

ĐẠI HỌC QUỐC GIA TP. HCM
TRƯỜNG ĐẠI HỌC KHOA HỌC TỰ NHIÊN

NGUYỄN THỊ HIỀN

TRÍCH XUẤT THÔNG TIN CẤU TRÚC PHÂN TỬ
TỪ PHỔ TÁI TÁN XẠ ELECTRON
DO LASER XUNG CỰC NGẮN

Ngành: **Vật lý lý thuyết và vật lý toán**

Mã số ngành: **9440103**

TÓM TẮT LUẬN ÁN TIẾN SĨ VẬT LÝ

Tp. Hồ Chí Minh - Năm 2025

Công trình được hoàn thành tại Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, ĐHQG-HCM.

Người hướng dẫn khoa học:

1. Hướng dẫn chính: PGS. TS. Phan Thị Ngọc Loan
2. Hướng dẫn phụ: GS. TS. Nguyễn Quốc Khánh

Phản biện 1: PGS.TS. Đỗ Ngọc Sơn

Phản biện 2: PGS.TS. Đinh Thị Hạnh

Phản biện 3: TS. Cao Huy Thiện

Phản biện độc lập 1: PGS.TS. Nguyễn Thị Thúy Hằng

Phản biện độc lập 2: PGS.TS. Phạm Nguyễn Thành Vinh

Luận án sẽ được bảo vệ trước Hội đồng chấm luận án cấp cơ sở đào tạo họp tại Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, vào hồi ... giờ ... ngày ... tháng ... năm 20...

Có thể tìm hiểu luận án tại thư viện:

- Thư viện Khoa học Tổng hợp TP.HCM
- Thư viện Đại học Quốc gia TP.HCM
- Thư viện Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, ĐHQG-HCM

Mục lục

Mục lục	i
1 Mở đầu	1
2 Kiểm chứng vùng làm việc và phát triển mô hình tính tiết diện tán xạ vi phân (DCS) xét đến dao động phân tử	4
2.1 Kiểm chứng vùng làm việc của mô hình nguyên tử độc lập (IAM) và lý thuyết đa tán xạ (MS)	4
2.1.1 Phương pháp mô phỏng: mô hình IAM và lý thuyết MS .	4
2.1.2 So sánh hình ảnh tán xạ của electron trên phân tử khi tính bằng mô hình IAM và lý thuyết MS	7
2.2 Phát triển lý thuyết MS có tính đến dao động phân tử	8
2.2.1 Phương pháp mô phỏng	8
2.2.2 Kết quả	9
3 Hiệu ứng dao động trong nhiễu xạ electron thông thường và nhiễu xạ electron do laser. Ứng dụng trích xuất thể năng liên nguyên tử	10
3.1 Mô hình thể Morse	10
3.2 Trích xuất thể năng liên nguyên tử từ CED	11
3.2.1 Phương pháp mô phỏng hình ảnh nhiễu xạ xét đến dao động hạt nhân	11
3.2.2 Độ nhạy của hình ảnh nhiễu xạ CED	11
3.2.3 Trích xuất thể năng phân tử từ CED	12
3.3 Hiệu ứng dao động và khả năng trích xuất thể năng phân tử từ phổ nhiễu xạ electron do laser (LIED)	13
3.3.1 Phương pháp tính dao động trong DCS trong điều kiện LIED	13
3.3.2 Hiệu ứng dao động của hình ảnh nhiễu xạ trong điều kiện LIED	14
3.3.3 Tăng cường độ nhạy của hình ảnh nhiễu xạ LIED với các tham số thể	16
4 Hiệu ứng nhiễu electron trong HHG chặn-lẻ của phân tử CO	17
4.1 Phương pháp mô phỏng phổ HHG chặn-lẻ của phân tử CO . . .	17
4.2 Ảnh hưởng của hiệu ứng DCEP lên tỷ số chặn-lẻ của HHG . . .	17

4.3	Ảnh hưởng của hiệu ứng DCEP lên trắc đồ thời gian của HHG .	19
4.4	Liên hệ giữa hiệu ứng DCEP lên trắc đồ thời gian và tỷ số chặn-lẻ HHG	20

5	Kết luận và hướng phát triển	21
----------	-------------------------------------	-----------

Danh mục các công trình công bố liên quan đến Luận án

Tài liệu tham khảo

Chương 1

Mở đầu

Nghiên cứu xác định thông tin cấu trúc của vật chất từ lâu đã thu hút sự quan tâm của các nhà khoa học. Phương pháp tán xạ electron truyền thống (Conventional Electron Diffraction - CED) [1] cho phép thu nhận thông tin của nguyên tử, phân tử với độ phân giải không gian cao. Tuy nhiên, các thông tin thu được này là "tĩnh", tức đã được trung bình bởi dao động nhiệt của phân tử trong suốt thời gian đo. Sự phát triển vượt bậc của công nghệ laser cho phép thăm dò chuyển động của electron trong nguyên tử, phân tử với độ phân giải thời gian cỡ pico giây, femto giây, và gần đây là atto giây. Khi xung laser mạnh tương tác với nguyên tử hoặc phân tử, hàng loạt hiệu ứng quang phi tuyến xảy ra. Các hiệu ứng này được hình dung trực quan qua mô hình ba bước [2]. Theo đó, (i) đầu tiên, electron bị ion hóa ra ngoài; (ii) sau đó, electron được gia tốc trong trường điện của laser và tích trữ năng lượng; (iii) tiếp theo, điện trường laser đổi chiều kéo electron quay trở về tái tán xạ trên ion mẹ. Nếu electron tái kết hợp với ion mẹ sẽ phát ra các photon có tần số cao gọi là hiệu ứng phát xạ sóng điều hòa bậc cao (High-Order Harmonic Generation - HHG) [3]. Còn nếu electron tán xạ đàn hồi trên ion mẹ sẽ thu được phổ nhiễu xạ electron do laser (Laser-Induced Electron Diffraction - LIED) [4]. Nếu electron tán xạ không đàn hồi trên ion mẹ sẽ thu được phổ ion hóa kép không liên tiếp.

Trong Luận án, chúng tôi quan tâm đến các quá trình CED, LIED và HHG.

1. Trước hết, chúng tôi nghiên cứu phương pháp trích xuất thông tin cấu trúc và động lực học của phân tử từ CED và LIED. Sở dĩ chúng tôi quan tâm đến hai quá trình này bởi chúng có mối liên hệ chặt chẽ với nhau. Cụ thể, bằng lý thuyết

tái tán xạ định lượng [4], từ phổ LIED có thể trích xuất tiết diện tán xạ vi phân (Differential Cross Section - DCS) của electron trên ion mẹ, tương tự như DCS trong CED. Từ các đo đạc CED và LIED có thể trích xuất được cấu trúc phân tử. Một trong những phương pháp trích xuất thông tin phân tử là phương pháp so sánh phù hợp (fitting), tức so sánh dữ liệu thực nghiệm với dữ liệu mô phỏng cho mỗi cấu trúc thử của phân tử. Để áp dụng phương pháp gián tiếp này, việc mô phỏng DCS bằng lý thuyết đơn giản và nhanh là quan trọng. Phương pháp đơn giản là sử dụng mô hình nguyên tử độc lập (IAM), trong đó chỉ xét đến sự giao thoa của các sóng khi electron tán xạ chỉ một lần trên các nguyên tử trong phân tử [1, 5]. Mô hình IAM chỉ phù hợp khi electron tới có năng lượng cao. Khi electron tới có năng lượng thấp, electron có thể tán xạ nhiều lần trên các nguyên tử trong phân tử. Khi này lý thuyết đa tán xạ (Multiple Scattering Theory - MS) phù hợp hơn [6, 7]. Tuy nhiên, *việc kiểm tra vùng làm việc cụ thể của hai mô hình này vẫn chưa được nghiên cứu và việc sử dụng lý thuyết MS để kiểm tra độ chính xác của mô hình IAM là cần thiết*. Bên cạnh đó, để thu được cấu trúc phân tử chính xác hơn, cần phải xét đến hiệu ứng dao động trong mô phỏng DCS. Hiện nay, *chưa có một nghiên cứu nào về lý thuyết MS khi xét đến dao động phân tử*.

2. Việc trích xuất thông tin phân tử từ đo đạc DCS trong CED đã được thực hiện khá chính xác khi áp dụng các phương pháp mô phỏng DCS xét đến dao động phân tử. Tuy vậy, trong các công trình gần đây, việc trích xuất thông tin phân tử từ DCS thu được từ LIED lại chưa xét đến dao động phân tử. Mặc dù CED và LIED bản chất đều là tán xạ electron trên phân tử, nhưng trong CED, phân tử được kích thích dao động bởi nhiệt, còn trong LIED, sự có mặt của xung laser mạnh làm thay đổi trạng thái dao động phân tử. Do đó, *cần nghiên cứu hiệu ứng dao động phân tử lên hình ảnh nhiễu xạ trong LIED*. Bên cạnh đó, nếu hiệu

ứng dao động lên CED hoặc LIED là đáng kể thì *liệu có thể trích xuất thế năng liên nguyên tử từ DCS thu được từ CED và LIED không?*

3. Ngoài LIED, chúng tôi cũng quan tâm đến quá trình phát xạ HHG. Để tính được HHG, về bản chất là phải giải phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian (Time-Dependent Schrödinger Equation - TDSE). Để giải trực tiếp TDSE, phân tử nhiều electron thường được xét trong mô hình một electron hoạt động (Single-Active-Electron Model - SAE), nhằm giảm chi phí tính toán. Trong mô hình SAE, electron lớp ngoài cùng sẽ chuyển động trong thế năng hiệu dụng tạo bởi hạt nhân và các electron còn lại bị "đóng băng", được gọi là các electron-lõi. Tuy nhiên, một số đo đạc thực nghiệm gần đây cho các hiệu ứng quang phi tuyến phát ra từ các phân tử có độ phân cực lớn lại không thể giải thích được bằng lý thuyết khi sử dụng mô hình SAE. Điều này đặt ra câu hỏi liệu electron-lõi có thực sự bị "đóng băng". Cách tiếp cận để kiểm chứng ảnh hưởng của hiệu ứng nhiều electron, đó là thêm vào phương trình TDSE thành phần mô tả hiệu ứng phân cực động lõi-electron (Dynamic Core-Electron Polarization - DCEP) [8]. Nghiên cứu lý thuyết đã chỉ ra DCEP ảnh hưởng đến cường độ của bậc điều hòa tại vị trí giao thoa cực tiểu [9, 10] và điểm dừng [11] của phổ HHG. Nói cách khác, DCEP làm ảnh hưởng tới cường độ và hình dạng của phổ HHG, tuy nhiên, những sự thay đổi này nhỏ nên khó có thể kiểm chứng bằng các đo đạc thực nghiệm. Cho đến nay, *vẫn chưa có thể kiểm chứng được hiệu ứng DCEP trên phổ HHG bằng các đo đạc thực nghiệm.*

Một khía cạnh quan trọng khác của phổ HHG là bậc điều hòa, tức là tỷ số giữa tần số HHG và tần số laser chiếu vào. Nếu xung laser đủ dài chiếu vào phân tử bất đối xứng, phổ HHG sẽ có cả bậc điều hòa chẵn và lẻ [12, 13]. Để đặc trưng hóa phổ HHG chẵn-lẻ, đại lượng "tỷ số chẵn-lẻ" được định nghĩa là tỷ số giữa

cường độ HHG của bậc chẵn và trung bình của hai bậc lẻ liền kề [12]. Tuy vậy, *bản chất của tỷ số chẵn-lẻ của HHG và khả năng dùng nó để đặc trưng cho tính chất bất đối xứng của hệ laser-phân tử vẫn chưa được làm rõ.*

Mục tiêu của Luận án là trích xuất thông tin cấu trúc phân tử từ phổ tái tán xạ (LIED và HHG) thu được khi phân tử tương tác với laser mạnh xung cực ngắn.

Nội dung nghiên cứu cụ thể như sau: (1) Phát triển phương pháp tính DCS của electron tán xạ trên phân tử khi không xét và có xét tới dao động phân tử. Trước tiên, chúng tôi sẽ kiểm chứng tính chính xác của mô hình IAM. Chúng tôi làm rõ vùng làm việc của mô hình IAM và lý thuyết MS. Sau đó, chúng tôi phát triển lý thuyết MS để tính DCS của electron tán xạ trên phân tử dao động; (2) Nghiên cứu ảnh hưởng của hiệu ứng dao động phân tử lên hình ảnh nhiễu xạ của electron trên phân tử trong hai trường hợp CED và LIED. Từ đó, chúng tôi đánh giá khả năng trích xuất thông tin thể năng liên nguyên tử từ phổ CED và LIED; (3) Nghiên cứu ảnh hưởng của hiệu ứng DCEP lên tỷ số chẵn-lẻ của HHG cho phân tử CO khi tương tác với xung laser. Chúng tôi sẽ không chỉ phân tích về mặt lý thuyết mà còn so sánh với các dữ liệu đo đạc thực nghiệm sẵn có.

Chương 2

Kiểm chứng vùng làm việc và phát triển mô hình tính tiết diện tán xạ vi phân (DCS) xét đến dao động phân tử

2.1 Kiểm chứng vùng làm việc của mô hình nguyên tử độc lập (IAM) và lý thuyết đa tán xạ (MS)

2.1.1 Phương pháp mô phỏng: mô hình IAM và lý thuyết MS

Mô hình IAM là mô hình đơn giản nhất để tính DCS của electron tán xạ trên phân tử. Mô hình này giả thiết phân tử là tập hợp của các nguyên tử được xem

gần đúng như các nguyên tử độc lập, còn các hiệu ứng liên kết hóa học và tán xạ nhiều lần bị bỏ qua. Khi đó, electron tới chỉ tán xạ một lần trên mỗi nguyên tử. Điều này chỉ phù hợp khi electron tới có năng lượng cao [1]. Do đó, biên độ tán xạ của electron trên phân tử bằng

$$F = \sum_j f_j e^{is\mathbf{R}_j}, \quad (2.1)$$

trong đó f_j là biên độ tán xạ của nguyên tử j có tọa độ là $\mathbf{R}_j$.

Vì trong đo đặc CED, các phân tử của bia được định phương hoặc định hướng ngẫu nhiên trong không gian, nên DCS của phân tử được xác định bằng cách lấy trung bình theo không gian của bình phương mô đun biên độ tán xạ phân tử theo biểu thức sau

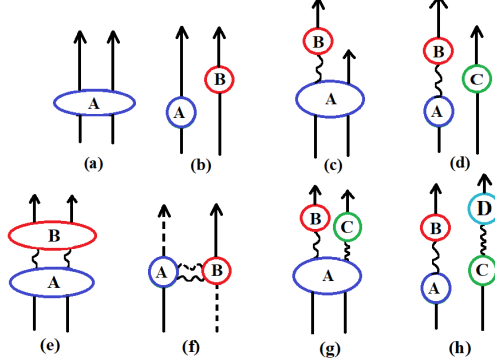
$$I_{\text{tot}} \equiv \frac{d\sigma}{d\Omega} = \langle F^2 \rangle = I_a + I_{\text{mol}} \quad (2.2)$$

trong đó $I_a = \sum_j f_j^2$ là tổng DCS không kết hợp của tất cả các tán xạ bậc nhất của electron trên các nguyên tử thành phần, còn $I_{\text{mol}} = \sum_{i \neq j} f_i f_j^* \langle e^{is\mathbf{R}_{ij}} \rangle = \sum_{i \neq j} f_i f_j^* \frac{\sin(sR_{ij})}{sR_{ij}}$, thể hiện sự giao thoa của sóng tán xạ trên từng cặp nguyên tử của phân tử, với $\mathbf{R}_{ij} = \mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j$. Hai số hạng I_a và I_{mol} được thể hiện trong Hình 2.1(a) và 2.1(b).

Vì chỉ có số hạng I_{mol} chứa thông tin cấu trúc phân tử, còn số hạng I_a chỉ là phonon nền, nên để tăng độ nhạy trong quá trình trích xuất cấu trúc phân tử, thay vì sử dụng DCS, người ta thường quan tâm đến yếu tố tương phản phân tử (Molecular Contrast Factor-MCF) được tính bằng

$$M(s) = \frac{I_{\text{tot}} - I_a}{I_a} = \frac{I_{\text{mol}}}{I_a}. \quad (2.3)$$

Ngoài ra, một đại lượng khác cũng thường sử dụng trong tán xạ electron-phân tử là $sM(s)$, được tính bằng tích của $M(s)$ với giá trị độ lớn của vector truyền động lượng s (là hiệu của vector sóng electron tán xạ và sóng electron tới).



Hình 2.1. Các số hạng trong mô hình IAM [(a)-(b)] và lý thuyết MS [(a)-(h)].

Như đã trình bày ở trên, mô hình IAM phù hợp khi năng lượng của electron tới cao. Tuy nhiên, khi năng lượng của electron tới thấp, mô hình IAM không còn cho giá trị DCS phù hợp [14]. Khi electron tới có năng lượng thấp, electron có thể tán xạ nhiều lần trên các nguyên tử trong phân tử trước khi đến máy thu [6]. Do đó, các nhà khoa học đã mở rộng mô hình IAM về mặt giải tích bằng cách thêm vào một loạt các thành phần mô tả hiệu ứng tán xạ bậc cao và gọi là *lý thuyết đa tán xạ (MS)* [6, 7]. Theo đó, DCS của phân tử được xác định bởi

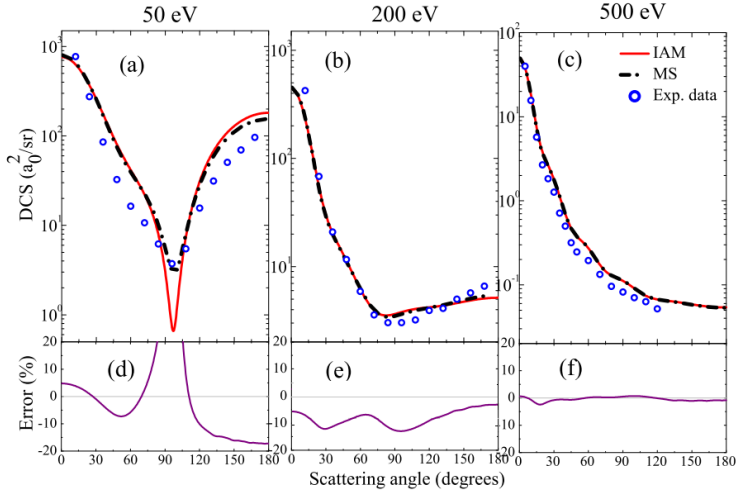
$$I_{MS} = I_a + I_{SS} + I_{SD1} + I_{SD2} + I_{DD} + I_{DD1}, \quad (2.4)$$

trong đó I_{SD1} và I_{SD2} thể hiện sự giao thoa giữa tán xạ bậc một và bậc hai như trên Hình 2.1(c), 2.1(d). Còn I_{DD} và I_{DD1} mô tả giao thoa không kết hợp và kết hợp giữa các tán xạ bậc hai như Hình 2.1[(e)-(h)].

2.1.2 So sánh hình ảnh tán xạ của electron trên phân tử khi tính bằng mô hình IAM và lý thuyết MS

Để xác định vùng làm việc của mô hình IAM và MS, chúng tôi so sánh DCS tính bằng hai mô hình này cho phân tử O_2 tán xạ bởi các electron tới có năng lượng khác nhau. Bên cạnh đó, chúng tôi cũng so sánh kết quả mô phỏng này với dữ liệu thực nghiệm được lấy từ tài liệu [15, 16]. Hình 2.2(a) cho thấy, khi electron tới có năng lượng thấp (50 eV), có sự khác biệt giữa DCS tính bằng mô hình IAM và lý thuyết MS, hơn nữa, mô hình MS phù hợp với dữ liệu thực nghiệm hơn so với mô hình IAM. Còn trên Hình 2.2[(b)-(c)] cho năng lượng tán xạ càng cao (200 eV và 500 eV), mô hình IAM và lý thuyết MS cho DCS giống nhau, và phù hợp với dữ liệu thực nghiệm. Chúng tôi định lượng sự khác biệt giữa DCS tính bằng mô hình IAM và lý thuyết MS, và biểu diễn trên Hình 2.2[(d)-(f)]. Kết quả cho thấy, năng lượng tán xạ càng cao, DCS tính bằng MS càng gần với DCS tính bằng IAM.

Tiếp tục, chúng tôi nghiên cứu sự khác biệt giữa DCS tính từ IAM và MS khi năng lượng của electron tới thay đổi liên tục từ 50 eV tới 700 eV. Kết quả cho thấy, với năng lượng electron tới thấp, sự sai khác giữa DCS tính bằng IAM và MS là đáng kể. Nguyên nhân là do tán xạ bậc cao đóng góp đáng kể vào DCS, dẫn đến lý thuyết MS cho kết quả gần với dữ liệu thực nghiệm hơn so với mô hình IAM. Do đó, lý thuyết MS cần được sử dụng để tính hình ảnh tán xạ electron-phân tử tại vùng năng lượng thấp. Khi năng lượng của electron tới lớn hơn, sự khác biệt giữa DCS tính bằng hai mô hình giảm đi nhanh chóng. Khi năng lượng electron tới lớn hơn 230 eV, sự sai khác cực đại giữa hai mô hình là nhỏ hơn 10 %. Khi này, mô hình IAM cho kết quả tin cậy.



Hình 2.2. DCS tính bằng mô hình IAM và MS, so sánh với dữ liệu thực nghiệm khi phân tử O_2 tán xạ bởi electron tới với năng lượng 50 eV (a), 200 eV (b) và 500 eV (c) (hàng trên). Dữ liệu thực nghiệm được lấy từ tài liệu [15, 16].

2.2 Phát triển lý thuyết MS có tính đến dao động phân tử

2.2.1 Phương pháp mô phỏng

Để tính DCS của phân tử O_2 bằng lý thuyết MS xét đến dao động phân tử, chúng tôi sử dụng công thức sau

$$I_{tot}^v = \int_{-\infty}^{\infty} P(r, T) I_{tot}(r) dr, \quad (2.5)$$

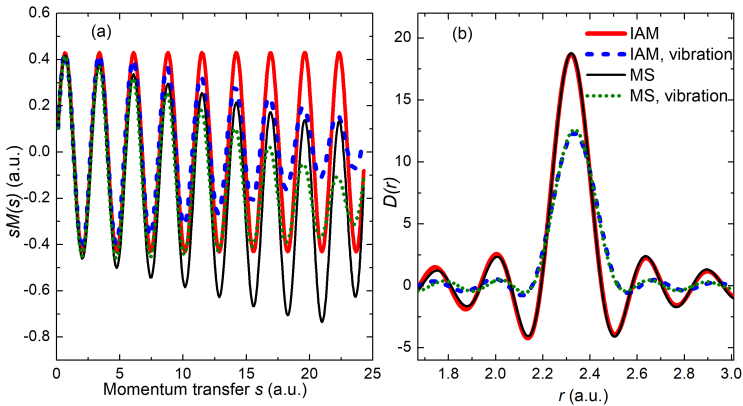
trong đó $I_{tot}(r)$ được tính bằng lý thuyết MS theo công thức (2.4). Trường hợp tính bằng mô hình IAM để đối chiếu, $I_{tot}(r)$ được tính theo công thức (2.2). Phân bố xác suất dao động $P(r, T)$ được tính bằng

$$P(r, T) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n(T) |\psi_n(r)|^2, \quad (2.6)$$

với $f_n(T)$ là hàm phân bố Boltzmann trên các mức dao động khi hệ phân tử đang ở trạng thái cân bằng nhiệt ở nhiệt độ T . Hàm sóng dao động $\psi_n(r)$ được giải từ phương trình Schrödinger mô tả hạt nhân O_2 đang dao động trong thế năng phân tử. Phương trình này được chúng tôi giải bằng phương pháp thời gian ảo.

2.2.2 Kết quả

Đường cong $sM(s)$ tính bằng lý thuyết MS khi xét và không xét đến dao động hạt nhân cho năng lượng tán xạ 2000 eV được thể hiện trên Hình 2.3 (a). Để so sánh, chúng tôi cũng trình bày $sM(s)$ tính bằng mô hình IAM. Kết quả cho thấy dao động hạt nhân làm thay đổi đường cong $sM(s)$ so với trường hợp bỏ qua dao động hạt nhân. Cụ thể, dao động hạt nhân làm hạ thấp cường độ đỉnh, và làm tăng bề rộng của mỗi đỉnh của đường cong $sM(s)$. Mức độ suy giảm của biên độ $sM(s)$ gây ra bởi dao động trong mô hình IAM và MS là tương đương nhau.



Hình 2.3. Đường cong tán xạ phân tử $sM(s)$ (a) và hàm phân bố xuyên tâm $D(r)$ (b) của O_2 khi xét đến và bỏ qua hiệu ứng dao động hạt nhân. Kết quả được tính bằng mô hình IAM và MS với năng lượng tán xạ 2000 eV. Đường cong $D(r)$ được tính bằng mô hình IAM và MS phù hợp với nhau.

Các thông tin cấu trúc phân tử, và tham số dao động có thể được trích xuất

trực tiếp từ đường cong phân bố xuyên tâm $D(r)$ được tính từ phép biến đổi Fourier của $sM(s)$, tức là $D(r) = \int_0^\infty sM(s) \sin sr ds$. Để kiểm tra tính chính xác của lý thuyết MS xét đến dao động hạt nhân trong việc trích xuất cấu trúc phân tử, chúng tôi trích xuất khoảng cách liên hạt nhân từ $D(r)$ với năng lượng tán xạ 2000 eV. Hình 2.3 (b) biểu diễn đường $D(r)$ khi tính bằng mô hình IAM và MS khi xét và không xét đến dao động hạt nhân. Hình vẽ chỉ ra khi không xét đến dao động hạt nhân, vị trí của đỉnh là 1.230 Å, trùng với dữ liệu đầu vào của phần mềm GAUSSIAN dùng để mô phỏng DCS. Khi xét đến dao động hạt nhân, ngoài việc làm cho các đỉnh này bị "nhòe", dao động hạt nhân còn làm dịch vị trí đỉnh đến 1.237 Å do tính phi điều hòa của thế năng phân tử [1]. Giá trị này phù hợp với dự đoán lý thuyết $r_a = \langle r^{-1} \rangle^{-1} = 1.236$ Å. Ngoài ra, đường $D(r)$ tính bằng mô hình MS và IAM hoàn toàn phù hợp với nhau. Do đó, lý thuyết MS xét đến dao động hạt nhân là tin cậy.

Chương 3

Hiệu ứng dao động trong nhiễu xạ electron thông thường và nhiễu xạ electron do laser. Ứng dụng trích xuất thế năng liên nguyên tử

3.1 Mô hình thế Morse

Thế Morse được tham số hóa bởi ba tham số theo biểu thức sau

$$V(x) = D_e [1 - e^{-\alpha(x-x_e)}]^2, \quad (3.1)$$

trong đó x_e là khoảng cách liên nguyên tử ở trạng thái cân bằng, D_e là độ sâu giếng thế của phân tử, và α là tham số đặc trưng cho tính phi điều hòa.

3.2 Trích xuất thể năng liên nguyên tử từ CED

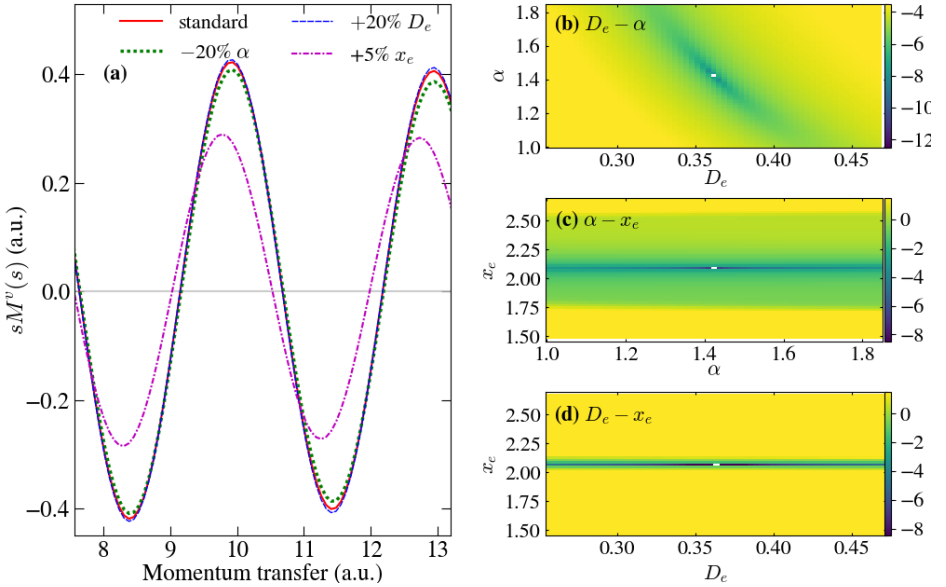
3.2.1 Phương pháp mô phỏng hình ảnh nhiễu xạ xét đến dao động hạt nhân

Để mô phỏng DCS của electron tán xạ trên phân tử N_2 , chúng tôi sử dụng mô hình IAM theo các công thức (2.2)-(2.3). Để tính DCS của phân tử N_2 xét đến dao động hạt nhân, chúng tôi sử dụng công thức (2.5), trong đó phân bố xác suất dao động nhiệt $P(r, T)$ được tính từ công thức (2.6) với $f_n(T)$ là phân bố Boltzmann. Hàm sóng dao động là hàm giải tích mô tả chuyển động của hạt nhân trong thế Morse (3.1). Ngoài DCS, chúng tôi cũng tính các đại lượng thứ cấp của DCS (MCF, $sM(s)$) bằng mô hình IAM theo công thức (2.3).

3.2.2 Độ nhạy của hình ảnh nhiễu xạ CED

Điều kiện tiên quyết để trích xuất thông tin là các hình ảnh nhiễu xạ phải nhạy với sự thay đổi thể năng phân tử. Đầu tiên, chúng tôi đánh giá sơ bộ độ nhạy bằng cách kiểm tra hình ảnh nhiễu xạ đối với sự thay đổi của một tham số của thế Morse (trong khi giữ nguyên các tham số khác). Chúng tôi tăng dần độ thay đổi của tham số thể, kết quả cho thấy x_e nhạy hơn nhiều so với D_e và α . Vì vậy, để biểu diễn chúng tôi chọn x_e thay đổi 5%, còn D_e và α thay đổi 20% là đủ để thấy được sự thay đổi của $sM^v(s)$, như được thể hiện ở Hình 3.1(a). Hình 3.1(a) thể hiện $sM^v(s)$ của CED xét đến hiệu ứng dao động, khi các electron có năng lượng tới 20 keV tán xạ với khí N_2 tại góc tán xạ nhỏ trong khoảng $[0^\circ, 20^\circ]$. Hình 3.1(a) cho thấy $sM^v(s)$ nhạy nhất với sự thay đổi của x_e ; đặc biệt, chu kỳ dao động bị thay đổi đáng kể. Ngoài ra, $sM^v(s)$ cũng nhạy đối với sự thay đổi của D_e và α . Tuy nhiên, việc thay đổi D_e và α chỉ điều chỉnh biên độ của $sM^v(s)$ ở các điểm cực trị.

Để định lượng hóa độ nhạy, chúng tôi xác định hàm mục tiêu cho $sM^v(s)$



Hình 3.1. Đường $sM^v(s)$ (a) và hàm mục tiêu A tính từ $sM^v(s)$ [(b)-(d)] của CED từ N_2 khi thay đổi các tham số thể. Hình (a): tăng D_e , giảm α đi 20%, hoặc kéo giãn x_e thêm 5%. Hình [(b)-(d)]: hàm mục tiêu khi thay đổi từng cặp tham số thể. Điểm trắng ở giữa biểu thị các giá trị mong đợi (giá trị tiêu chuẩn).

có dạng $A = \sum_s |sM^v(s) - \hat{sM}^v(s)|$, với $sM^v(s)$ và $\hat{sM}^v(s)$ lần lượt là giá trị thử nghiệm và giá trị kỳ vọng tại mỗi giá trị của s . Tiếp theo, chúng tôi khảo sát A khi thay đổi từng cặp tham số thể năng trong khi cố định tham số còn lại ở giá trị tiêu chuẩn. Hình 3.1 [(b)-(d)] chỉ ra rằng A rất nhạy với các tham số thể năng; tuy nhiên, mức độ nhạy là khác nhau đối với các tham số khác nhau. Cụ thể, A hội tụ đối với x_e nhanh hơn nhiều so với D_e và α , và α hội tụ nhanh hơn D_e .

3.2.3 Trích xuất thể năng phân tử từ CED

Chúng tôi tiến hành trích xuất các tham số thể năng phân tử từ DCS ($sM(s)$) đo đạc thực nghiệm. Tuy nhiên, vì không có dữ liệu thực nghiệm, chúng tôi sẽ mô phỏng DCS cho phân tử N_2 với các giá trị tiêu chuẩn, coi nó là dữ liệu "thực

nghiệm", sau đó trích xuất ngược lại các tham số thể năng từ dữ liệu DCS này. Chúng tôi sử dụng thuật toán di truyền (GA) nhằm tối ưu quá trình trích xuất.

Kết quả trích xuất các tham số thể năng x_e , D_e và α trong mười lần thực hiện GA được thể hiện trong Bảng 3.1. Bên cạnh đó, các giá trị trung bình của chúng cùng với sai số tiêu chuẩn trong khoảng tin cậy 95% (TB) và sự khác biệt của chúng so với các giá trị tiêu chuẩn (Δ) cũng được trình bày trên Bảng 3.1. Thoạt nhìn, Bảng 3.1 cho thấy các tham số thể năng đều có thể được trích xuất với độ chính xác cao và sai số tiêu chuẩn nhỏ. Điều đó có nghĩa là quy trình trích xuất hoạt động chính xác và ổn định. Hơn nữa, thứ bậc của độ chính xác hoàn toàn phù hợp với thứ bậc của độ nhạy như đã thảo luận trong mục 3.2.2. Cụ thể, việc trích xuất x_e chính xác hơn so với việc trích xuất hai tham số thể năng còn lại vì đây là đại lượng nhạy nhất. Việc trích xuất α chính xác hơn một chút so với D_e do độ nhạy tương ứng của chúng.

Tuy nhiên, xem xét chi tiết hơn, Bảng 3.1 cho thấy độ chính xác của α và D_e được trích xuất hoàn toàn phụ thuộc vào độ chính xác của x_e . Ví dụ, ở lần thực hiện thứ năm trong Bảng 3.1, khi độ chính xác của x_e giảm đi một chút sẽ dẫn đến chênh lệch của α và D_e tăng lên khá nhiều. Điều đó ngụ ý việc trích xuất α và D_e là khả thi chỉ khi $s\hat{M}^v(s)$ được đo với độ chính xác cao.

3.3 Hiệu ứng dao động và khả năng trích xuất thể năng phân tử từ phổ nhiễu xạ electron do laser (LIED)

3.3.1 Phương pháp tính dao động trong DCS trong điều kiện LIED

Một trong những điểm khác biệt quan trọng nhất so với CED là trong LIED, các electron không được chuẩn bị trong phòng thí nghiệm mà bị ion hóa từ các phân tử do sự tương tác của xung laser cường độ cao. Do đó, DCS, cũng như $sM(s)$ phải được tính đến trọng số là tốc độ ion hóa phụ thuộc vào góc. Hơn nữa,

Bảng 3.1. Trích xuất các tham số thế của N_2 từ CED (20 keV, 300 K, $[0^\circ, 20^\circ]$). Các tham số mục tiêu là $x_e = 2.0749$ a.u., $\alpha = 1.424$ a.u., $D_e = 0.364$ a.u.

STT	x_e	α	D_e
1	2.0745	1.4699	0.3421
2	2.0756	1.3454	0.4068
3	2.0755	1.3564	0.4001
4	2.0745	1.4741	0.3389
5	2.0737	1.5527	0.3076
6	2.0750	1.4077	0.3713
7	2.0759	1.3080	0.4302
8	2.0754	1.3751	0.3896
9	2.0749	1.4220	0.3650
10	2.0756	1.3321	0.4152
TB	2.07506	1.40434	0.37668
	± 0.00048	± 0.05470	± 0.02774
Δ	0.008%	1.38%	3.48%

dao động cần phải được đưa vào DCS theo như công thức (2.5); tuy nhiên, trong LIED, sự hiện diện của xung laser cường độ cao sẽ gây ra dao động phân tử chứ không phải là dao động nhiệt như trong CED.

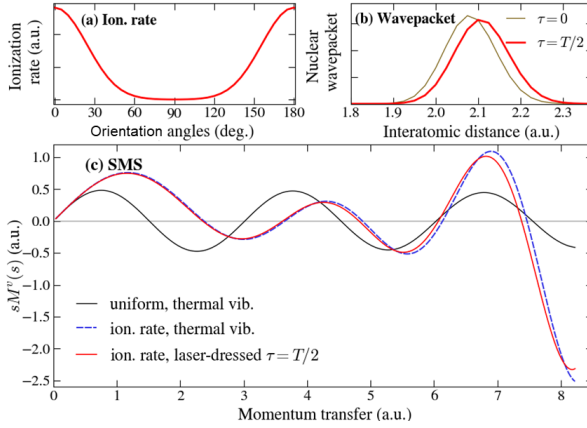
Theo công trình [17], hàm sóng dao động phụ thuộc thời gian $\psi(x, t)$ là nghiệm của phương trình Schrödinger của phân tử trong trường laser

$$i \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \left[-\frac{1}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) - \frac{1}{2} \sum_{ij} \beta_{ij}(x) E_i(t) E_j(t) \right] \psi(x, t), \quad (3.2)$$

trong đó μ là khối lượng rút gọn của hạt nhân, $V(x)$ là thế năng phân tử, $\beta_{ij}(x)$ là tensor phân cực của electron lõi của phân tử trung hòa. Phương trình (3.2) được giải bằng phương pháp tách toán tử [18]. Từ đó, chúng tôi thu được xác suất dao động $P(x, t) = |\psi(x, t)|^2$, và thu được DCS theo công thức (2.5).

3.3.2 Hiệu ứng dao động của hình ảnh nhiễu xạ trong điều kiện LIED

Chúng tôi mô phỏng $sM^v(s)$ trong điều kiện LIED với laser có cường độ 2.9×10^{14} W/cm², bước sóng 2300 nm, độ dài xung bảy chu kỳ. Laser này sẽ tạo ra electron có năng lượng khoảng 230 eV khi tái va chạm. Xác suất của các bó sóng dao động ở giữa xung ($\tau = T/2$) cho thấy sự tiến hóa theo thời gian đáng

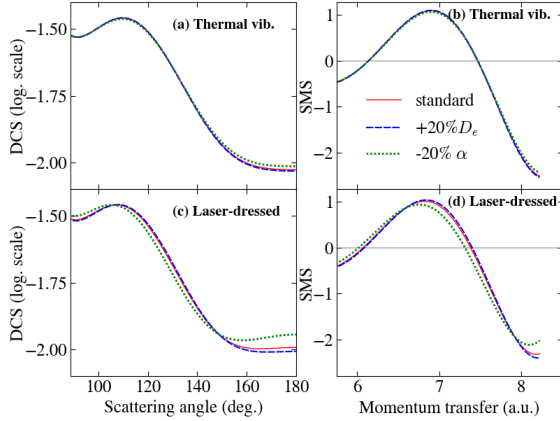


Hình 3.2. Tốc độ ion hóa phụ thuộc vào góc định phương (a) và xác suất của bó sóng dao động phân tử ở đầu ($\tau = 0$) và giữa ($\tau = T/2$) xung laser (b) khi N_2 tương tác với laser. Hình (c) trình bày $sM^v(s)$ của electron bị ion hóa, có năng lượng tại thời điểm tán xạ 230 eV trên N_2 trong ba trường hợp: N_2 ở 100 K và electron tới phân tử với góc ngẫu nhiên (màu đen) hoặc theo phân bố phụ thuộc vào góc theo tốc độ ion hóa (màu xanh); hoặc bao gồm cả tốc độ ion hóa và xác suất của các bó sóng dao động gây ra bởi laser tại thời điểm giữa xung (màu đỏ).

chú ý so với thời điểm ban đầu ($\tau = 0$) được biểu diễn trên Hình 3.2(b). Để đánh giá hiệu ứng dao động, Hình 3.2(c) trình bày $sM^v(s)$ cho ba kịch bản: (i) xác suất của bó sóng dao động gây ra bởi dao động nhiệt ở 100 K, các electron tới phân tử với góc ngẫu nhiên như điều kiện CED (màu đen); (ii) dao động nhiệt, nhưng tốc độ ion hóa phụ thuộc vào góc (màu xanh); (iii) xác suất của bó sóng dao động gây ra bởi laser tại thời điểm giữa xung và tốc độ ion hóa phụ thuộc vào góc, như điều kiện LIED (màu đỏ). Hình 3.2(c) cho thấy khác với $sM^v(s)$ của CED có dạng dao động điều hòa với biên độ giảm theo hàm mũ (màu đen) [1], trong LIED, việc tính đến tốc độ ion hóa phụ thuộc vào góc (màu đỏ) làm tăng đáng kể $sM^v(s)$ tại giá trị của s gần bằng 0 và giá trị cực đại. Ngoài ra, so sánh đường màu đỏ và màu xanh cho thấy sự tiến hóa theo thời gian của xác suất của bó sóng dao động do laser gây ra làm thay đổi $sM^v(s)$ đáng kể tại giá trị của vector truyền

động lượng s lớn. Do đó, nhờ có laser, sự thay đổi lớn của $sM^v(s)$ tại giá trị của s lớn sẽ có thể có ích trong việc trích xuất tham số thế.

3.3.3 Tăng cường độ nhạy của hình ảnh nhiễu xạ LIED với các tham số thế



Hình 3.3. Độ nhạy của DCS [(a), (c)] và $sM^v(s)$ [(b), (d)] của các electron có năng lượng 230 eV tán xạ trên phân tử N_2 khi thay đổi các tham số thế năng trong đó xác suất của các bó sóng dao động phân tử được tạo ra bằng hai cách: dao động nhiệt ở 100 K [(a), (b)] và bằng xung laser (tại $\tau = T/2$) [(c), (d)].

Chúng tôi tiếp tục kiểm tra độ nhạy của hình ảnh nhiễu xạ trong điều kiện LIED, với sự thay đổi của thế năng liên nguyên tử. Hình 3.3[(c)-(d)] trình bày các đường DCS và $sM^v(s)$ khi thay đổi các tham số thế năng α và D_e thêm 20% Hình vẽ cho thấy sự dao động gây ra bởi laser giúp tăng cường độ nhạy của hình ảnh nhiễu xạ. Ngay cả DCS, vốn rất khó phát hiện độ nhạy trong CED thì trong điều kiện LIED, DCS thay đổi đáng kể khi thay đổi α và D_e , đặc biệt ở góc tán xạ lớn [Hình 3.3(c)]. Do đó, $sM^v(s)$ tại giá trị của s cao bị thay đổi đáng kể [Hình 3.3(d)]. Đặc biệt, khi thay đổi α và D_e , thì $sM^v(s)$ không chỉ bị thay đổi ở các cực trị của $sM^v(s)$ như đối với CED [Hình 3.1(a)], mà còn thay đổi hình dạng và chu kỳ dao động của $sM^v(s)$.

Nguyên nhân của sự thay đổi này là do laser đã thay đổi đáng kể bó sóng

dao động phân tử cả về vị trí trung bình và độ rộng bó sóng [Hình 3.2(b)]. Để giải thích, chúng tôi phân tích hệ số đóng góp trên từng trạng thái kích thích và thấy rằng xung laser kích thích hạt nhân nhảy lên các mức dao động cao (mức kích thích 1-4). Điều này khác với CED chỉ với dao động nhiệt, hạt nhân chủ yếu nằm ở trạng thái cơ bản. Do đó, sự hiện diện của xung laser cường độ cao trong LIED giúp tăng cường độ nhạy về cường độ, hình dạng và chu kỳ dao động của hình ảnh nhiễu xạ với sự thay đổi tham số thể. Vì vậy, có thể khôi phục thể liên nguyên tử từ hình ảnh nhiễu xạ LIED mà không cần yêu cầu chặt chẽ về độ chính xác như trong CED.

Chương 4

Hiệu ứng nhiễu electron trong HHG chắn-lẻ của phân tử CO

4.1 Phương pháp mô phỏng phổ HHG chắn-lẻ của phân tử CO

Để tính HHG phát ra từ phân tử CO, chúng tôi áp dụng phương pháp giải số phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian (TDSE) sử dụng gần đúng SAE [19]. Để nghiên cứu hiệu ứng phân cực DCEP lên phổ HHG, chúng tôi thêm vào TDSE thành phần thế năng phân cực DCEP

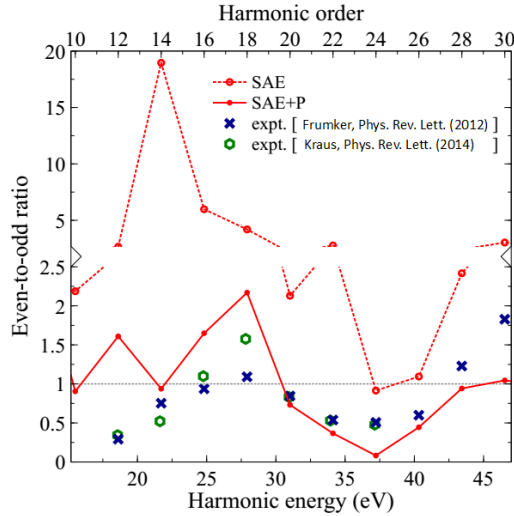
$$V_p(\mathbf{r}, t) = -\frac{\mathbf{E}(t)\hat{\alpha}_c\mathbf{r}}{r^3}, \quad (4.1)$$

với $\hat{\alpha}_c$ là tensor phân cực của electron lõi.

4.2 Ảnh hưởng của hiệu ứng DCEP lên tỷ số chắn-lẻ của HHG

Trước hết, chúng tôi nghiên cứu ảnh hưởng của hiệu ứng DCEP lên tỷ số HHG chắn-lẻ của CO khi góc định hướng 0° . Trên Hình 4.1, chúng tôi so sánh tỷ số HHG chắn-lẻ bằng phương pháp TDSE cho CO khi bỏ qua và tính đến DCEP. Ở đây, tỷ số HHG chắn lẻ được tính bằng tỷ số của cường độ bậc chắn chia cho

trung bình cường độ của hai bậc lẻ liền kề. Xung laser được sử dụng có 10 chu kỳ, bước sóng 800 nm, cường độ 1.5×10^{14} W/cm². Trên Hình 4.1, chúng tôi cũng biểu diễn dữ liệu thực nghiệm đã được công bố trước đó trong các công trình [12, 13]. Hình 4.1 cho thấy DCEP làm thay đổi tỷ số HHG chẵn-lẻ lên đến từ 5-10 lần. Hơn nữa, chỉ khi tính đến DCEP mới làm cho tỷ số HHG chẵn-lẻ phù hợp với dữ liệu thực nghiệm cả về cường độ và hình dạng. Đặc biệt, chúng tôi cũng quan sát thấy vị trí cực đại tại 28 eV gây ra do hiện tượng cộng hưởng hình dạng [20]. Sau đó, chúng tôi cũng tiến hành nghiên cứu ảnh hưởng của DCEP lên các góc định hướng khác và thu được kết quả tương tự rằng DCEP ảnh hưởng đáng kể đến tỷ số HHG chẵn-lẻ. Như vậy, hiệu ứng DCEP lên tỷ số HHG chẵn-lẻ rất rõ rệt.



Hình 4.1. Tỷ số HHG chẵn-lẻ của CO khi mô phỏng bằng TDSE, có xét đến DCEP (SAE+P) và bỏ qua DCEP (SAE). Dữ liệu thực nghiệm lấy từ [12, 13].

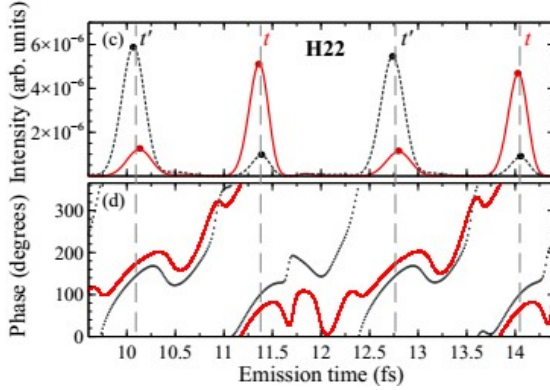
4.3 Ảnh hưởng của hiệu ứng DCEP lên trắc đồ thời gian của HHG

Để giải thích ảnh hưởng rõ rệt của DCEP theo tỷ số HHG chẵn-lẻ, chúng tôi tìm hiểu nguyên nhân gây ra sóng điều hòa chẵn và lẻ. Về bản chất, sự tạo sóng điều hòa là sự giao thoa kết hợp của các xung atto gây được phát ra cách nhau nửa chu kỳ laser [3]. Về mặt toán học có thể biểu diễn biên độ phức của sóng điều hòa có tần số $n\omega_0$ (ω_0 là tần số laser) là $A(n) = A_1(n) - A_2(n)e^{-i\pi n}$, trong đó $A_1(n)$ và $A_2(n)$ là biên độ phức của sóng điều hòa phát ra từ hai đầu của phân tử CO [12]. Kết quả là, các sóng điều hòa lẻ (chẵn) được gây ra bởi sự giao thoa tăng cường (triệt tiêu) của hai xung atto gây liên tiếp. Do đó, chúng tôi có thể rút ra được độ lớn của tỷ số HHG chẵn-lẻ

$$\eta(n) = 1 - \frac{2 \kappa(n) \cos \Delta \phi(n)}{1 + \kappa(n) \cos \Delta \phi(n)}, \quad (4.2)$$

trong đó $\kappa(n) = \frac{2|A_1(n)| |A_2(n)|}{|A_1(n)|^2 + |A_2(n)|^2} \in [0, 1]$ là độ mất cân bằng cường độ giữa hai xung atto gây liên tiếp và $\Delta \phi(n)$ là độ lệch pha giữa chúng. Biên độ phức của các xung atto gây $A_1(n)$, $A_2(n)$ có thể thu được từ gia tốc lưỡng cực cảm ứng $a(t)$ (thu được từ phương trình TDSE) thông qua phép biến đổi thời gian-tần số như phép biến đổi Gabor $A(\omega, t) = \int dt' a(t') \frac{\exp[-(t' - t)^2 / 2\sigma^2]}{\sigma \sqrt{2\pi}} \exp(i\omega t')$.

Trên Hình 4.2, chúng tôi biểu diễn cường độ và pha của trắc đồ thời gian khi có và không có DCEP ở bậc 22. Hình 4.2(a) cho thấy DCEP làm tăng cường độ xung atto gây phát ra tại thời điểm $t \approx (1.25 + k)T_0$ (với $k = 1 - 8$ và T_0 là chu kỳ laser), trong khi gần như loại bỏ các xung cách đó nửa chu kỳ, $t' \approx (1.76 + k)T_0$. Mặc dù trường hợp SAE thể hiện độ mất cân bằng cường độ lớn, nhưng khi xét thêm DCEP, cường độ trắc đồ thời gian hoàn toàn ngược lại với trường hợp SAE. Tương tự như cường độ, pha của trắc đồ thời gian cũng thay đổi đáng kể khi tính

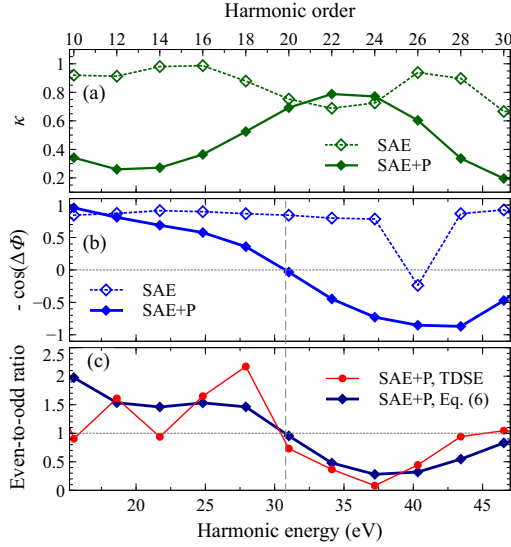


Hình 4.2. Cường độ (c) và pha (d) của trắc đồ thời gian cho bậc HHG 22 được mô phỏng từ phương trình TDSE khi bỏ qua (SAE) và xét đến DCEP (SAE+P).

đến DCEP, như được thể hiện trong Hình 4.2(b). Hai xung $\sim 4.25T_0$ và $\sim 4.76T_0$ gần như cùng pha ($\Delta\Phi \approx 44^\circ$) trong trường hợp SAE. Tuy nhiên, trong trường hợp SAE+P, độ lệch pha trở thành ngược pha ($\Delta\Phi \approx 107^\circ$).

4.4 Liên hệ giữa hiệu ứng DCEP lên trắc đồ thời gian và tỷ số chặn-lẻ HHG

Từ ảnh hưởng rõ rệt của DCEP lên trắc đồ thời gian, chúng tôi chỉ ra nó chính là nguyên nhân mà DCEP ảnh hưởng đến tỷ số chặn-lẻ. Trên Hình 4.3, chúng tôi biểu diễn các thành phần của công thức (4.2), $\kappa(n)$ và $-\cos\Delta\phi(n)$. Các thành phần này được tính từ hai xung atto giây phát ra tại $4.76T_0$ và $5.25T_0$. Hình 4.3(a) cho thấy DCEP không chỉ biến điệu $\kappa(n)$ theo năng lượng sóng điều hòa mà còn giảm đáng kể về cường độ. Ngoài sự mất cân bằng cường độ, việc bỏ qua DCEP còn làm sai lệch đáng kể độ lệch pha giữa hai xung atto giây liên tiếp [Hình 4.3(b)]. Trên Hình 4.3(c), chúng tôi biểu diễn tỷ số HHG chặn-lẻ được xây dựng lại từ các thành phần $\kappa(n)$ và $-\cos\Delta\phi(n)$ của các xung atto giây liên kế bằng cách sử dụng công thức (4.2). Các thành phần đều được tính đến DCEP. Kết quả cho thấy tỷ số HHG chặn-lẻ xây dựng lại từ công thức (4.2) rất phù hợp



Hình 4.3. Giá trị của $\kappa(n)$ (a) và $-\cos\Delta\phi(n)$ (b) của hai xung atto giây liên kế phát ra tại $4.76T_0$ và $5.25T_0$ cho các trường hợp không xét DCEP (SAE) và xét đến DCEP (SAE+P). Trong Hình (c), tỷ số HHG chẵn-lẻ được tính bằng công thức (4.2), sau đó được so sánh với kết quả từ giải phương trình TDSE khi xét đến DCEP.

với kết quả tính được từ phương trình TDSE cả về cường độ và hình dạng. Điều thú vị là các Hình 4.3(b) và 4.3 (c) cho thấy $-\cos\Delta\phi(n)$ và tỷ lệ chẵn lẻ có cùng dạng biến điệu. Như vậy, chúng tôi kết luận rằng DCEP hiệu chỉnh cường độ và pha của các xung atto giây, làm cho tỷ số HHG chẵn-lẻ thay đổi đáng kể, phù hợp hơn với thực nghiệm.

Chương 5

Kết luận và hướng phát triển

Kết luận: Luận án đã hoàn thành việc trích xuất thông tin phân tử từ phổ tái tán xạ của electron trên phân tử, bao gồm phổ LIED và HHG, khi phân tử tương tác với laser mạnh, xung cực ngắn. Các thông tin phân tử ở đây bao gồm cấu trúc hình học và dao động của phân tử từ phổ LIED, và thông tin đặc trưng cho phân

tử phân cực từ phổ HHG.

1. Đã phát triển được phương pháp tính tiết diện tán xạ vi phân (DCS) khi electron tán xạ trên phân tử có xét đến dao động phân tử. Đầu tiên, chúng tôi đã làm rõ được vùng làm việc của mô hình IAM và lý thuyết MS. Lý thuyết MS nên được áp dụng khi các electron tới có năng lượng thấp tán xạ trên phân tử. Ngược lại, khi electron tới có năng lượng cao, mô hình IAM cho kết quả chính xác và phù hợp với DCS tính bằng lý thuyết MS. Sau đó, chúng tôi đã phát triển lý thuyết MS có tính đến dao động phân tử. Các thông tin cấu trúc và thông tin dao động trích xuất được từ mô hình IAM và lý thuyết MS xét đến dao động hoàn toàn phù hợp với nhau ở vùng năng lượng electron tới cao.

2. Đã khảo sát hiệu ứng dao động lên hình ảnh nhiễu xạ của electron trên phân tử trong điều kiện CED và LIED, và chỉ ra khả năng sử dụng các hình ảnh nhiễu xạ này để trích xuất thế năng liên nguyên tử. Kết quả cho thấy trong điều kiện CED, có khả năng trích xuất được thế năng liên nguyên tử, tuy nhiên, yêu cầu phép đo đặc hình ảnh nhiễu xạ phải có độ chính xác cao. Còn trong điều kiện LIED, sau khi xây dựng phương pháp mô phỏng hiệu ứng dao động gây ra bởi laser, chúng tôi đã chỉ ra rằng sự hiện diện của các laser cường độ cao làm mở rộng các bó sóng dao động phân tử theo thời gian và kích thích hạt nhân lên mức dao động cao hơn, dẫn đến hình ảnh nhiễu xạ của LIED thay đổi nhiều so với trường hợp CED. Điều đó giúp cho có thể trích xuất được thế năng tương tác từ nhiễu xạ LIED.

3. Đã chỉ ra tỷ số HHG chắn-lẻ là đại lượng đặc trưng nội tại cho phân tử phân cực và chỉ ra ảnh hưởng đáng kể của DCEP lên tỷ số HHG chắn-lẻ của phân tử CO. Hiệu ứng DCEP ảnh hưởng đến cả cường độ và hình dạng của tỷ số HHG chắn-lẻ. Chỉ khi xét đến hiệu ứng DCEP, tỷ số HHG chắn-lẻ mới phù

hợp với dữ liệu thực nghiệm. Chúng tôi cũng chỉ ra nguyên nhân là DCEP làm thay đổi cường độ và đặc biệt là pha trong trắc đồ thời gian.

Hướng phát triển: Chúng tôi sẽ tiếp tục mở rộng bài toán trích xuất thông tin dao động phân tử khi sử dụng xung laser có bước sóng ngắn và sử dụng lý thuyết MS để tính toán DCS của phân tử. Bên cạnh đó, chúng tôi tiếp tục mở rộng bài toán trích xuất thông tin cấu trúc của phân tử từ phổ LIED khi có mặt cả hai xung laser: xung bơm và xung thăm dò. Ngoài ra, chúng tôi đang xem xét ảnh hưởng của các orbital lõi lên HHG. Bên cạnh đó, nghiên cứu cho các phân tử lớn hơn, không thẳng đang được tiến hành.

Danh mục các công trình công bố liên quan đến Luận án

1. **Hien T. Nguyen**, Doan-An Trieu, Duong D. Hoang-Trong, Van-Hoang Le, and Ngoc-Loan Phan, Vibrational Effect in Conventional and Laser-Induced Electron Diffractions, Journal of the Optical Society of America B 41 (9) (2024) 2165.
2. **Hien T. Nguyen**, Kim-Ngan H. Nguyen, Ngoc-Loan Phan, Cam-Tu Le, DinhDuy Vu, Lan-Phuong Tran, and Van-Hoang Le, Imprints of Multi-electron Polarization Effects in Odd-Even Harmonic Generation from CO Molecules, Physical Review A 105 (2022) 0231061.
3. **Hien T. Nguyen**, Ngoc-Loan Phan, Multiple Scattering Model Considering the Vibration Effect, Journal of Physics: Conference Series 1506 (2020) 0120071.
4. Ngoc-Loan Phan, **Hien T. Nguyen**, Sensitivity of Gas-Phase Electron Diffraction Images to the Molecular Potential Parameters, Journal of Physics: Conference Series 1506 (2020) 0120061.
5. **Hien T. Nguyen**, Ngoc-Loan Phan, Effect of the Potential within Single-Active-Electron Approximation on High-Order Harmonic Generation from CO Molecule, HCMUE Journal of Science 17 (3) (2020) 509.

Tài liệu tham khảo

- [1] K. Yamanouchi, Quantum Mechanics of Molecular Structures, Springer, New York, (2012).

- [2] P. B. Corkum, Phys. Rev. Lett. 71 (1993) 1994.
- [3] M. Lewenstein, P. Balcou, M. Y. Ivanov, A. L'Huillier, P. B. Corkum, Phys. Rev. A 49 (1994) 2117.
- [4] Z. Chen, A.-T. Le, T. Morishita, C. D. Lin, Phys. Rev. A 79 (2009) 033409.
- [5] N. F. Mott, H. S. W. Massey, The Theory of Atomic Collisions, Oxford, England, (1949).
- [6] S. Hayashi, K. Kuchitsu, J. Phys. Soc. Jpn. 41 (5) (1976) 1724.
- [7] D.-D. T. Vu, N.-L. T. Phan, V.-H. Hoang, V.-H. Le, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 50 (24) (2017) 245101.
- [8] Z. Zhao, T. Brabec, J. Mod. Opt. 54 (7) (2007) 981.
- [9] B. Zhang, J. Yuan, Z. Zhao, Phys. Rev. A 90 (2014) 035402.
- [10] C.-T. Le, D.-D. Vu, C. Ngo, V.-H. Le, Phys. Rev. A 100 (5) (2019) 053418.
- [11] C.-T. Le, V.-H. Hoang, L.-P. Tran, V.-H. Le, Phys. Rev. A 97 (2018) 043405.
- [12] E. Frumker, N. Kajumba, J. B. Bertrand, H. J. Wörner, C. T. Hebeisen, et al., Phys. Rev. Lett. 109 (2012) 233904.
- [13] P. M. Kraus, D. Baykusheva, H. J. Wörner, Phys. Rev. Lett. 113 (2014) 023001.
- [14] X. Li, J. Zhu, Y. Zuo, Y. Li, EPJ Web Conf. 239 (2020) 08005.
- [15] T. W. Shyn, W. E. Sharp, Phys. Rev. A 26 (1982) 1369.
- [16] I. Iga, L. Mu-Tao, J. C. Nogueira, R. S. Barbieri, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 20 (1987) 1095.
- [17] A.-T. Le, T. Morishita, R. R. Lucchese, C. D. Lin, Phys. Rev. Lett. 109 (2012) 203004.
- [18] M. Feit, J. Fleck, A. Steiger, J. Comput. Phys. 47 (3) (1982) 412.
- [19] M. Abu-samha, L. B. Madsen, Phys. Rev. A 81 (2010) 033416.
- [20] E. W. Plummer, T. Gustafsson, W. Gudat, D. E. Eastman, Phys. Rev. A 15 (1977) 2339.