

ВЕРОЯТНОСТИ ПЕРЕХОДОВ ВРАЩАЮЩЕГОСЯ ОСЦИЛЛЯТОРА ПОД ДЕЙСТВИЕМ ВНЕШНЕЙ СИЛЫ

© 2003 г. М. Л. Стрекалов

Институт химической кинетики и горения Сибирского отделения Российской академии наук, Новосибирск

Поступила в редакцию 10.01.2002

Получены формулы связи вероятностей переходов вращающегося осциллятора с вероятностями переходов из первоначально возбужденного состояния в основное состояние. Для этих выражений установлены асимптотические формулы и рассчитаны необходимые моменты.

1. ВВЕДЕНИЕ

Как известно, при столкновениях тяжелых молекул возбуждается большое число квантовых состояний, поэтому формулы связи, устанавливающие аналитические соотношения между вероятностями переходов, становятся очень полезным инструментом изучения колебательно-вращательной релаксации [1]. В общем случае свойство факторизации вероятностей проявляется в том, что вероятность произвольного перехода может быть представлена как сумма вероятностей “базовых” переходов с довольно сложными коэффициентами, которые для вращательно-неупругих столкновений были рассчитаны в явном виде [2–4]. Если факторизация имеет место для вероятностей переходов, то это свойство легко обобщается на дифференциальные и интегральные сечения, а также на константы скорости переходов. С физической точки зрения факторизация возникает из-за неадиабатической природы вращательной релаксации, т.е. выполняется приближенно для внезапных столкновений [2–6]. Поэтому сюрпризом стал вывод формулы факторизации для гармонического осциллятора, у которого это свойство выполняется строго вне зависимости от величины параметра адиабатичности [7]. Однако для ангармонического осциллятора, возбуждаемого внешней силой, факторизация имеет место уже приближенно, причем по параметру ангармонизма [7].

Обобщение формул связи на случай переходов между колебательно-вращательными состояниями двухатомных молекул предпринималось ранее [5]. Однако из теории не следует случай гармонического осциллятора и, более того, сумма вероятностей всех переходов не равна единице. В настоящей работе этот недостаток будет устранен. При этом главное внимание будет сосредоточено на выводе асимптотических формул связи, позволяющих получать аналитические выражения для констант скорости колебательно-вращательных

переходов, располагая информацией о зависимости базовых скоростей от квантовых чисел.

2. ФАКТОРИЗАЦИЯ ВЕРОЯТНОСТЕЙ V-T-ПЕРЕХОДОВ, ВКЛЮЧАЯ ВРАЩЕНИЕ

Рассмотрим неупругое столкновение двухатомной молекулы в состоянии $|njm\rangle$ с атомом, в результате которого она оказывается в состоянии $|n'j'm'\rangle$, где n – колебательное квантовое число и j, m – вращательные квантовые числа. Потенциал взаимодействия запишем как обычно:

$$V(r, R, \gamma) = \sum_{\lambda=0} V_{\lambda}(r, R) P_{\lambda}(\cos \gamma), \quad (1)$$

где r – расстояние между атомами в молекуле, R – расстояние между атомом и центром масс молекулы, γ – угол между осью молекулы и радиус-вектором атома. Гамильтониан для нашей задачи имеет вид

$$H = \frac{m}{2}(x^2 + \omega^2 x^2) + B\mathbf{J}^2 + V(r_{eq}, R, \gamma) - xf(t), \quad (2)$$

где m – приведенная масса молекулы, $B = \hbar^2/2mr_{eq}^2$ – вращательная постоянная, $x = r - r_{eq}$ – смещение, $f(t)$ – внешняя сила:

$$f(t) = - \sum_{\lambda=0} \left(\frac{\partial V_{\lambda}}{\partial r} \right)_{eq} P_{\lambda}(\cos \gamma). \quad (3)$$

Такое представление соответствует разложению потенциала по степеням малой амплитуды колебаний. Слагаемое $V_0(r_{eq}, R)$ определяет траекторию относительного движения $R(t)$. Во вращающейся системе отсчета с осью \mathbf{z} , всегда направленной по радиус-вектору $\mathbf{R}(t)$, угол γ не зависит от времени.

Экспоненциальное представление для матрицы рассеяния примечательно тем, что уже первое слагаемое в ряде Магнуса дает точное решение для гармонического осциллятора под действием

внешней силы [8]. Хорошо известное в литературе приближение внезапных столкновений соответствует в пределе $\omega_R \tau_c \ll 1$ также первому члену этого разложения [6, 9]. Здесь ω_R – характерная частота вращения молекулы, τ_c – время столкновения. Не останавливаясь на деталях (см. подробности в [6, 8]), приведем известный результат:

$$S = \exp \left[-i \sum_{\lambda} \delta_{\lambda} P_{\lambda}(\cos \gamma) + i \left(\frac{2m\omega}{\hbar} \right)^{1/2} A(\gamma)x \right], \quad (4)$$

где δ_{λ} – фаза, набегаящая вдоль классической траектории в потенциале $V_{\lambda}(R)$,

$$\delta_{\lambda} = \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} V_{\lambda}[r_{eq}, R(t)] dt, \quad (5)$$

а сдвиг колебательной фазы $A(\gamma)$ определяется возмущающей силой

$$A(\gamma) = -\frac{1}{\hbar} \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{1/2} \times \sum_{\lambda=0}^p P_{\lambda}(\cos \gamma) \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\partial V_{\lambda}}{\partial r} \right)_{eq} \cos \omega t dt. \quad (6)$$

Теперь разложим матрицу рассеяния в двойной ряд по подходящей системе ортогональных полиномов:

$$S = \sum_{N, J=0}^{\infty} (2J+1) P_J(\cos \gamma) S_{NJ} \varphi_N(x) / \varphi_0(x), \quad (7)$$

где $\varphi_n(x)$ – волновые функции гармонического осциллятора. Выражение для амплитуды вероятности колебательного перехода N–O находится просто:

$$\left\langle \varphi_N \left| \exp \left[i \left(\frac{2m\omega}{\hbar} \right)^{1/2} Ax \right] \right| \varphi_0 \right\rangle = \frac{(iA)^N}{\sqrt{N!}} \exp \left(-\frac{A^2}{2} \right), \quad (8)$$

поэтому коэффициенты разложения можно записать в развернутом виде:

$$S_{NJ} = \frac{i^N}{2\sqrt{N!}} \int_{-1}^{+1} A(\gamma)^N \times \exp \left[-i \sum_{\lambda} \delta_{\lambda} P_{\lambda}(\cos \gamma) - \frac{A(\gamma)^2}{2} \right] P_J(\cos \gamma) d(\cos \gamma). \quad (9)$$

Принимая во внимание известное выражение для интеграла от трех сферических функций [10, стр. 131], находим элементы матрицы рассеяния:

$$\langle njm | S | n' j' m' \rangle = (-1)^m [(2j+1)(2j'+1)]^{1/2} \times \sum_{NJ} (2J+1) \begin{pmatrix} j & j' & J \\ -m & m' & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j & j' & J \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} I_{nn'N} S_{NJ}, \quad (10)$$

где выражение в круглых скобках – 3j-символ [10] и через $I_{nn'N}$ обозначен интеграл перекрытия:

$$I_{nn'N} = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_n(x) \varphi_{n'}(x) \varphi_N(x) / \varphi_0(x) dx. \quad (11)$$

После усреднения по всем начальным проекциям вращательного углового момента и суммирования по всем конечным получаем вероятности $n_j \rightarrow n' j'$ переходов:

$$P_{n_j \rightarrow n' j'} = (2j'+1) \times \sum_{J=|j-j'|}^{j+j'} (2J+1) \begin{pmatrix} j & j' & J \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \left| \sum_{N=|n-n'|}^{n+n'} I_{nn'N} S_{NJ} \right|^2. \quad (12)$$

В рамках приближения внезапных столкновений по вращательным степеням свободы формулы, подобные (12), выводились неоднократно (см., например, [4]), и дальнейшее продвижение возможно только путем задания зависимости коэффициентов разложения от колебательного квантового числа N . Это и было сделано в (9).

Введем определение для функции от переменной A :

$$F(n, n', A) = \sum_{N=|n-n'|}^{n+n'} I_{nn'N} \frac{(iA)^N}{\sqrt{N!}}. \quad (13)$$

Тогда сумму по N в (12) можно записать как

$$\sum_N I_{nn'N} S_{NJ} = \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} F(n, n', A) \times \exp \left[-i \sum_{\lambda} \delta_{\lambda} P_{\lambda}(\cos \gamma) - \frac{A^2}{2} \right] P_J(\cos \gamma) d(\cos \gamma). \quad (14)$$

Следующая формула является ключевой для дальнейшего продвижения и прямо следует из результатов работы [7]:

$$|F(n, n', A)|^2 = \sum_{N=|n-n'|}^{n+n'} C_{nn'N} \frac{A^{2N}}{N!}. \quad (15)$$

Здесь

$$C_{nn'N} = (-1)^{n+n'+N} \times \sum_k \begin{pmatrix} N \\ k - n_{>} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_{<} \\ k - N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_{>} \\ k - n_{<} \end{pmatrix}, \quad (16)$$

где $n_< = \min(n, n')$ и $n_> = \max(n, n')$, причем область суммирования по индексу k ограничена неравенствами

$$\max(n_>, N) \leq k \leq \min(n_< + N, n + n'). \quad (17)$$

Свойства коэффициентов C подробно исследованы в [7]. Обратимся теперь к уравнению (6). Совершенно ясно, что для слабо анизотропного взаимодействия молекулы с атомом основной вклад в сдвиг колебательной фазы дает изотропная часть потенциала, и зависимость $A(\gamma)$ от угла γ является слабовыраженной. С другой стороны, при значительной анизотропии взаимодействия, например для химически активных частиц, эффективны для возбуждения колебаний только столкновения с $\gamma \approx 0$ (или π). В обоих случаях из (14) с учетом соотношения (15) приближенно получаем

$$\left| \sum_N I_{nn'N} S_{NJ} \right|^2 = \sum_N C_{nn'N} |S_{NJ}|^2. \quad (18)$$

В результате для вероятностей колебательно-вращательных переходов находим факторизованное выражение:

$$P_{nj \rightarrow n'j'} = (2j' + 1) \times \sum_{NJ} (2J + 1) \begin{pmatrix} j & j' & J \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 C_{nn'N} P_{NJ \rightarrow 00}. \quad (19)$$

В этой связи отметим, что в [5] в качестве коэффициентов $C_{nn'N}$ фигурировали величины $(I_{nn'N})^2$, для которых сумма по любому из индексов не равна единице, как это должно вытекать из унитарности S -матрицы.

Исследуем несколько частных случаев, следующих из общей формулы. Рассмотрим возбуждение вращений в основном колебательном состоянии. Из (20) непосредственно получаем

$$P_{0j \rightarrow 0j'} = (2j' + 1) \sum_J (2J + 1) \begin{pmatrix} j & j' & J \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 P_{0J \rightarrow 00}, \quad (20)$$

где

$$P_{0j \rightarrow 00} = \left| \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} P_j(\cos \gamma) \exp \left[-i \sum_{\lambda} \delta_{\lambda} P_{\lambda}(\cos \gamma) - \frac{A(\gamma)^2}{2} \right] d(\cos \gamma) \right|^2. \quad (21)$$

Об обычного выражения для базовых вероятностей, полученных в приближении жесткого ротатора [6], найденные вероятности отличаются наличием в экспоненте слагаемого $A(\gamma)^2/2$. Как мы увидим ниже, величина $A(\gamma)^2$ равно переданной на колебательные степени свободы энергии (в единицах $\hbar\omega$) при заданной геометрии столкновения. Как правило, эта величина мала и малб ее влияние на вращательные переходы. Для большинства ситуаций вращательное равновесие достигается задолго до наступления равновесия по колебательным степеням свободы, поэтому интерес представляют вероятности переходов, усредненные по всем начальным j и просуммированные по всем конечным j' , а именно:

$$P_{n \rightarrow n'} = \sum_N C_{nn'N} \int_{-1}^{+1} P_{N \rightarrow 0}(\gamma) \frac{d(\cos \gamma)}{2}, \quad (22)$$

где базовые вероятности переходов есть

$$P_{N \rightarrow 0}(\gamma) = \frac{A(\gamma)^{2N}}{N!} \exp(-A(\gamma)^2). \quad (23)$$

При выводе (23) было использовано свойство полноты полиномов Лежандра. Следует заметить, что для невращающегося осциллятора (коллинеарные столкновения) формула связи вида (23) является точной [7].

Наконец, рассчитаем переданную на колебательные степени свободы энергию за одно столкновение (формулы суммирования приведены ниже),

$$\langle \Delta E \rangle = \sum_{n'} (E_{n'} - E_n) P_{n \rightarrow n'} = \hbar\omega \int_{-1}^{+1} A(\gamma)^2 \frac{d(\cos \gamma)}{2} = \frac{1}{2m} \sum_{\lambda=0}^{+\infty} \frac{1}{2\lambda + 1} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\partial V_{\lambda}}{\partial r} \right)_{eq} \cos \omega t dt \right]^2. \quad (24)$$

Это ожидаемый для гармонического осциллятора результат, так как величина $\langle \Delta E \rangle$ получается такой, какую дает классическая механика.

3. ВЫЧИСЛЕНИЕ МОМЕНТОВ. АСИМПТОТИЧЕСКИЕ ФОРМУЛЫ СВЯЗИ

Для чистого вращения вероятности базовых переходов $P_{j \rightarrow 0}$ зависят как от номера враща-

тельного уровня J , так и от его энергии E_J (переданной энергии). В неадиабатических условиях зависимость от J слабая, так что вероятность перехода есть функция $P[J(J+1)]$. С другой стороны, вращательное движение молекул в газе практически всегда классично (большие j, j'). В этой ситуации сумму по J в (21) можно заменить интегралом, чтобы получить выражение, пригодное для нахождения аналитических формул, моделирующих зависимость вероятностей от вращательных квантовых чисел j, j' [11, 12]:

$$\sum_J (2J+1) \begin{pmatrix} j & j' & J \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 P[J(J+1)] = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi P(\varepsilon_j - 2\sqrt{\varepsilon_j \varepsilon_{j'}} \cos \varphi + \varepsilon_{j'}) d\varphi, \quad (25)$$

где $\varepsilon_j = j(j+1)$ и $\varepsilon_{j'} = j'(j'+1)$. Так как прямое восстановление $P_{J \rightarrow 0}$ из экспериментальных данных не всегда возможно, то вероятности (или константы скорости) задают на основании физических соображений в виде функциональной зависимости от J с небольшим числом подгоночных параметров (см. обзоры [13–15]). Затем из (26) можно, в принципе, получить аналитическое выражение для $P_{j \rightarrow j'}$ с тем же самым набором подгоночных параметров. Такие закономерности удобны для сжатого представления экспериментальных данных по константам скорости [13–17].

В настоящей работе свойство факторизации вероятностей колебательно-вращательных переходов, установленное в (20), (23), будет использовано для получения асимптотических формул связи, пригодных для описания V - T -релаксации высоковозбужденных колебательных состояний молекул. Начнем с вычисления моментов

$$M_q(n, n') = \sum_{N=|n-n'|}^{n+n'} C_{nn'N} N^q, \quad (26)$$

где q – целое положительное число. Нулевой и первый моменты были рассчитаны в [7]:

$$M_0 = 1, \quad M_1 = n + n'. \quad (27)$$

Чтобы рассчитать последующие моменты, придем к сведению ряд соображений общего характера. Во-первых, $M_q(n, n')$ есть полином, симметричный по переменным n, n' , степени не выше q . Во-вторых, из свойства $C_{0nN} = \delta_{nN}$ вытекает равенство $M_q(0, n') = n'^q$ и аналогичное по переменной n . В-третьих, $M_q(0, 0) = 0$. Таким образом, второй момент можно представить в виде

$$M_2(n, n') = n^2 + n'^2 + ann'. \quad (28)$$

Рассчитав выражение слева прямо из определения (27) при частных значениях n, n' , например $M_2(1, 1) = 6$, получаем уравнение с одним неизвестным, которое дает $a = 4$. Этим простым способом можно вычислить моменты более высокого порядка:

$$M_3 = n^3 + n'^3 + 9(n^2 n' + n n'^2) - 6nn', \quad (29)$$

$$M_4 = n^4 + n'^4 + 16(n^3 n' + n n'^3) + 36n^2 n'^2 - 30(n^2 n' + n n'^2) + 20nn'. \quad (30)$$

Далее замечаем, что при больших n, n' основной вклад в M_q дают слагаемые $n^s n'^s$ с $s + s' = q$. Анализ выражений (28)–(31) подсказывает результат. Асимптотическая формула для M_q имеет вид

$$M_q(n, n') \approx \sum_{k=0}^q \binom{q}{k} n^k n'^{q-k}. \quad (31)$$

Этот результат прямо следует из рекуррентного соотношения для моментов в пределе больших n, n' , но из-за громоздкости вывода мы ограничимся здесь “физическим” уровнем строгости. Заметим, что нулевой, первый и второй моменты рассчитываются по этой формуле точно. Сумму (32) можно представить в виде интеграла [18, стр. 415]:

$$\sum_{k=0}^q \binom{q}{k} n^k n'^{q-k} = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi (n - 2\sqrt{nn'} \cos \varphi + n')^q d\varphi. \quad (32)$$

Следовательно, если функция $R_{N \rightarrow 0} = P(N)$ разлагается в сходящийся ряд Тейлора, то при больших n, n' можно записать приближенное равенство:

$$\sum_{N=|n-n'|}^{n+n'} C_{nn'N} P(N) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi (n - 2\sqrt{nn'} \cos \varphi + n') d\varphi. \quad (33)$$

Выражение в правой части (34) является равномерной аппроксимацией конечной суммы в левой части. Так, при $n = 0$ или $n' = 0$ равенство (34) обращается в тождество.

Формула связи (34), выведенная для вероятностей колебательных переходов, очень похожа на аналогичную формулу (26) для вероятностей вращательных переходов. Если вспомнить, что для уровней колебательной энергии $\varepsilon_n \propto n$, то сходство результатов (34) и (26) становится полным. Но есть и различия. Так, в отличие от случая гармонического осциллятора, переданная на вращательные степени свободы энергия зависит от начального вращательного квантового числа, и эта зависимость утрачивается только в неадиабатическом

пределе [19]. Если теперь базовые вероятности переходов $NJ \rightarrow 00$ представить функцией от

двух переменных: $P[N, J(J+1)]$, то с учетом (26) и (34) сразу получаем

$$\sum_{N=|n-n'|}^{n+n'} C_{nn'N} \sum_{J=|j-j'|}^{j+j'} (2J+1) \begin{pmatrix} j & j' & J \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 P[N, J(J+1)] =$$

$$= \frac{1}{\pi^2} \int_0^\pi d\varphi_1 \int_0^\pi d\varphi_2 P(n - 2\sqrt{nn'} \cos \varphi_1 + n', \varepsilon_j - 2\sqrt{\varepsilon_j \varepsilon_{j'}} \cos \varphi_2 + \varepsilon_{j'}).$$
(34)

Формулы связи выведены в приближении гармонического осциллятора и справедливы для больших квантовых чисел, т.е. для высоковозбужденных колебательных состояний. Для реальных молекул энергии этих состояний перестают линейно зависеть от n из-за ангармонизма колебаний. Однако замечательной особенностью коэффициентов C является их независимость от деталей внутри- и межмолекулярного взаимодействий. Так, коэффициенты $C^{(M)}$ для осциллятора Морзе определяются только динамической алгеброй $SU(2)$

[7]. При этом учет ангармонизма в формуле связи (23) наряду с изменением функционального вида базовых вероятностей сводится к введению под знак суммы поправочной функции $A(n, n', N; 1/x_0)$, поскольку выражение для коэффициентов $C^{(M)}$ (см. в [7] уравнение (38)) можно переписать как

$$C_{nn'N}^{(M)} = A(n, n', N; M) C_{nn'N}, \quad (35)$$

где

$$A(n, n', N; M) = \frac{(M-n)!(M-n')!(M-N)!}{M![(M-k_1)!(M-k_2)!(M-s+k_1)!(M-s+k_2)!]^{1/2}}. \quad (36)$$

Здесь $M = [1/x_0]$ и x_0 – параметр ангармонизма молекулы; для краткости введено обозначение $s = n + n' + N$, а также

$$k_1 = \max(n_>, N, s - M),$$

$$k_2 = \min(n_< + N, n + n', M). \quad (37)$$

Следует отметить, что приближенное равенство (36) выполняется тем лучше, чем больше M . Однако при фиксированных n и N первых два разрешенных по индексу n' коэффициента и два последних даются формулой (37) точно при любом M . При характерном значении параметра ангармонизма $1/x_0 \approx 160$, присущем таким молекулам, как N_2 , CO и т.д., поправочная функция практически не отличается от единицы, если $n, n', N \ll 1/x_0$. С другой стороны, учитывая ограничения, которые накладываются выбором модели, можно указать следующие уточнения теории:

1) рассмотрение умеренно неадиабатических вращательных столкновений с конечной величиной параметра адиабатичности $\omega_R \tau_c$;

2) учет изменения относительной энергии столкновения путем симметризации параметров траектории.

Обычная практика учета этих эффектов состоит в исправлении базовых вероятностей переходов путем умножения их на адиабатический корректирующий фактор $A(n, j, n', j', N, J)$, кото-

рый зависит от частоты вращения молекулы, времени столкновения, константы ангармонизма и переданной энергии как от параметров [5, 7, 13–15, 20]. Следовательно, располагая информацией о зависимости $A(N)P_{N \rightarrow 0}$ от N для реальной молекулы, можно с помощью формул связи прогнозировать зависимость вероятностей переходов от колебательных квантовых чисел. Мы отложим эту задачу на будущее вместе с конкретными приложениями теории. Здесь же обратим внимание на другую возможность формул связи. Полученные на их основе выражения для компактного представления опытных данных позволяют применять их при численном моделировании условий, в которых реальный эксперимент провести трудно или невозможно. При таком моделировании гораздо легче просмотреть возможные ситуации и выбрать из них ту, которая представляет интерес для исследований в лаборатории.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Никитин Е.Е., Осунов А.И. // Итоги науки и техники. Кинетика и катализ. М.: ВИНТИ, 1977. Т. 4.
2. Goldflam R., Green S., Kouri D.J. // J. Chem. Phys. 1977. V. 67. № 9. P. 4149.
3. Varshalovich D.A., Khersonsky V.R. // Astrophys. Lett. 1977. V. 18. P. 167.

4. *Parker G.A., Pack R.T.* // J. Chem. Phys. 1978. V. 68. № 4. P. 1585.
5. *DePristo A.E., Augustin S.D., Ramaswamy R., Rabitz H.* // J. Chem. Phys. 1979. V. 71. № 2. P. 850.
6. *Стрекалов М.Л.* // Оптика и спектроскопия. 1980. Т. 49. № 1. С. 36.
7. *Korsch H.J., Ernesti A., Nunez J.A.* // J. Phys. B. 1992. V. 25. P. 773.
8. *Pechukas P., Light J.C.* // J. Chem. Phys. 1966. V. 44. № 10. P. 3897.
9. *Дыхне А.М., Юдин Г.Л.* // УФН. 1978. Т. 125. № 3. С. 377.
10. *Варшалович Д.А., Москалев А.Н., Херсонский В.К.* Квантовая теория углового момента. М.: Наука, 1975.
11. *Стрекалов М.Л.* // Хим. физика. 1992. Т. 11. № 10. С. 1315.
12. *Strekalov M.L.* // Chem. Phys. Lett. 1996. V. 256. № 1. P. 149.
13. *Brunner T.A., Pritchard D.E.* // Advan. Chem. Phys. 1982. V. 50. P. 589.
14. *Steinfeld J.I., Ruttenger P., Millot G. et al.* // J. Phys. Chem. 1991. V. 95. № 24. P. 9638.
15. *Богданов А.В., Дубровский Г.В., Осипов А.И.* // Хим. физика. 1985. Т. 4. № 9. С. 1155.
16. *Sharafutdinov R.G., Belikov A.E., Strekalov M.L., Storozev A.V.* // Chem. Phys. 1996. V. 207. № 1. P. 193.
17. *Ostrovsky V.N., Ustimov V.I.* // J. Phys. B. 1984. V. 17. № 1. P. 99.
18. *Прудников А.П., Брычков Ю.А., Маричев О.И.* Интегралы и ряды. М.: Наука, 1981.
19. *Сторожев А.В., Стрекалов М.Л.* // Хим. физика. 1992. Т. 11. № 2. С. 168.
20. *Беликов А.Е., Сторожев А.В., Стрекалов М.Л.* // Хим. физика. 2000. Т. 19. № 10. С. 50.