# CHỤP ẢNH ĐỘNG PHÂN TỬ N₂ BẰNG PHƯƠNG PHÁP CẮT LỚP SỬ DỤNG PHÁT XẠ SÓNG HÀI BẬC CAO

# NGUYÊN NGỌC TY<sup>\*</sup>, LÊ VĂN HOÀNG<sup>\*\*</sup>

# TÓM TẮT

Bằng cách mô phỏng, chúng tôi kiểm chứng kết quả thực nghiệm về việc chụp ảnh động của lớp điện tử ngoài cùng (HOMO) và lớp liền kề bên trong (HOMO-1) của phân tử  $N_2$  từ nguồn phát xạ sóng hài bậc cao do tương tác với chùm lade mạnh xung cực ngắn. Kết quả mô phỏng phù hợp với kết quả thực nghiệm. Chúng tôi cũng chỉ ra rằng để có được hình ảnh HOMO như kết quả thực nghiệm, nguồn lade cần có bước sóng ít nhất là 1200nm thay vì 800nm và với bước sóng 2400nm hình ảnh sẽ trở nên hoàn hảo.

*Từ khóa:* chụp ảnh động, sóng hài bậc cao, lade xung siêu ngắn.

#### ABSTRACT

# Dynamic imaging of $N_2$ molecule by tomographic method using high-order harmonic generation

By simulation, we confirm the recent experimental results about dynamic imaging of the highest occupied molecular orbital (HOMO) and the second least bound orbital (HOMO-1) of  $N_2$  molecule using high-order harmonic generation (HHG) with ultrashort pulsed laser. The reconstructed images agree with the experimental results. We point out that in order to obtain the imagez of HOMO, like that of experimental works, the laser must be at least 1200nm of wavelength, instead of 800nm and with 2400nm the image quality is perfect.

Keywords: dynamic imaging, high-order harmonic generation, ultrashort laser pulse.

#### 1. Giới thiệu

Trong vòng hai thập kỉ gần đây, việc thu nhận thông tin cấu trúc động của phân tử bằng nguồn xung lade siêu ngắn đã trở thành một trong những hướng nghiên cứu thú vị trong cộng đồng khoa học. Khi phân tử hay nguyên tử tương tác với chùm lade mạnh, một trong những hiệu ứng quang phi tuyến xảy ra là sự phát xạ sóng thứ cấp (chúng tôi gọi là sóng hài bậc cao, viết tắt là HHG của cụm từ High-order Harmonic Generation) [1]. HHG phát ra do sự kết hợp của điện tử đã bị ion hóa trước đó với ion mẹ vì vậy chúng mang thông tin cấu trúc của phân tử. Năm 2004, hình ảnh đám mây điện tử lớp ngoài cùng (HOMO) của phân tử khí N<sub>2</sub> đã được tái tạo từ nguồn dữ liệu HHG phát ra do tương tác giữa các phân tử với chùm lade hồng ngoại 800nm có độ dài xung 30femto giây (fs), cường độ  $2.10^{14}$ W/cm<sup>2</sup> [3]. Thông tin về đám mây điện tử N<sub>2</sub> được

TS, Trường Đại học Sư phạm TPHCM

<sup>\*\*</sup> PGS TSKH, Trường Đại học Sư phạm TPHCM

ghi nhận trong thang thời gian femto giây, chính là thang thời gian diễn ra sự dao động của phân tử nên được xem là thông tin cấu trúc động. Chính thành công này đã thu hút nhiều mối quan tâm của các nhóm nghiên cứu về việc thu nhận các thông tin cấu trúc động phân tử từ HHG [2, 6, 7, 8, 10]. Trong các công trình [6, 7], bằng cách tái tạo HOMO của các phân tử thẳng như N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub> từ nguồn HHG mô phỏng, chúng tôi đã khẳng định kết quả của công trình [3], đồng thời cũng đã chỉ ra sự phụ thuộc của chất lượng hình ảnh vào bề rộng của miền phẳng trong phổ HHG. Theo đó, kết luận được đưa ra là để thu được hình ảnh với chất lượng được mô tả như hình số 4 trong công trình [3], nguồn lade được sử dụng phải có bước sóng dài hơn 800nm, 1200nm là một ví dụ cụ thể.

Gần đây, trong công trình [2], nhóm tác giả Haessler đã tái tạo thành công không những HOMO mà còn hình ảnh của lớp điện tử liền kề bên trong (HOMO-1) của phân tử  $N_2$  từ dữ liệu HHG đo đạc được. Trong công trình trên, từ nguồn dữ liệu HHG thực nghiệm, các tác giả đã tính toán được sự đóng góp của từng lớp điện tử, đây chính là cơ sở quan trọng cho việc tái tạo thành công hình ảnh của cả hai đám mây một cách đồng thời. Điều thú vị là trong công trình [2], các tác giả cũng đã khẳng định lại kết quả đã được đăng trong công trình [3] với cùng một chất lượng và điều này khác với kết quả của chúng tôi trong công trình [6]. Chính điều này đã kích thích chúng tôi tiến hành nghiên cứu chi tiết hơn quá trình chụp ảnh cho phân tử  $N_2$ .

Trong bài báo này, chúng tôi sẽ tái tạo hình ảnh HOMO và HOMO-1 của phân tử  $N_2$  từ nguồn HHG mô phỏng. Mục đích của công trình này không chỉ để kiểm chứng kết quả của [2] mà còn cung cấp cho người đọc thấy một mối quan hệ sâu sắc giữa chất lượng hình ảnh tái tạo được và độ rộng của miền phẳng trong phổ HHG, liên quan tới mật thiết với độ dài bước sóng của chùm lade.

Bố cục bài báo được chia làm ba phần chính. Trong phần 2 tiếp theo, chúng tôi sẽ mô tả về phương pháp tính toán phổ HHG và quy trình chụp ảnh phân tử. Sau đó, trong phần 3, chúng tôi sẽ trình bày các kết quả về tái tạo hình ảnh HOMO và HOMO-1 của phân tử  $N_2$  từ nguồn HHG mô phỏng. Ngoài ra, chúng tôi cũng phân tích ảnh hưởng của độ rộng miền phẳng của phổ HHG tới chất lượng hình ảnh thu nhận được và chỉ ra bước sóng tương ứng của chùm lade để có được một kết quả hoàn chỉnh như kết quả tính toán từ nguyên lí ban đầu. Cuối cùng, chúng tôi tóm tắt lại các kết quả về quá trình chụp ảnh phân tử.

# 2. Mô hình tính toán phổ HHG và quy trình chụp ảnh phân tử

Trong bài báo này, mô hình ba bước với gần đúng trường mạnh được sử dụng để tính phổ HHG [5, 9]. Trong mô hình này, trước hết điện tử sẽ bị ion hóa xuyên hằm thoát khỏi rào thế tạo bởi phân tử và chùm lade mạnh, sau đó được gia tốc trong trường lade và cuối cùng khi trường lade đổi chiều, trở về kết hợp với ion mẹ và phát ra photon. Việc phát triển mô hình này cũng đang được nghiên cứu và hiện nay đã có một số mô hình tiến bô hơn như lí thuyết tán xạ định lượng [4]. Tuy nhiên, mô hình ba bước vẫn đáp ứng tốt các yêu cầu của chúng tôi về mặt định tính. Các chi tiết tính toán HHG cho phân tử có thể xem trong các công trình [5, 9].

Từ dữ liệu HHG mô phỏng bằng tính toán lí thuyết, chúng tôi tiến hành chụp ảnh các lớp điện tử của  $N_2$ . Quá trình chụp ảnh được tiến hành dựa trên mối liên hệ giữa cường độ HHG phát ra và lưỡng cực được mô tả bởi công thức:

$$S(w,q) = N(q)w^4 \left| a \not g(w) \not d(w,q) \right|^2.$$
<sup>(1)</sup>

Trong đó, S(w,q) và N(q) lần lượt là cường độ HHG và tốc độ ion hóa phụ thuộc vào góc định phương q giữa trục phân tử và vecto phân cực của lade.  $a \notin (w)_{ii}^{h}$  chính là biên độ sóng khi điện tử quay về tái va chạm với ion mẹ để phát ra photon [3, 6].

Từ biểu thức (1), ta có thể suy ra được giá trị tuyệt đối của lưỡng cực |d(w,q)|, đại lượng này được định nghĩa bởi biểu thức

$$d(w,q) = (2p)^{3/2} \grave{O} dr Y_0(r,q) \exp(\frac{i}{2}k(w)r_{11}^{\dot{U}}.$$
(2)

Giá trị của HHG và tốc độ ion hóa có thể đo được trong phòng thí nghiệm hoặc tính toán như đã trình bày. Trong công trình này, chúng tôi tính tốc độ ion hóa của  $N_2$ bằng hai phương pháp gần đúng trường manh SFA và lí thuyết ion hóa xuyên hầm MO-ADK. Kết quả thu được từ hai phương pháp này cho  $N_2$  hoàn toàn phù hợp với thực nghiệm và điều này cũng đã được khẳng định trong bài báo trước của chúng tôi [7]. Biên độ sóng  $a \notin (w)$  khi điện tử quay về sẽ được tính gián tiếp qua một nguyên tử tham chiếu có cùng thế ion hóa  $(I_p)$  của phân tử dựa trên giả thiết rằng trong miền chuyển động tự do, điện tử chịu tác dụng chủ yếu của trường lade và phụ thuộc yếu vào cấu trúc phân tử thể hiện qua  $I_{n}$ . Do đó biên độ sóng điện tử quay về ứng với phân tử và một nguyên tử có cùng I<sub>p</sub> trong cùng một điều kiện của nguồn lade được xem là như nhau. Khi đó ta chỉ cần tính HHG và lưỡng cực dịch chuyển của nguyên tử này là có thể suy ra được giá trị của biên độ sóng  $a \notin (w)$ . Ngoài ra, như đã trình bày, từ biểu thức (1) chúng ta chỉ có thể thu được giá trị tuyệt đối của lưỡng cực. Để thu được giá trị đại số của đại lượng này, ta cần chú ý đến việc nhảy pha của HHG khi đi qua điểm cực tiểu trong miền phẳng. Chính điều này dẫn đến việc lưỡng cực sẽ đổi dấu khi giá trị tuyệt đối đi qua điểm zero [3, 6].

Cuối cùng, để thu được hàm sóng mô tả đám mây điện tử, ta phải thực hiện một phép biến đổi ngược từ giá trị lưỡng cực, trong trường hợp này là phép biến đổi ngược Fourier. Với phép biến đổi này, hàm sóng thu được càng chính xác khi miền lấy tích phân với biến số là số sóng k càng rộng, điều này đồng nghĩa với việc lưỡng cực cần được tính cho một miền tần số lớn do mối liên hệ  $k = \sqrt{2(w - I_p)}$ . Đối với phân tử N<sub>2</sub>,  $k^2 = [0.9-4.2]$  khi chùm lade sử dụng có bước sóng 800 nm và  $k^2 = [1.0-7.5]$  khi bước sóng tăng đến 1200nm.

Trong công trình này, chúng tôi giả định các phân tử  $N_2$  được định phương trong mặt phẳng xy, trục phân tử song song với Ox và hợp với vecto phân cực của chùm lade một góc  $\theta$ . HHG phát ra được đo theo hai phương song song và vuông góc với vecto phân cực. Hai biểu thức chính được sử dụng trong quá trình chụp ảnh được cho bởi

$$xY(x,y) = \mathop{\triangleright}\limits_{0}^{p} \mathop{dq}\limits_{0}^{+*} \mathop{dwe}\limits_{0}^{k(x\cos q + y\sin q)} \mathop{\Leftrightarrow}\limits_{0}^{+} \mathop{\sin qd}\limits_{x}(w,q) + \sin qd_{y}(w,q) \mathop{\triangleright}\limits_{0}^{+}$$
(3)

$$y\mathbf{Y}(x,y) = \bigotimes_{0}^{p} dq \bigotimes_{0}^{+\Psi} dw e^{ik(x\cos q + y\sin q)} \quad \text{(f)} \quad \sin qd_{x}(w,q) + \cos qd_{y}(w,q) \stackrel{\text{(i)}}{=} . \tag{4}$$

Trong hai biểu thức (3) và (4), hàm sóng đã được lấy tích phân trên toàn miền biến thiên của tọa độ thứ ba là z.

$$Y(x,y) = \bigotimes_{=\frac{1}{2}}^{+\frac{1}{2}} Y(x,y,z) dz .$$
(5)

#### 3. Kết quả

Để mô phỏng HHG, chúng tôi sử dụng nguồn lade có độ dài xung 30fs, cường độ  $2.10^{14}$ Wcm<sup>-2</sup> với hai trường hợp bước sóng 800nm và 1200nm. Phân tử N<sub>2</sub> được giả định đang ở cấu hình bền ứng với khoảng cách N-N=1.1Å. HHG được mô phỏng do điện tử từ HOMO và HOMO-1 phát ra độc lập với nhau. Chúng tôi tiến hành tái tạo hình ảnh HOMO và HOMO-1 từ các nguồn sóng độc lập này để so sánh với các kết quả đã công bố và đưa ra kết luận về sự phụ thuộc của chất lượng hình ảnh vào bước sóng lade sử dụng.

#### 3.1. Hình ảnh HOMO của $N_2$

Sử dụng dữ liệu HHG phát ra do sự kết hợp của điện tử ở lớp HOMO, chúng tôi tiến hành tái tạo hàm sóng của vân đạo này. Hình ảnh HOMO được tái tạo từ HHG của phân tử N<sub>2</sub> được thể hiện trong hình 1. Để tiện so sánh chúng tôi vẽ kèm theo hình ảnh HOMO chính xác của N<sub>2</sub> được tái tạo từ nguồn lưỡng cực tính toán theo nguyên lí ban đầu với miền  $k^2 = [0-25]$ .



Hình 1. HOMO của  $N_2$  được tái tạo từ HHG với: (a) lade 800nm,

(b) lade 1200nm so với (c) hàm sóng chính xác

Trong hình 1, chúng ta có thể thấy khi sử dụng nguồn lade có bước sóng 800nm để phát HHG, hình ảnh HOMO của N<sub>2</sub> thu được chỉ thấy rõ phần phân bố xung quanh hai hạt nhân nitơ. Phần phân bố trong khoảng giữa hai hạt nhân thu được trong trường hợp này không rõ khi so với trường hợp tính toán chính xác. Điều này có thể được giải thích là do độ rộng miền phẳng của HHG khi sử dụng lade 800nm chỉ từ bậc 11 đến bậc 39 ứng với  $k^2 = [0.9-4.2]$ , do đó lượng thông tin lưỡng cực đưa vào biểu thức (3), (4) khi tái tạo hình ảnh HOMO không nhiều. Để tăng độ rộng miền phẳng của phổ HHG cũng là tăng lượng thông tin lưỡng cực đưa vào (3), (4), chúng tôi tăng bước sóng của lade lên 1200nm vì độ rộng miền phẳng tỉ lệ với bình phương bước sóng. Hình ảnh HOMO được tái tạo từ nguồn HHG khi sử dụng lade có bước sóng 1200nm được thể hiện trong hình 1b. So sánh hình 1b và 1c ta thấy hình ảnh HOMO được tạo dựng từ nguồn HHG có sự phù hợp với hình ảnh HOMO chính xác. Điều này được giải thích là do độ dài miền phẳng lúc này từ bậc 17 đến bậc 109, do đó lưỡng cực cũng được tính toán trong một miền rộng hơn của số sóng,  $k^2 = [1.0-7.5]$ . Điều này dẫn đến kết quả hình ảnh HOMO gần với kết quả chính xác hơn khi sử dụng hai biểu thức (3) và (4) để tái hiện lại hình ảnh HOMO của N<sub>2</sub>.

Với hình 1, chúng ta chỉ có thể so sánh một cách định tính sự giống hay khác nhau về hình dạng của HOMO tái tạo và kết quả tính toán chính xác. Để so sánh một cách chi tiết hơn, chúng tôi vẽ các mặt cắt hàm sóng tại y=0. Trong hình 2, ngoài hàm sóng của HOMO được tái tạo từ nguồn HHG ứng với hai trường hợp của bước sóng là 800nm và 1200nm, chúng tôi còn vẽ hàm sóng chính xác được tính theo nguyên lí ban đầu. Ngoài ra, chúng tôi còn vẽ thêm hàm sóng được tái tạo từ nguồn lưỡng cực tính toán lí thuyết ứng với hai trường hợp  $k^2 = [1.0-7.5]$  tương ứng bước sóng 1200nm và  $k^2 = [0.9-4.2]$  tương ứng với bước sóng 800nm.



Hình 2. Mặt cắt hàm sóng HOMO của  $N_2$  Y(x, y = 0)

Trong hình 2, chúng ta có thể thấy hàm sóng được tái tạo từ nguồn HHG phù hợp tốt với hàm sóng xây dựng từ lưỡng cực lí thuyết trong cả hai trường hợp bước sóng 800nm và 1200nm. Điều này chứng tỏ rằng mối quan hệ (1) là đáng tin cậy để trích xuất lưỡng cực từ nguồn HHG và cho kết quả phù hợp với các tính toán chính xác. Hơn nữa, trong hình 2 chúng ta cũng thấy rõ kết quả hàm sóng trích xuất từ HHG khi sử dụng lade có bước sóng 1200nm phù hợp hơn trường hợp 800nm khi so sánh với hàm sóng tính toán chính xác. Điều này dẫn chúng tôi đến kết luận việc sử dụng nguồn lade có bước sóng dài hơn trong quy trình chụp ảnh phân tử sẽ cho kết quả tốt hơn, nghĩa là hình ảnh HOMO thu được có chất lượng tốt hơn. Phần này chúng tôi lập lại kết quả công bố trong [6].

# 3.2. Hình ảnh HOMO-1 của $N_2$

Trong phần này, chúng tôi tiếp tục áp dụng quy trình chụp ảnh từ nguồn HHG cho lớp điện tử HOMO-1 của phân tử  $N_2$ . Chúng tôi cũng sử dụng các nguồn lade bước sóng 800nm và 1200nm để tính HHG phát ra do sự kết hợp của điện tử từ lớp HOMO-1 với ion mẹ và tái tạo hàm sóng của lớp điện tử này theo quy trình đã mô tả ở trên. Với nguồn lade 800nm, chúng tôi thu nhận được hàm sóng HOMO-1 của  $N_2$  được vẽ

trong hình 3a. Tương tự, hình 3b là kết quả khi lade có bước sóng 1200nm. Chúng tôi cũng tái tạo hàm sóng HOMO-1 của N<sub>2</sub> từ nguồn lưỡng cực lí thuyết được tính theo nguyên lí ban đầu, được xem như hàm sóng chính xác, được vẽ trong hình 3c. So sánh với kết quả được công bố trong công trình [8], chúng tôi nhận thấy có sự tương đồng về hình dạng của HOMO-1 thu được từ nguồn HHG thực nghiệm và kết quả hàm sóng được tái tạo từ nguồn HHG tính toán theo gần đúng trường mạnh. Hơn nữa, nhìn vào hình 3a, 3b và 3c, chúng ta thấy rằng hình ảnh HOMO-1 của N<sub>2</sub> thu nhận từ HHG trong cả hai trường hợp phù hợp với kết quả tính toán chính xác. Điều này là do HOMO-1 của N<sub>2</sub> có đối xứng  $p_g$ , gồm hai phần đối xứng với nhau qua đường thẳng y=0. Do đó nếu xét chỉ xét về hình dạng của HOMO-1 thì sẽ thấy rằng nguồn lade 1200nm không làm tăng chất lượng hình ảnh nhiều như đã làm cho trường hợp HOMO.



Hình 3. HOMO-1 của N<sub>2</sub> từ HHG với (a) lade 800 nm,
(b) lade 1200 nm so với (c) hàm sóng chính xác

Để nghiên cứu một cách chi tiết sự phụ thuộc của chất lượng hình ảnh HOMO-1 đối với bước sóng của nguồn lade, chúng tôi so sánh các hàm sóng tại x=0 được vẽ trong hình 4.



**Hình 4.** Mặt cắt hàm sóng HOMO-1 của  $N_2$  Y (x = 0, y)

Trong hình 4, chúng tôi vẽ hàm sóng được tái tạo từ HHG ứng với nguồn lade 800nm và 1200nm. Ngoài ra để so sánh, chúng tôi vẽ thêm hàm sóng chính xác và hàm sóng được tái tạo từ lưỡng cực lí thuyết trong khoản giá trị *k* lần lượt tương ứng với bước sóng 800nm và 1200nm. Theo hình 4, chúng ta nhận thấy rằng kết quả hàm sóng từ nguồn HHG và kết quả từ lưỡng cực lí thuyết phù hợp với nhau trong cả hai trường hợp của bước sóng 800nm và 1200nm. Điều này một lần nữa khẳng định độ tin cậy cho biểu thức (1) trong quá trình chụp ảnh HOMO-1. Ngoài ra khi so sánh với hàm sóng chính xác, chúng ta lại thấy rằng hàm sóng tái tạo từ HHG sử dụng lade 1200nm cho kết quả phù hợp hơn kết quả khi sử dụng lade 800nm. Cụ thể, hàm sóng thu nhận từ nguồn lade 1200nm có phần trùng khớp với hàm sóng chính xác nhiều hơn đáng kể so với trường hợp sử dụng lade 800nm.

#### 3.3. Sự phụ thuộc chất lượng hình ảnh vào bước sóng nguồn lade

Để tìm hiểu sự phụ thuộc của chất lượng hình ảnh vào chiều dài bước sóng của nguồn lade sử dụng, chúng tôi tiến hành tái tạo hình ảnh HOMO và HOMO-1 của  $N_2$  từ lưỡng cực tính toán lí thuyết với các khoản giá trị k khác nhau, tương ứng với các bước sóng lade khác nhau. Như đã trình bày trong phần 2 về quy trình chụp ảnh phân tử, hình ảnh các lớp điện tử thu được sẽ càng gần với kết quả chính xác nếu lưỡng cực được tính toán trong miền giá trị số sóng k càng rộng. Chúng tôi tiến hành tăng giá trị số sóng k và tái tạo hàm sóng các lớp điện tử tương ứng. Kết quả cho thấy khi giá trị k tăng thì hàm sóng được tái tạo càng tiến gần đến hàm sóng chính xác. Đặc biệt, khi giá trị k tăng đến một giá trị tương ứng với bước sóng 2400nm thì hàm sóng tái tạo gần như trùng với hàm sóng chính xác.

Trong hình 5a, chúng tôi vẽ hàm sóng HOMO Y (x, y = 0) của N<sub>2</sub> được tái tạo từ lưỡng cực lí thuyết với các bước sóng tương ứng từ 2000nm, 2300nm và 2400nm.



Hình 5. Hàm sóng Y(x, y = 0) của (a) HOMO và (b) HOMO-1 của  $N_2$ 

# tái tạo từ lưỡng cực lí thuyết

Theo hình 5a, ta có thể thấy, ứng với bước sóng 2000nm hàm sóng Y(x, y = 0) có phần đỉnh giữa cao hơn hàm sóng chính xác. Khi bước sóng tăng, độ cao của đỉnh này giảm dần và trùng với vị trí của hàm sóng chính xác khi bước sóng đạt giá trị 2400nm.

Một cách tương tự, chúng tôi cũng nghiên cứu sự phụ thuộc của chất lượng hình ảnh HOMO-1 của N<sub>2</sub> và bước sóng của nguồn lade sử dụng. Kết quả thu được cho trường hợp HOMO-1 cũng tương tự như HOMO, nghĩa là khi giá trị bước sóng tăng thì chất lượng hình ảnh thu được cũng tăng lên. Cụ thể, với bước sóng 2400nm hàm sóng HOMO-1 thu được trùng khớp với hàm sóng tính toán chính xác. Trong hình 5b, chúng tôi vẽ hàm sóng của HOMO-1 Y (x = 0, y) của N<sub>2</sub> được tái tạo từ lưỡng cực lí thuyết ứng với các giá trị bước sóng tương ứng 2000nm, 2300nm và 2400nm. Hình ảnh HOMO-1 của N<sub>2</sub> trong hình 5b cũng cho thấy khi bước sóng tăng từ 2000nm, hàm sóng tái tạo tiến dần về phía hàm sóng chính xác. Khi bước sóng đạt 2400nm, hàm

# 4. Kết luận

Trong công trình này, chúng tôi sử dụng mô hình ba bước để tính toán HHG của phân tử  $N_2$  từ hai lớp điện tử HOMO và HOMO-1 độc lập nhau. Sau đó, bằng cách áp dụng quy trình chụp ảnh cắt lớp, chúng tôi tái tạo hàm sóng của các lớp điện tử của

phân tử trong thang thời gian femto giây. Chúng tôi thấy rằng hình ảnh HOMO được tái tạo từ nguồn HHG sử dụng lade 800nm không giống với kết quả đã được công bố trong trích dẫn [2] trong khi đó hình ảnh HOMO-1 lại phù hợp tốt với kết quả của [2]. Tuy nhiên, khi tăng bước bóng lade lên 1200nm, hình ảnh HOMO và cả HOMO-1 thu nhận được có chất lượng tốt hơn và phù hợp với các tính toán lí thuyết. Hơn nữa, chúng tôi cũng nhận thấy được chất lượng hình ảnh của cả HOMO và HOMO-1 của N<sub>2</sub> sẽ hoàn toàn trùng hợp với tính toán lí thuyết từ nguyên lí ban đầu nếu lade được sử dụng có bước sóng 2400nm.

*Ghi chú:* Công trình này được thực hiện trong khuôn khổ đề tài nghiên cứu khoa học cấp cơ sở của Trường Đại học Sư phạm TPHCM năm 2011 (mã số CS.2011.19.50).

# TÀI LIỆU THAM KHẢO

- 1. Corkum P.B. (1993), "Plasma perspective on strong field multiphoton ionization", *Phys. Rev. Lett.*, 71, pp. 1994-1997.
- 2. Haessler S. et al. (2010), "Attosecond imaging of molecular electronic wavepackets", *Nature Physics*, 6, pp. 200-206.
- 3. Itatani J., Levesque J., Zeidler D., Niikura H., et al. (2004), "Tomographic imaging of molecular orbitals", *Nature*, 432, pp. 867-871.
- 4. Le A. T., Lucchese R. R., Tonzani S., Morishita T., and Lin C. D. (2009), "Quantitative rescattering theory for high-order harmonic generation from molecules", *Phys. Rev. A*, 80, 013401 (23 p.).
- 5. Le A.T., Della Picca R., Fainstein P.D., et al. (2008), "Theory of high-order harmonic generation from molecules by intense laser pulses", *J. Phys. B*, 41, 081002 (6 p.).
- 6. Le V.H., Le A.T., Xie R.H., Lin C.D. (2007), "Theoretical analysis of dynamic chemical imaging with lasers using high-order harmonic generation", *Phys. Rev. A*, 76, 013414 (13 p.).
- 7. Le V.H., Nguyen N.T., Jin C., Le A.T., Lin C.D. (2008), "Retrieval of interatomic separations of molecules from laser-induced high-order harmonic spectra", *J. Phys. B*, 41, 085603 (8 p.).
- 8. Lein M. (2007), "Molecular imaging using recolliding electrons", J. Phys. B, 40, pp. R135 R173.
- 9. Lewenstein M., Balcou Ph., Ivanov M. Yu, et al. (1994), "Theory of high-harmonic generation by low-frequency laser fields", *Phys. Rev. A*, 49, pp. 2117-2132.
- Torres R., Kajumba N., Jonathan G. Underwood, Robinson J. S., Baker S., Tisch J.W. G., Nalda R. de, Bryan W. A., Velotta R., Altucci C., Turcu I. C. E., and Marangos J. P. (2007), "Probing Orbital Structure of Polyatomic Molecules by High-Order Harmonic Generation", *Phys. Rev. Lett.*, 98, 203007 (4 p.).

(Ngày Tòa soạn nhận được bài: 14-12-2011; ngày phản biện đánh giá: 10-3-2012; ngày chấp nhận đăng: 24-4-2012)