

РАСЧЕТ СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ДИМЕРОВ ЩЕЛОЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ НА ОСНОВЕ МОДЕЛЬНОЙ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ

А. В. Глушков*, В. Н. Полищук, В. А. Ефимов, А. Н. Полевой, А. Ф. Кивганов,
В. Н. Хохлов, Г. А. Боровская, С. В. Даньков

УДК 539.186

Одесский гидрометеорологический институт, Украина,
270009, Одесса-9, а/с 108

(Поступила 28 февраля 1997)

На основе псевдопотенциального подхода в рамках модельной формально точной теории возмущений типа Рэлея—Шредингера с затравочным потенциалом нулевого приближения рассмотрена задача расчета некоторых щелочных двухатомных молекул в гомо- и гетероядерных вариантах Na_2 , RbM ($M = Na, Li, K, Rb, Cs$). Приведены результаты расчета энергетических параметров, в частности энергий диссоциации; часть данных получена впервые. Приведены результаты расчета энергий ридберговских состояний $n^1\Sigma_g^+$ ($n = 4-6$), спектроскопических констант димера Na . Расчет продемонстрировал важную роль в достижении приемлемой точности двух основных эффектов 2-го порядка теории возмущений — эффекта поляризационного взаимодействия валентных частиц через остов и взаимного экранирования их друг другом. Для ридберговских состояний принципиальным оказывается вклад возбуждений остова.

Ключевые слова: псевдопотенциал, теория возмущения, поляризация остова, ридбергово состояние, димер щелочного элемента

Введение. Расчет спектроскопических параметров двухатомных молекул по-прежнему относится к числу актуальных задач, что обусловлено важностью соответствующей информации для ряда оптических приложений. В частности, сведения о спектроскопических характеристиках щелочеров представляют собой особый интерес для лазерной спектроскопии, создания лазерных источников непрерывного излучения и др. [1—4]. Эта задача актуальна и с точки зрения дальнейшего развития современных методов расчета двухатомных молекул [5]. Получившие широкое распространение методы модельного потенциала и псевдопотенциала (ПП) интенсивно использовались в расчетах легких щелочных димеров [6—13]. Многочисленный опыт применения ПП в молекулярных расчетах показал тем не менее, что методы ПП иногда с достаточно высокой точностью способны воспроизводить результаты корректных *ab initio* полных многоэлектронных расчетов, в частности, если речь идет о молекулах, содержащих атомы первых двух периодов периодической таблицы и переходных металлов [1—10]. Сравнение результатов ПП-расчетов с лучшими расчетами методом конфигурационного взаимодействия показывает, что методы ПП дают ошибку вычисления эффектов электронной корреляции в среднем $\sim 10\%$ и более. По-видимому, наиболее подходящие объекты для применения методов ПП — одноквазичастичные (т. е. один электрон над остовом заполненных электронных оболочек) молекулярные щелочные ионы вида M_2^+ , $M = Li, Na, K, Rb, Cs$ [5, 8]. Если в системе имеется несколько внешних электронов (квазичастиц), проблема аккуратного учета межэлектронной корреляции приобретает очень важное значение, и без использования корректных методов ее решения методы ПП могут давать невысокую точность расчета ([2, 3, 5]). Один из известных методов учета обменно-поляризационных эффектов дает теория функционала плотности, однако во многих случаях точность расчета далека от спектроскопической. В ряде работ [9, 12] эффекты обмена и корреляции учитывались путем дополнения модельного

ПП (МПП) потенциалами, зависящими от дипольной α_d и квадрупольной α_q поляризуемостей остова. К недостаткам этого метода относятся необходимость предварительного определения α_d , α_q (точность их расчета, как правило, невелика) и неполный учет важнейших обменно-корреляционных эффектов. На наш взгляд, очень эффективной и последовательной является процедура построения МПП в рамках теории возмущений (ТВ) Рэлея—Шредингера с эффективным учетом обменно-корреляционных эффектов как эффектов высших порядков и с затраточным ПП нулевого приближения (НП). По крайней мере, такой путь с успехом реализован в теории расчета атомов, ионов, а также молекул [13—31].

В настоящей работе на основе метода ПП в рамках модельной ТВ рассмотрена задача расчета щелочных двухатомных молекул в гомо- и гетероядерных вариантах RbM (M=Li, Na, K, Rb, Cs). Модельный гамильтониан системы конструируется в рамках ТВ типа Рэлея—Шредингера с затраточным ПП НП [13, 15], в качестве которого взят локальный модельный потенциал типа Геллмана [6]. Для учета двух основных эффекта 2-го порядка ТВ (поляризационного взаимодействия валентных частиц через остов и экранирования их друг другом) использованы оригинальные процедуры. Применение при расчетах щелочных молекул в нулевом приближении ТВ с ПП НП эмпирической информации о более простых соответствующих ионах позволило увеличить точность расчета без дополнительных вычислений.

В рамках ПП-подхода задачу расчета молекул типа RbM можно свести к задаче расчета системы, состоящей из двух внешних электронов (квазичастиц), движущихся в поле ионов типа атомов благородных газов $M^+—M^+$, образующих остов [13, 15]. Основное состояние системы (состояние с двумя квазичастицами над остовом в представлении вторичного квантования) имеет вид

$$\Phi = \sum_{\xi\eta} C_{\xi\eta} a_{\xi}^+ a_{\eta}^+ \Phi_0,$$

где a^+ — оператор рождения частицы над остовом; Φ_0 — состояние остова; c — коэффициент, учитывающий угловую симметрию. Электронный гамильтониан системы имеет вид

$$H = \sum_i \varepsilon_i a_i^+ a_i + \sum_{ij} F_{ij} a_i^+ a_j^+ + \sum_{ijkl} F_{ijkl} a_i^+ a_j^+ a_k a_l,$$

где ε_i — одноквазичастичные энергии:

$$F_{ij} = - \sum_{\sigma=a,b} \int d^3 r \varphi_i(r_1) V_M(r_{i\sigma}) \varphi_j(r_2),$$

$$F_{ij} = \iint d^3 r_1 d^3 r_2 \varphi_i(r_1) \varphi_j(r_2) r_{12}^{-1} \varphi_k(r_2) \varphi_l(r_1).$$

Здесь $V_M(r_{i\sigma})$ — одночастичный МПП, имитирующий потенциал остова, в котором движутся квазичастицы. Энергию взаимодействия E_0 ионов M^+ остова определяем как

$$E_0 = z_a^c z_b^c / R,$$

где R — межъядерное расстояние; z_a^c , z_b^c — эффективные заряды ([32—35]). Процедура корректного определения z^c приведена, например, в [32]. В качестве модельного потенциала V_M взят локальный потенциал типа Геллмана [5, 8]:

$$V_M = -\frac{1}{r} + \frac{A}{r} \exp(-2kr), \quad (1)$$

где A , k — параметры потенциала, калибруемые обычно по экспериментальным энергиям основного состояния щелочных атомов (см. табл. 1). Корректный молекулярный МПП представляется в виде суммы

$$V_M = V_M(r_a, \theta_a, \varphi_a) + V_M(r_b, \theta_b, \varphi_b). \quad (2)$$

В последовательной реализации развиваемого метода ТВ с ПП нулевого приближения в качестве функций НП следует использовать собственные функции известной задачи двух цент-

Т а б л и ц а 1. Параметры затравочного модельного потенциала V_M (а.е.) и экспериментальные энергии ионизации E щелочных атомов (эВ)

Атом	A	k	$-E$
Li	1,287	0,422	5,39
Na	1,826	0,536	5,14
K	1,989	0,449	4,32
Rb	1,640	0,358	4,18
Cs	1,672	0,333	3,88

ров квантовой механики с потенциалом V_M [35]. Ниже это будет реализовано для молекулы Rb_2 как один из вариантов расчета. Решение двухцентровой задачи рассматривалось ранее [13, 18, 33]. В качестве другого варианта используется вариационный принцип Рэлея—Ритца, а в качестве пробной волновой функции — функция [8]:

$$\Psi(\lambda, \mu) = (R\lambda)^n e^{-(\alpha R\lambda + \beta R\mu)},$$

где λ, μ — обычные эллиптические координаты ($\lambda = (r_a + r_b)/R$, $1 \leq \lambda \leq \infty$; $\mu = (r_a - r_b)/R$, $-1 \leq \mu \leq 1$); α, β — вариационные параметры, определяемые минимизацией энергии основного состояния; n — целое число, выбираемое таким образом, чтобы получить наилучшую энергию (см. подробнее в [8]). Третий вариант расчета практически совпадает со вторым, за исключением того, что параметры α, β, n подбираются из условия воспроизведения экспериментальной энергии диссоциации соответствующего иона M_2^+ . Расчет исследуемой системы M_2 распадается на два этапа: построение модельного приближения нулевого порядка с использованием эмпирической информации для определения параметров ПП; вычисление поправок различного порядка ТВ с помощью ТВ типа Рэлея—Шредингера с эффективным учетом обменно-корреляционных эффектов как эффектов высших порядков ТВ посредством использования соответствующих одно- и многочастичных ПП. В качестве оператора возмущения выступает оператор вида

$$H_{PT} = \sum_{\sigma} \sum_{ij} [r_{ij}^{-1} - V_M(r_{i\sigma})]. \quad (4)$$

где σ, i, j — индексы суммирования по ядрам и электронам.

В [13, 18] строился ряд ТВ для матрицы секулярного оператора и рассматривались способы суммирования диаграмм для секулярного матрицы. Члены такого ряда представлялись в виде вкладов фейнмановских диаграмм, которые классифицировались по числу концевых линий. Соответственно этой классификации матричный элемент M секулярного оператора представляется как

$$M_{\xi_n} = M_{\xi_n}^{(0)} + M_{\xi_n}^{(1)} + \dots + M_{\xi_n}^{(i)},$$

где i — полное число квазичастиц; $M^{(0)}$ — вклад вакуумных диаграмм (без концевых линий); $M^{(1)}$ — вклад одноквазичастичных диаграмм (одна пара концевых линий); $M^{(2)}$ — вклад двухквазичастичных диаграмм (две пары концевых линий) и т.д. Вклад $M^{(0)}$ определяет энергию остова. Вклад $M^{(1)}$ равен сумме одноквазичастичных состояний ε_i . В первом порядке ТВ следует рассчитать только вклад двухквазичастичных диаграмм 1-го порядка, учитывающих непосредственное кулоновское взаимодействие квазичастиц. Искомая поправка 1-го порядка равна энергии взаимодействия квазичастиц $\Delta E^{(1)}$ и выражается через матричные элементы обычного типа на волновых функциях НП. Для оператора r_{12}^{-1} , как обычно, используется разложение Неймана по присоединенным полиномам Лежандра 1-го и 2-го рода и сферическим гармоникам [35]. Отметим, что в 1-м порядке ТВ отсутствуют двухчастичные диаграммы с компенсирующим членом $-V_M$ в H_{PT} , однако во 2-м порядке такие диаграммы появляются, хотя их вклад существенно компенсируется вкладом диаграмм с собственно энергетическими вставками [22—24]. Далее рассматриваются диаграммы 2-го порядка A, B, C (рис. 1), для которых сле-

дует проводить расчет. В теории многоэлектронных систем корреляции обычно учитываются наложением дополнительных конфигураций, т.е. расширением секулярной матрицы. Дополни-

тельные конфигурации можно разбить на две группы: 1) состояния с возбуждением электронов из остова (состояния с одной вакансией в остова и тремя электронами над остовом); наложение этих состояний учитывает поляризационное взаимодействие квазичастиц друг с другом через поляризуемый остов (диаграммы 2-го порядка, рис. 1, A, B); 2) состояния, соответствующие возбуждению одной из внешних квазичастиц (при этом число внешних частиц не меняется); наложение этих состояний описывает эффект внешнего экранирования внешних частиц друг другом (диаграмма 2-го порядка, рис. 1, C). Эти два типа состояний дают поправку 2-го порядка ТВ:

$$\Delta E^2 = \Delta E_{\text{pol}}^{(2)} + \Delta E_{\text{scr}}^{(2)}.$$

Заметим, что такое аддитивное разбиение возможно лишь во 2-м порядке ТВ, в высших порядках появляются члены, описывающие интерференцию этих эффектов. Наложение состояний второго типа привело бы к вычислению очень громоздких матричных элементов. Состояния 2-го типа в принципе могут быть учтены в секулярной матрице посредством выражения $\Delta E^{(1)}$ для матричного элемента. Однако может оказаться, что для достижения

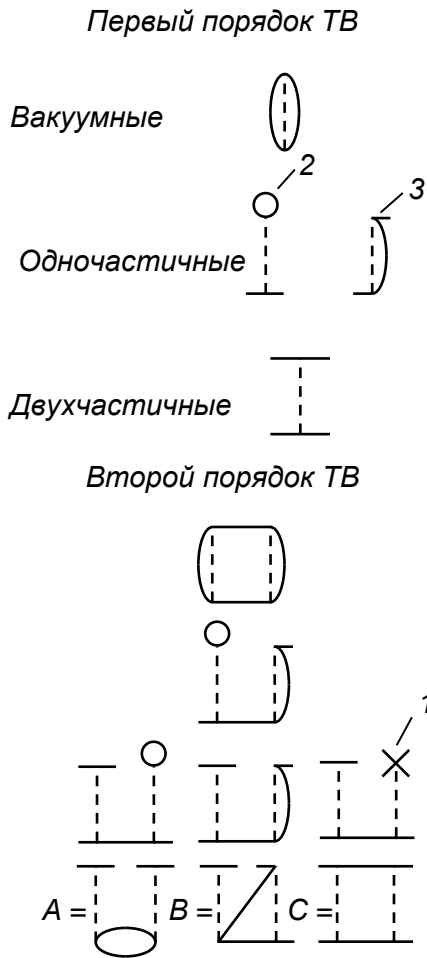


Рис. 1. Основные фейнмановские диаграммы ТВ с модельным потенциалом НП; диаграмма, соответствующая $-V_M$ (вертекс 1), почти полностью компенсируется диаграммами с хартри-фоковскими вставками (2, 3) во всех порядках ТВ; A, B — прямая и обменная поляризационная, C — лестничная диаграммы

желаемой точности необходимо учитывать целый континуум высоких состояний. Эффективный способ учета состояний как 1-го, так и 2-го типа без увеличения размеров секулярной матрицы (и дополнительных вычислений) предложен в [24—28] (см. также [15—19]) и заключается в добавлении к оператору кулоновского межчастичного взаимодействия поляризационного оператора, описывающего взаимодействие внешних частиц через поляризуемый остов. Матричные элементы поляризационного оператора, имеющего вид [13, 26]

$$F_{\text{pol}} = X \left\{ \int d^3 r \rho_c^{1/3}(r) / |r_1 - r| |r - r_2| - \left[\int d^3 r \rho_c^{1/3}(r) / |r_1 - r| \int d^3 r \rho_c^{1/3}(r) / |r - r_2| \right] / \int d^3 r \rho_c^{1/3}(r) \right\}, (5)$$

являются вкладами от поляризационных диаграмм (см. рис. 1). Здесь X — численный коэффициент (процедура его нахождения детально изложена в [26]); ρ_c — электронная плотность остова без учета внешних квазичастиц. При вычислении поляризационной поправки для величины ρ_c использовали анзац: $\rho_c = \rho_a + \rho_b$, и далее плотность $\rho_{a,b}$ определялась выражениями так же, как и в [35]. Общая вычислительная процедура $\Delta E_{\text{pol}}^{(2)}$ описана в [26, 27]. Заметим, что угловые части матричных элементов r_{12}^{-1} и $F_{\text{pol}}(r_1, r_2)$ совпадают, поэтому учет поправки $\Delta E_{\text{pol}}^{(2)}$ сводится лишь к модификации радиальных интегралов, входящих в выражение для $\Delta E^{(1)}$. Вве-

дение F_{pol} позволило свести проблему к задаче о двух частицах, взаимодействующих через потенциал $[r_{12}^{-1} + F_{\text{pol}}(r_1, r_2)]$, уже с точностью до 2-го порядка ТВ. Учет эффекта экранирования внешних частиц друг другом можно произвести, добавляя к потенциалу взаимодействия внешнего электрона со всеми электронами остова в гамильтониане НП дополнительный экранировочный потенциал W_{scr} , возникающий от присутствия второй частицы. Искомый потенциал

W_{scr} выбирается таким образом, что $\left\langle \left| \sum_{\sigma} \frac{\theta}{r_{i\sigma}} \right| \right\rangle = \left\langle |r_{12}^{-1}| \right\rangle$, где θ — параметр потенциала (см. ниже).

Матричные элементы рассчитываются на волновых функциях НП с затравочным модельным потенциалом. Возможны и другие варианты учета эффекта экранирования [32—35]. Включение W_{scr} в нулевой порядок позволяет эффективно учесть диаграммы лестничного типа во всех порядках ТВ (см. рис. 1).

Т а б л и ц а 2. Значения параметров α , β , n , N равновесных расстояний R_e , энергий диссоциации ионов D_e

Ион	α	β	n	D_e	R_e	N	θ
LiRb ₂ ⁺	0,5548	0,0603	3	—	7,20	0,1108	0,7523
Na ₂ ⁺	0,5865	0	3	1,13	6,48	0,3777	0,7318
NaRb ₂ ⁺	0,5249	0,0576	3	0,60	7,53	0,1149	0,7752
KRb ₂ ⁺	0,4836	0,0538	3	—	8,20	0,1216	0,8012
Rb ₂ ⁺	0,4731	0	3	0,86	8,40	0,1270	0,8149
CsRb ₂ ⁺	0,4624	0,0516	3	—	8,62	0,1214	0,8233

Приведем результаты расчета на основе разработанного метода ТВ типа Рэля — Шредингера с затравочным модельным потенциалом НП энергий D_e диссоциации равновесных расстояний R_e ряда двухатомных димеров щелочных атомов RbM. В табл. 1 приведены значения параметров A , k потенциала (1), откалиброванные по эмпирическим энергиям основного состояния щелочных атомов [1, 13]. В табл. 2 указаны затравочные значения параметров α , β , n , N волновой функции НП, найденные вариационным образом для соответствующих молекулярных ионов M_2^+ , исходя из процедуры минимизации энергии. Естественно, в гомоядерном варианте $\beta = 0$, в гетероядерном $\beta \neq 0$. Здесь же приведены значения параметра θ экранировочного потенциала W_{scr} . Результаты расчета энергии диссоциации димера Rb в трех вариантах приведены в табл. 3: 1) НП определено решением задачи двух центров в квантовой механике; 2) в качестве волновой функции НП использована пробная функция с вариационно определенными параметрами (см. табл. 2); 3) в качестве волновой функции НП использована пробная функция с параметром α , выбранным из условия воспроизведения экспериментального значения энергии диссоциации Rb_2^+ . Обменно-корреляционные эффекты во всех вариантах учтены одинаковым образом по методике, описанной выше. Табл. 3 содержит и результаты расчета энергий диссоциации и других щелочных двухатомных молекул. Для сравнения в табл. 3 приведены и имеющиеся в литературе результаты расчета энергии некоторых из указанных молекул другими методами: в рамках различных версий ПП подхода [1—11, 34, 35]. Отметим хорошее согласие наших расчетных данных с имеющимися эмпирическими результатами. Для ряда молекул искомые энергии получены впервые. Наиболее принципиальным моментом данного расчета является аккуратный учет эффекта поляризационного взаимодействия внешних квазичастиц через остов и взаимного экранирования этих частиц, благодаря чему полученные нами результаты превосходят по точности проведенных ранее расчеты. Анализ расчета димера Rb_2 в трех вариантах показывает, что использование в НП в качестве волновых функций соб-

Т а б л и ц а 3. Энергии диссоциации (эВ) щелочных димеров M_2 , рассчитанные в настоящей работе методом ТВ, а также в рамках других приближений, и имеющиеся экспериментальные данные

	M_2					
	RbLi	Na ₂	RbNa	RbK	Rb ₂	RbCs
Экспериментальные данные		0,74	0,58		0,49	
Гауссов ПП и модельные волновые функции		1,33	0,79		0,49	
Потенциал Геллмана и гауссовы модельные волновые функции		0,25	0,09		0,02	
Потенциал Геллмана и гайтлер-лондонский анзац со слэтеровскими орбиталями		0,23				
Хартри-фоковский потенциал + точный ПП Филлипса — Клеймана и гайтлер-лондонский анзац со слэтеровскими орбиталями; учтена поляризация остова в форме эффективного потенциала		0,25				
Модельный ПП и 13-конфигурационная волновая функция						
Модельный ПП и приближение конфигурационного взаимодействия с использованием приближенных натуральных орбиталей		0,59				
Настоящая работа:						
1 вариант расчета	0,66	0,74	0,58	0,52	0,48	0,45
2 вариант расчета	0,61	0,68	0,51	0,48	0,40	0,39
3 вариант расчета		0,74	0,57		0,46	
Полуэмпирическая ТВ (с подгонкой D_e под эксперимент)		0,71				
Приближение локальной плотности в теории функционала плотности		0,75				

ственных функций задачи двух центров приводит к более точным результатам, чем при использовании модельных волновых с вариационными параметрами α , β . Подгонка параметра α волновой функции в 3-м варианте расчета по экспериментальному значению энергии диссоциации Rb_2^+ приводит к более точному значению D_e для Rb_2 , чем в случае вариационного определения α . Очевидно, это объясняется хорошо известным фактом из теории расчетов атомов и ионов в рамках аналогичного подхода (см. [23—28]), связанным с использованием в НП ТВ эмпирической информации о более простой родственной системе. На диаграммном языке это означает более полный учет соответствующих корреляционных диаграмм. Результаты расчета потенциальных кривых, спектроскопических констант для ридберговских состояний $n^1\Sigma_g^+$ ($n = 4—6$) Na_2 представлены в табл. 4, где для сравнения приведены также результаты аналогичных ПП расчетов на основе метода *ab initio* ПП с калибровкой на хартри-фоковскую волновую функцию основного состояния и расчетов с использованием эмпирических ПП и учетом поляризационного остова посредством ПП Далгарно, а также экспериментальные данные [11, 12, 14]. Как видно из табл. 4, расчетные данные находятся в хорошем согласии с эксперимен-

Т а б л и ц а 4. Спектроскопические константы ридберговских состояний, рассчитанные в настоящей работе, а также в рамках других подходов, и экспериментальные данные для энергии возбуждения T_e , для вращательной B_e и колебательной констант ω_e

Состояние		$4^1\Sigma_g^+$	$5^1\Sigma_g^+$	$6^1\Sigma_g^+$
$T_e, 10^2 \text{ см}^{-1}$	a	283,26	317,72	325,62
	b	285	319	328
	c	286	319	327
	d	285	320	326
$B_e, \text{ см}^{-1}$	a	0,0899	0,1136	0,1059
	b	0,0838	0,107	0,101
	c	0,088	0,110	0,110
	d	0,093	0,109	0,107
$\omega_e, \text{ см}^{-1}$	a	108,74	109,41	123,67
	b	107	110	119
	c	105	113	123
	d	106	110	123

Примечание. а — экспериментальные данные [11]; б — хартри-фоковский *ab initio* ПП + поляризация остова [14]; в — эмпирический ПП + поляризация остова [12]; д — настоящая работа.

том. Важно подчеркнуть принципиальную роль учета эффектов поляризации остова и экранирования в получении высокой точности. Включение экранировочного потенциала улучшает также сходимость ТВ.

В заключение подчеркнем, что вычислительная схема нашего подхода включает возможность использования в НП ТВ *ab initio* ПП, подобно тому, как это было ранее сделано для атомных систем [22—26]. Это позволяет рассчитывать нашим методом двухатомные системы, для которых отсутствуют какие-либо экспериментальные данные о структуре и спектре.

Работа частично финансирована Международной соросовской программой поддержки образования в области точных наук ISSEP, грант N SPU 061016 (А. В. Г.).

Список цитируемой литературы

1. К.-П. Хьюбер, Г. Герцберг. Константы двухатомных молекул, Москва (1984)
2. Е. Е. Никитин, С. Я. Уманский. Полуэмпирические методы расчета потенциалов и взаимодействия атомов. Итоги науки и техники. ВИНТИ. Сер. Структура молекул и химическая связь, вып. 4 (1980)
3. Н. Haberland, Y. T. Lee, P. E. Siska/ Excited States in Chem. Phys., V. 2, ed. J. W. McGowan, Adv. Chem. Phys., **45** (1981) 457—478
4. W.-T. Luh, J. T. Bahns et al. J. Chem. Phys., **88** (1988) 2235—2241
5. Ph. Durand, J. P. Marliou. Ab initio methods of Quantum Chemistry, ed. K. P. Lawley, Chichester etc., New York (1987)
6. P. Gombas. Pseudopotentials, Berlin (1967)
7. M. Frauss, W. Stevens. J. Chem. Phys., **93** (1990) 4236—4242
8. L. Bellomonte, F. Cavaliere, G. Ferrante. J. Chem. Phys., **61** (1974) 3225—3234
9. C. Bottcher, A. Dalgarno. Proc. Roy. Soc. London A., **340** (1974) 187—196
10. А. В. Немухин, Н. Ф. Степанов. Вестн. МГУ. Сер. 2. Химия, **18** (1977) 282—286
11. A. J. Taylor, K. M. Jones, A. L. Schawlow. Opt. Commun., **39** (1981) 47—50
12. A. Henriot, F. Masnou-Seeuws. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **21** (1988) L339—L346
13. А. В. Глушков. Журн. структур. химии, **34**, № 5 (1993) 3—10
14. G. H. Jeung. Phys. Rev. A, **35** (1987) 26—35; J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **16** (1983) 4289—4297
15. А. В. Глушков. Журн. структур. химии, **29**, № 4 (1988) 3—10; **30**, № 6 (1989) 3—6; **31**, № 1 (1990) 11—14; **30**, № 4 (1990) 11—16
16. А. В. Глушков, Н. Н. Дудник, С. В. Малиновская. Журн. структур. химии, **29**, № 1 (1988) 165—167
17. А. В. Глушков, С. В. Малиновская. Журн. физ. химии, **62** (1988) 100—105; **65** (1991) 2970—2977; **66** (1992) 1259—1268
18. А. В. Глушков. Журн. физ. химии, **66** (1992) 589—595
19. А. В. Глушков. Опт. и спектр., **76** (1994) 885—890; **77** (1994) 5—10
20. А. В. Глушков. Изв. вузов. Физика, **33**, № 10 (1990) 41—46; **35**, № 10 (1992) 3—9; **37**, № 6 (1994) 41—48
21. А. В. Глушков, С. В. Амбросов, Т. В. Буяджи и др. Журн. прикл. спектр., **64** (1997) 256—259
22. V. V. Tolmachev. Adv. Chem. Phys., **14** (1969) 421—482
23. В. В. Толмачев, Л. Н. Иванов, Е. П. Иванова. Изв. вузов. Физика, **12** (1969) 84—89
24. А. В. Глушков, Л. Н. Иванов, Е. П. Иванова. Автоионизационные явления в атомах, Москва (1986) 58—68
25. V. S. Letochov, L. N. Ivanov. Com. At. Mol. Phys. D., **14** (1985) 169—192
26. E. P. Ivanova, L. N. Ivanov, A. V. Glushkov, A. E. Kramida. Phys. Scripta, **32** (1985) 512—524
27. A. V. Glushkov, E. P. Ivanova. J. Quant. Spectr. Rad. Transf., **36** (1986) 127—145
28. A. V. Glushkov, L. N. Ivanov. Phys. Lett. A., **170** (1992) 33—36
29. А. В. Глушков. Письма в ЖЭТФ, **55**, № 2 (1992) 104—107
30. A. V. Glushkov, L. N. Ivanov. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **26**, N 16 (1993) L379—386
31. A. V. Glushkov, S. V. Ambrosov, V. E. Orlova et al. Proc. 5th Atomic Spectra & Oscillator Strengths for Astrophysics and Laboratory Plasma Conf. (5thASOSALP), Paris-Meudon (1995)
32. М. Д. Долгушин. Журн. физ. хим., **64** (1990) 3250—3256
33. А. В. Глушков. Журн. прикл. спектр., **49** (1988) 840—843
34. J. Harris, R. O. Jones. J. Chem. Phys., **68** (1978) 1190—1198
35. K. Miller, A. E. S. Green. J. Chem. Phys., **60** (1974) 2426—2432