

## XÁC SUẤT ION HÓA CỦA MÔ HÌNH PHÂN TỬ PHÂN CỰC TRONG TRƯỜNG LASER

HOÀNG VĂN HƯNG\*

### TÓM TẮT

*Xác suất ion hóa trong quá trình tương tác của một mô hình phân tử phân cực với trường laser được tính toán bằng lý thuyết MO-ADK, SC-MO-ADK và phương pháp TDSE. So sánh với kết quả TDSE, chúng tôi nhận thấy (i) cần phải sử dụng lý thuyết SC-MO-ADK cho các phân tử phân cực, thay vì MO-ADK, (ii) lý thuyết SC-MO-ADK dự đoán tốt sự phụ thuộc của xác suất ion hóa vào góc định phương.*

**Từ khóa:** xác suất ion hóa, phân tử phân cực.

### ABSTRACT

#### *Ionization probability of polar molecule model in laser field*

*Ionization probability in the interaction of a polar molecule model with a laser field is calculated by MO-ADK, SC-MO-ADK theory, and TDSE method. Compared to TDSE results, we found that (i) the SC-MO-ADK theory need to use for polar molecule, instead of MO-ADK theory, and (ii) SC-MO-ADK theory is good apply for the prediction of the dependence of ionization probability on alignment angle.*

**Keywords:** ionization probability, polar molecule.

### 1. Giới thiệu

Quá trình ion hóa của điện tử dưới tác dụng của trường điện là một bài toán quan trọng đã được nghiên cứu rất rộng rãi; do đây là quá trình đầu tiên của các quá trình phi tuyến như ion hóa trên ngưỡng hay phát xạ sóng điều hòa bậc cao, ion hóa hai điện tử không liên tục. Đại lượng đặc trưng cho quá trình này là xác suất ion hóa, tức là có bao nhiêu phần trăm điện tử sẽ bị ion hóa dưới tác dụng của trường ngoài. Đại lượng này có được tính được bằng cách dùng phương pháp số ab initio như phương pháp giải chính xác phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian (TDSE), Hartree-Fock phụ thuộc thời gian (TDHF), lý thuyết nhiễu loạn mật độ phụ thuộc thời gian (TDDFT) [2, 4, 8] hay các mô hình giải tích như gần đúng trường mạnh SFA (Strong Field Approximation) [7], MO-ADK (molecule Ammosov-Delone-Krainov) [12].

Ưu điểm của phương pháp số ab initio là cho kết quả tốt có độ tin cậy cao, nhưng tốn rất nhiều tài nguyên tính toán cũng như thời gian tính toán tương đối lâu. Do đó phạm vi áp dụng chỉ xung quanh một số bài toán khá nhỏ và mang tính mô hình. Trong những năm gần đây, với sự phát triển của phương pháp tính và sự xuất hiện ngày càng nhiều của các máy tính hiệu năng cao, đã làm cho phương pháp số ab initio được áp

\* ThS, Trường Đại học Sư phạm TPHCM; Email: hungvh@hcmup.edu.vn

dụng cho các bài toán lớn mà thực nghiệm có thể đo được như các nguyên tử khí trơ,  $N_2$ ,  $CO_2$ ,  $O_2$  hay  $CO$ . [2, 4]

Ngoài phương pháp số *ab initio* thì phương pháp mô hình vẫn được quan tâm phát triển bởi vì nó cung cấp bức tranh về vật lý quá trình diễn ra. Một trong những lý thuyết được chấp nhận sử dụng rộng rãi là MO-ADK được phát triển bởi các nhà khoa học tại Đại học bang Kansas mà đứng đầu là GS C. D. Lin. Ý tưởng đầu tiên của lý thuyết này xuất phát từ lý thuyết ADK [1] cho nguyên tử do ba nhà khoa học người Nga Ammosov, Delone, và Krainov đề xuất, sau đó được phát triển lên thành MO-ADK cho phân tử [12, 13]. Lý thuyết MO-ADK được áp dụng thành công để giải thích sự phụ thuộc theo góc định phương của xác suất ion hóa cho các phân tử như  $H_2^+$ ,  $H_2$ ,  $F_2$ ,  $N_2$ ,  $O_2$ . Tuy nhiên, vẫn có những trường hợp lý thuyết MO-ADK áp dụng không tốt như cho phân tử  $CO_2$ .

Trong lý thuyết MO-ADK, các tác giả đã giả sử rằng trong trường tĩnh điện yếu thì năng lượng của phân tử trung hòa và ion của nó là không đổi, dẫn đến thế ion hóa là đại lượng bất biến với điện trường. Tuy nhiên, cho những phân tử phân cực và trong trường điện mạnh, sự thay đổi năng lượng của phân tử trung hòa và ion của nó là rất đáng kể và không thể được bỏ qua như trong công trình [3, 5, 10] đã chỉ ra. Do đó trong [6] các tác giả đã đề xuất thay vì coi thế ion hóa là một hằng số, thì thế ion hóa sẽ phụ thuộc vào điện trường tĩnh theo biểu thức gần đúng bậc hai của hiệu ứng Stark. Từ đó các tác giả đã hình thức luận lý thuyết MO-ADK lên thành lý thuyết Stark-corrected MO-ADK (SC-MO-ADK). Áp dụng mô hình này các tác giả đã thành công trong việc giải thích xác suất ion hóa của phân tử NO, tuy nhiên lại thất bại khi áp dụng cho phân tử CO. Điều này đã được giải thích trong [2] là do với phân tử CO thì đóng góp của các lớp điện tử bên trong là đáng kể và cả MO-ADK hay SC-MO-ADK đều chưa tính đến điều này.

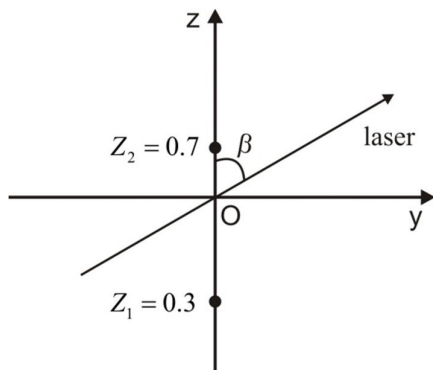
Tuy nhiên, hình thức luận này vẫn chưa được chứng minh một cách chặt chẽ bằng biểu thức giải tích hay phương pháp số *ab initio*. Trong công trình này, nghiên cứu quá trình ion hóa của một mô hình phân tử phân cực, chúng tôi sẽ chứng minh sự hiệu quả và khả năng ứng dụng của hai mô hình MO-ADK và SC-MO-ADK bằng cách so sánh với phương pháp số TDSE.

## 2. Phương pháp tính xác suất ion hóa

### 2.1. Phương pháp TDSE

Xét mô hình một phân tử phân cực có hai hạt nhân với điện tích  $Z_1 = 0.3$  a.u. và  $Z_2 = 0.7$  a.u. được đặt cố định trên trục Oz tương ứng với tọa độ là  $z_1 = -1.4$  a.u. và  $z_2 = 0.6$  a.u. [10]. Một điện tử chuyển động dưới tác dụng của trường Coulomb gây ra bởi hai hạt nhân và trường điện của laser như hình 1. Chúng tôi không quan tâm đến quá trình định phương của laser mà giả sử laser được chiếu sao cho vectơ phân cực nằm trong mặt phẳng yOz và hợp với trục phân tử một góc định phương là  $\beta$ . Xác suất

ion hóa do quá trình tương tác của phân tử phân cực sẽ được khảo sát với sự thay đổi của góc định phương.



**Hình 1.** Mô hình “thí nghiệm” để khảo sát bài toán

### 2.1.1. Giải phương trình Schrödinger dừng

Phương trình Schrödinger dừng cho điện tử khi chưa tương tác với trường điện laser trong hệ đơn vị nguyên tử (được sử dụng trong toàn bộ công trình này) được cho bởi phương trình

$$\hat{H}_0 \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}), \quad (1)$$

trong đó toán tử  $\hat{H}_0$  là toán tử “tự do” của điện tử bao gồm động năng của điện tử và thế năng tương tác coulomb của điện tử và hai hạt nhân

$$\hat{V}_c(\vec{r}) = -\frac{Z_1}{\sqrt{r^2 - 2r \cos \theta z_1 + z_1^2}} - \frac{Z_2}{\sqrt{r^2 - 2r \cos \theta z_2 + z_2^2}}. \quad (2)$$

Phương trình (1) được giải bằng phương pháp DVR [11]. Tập hợp tất cả các hàm riêng  $\psi_n(\vec{r})$  của  $\hat{H}_0$  sẽ tạo thành một bộ hàm trực giao chuẩn hóa và đầy đủ. Bộ hàm cơ sở này sẽ được dùng để giải phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian.

### 2.1.2. Giải phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian

Phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian được cho bởi

$$\left[ \hat{H}_0 + \hat{V}_L(\vec{r}, t) \right] \Psi(\vec{r}, t) = \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t}, \quad (3)$$

trong đó thế năng tương tác giữa trường laser và lưỡng cực của điện tử là

$$\hat{V}_L(\vec{r}, t) = \vec{E}(t) \vec{r} = E(t) \cos \beta r \cos \theta + E(t) \sin \beta r \sin \theta \sin \varphi. \quad (4)$$

Laser được sử dụng trong bài viết này laser có dạng

$$E(t) = E_0 \sin^2 \left( \frac{\pi t}{\tau} \right) \sin(\omega t + \phi), \quad (5)$$

trong đó  $E_0$  là cường độ đỉnh,  $\omega$  là tần số,  $\tau$  là độ dài xung, và  $\phi$  pha ban đầu của laser. Trong nghiên cứu này, chúng tôi sử dụng laser có độ dài xung là hai chu kỳ quang học, bước sóng là 1200 nm và pha ban đầu  $\phi = 90^\circ$ .

Phương trình (3) được giải được giải bằng phương pháp tách toán tử trong gần đúng bậc hai [9]

$$\Psi(\vec{r}, t + \Delta t) \approx \exp\left[-\frac{i\hat{H}_0\Delta t}{2}\right] \exp\left[-i\hat{V}_L\left(\vec{r}, t + \frac{\Delta t}{2}\right)\Delta t\right] \exp\left[-\frac{i\hat{H}_0\Delta t}{2}\right] \Psi(\vec{r}, t). \quad (6)$$

Chúng tôi tách toán tử thành hai thành phần  $\hat{H}_0$  và  $\hat{V}_L$  giúp cho việc tính toán nhanh hơn và tốc độ hội tụ cũng nhanh hơn. Để giải phương trình (6), đầu tiên hàm sóng tại  $\Psi(\vec{r}, t)$  được khai triển trong hệ hàm riêng của toán tử  $\hat{H}_0$

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_n C_n(t) \psi_n(\vec{r}), \quad (7)$$

sau đó áp dụng thuật toán ba bước sau.

*Bước 1.* tác dụng toán tử  $\exp\left[-\frac{i\hat{H}_0\Delta t}{2}\right]$  lên  $\Psi(\vec{r}, t)$  và khai triển hàm sóng mới trong trong hệ hàm riêng của toán tử  $\hat{H}_0$

$$\Psi^1(\vec{r}, t) = \exp\left[-\frac{i\hat{H}_0\Delta t}{2}\right] \sum_n C_n(t) \psi_n(\vec{r}) = \sum_n C_n^1(t) \psi_n(\vec{r}), \quad (8)$$

với  $C_n^1(t) = \exp\left[-\frac{iE_n\Delta t}{2}\right] C_n(t)$ .

*Bước 2.* tác dụng toán tử  $\exp\left[-i\hat{V}_L\left(\vec{r}, t + \frac{\Delta t}{2}\right)\Delta t\right]$  lên hàm sóng  $\Psi^1(\vec{r}, t)$  và lại tiếp tục khai triển hàm sóng mới trong trong hệ hàm riêng của toán tử  $\hat{H}_0$

$$\Psi^2(\vec{r}, t) = \exp\left[-i\hat{V}_L\left(\vec{r}, t + \frac{\Delta t}{2}\right)\Delta t\right] \sum_{n_1} C_{n_1}^1(t) \psi_{n_1}(\vec{r}) = \sum_{n_2} C_{n_2}^2(t) \psi_{n_2}(\vec{r}), \quad (9)$$

với  $C_{n_2}^2(t) = \sum_{n_1} C_{n_1}^1(t) \langle \psi_{n_2}(\vec{r}) | \exp\left[-i\hat{V}_L\left(\vec{r}, t + \frac{\Delta t}{2}\right)\Delta t\right] | \psi_{n_1}(\vec{r}) \rangle$ .

*Bước 3.* tương tự bước 1 tác dụng toán tử  $\exp\left[-\frac{i\hat{H}_0\Delta t}{2}\right]$  lên  $\Psi^2(\vec{r}, t)$  và một lần nữa tiếp tục khai triển hàm sóng mới trong trong hệ hàm riêng của toán tử  $\hat{H}_0$

$$\Psi(\vec{r}, t + \Delta t) = \Psi^3(\vec{r}, t) = \exp\left[-\frac{i\hat{H}_0\Delta t}{2}\right] \sum_n C_n^2(t) \psi_n(\vec{r}) = \sum_n C_n(t + \Delta t) \psi_n(\vec{r}), \quad (10)$$

với  $C_n(t + \Delta t) = \exp\left[-\frac{iE_n\Delta t}{2}\right] C_n^2(t)$ . Từ hàm sóng ban đầu  $\Psi(\vec{r}, t = 0)$  chính là hàm sóng tại trạng thái cơ bản, áp dụng phương trình (6) cho đến khi hết thời gian phát xung  $\tau$  của laser thì chúng tôi sẽ thu được hàm sóng phụ thuộc thời gian tại các điểm cách đều nhau  $\Delta t$  trong khoảng từ  $0 \rightarrow \tau$ .

### 2.1.3. Xác suất ion hóa

Điện tử chỉ có thể nằm ở các mức trạng thái liên kết  $E_n < 0$  hoặc trạng thái tự do  $E_n \geq 0$  với xác suất tương ứng là  $|C_n(t)|^2$ . Xác suất tìm thấy điện tử trong toàn bộ miền năng lượng bằng 1 do đó xác suất ion hóa sẽ là

$$P(t) = 1 - \sum_{E_n < 0} |C_n(t)|^2. \quad (11)$$

Trong nghiên cứu này, chúng tôi chỉ quan tâm đến xác suất ion hóa tại thời điểm trường laser tắt bởi vì khi đó dòng điện tử bị ion hóa đã ra khỏi miền hấp thụ. [2]

### 2.2. Lí thuyết MO-ADK và SC-MO-ADK

Lí thuyết MO-ADK được trình bày chi tiết trong [12], do đó trong bài báo này chúng tôi chỉ trình bày những công thức cần thiết phục vụ cho việc tính toán. Hàm sóng tại một trạng thái xác định tại những khoảng cách lớn sẽ được khai triển thành

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{lm} C_{lm} r^{\frac{Z_c-1}{\kappa}} e^{-\kappa r} Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (12)$$

trong đó  $Z_c$  là điện tích hiệu dụng tức là tổng điện tích còn lại của phân tử,  $\kappa = \sqrt{2I_p}$  với  $I_p$  là thế ion hóa của phân tử và  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  là hàm cầu của nguyên tử hydro. Tốc độ ion hóa của phân tử trong trường tĩnh điện với độ lớn của trường là  $F = |E|$  được cho bởi

$$w_{stat}(F, \beta) = \sum_{m'} \frac{B^2(m')}{2^{|m'|} |m'|!} \frac{1}{\kappa^{\frac{2Z_c-1}{\kappa}}} \left(\frac{2\kappa^3}{F}\right)^{\frac{2Z_c-1}{\kappa} - |m'| - 1} e^{-\frac{2\kappa^3}{3F}}, \quad (13)$$

với

$$B(m') = \sum_l C_l D_{m',m}^l(\beta) (-1)^{m'} \sqrt{\frac{(2l+1)(l+|m'|)!}{2(l-|m'|)!}} \quad (14)$$

trong đó  $D_{m',m}^l$  là ma trận quay. Từ đó có thể dễ dàng tính được tốc độ ion hóa trong trường điện biến thiên với tần số nhỏ là

$$w(F, \beta) = \left( \frac{3F}{\kappa^3} \right)^{1/2} w_{stat}(F, \beta). \quad (15)$$

Xác suất ion hóa trong trường điện laser liên hệ với tốc độ ion hóa qua biểu thức

$$P(F, \beta) = 1 - e^{-\int w(F, \beta) dt}, \quad (16)$$

có nghĩa là trường điện laser sẽ được chia thành những khoảng  $dt$  rất nhỏ sao cho điện trường trong vùng đó có thể xem là biến thiên chậm và áp dụng được biểu thức (13) và (15).

Với phân tử phân cực thể ion hóa sẽ không còn là hằng số mà phụ thuộc vào điện trường  $\vec{E}$  thông qua biểu thức gần đúng bậc hai từ hiệu ứng Stark [3, 5]

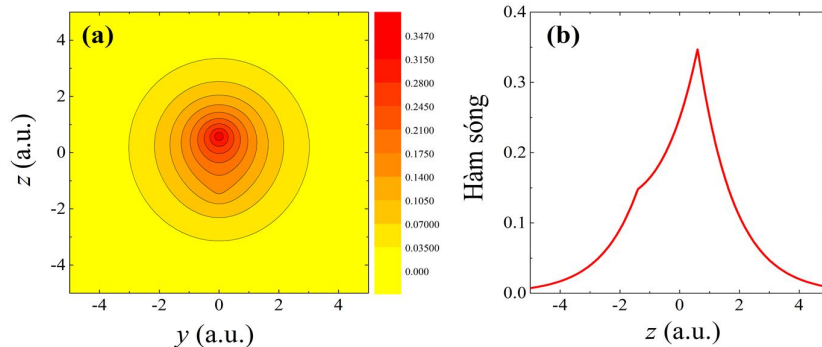
$$I_p(\vec{E}) = I_p(0) + \Delta\vec{\mu}\vec{E} + \frac{1}{2}\vec{E}^T\Delta\alpha\vec{E}, \quad (17)$$

trong đó,  $I_p(0)$  là ion hóa khi chưa có trường ngoài,  $\Delta\vec{\mu}$  là hiệu vec tơ lưỡng cực (dipole) và  $\Delta\alpha$  là hiệu tensor phân cực (polarizability) của phân tử trung hòa và ion dương của nó. Do đó trong lí thuyết SC-MO-ADK thì toàn bộ các công thức từ (13) đến (16) sẽ được giữ nguyên nhưng thể ion hóa sẽ được cho bởi phương trình (17). Với phân tử phân cực phần đóng góp của độ phân cực  $\Delta\vec{\mu}$  là chủ yếu, do đó tương tự như [6] chúng tôi chỉ xét tới đóng góp hiệu chỉnh bậc nhất (tuyến tính) trong biểu thức tính thể ion hóa.

### 3. Kết quả

#### 3.1. Hàm sóng và năng lượng tại trạng thái cơ bản

Năng lượng tại trạng thái cơ bản của điện tử là 10.5 eV và hàm sóng tại trạng thái cơ bản của điện tử được vẽ ra trong hình 2. Có thể thấy hầu như toàn bộ điện tử đều tập trung ở phía hạt nhân có điện tích lớn ( $Z_2 = 0.7$  a.u.). Và do tính chất đối xứng nên hiệu vec tơ lưỡng cực  $\Delta\vec{\mu}$  của phân tử sẽ là một vec tơ hướng dọc và ngược chiều trục  $Oz$ , có độ lớn là 0.194 a.u.



**Hình 2.** Hàm sóng tại trạng thái cơ bản của phân tử  $Z_1Z_2$  (a) tại mặt cắt  $x=0$  và (b) tại mặt cắt  $x=0, y=0$

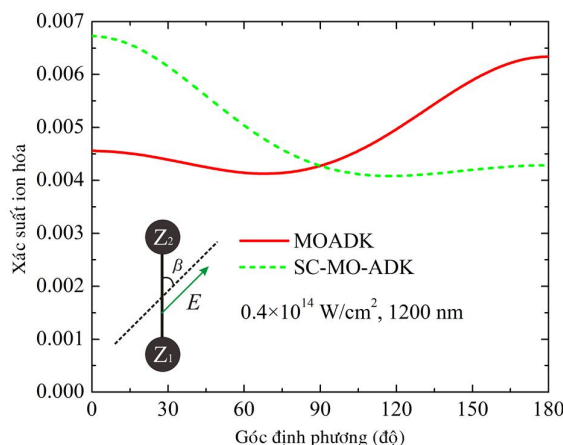
### 3.2. Xác suất ion hóa bằng lý thuyết MO-ADK và SC-MO-ADK

Các hệ số  $C_l$  khi khai triển hàm sóng cơ bản của phân tử  $Z_1Z_2$  ở khoảng cách rất lớn được trình bày trong bảng 1. Góc của những trạng thái với  $l > 3$  rất nhỏ có thể bỏ qua, do đó chúng tôi chỉ tính tới  $l = 2$ .

**Bảng 1.** Các hệ số  $C_l$ .

$l, m = 0$	$C_l$
0	1.651
1	0.085
2	0.059

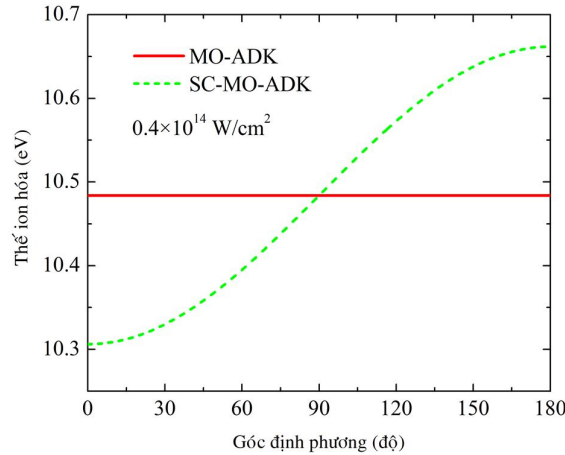
Xác suất ion hóa của phân tử  $Z_1Z_2$  khi tương tác với trường laser có bước sóng 1200 nm, cường độ  $0.4 \times 10^{14}$  W/cm<sup>2</sup> bằng lý thuyết MO-ADK và SC-MO-ADK được thể hiện trong hình 3. Có thể thấy một sự khác biệt hoàn toàn giữa lý thuyết MO-ADK và SC-MO-ADK. Theo lý thuyết MO-ADK thì điện tử sẽ dễ bị ion hóa hơn khi cường độ laser cực đại chiếu từ  $Z_2$  sang  $Z_1$  a.u. ( $\beta = 180^\circ$ ) so với chiều ngược lại từ  $Z_1$  sang  $Z_2$  ( $\beta = 0^\circ$ ). Lý thuyết SC-MO-ADK thì lại dự đoán hoàn toàn ngược lại, nghĩa là phân tử  $Z_1Z_2$  sẽ dễ bị ion hóa hơn tại góc định phương  $\beta = 0^\circ$  so với  $\beta = 180^\circ$ . Thêm nữa, theo lý thuyết MO-ADK xác suất ion hóa cực tiểu tại góc định phương  $\beta = 70^\circ$  và  $\beta = 120^\circ$  theo lý thuyết SC-MO-ADK.



**Hình 3.** Xác suất ion hóa của phân tử  $Z_1Z_2$  trong trường laser có cường độ  $0.4 \times 10^{14}$  W/cm<sup>2</sup>, bước sóng 1200 nm, tính bằng lý thuyết MO-ADK và SC-MO-ADK

Để giải thích cho kết quả này, thể ion hóa phụ thuộc vào góc định phương khi laser có cường độ đỉnh  $0.4 \times 10^{14}$  W/cm<sup>2</sup> được vẽ ra trong hình 4. Với lý thuyết MO-

ADK thì thế ion hóa là hằng số, tuy nhiên với lý thuyết SC-MO-ADK thì thế ion hóa sẽ phụ thuộc vec tơ điện trường, tức là cường độ và hướng của nó. Tại góc  $0^0$ , hai vec tơ  $\Delta\vec{\mu}$  và  $\vec{E}$  ngược chiều nhau, từ (17) sẽ thấy thế ion hóa giảm, dẫn đến điện tử sẽ dễ bị ion hóa hơn. Ngược lại tại góc  $180^0$ , hai vec tơ  $\Delta\vec{\mu}$  và  $\vec{E}$  cùng chiều, thế ion hóa điện tử tăng, điện tử sẽ khó bị ion hóa hơn. Như vậy, có thể thấy đối với các phân tử phân cực thì đóng góp của tương tác giữa lưỡng cực phân tử và điện trường là đáng kể và không thể bỏ qua. Tại góc định phương  $\beta = 90^0$  thế ion hóa của hai lý thuyết là như nhau do đó xác suất ion hóa tại góc này là giống nhau như được thể hiện trong hình 3.

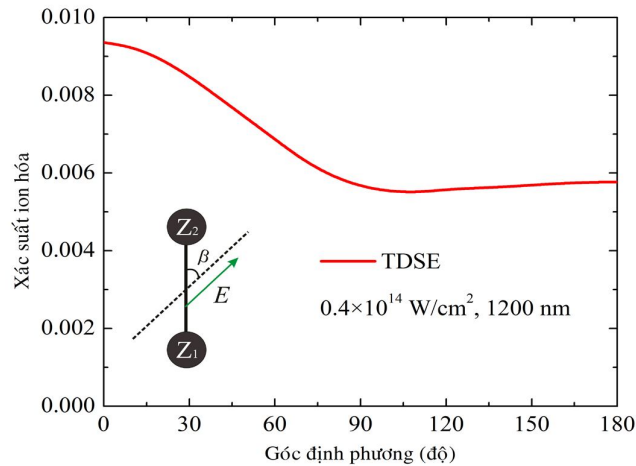


**Hình 4.** Thế ion hóa của phân tử  $Z_1Z_2$  khi laser có cường độ đỉnh  $0.4 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$  tính bằng lý thuyết MO-ADK và SC-MO-ADK

### 3.3. Xác suất ion hóa bằng phương pháp TDSE

Xác suất ion hóa của phân tử  $Z_1Z_2$  phụ thuộc góc định phương khi tương tác với laser có cường độ  $0.4 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$  và bước sóng 1200 nm bằng phương pháp TDSE được thể hiện trong hình 5. Có thể thấy xác suất ion hóa đạt giá trị cực đại tại góc  $0^0$  sau đó giảm xuống tới  $120^0$  và tăng lên nhẹ tới góc  $180^0$ . Hành xử này là hoàn toàn tương tự với những gì lý thuyết SC-MO-ADK đã dự đoán. Do đó bằng phương pháp số chúng tôi đã chứng minh được lý thuyết SC-MO-ADK dự đoán tốt sự phụ thuộc của xác suất ion hóa vào góc định phương.

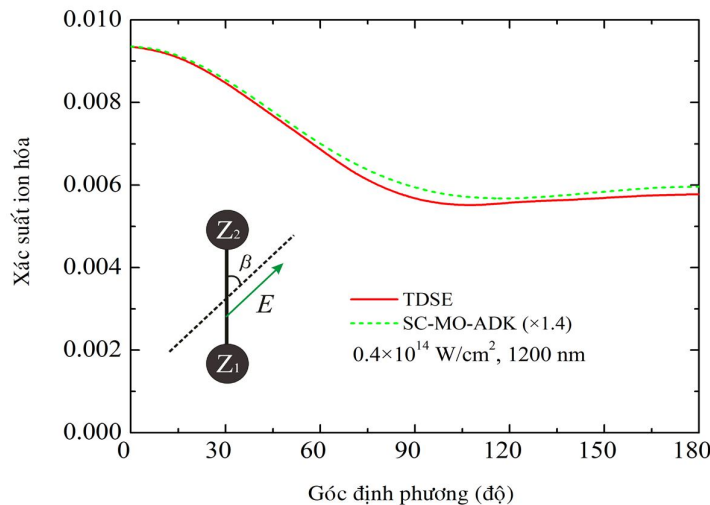




**Hình 5.** Xác suất ion hóa của phân tử  $Z_1Z_2$  khi tương tác với laser có cường độ  $0.4 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$  và bước sóng 1200 nm tính bằng phương pháp TDSE

### 3.4. So sánh phương pháp SC-MO-ADK và TDSE

Để thấy được sự hiệu quả của lý thuyết SC-MO-ADK và TDSE, trong hình 6 chúng tôi thể hiện xác suất ion hóa khi phân tử tương tác với laser có cường độ  $0.4 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ , bước sóng 1200 nm. So với kết quả TDSE, có thể thấy xác suất ion hóa bằng lý thuyết SC-MO-ADK là nhỏ hơn khoảng 1.4 lần so với kết quả TDSE. Tuy nhiên lý thuyết SC-MO-ADK dự đoán một cách chính xác sự phụ thuộc của xác suất ion hóa theo góc định phương, nghĩa là đạt cực đại tại  $0^\circ$ , giảm xuống đạt cực tiểu tại  $120^\circ$ , sau đó tăng nhẹ khi góc định phương đạt  $180^\circ$ .



**Hình 6.** Xác suất ion hóa của phân tử  $Z_1Z_2$  khi tương tác với laser có cường độ  $0.4 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ , bước sóng 1200 nm tính bằng phương pháp TDSE và SC-MO-ADK

Để so sánh một cách cụ thể và định lượng hơn, trong bảng 2 chúng tôi cung cấp xác suất ion hóa tại các góc định phương  $0^0$  và tỉ số xác suất ion hóa  $\varepsilon = P(0^0) / P(180^0)$  bằng TDSE và lí thuyết SC-MO-ADK cho những cường độ laser khác nhau. Tại góc  $0^0$ , khi cường độ laser tăng xác suất ion hóa bằng lí thuyết SC-MO-ADK tăng nhanh hơn khi so với kết quả TDSE, từ bé hơn tại cường độ  $0.4 \times 10^{14}$  W/cm<sup>2</sup> sau đó lớn hơn cho những cường độ khác. Đây là một vấn đề cần được cải tiến trong lí thuyết SC-MO-ADK. Tuy nhiên, tỉ số xác suất ion hóa tại góc định phương  $0^0$  và  $180^0$  gần như là giống nhau, với độ lệch dưới 4% cho toàn bộ cường độ laser. Do đó mặc dù lí thuyết SC-MO-ADK chưa cung cấp chính xác có bao nhiêu điện tử có khả năng bị ion hóa tại một góc định phương cụ thể, nhưng nó cung cấp một bức tranh tổng quát về sự phụ thuộc của xác suất ion hóa vào góc định phương. Đây là một kết quả tạo tiền đề cho những nghiên cứu về thực nghiệm.

**Bảng 2.** Xác suất ion hóa của phân tử  $Z_1Z_2$  với những cường độ khác nhau được tính bằng phương pháp TDSE và lí thuyết SC-MO-ADK

Cường độ ( $\times 10^{14}$ W/cm <sup>2</sup> )	TDSE		SC-MO-ADK	
	$P(0^0)$ (%)	$\varepsilon$	$P(0^0)$ (%)	$\varepsilon$
0.4	0.94	1.62	0.67	1.57
0.5	2.37	1.58	2.53	1.58
0.6	4.75	1.55	6.57	1.57
0.7	8.10	1.52	13.5	1.56
0.8	12.2	1.48	23.2	1.53

#### 4. Kết luận

Trong bài này chúng tôi đã trình bày lí thuyết tính xác suất ion hóa bằng phương pháp số TDSE, cũng như lí thuyết MO-ADK và SC-MO-ADK cho mô hình phân tử phân cực  $Z_1Z_2$ . Sau đó xác suất ion hóa của mô hình phân tử phân cực  $Z_1Z_2$  dưới tác dụng của trường điện laser có cường độ  $0.4 \times 10^{14}$  W/cm<sup>2</sup>, bước sóng 1200 nm đã được tính bằng lí thuyết MO-ADK, SC-MO-ADK và phương pháp TDSE. So sánh với kết quả TDSE chúng tôi nhận thấy cần phải sử dụng lí thuyết SC-MO-ADK, thay vì MO-ADK cho các phân tử phân cực. Tiếp tục tính cho các cường độ cao hơn chúng tôi nhận thấy mặc dù chưa dự đoán chính xác độ lớn của xác suất ion hóa tại từng góc định phương cụ thể, nhưng lí thuyết SC-MO-ADK dự đoán tốt, cung cấp một bức tranh về sự phụ thuộc của xác suất ion hóa vào góc định phương.

**Ghi chú:** Công trình này được thực hiện trong khuôn khổ đề tài nghiên cứu khoa học cấp cơ sở năm 2015 của Trường Đại học Sư phạm TP HCM, với mã số CS.2015.19.65.

## TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Ammosov M. V., Delone N. B., Krainov V. P. (1986), “Tunnel ionization of complex atoms and of atomic ions in an alternating electromagnetic field”, *Sov. Phys. JETP*, 64, pp. 1191.
2. Bin Z., Jianmin Y., and Zhao Z. (2013), “Dynamic Core Polarization in Strong-Field Ionization of CO Molecules”, *Phys. Rev. Lett.*, 111, pp. 163001.
3. Dimitrovski D., Martiny C. P. J., and Madsen L. B. (2010), “Strong-field ionization of polar molecules: Stark-shift-corrected strong-field approximation”, *Phys. Rev. A*, 82, pp. 053404.
4. Domagoj P., Lee K. F., Rayner D. M., Corkum P. B., and Villeneuve D. M. (2007), “Alignment-Dependent Ionization of N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, and CO<sub>2</sub> in Intense Laser Fields”, *Phys. Rev. Lett.*, 98, pp. 243001.
5. Holmegaard L., Hansen J. L., Kalkhøj L., Kragh S. L., Stapelfeldt H., Filsinger F., Küpper J., Meijer G., Dimitrovski D., Abu-samha M., Martiny C. P. J., and Madsen L. B. (2010), “Photoelectron angular distributions from strong-field ionization of oriented molecules”, *Nature Physics*, 6, pp. 428.
6. Li H., Ray D., De S., Znakovskaya I., Cao W., Laurent G., Wang Z., Kling M. F., Le A. T., and Cocke C. L. (2011), “Orientation dependence of the ionization of CO and NO in an intense femtosecond two-color laser field”, *Phys. Rev. A*, 84, pp. 043429.
7. Muth-Bohm J., Becker A., and Faisal F. H. M. (2000), “Suppressed Molecular Ionization for a Class of Diatomics in Intense Femtosecond Laser Fields”, *Phys. Rev. Lett.*, 85, pp. 2280.
8. Son S. K. and Chu S. I. (2009), “Multielectron effects on the orientation dependence and photoelectron angular distribution of multiphoton ionization of CO<sub>2</sub> in strong laser fields”, *Phys. Rev. A*, 80, pp. 011403(R).
9. Telnov D. A. and Chu S. I. (2007), “Ab initio study of the orientation effects in multiphoton ionization and high-order harmonic generation from the ground and excited electronic states of H<sub>2</sub><sup>+</sup>”, *Phys. Rev. A*, 76, pp. 043412.
10. Tolstikhin O. I., Morishita T., and Madsen L. B. (2011), “Theory of tunneling ionization of molecules: Weak-field asymptotics including dipole effects”, *Phys. Rev. A*, 84, pp. 053423.
11. Tolstikhin O. I. and Namba C. (2003), “CTBC-A Program to Solve the Collinear Three-Body Coulomb Problem: Bound States and Scattering Below the Three-Body Disintegration Threshold”, National Institute for Fusion Science, Toki, Japan.
12. Tong X. M., Zhao Z. X., and Lin C. D. (2002), “Theory of molecular tunneling ionization”, *Phys. Rev. A*, 66, pp. 033402.
13. Zhao S. F., Jin C., Le A. T., Jiang T. F., and Lin C. D. (2010), “Determination of structure parameters in strong-field tunneling ionization theory of molecules”, *Phys. Rev. A*, 82, pp. 049903.

(Ngày Tòa soạn nhận được bài: 25-11-2015; ngày phản biện đánh giá: 30-11-2015;  
ngày chấp nhận đăng: 22-12-2015)