

## ẢNH HƯỞNG ĐỘNG LỰC HỌC PHÂN CỰC LỖI LÊN XÁC SUẤT ION HÓA CỦA PHÂN TỬ CO BẰNG PHƯƠNG PHÁP AB INITIO

HOÀNG VĂN HƯNG\*

### TÓM TẮT

Xác suất ion hóa của phân tử CO dưới tác dụng của trường laser được tính bằng phương pháp TDSE kết hợp gần đúng một điện tử có xét đến ảnh hưởng của động lực học phân cực lõi. Chúng tôi đã chỉ ra có thể dùng phương pháp này để tính xác suất ion hóa của phân tử dưới tác dụng của trường laser. Chúng tôi cũng đã chỉ ra ảnh hưởng của động lực học phân cực lõi lên xác suất ion hóa của phân tử CO là lớn không thể bỏ qua. Các kết quả phù hợp với những công trình thực nghiệm và tính toán lý thuyết khác đã công bố.

**Từ khóa:** xác suất ion hóa, phân tử CO, động lực học phân cực lõi.

### ABSTRACT

#### *The effect of dynamic core polarization on ionization probability of CO molecule by ab initio method*

Ionization probability of CO molecule in the interaction with laser field is calculated by TDSE (Time – Dependent Schrödinger Equation) method within single active electron model with consideration of dynamic core polarization. We showed that this method can be applied for the calculation of ionization probability of a molecule in laser field. We also showed that the effect of dynamic core polarization on ionization probability of CO molecule plays an important role and cannot be ignored. All results are in agreement with experiments and previous theoretical calculations.

**Keywords:** ionization probability, CO molecule, dynamic core polarization.

### 1. Giới thiệu

Quá trình ion hóa của phân tử trong trường laser mạnh là một trong những bài toán được quan tâm nghiên cứu rộng rãi về cả lý thuyết và thực nghiệm. Một vài hướng tiếp cận lý thuyết cho vấn đề này có thể kể ra như lý thuyết MO-ADK (Molecule Ammosov-Delone-Krainov) [9], gần đúng trường mạnh SFA (Strong Field Approximation) [6] hay những phương pháp số ab initio như giải số phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian (TDSE) [7], Hartree-Fock phụ thuộc thời gian (TDHF) [2, 4], lý thuyết phiếm hàm mật độ phụ thuộc thời gian (TDDFT) [8]. Điểm chung của các phương pháp giải tích như MO-ADK hay SFA là đều xem mật độ của lớp điện tử ngoài cùng quyết định đến sự phân bố xác suất ion hóa của phân tử với sự định hướng của laser, các lớp điện tử bên trong liên kết chặt với hạt nhân do đó xem như đóng góp không đáng kể.

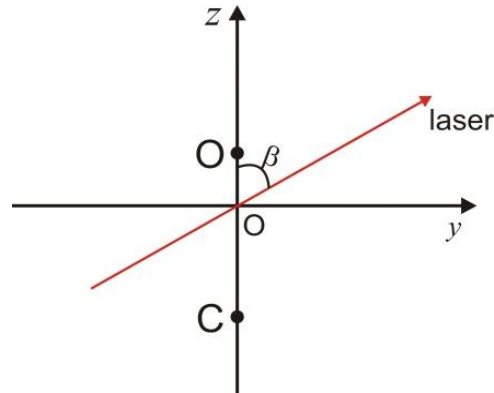
\* ThS, Trường Đại học Sư phạm TPHCM; Email: hungvh@hcmup.edu.vn

Trong công trình thực nghiệm năm 2010 [3], để giải thích kết quả đo mật độ ion hóa cho phân tử OCS, các tác giả nhận thấy hiệu ứng Stark là quan trọng và cần được tính đến trong các lý thuyết như MO-ADK hay SFA. Đây là một đóng góp quan trọng trong việc phát triển các lý thuyết tính mật độ ion hóa cho các phân tử phân cực vì trước đây hiệu ứng này không được tính đến. Bằng cách sử dụng phương pháp TDSE cho mô hình phân tử phân cực  $Z_1Z_2$  chúng tôi cũng đã xác nhận lại kết quả này trong công trình [1]. Tuy nhiên, gần đây các kết quả đo thực nghiệm mật độ ion hóa của phân tử CO trong năm 2011 [5] và 2012 [10] lại hoàn toàn không thể giải thích được bằng lý thuyết MO-ADK có tính đến hiệu ứng Stark, hay kể cả các phương pháp TDSE sử dụng gần đúng một điện tử SAE (Single Active Electron). Năm 2013, trong công trình [2] các tác giả sử dụng phương pháp TDHF giải số phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian khi phân tử CO tương tác với chùm laser, phân tích so sánh với phương pháp sử dụng mô hình một orbital hoạt động SAO (Single Active Orbital), các tác giả chỉ ra rằng mặc dù các điện tử bên trong liên kết chặt với hạt nhân nhưng động lực học của nó không thể bỏ qua và đóng vai trò rất quan trọng trong việc tính toán mật độ ion hóa của phân tử CO. Điều này gây một sự chú ý lớn trong cộng đồng khoa học vì đây là lần đầu tiên ảnh hưởng động lực học của các hạt nhân và các lớp điện tử bên trong lại được quan sát rõ ràng như vậy.

Phương pháp TDHF được các tác giả sử dụng trong công trình [2] là một phương pháp được quan tâm phát triển trong những năm gần đây. Điểm mạnh của phương pháp này là xét đến toàn bộ đóng góp của các lớp điện tử do đó kết quả rất đáng tin cậy, có thể dùng làm tiêu chuẩn kiểm tra đánh giá các phương pháp khác. Tuy nhiên, cũng vì vậy mà phương pháp này có khối lượng tính toán rất lớn và chỉ mới được xây dựng và áp dụng được trong một vài trường hợp cụ thể. Và vì là giải số nên các kết quả sẽ cung cấp ít hiểu biết về quá trình hiện tượng vật lý bên trong. Trong công trình này, chúng tôi sử dụng phương pháp TDSE kết hợp gần đúng một điện tử, xét đến ảnh hưởng của động lực học phân cực lõi (dynamic core polarization) để tính xác suất ion hóa của phân tử CO. Mục tiêu của nghiên cứu này là để xem liệu chỉ cần sử dụng gần đúng một điện tử và tính đến ảnh hưởng của động lực học phân cực lõi có thể giải thích được kết quả thực nghiệm đo mật độ ion hóa của phân tử CO hay không. Đây là một nghiên cứu có ý nghĩa định hướng về mặt phương pháp tính toán.

## 2. Phương pháp TDSE tính xác suất ion hóa

Để tận dụng tính đối xứng trục, giảm bớt khối lượng tính toán, phân tử CO được định phương hoàn toàn trên trục Oz, một laser có vec tơ phân cực nằm trong mặt phẳng yOz được chiếu vào để tương tác với phân tử. Xác suất ion hóa của phân tử CO sẽ được khảo sát theo góc định phương  $\beta$ , là góc hợp bởi trục phân tử (từ C đến O) và phương của vec tơ điện trường khi trường điện của laser có giá trị cực đại như trong Hình 1.



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

Phân tử CO được mô hình như một điện tử hoạt động chuyển động dưới tác dụng của thế Coulomb gây ra bởi hạt nhân và các điện tử  $\hat{V}_{SAE}(r, \theta)$ , của thế động lực học phân cực lõi  $\hat{V}_p(\vec{r}, t)$ , và của thế tương tác của điện tử và điện trường laser  $\hat{V}_L(\vec{r}, t)$ . Phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian trong hệ đơn vị nguyên tử được cho bởi:

$$\left[ \frac{\nabla^2}{2} + \hat{V}_{SAE}(r, \theta) + \hat{V}_p(\vec{r}, t) + \hat{V}_L(\vec{r}, t) \right] \psi(\vec{r}, t) = \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t}. \quad (1)$$

Phương pháp để giải phương trình (1) và tính xác suất ion hóa đã được trình bày cụ thể trong công trình [1], trong bài viết này chúng tôi chỉ tập trung trình bày vào việc xây dựng thế một điện tử hoạt động và thế động lực học phân cực lõi.

### 2.1. Mô hình một điện tử hoạt động

Về cơ bản, chúng tôi sử dụng mô hình một điện tử hoạt động LDA+LB như trong công trình [11], chỉ khác chúng tôi tính trực tiếp các tích phân thay vì khai triển thế năng theo các đa thức Legendre. Thế năng tương tác của mô hình một điện tử hoạt động bao gồm ba thành phần:

$$\hat{V}_{SAE}(r, \theta) = V_{nuc}(r, \theta) + V_{el}(r, \theta) + V_{ex}(r, \theta), \quad (2)$$

trong đó,  $V_{nuc}(r, \theta)$  là tương tác của hạt nhân với điện tử,  $V_{el}(r, \theta)$  là tương tác của các điện tử với điện tử và tương tác trao đổi liên quan đến spin của điện tử là  $V_{ex}(r, \theta)$ .

Tương tác của hạt nhân với điện tử chính là thế tương tác Coulomb của điện tử và  $N_a$  hạt nhân được cho bằng biểu thức:

$$V_{nuc}(r, \theta) = - \sum_{i=1}^{N_a} \frac{Z_i}{\sqrt{r^2 - 2r \cos \theta z_i + z_i^2}}, \quad (3)$$

trong đó  $Z_i, z_i$  lần lượt là điện tích và tọa độ của hạt nhân thứ  $i$ .

Tổng mật độ điện tích của  $N_e$  điện tử

$$\rho(r', \theta') = \frac{1}{2\pi} \sum_{i=1}^{N_e} \int_0^{2\pi} |\Psi_i(r', \theta', \varphi')| d\varphi', \quad (4)$$

gây nên tương tác Coulomb với điện tử là:

$$\begin{aligned} V_{el}(r, \theta) &= \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \frac{\rho(r', \theta')}{\sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr'[\sin\theta \sin\theta' \cos(\varphi' - \varphi) + \cos\theta \cos\theta']}} r'^2 \sin\theta' dr' d\theta' d\varphi' \\ &= \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \frac{\rho(r', \theta')}{\sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr'[\sin\theta \sin\theta' \cos\varphi' + \cos\theta \cos\theta']}} r'^2 \sin\theta' dr' d\theta' d\varphi', \end{aligned} \quad (5)$$

trong đó, hàm sóng điện tử  $\Psi_i(r', \theta', \varphi')$  được tính bằng phương pháp Hartree-Fock với hệ hàm cơ sở AUG-cc-pVTZ được tích hợp trong phần mềm Gaussian 03.

Thế trao đổi bao gồm hai thành phần:

$$V_{ex}(r, \theta) = \gamma V_{ex}^{\text{LDA}}(r, \theta) + V_{ex}^{\text{GC}}(r, \theta). \quad (6)$$

Ở đây thế gần đúng mật độ địa phương là:

$$V_{ex}^{\text{LDA}}(r, \theta) = - \left[ \frac{6}{\pi} \rho_\sigma(r, \theta) \right]^{1/3}, \quad (7)$$

với  $\rho_\sigma(r, \theta)$  là tổng mật độ các điện tử có cùng spin  $\sigma$ . Số hạng thế hiệu chỉnh đạo hàm là:

$$V_{ex}^{\text{GC}}(r, \theta) = - \frac{\eta \chi_\sigma^2(r, \theta) \rho_\sigma^{1/3}(r, \theta)}{1 + 3\eta \chi_\sigma(r, \theta) \sinh^{-1}[\chi_\sigma(r, \theta)]}, \quad (8)$$

với

$$\chi_\sigma(r, \theta) = |\nabla \rho_\sigma(r, \theta)| \rho_\sigma^{-4/3}(r, \theta). \quad (9)$$

Hai hệ số  $\gamma, \eta$  được chọn sao cho thế ion hóa của mô hình gần với thực nghiệm. Tương tự như công trình [11], chúng tôi chọn  $\gamma = 1, \eta = 0.05$ .

Về mặt tính toán, thế tương tác ở những khoảng cách xa rất khó tính do hai nguyên nhân. Một là các hàm sóng ở xa sẽ được mô tả bằng các hàm Slater  $\propto e^{-\alpha r}$ , trong khi đó hàm sóng của chúng tôi sử dụng lại được mô tả bằng các hàm Gauss  $\propto e^{-\alpha r^2}$ , với  $r$  lớn các hàm Gauss tiến về không nhanh hơn so với các hàm Slater. Hai là ra xa hạt nhân thế năng tương tác càng nhỏ do đó việc tính toán là rất khó. Tuy nhiên, hàm thế năng  $\hat{V}_{\text{SAE}}(r, \theta)$  sẽ có dạng  $-1/r$  khi  $r \rightarrow \infty$ ; do đó, chúng tôi xem với những giá trị  $r \geq r_{\text{cut}}$ , giá trị của  $\hat{V}_{\text{SAE}}(r, \theta)$  được xem như bằng  $-1/r$ . Trong công trình này, khảo sát nhiều giá trị của  $r_{\text{cut}}$ , xem xét sự ảnh hưởng lên mật độ ion hóa chúng tôi nhận thấy giá trị của  $r_{\text{cut}} \geq 10$  a.u..

## 2.2. Thế năng tương tác của laser

Thế năng tương tác của laser bao gồm hai thành phần, thế năng tương tác của laser với lưỡng cực điện tử:

$$\hat{V}_L(\vec{r}, t) = \vec{E}\vec{r} \quad (10)$$

và thế năng tương tác gây ra bởi động lực học phân cực lõi  $\alpha\vec{E}$  với lưỡng cực điện tử:

$$\hat{V}_P(\vec{r}, t) = -\frac{\alpha\vec{E}\vec{r}}{r^3}, \quad (11)$$

trong đó

$$\alpha = \begin{pmatrix} \alpha_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_{zz} \end{pmatrix} \quad (12)$$

là tensor phân cực bậc 2. Do phân tử CO là phân tử thẳng, nằm trên trục Oz nên chỉ có 3 thành phần nằm trên đường chéo của tensor này khác không và thành phần theo hai phương x và y là như nhau. Lưu ý là chỉ có hạt nhân và các điện tử còn lại tạo nên sự phân cực này, do đó  $\alpha$  là của ion phân tử CO<sup>+</sup> chứ không phải của phân tử trung hòa CO.

Khác với công trình [2] bằng cách khớp hàm của  $\alpha\vec{E}$  với lưỡng cực cảm ứng để thu được các giá trị khác không của ma trận  $\alpha$ ; trong công trình này, chúng tôi đề nghị sử dụng chức năng “polar” được tích hợp sẵn trong phần mềm Gaussian để tính đại lượng này. Nguyên tắc của phương pháp này là cho phân tử tương tác với trường điện yếu, sau đó khớp hàm thế ion hóa theo biểu thức của hiệu ứng Stark:

$$I_p(\vec{E}) = I_p(0) + \Delta\mu\vec{E} + \frac{1}{2}\vec{E}^T\Delta\alpha\vec{E}, \quad (13)$$

để thu được giá trị của tensor  $\alpha$ . Vẫn sử dụng phương pháp Hatree Fock và hệ hàm cơ sở AUG-cc-pVTZ, đầu tiên chúng tôi thu được tensor  $\alpha$  cho CO, kết quả thu được gần với các giá trị thực nghiệm. Do đó, chúng tôi tiếp tục sử dụng để tính cho phân tử CO<sup>+</sup> và thu được các giá trị khác không của tensor  $\alpha$  là  $\alpha_{xx} = \alpha_{yy} = 6.72$  a.u.,  $\alpha_{zz} = 12.22$  a.u. Các giá trị này là lớn hơn khoảng 2 lần so với công trình [2], tương ứng là  $\alpha_{xx} = \alpha_{yy} = 3.28$  a.u.,  $\alpha_{zz} = 5.32$  a.u. Nguyên nhân của sự khác nhau này theo chúng tôi là trong [2] các tác giả sử dụng mô hình SAO trong khi chúng tôi sử dụng SAE.

Cuối cùng thế năng tương tác của điện trường laser sẽ được viết lại thành:

$$\hat{V}_{LP}(\vec{r}, t) = \hat{V}_L(\vec{r}, t) + \hat{V}_P(\vec{r}, t) = E_y(t)y\left(1 - \frac{\alpha_{yy}}{r^3}\right) + E_z(t)z\left(1 - \frac{\alpha_{zz}}{r^3}\right). \quad (14)$$

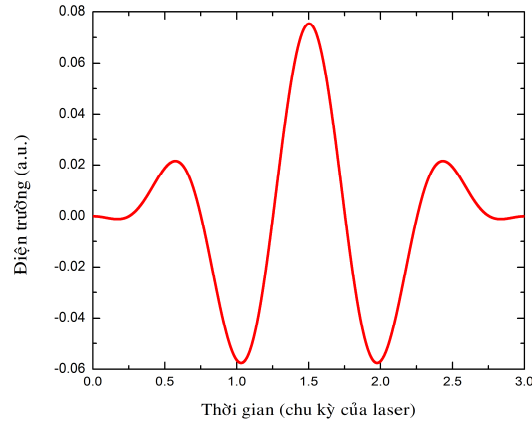
Để tránh các điểm kì dị gần hạt nhân, các điểm nằm trên và trong mặt elip có phương trình

$$\frac{x^2}{(\sqrt[3]{\alpha_{xx}})^2} + \frac{y^2}{(\sqrt[3]{\alpha_{yy}})^2} + \frac{z^2}{(\sqrt[3]{\alpha_{zz}})^2} = 1 \quad (15)$$

thì  $\hat{V}_L(\vec{r}, t)$  và  $\hat{V}_p(\vec{r}, t)$  triệt tiêu lẫn nhau nên  $\hat{V}_{LP}(\vec{r}, t)$  có giá trị bằng không.

### 3. Kết quả

Trong công trình này, để kiểm chứng lại kết quả trong [2], laser được sử dụng có 3 chu kỳ quang học, hàm bao  $\cos^2\left(\frac{\omega t}{6}\right)$ , bước sóng 800 nm cường độ  $2 \times 10^{14}$  W/cm<sup>2</sup> như được thể hiện trong Hình 2.



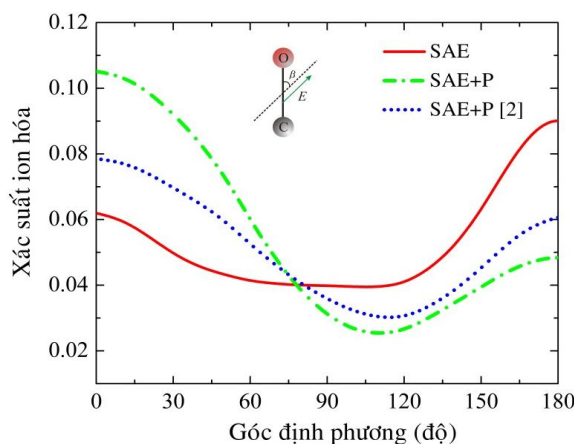
**Hình 2.** Đồ thị một xung laser có 3 chu kỳ quang học, bước sóng 800 nm cường độ  $2 \times 10^{14}$  W/cm<sup>2</sup>

Xác suất ion hóa của phân tử CO tương tác với laser được thể hiện như trong hình 3. Trong đó, “SAE” có nghĩa là mô hình điện tử độc lập mà không xét đến hiệu ứng của lõi và “SAE+P” có nghĩa là có xét đến hiệu ứng động lực học phân cực lõi với hệ số  $\alpha_{xx} = \alpha_{yy} = 6.72$  a.u.,  $\alpha_{zz} = 12.22$  a.u. được tính từ chức năng “polar” của phần mềm Gaussian, và “SAE+P [2]” có nghĩa là có tính đến ảnh hưởng của  $\hat{V}_p(\vec{r}, t)$  nhưng với hệ số  $\alpha_{xx} = \alpha_{yy} = 3.28$  a.u.,  $\alpha_{zz} = 5.32$  a.u. như trong công trình [2].

Từ kết quả trong Hình 3 có thể nhận thấy ảnh hưởng của thế phân cực là không thể bỏ qua. Nếu không tính đến  $\hat{V}_p(\vec{r}, t)$ , khoảng 6% điện tử sẽ bị ion hóa tại góc định phương  $0^0$ , sau đó xác suất này giảm nhẹ và tăng lên đến giá trị cực đại khoảng 9% khi góc định phương là  $180^0$ . Ngược lại, khi xét đến ảnh hưởng của  $\hat{V}_p(\vec{r}, t)$  với giá trị  $\alpha$  từ tính toán của chúng tôi, xác suất ion hóa đạt giá trị cực đại tại góc  $0^0$  cỡ 10,5%, giảm dần đạt giá trị cực tiểu tại góc  $120^0$  và tăng nhẹ và khi góc định phương đạt giá trị  $180^0$  thì xác suất này đạt cỡ 4,9%. Điều này có nghĩa là phân tử CO sẽ dễ bị ion hóa hơn khi laser chiếu theo chiều từ C đến O (góc định phương  $0^0$ ) so với chiều ngược lại. Điều này hoàn toàn phù hợp với các công trình lí thuyết [2] cũng như thực nghiệm đã được công bố [5, 10]. Trong [5], các tác giả sử dụng laser phân cực thẳng hai màu, còn trong [10] các tác giả sử dụng laser phân cực tròn và elip để ion hóa phân tử CO, cả hai kết quả thực nghiệm đều chỉ ra rằng phân tử CO sẽ bị ion hóa mạnh hơn khi laser chiếu từ

C đến O so với chiều ngược lại. Từ những phân tích trên cho thấy có thể sử dụng mô hình gần đúng một điện tử có tính đến ảnh hưởng của động lực học phân cực lõi để tính xác suất ion hóa của phân tử CO và ảnh hưởng của thể động lực học phân cực lõi lên xác suất ion hóa của phân tử CO cần được xét đến và không thể bỏ qua.

Xét hai trường hợp sử dụng giá trị khác nhau của  $\alpha$ , một là từ tính toán của chúng tôi và hai là từ công trình [2] đều dẫn đến cùng một kết luận là ảnh hưởng của động lực học phân cực lõi là không thể bỏ qua, sự ảnh hưởng của nó dẫn đến sự thay đổi đáng kể mật độ ion hóa tại góc  $0^0$  và  $180^0$ . Như đã phân tích ở trên, giá trị  $\alpha$  từ những tính toán của chúng tôi lớn hơn cỡ 2 lần so với giá trị trong công trình [2], dẫn đến mật độ ion hóa tại góc  $0^0$  tăng mạnh hơn và tại  $180^0$  giảm mạnh hơn. Điều này có nghĩa là giá trị  $\alpha$  càng lớn thì ảnh hưởng của nó lên mật độ ion hóa càng lớn.



**Hình 3.** Xác suất ion hóa của phân tử CO khi tương tác với laser có 3 chu kỳ quang học, bước sóng 800 nm cường độ  $2 \times 10^{14}$  W/cm<sup>2</sup>

#### 4. Kết luận

Trong công trình này, chúng tôi đã chứng minh được về mặt phương pháp có thể sử dụng mô hình gần đúng một điện tử hoạt động, tính đến ảnh hưởng của động lực học phân cực lõi để tính xác suất ion hóa của phân tử CO. Phương pháp này cần được nhân rộng và kiểm tra cho các phân tử khác. Phân tích kết quả thu được chúng tôi nhận thấy ảnh hưởng của động lực học phân cực lõi là không thể bỏ qua trong trường hợp phân tử CO. Các kết quả thu được phù hợp với các công trình lí thuyết và thực nghiệm đã công bố.

**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 TPHCM, với mã số CS.2015.19.65.

## TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Hoàng Văn Hưng (2015), “Xác suất ion hóa của mô hình phân tử phân cực trong trường laser”, *Tạp chí Khoa học Trường Đại học Sư phạm TP HCM*, 12, tr. 56.
2. Bin, Z. , Jianmin, Y., & Zhao, Z. (2013), “Dynamic core polarization in strong-field ionization of CO molecules”, *Phys. Rev. Lett.*, 111, pp. 163001.
3. Holmegaard, L., Hansen, J. L., Kalthøj, L., Kragh, S. L., Stapelfeldt, H., Filsinger, F., Küpper, J., Meijer, G., Dimitrovski, D., Abu-samha M., Martiny C. P. J., & Madsen, L. B. (2010), “Photoelectron angular distributions from strong-field ionization of oriented molecules”, *Nature Physics*, 6, pp. 428.
4. Kulander, K. C. (1987), “Time-dependent Hartree-Fock theory of multiphoton ionization: Helium”, *Phys. Rev. A*, 36, pp. 2726.
5. Li, H., Ray, D., De, S., Znakovskaya, I., Cao, W., Laurent, G., Wang, Z., Kling, M. F., Le, A. T., & 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.
6. Muth-Bohm J., Becker, A., & Faisal F. H. M. (2000), “Suppressed molecular ionization for a class of diatomics in intense femtosecond laser fields”, *Phys. Rev. Lett.*, 85, pp. 2280.
7. Petretti, S., Vanne, Y. V., Saenz, A., Castro, A., & Decleva, P. (2010), “Alignment-dependent ionization of N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, and CO<sub>2</sub> in intense laser fields”, *Phys. Rev. Lett.*, 104, pp. 223001.
8. Son, S.-K., & 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. 011403R.
9. Tong, X. M., Zhao, Z. X., & Lin, C. D. (2002), “Theory of molecular tunneling ionization”, *Phys. Rev. A*, 66, pp. 033402.
10. Wu, J. L., Schmidt, Ph. H., Kunitski, M., Meckel, M., Voss, S., Sann, H., Kim, H., Jahnke, T., Czasch, A., & Dörner, R. (2012), “Multiorbital tunneling ionization of the CO molecule”, *Phys. Rev. Lett.*, 108, pp. 183001.
11. Zhao, S. F., Jin, C., Le, A. T., Jiang, T. F., & 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: 30-9-2016; ngày phản biện đánh giá: 09-11-2016,  
ngày chấp nhận đăng: 16-12-2016)