



ISSN: 1859-3100

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

KHOA HỌC TỰ NHIÊN VÀ CÔNG NGHỆ  
Tập 15, Số 6 (2018): 37-46

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

NATURAL SCIENCES AND TECHNOLOGY  
Vol. 15, No. 6 (2018): 37-46

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

## TRẠNG THÁI CƠ BẢN CỦA ION PHÂN TỬ HYDRO TRONG ĐIỆN TRƯỜNG TĨNH

Phạm Nguyễn Thành Vinh\*

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

Ngày nhận bài: 02-01-2018; ngày nhận bài sửa: 07-02-2018; ngày duyệt đăng: 19-6-2018

### TÓM TẮT

Chúng tôi khảo sát một cách hệ thống sự dịch chuyển mức năng lượng và tốc độ ion hóa của ion phân tử hydro ở trạng thái  $1\sigma_g$  dưới tác động của điện trường tĩnh không đổi. Sự phụ thuộc của những đại lượng quan sát được nêu trên vào khoảng cách liên hạt nhân, cường độ điện trường, và góc định phương phân tử được nghiên cứu và thảo luận. Việc so sánh các kết quả giải số với dự đoán của lí thuyết nhiễu loạn bậc hai và lí thuyết gần đúng tiệm cận trường yếu tương ứng cho năng lượng và tốc độ ion hóa cũng được thảo luận nhằm xác nhận sự chính xác của các tính toán của chúng tôi.

**Từ khóa:** điện trường tĩnh, trạng thái  $1\sigma_g$ , ion phân tử hydro.

### ABSTRACT

#### *The ground state of hydrogen molecular ion in a static field*

We comprehensively investigate the shift of energy and the ionization rate of hydrogen molecular ion in  $1\sigma_g$  state induced by a uniform static field. The dependences of these observables on internuclear distance, strength of electric field, and molecular orientation angle are thoroughly studied and discussed. The comparisons of the numerical results with the prediction of second-order perturbation theory and weak-field asymptotic theory for the energy and ionization rate, respectively, are also discussed for validating our calculations.

**Keywords:** static electric field,  $1\sigma_g$  state, hydrogen molecular ion.

### 1. Mở đầu

Trong những năm gần đây, sự phát triển của công nghệ chế tạo laser đã thúc đẩy việc tạo ra những xung laser có bước sóng rất dài nằm giữa vùng hồng ngoại với cường độ cao [1]. Các xung laser có bước sóng dài như vậy được cho rằng tạo ra vùng đoạn thời gian (biến thiên rất chậm so với thời gian), trong đó quá trình ion hóa dưới tác dụng của xung laser hoàn toàn tương đương với hiện tượng xảy ra khi sử dụng điện trường tĩnh có cường độ  $F$  bằng giá trị tức thời của  $F(t)$  của trường laser. Ngoài ra, việc mô tả chính xác quá trình ion hóa là cần thiết cho việc tìm hiểu các hiện tượng phi tuyến trường mạnh như sự phát xạ sóng điều hòa bậc cao [2], quá trình ion hóa kép không liên tiếp [3], cũng như phân bố động lượng của quang electron [4]. Do đó, việc nghiên cứu quá trình ion hóa của

\* Email: vinhpham@hcmup.edu.vn

nguyên tử, phân tử dưới tác dụng của điện trường tĩnh đã thu hút được sự quan tâm trong nhiều thập kỉ qua [5-11]. Về mặt lí thuyết, có một số phương pháp tiếp cận cho vấn đề này như các phương pháp giải số liên quan đến kĩ thuật chuyển đổi tọa độ hoặc sử dụng hàm cơ sở phức [5, 12], các kĩ thuật giải tích [13, 14], và các phương pháp bán thực nghiệm [15]. Gần đây, một kĩ thuật giải số dựa trên phương pháp trạng thái Siegert đã ra đời nhằm giải quyết bài toán này [8]. Phương pháp này lấy ý tưởng từ bài toán tính toán công thức phân tán hạt nhân trong hiện tượng phân rã phóng xạ được đề xuất bởi Siegert vào năm 1939 [16], trong đó hàm sóng chỉ tồn tại hàm ngoại tuyến mà không có hàm sóng tới. Dựa vào kĩ thuật tính số này, tất cả các đại lượng quan sát được của quá trình ion hóa như sự dịch chuyển của mức năng lượng, tốc độ ion hóa, phân bố động lượng ngang của electron ion hóa đều có thể được tính toán [8, 10, 11] cho điện trường có cường độ lớn bất kì.

Trong vật lí lượng tử, ion phân tử hydro ( $H_2^+$ ) là một trong những hệ phân tử đơn giản nhất và được xem như một nguyên mẫu hoàn hảo của mô hình động lực học lượng tử một electron hoạt động [5-7, 10]. Tương tác của hệ phân tử này với điện trường tĩnh thu hút sự quan tâm và nghiên cứu ở lĩnh vực trường mạnh trong những năm gần đây. Việc khảo sát sự phụ thuộc vào khoảng cách liên hạt nhân và cường độ điện trường của các mức năng lượng và tốc độ ion hóa đã được thực hiện vào năm 1996 [5]. Một nghiên cứu sâu hơn về sự phụ thuộc của tốc độ ion hóa vào khoảng cách liên hạt nhân cho hai trạng thái thấp nhất của ion phân tử hydro khi điện trường có một số cường độ xác định [6] đã được công bố trong cùng năm 1996. Một số tính toán khác cho trường hợp thay đổi góc định phương phân tử cũng đã được thực hiện [7, 17]. Tuy nhiên, những công trình nêu trên chỉ xem xét quá trình ion hóa tương ứng với điện trường có cường độ rất yếu sâu trong vùng ion hóa xuyên ngầm. Vào năm 2012, bài toán ion phân tử hydro trong điện trường tĩnh đã được xem xét lại với ba trạng thái khác nhau cho điện trường có cường độ mạnh cũng như xét cho góc định phương bất kì [10]. Từ đó cho thấy, một nghiên cứu mang tính chất hệ thống và toàn diện của mức năng lượng và tốc độ ion hóa vào các yếu tố: Khoảng cách liên hạt nhân, góc định phương, cường độ điện trường là cần thiết. Trong bài báo này, chúng tôi khảo sát quá trình ion hóa của ion phân tử hydro dưới tác dụng của điện trường tĩnh với một yếu tố nêu trên được thay đổi và hai yếu tố còn lại được xem là tham số không đổi. Do việc tính toán cần rất nhiều thời gian nên chúng tôi chỉ tập trung thảo luận cho trạng thái cơ bản ( $1\sigma_g$ ), trạng thái kích thích thứ nhất sẽ được giới thiệu trong nghiên cứu tiếp theo của chúng tôi. Để đánh giá mức độ tin cậy của chương trình tính toán, chúng tôi so sánh kết quả giải số với lí thuyết nhiễu loạn bậc hai (NLB2) và lí thuyết tiệm cận trường yếu (TCTY) mà các thông số liên quan đã có sẵn trong [10] cho một số trường hợp cụ thể. Chúng tôi lưu ý hệ đơn vị nguyên tử được sử dụng trong toàn bộ bài báo này.

## 2. Cơ sở lý thuyết

Đối với một electron tương tác với thế hạt nhân  $V(\mathbf{r})$  kết hợp với thế năng tương tác với điện trường tĩnh không đổi  $\mathbf{F} = F\mathbf{e}_z$  ( $F \geq 0$ ), phương trình Schrödinger dừng có dạng

$$\left[ -\frac{1}{2}\Delta + V(\mathbf{r}) + Fz - E \right] \psi(\mathbf{r}) = 0. \quad (1)$$

Trong bài toán này, chúng tôi quan tâm đến ion phân tử hydro chỉ có duy nhất một electron, do đó thế đơn electron  $V(\mathbf{r})$  được mô tả theo công thức sau

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{Z}{r}, \quad (2)$$

trong đó,  $Z = 2$  là điện tích tổng của ion mẹ. Chúng tôi giải phương trình (1) trong hệ tọa độ parabolic được định nghĩa như sau [19]

$$\begin{aligned} \xi &= r + z \quad (0 \leq \xi < \infty), \\ \eta &= r - z \quad (0 \leq \eta < \infty), \\ \varphi &= \arctan \frac{y}{x} \quad (0 \leq \varphi < 2\pi). \end{aligned} \quad (3)$$

Trong hệ tọa độ này, phương trình (1) được viết lại dưới dạng

$$\left[ \frac{\partial}{\partial \eta} \eta \frac{\partial}{\partial \eta} + B(\eta) + \frac{E\eta}{2} + \frac{F\eta^2}{4} \right] \psi(\mathbf{r}) = 0, \quad (4)$$

trong đó, chúng tôi đưa ra khái niệm về Hamilton thành phần

$$B(\eta) = \frac{\partial}{\partial \xi} \xi \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\xi + \eta}{4\xi\eta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - rV(\mathbf{r}) + \frac{E\xi}{2} - \frac{F\xi^2}{4} \quad (5)$$

là một toán tử chỉ tác động vào hàm của  $\xi$ ,  $\varphi$  phụ thuộc vào  $\eta$  như một tham số. Nghiệm của phương trình (4) được phân tích dưới dạng,

$$\psi(\mathbf{r}) = \eta^{-1/2} \sum_{\nu} f_{\nu}(\eta) \Phi_{\nu}(\xi, \varphi; \eta). \quad (6)$$

Đối với  $F > 0$  và trong vùng tiệm cận rất xa ion mẹ [8, 10, 11]

$$f_{\nu}(\eta) \Big|_{\eta \rightarrow \infty} = \frac{2^{1/2} f_{\nu}}{(F\eta)^{1/4}} \exp \left[ \frac{iF^{1/2} \eta^{3/2}}{3} + \frac{iE\eta^{1/2}}{F^{1/2}} \right]. \quad (7)$$

Trong đó  $f_{\nu}$  là những hệ số tiệm cận. Trạng thái Siegert chỉ tồn tại cho các giá trị phức rời rạc của  $E$  mà phần thực và phần ảo của nó tương ứng chính là năng lượng  $\varepsilon$  và tốc độ ion hóa  $\Gamma$

$$E = \varepsilon - \frac{i}{2}\Gamma. \quad (8)$$

### 3. Kết quả và thảo luận

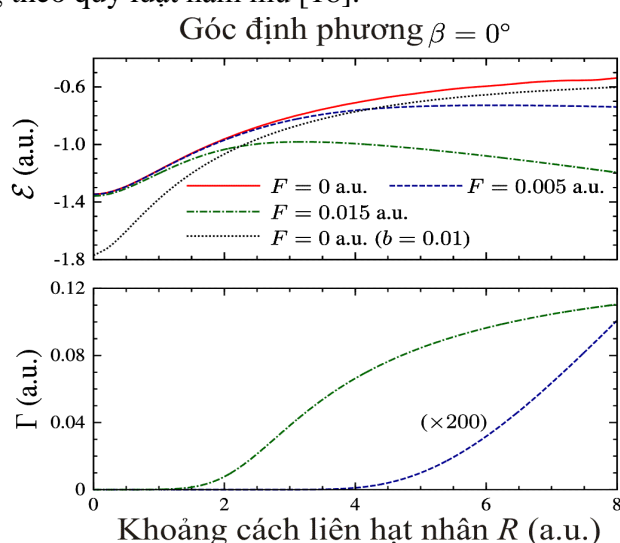
Chúng tôi tiến hành những tính toán cho ion phân tử hydro với hàm thế năng tương tác hạt nhân – electron có dạng

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\sqrt{\left|\mathbf{r}-\frac{\mathbf{R}}{2}\right|^2+b}} - \frac{1}{\sqrt{\left|\mathbf{r}+\frac{\mathbf{R}}{2}\right|^2+b}}, \quad (9)$$

trong đó,  $\mathbf{R} = (R \sin \beta, 0, R \cos \beta)$  và  $R$  là khoảng cách liên hạt nhân. Chúng tôi lưu ý rằng do giới hạn của kỹ thuật tính toán, chương trình của chúng tôi chỉ xử lý được trường hợp thế Coulomb có một vị trí bất định tương ứng với các trường hợp của nguyên tử. Vì vậy, thế Coulomb trong bài báo này được làm mềm để giải quyết sự bất định tại hai vị trí của hạt nhân, điều này không làm thay đổi tính tổng quát cũng như các tính chất vật lý của bài toán. Trong phần lớn các tính toán của chúng tôi, tham số làm mềm  $b = 0.09$  được sử dụng.

Chúng tôi bắt đầu thảo luận sự phụ thuộc vào khoảng cách liên hạt nhân của năng lượng  $\varepsilon$  và tốc độ ion hóa  $\Gamma$  trong trường hợp không có điện trường và cho hai giá trị điện trường khác nhau như Hình 3.1. Góc định phương trong trường hợp này được cố định là  $\beta = 0$  (vector điện trường song song với trục phân tử), khoảng cách liên hạt nhân được thay đổi từ 0 a.u. đến 8 a.u. Hai trường hợp tiệm cận được xem xét để thấy được tính hợp lý của tính toán. Trường hợp đầu tiên ứng với  $R = 0$ , nghĩa là hai proton cùng nằm tại một vị trí tương ứng với ion  $\text{He}^+$ . Do đó, năng lượng khi chưa đưa điện trường vào phải bằng  $-Z^2 \times 0.5 = -2$  a.u. (ở đây  $Z = 2$  là điện tích tổng của hạt nhân He) là giá trị năng lượng ở trạng thái cơ bản của ion  $\text{He}^+$ . Tuy nhiên, giá trị tính toán cho thế Coulomb mềm với  $b = 0.09$  là  $-1.35$  a.u., cao hơn rất nhiều so với dự kiến. Nguyên nhân của sự chênh lệch chỉ là do tham số làm mềm được chọn có giá trị tương đối lớn. Để rõ hơn, chúng tôi thể hiện trên Hình 1 kết quả cho  $b = 0.01$ , khi này giá trị của  $\varepsilon$  tại  $R = 0$  là  $-1.78$  a.u., gần hơn với giá trị lý thuyết. Chúng tôi cũng tiến hành tính toán cho trường hợp thế Coulomb thật sự với  $b = 0$  tại  $R = 0$  bởi chương trình tính toán của chúng tôi hoàn toàn có thể áp dụng cho trường hợp chỉ có một điểm bất định trong thế Coulomb hạt nhân. Kết quả nhận được chính xác bằng  $-2$  a.u. với độ hội tụ là 10 chữ số thập phân. Ngoài ra, dạng đồ thị mô tả sự phụ thuộc vào khoảng cách liên hạt nhân của  $\varepsilon$  khi chưa có điện trường với  $b = 0.09$  (đường liền nét màu đỏ) và  $b = 0.01$  (đường chấm màu đen) là tương tự nhau. Do đó, trong tất cả các tính toán tiếp theo chúng tôi sử dụng  $b = 0.09$  để tiết kiệm thời gian và tài nguyên tính toán. Trong giới hạn  $R \rightarrow \infty$ , ion phân tử hydro bị phân tách thành một proton và một nguyên tử hydro, vì vậy năng lượng của hệ khi không có điện trường phải tiến về giá trị năng lượng ở trạng thái cơ bản của nguyên tử hydro là  $-0.5$  a.u. cho thế Coulomb thật và  $-0.4$  a.u. cho thế Coulomb mềm với  $b = 0.09$  như quan sát được trong phần trên của Hình 3.1. Khi đặt điện trường vào, năng lượng của hệ  $\varepsilon$  tăng đến cực đại tại một vị trí trung gian  $R_c$  và sau đó giảm dần, ở đây  $R_c = 4$  a.u. và 2 a.u. lần lượt cho

$F = 0.005$  a.u. và  $F = 0.015$  a.u.. Kết quả tính toán này hoàn toàn phù hợp với những công trình trước đây [5, 6]. Trong phần dưới của Hình 3.1, chúng ta có thể quan sát được rằng tốc độ ion hóa  $\Gamma$  tăng dần khi khoảng cách liên hạt nhân tăng cho cả hai trường hợp cường độ điện trường đang xét. Khi tăng khoảng cách liên hạt nhân thì bề dày thành thế năng nhốt electron liên kết trở nên hẹp lại, từ đó làm cho xác suất ion hóa xuyên ngầm tăng lên. Tốc độ ion hóa trong trường hợp  $F = 0.015$  luôn luôn lớn hơn trường hợp  $F = 0.005$  khoảng vài trăm lần do trong vùng ion hóa xuyên ngầm, tốc độ ion hóa phụ thuộc vào cường độ điện trường theo quy luật hàm mũ [18].

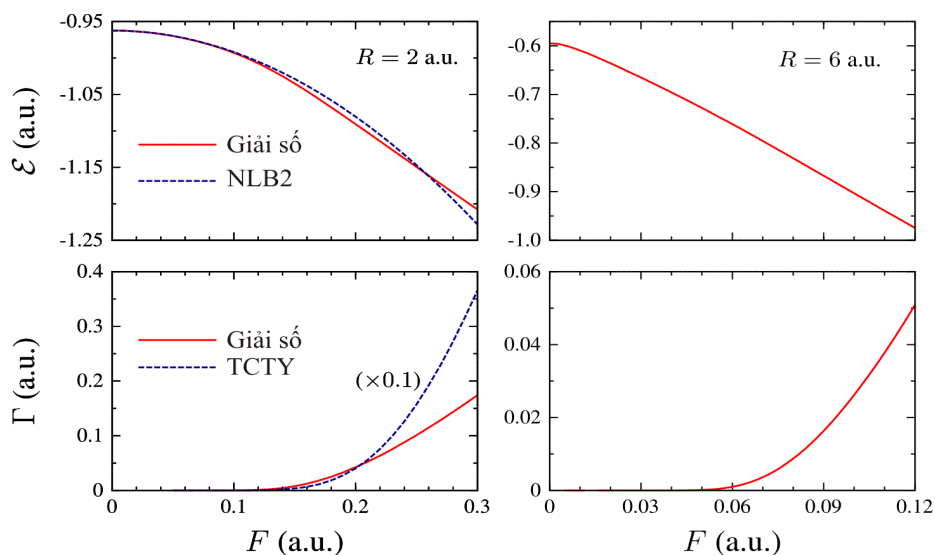


**Hình 3.1.** Sự phụ thuộc của năng lượng  $\varepsilon$  và tốc độ ion hóa  $\Gamma$  vào khoảng cách liên hạt nhân  $R$  với  $b = 0.09$  cho ba giá trị đại diện của cường độ điện trường  $F$  khi góc định phương là  $\beta = 0^\circ$ . Đường liền nét màu đỏ:  $F = 0$ , đường gạch đứt màu xanh dương:  $F = 0.005$  a.u., và đường chấm gạch màu xanh lá cây đậm:  $F = 0.015$  a.u.. Tốc độ ion hóa trong trường hợp  $F = 0.005$  a.u. được nhân cho 200 để biểu diễn trong cùng thang đo. Kết quả cho thế năng Coulomb mềm  $b = 0.01$  cũng được biểu diễn trên đường chấm màu đen cho  $F = 0$ .

Hình 3.2 mô tả sự phụ thuộc của năng lượng và tốc độ ion hóa vào cường độ điện trường khi cố định góc định phương  $\beta = 0^\circ$  tại hai khoảng cách liên hạt nhân tương ứng với khoảng cách cân bằng  $R = 2$  a.u. và  $R = 6$  a.u. rất thường được sử dụng trong thực nghiệm [4]. Kết quả dự đoán từ những lí thuyết gần đúng như lí thuyết NLB2 và lí thuyết TCTY cho năng lượng và tốc độ ion hóa cũng được đưa ra cho trường hợp  $R = 2$  a.u. Giá trị ngưỡng trên của cường độ điện trường được chọn sao cho nằm trong vùng ion hóa vượt rào, lần lượt là 0.3 a.u. và 0.12 a.u. cho  $R = 2$  a.u. và  $R = 6$  a.u.. Hình 3.2 cho thấy trong cả hai trường hợp khoảng cách liên hạt nhân đang xét thì năng lượng  $\varepsilon$  tăng dần khi cường độ điện trường tăng lên. Trong vùng ion hóa xuyên ngầm,  $F \leq 0.15$  a.u. cho  $R = 2$  a.u., năng lượng tăng bậc hai theo  $F$  và tuân theo sự dự đoán của lí thuyết NLB2. Trong khi đó đối với điện trường mạnh trong vùng ion hóa vượt rào,  $F > 0.15$  a.u., năng lượng chỉ tăng theo hàm bậc nhất. Điều tương tự cho năng lượng cũng được quan sát cho trường hợp

$R = 6$  a.u. Phần dưới của Hình 3.2 biểu diễn sự phụ thuộc của tốc độ ion hóa vào cường độ điện trường. Trong cả hai trường hợp, tốc độ ion hóa tăng theo hàm mũ trong vùng ion hóa xuyên ngầm, sau đó vẫn tiếp tục tăng nhưng chỉ theo hàm bậc nhất của  $F$  trong vùng ion hóa vượt rào. Chúng ta có thể nhận thấy những lí thuyết giải tích gần đúng mặc dù có thể giúp xác nhận độ tin cậy của tính toán nhưng chỉ có thể áp dụng cho điện trường yếu trong vùng ion hóa xuyên ngầm. Do đó, những tính toán số như của chúng tôi là vô cùng cần thiết để giải thích một cách chính xác quá trình ion hóa trong trường hợp điện trường có độ mạnh bất kì. Một điều thú vị cũng có thể được rút ra từ Hình 3.2 là sự khác biệt giữa quan niệm cổ điển và tính toán thực tế quá trình ion hóa. Như phần trên của Hình 3.2, khi cường độ điện trường tăng lên thì năng lượng bị dịch chuyển xuống thấp hơn, nghĩa là thế ion hóa (năng lượng cần thiết để ion hóa) tăng lên và sự ion hóa sẽ trở nên khó hơn theo quan niệm cổ điển. Tuy nhiên, dưới sự tác động của trường tĩnh điện, thế hạt nhân hiệu dụng bị nhiễu loạn và bề rộng của rào thế trở nên mỏng hơn, từ đó làm cho xác suất ion hóa xuyên ngầm của electron tăng lên rất đáng kể. Khi cường độ điện trường tiếp tục tăng đến giá trị đủ lớn, đỉnh của rào thế thậm chí thấp hơn cả mức năng lượng liên kết và electron có thể tự do thoát ra khỏi trạng thái liên kết với hạt nhân, đó chính là cơ chế ion hóa vượt rào. Do đó, quá trình ion hóa của nguyên tử, phân tử khi thay đổi cường độ điện trường là một hiện tượng hoàn toàn lượng tử và không thể sử dụng những lí thuyết cổ điển để xem xét.

Góc định phương  $\beta = 0^\circ$

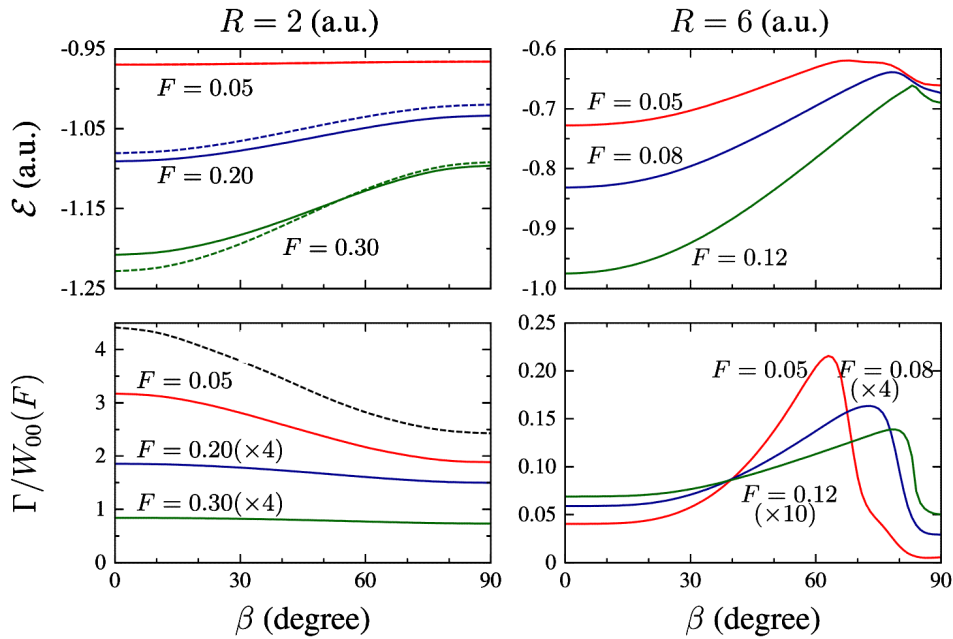


**Hình 3.2.** Sự phụ thuộc vào cường độ điện trường của năng lượng  $\mathcal{E}$  và tốc độ ion hóa  $\Gamma$  với  $b = 0.09$  cho hai giá trị của khoảng cách liên hạt nhân:  $R = 2$  a.u. (hình bên trái) và  $R = 6$  a.u. (hình bên phải) khi góc định phương  $\beta = 0^\circ$ . Đường liền nét màu đỏ và đường gạch màu xanh dương lần lượt biểu diễn kết quả từ giải số và các phương pháp gần đúng. Kết quả của lí thuyết gần đúng tiệm cận trường yếu được nhân cho 0.1 để phù hợp với tỷ lệ tọa độ hình vẽ.

Chúng tôi xem xét đến sự phụ thuộc vào góc định phương  $\beta$  của năng lượng và tốc độ ion hóa cho hai giá trị khoảng cách liên hạt nhân  $R$  như đã xét trong Hình 2 cho ba giá trị đại diện của cường độ điện trường  $F$  thay đổi từ vùng ion hóa xuyên ngầm đến vượt rào. Do sự đối xứng của vân đạo phân tử đối với phương của vector điện trường, chúng tôi chỉ khảo sát cho góc định phương từ  $0^0$  đến  $90^0$ . Chúng tôi cũng biểu diễn dự đoán của lí thuyết NLB2 và TCTY lần lượt cho năng lượng và tốc độ ion hóa cho trường hợp  $R = 2$  a.u.. Chúng tôi cũng lưu ý rằng do tốc độ ion hóa thay đổi rất nhanh theo quy luật hàm mũ của cường độ điện trường nên chúng tôi chia tốc độ ion hóa cho hệ số điện trường [18]

$$W_{00} = \frac{\kappa}{2} \left( \frac{4\kappa^2}{F} \right)^{2Z/\kappa-1} \exp\left(-\frac{2\kappa^3}{3F}\right), \quad (10)$$

để biểu diễn trong cùng thang đo như phần dưới của Hình 3.3. Tại khoảng cách cân bằng  $R = 2$  a.u., năng lượng tăng dần trong khi tốc độ ion hóa giảm dần khi tăng góc định phương  $\beta$ . Điều này cho thấy dưới điều kiện đang xét, phân tử dễ được ion hóa khi trục của nó song song với vector cường độ điện trường. Trong trường hợp điện trường mạnh tương ứng với cơ chế ion hóa vượt rào, cả lí thuyết NLB2 và TCTY đều không thể mô tả được năng lượng và tốc độ ion hóa. Với  $R = 6$  a.u., xem xét một cách tổng quát thì năng lượng  $\varepsilon$  tại  $\beta = 90^0$  vẫn lớn hơn tại  $\beta = 0^0$  và tốc độ ion hóa  $\Gamma$  tại  $\beta = 90^0$  nhỏ hơn so với  $\beta = 0^0$ . Tuy nhiên, một điều thú vị có thể nhận thấy rằng cả năng lượng và tốc độ ion hóa trong trường hợp này đều đạt cực đại tại cùng một giá trị trung gian của góc định phương  $\beta$ . Vị trí cực đại này dịch chuyển về phía góc định phương lớn hơn khi cường độ điện trường tăng lên (tại  $\beta = 65^0$  cho  $F = 0.05$  a.u. và  $\beta = 82^0$  cho  $F = 0.12$  a.u.). Đáng tiếc dữ liệu dự đoán từ lí thuyết NLB2 và TCTY không sẵn có cho trường hợp này. Một điều cần lưu ý là đối với trường hợp  $R = 6$  a.u., khi đặt điện trường vào thì hai mức năng lượng của trạng thái cơ bản đang xét  $1s\sigma_g$  ( $m = 0$ ) và trạng thái kích thích thứ nhất  $1s\sigma_u$  ( $m = 1$ ) khá gần nhau, do đó việc chuyển trình tự động nhảy sang trạng thái khác so với trạng thái cần tính trong quá trình thay đổi góc định phương hoàn toàn có thể xảy ra. Vì vậy chúng tôi đã cẩn thận kiểm tra giá trị của số lượng tử từ  $m$  tương ứng với kênh chiếm ưu thế khi góc định phương được thay đổi. Kết quả cho thấy  $m = 0$  cho tất cả các góc định phương được xét, đây chính là bằng chứng khẳng định không có sự tự động chuyển trạng thái như đã đề cập. Biểu hiện sự phụ thuộc của năng lượng và tốc độ ion hóa vào góc định phương cho trường hợp  $R = 6$  a.u. là một kết quả hay và vẫn là một câu hỏi mở đối với chúng tôi. Việc giải thích toàn diện cơ chế vật lí đằng sau hiện tượng này sẽ được trình bày trong những nghiên cứu tiếp theo.



**Hình 3.3.** Sự phụ thuộc của năng lượng  $\varepsilon$  và tốc độ ion hóa  $\Gamma$  vào góc định phương  $\beta$  với  $b = 0.09$  cho hai giá trị của khoảng cách liên hạt nhân:  $R = 2$  a.u. (bên trái) và  $R = 6$  a.u. (bên phải) cho ba giá trị đại diện của cường độ điện trường  $F$ . Trong hai hình bên trái, đường liền nét và đứt nét lần lượt thể hiện kết quả từ giải số và các lý thuyết gần đúng bao gồm NLB2 và TCTY.

#### 4. Kết luận

Trong bài báo này, chúng tôi đã khảo sát một cách có hệ thống hai đại lượng quan sát được bao gồm năng lượng và tốc độ ion hóa đối với trạng thái cơ bản của ion phân tử hydro dưới tác dụng của điện trường. Sự phụ thuộc của hai đại lượng nêu trên vào một trong ba yếu tố bao gồm khoảng cách liên hạt nhân, cường độ điện trường và góc định phương được xem xét kỹ lưỡng. Kết quả của chúng tôi phù hợp tốt với những tính toán trước đây và cũng có thể được mô tả bằng lý thuyết gần đúng khi điện trường yếu cho một số trường hợp cụ thể, đây chính là sự xác nhận tính tin cậy của chương trình tính toán. Chúng tôi cũng quan sát được xu hướng lạ của hai đại lượng trên trong trường hợp  $R = 6$  a.u. khi thay đổi góc định phương. Điều này đã truyền cảm hứng cho chúng tôi tiếp tục những khảo sát sâu hơn để đưa ra lời giải thích tường minh. Chúng tôi lưu ý rằng trên quan điểm của những nhà thực nghiệm trong lĩnh vực này, sự phụ thuộc vào góc định phương có thể được trích xuất từ phổ động lượng của electron ion hóa. Do đó tính toán này có ý nghĩa thực tiễn cao trong lĩnh vực tương tác giữa laser và phân tử.



- ❖ **Tuyên bố về quyền lợi:** Tác giả xác nhận hoàn toàn không có xung đột về quyền lợi.
- ❖ **Lời cảm ơn:** Đề tài này được tài trợ kinh phí bởi Trường Đại học Sư phạm TP Hồ Chí Minh cho đề tài khoa học và công nghệ cấp Trường mã số CS.2016.19.14.

### TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] O. Chalus, P. K. Bates, M. Smolarski, and J. Biegert, “Mid-IR short-pulse OPCPA with micro-joule energy at 100KHz,” *Optics Express* **17**, , pp.3587–3594, 2009.
- [2] M. Ferray, A. L’Huillier, X. F. Li, L. A Lompre, G. Mainfray, and C. Manus, “Multiple-harmonic conversion of 1064 nm radiation in rare gases,” *Journal of Physics B* **21**, L32, 1988.
- [3] B. Walker, B. Sheehy, L. F. Dimauro, P. Agostini, K. J. Schafer, and K. C. Kulander, “Precision measurement of strong field double ionization of helium,” *Physics Review Letters* **73**, 1227, 1994.
- [4] M. Murakami, and Shih-I Chu, “Photoelectron momentum distributions of the hydrogen molecular ion driven by multicycle near-infrared laser pulses,” *Physics Review A* **94**, 043425, 2016.
- [5] Z. Mulyukov, M. Pont, and R. Shakeshaft, “Ionization, dissociation, and level shifts of  $H_2^+$  in a strong dc or low-frequency ac field,” *Physics Review A* **54**, 4299, 1996.
- [6] M. Plummer, and J. F. McCann, “Field-ionization rates of the hydrogen molecular ion,” *Journal of Physics B* **29**, 4625, 1996.
- [7] M. Plummer, and J. F. McCann, “Orientation dependence of field ionization of the hydrogen molecular ion,” *Journal of Physics B* **30**, L401, 1997.
- [8] P. A. Batishchev, O. I. Tolstikhin, and T. Morishita, “Atomic Siegert states in an electric field: Transverse momentum distribution of the ionized electrons,” *Physical Review A* **82**, 023416, 2010.
- [9] A. S. Stodona, A. Rouzee, F. Lepine, S. Cohen, F. Robicheaux, A. Gijsbertsen, J. H. Jungmann, C. Bordas, and M. J. J. Vrakking, “Hydrogen Atoms under Magnification: Direction Observation of the Nodal Structure of Stark States,” *Physical Review Letter* **110**, 213001, 2013.
- [10] L. Hamonou, T. Morishita, and O. I. Tolstikhin, “Molecular Siegert states in an electric field,” *Physical Review A* **86**, 013412, 2012.
- [11] V. N. T. Pham, O. I. Tostikhin, and T. Morishita, “Molecular Siegert states in an electric field. II. Transverse momentum distribution of the ionized electrons,” *Physical Review A* **89**, 033426, 2014.
- [12] A. Scrinzi, M. Geissler, and T. Brabec, “Ionization above the Coulomb barrier,” *Physical Review Letters* **83**, 706, 1999.
- [13] M. V. Ammosov, N. B. Delone, and V. P. Krainov, “Tunnel ionization of complex atoms and of atomic ions in an alternating electromagnetic field,” *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **91**, pp.2008-2013, 1986.

- [14] X. M. Tong, Z. X. Zhao, and C. D. Lin, "Theory of molecular tunneling ionization," *Physical Review A* **66**, 033402, 2002.
- [15] X. M. Tong, and C. D. Lin, "Empirical formula for static field ionization rates of atoms and molecules by lasers in the barrier-suppression regime," *Journal of Physics B* **38**, pp.2593-2600, 2005.
- [16] A. J. F. Siegert, "On the derivation of the Dispersion Formula for Nuclear Reactions," *Physical Review* **56**, 750, 1939.
- [17] T. Bartsch and T. Uzer, "Semiclassical ionization dynamics of the hydrogen molecular ion in an electric field of arbitrary orientation," *Journal of Physics B* **38**, S241-S260, 2005.
- [18] O. I. Tolstikhin, T. Morishita, and L. B. Madsen, "Theory of tunneling ionization of molecules: Weak-field asymptotics including dipole effects," *Physical Review A* **84**, 053423, 2011.
- [19] L. D. Landau and E. M. Lifshiz, "Quantum Mechanics (Non-relativistic Theory)," *Pergamon Press*, Oxford, 1977.