



Bài báo nghiên cứu

TRẠNG THÁI $2p\sigma$ CỦA ION PHÂN TỬ HYDRO TRONG ĐIỆN TRƯỜNG TĨNH

Trần Ngọc Liên Hương¹, Hoàng Tuấn Đức², Lê Bình Hiếu², Nguyễn Thúy Uyên²,
Nguyễn Ngọc Giàu², Bùi Ngọc Thao³, Phạm Nguyễn Thành Vinh^{2*}

¹Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, ĐHQG TP HCM, Việt Nam

²Trường Đại học Sư phạm Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam

³Trường THPT Nguyễn Hữu Thọ, Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam

*Tác giả liên hệ: Phạm Nguyễn Thành Vinh – Email: vinhpnt@hcmue.edu.vn

Ngày nhận bài: 07-4-2020; ngày nhận bài sửa: 04-9-2020, ngày chấp nhận đăng: 23-9-2020

TÓM TẮT

Trong bài báo này, các đại lượng vật lý quan trọng đặc trưng cho quá trình ion hóa như tốc độ ion hóa và phân bố động lượng ngang của electron cho trạng thái $2p\sigma$ của ion phân tử hydro được khảo sát chi tiết khi xoay phân tử quanh tâm của phân tử. Đồng thời, chúng tôi giữ nguyên chiều của vector cường độ điện trường từ đó thay đổi được góc định phương phân tử. Trong nghiên cứu này, chúng tôi sử dụng phương pháp trạng thái Siegert để tính số chính xác, sau đó so sánh với kết quả từ phương pháp gần đúng lý thuyết trường yếu để khẳng định tính đúng đắn của nghiên cứu. Kết quả cho thấy, tốc độ ion hóa đạt cực đại tại góc định phương $\beta = 0^\circ$, sau đó giảm dần và đạt cực tiểu khi $\beta = 90^\circ$. Bên cạnh đó, phân bố động lượng ngang của electron ion hóa phản ánh rõ cấu trúc và tính chất đối xứng của vân đạo phân tử $2p\sigma$ so với trục của vector điện trường. Sự kết hợp giữa các kênh ion hóa khác nhau cũng được quan sát thông qua biểu hiện của phân bố động lượng ngang.

Từ khóa: trạng thái Siegert; H_2^+ ; tốc độ ion hóa; phân bố động lượng ngang

1. Mở đầu

Trong vật lý trường mạnh, quá trình ion hóa của nguyên tử/phân tử dưới tác dụng của trường laser đóng vai trò quan trọng bởi đây là quá trình khởi nguồn cho tất cả mọi hiệu ứng phi tuyến thu hút sự quan tâm của nhiều nhà khoa học trong và ngoài nước (Itatani et al., 2004; Gontier et al., 1980; Bergues et al., 2012). Do đó, việc tính toán chính xác các đại lượng vật lý liên quan đến quá trình ion hóa như tốc độ ion hóa, sự thay đổi mức năng lượng của trạng thái xem xét là vô cùng cần thiết. Hiện nay, sự xuất hiện của những xung laser có bước sóng rất dài sâu trong vùng hồng ngoại (Tochitsky et al., 2019) đã giúp cho

Cite this article as: Tran Ngoc Lien Huong, Hoang Tuan Duc, Le Binh Hieu, Nguyen Thuy Uyen, Nguyen Ngoc Giau, Bui Ngoc Thao, & Pham Nguyen Thanh Vinh (2020). The $2p\sigma$ state of hydrogen molecular ion in a static field. *Ho Chi Minh City University of Education Journal of Science*, 17(9), 1664-1674.

quá trình ion hóa của nguyên tử/phân tử trong trường laser có tính chất tương đương với quá trình này trong điện trường tĩnh với cường độ điện trường tĩnh bằng đúng cường độ điện trường tức thời của xung laser. Do đó, trong những năm gần đây, bài toán ion hóa của nguyên tử/phân tử dưới tác dụng của điện trường tĩnh đã và đang nhận được sự quan tâm của giới khoa học vật lý trường mạnh.

Sau khi được ion hóa ra khỏi nguyên tử/phân tử, electron dưới tác động của điện trường tĩnh sẽ được gia tốc, do đó động lượng của electron theo phương của vector điện trường sẽ tăng bất định. Tuy nhiên, trong mặt phẳng vuông góc với vector điện trường ngoài, do không còn lực tác dụng nên động lượng của electron sẽ dần ổn định khi electron bay ra xa ion mẹ. Động lượng trên mặt phẳng này được gọi là phân bố động lượng ngang (Transverse Momentum Distribution – TMD). Các nghiên cứu trước đây cho thấy rằng, TMD mô tả rất tốt cấu trúc cũng như các tính chất đối xứng của vân đạo nguyên tử/phân tử mà tại đó electron bị ion hóa (Pham, 2015; Petersen et al., 2015).

Hiện nay, có ba phương pháp thông dụng để xem xét bài toán ion hóa của nguyên tử/phân tử dưới tác dụng của điện trường tĩnh. Phương pháp thứ nhất là phương pháp giải tích gần đúng có thể mô tả tốt tốc độ ion hóa và TMD cho điện trường có cường độ yếu (Ammosov et al., 1986; Pham, 2014; Tong et al., 2002) tương ứng với cơ chế ion hóa xuyên ngầm, và cường độ tương đối cao đến ngưỡng biên giữa cơ chế ion hóa xuyên ngầm và vượt rào. Phương pháp này cung cấp cho các nhà vật lý những công thức gần đúng có thể mô tả nhanh các kết quả thực nghiệm, tuy nhiên hoàn toàn không thể áp dụng cho điện trường có cường độ cao trong vùng ion hóa vượt rào. Phương pháp thứ hai là phương pháp giải số có thể cung cấp kết quả mô tả chính xác các đại lượng liên quan đến quá trình ion hóa cho điện trường có độ lớn bất kỳ (Pham, 2014; Pham, 2015; Plummer, & McCann, 1996). Phương pháp này lại có nhược điểm là đòi hỏi tài nguyên máy tính lớn, thời gian tính tương đối lâu. Phương pháp thứ ba là phương pháp bán thực nghiệm, chủ yếu dựa vào kết quả giải số như là các số liệu “giả thực nghiệm” và tìm ra một dạng hàm phù hợp đến khớp với dữ liệu “giả thực nghiệm” này nhằm tìm ra các tham số tự do trong hàm giải tích (Tong, & Lin, 2005; Zhang et al., 2014; Pham, & Nguyen, 2017). Tuy những hàm giải tích này vẫn được sử dụng rộng rãi bởi các nhà thực nghiệm, nhưng phương pháp này lại không chặt chẽ về mặt toán học.

Trong nghiên cứu này, chúng tôi quan tâm đến cách tiếp cận giải số và cụ thể là sử dụng phương pháp trạng thái Siegert, là phương pháp đã được sử dụng rất nhiều trong các bài toán khảo sát quá trình ion hóa của nguyên tử (Pham, 2014; Pham, 2015) và phân tử (Pham, 2018). Trong phương pháp này, tốc độ ion hóa và TMD lần lượt được trích xuất trực tiếp từ kết quả giải số cho trị riêng (phần ảo của năng lượng) và hàm riêng của bố sóng electron khi chúng bay ra xa ion mẹ. Ngoài ra, phương pháp trạng thái Siegert có thể cho kết quả chính xác cho điện trường có bước sóng lớn bất kỳ, từ đó giúp chúng ta khảo sát được quá trình này cho cả cơ chế ion hóa xuyên ngầm và vượt rào. Bên cạnh đó, kết quả

giải số của trạng thái Siegert là dữ liệu đầu vào chính xác để tính phân bố động lượng ba chiều của electron ion hóa dưới tác dụng của trường laser có dạng phân cực bất kì theo phương pháp “đoạn thời gian” (Pham, 2018). Hiện nay, phương pháp trạng thái Siegert đã được sử dụng cho các hệ nguyên tử (Pham, 2014), và ion phân tử hydro ở trạng thái cơ bản $1s\sigma$ và trạng thái kích thích $2p\pi^\pm$ (Pham, 2018). Do đó, để cung cấp một bức tranh toàn diện về quá trình ion hóa của ion phân tử hydro, các trạng thái khác cũng cần được khảo sát. Từ đó, trong bài báo này chúng tôi đã tiến hành khảo sát quá trình này cho trạng thái $2p\sigma$ khi thay đổi góc định phương phân tử, là góc hợp bởi trục phân tử và trục của vector điện trường ngoài. Kết quả khảo sát cho thấy cả tốc độ ion hóa và TMD đều phản ánh rõ cấu trúc của vân đạo phân tử $2p\sigma$.

2. Cơ sở lý thuyết

Cơ sở lý thuyết liên quan đến phương pháp trạng thái Siegert đã được chúng tôi trình bày chi tiết trong các công trình trước đây của nhóm (Pham, 2014; Pham, 2015; Pham, 2018). Trong bài báo này, chúng tôi chỉ giới thiệu những phương trình quan trọng. Phương trình Schrödinger dùng mô tả tương tác giữa electron với thế hạt nhân trong gần đúng một điện tử hoạt động $V(\mathbf{r}) = -Z/r$ kết hợp với điện trường tĩnh $\mathbf{F} = F\mathbf{e}_z$ ($F \geq 0$) có dạng

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

với $Z = 2$ tương ứng với ion phân tử hydro. Chúng tôi giải hệ phương trình này trong hệ tọa độ parabolic (Landau, & Lifshitz, 1981)

$$\xi = r + z \quad (0 \leq \xi < \infty),$$

$$\eta = r - z \quad (0 \leq \eta < \infty),$$

$$\varphi = \arctan \frac{y}{x} \quad (0 \leq \varphi < 2\pi). \quad (2)$$

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

$$\left[\frac{\partial}{\partial \eta} \eta \frac{\partial}{\partial \eta} + \frac{E\eta}{2} + \frac{F\eta^2}{4} + \left(\frac{\partial}{\partial \xi} \xi \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\xi + \eta}{4\xi\eta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - rV(\mathbf{r}) + \frac{E\xi}{2} - \frac{F\xi^2}{4} \right) \right] \psi(\mathbf{r}) = 0. \quad (3)$$

Sự xuất hiện của của điện trường ngoài đã phá vỡ tính chất Hermite của toán tử Hamilton, do đó 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 ε và tốc độ ion hóa Γ

$$E = \varepsilon - \frac{i}{2}\Gamma. \quad (4)$$

Nghiệm của phương trình (3) được phân tích dưới dạng

$$\psi(\mathbf{r}) = \eta^{-1/2} \sum_{\nu} f_{\nu}(\eta) \Phi_{\nu}(\xi, \varphi; \eta), \quad (5)$$

với $\nu = (n_\xi, |m|)$ là kênh ion hóa, trong đó n_ξ và m là các số lượng tử tương ứng với trục ξ và φ . Điều kiện biên của phương trình (3) trong vùng tiệm cận rất xa ion mẹ đối với $F > 0$ (Pham, 2014)

$$f_\nu(\eta)\Big|_{\eta \rightarrow \infty} = \frac{2^{1/2} f_\nu}{(F\eta)^{1/4}} \exp\left[\frac{iF^{1/2}\eta^{3/2}}{3} + \frac{iE\eta^{1/2}}{F^{1/2}}\right]. \quad (6)$$

Trong đó f_ν là những hệ số tiệm cận. Theo lí thuyết gần đúng trường yếu thì tổng module bình phương của tất cả các hệ số f_ν sẽ tiệm cận với tốc độ ion hóa của hệ trong kênh thứ ν . Trong vùng không gian rất xa ion mẹ, dạng tiệm cận của hàm sóng (5) có dạng

$$\psi(\mathbf{r})\Big|_{z \rightarrow -\infty} = \int A(\mathbf{k}_\perp) e^{ik_\perp r_\perp} g(z, \mathbf{k}_\perp) \frac{d\mathbf{k}_\perp}{(2\pi)^2}, \quad (7)$$

trong đó $\mathbf{r}_\perp = (x, y) = (r_\perp \cos \varphi, r_\perp \sin \varphi)$, $\mathbf{k}_\perp = (k_x, k_y) = (k_\perp \cos \varphi_k, k_\perp \sin \varphi_k)$, và

$$g(z, \mathbf{k}_\perp) = e^{-i\pi/12} 2\pi^{1/2} (2F)^{-1/6} \text{Ai}(\zeta), \quad (8)$$

$$\zeta = \frac{2e^{-i\pi/3}}{(2F)^{2/3}} \left[E - Fz - \frac{k_\perp^2}{2} \right]. \quad (9)$$

Ở đây $\text{Ai}(x)$ là hàm Airy và $A(\mathbf{k}_\perp)$ là biên độ phức của TMD. Từ phương trình (7), TMD của electron ion hóa có thể được rút ra dưới dạng

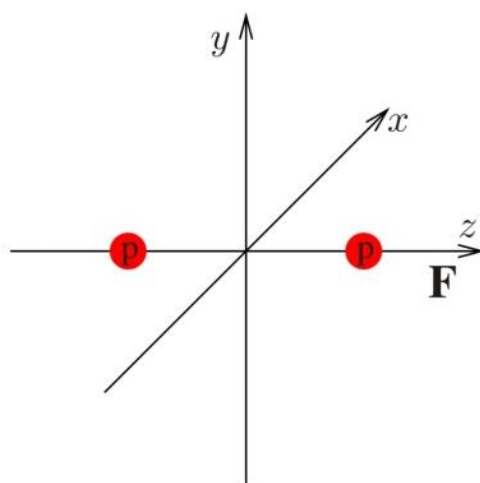
$$P(\mathbf{k}_\perp) \equiv |A(\mathbf{k}_\perp)|^2 = \frac{8\pi^2}{F} \left| \sum_\nu f_\nu \Phi_\nu \left(\frac{k_\perp^2}{F}, \varphi_k \right) \right|^2. \quad (10)$$

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

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\sqrt{\left|\mathbf{r} - \frac{\mathbf{R}}{2}\right|^2 + b}} - \frac{1}{\sqrt{\left|\mathbf{r} + \frac{\mathbf{R}}{2}\right|^2 + b}}, \quad (11)$$

trong đó phân tử được bố trí nằm trong mặt phẳng Oxz với $\mathbf{R} = (R \sin \beta, 0, R \cos \beta)$ và R là khoảng cách liên hạt nhân. Vector điện trường ngoài được bố trí cố định dọc theo trục Oz , gốc tọa độ được chọn trùng với tâm của phân tử, trục phân tử có thể xoay quanh gốc tọa độ trong mặt phẳng Ozx . Trong Hình 1, chúng tôi mô tả hình học của hệ khi trục phân tử được đặt dọc theo phương Oz .

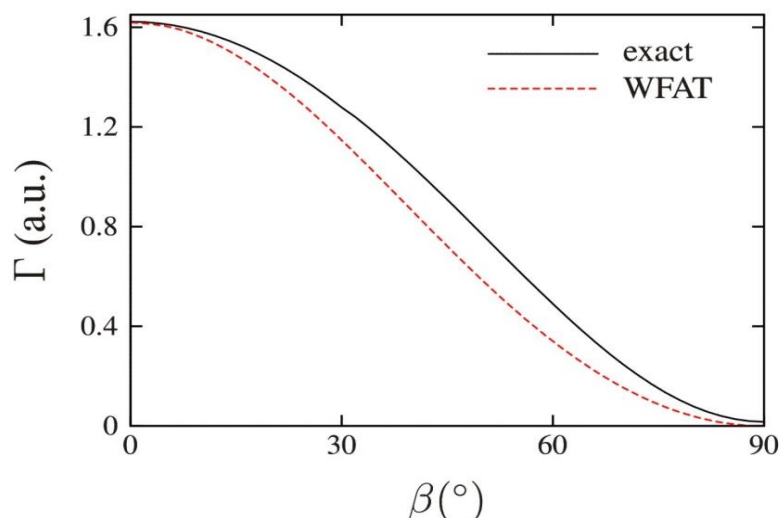


Hình 1. Hình học của hệ H_2^+ đặt trong điện trường ngoài có vector điện trường hướng dọc theo trục Oz khi trục phân tử tương ứng với hai proton (chấm tròn) được đặt trên trục Oz

Chúng tôi tiến hành khảo sát tốc độ ion hóa của phân tử H_2^+ ở trạng thái $2p\sigma$ khi xoay phân tử quanh gốc tọa độ và giữ nguyên cường độ điện trường $F = 0,03a.u.$ Do tính chất đối xứng của hệ nên chúng tôi chỉ khảo sát cho góc định phương β thay đổi từ 0° đến 90° và thể hiện kết quả sự phụ thuộc của tốc độ ion hóa vào góc định phương trong Hình 2. Để xác nhận độ tin cậy của phương pháp giải số, chúng tôi so sánh kết quả giải số với kết quả gần đúng thu được từ lý thuyết gần đúng tiệm cận trường yếu (Weak-Field Asymptotic Theory - WFAT) (Pham, 2014). Theo WFAT, tốc độ ion hóa được tính theo công thức

$$\Gamma_{as} = (2 - \delta_{m0}) |g_{m0}|^2 W_{m0}(F), \tag{11}$$

trong đó g_{m0} và W_{m0} lần lượt là hệ số liên quan đến bản chất của hệ lượng tử đang xem xét và điện trường được sử dụng. Dạng tường minh của hai hệ số này được cho trong công trình (Pham, 2014). Ở đây m là số lượng tử từ đặc trưng cho kênh ion hóa chính. Theo WFAT, đối với trường hợp H_2^+ ở trạng thái $2p\sigma$ thì chỉ tồn tại một kênh ion hóa chiếm ưu thế tương ứng với $m = 0$.



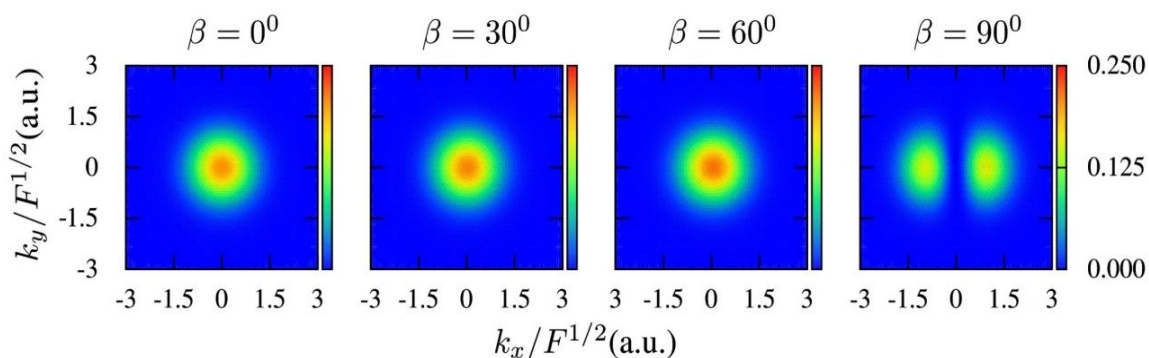
Hình 2. Sự phụ thuộc của tốc độ ion hóa từ trạng thái $2p\sigma$ của H_2^+ vào góc định phương phân tử khi cường độ điện trường là $F = 0,03$ a.u. Đường liền nét màu đen và đường đứt nét màu đỏ lần lượt là kết quả thu được từ phương pháp giải số và lí thuyết gần đúng WFAT

Kết quả từ Hình 2 cho thấy tốc độ ion hóa đạt cực đại tại vị trí góc định phương $\beta = 0^\circ$, sau đó giảm dần và đạt cực tiểu tại vị trí ứng với góc định phương $\beta = 90^\circ$. Từ 90° đến 180° , tốc độ ion hóa sẽ tăng dần lên và đạt cực đại tại 180° . Hình dạng của đường cong phụ thuộc này ứng với $90^\circ \leq \beta \leq 180^\circ$ hoàn toàn đối xứng với đường cong trong khoảng từ $0^\circ \leq \beta \leq 90^\circ$. Chu kì thay đổi này tiếp tục lặp lại khi khảo sát cho góc định phương $180^\circ \leq \beta \leq 360^\circ$. Kết quả này có thể được giải thích như sau: khi $\beta = 0^\circ$ hoặc $\beta = 180^\circ$, trục của phân tử trùng với phương của vector điện trường ngoài. Do đó, sự chòng chập giữa vector điện trường và vận đạo phân tử là lớn nhất, từ đó xác suất để ion hóa electron cũng lớn nhất. Khi $\beta = 90^\circ$, vector điện trường ngoài hướng dọc theo mặt phẳng nút của vận đạo phân tử (là mặt phẳng mà xác suất tồn tại electron là nhỏ nhất). Vì vậy, sự chòng chập giữa vector điện trường ngoài và vận đạo phân tử là ít nhất dẫn đến xác suất ion hóa electron là thấp nhất.

Một lưu ý khác được rút ra từ Hình 2, là sự sai biệt lớn giữa kết quả giải số và lí thuyết WFAT khi $\beta = 90^\circ$. Kết quả giải số cho thấy tốc độ ion hóa trong trường hợp này rất bé và $\Gamma \neq 0$, trong khi theo WFAT thì tốc độ ion hóa bằng 0. Nguyên nhân là do WFAT chỉ xem xét một kênh ion hóa duy nhất chiếm ưu thế ứng với $m = 0$ trong khi ứng với $\beta = 90^\circ$ thì số lượng tử từ đã chuyển từ $m = 0$ sang $m = 1$. Điều này cho thấy nhược điểm của WFAT, đồng thời khẳng định sự cần thiết của phương pháp giải số trong việc cung cấp kết quả chính xác liên quan đến quá trình ion hóa của nguyên tử/phân tử dưới tác dụng của điện trường ngoài. Ngoài ra, khi góc định phương thay đổi từ $\beta = 0^\circ$ đến $\beta = 90^\circ$, kênh ion hóa sẽ có sự chuyển tiếp từ $m = 0$ sang $m = 1$. Do đó, sẽ tồn tại những góc

định phương mà tại đó cả hai kênh này đều có đóng góp như nhau. Hiện tượng này đã được quan sát cho trạng thái $2p\pi^+$ của H_2^+ , khi này đường cong biểu diễn mối liên hệ giữa tốc độ ion hóa và góc định phương xuất hiện một cực đại tại một góc định phương trung gian. Tuy nhiên, trong trường hợp của trạng thái $2p\sigma$, cực đại trung gian này lại không xuất hiện. Đây vẫn là một vấn đề mở mà chúng tôi sẽ tiếp tục tìm hiểu trong những nghiên cứu tiếp theo.

Tiếp theo, chúng tôi khảo sát TMD của electron ion hóa từ trạng thái $2p\sigma$ của H_2^+ ứng với các góc định phương phân tử khác nhau. Hình 3 thể hiện TMD cho bốn góc định phương đại diện $\beta = 0^\circ, 30^\circ, 60^\circ$ và 90° . Ở đây, TMD được xét trong mặt phẳng Oxy vuông góc với vector điện trường trong không gian động lượng (k_x, k_y) . Kết quả cho thấy, khi $\beta = 0^\circ, 30^\circ$ và 60° , TMD có dạng là các vòng tròn đồng tâm, đạt cực đại ở tâm và giảm dần khi độ lớn của vector $\mathbf{k}_\perp = \mathbf{k}_x + \mathbf{k}_y$ tăng lên theo quy luật của phân bố Gauss. Điều này có thể được giải thích là do đối với các góc định phương này, kênh ion hóa chiếm ưu thế ứng với $m = 0$. Khi này, TMD cũng thể hiện rõ cấu trúc của vân đạo phân tử khi người quan sát đứng rất xa hệ phân tử và nhìn dọc theo trục của vector điện trường. Đối với trường hợp $\beta = 90^\circ$ tức vector điện trường đang hướng dọc theo mặt phẳng nút của vân đạo $2p\sigma$, kênh ion hóa chiếm ưu thế ứng với $m = 1$, và TMD cũng thể hiện rất rõ cấu trúc của vân đạo khi người quan sát đứng rất xa hệ phân tử. Kết quả này, cùng với các nghiên cứu trước đây (Pham, 2015; Petersen et al., 2015), đã tái khẳng định rằng cấu trúc của vân đạo phân tử mà tại đó electron bị ion hóa được lưu trữ vào thông tin ổn định của TMD và được electron ion hóa mang theo đến đầu dò động lượng.

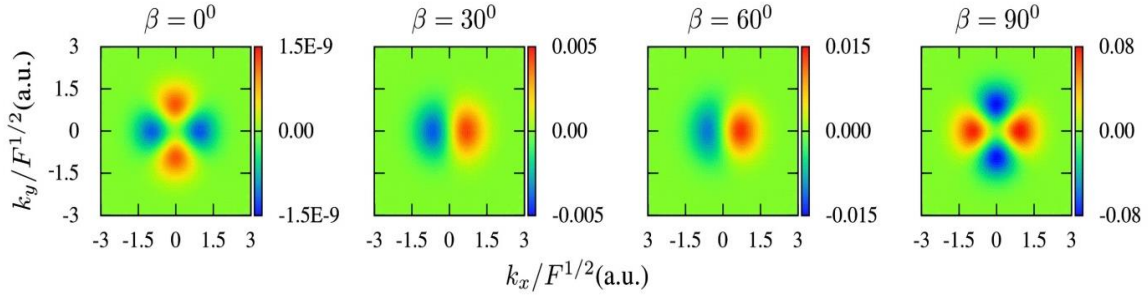


Hình 3. TMD của electron ion hóa từ trạng thái $2p\sigma$ ứng với bốn giá trị đại diện của góc định phương từ trái qua phải lần lượt là $0^\circ, 30^\circ, 60^\circ$ và 90° khi cường độ điện trường là $F = 0,03 a.u$

Để trích xuất dữ liệu về tính chất đối xứng của vân đạo phân tử đối với vector điện trường, chúng tôi tính giá trị trung bình của TMD theo tọa độ góc φ_k trong không gian động lượng theo công thức

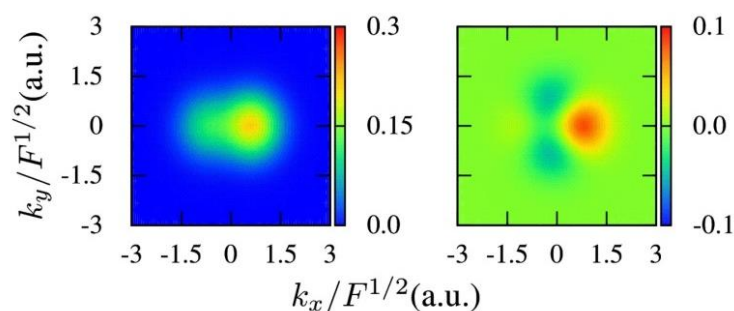
$$\bar{P}(k_{\perp}) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} P(\mathbf{k}_{\perp}) d\varphi_k, \tag{11}$$

sau đó trừ phổ TMD ứng với từng góc φ_k cho giá trị phong trung bình $\bar{P}(k_{\perp})$ và thu được kết quả như Hình 4.



Hình 4. TMD của electron ion hóa từ trạng thái $2p\sigma$ sau khi đã trừ phong trung bình $\bar{P}(k_{\perp})$ ứng với bốn giá trị đại diện của góc định phương từ trái qua phải lần lượt là $\beta = 0^{\circ}, 30^{\circ}, 60^{\circ}$ và 90° khi cường độ điện trường là $F = 0,03$ a.u.

Khác với trường hợp của nguyên tử, vân đạo phân tử khi quan sát từ các góc định phương phù hợp có vẻ đẳng hướng như hình dạng những vòng tròn đồng tâm trong Hình 3 cho các trường hợp $\beta = 0^{\circ}, 30^{\circ}$ và 60° . Tuy nhiên, vân đạo phân tử không hoàn toàn đẳng hướng như kết quả được thể hiện trong Hình 4. Trong các trường hợp xem xét, chúng tôi nhận thấy chỉ có trường hợp $\beta = 0^{\circ}$, tính đẳng hướng của phân tử là cao nhất bởi độ lớn của TMD sau khi trừ đi giá trị phong là rất bé so với độ lớn của bản thân TMD. Điều này hoàn toàn phù hợp với hình học của hệ và kết quả thu nhận được cho trạng thái $1s\sigma$ (Pham et al., 2018). Khi $\beta = 0^{\circ}$ và $\beta = 90^{\circ}$, trục của phân tử và trục của vector điện trường trùng hoặc vuông góc với nhau, do đó khi nhìn vân đạo phân tử dọc theo trục điện trường, vân đạo phân tử phải đối xứng qua hai trục Ox và Oy. Ngoài ra, khi xoay phân tử một góc 90° thì tính đối xứng của vân đạo cũng thay đổi một góc 90° . Trong khi đó, đối với trường hợp $\beta = 30^{\circ}, 60^{\circ}$ thì vân đạo phân tử chỉ còn đối xứng qua trục Ox. Những nhận định trực quan này hoàn toàn phù hợp với kết quả trích xuất từ TMD trong Hình 4 và cũng hoàn toàn phù hợp với kênh ion hóa chiếm ưu thế đã phân tích ở phần trên. Kết quả phân tích của chúng tôi cho thấy, TMD của electron ion hóa không chỉ thể hiện cấu trúc vân đạo phân tử mà từ đó electron được thoát ra khỏi phân tử mà còn phản ánh tính chất đối xứng của vân đạo này đối với trục của vector điện trường ngoài.



Hình 5. TMD (hình bên trái) và TMD sau khi đã trừ phong trung bình $\bar{P}(k_{\perp})$ (hình bên phải) của electron ion hóa từ trạng thái $2p\sigma$ ứng với góc định phương $\beta = 84^{\circ}$ khi cường độ điện trường là $F = 0,03$ a.u.

Cuối cùng, để kiểm chứng sự đồng đóng góp của hai kênh ion hóa ứng với $m = 0$ và $m = 1$, chúng tôi đã tiến hành tính toán cho TMD của electron ion hóa ứng với góc định phương $\beta = 84^{\circ}$ và thể hiện kết quả ở Hình 5 cho bản thân TMD (hình bên trái) và hình ảnh trích xuất khi trừ TMD với phong trung bình $\bar{P}(k_{\perp})$ (hình bên phải). Kết quả cho thấy, trong trường hợp này, TMD không còn hình dạng là những vòng tròn đồng tâm thể hiện kênh ưu thế là $m = 0$ hay tồn tại một mặt phẳng nút ứng với kênh ưu thế là $m = 1$. Thay vào đó, cấu trúc TMD trong trường hợp này là sự kết hợp của cả hai mẫu hình này. Đây là một bằng chứng quan trọng khẳng định sự cạnh tranh của hai kênh ion hóa mà chúng tôi đã đề cập. Ngoài ra, TMD trong trường hợp này cũng tương đương với những trường hợp khác khi $\beta \neq 0^{\circ}, 90^{\circ}$ là chỉ tồn tại tính đối xứng qua trục Ox .

4. Kết luận

Trong bài báo này, chúng tôi đã khảo sát một cách toàn diện những đại lượng vật lý quan trọng đặc trưng cho quá trình ion hóa của ion phân tử hydro ở trạng thái $2p\sigma$ khi giữ nguyên cường độ điện trường và thay đổi góc định phương phân tử. Kết quả về sự phụ thuộc của tốc độ ion hóa vào góc định phương β đạt cực đại tại $\beta = 0^{\circ}$, giảm dần khi β tăng lên, và đạt cực tiểu tại $\beta = 90^{\circ}$. Kết quả này hoàn toàn phù hợp sự mô tả của lý thuyết gần đúng WFAT cũng như sự chông chập giữa điện trường ngoài và vận đạo phân tử. Tuy nhiên, chúng tôi không nhận thấy được một cực trị tại một góc định phương trung gian. Vấn đề này sẽ được tìm hiểu trong nghiên cứu tiếp theo của chúng tôi. Ngoài ra, chúng tôi cũng đã khảo sát chi tiết hình dạng của TMD ứng với những góc định phương β khác nhau. Chúng tôi nhận thấy tính chất của TMD phản ánh rất tốt cấu trúc và sự đối xứng của vận đạo $2p\sigma$ trong điện trường ngoài. Bên cạnh đó, sự cạnh tranh giữa hai kênh ion hóa tương ứng với $m = 0$ và $m = 1$ cũng đã được kiểm chứng khi xem xét TMD cho góc định phương $\beta = 84^{\circ}$.

- ❖ **Tuyên bố về quyền lợi:** Các 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 Bộ Giáo dục và Đào tạo dưới hình thức đề tài khoa học và công nghệ cấp Bộ mã số B2018-SPS-20.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- Ammosov, M. V. (1987). Tunnel ionization of complex atoms and of atomic ions in an alternating electromagnetic field. *Sov. Phys. JETP*, 64, 1191.
- Bergues, B., Kübel, M., Johnson, N. G., Fischer, B., Camus, N., Betsch, K. J., ... & Pfeifer, T. (2012). Attosecond tracing of correlated electron-emission in non-sequential double ionization. *Nature communications*, 3(1), 1-6.
- Gontier, Y., Poirier, M., & Trahin, M. (1980). Multiphoton absorptions above the ionisation threshold. *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, 13(7), 1381.
- Itatani, J., Levesque, J., Zeidler, D., Niikura, H., Pépin, H., Kieffer, J. C., ... & Villeneuve, D. M. (2004). Tomographic imaging of molecular orbitals. *Nature*, 432(7019), 867-871.
- Landau, L. D., & Lifshitz, E. M. (1981). *Quantum mechanics: non-relativistic theory* (Vol. 3). Elsevier.
- Petersen, I., Henkel, J., & Lein, M. (2015). Signatures of molecular orbital structure in lateral electron momentum distributions from strong-field ionization. *Physical Review Letters*, 114(10), 103004.
- Pham, N. T. V. (2014). Investigating the ionization process of noble gas atoms by a static field using Siegert state method. *Ho Chi Minh City University of Education Journal of Science*, 2(67), 39-59.
- Pham, N. T. V. (2015). Noble-gas atoms in a static electric field. Transverse momentum distribution of ionized electron. *Hue University Journal of Science*, 107(8), 99-107.
- Pham, V. N. T., & Nguyen, P. (2017). Correction of parameters used for empirical formula describing the ionization rate in over-the-barrier regime. *Ho Chi Minh City University of Education Journal of Science*, 14(9), 67-75.
- Pham, N. T. V. (2018). The ground state of hydrogen molecular ion in a static field (Trang thai co ban cua ion phan tu hydro trong dien truong tinh). *Ho Chi Minh City University of Education Journal of Science*, 15(6), 37-46.
- Pham, N. T. V. (2018). The improved program calculating the photomomentum distribution induced by circularly polarized laser. *Science and Technology Development Journal-Natural Sciences*, 2(4), 126-135.
- Plummer, M., & McCann, J. F. (1996). Field-ionization rates of the hydrogen molecular ion. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 29(20), 4625.
- Tochitsky, S., Welch, E., Polyanskiy, M., Pogorelsky, I., Panagiotopoulos, P., Kolesik, M., ... & Joshi, C. (2019). Megafilament in air formed by self-guided terawatt long-wavelength infrared laser. *Nature Photonics*, 13(1), 41-46.

- Tong, X. M., & Lin, C. D. (2005). Empirical formula for static field ionization rates of atoms and molecules by lasers in the barrier-suppression regime. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 38(15), 2593.
- Tong, X. M., Zhao, Z. X., & Lin, C. D. (2002). Theory of molecular tunneling ionization. *Physical Review A*, 66(3), 033402.
- Zhang, Q., Lan, P., Lu, P. (2014). Empirical formula for over-barrier strong-field ionization. *Physical Review A*, 90(4), 043410.

THE $2p\sigma$ STATE OF HYDROGEN MOLECULAR ION IN A STATIC FIELD

Tran Ngoc Lien Huong¹, Hoang Tuan Duc², Le Binh Hieu², Nguyen Thuy Uyen²,
Nguyen Ngoc Giau², Bui Ngoc Thao³, Pham Nguyen Thanh Vinh^{2*}

¹University of Science, Vietnam National University Ho Chi Minh City, Vietnam

²Ho Chi Minh City University of Education, Ho Chi Minh City, Vietnam

³Nguyen Huu Tho High School, Ho Chi Minh City, Vietnam

*Corresponding author: Pham Nguyen Thanh Vinh – Email: vinhpnt@hcmue.edu.vn

Received: April 07, 2020; Revised: September 04, 2020; Accepted: September 23, 2020

ABSTRACT

In this article, the physical quantities characterizing the ionization process such as the ionization rate and transverse momentum distribution for the $2p\sigma$ of hydrogen molecular ion are thoroughly investigated as the molecule is rotated about the molecular center. We also fix the direction of electric field, thus are able to vary the orientation angle of the molecule in the external field. In this study, the Siegert state method for precisely numerical calculation was applied, then the results were compared with those obtained from the weak-field asymptotic theory to validate the approach. The results indicate that the ionization rate reached a maximum at the orientation angle $\beta = 0^\circ$, then gradually decreased to a minimum at $\beta = 90^\circ$. Besides, the transverse momentum distribution of the ionized electron well reflects the structural and symmetric properties of $2p\sigma$ orbital with respect to the axis of the electric field. The combination of different ionization rates is also imprinted in the transverse momentum distribution.

Keywords: Siegert state, H_2^+ ; ionization rate, transverse momentum distribution