

УДК 517.589, 539.192, 538.915, 539.194
DOI: 10.31040/2222-8349-2024-0-2-3-7

НОВЫЙ ПОДХОД К РАСЧЕТАМ СТОЛКНОВЕНИЯ ЭЛЕКТРОНА С МОЛЕКУЛАМИ

© Р.Ф. Ахметьянов, Е.С. Шиховцева

Целью работы является исследование механизма захвата электрона молекулой с образованием отрицательного иона. Для решения этой задачи привлекаются методы квантовой химии или используются другие модельные подходы путем введения определенного модельного потенциала взаимодействия. Недостаток таких методов связан с тем, что для конкретных молекул мы должны вводить конкретный потенциал взаимодействия. В этой работе мы придерживаемся стандартного кулоновского взаимодействия и в таком базисе, в котором ядро системы интегральных уравнений имеет вырожденную форму.

Ключевые слова: кулоновские системы, матрица рассеяния.

Введение. Рассмотрим процесс рассеяния электрона e_0 с начальной энергией E_0 на мишени в начальном состоянии M_0 и переходом в другое (возбужденное) состояние этой мишени в M_1^* и рассеянного электрона e_1 с энергией E_1

$$e_0 + M_0 \rightarrow e_1 + M_1^*.$$

Задачи такого рода описаны во многих работах, в частности [1–3], и проблема заключается в решении задачи многих тел. Так как взаимодействие налетающего, несвязанного электрона с молекулой имеет кулоновский характер, а сама молекула, состоящая из связанных электронов и ядер, имеет ту же природу взаимодействия, то мы можем искать решения в общем базовом представлении, которое мы введем.

Сначала для введения обозначений вкратце опишем саму задачу рассеяния. Так, полный гамильтониан процесса рассеяния электрона молекулой представим в виде

$$\hat{H}(r; q, R) = \hat{H}(q, R) + U(r; q, R) + \hat{K}(r)$$

где $\hat{H}(q, R)$ гамильтониан молекулы с координатами всех электронов $q = \{\vec{q}_1, \vec{q}_2, \dots, \vec{q}_N\}$ и ядер $R = \{\vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots, \vec{R}_M\}$, причем

$$\hat{H}(q, R)\psi_p(q, R) = \varepsilon_p \psi_p(q, R)$$

$\psi_p(q, R)$ и ε_p есть (собственные) волновые функции и энергии молекулы $U(r; q, R)$ – есть

потенциал взаимодействия налетающего электрона с молекулой, а $\hat{K}(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$ – оператор кинетической энергии налетающего электрона.

Полную волновую функцию молекулы с налетающим электроном представим в виде

$$\Psi(r; q, R) = \sum_i \psi_{p_i}(q, R) F_i(r)$$

$$\hat{H}(r; q, R)\Psi(r; q, R) = E\Psi(r; q, R),$$

причем $F_i(r)$ асимптотически должна удовлетворять условиям

$$F_0(r) \approx e^{ik_0 r} + \frac{1}{r} f_0(r) e^{ik_0 r}$$

$$F_i(\vec{r}) \approx \frac{1}{r} f_i(\vec{r}) e^{i\vec{k}_i \vec{r}}, \quad i \neq 0$$

и их система дифференциальных уравнения имеет следующий вид:

$$\hat{h}_n F_n(\vec{r}) = V_{n0}(\vec{r})\psi_0(\vec{r}) + \sum_m V_{nm}(\vec{r}) F_m(\vec{r}), \quad (1a)$$

где

$$\hat{h}_n = \frac{\hbar^2}{2m}\Delta + E_n, \quad E_n = E - \varepsilon_n,$$

$$V_{nm}(\vec{r}) = \int d^3q \psi_n^*(q, R) U(r; q, R) \psi_m(q, R)$$

или в другом виде:

$$\hat{H}_n F_n(\vec{r}) = V_{n0}(\vec{r})\psi_0(\vec{r}) + \sum_{m \neq n} V_{nm}(\vec{r}) F_m(\vec{r}), \quad (1b)$$

$$\hat{H}_n = \frac{\hbar^2}{2m}\Delta + E_n - V_{nn}(\vec{r}).$$

АХМЕТЬЯНОВ Роберт Фанилович, Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,
e-mail: robertu@mail.ru

ШИХОВЦЕВА Елена Сергеевна – д.ф.-м.н., Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,
e-mail: elshik@anrb.ru

Мы заранее сняли однородность этих уравнений, вводя

$$F_0(\vec{r}) \Rightarrow \Psi_0(\vec{r}) + F_0(\vec{r}),$$

$$\Psi_0(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k}_0\vec{r}}, \quad k_0^2 = \frac{2mE_0}{\hbar^2}.$$

Особый интерес представляет система уравнения второго порядка. Это означает, что до столкновения внешнего электрона молекула находилась в одном (например, в основном) состоянии, а после столкновения и рассеяния – в другом возбужденном состоянии. Для систем третьего и т.д. порядка можно получить решения общего вида из решения второго порядка методом итерации. Отметим, что система уравнения первого порядка представляет собой уравнение Липпмана–Швингера, а его решения – методом уравнения Фаддеева [4]. Анализ поведения Т-матричных элементов в уравнениях Фаддеева дан в работах [5, 6]. Точные решения уравнения Липпмана–Швингера для рассеяния на гиперсферических потенциалах даны, например, в работе [7].

Приближение второго порядка. Так, для второго порядка из (1) мы получим систему интегральных уравнений

$$F_0(\vec{r}) = \int d^3\vec{r}_2 R_0(\vec{r}, \vec{r}_2) \Psi_0(\vec{r}_2), \quad (2)$$

где

$$R_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = C_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \int d^3\vec{r}_3 C_0(\vec{r}_1, \vec{r}_3) R_0(\vec{r}_3, \vec{r}_2)$$

$$C_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = g_0(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) V_{00}(\vec{r}_2) +$$

$$+ V_{10}(\vec{r}_2) \int d^3\vec{r}_3 M_0(\vec{r}_1, \vec{r}_3) g_1(\vec{r}_3 - \vec{r}_2)$$

$$M_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = g_0(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) V_{01}(\vec{r}_2) +$$

$$+ V_{11}(\vec{r}_2) \int d^3\vec{r}_3 g_0(\vec{r}_1 - \vec{r}_3) V_{01}(\vec{r}_3) G_1(\vec{r}_3, \vec{r}_2),$$

а также для

$$F_1(\vec{r}) = \int d^3\vec{r}_2 R_1(\vec{r}, \vec{r}_2) \Psi_0(\vec{r}_2), \quad (3)$$

где

$$R_1(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = M_1(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \int d^3\vec{r}_3 C_1(\vec{r}_1, \vec{r}_3) R_1(\vec{r}_3, \vec{r}_2)$$

$$C_1(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = g_1(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) V_{11}(\vec{r}_2) +$$

$$+ V_{01}(\vec{r}_2) \int d^3\vec{r}_3 M_1(\vec{r}_1, \vec{r}_3) g_0(\vec{r}_3 - \vec{r}_2)$$

$$M_1(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = g_1(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) V_{10}(\vec{r}_2) +$$

$$+ V_{00}(\vec{r}_2) \int d^3\vec{r}_3 g_1(\vec{r}_1 - \vec{r}_3) V_{10}(\vec{r}_3) G_0(\vec{r}_3, \vec{r}_2),$$

здесь функции Грина $g_n(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ и $G_n(\vec{r}_3, \vec{r}_2)$ определены условием

$$\hat{h}_n g_n(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$$

$$\hat{H}_n G_n(\vec{r}_3, \vec{r}_2) = \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2).$$

Интересующее нас асимптотическое поведение для (2) и (3) при больших значениях \vec{r} будет

$$F_n(\vec{r}) \approx \frac{e^{i\vec{k}_n\vec{r}}}{r} \chi_n(\vec{k}_n, \vec{k}_0);$$

$$\chi_n(\vec{k}_n, \vec{k}_0) =$$

$$= -\frac{\sqrt{2\pi m}}{\hbar^2} \int d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \Psi_n^*(\vec{r}_1) S_n(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \Psi_0(\vec{r}_2) =$$

$$= -\frac{\sqrt{2\pi m}}{\hbar^2} S_n(\vec{k}_n, \vec{k}_0);$$

$$\Psi_n(\vec{r}) = \frac{e^{i\vec{k}_n\vec{r}}}{\sqrt{(2\pi)^3}}, \quad k_n^2 = \frac{2mE_n}{\hbar^2},$$

которые и определяют сечение рассеяния в виде:

$$\sigma_{n,0}(\Omega) = \frac{k_n}{k_0} \left| \chi_n(\vec{k}_n, \vec{k}_0) \right|^2.$$

Таким образом, для определения рассеяния нам необходимо знать $S_n(\vec{k}_n, \vec{k}_0)$.

Для определения $S_n(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ была получена система интегральных уравнений:

$$S_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) V_{00}(\vec{r}_2) +$$

$$+ V_{01}(\vec{r}_1) G_1(\vec{r}_1, \vec{r}_2) V_{10}(\vec{r}_2) + \int d^3\vec{r}_3 B_0(\vec{r}_1, \vec{r}_3) S_0(\vec{r}_3, \vec{r}_2)$$

$$B_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = V_{00}(\vec{r}_1) g_0(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) +$$

$$+ V_{01}(\vec{r}_1) \int d^3\vec{r}_3 G_1(\vec{r}_1, \vec{r}_3) V_{10}(\vec{r}_3) g_0(\vec{r}_3 - \vec{r}_2),$$

а также при переходе в возбужденные состояния:

$$S_1(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) V_{10}(\vec{r}_2) +$$

$$+ V_{10}(\vec{r}_1) G_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) V_{00}(\vec{r}_2) + \int d^3\vec{r}_3 B_1(\vec{r}_1, \vec{r}_3) S_1(\vec{r}_3, \vec{r}_2)$$

$$B_1(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = V_{11}(\vec{r}_1) g_1(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) +$$

$$+ V_{10}(\vec{r}_1) \int d^3\vec{r}_3 G_0(\vec{r}_1, \vec{r}_3) V_{01}(\vec{r}_3) g_1(\vec{r}_3 - \vec{r}_2),$$

соответственно в k -представлении:

$$S_0(\vec{k}_1, \vec{k}_2) = \frac{1}{(2\pi)^3} V_{00}(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) +$$

$$+ \frac{1}{(2\pi)^3} \iint d^3\vec{p}_1 d^3\vec{p}_2 V_{01}(\vec{k}_1 - \vec{p}_1) G_1(\vec{p}_1, \vec{p}_2) V_{10}(\vec{p}_2 - \vec{k}_2) + \quad (4a)$$

$$+ \int d^3\vec{p}_1 B_0(\vec{k}_1, \vec{p}_1) S_0(\vec{p}_1, \vec{k}_2),$$

$$B_0(\vec{k}_1, \vec{k}_2) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} V_{00}(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) g_0(\vec{k}_2) + \frac{g_0(\vec{k}_2)}{(2\pi)^3} \iint d^3 \vec{p}_1 d^3 \vec{p}_2 V_{01}(\vec{k}_1 - \vec{p}_1) G_1(\vec{p}_1, \vec{p}_2) V_{10}(\vec{p}_2 - \vec{k}_2) \quad (4b)$$

$$S_1(\vec{k}_1, \vec{k}_2) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} V_{10}(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) + \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 \vec{p}_1 d^3 \vec{p}_2 V_{10}(\vec{k}_1 - \vec{p}_1) G_0(\vec{p}_1, \vec{p}_2) V_{00}(\vec{p}_2 - \vec{k}_2) + \int d^3 \vec{p}_1 B_1(\vec{k}_1, \vec{p}_1) S_1(\vec{p}_1, \vec{k}_2), \quad (5a)$$

$$B_1(\vec{k}_1, \vec{k}_2) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} V_{11}(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) g_1(\vec{k}_2) + \frac{g_1(\vec{k}_2)}{(2\pi)^3} \iint d^3 \vec{p}_1 d^3 \vec{p}_2 V_{10}(\vec{k}_1 - \vec{p}_1) G_0(\vec{p}_1, \vec{p}_2) V_{01}(\vec{p}_2 - \vec{k}_2). \quad (5b)$$

Метод решения. Для решения системы (4) или (5) достаточно знать функции вида

$$R(\vec{k}_1, \vec{k}_2) = \iint d^3 \vec{p}_1 d^3 \vec{p}_2 V_{nm}(\vec{k}_1 - \vec{p}_1) G_i(\vec{p}_1, \vec{p}_2) V_{n_2 m_2}(\vec{p}_2 - \vec{k}_2).$$

Мы предложим, чтобы функция $R(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$ и матричные элементы потенциала взаимодействия $V_{nm}(\vec{k}_1 - \vec{k}_2)$ можно было представить в виде разложения $\approx \sum_{\nu, \mu} \gamma_{\nu, \mu} \zeta_{\nu}(\vec{k}_1) \zeta_{\mu}(\vec{k}_2)$ по известным функциям $\zeta_{\nu}(\vec{k})$. После чего интегральные уравнения для $S_n(\vec{k}_n, \vec{k}_0)$ будут представлять собой интегральные уравнения с вырожденным ядром, которые можно привести к решаемому виду. Так, матричные элементы потенциала взаимодействия, которые входят в интегральные уравнения, представляются в виде

Мы предложим, чтобы функция $R(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$ и матричные элементы потенциала взаимодействия $V_{nm}(\vec{k}_1 - \vec{k}_2)$ можно было представить в виде разложения $\approx \sum_{\nu, \mu} \gamma_{\nu, \mu} \zeta_{\nu}(\vec{k}_1) \zeta_{\mu}(\vec{k}_2)$ по известным функциям $\zeta_{\nu}(\vec{k})$. После чего интегральные уравнения для $S_n(\vec{k}_n, \vec{k}_0)$ будут представлять собой интегральные уравнения с вырожденным ядром, которые можно привести к решаемому виду. Так, матричные элементы потенциала взаимодействия, которые входят в интегральные уравнения, представляются в виде

$$V_{nm}(\vec{r}) = -\delta_{nm} \sum_{l=1}^M \frac{e^2 Z_l}{|\vec{r} - \vec{R}_l|} + \sum_{i=1}^N \int d^3 Q \frac{e^2 \Psi_n^*(Q) \Psi_m(Q)}{|\vec{r} - \vec{q}_i|},$$

$Q = \langle \vec{q}_1, \vec{q}_2, \vec{q}_3, \dots, \vec{q}_N \rangle$ $d^3 Q = d^3 \vec{q}_1 d^3 \vec{q}_2 d^3 \vec{q}_3 \dots d^3 \vec{q}_N$, где $\Psi_n(Q)$ – волновые функции системы из N электронов в молекуле, в k -представлении

$$V_{nm}(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d^3 \vec{r} V_{nm}(\vec{r}) e^{i\vec{p}\vec{r}},$$

соответственно,

$$V_{nm}(\vec{p}_1 - \vec{p}_2) = e^2 \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left[-\delta_{nm} \sum_{l=1}^M Z_l \frac{e^{i\vec{R}_l(\vec{p}_1 - \vec{p}_2)}}{|\vec{p}_1 - \vec{p}_2|^2} + \sum_{i=1}^N \int d^3 Q \rho_{nm}(Q) \frac{e^{i\vec{q}_i(\vec{p}_1 - \vec{p}_2)}}{|\vec{p}_1 - \vec{p}_2|^2} \right] \quad (6)$$

$$\rho_{nm}(Q) = \Psi_n^*(Q) \Psi_m(Q),$$

или в виде

$$V_{nm}(\vec{p}_1 - \vec{p}_2) = e^2 \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int d^3 \vec{q} P_{nm}(\vec{q}) \frac{e^{i\vec{q}(\vec{p}_1 - \vec{p}_2)}}{|\vec{p}_1 - \vec{p}_2|^2} = 4\pi e^2 \frac{P_{nm}(\vec{p}_1 - \vec{p}_2)}{|\vec{p}_1 - \vec{p}_2|^2},$$

где

$$P_{nm}(\vec{q}) = -\delta_{nm} \sum_{l=1}^M Z_l \delta(\vec{q} - \vec{R}_l) + \rho_{nm}(\vec{q})$$

с учетом свойств симметрии

$$\rho_{nm}(\vec{q}) = \int d^3 \vec{q}_1 \dots \int d^3 \vec{q}_{N-1} \left[\Psi_n^*(\vec{q}, \vec{q}_1, \dots, \vec{q}_{N-1}) \Psi_m(\vec{q}, \vec{q}_1, \dots, \vec{q}_{N-1}) + \Psi_n^*(\vec{q}_1, \vec{q}, \dots, \vec{q}_{N-1}) \Psi_m(\vec{q}_1, \vec{q}, \dots, \vec{q}_{N-1}) + \dots + \Psi_n^*(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_{N-1}, \vec{q}) \Psi_m(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_{N-1}, \vec{q}) \right].$$

В работе [8] мы получили, что

$$\frac{1}{|\vec{p}_1 - \vec{p}_2|^2} = 2\pi \sqrt{p_1^2 + 1} \sqrt{p_2^2 + 1} \times \sum_{n=m+1}^{\infty} \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^{m=+l} \frac{\eta_{nl}(p_1) \eta_{nl}(p_2)}{\lambda_n} Y_{lm}(\Omega_{p_1}) Y_{lm}^*(\Omega_{p_2}), \quad (7)$$

где

$$\lambda_n = \frac{2n}{\pi},$$

а также для потенциалов в r -представлении

$$\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = 4\pi (r^2 + 1) (r'^2 + 1) \times \sum_{n=m+1}^{\infty} \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^{m=+l} \frac{\eta_{nl}(r) \eta_{nl}(r')}{(2n+1)(2n+3)} Y_{lm}(\Omega_r) Y_{lm}^*(\Omega_{r'}),$$

здесь функция $\eta_{nl}(x)$

$$\eta_{nl}(x) = 4^{l+1} l! \sqrt{\frac{n(n-l-1)!}{\pi(n+l)!}} \frac{x^l}{(x^2+1)^{l+\frac{3}{2}}} C_{n-l-1}^{l+1} \left(\frac{x^2-1}{x^2+1} \right)$$

является ортогональной с весом x^2

$$\int_0^{\infty} dx x^2 \eta_{n_1 l}(x) \eta_{n_2 l}(x) = \delta_{n_1 n_2},$$

где $C_{n-l-1}^{l+1}(\dots)$ – есть функция Гегенбауэра.

Так, в частном случае для (6) и (7)

$$\frac{e^{i(\vec{p}_1 - \vec{p}_2)\vec{a}}}{|\vec{p}_1 - \vec{p}_2|^2} = 2\pi\sqrt{p_1^2 + 1}\sqrt{p_2^2 + 1} \times \\ \times \sum_v \frac{\Phi_v(\vec{p}_1)e^{i\vec{p}_1\vec{a}}\Phi_v^*(\vec{p}_2)e^{-i\vec{p}_2\vec{a}}}{\lambda_v} = \\ = \sum_v \zeta_v(\vec{p}_1)e^{i\vec{p}_1\vec{a}} \left(\zeta_v(\vec{p}_2)e^{i\vec{p}_2\vec{a}} \right)^*,$$

где

$$v = \langle n, l, m \rangle \quad \sum_v (\dots) = \sum_{n=m+1}^{\infty} \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^{l} (\dots)$$

и

$$\Phi_v(\vec{p}) = \eta_{nl}(p)Y_{lm}(\Omega_p)$$

$$\int d^3\vec{p} \Phi_{v_1}(\vec{p})\Phi_{v_2}^*(\vec{p}) = \delta_{v_1v_2}$$

представляется в виде билинейной комбинации уже известных функций

$$\zeta_v(\vec{p}) = \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda_v}} \sqrt{p^2 + 1} \eta_{nl}(p)Y_{lm}(\Omega_p).$$

Основная трудность может заключаться в нахождении $\rho_{nm}(\vec{q})$ или $\Psi_n(\vec{q}_1, \vec{q}_2, \dots, \vec{q}_N)$ для молекул, поскольку взаимодействия между электронами и электронами с ядрами имеют кулоновский характер и в p -представлении имеют характер $\approx \frac{1}{|\vec{p}_1 - \vec{p}_2|^2}$.

Однако (см. [8]) мы также можем найти правила умножения и интегрирования для функции $\zeta_v(\vec{p})e^{i\vec{p}\vec{a}}$ в виде $\int d^3p \prod_{v_i} \zeta_{v_i}(\vec{p})e^{i\vec{p}\vec{a}}$ и получим, что

$$\rho_{nm}(\vec{k}_1, \vec{k}_2) = \sum_{v,\mu} \rho_{n,m}^{v,\mu} \zeta_v(\vec{k}_1) \zeta_\mu(\vec{k}_2),$$

что, в свою очередь, мы получаем, что $R(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$ и $V_{nm}(\vec{k}_1 - \vec{k}_2)$ представляются в виде билинейной комбинации от функции $\zeta_v(\vec{p})e^{i\vec{p}\vec{R}}$. В итоге интегральные уравнения для $S_n(\vec{k}_n, \vec{k}_0)$ вполне решаемы. Таким образом, мы получили метод для дальнейших расчетов и изучения образования отрицательных ионов.

Заключение. Для описания процесса столкновения и захвата электронов с молекулами и ионами иногда приходится сталкиваться с некоторыми приближенными методами для решения этих задач. Показано, что представление

потенциала взаимодействия (6) в виде разложения (7), можно привести уравнения для матриц рассеяния (4) и (5) в интегральные уравнение Фредгольма с вырожденным ядром. Это приводит к менее затратным расчетам процессов столкновения электрона с молекулами.

Литература

1. Смирнов Б.М. Отрицательные ионы. М., 1978.
2. Месси Г. Отрицательные ионы / пер. с англ. М., 1979.
3. Мотт Н., Месси Г. Теория атомных столкновений / пер. с англ., 3-е изд. М., 1969.
4. Фаддеев Л.Д. Математические вопросы квантовой теории рассеяния для системы трех частиц // Труды Мат. ин-та АН СССР. 69. 1963.
5. Ахметьянов Р.Ф., Шиховцева Е.С. Т-матричные элементы рассеяния для кулоновских систем взаимодействия // Известия Уфимского научного центра РАН. 2018. № 3. С. 22–27.
6. Ахметьянов Р.Ф., Шиховцева Е.С. Асимптотическое поведение двухчастичных Т-матричных элементов в непрерывных и дискретных областях спектров // Известия Уфимского научного центра РАН. 2020. № 3. С. 12–17.
7. Pereira M.E., Schmidt A.G.M. Exact Solutions for Lippmann–Schwinger Equation for the Scattering by Hyper-Spherical Potentials // Few-Body Syst. 2022. V. 63. № 25.
8. Ахметьянов Р.Ф., Шиховцева Е.С. Разложение степенного потенциала на основе обобщенной формулы Гейне // Известия Уфимского научного центра РАН. 2016. № 1. С. 24–31.

References

1. Smirnov B.M. Otritsatel'nye iony. Moscow, 1978.
2. Messi G. Otritsatel'nye iony, per. s angl. Moscow, 1979.
3. Mott N., Messi G. Teoriya atomnykh stolknoveniy, per. s angl., 3-e izd. Moscow, 1969.
4. Faddeev L.D. Matematicheskie voprosy kvantovoy teorii rasseyaniya dlya sistemy trekh chastits // Trudy Mat. in-ta AN SSSR. 69. 1963.
5. Akhmet'yanov R.F., Shikhovtseva E.S. T-matrichnye elementy rasseyaniya dlya kulonovskikh sistem vzaimodeystviya // Izvestiya Ufimskogo nauchnogo tsentra RAN, 2018, no. 3, pp. 22–27.
6. Akhmet'yanov R.F., Shikhovtseva E.S. Asimptoticheskoe povedenie dvukhchastichnykh T-matrichnykh elementov v nepreryvnykh i diskretnykh oblastiakh spektrov // Izvestiya Ufimskogo nauchnogo tsentra RAN, 2020, no. 3, pp. 12–17.
7. Pereira M.E., Schmidt A.G.M. Exact Solutions for Lippmann–Schwinger Equation for the Scattering by

Hyper-Spherical Potentials // Few-Body Syst., 2022,
vol. 63, no. 25.

8. Akhmet'yanov R.F., Shikhovtseva E.S.
Razlozhenie stepennogo potentsiala na osnove

obobshchennoy formuly Geyne // Izvestiya Ufimskogo
nauchnogo tsentra RAN, 2016, no. 1, pp. 24–31.



A NEW APPROACH TO CALCULATING THE COLLISION OF AN ELECTRON WITH MOLECULES

© **R.F. Akhmetyanov, E.S. Shikhovtseva**

Institute of Molecule and Crystal Physics – Subdivision of the Ufa Federal Research Centre
of the Russian Academy of Sciences,
151, prospect Oktyabrya, 450075, Ufa, Russian Federation

The purpose of the work is to study the mechanism of electron capture by a molecule with the formation of a negative ion. To solve this problem, methods of quantum chemistry are used or other model approaches are used by introducing a certain model interaction potential. The disadvantage of such methods is that for specific molecules we must introduce specific interaction potentials. In this work, we adhere to the standard Coulomb interaction and in a basis in which the kernel of the system of integral equations has a degenerate form.

Keywords: Coulomb systems, scattering matrix.