



ISSN: 1859-3100

TRƯỜNG ĐẠI HỌC SƯ PHẠM TP HỒ CHÍ MINH  
**TẠP CHÍ KHOA HỌC**

KHOA HỌC TỰ NHIÊN VÀ CÔNG NGHỆ  
Tập 14, Số 12 (2017): 12-21

HO CHI MINH CITY UNIVERSITY OF EDUCATION  
**JOURNAL OF SCIENCE**

NATURAL SCIENCES AND TECHNOLOGY  
Vol. 14, No. 12 (2017): 12-21

Email: tapchikhoahoc@hcmue.edu.vn; Website: http://tckh.hcmue.edu.vn

## TRÍCH XUẤT THÔNG TIN DAO ĐỘNG HẠT NHÂN TỪ PHỔ SÓNG ĐIỀU HÒA BẬC CAO CỦA ION PHÂN TỬ $H_2^+$ , $D_2^+$ , $T_2^+$

*Phan Thị Ngọc Loan\**

*Khoa Vật lý - Trường Đại học Sư phạm TP Hồ Chí Minh*

*Ngày nhận bài: 22-9-2017; ngày nhận bài sửa: 09-10-2017; ngày duyệt đăng: 20-12-2017*

### TÓM TẮT

*Bằng phương pháp giải số phương trình Schödinger phụ thuộc thời gian của  $H_2^+$  và các đồng vị trong trường laser mạnh, chúng tôi thu được phổ sóng điều hòa bậc cao (HHG) tính đến dao động hạt nhân. Trong phổ HHG xuất hiện những đỉnh phụ, cách đỉnh chính đúng bằng tần số dao động của hạt nhân. Chúng tôi chỉ ra rằng, cấu trúc tinh tế này vẫn xuất hiện khi hạt nhân dao động ở trạng thái kích thích, hoặc chồng chập của các trạng thái với hệ số đóng góp khác nhau. Hơn nữa, tần số dao động trích xuất được từ phổ HHG không phụ thuộc vào trạng thái dao động ban đầu của hạt nhân. Tuy nhiên, cấu trúc tinh tế chỉ quan sát được khi laser tương tác có cường độ thích hợp.*

*Từ khóa:* HHG, dao động hạt nhân, cấu trúc tinh tế, tần số dao động, đồng vị.

### ABSTRACT

#### *Extraction of the nuclear vibration from the high-order harmonic spectra in molecular ions $H_2^+$ , $D_2^+$ , $T_2^+$*

*By numerically solving the time-dependent Schödinger equation for vibrating molecular ion  $H_2^+$  and its isotopes in strong laser field, we have obtained the high-order harmonic generation (HHG) spectra. In these spectra, the satellite peaks appear and surround the odd peaks with space of nuclear vibration frequency. We show that, this fine structure exists even when the nuclei initially vibrate in the excited states, or in a coherent superposition of states with various populations. Moreover, the extracting vibration frequency from the HHG spectra is not affected by the initial vibrational states. However, the fine structure is only observed by the laser with appropriate intensities.*

*Keywords:* HHG, nuclear vibration, fine structure, vibration frequency, isotopes.

### 1. Giới thiệu

Phát xạ sóng điều hòa bậc cao (HHG) là một trong những hiệu ứng phi tuyến xảy ra khi nguyên tử, phân tử tương tác với trường laser mạnh [1, 2]. Từ phổ HHG cho phép tạo xung có độ dài cực ngắn ( $\sim 10^{-18}$  giây), mở ra hướng nghiên cứu mới – vật lý atto giây, hiện đang thu hút sự quan tâm của rất nhiều nhà khoa học trên thế giới [3, 4]. Ngoài ra, HHG

\* Email: loanphan@hcmup.edu.vn

còn được ứng dụng như là một công cụ hữu hiệu nhằm trích xuất thông tin cấu trúc phân tử [5, 6], hay theo dõi chuyển động của điện tử và hạt nhân [7-10].

Bức tranh phát xạ HHG được mô tả trong gần đúng bán cổ điển bằng mô hình ba bước được đề xuất lần đầu tiên bởi Corkum [1] và sau đó là nhóm Lewenstein [2]. Theo đó, đầu tiên, dưới tác dụng của trường mạnh, điện tử bị ion hóa xuyên hầm ra vùng liên tục; sau đó điện tử được gia tốc bởi điện trường của laser; cuối cùng khi laser đổi chiều, điện tử bị kéo ngược trở về, tái kết hợp với ion mẹ và phát xạ HHG. Sự phát xạ HHG gây ra bởi chuyển động của điện tử, hơn nữa, điện tử chuyển động nhanh hơn rất nhiều so với hạt nhân, do đó thông thường khi tính phát xạ HHG, chuyển động của hạt nhân thường bị bỏ qua [5, 6]. Tuy nhiên, chu kỳ dao động của hạt nhân ( $\sim 20$  fs) có thể so sánh được với độ dài của xung laser tương tác, do đó, các công trình thực nghiệm đã chỉ ra rằng, dao động của hạt nhân gây ảnh hưởng tới phổ HHG [11,12]. Khi hạt nhân dao động càng mạnh, hiệu suất phát xạ HHG càng tăng [13, 14]. Trong [7, 9, 15], các tác giả đã chỉ ra khả năng thu được các thông tin như khoảng cách liên hạt nhân, vận tốc ban đầu của hạt nhân từ phổ HHG. Năm 2005, Lein [8] đã chứng minh mối liên hệ giữa hiệu suất phát xạ HHG và dao động hạt nhân. Từ đó, các tác giả theo dõi được sự dao động của hạt nhân từ sự phổ HHG của các đồng vị [8]. Kết quả này đã được kiểm chứng trong công trình của nhóm Baker [11]. Gần đây, Nhóm Bian [10] nhận thấy, dao động hạt nhân còn gây ra sự dịch chuyển tần số phát xạ HHG về phía đỏ so với các bậc lẻ, đồng thời, chỉ ra khả năng thu nhận thông tin chuyển động của hạt nhân trực tiếp từ sự dịch chuyển đỏ trong phổ HHG. Corso và các cộng sự [16,17] đã nghiên cứu phổ HHG phát ra từ ion  $H_2^+$ ,  $D_2^+$ , phân tử  $H_2$ ,  $D_2$  trong trường laser nhiều chu kỳ, và phát hiện rằng, ngoài các đỉnh chính tại các bậc lẻ thường thấy trong phổ HHG, còn xuất hiện hàng loạt các đỉnh phụ, cách đều đỉnh chính với khoảng cách chính bằng tần số dao động của hạt nhân, hình thành cấu trúc tinh tế trong phổ HHG. Như vậy, các tác giả cho rằng, có thể thu trực tiếp thông tin tần số dao động của hạt nhân từ phổ HHG. Tuy nhiên, trong công trình trên [16,17], các tác giả mới tính cho trạng thái dao động cơ bản của hạt nhân.

Trong công trình này, chúng tôi sẽ đánh giá khả năng trích xuất thông tin tần số dao động hạt nhân của  $H_2^+$  và các đồng vị từ phổ HHG khi hạt nhân dao động ở trạng thái kích thích, và trong trường hợp hạt nhân dao động với chồng chập các trạng thái với hệ số đóng góp khác nhau. Phương pháp giải số phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian (TDSE) được sử dụng để thu được HHG. Trước tiên, chúng tôi kiểm chứng kết quả của nhóm Corso [16,17], và thảo luận về việc sử dụng laser thích hợp nhằm thu được các đỉnh phụ trong phổ HHG của  $H_2^+$ . Sau đó, dùng gần đúng Born-Oppenheimer, chúng tôi sẽ thu được phổ HHG khi hạt nhân dao động ở trạng thái kích thích, và chồng chập của các trạng thái. Cuối cùng, ảnh hưởng của đồng vị lên cấu trúc tinh tế trong phổ HHG được nghiên cứu.

Đây là bài toán tiền đề cho những nghiên cứu tiếp theo của chúng tôi cho các phân tử phức tạp hơn, như phân tử bất đối xứng và các phân tử lớn.

## 2. Phương pháp TDSE cho phân tử $H_2^+$ xét đến dao động hạt nhân

Trong bài báo này, chúng tôi sử dụng mô hình phân tử  $H_2^+$  đơn giản với một chiều chuyển động của điện tử, dọc theo hướng vectơ phân cực của trường laser. Hai hạt nhân dao động dọc theo trục này. Chuyển động quay của phân tử được coi như rất chậm so với dao động hạt nhân nên sẽ được bỏ qua. Trong hệ quy chiếu khối tâm, phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian của ion phân tử  $H_2^+$  trong trường laser (trong hệ đơn vị nguyên tử với  $\hbar = e = m_e = 1$ ) có dạng

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, R, t) = \left( -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{1}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial R^2} + V_C(x, R) + V_L(x, t) \right) \Psi(x, R, t), \quad (1)$$

với  $x$  là tọa độ của điện tử tính từ khối tâm của hệ;  $R$  là khoảng cách giữa hai hạt nhân.  $\mu$  là khối lượng rút gọn của hai hạt nhân.

Thế Coulomb của hệ

$$V_C(x, R) = -\frac{1}{\sqrt{(x-R/2)^2 + \alpha}} - \frac{1}{\sqrt{(x+R/2)^2 + \alpha}} + -\frac{1}{\sqrt{R^2 + \beta}}, \quad (2)$$

với hệ số làm mềm Coulomb  $\alpha, \beta$  lần lượt nhận các giá trị bằng 1 và 0.03 [17]. Ban đầu, khoảng cách liên hạt nhân ở trạng thái cân bằng  $R_{equi} = 2.59$  a.u. với năng lượng -0,781 a.u.

Thế tương tác của trường laser với điện tử được viết trong định chuẩn dài như sau

$$V_L(x, t) = E_0 f(t) \sin \omega_0 t, \quad (3)$$

với  $E_0$  và  $\omega_0$  lần lượt là cường độ đỉnh và tần số của laser.  $f(t)$  là hàm bao của laser.

Hàm sóng phụ thuộc vào thời gian của hệ được giải bằng phương pháp tách toán tử [18]

$$\Psi(x, R, t + \Delta t) = \exp\left(-i \frac{V(x, R, t)}{2} \Delta t\right) \exp(-i \hat{T} \Delta t) \exp\left(-i \frac{V(x, R, t)}{2} \Delta t\right) \Psi(x, R, t) + O(\Delta t^3), \quad (4)$$

với  $V(x, R, t)$  là tổng thế năng, và  $\hat{T}$  là tổng toán tử động năng của hệ.

Vì khối lượng của hạt nhân lớn hơn rất nhiều so với khối lượng của điện tử, nên trong gần đúng Born-Oppenheimer có thể tách riêng chuyển động của hạt nhân và điện tử. Hàm sóng ban đầu  $\Psi(x, R, 0)$  của hệ được cho bởi

$$\Psi(x, R, 0) = \sum_n C_n \varphi(x, R) \chi_n(R), \quad (5)$$

trong đó,  $n$  là chỉ số lượng tử đặc trưng cho mức dao động của hạt nhân.  $C_n$  là hệ số đóng góp của các mức dao động hạt nhân vào hàm sóng toàn phần của ion phân tử.  $\varphi(x, R)$ ,

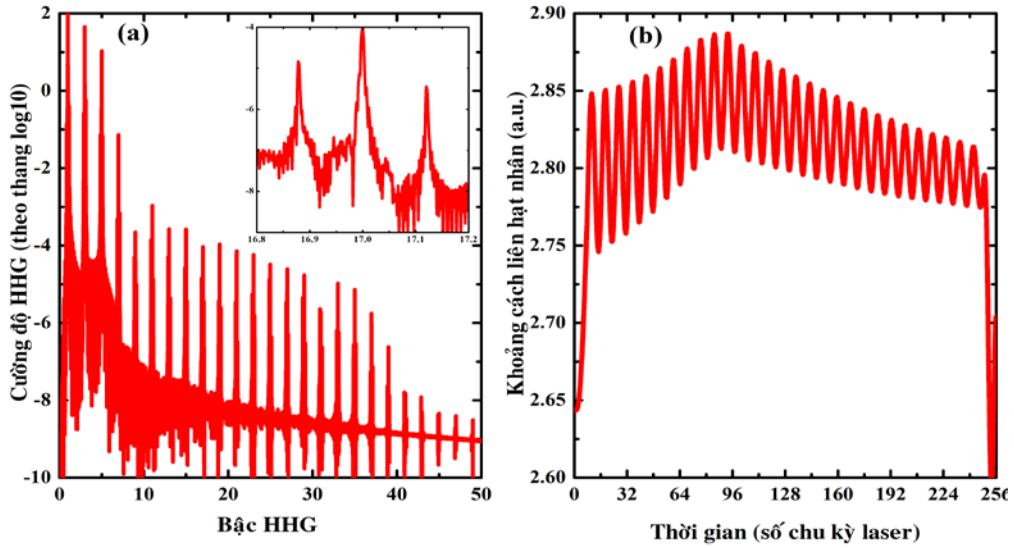
$\chi_n(R)$  lần lượt là hàm sóng của điện tử và hạt nhân được giải bằng phương pháp thời gian ảo [19].

Phổ HHG được tính từ gia tốc lưỡng cực  $\mathbf{a}(t) = -\langle \Psi | \nabla V_C + \mathbf{E} | \Psi \rangle$  bằng biến đổi Fourier

$$S_{HHG}(\omega) = \left| \int_{-\infty}^{\infty} a(t) e^{-i\omega t} dt \right|^2. \quad (6)$$

Trong bài báo này, lưới tính toán với tọa độ không gian  $0 \leq R \leq 50$  a.u. và  $-512 \leq x \leq 512$  a.u với bước nhảy tương ứng lần lượt là  $\Delta R = 0.05$  a.u. và  $\Delta x = 0.25$  a.u. Để tránh sự phản xạ của hàm sóng do giới hạn của lưới tính toán, chúng tôi sử dụng hàm mật nã hấp thụ dạng  $\cos^{1/4}[\pi(|x| - x_{cut})/2(x_{max} - x_{min})]$  khi  $|x| \geq x_{cut}$  cho điện tử, và  $\cos^{1/4}[\pi(R - R_{cut})/2(R_{max} - R_{min})]$  cho khoảng cách liên hạt nhân với  $x_{cut} = 350$  a.u. và  $R_{cut} = 45$  a.u. Bước nhảy thời gian  $\Delta t = 0.1$  a.u. Những thông số này đã được kiểm tra nhằm bảo đảm sự hội tụ khi tính HHG.

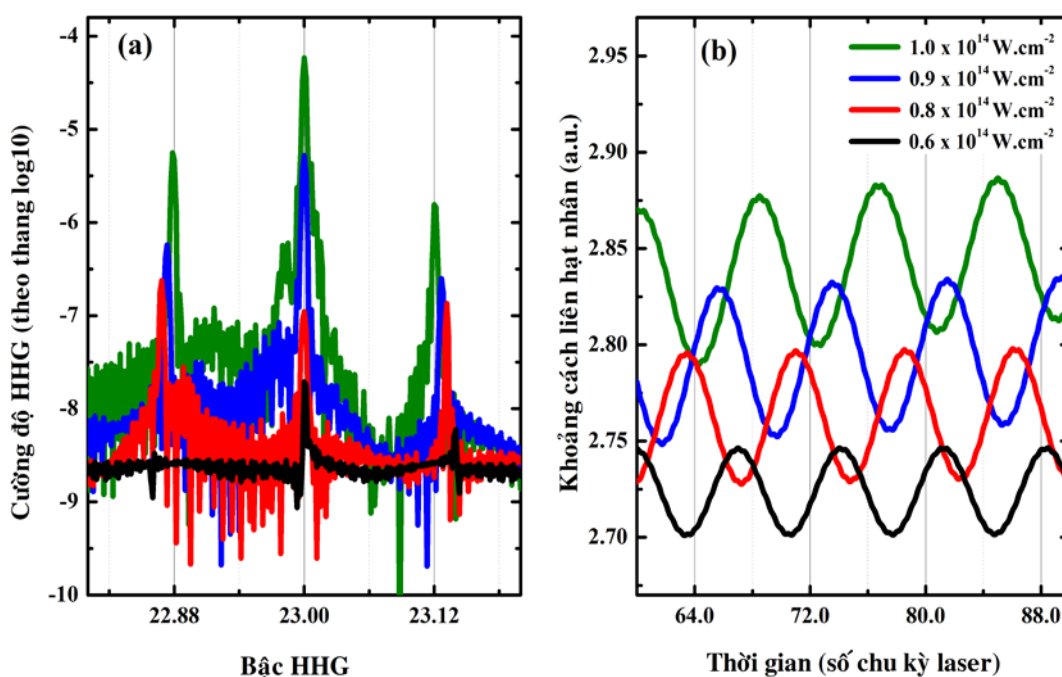
### 3. Kết quả và thảo luận



**Hình 1.** (a) Phổ HHG của phân tử  $H_2^+$  dao động với trạng thái  $n=0$ . Hình nhỏ (lồng trong hình (a)) thể hiện cấu trúc tinh tế của bậc 17 trong phổ HHG. (b) Sự thay đổi theo thời gian của khoảng cách liên hạt nhân phân tử  $H_2^+$ . Laser có cường độ  $1 \times 10^{14}$  W.cm<sup>-2</sup>, bước sóng 800 nm, độ dài xung 256 chu kỳ.

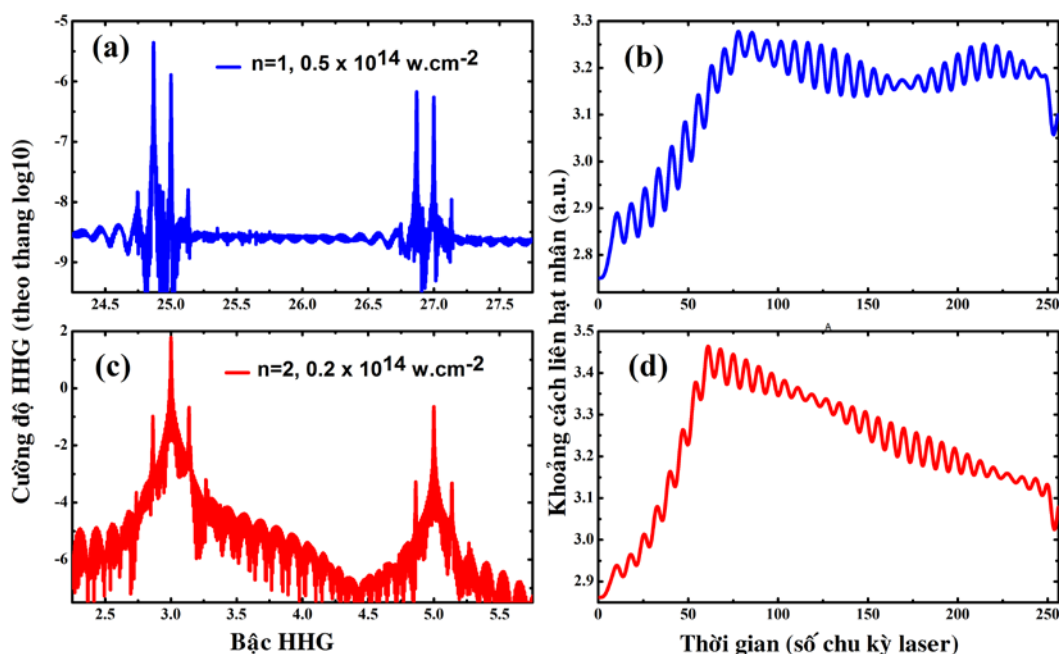
Trong mục này, chúng tôi sẽ trình bày phổ HHG phát ra từ phân tử  $H_2^+$  và các đồng vị dao động trong trường laser. Để nghiên cứu dao động hạt nhân và tránh hiệu ứng dịch chuyển đỏ của phổ HHG khi sử dụng xung laser ngắn [10], chúng tôi sử dụng xung laser dài 256 chu kỳ, có hàm bao dạng hình thang, với 8 chu kỳ bật và 8 chu kỳ tắt.

Hình 1a. biểu diễn phổ HHG của  $H_2^+$  với trạng thái dao động ban đầu  $n=0$  khi tương tác với laser có cường độ  $1 \times 10^{14} \text{ W.cm}^{-2}$ , bước sóng 800 nm. Dễ dàng nhận thấy, sóng HHG phát ra có các đỉnh rõ nét, tương ứng với tần số là bội số lẻ của tần số laser chiếu vào. Trong hình vẽ lồng trong Hình 1a, chúng tôi chỉ cụ thể các đỉnh HHG tương ứng với bậc HHG 17. Các đỉnh này cách nhau với khoảng cách tương ứng  $0,121\omega_0 = 0,0069 \text{ a.u.}$ , hình thành cấu trúc tinh tế trong phổ HHG. Hơn nữa, sử dụng laser có số chu kỳ càng tăng, cấu trúc tinh tế càng thể hiện rõ nét. Kết quả này tương tự các kết quả được nhóm của Corso tính toán bằng phương pháp bán cổ điển [16] và lượng tử phi Born-Oppenheimer [17]. Cấu trúc tinh tế hoàn toàn biến mất khi dao động hạt nhân bị bỏ qua.



**Hình 2.** Cấu trúc tinh tế trong phổ HHG tại bậc 23 (a) và dao động của khoảng cách liên hạt nhân (b) của  $H_2^+$  với trạng thái  $n=0$  trong trường laser có cường độ khác nhau. Laser có bước sóng 800nm và độ dài 256 chu kỳ.

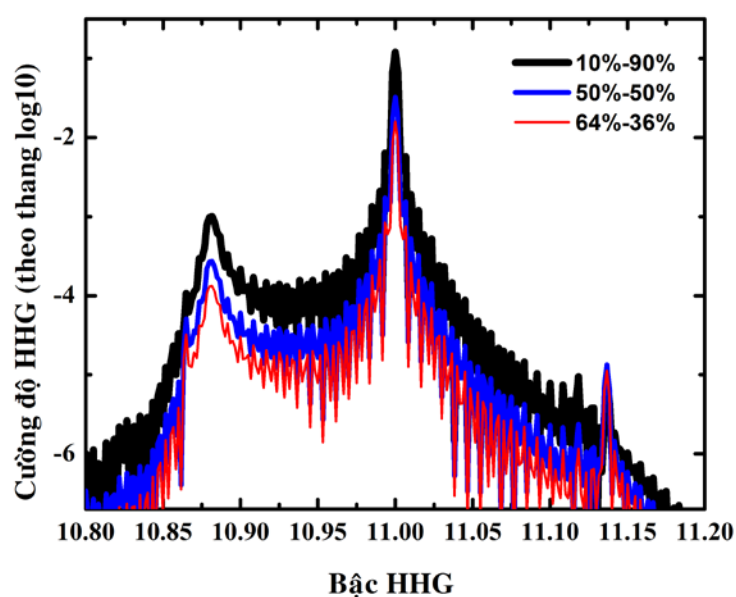
Để giải thích hiện tượng này, dao động của hạt nhân được biểu diễn thông qua sự phụ thuộc của khoảng cách liên hạt nhân theo thời gian được thể hiện trong Hình 1b. Chúng tôi nhận thấy khoảng cách liên hạt nhân dịch chuyển khỏi vị trí ban đầu, sau đó dao động điều hòa với chu kỳ bằng 8,4 chu kỳ laser (tức  $\sim 22$  fs), tương ứng với tần số dao động là  $\omega_0/8,4 = 0,12\omega_0$ . Như vậy, chúng tôi xác nhận lại kết quả thu được trong [16, 17]. Trong công trình [16], các tác giả cho rằng, sự dịch chuyển của khoảng cách liên hạt nhân khỏi vị trí cân bằng là tương đối nhỏ, do đó hạt nhân dao động trong hố thế của điện tử với dạng xấp xỉ hố thế điều hòa với tần số tỉ lệ nghịch với khối lượng hạt nhân. Sự dịch chuyển nhỏ của khoảng cách liên hạt nhân làm phá vỡ đối xứng của thế Coulomb khi  $(x, t) \rightarrow (-x, t + T/2)$ , với  $T$  là chu kỳ của laser [16], làm xuất hiện các đỉnh phụ trong phổ HHG.



**Hình 3.** Cấu trúc tinh tế trong phổ HHG (cột trái) và dao động của khoảng cách liên hạt nhân (cột phải) khi phân tử  $\text{H}_2^+$  dao động với trạng thái  $n=1$  (hình a,b) và  $n=2$  (Hình c, d).

Tiếp theo, chúng tôi sẽ khảo sát cấu trúc phổ HHG khi ion phân tử  $\text{H}_2^+$  tương tác với laser có cường độ khác nhau (Hình 2). Chúng tôi nhận thấy cấu trúc tinh tế vẫn xuất hiện trong phổ HHG. Tuy nhiên, khi cường độ laser giảm, khoảng cách giữa các đỉnh phụ tăng dần. Với cường độ laser là  $1 \times 10^{14} \text{ W.cm}^{-2}$ ,  $0,9 \times 10^{14} \text{ W.cm}^{-2}$ ,  $0,8 \times 10^{14} \text{ W.cm}^{-2}$ ,  $0,6 \times 10^{14} \text{ W.cm}^{-2}$  khoảng cách giữa các đỉnh lần lượt là  $0,12\omega_0$ ,  $0,127\omega_0$ ,  $0,132\omega_0$ ,  $0,14\omega_0$ . Nguyên nhân là do cường độ laser càng giảm, chu kỳ dao động của khoảng cách liên hạt

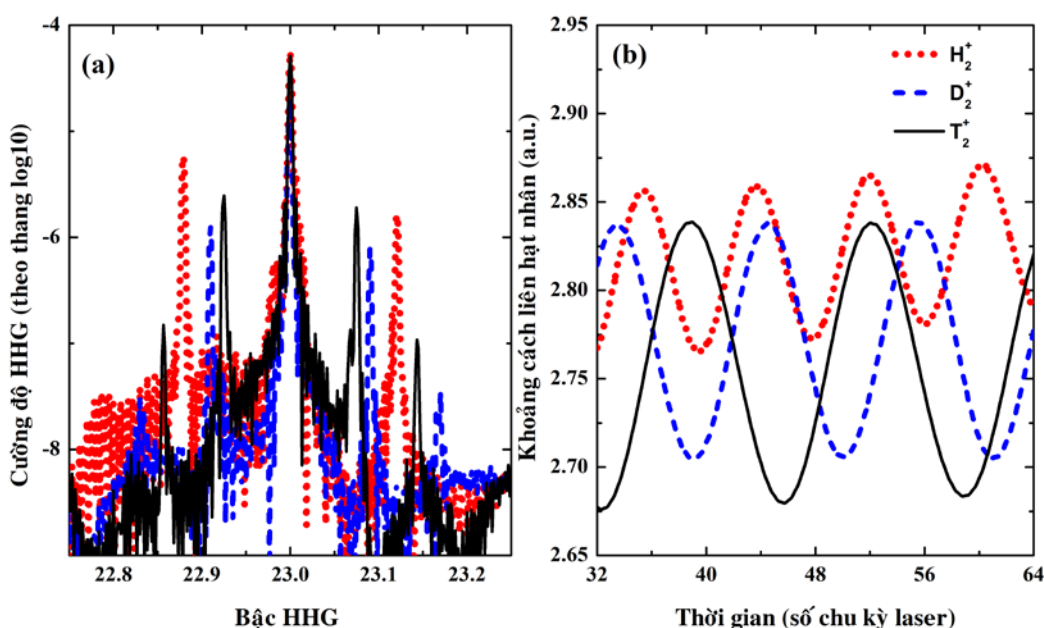
nhân giảm tương ứng là  $8,4T$ ,  $8T$ ,  $7,5T$ ,  $7T$  (Hình 2b). Cường độ laser tương tác càng nhỏ, khoảng cách liên hạt nhân dịch chuyển khỏi vị trí cân bằng càng ít, do đó dạng thế năng điện tử càng giống dạng hố thế điều hòa. Tuy nhiên, nếu tiếp tục giảm cường độ laser tương tác thì hiệu suất phát xạ HHG thấp, và miền phẳng của phổ HHG càng hẹp gây khó khăn trong việc quan sát cấu trúc tinh tế. Mặt khác, nếu laser quá mạnh ( $>1.5 \times 10^{14} \text{ W.cm}^2$ ), sự phân li giữa hai hạt nhân chiếm ưu thế, do đó, trong phổ HHG không còn xuất hiện các đỉnh phụ tương ứng với dao động hạt nhân. Như vậy, chúng tôi kết luận rằng, chỉ có một vùng cường độ laser thích hợp cho phép quan sát cấu trúc tế trong phổ HHG.



**Hình 4.** Cấu trúc tinh tế trong phổ HHG khi phân tử  $\text{H}_2^+$  dao động với chồng chập các trạng thái  $n=0$  và  $n=1$  với xác suất lần lượt là 10% và 90% (đường đậm màu đen); 50% và 50% (đường màu xanh); 64% và 36% (đường mảnh màu đỏ).

Ở trên, chúng tôi đã thảo luận cấu trúc tinh tế của phổ HHG khi hạt nhân phân tử  $\text{H}_2^+$  dao động ở mức cơ bản  $n=0$ . Tiếp theo, chúng tôi mở rộng khảo sát xem cấu trúc này có xuất hiện cho trường hợp hạt nhân dao động với mức cao hơn không. Hình 3a và 3c lần lượt thể hiện cấu trúc trong phổ HHG tại bậc HHG cụ thể cho trạng thái dao động  $n=1$  và  $n=2$ . Ngoài các đỉnh chính tại các bậc lẻ, trong phổ vẫn có những đỉnh phụ cách đỉnh chính lần lượt là  $0,132\omega_0$  và  $0,138\omega_0$  (tương ứng chu kỳ dao động  $7,5T$  và  $7,2T$  (Hình 3b,3d)) cho trạng thái  $n=1$  và  $n=2$ . Có thể thấy rằng, trạng thái dao động ban đầu của hạt nhân không ảnh hưởng nhiều đến chu kỳ dao động của hạt nhân. Điều này dễ hiểu vì năng lượng ban đầu chỉ làm thay đổi biên độ dao động (tức khoảng cách liên hạt nhân), mà không ảnh hưởng tới tần số dao động của hệ. Lưu ý rằng cường độ laser được chọn sao cho độ dịch

chuyển của khoảng cách liên hạt nhân khi vị trí cân bằng đủ nhỏ và hạt nhân còn dao động. Bậc dao động càng cao, thế ion hóa của phân tử càng giảm, dẫn đến xác suất ion hóa càng tăng, hiện tượng phân li càng dễ dàng xảy ra. Mặt khác, bậc dao động càng tăng, miền phẳng của phổ HHG càng bị thu hẹp lại. Do đó, bậc dao động tăng, miền cường độ laser cho phép quan sát cấu trúc tinh tế càng giảm. Trong trường hợp ban đầu, hạt nhân dao động với chông chập của hai trạng thái  $n=0$  và  $n=1$ , chúng tôi thu được kết quả tương tự (Hình 4). Khoảng cách giữa các đỉnh phụ và đỉnh chính (tại bậc lẻ) trong phổ HHG không phụ thuộc vào hệ số đóng góp của các trạng thái.



**Hình 5.** Cấu trúc tinh tế trong phổ HHG (a) và khoảng cách liên hạt nhân (b) của các đồng vị  $H_2^+$ ,  $D_2^+$ ,  $T_2^+$  trong trường laser. Laser có cường độ  $1 \times 10^{14} \text{ W.cm}^{-2}$ , bước sóng 800 nm, độ dài xung 256 chu kỳ.

Cuối cùng, chúng tôi khảo sát phổ HHG cho các đồng vị  $H_2^+$ ,  $D_2^+$ ,  $T_2^+$  tính đến dao động hạt nhân (Hình 5). Phổ HHG được tính bằng phương pháp phi Born-Oppenheimer. Khoảng cách giữa các đỉnh trong cấu trúc tinh tế (Hình 5a) cách nhau lần lượt là  $0,12\omega_0$ ,  $0,09\omega_0$ ,  $0,075\omega_0$ , tương ứng với chu kỳ dao động (Hình 5b) là  $8,4T$ ,  $10,9T$ ,  $13,3T$  cho  $H_2^+$ ,  $D_2^+$  và  $T_2^+$ . Hạt nhân càng nặng thì chu kỳ dao động càng tăng, hạt nhân dao động càng chậm. Theo lý thuyết cổ điển, tần số dao động tỉ lệ nghịch với  $\sqrt{\mu}$  [16,17], phù hợp với tần số dao động trích xuất trực tiếp được từ phổ HHG.



#### 4. Kết luận

Như vậy, trong bài báo này, chúng tôi đã chỉ ra khả năng trích xuất tần số dao động hạt nhân từ phổ HHG không chỉ cho trường hợp hạt nhân dao động ở trạng thái cơ bản, mà cả cho trường hợp hạt nhân ở trạng thái kích thích, và chồng chập các trạng thái với hệ số đóng góp khác nhau. Trong phổ HHG xuất hiện những đỉnh phụ, cách đỉnh chính tại bậc lẻ bằng tần số dao động của hạt nhân. Cấu trúc tinh tế chỉ quan sát được khi laser tương tác có cường độ thích hợp. Trạng thái dao động ban đầu của hạt nhân càng cao, vùng cường độ laser cho phép quan sát cấu trúc tinh tế càng hẹp. Từ những kết luận này, chúng tôi đặt ra hướng phát triển tiếp theo của chúng tôi là khảo sát cấu trúc tinh tế trong phổ HHG cho những phân tử phức tạp hơn như  $\text{HD}^+$ ,  $\text{HT}^+$ ,  $\text{HeH}^{2+}$  ...

❖ **Tuyên bố về quyền lợi:** Tác giả xác nhận hoàn toàn không có xung đột về quyền lợi.

❖ **Lời cảm ơn:**

Nghiên cứu này được tài trợ bởi Trường Đại học Sư phạm TP Hồ Chí Minh qua đề tài cấp Trường, mã số CS2016.19.09.

#### TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Corkum P. B., "Plasma perspective on strong field multiphoton ionization," *Phys. Rev. Lett.* **71**(13), pp. 1994, 1993.
- [2] Lewenstein M., Balcou P., Ivanov M. Y., L'huillier A. and Corkum, P. B., "Theory of high-harmonic generation by low-frequency laser fields," *Phys. Rev. A* **49**(3), pp. 2117, 1994.
- [3] Hu S. X. and Collins L. A., "Attosecond pump probe: exploring ultrafast electron motion inside an atom," *Phys. Rev. Lett.* **96**(7), pp. 073004, 2006.
- [4] Calegari F., Ayuso D., Trabattoni A. et al., "Ultrafast electron dynamics in phenylalanine initiated by attosecond pulses," *Science* **346**(6207), pp. 336-339, 2014.
- [5] Lein M., Hay N., Velotta R., Marangos J. P. and Knight P. L., "Role of the intramolecular phase in high-harmonic generation," *Phys. Rev. Lett.* **88**(18), 183903, 2002.
- [6] Itatani J., Levesque J., Zeidler D., Niikura H., "Tomographic imaging of molecular orbitals," *Nature* **432**(7019), 867, 2004
- [7] Nguyen N. T., Hoang V. H., Le V. H., "Probing nuclear vibration using high-order harmonic generation," *Phys. Rev. A* **88**(2), 023824, 2013.
- [8] Lein M., "Attosecond probing of vibrational dynamics with high-harmonic generation," *Phys. Rev. Lett.* **94**(5), pp. 053004, 2005.
- [9] Nguyen N. T., Le T. T. and Phan N. L., "Probing nuclear vibration using high-order harmonic generation beyond two-level model," *Comput. Theor. Chem.* **1094**, pp.8-12., 2016.
- [10] Bian X. B. and Bandrauk A. D., "Probing nuclear motion by frequency modulation of molecular high-order harmonic generation," *Phys. Rev. Lett.* **113**(19), 193901, 2014.

- [11] Baker S., Robinson J. S., Lein M., et al., “Dynamic two-center interference in high-order harmonic generation from molecules with attosecond nuclear motion,” *Phys. Rev. Lett.* **101**(5), pp. 053901, 2008.
- [12] Kanai T., Takahashi E. J., Nabekawa Y. and Midorikawa K., “Observing the attosecond dynamics of nuclear wavepackets in molecules by using high harmonic generation in mixed gases,” *New J. Phys.* **10** (2), pp. 025036, 2008.
- [13] Guo Y. H., He H. X., Liu J. Y. and He G. Z., “Sensitivity of high-order harmonic generation to nuclear motion,” *J. Mol. Struct. THEOCHEM*, **947**(1), pp.119-122, 2010.
- [14] Phan N. L., Truong T. C. and Nguyen N. T., “Ionization and high-order harmonic generation from highly vibrational,” *Comput. Theor. Chem.* **1057**, pp. 39-42, 2015.
- [15] Zhao J., and Zhao Z., “Probing H<sub>2</sub><sup>+</sup> vibrational motions with high-order harmonic generation,” *Phys. Rev. A* **78**(5), pp.053414, 2008.
- [16] Corso P. P., Fiordilino E., and Persico F., “Direct theoretical evidence of nuclear motion in H<sub>2</sub><sup>+</sup> by means of high harmonic generation,” *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **40**(7), pp. 1383, 2007.
- [17] Daniele R., Castiglia G., Corso P. P., Fiordilino E., Morales F., and Orlando G., “Nuclear molecular dynamics investigated by using high-order harmonic generation spectra,” *J. Mod. Opt.* **56**(6), pp.751-757, 2009.
- [18] Feit M.D., Fleck J.A., Steiger A., “Solution of the Schrödinger equation by a spectral method,” *J. Comput. Phys.* **47**, pp. 412-433, 1982.
- [19] Kosloff R., Tal-Ezer H., “A direct relaxation method for calculating eigenfunctions and eigenvalues of the Schrödinger equation on a grid,” *Chem. Phys. Lett.* **127**, pp. 223-230, 1986.