

УДК 539.1.08, 539.198

PACS 34.80.Dp, 34.80.Gs

DOI: <https://doi.org/10.24144/2415-8038.2016.39.120-127>

Л.О. Бандурина<sup>1</sup>, С.В. Гедеон<sup>2</sup>, А.-К.В. Долинай<sup>2</sup>, Є.А. Нодь<sup>2</sup>

<sup>1</sup> ІЕФ НАН України, вул. Університетська, 21, 88000, Ужгород

e-mail: lusiabandurina@mail.ru

<sup>2</sup> Ужгородський національний університет, вул. Волошина, 54, 88000, Ужгород

e-mail: gedsv@narod.ru, anna-kristina@ukr.net, nagy-liz@yandex.ru

## ОДНОЧАСТИНКОВИЙ ПІДХІД ДО ПРОБЛЕМИ C<sub>2</sub>-ФРАГМЕНТАЦІЇ ІОНІВ ФУЛЕРЕНУ C<sub>60</sub><sup>q+</sup> (q = 1, 2, 3) ЕЛЕКТРОННИМ УДАРОМ

У даній роботі оцінена можливість пояснення C<sub>2</sub>-фрагментації іонів фулерену C<sub>60</sub><sup>q+</sup> (q = 1, 2, 3) електронним ударом у рамках „одночастинкового” підходу, на основі розрахунків перерізів розсіяння e – C. При цьому перерізи прямої іонізації обчислювалися за формулою Лотца для оболонок 2p, 2s та подвійної іонізації з 2p-оболонки. Сумарний переріз збудження з основного стану вуглецю 2s<sup>2</sup>2p<sup>2</sup> <sup>3</sup>P у 27 вище розміщених станів був розрахований методом R-матриці з B-сплайнами.

**Ключові слова:** C<sub>2</sub>-фрагментація, іони фулерену C<sub>60</sub><sup>q+</sup>, атом вуглецю, розсіяння електронів, метод R-матриці з B-сплайнами, перерізи розсіяння.

### Вступ

Унікальні властивості фулеренів у цілому і, зокрема, повністю алотропної форми вуглецю C<sub>60</sub>, з часу відкриття цих об'єктів привертають підвищену увагу експериментаторів і теоретиків. Одним з основних предметів дослідження є їх виключно висока стабільність. Остання з необхідністю вимагає вивчення механізмів, які призводять до збудження і релаксації фулеренів. Зокрема процеси збудження досліджувалися методами однофотонного або багатифотонного поглинання, теплового нагріву, електронного удару, шляхом зіткнення з поверхнями, кластерними, молекулярними і атомними іонами, а також з нейтральними частинками. „Охолодження” збуджених фулеренів може відбуватися через радіаційні втрати енергії, випаровування електронів (термоіонізація) і викид нейтральних або заряджених частинок (фрагментація) (детальніше див. [1]). Відносне значення перерахованих способів охолодження сильно залежить від енергії збудження.

Всебічне вивчення „бакмінстерського” фулерену C<sub>60</sub> дозволило встановити кілька важливих параметрів і принципів, які будуть потрібні нам для подальшого обговорення. Так, загальноприйняте значення енергії зв'язку фрагменту C<sub>2</sub> до C<sub>58</sub><sup>q+</sup> (для q = 0, 1, 2, ...) видається близьким до 11 еВ [2]. Доведено також, що домінуючим процесом для формування невеликих фрагментів з іонів фулерену є послідовна втрата ним молекулярної „зв'язки” C<sub>2</sub> [3]. Але тоді незрозуміло чому в мас-спектрах так багато великих багатозарядних іонних фрагментів у порівнянні з відповідними материнськими іонами [4]. Відомо також, що для фрагментації в мілісекундному режимі часу необхідно близько 38 еВ [5]. Як стверджується в [1], найбільш ефективним способом „внесення” такої кількості енергії є колективне збудження фулерену шляхом утворення плазмона.

На противагу більшості попередніх досліджень фрагментації фулеренів, що базувалися на дисоціативних процесах іонізації нейтральних фулеренів, в експерименті [1] вивчалася чиста C<sub>2</sub>-фрагментація електронним ударом масово

відібраних катіонів  $C_{60}^{q+}$  ( $q = 1, 2, 3$ ). Абсолютні перерізи втрати фрагменту  $C_2$  були визначені в [1] у діапазоні енергії електронів від відповідного порогу і до 1 кеВ. Проблеми, які проявилися в результаті досліджень [1], якраз і є предметом розгляду даної роботи. Ми зосереджуємося на порівнянні характерних особливостей перерізів розсіяння  $e - C$  та  $C_2$ -фрагментації іонів фулерену  $C_{60}^{q+}$  ( $q = 1, 2, 3$ ) електронним ударом. При цьому перерізи зіткнення електронів з атомом вуглецю беруться з нашої зі співавторами роботи [6], а також з недавньої праці [7].

### Методи дослідження

В роботі [1] вперше було детально вивчено на експерименті процес  $C_2$ -фрагментації іонів фулерену  $C_{60}^{q+}$  ( $q = 1, 2, 3$ ) електронним ударом. Згідно [1], енергетичні залежності перерізів втрати фрагмента  $C_2$  молекулою фулерену вказують на наявність двох різних процесів, відповідальних за фрагментацію. При низьких енергіях електрона, що налітає, відбувається пряме збудження гігантського резонансу плазмону. При енергіях електронів більше 100 еВ фрагментація іонів фулерену може бути описана як невдала іонізація. Тільки ця друга частина перерізу вказує на його залежність від заряду  $q$  початкового іона.

Експериментальні перерізи викликані електронним ударом  $C_2$ -фрагментації  $C_{60}^{q+}$ , що виміряні в роботі [1], для всіх трьох вимірних зарядових станів ( $q = 1, 2, 3$ ) мають одну і ту ж форму залежності від енергії. При енергіях нижче 100 еВ спостерігається явно виражена пікоподібна структура, а при вищих енергіях перерізи поведуться подібно до типового перерізу іонізації. Щоб обчислити вказані дві фракції, високоенергетична частина була підігнана в [1] за формулою Лотца [8], що зазвичай використовується для розрахунку перерізів іонізації електронним ударом. На відміну від всіх попередніх досліджень фрагментації фулеренів, які розглядали комбіновані процеси іонізації та фрагментації, в [1] була досліджена чиста

фрагментація. Щоб виокремити її внесок, підігнані „за Лотцом” перерізи, віднімали від виміряного перерізу. Подібність отриманого піку до гігантського резонансу плазмона, що спостерігався в інших дослідженнях, дала авторам роботи [1] підстави вважати, що при низьких енергіях налітаючого електрона домінуючою причиною процесу фрагментації є збудження плазмона. Причому форма цього піку, як показано в [1], не залежить від заряду іона.

Хороше узгодження другої частини перерізів з підгонкою Лотца вказує, що фрагментація в цьому енергетичному діапазоні фактично викликається процесом іонізації. Однак, оскільки заряд системи не змінюється, один з двох електронів, що вилетіли, повинен бути „повернений” у молекулу фулерену. Енергія відриву для цього процесу, згідно з методом підгонки в [1], приймалася рівною  $\sim 35$  еВ і, таким чином, добре узгоджується з положенням максимуму головного піку, який може бути приписаний плазмонному резонансу. При вищих енергіях налітаючого електрона, переважно повільний вибитий електрон буде непружно зіштовхуватися з іоном фулерену у процесі їх розділення. Якщо енергія електрона, вибитого під час зіткнення, досить низька, то електрон попаде в поле притягання іонізованого фулерену і рекомбінує з подальшим вивільненням енергії.

Що стосуються розрахунку структури атома вуглецю та перерізів розсіяння  $e - C$ , то у даній роботі нами використовуються результати праці [6]. Тому ми не зупиняємося на деталях методики проведених розрахунків спектроскопічних характеристик та перерізів розсіяння. Зазначимо тільки, що розрахунки процесів розсіяння електронів на атомі вуглецю здійснювалися в [6] методом  $R$ -матриці з  $V$ -слайнами (див. також працю [9]). Застосований у [6] розклад сильного зв'язку включав 28 спектроскопічних станів атома вуглецю, складених із конфігурацій  $1s^2 2s^2 2p^2$ ,  $1s^2 2s^2 2p 3l$  ( $l = 1, 2, 3$ ),  $1s^2 2s^2 2p 4s$ ,  $1s^2 2s 2p^3$  і  $1s^2 2p^4$ , та був доповнений вісьмома псевдостанами для повного врахування поляризації основного



атома вуглецю електронним ударом. Розглянуто випадки розсіяння  $e - C$ , коли атом вуглецю знаходиться в основному стані, а також у трьох нижніх збуджених станах. З рис. 2 видно, що переріз збудження жодного окремо взятого переходу практично не перевищує  $1.0 \cdot 10^{-16} \text{ см}^2$ . Більше того, як показали недавні розрахунки у наближенні BSR696 [7] з урахуванням понад 660 псевдостанів континууму, перерізи BSR28 [6] проявляють тенденцію до завищення на 5-20% у порівнянні з даними [7].

Розрахунки [7] підтвердили встановлений за результатами праці [6] факт близькості повних перерізів збудження електронами вуглецю в основному стані  $1s^2 2s^2 2p^2 \ ^3P$  та в двох нижніх збуджених станах  $2s^2 2p^2 \ ^1D$ ,  $2s^2 2p^2 \ ^1S$ . На рис. 3 наведені вказані перерізи, разом з доданим до кожного з них перерізом прямої  $2p$ -іонізації, також розрахованим у [7].

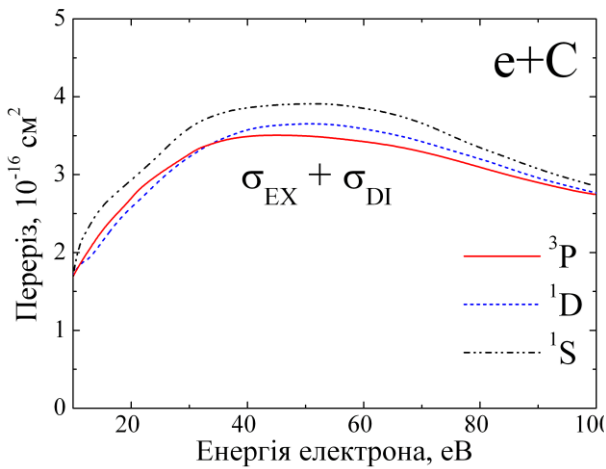


Рис. 3. Інтегральні перерізи розсіяння електронів на атомі С в основному стані  $1s^2 2s^2 2p^2 \ ^3P$  та в двох нижніх збуджених станах  $2s^2 2p^2 \ ^1D$  і  $2s^2 2p^2 \ ^1S$ . Для кожного випадку представлена сума перерізу  $2p$ -іонізації ( $\sigma_{DI}$ ) та перерізу сумарного збудження ( $\sigma_{EX}$ ), отримана нами на основі даних [7].

З рис. 3 видно, що сумарний переріз ( $\sigma_{DI} + \sigma_{EX}$ ) збудження та іонізації станів конфігураційної оболонки  $1s^2 2s^2 2p^2$  мало залежить від кінцевого терму цієї оболонки. Збудження ж із метастабільного стану  $2s 2p^3 \ ^5S$  є сильно подавлене, рис. 2d, через спин-забороненість переходів практично у всі стани, що включалися в

розклад сильного зв'язку [6]. Проте не факт, що для переходів з інших термів конфігурації  $2s 2p^3$  перерізи збудження будуть такими ж незначними. З рис. 2 видно, що перерізи переходів зі станів основної конфігурації вуглецю  $2s^2 2p^2$  у стани конфігурації  $2s 2p^3$  є домінуючими. Оскільки останні розміщені вище по енергії, збудження атомів вуглецю, що знаходяться у деякому усередненому по термах стані конфігурації  $2s 2p^3$ , може мати більші перерізи, ніж збудження з основної конфігурації  $2s^2 2p^2$ .

Перейдемо тепер до розгляду  $C_2$ -фрагментації іонів фулерену  $C_{60}^{q+}$  ( $q = 0, 1, 2$ ) електронним ударом [1]. На рис. 4 представлені відповідні експериментальні перерізи  $C_2$ -фрагментації [1], які порівнюються з сумарним перерізом збудження та прямої іонізації електронним ударом атома вуглецю в основному стані  $1s^2 2s^2 2p^2 \ ^3P$ . Сумарний переріз збудження був розрахований нами на основі даних

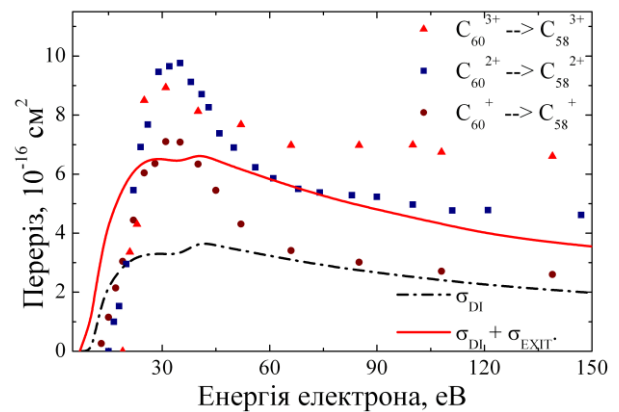


Рис. 4. Порівняння експериментальних перерізів  $C_2$ -фрагментації іонів фулерену  $C_{60}^{q+}$  ( $q = 1, 2, 3$ ) електронним ударом [1] з сумарним теоретичним перерізом збудження  $\sigma_{EX}$  та прямої іонізації  $\sigma_{DI}$  атома вуглецю С ( $2s^2 2p^2 \ ^3P$ ) електронним ударом. Перерізи збудження атомів вуглецю  $2p^2 \ ^3P$  взяті з [6] і сумовані за всіма станами, включеними у розклад сильного зв'язку. Перерізи однократної прямої іонізації з  $2p$ - та  $2s$ -оболонки, а також подвійної іонізації  $e^- - C \rightarrow C^{2+} - 3e^-$  розраховані за формулою Лотца [8].

BSR28 [6]. Перерізи однократної прямої іонізації з оболонки  $2p$  і  $2s$ , а також подвійної іонізації  $e^- - C \rightarrow C^{2+} - 3e^-$

розраховувалися нами за формулою Лотца [8].

З порівняння ходу експериментальних перерізів  $C_2$ -фрагментації іонів фулерену  $C_{60}^{q+}$  і теоретичних перерізів розсіяння електронів на атомі вуглецю можна зробити деякі висновки. По-перше, потрібно зважити на те, що спроба розгляду молекули фулерену, як сукупності окремих атомів вуглецю є достатньо грубою і спрощеною моделлю.

По-друге, іонізація електрона з  $2p$  або  $2s$ -оболонки атома вуглецю (до того ж перебудованих в результаті  $sp^3$ -гібридизації), що входять до складу іона молекули фулерену, не обов'язково повинна призводити до фрагментації останнього. Механізм подібної фрагментації якраз і належить з'ясувати. Відзначимо лише, що при певних значеннях енергій вибитого і розсіяного електрона не виключається можливість їх повторного розсіювання на атомах вуглецю, що складають молекулу фулерену. Як видно з рис. 4, пороги фрагментації приблизно рівні 13, 16.5 і 21 еВ (для  $q = 1, 2, 3$ , відповідно), тобто фрагментація відсутня при енергіях, менших за енергію іонізації  $2p$ -оболонки атома вуглецю (11.26 еВ).

По-третє, як видно з рис. 4, перерізи фрагментації перевищують в піку сумарний переріз прямої іонізації в  $\sim 1.8$ - $2.5$  раз. тобто в області енергій 20-50 еВ неможливо підігнати переріз фрагментації іонів фулерену сумарним перерізом прямої іонізації оболонки  $2p$ ,  $2s$  атома вуглецю, а також подвійної іонізації  $e^- - C \rightarrow C^{2+} - 3e^-$  (з порогом  $\sim 34$  еВ).

Напрошується висновок, що різницю між величинами перерізів фрагментації і прямої іонізації можна зменшити шляхом врахування (в рамках даної моделі) процесів збудження електронів з верхньої або внутрішньої оболонки атома вуглецю, які (процеси) можуть призвести до розриву чотирьох одинарних  $\pi$ -зв'язків молекули  $C_2$ . з іншими аналогічними фрагментами молекули фулерену і вирвати цю молекулу  $C_2$  із ґратки  $C_{60}$ . Максимальне значення

такого сумарного перерізу збудження, доданого до вказаного вище перерізу прямої іонізації якраз і представлено на рис. 4. В контексті припущення щодо можливості повторних актів зіткнення розсіяного і вибитого електронів з атомами вуглецю, які входять в склад  $C_{60}$ , подібне сумування значень перерізів різних елементарних процесів, що супроводжують зіткнення  $e^- - C$ , не видається надто довільним.

Дійсно проблемним моментом розглянутої моделі  $C_2$ -фрагментації іонів фулерену є механізм „зведення” воєдино різнорідних збуджень, прикладених (потенційно) до різних атомних систем вуглецю, що входять у склад фулерену. Всі збудження повинні в реальному режимі часу концентруватися на якійсь молекулі  $C_2$ , з тим, щоб обірвати її чотири одинарні  $\pi$ -зв'язки і, таким чином, призвести до  $C_2$ -фрагментації іона  $C_{60}^{q+}$ . Наразі таким механізмом концентрації збудження вважається утворення плазмона, про що йшлося вище.

## Висновки

На основі даних з розсіяння електронів на атомі вуглецю, в роботі розглянуто концепцію „одночастинкового” підходу до пояснення явища  $C_2$ -фрагментації іонів  $C_{60}^{q+}$  ( $q = 1, 2, 3$ ). Констатовано можливість пояснення  $C_2$ -фрагментації шляхом розгляду багатократного розсіяння електронів на атомах  $C_2$ , що входять у склад фулерена. Висунуто припущення про перспективність „одночастинкового” розгляду  $C_2$ -фрагментації фулерена при умові врахування  $sp^3$ -гібридизації атомів вуглецю при їх зв'язуванні у молекулу  $C_2$ , і розгляді збудження та іонізації електронним ударом гібридизованого атома в деякому усередненому стані конфігурації  $2s2p^3$ .

Автори висловлюють подяку своїм співавторам по роботі [6] за допомогу у проведенні розрахунків та продуктивні обговорення.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Hathiramani D. Electron-impact induced fragmentation of fullerene ions / D. Hathiramani, K. Aichele, W. Arnold, K. Huber, E. Salzborn, P. Scheier // *Phys. Rev. Lett.* – 2000. – V. 85, Num. 17. – P. 3604-3607.
2. Matt S. Kinetic energy release distributions and evaporation energies for metastable fullerene ions / S. Matt, O. Echt, M. Sonderegger, R. David, P. Scheier, J. Laskin, C. Lifshitz, T.D. Märk // *Chem. Phys. Lett.* – 1999. – V. 303, Iss. 3-4. – P. 379-386.
3. Dünser B. Sequential reaction channels of metastable  $C_{60}^{4+}$  / B. Dünser, O. Echt, P. Scheier, T.D. Märk // *Phys. Rev. Lett.* – 1997. – V. 79, Iss. 20. – P. 3861-3864.
4. Scheier P. Charge separation processes of multiply-charged fullerene ions  $C_{60-2m}^{z+}$ , with  $0 \leq m \leq 7$  and  $3 \leq z \leq 7$  / P. Scheier, B. Dünser, T.D. Märk // *J. Phys. Chem.* – 1995. – V. 99, Iss. 42. – P. 15428-15437.
5. Lezius M. Interaction of free electrons with  $C_{60}$ : ionization and attachment reactions / M. Lezius, P. Scheier, M. Foltin, B. Dünser, T. Rauth, V. M. Akimov, W. Krätschmer, T.D. Märk // *Int. J. Mass Spectrom. Ion Process.* – 1993. – V. 129. – P. 49-56.
6. Zatsarinny O. Electron-impact excitation of carbon / O. Zatsarinny, K. Bartschat, L. Bandurina, V. Gedeon // *Phys. Rev. A.* – 2005. – V. 71, Iss. 4. – P. 042702 (9).
7. Wang Y. *B*-spline *R*-matrix-with-pseudostates calculations for electron-impact excitation and ionization of carbon / Y. Wang, O. Zatsarinny, K. Bartschat // *Phys. Rev. A.* – 2013. – V. 87, Iss. 1. – P. 012704 (8).
8. Lotz W. Electron-impact ionization cross-sections and ionization rate coefficients for atoms and ions from hydrogen to calcium / W. Lotz // *Zeitschrift für Physik.* – 1968. – Bd. 216. – S. 241-247.
9. Zatsarinny O. BSR: *B*-spline atomic *R*-matrix codes / O. Zatsarinny // *Comput. Phys. Commun.* – 2006. – V. 174, No 4. – P. 273-356.
10. Burke V.M. FARM – A flexible asymptotic *R*-matrix package / V.M. Burke, C.J. Noble // *Comput. Phys. Commun.* – 1995. – V. 85, No 3. – P. 471-500.

Стаття поступила до редакції 17.05.2015 р.

Л.О. Бандурина<sup>1</sup>, С.В. Гедеон<sup>2</sup>, А.-К.В. Долинай<sup>2</sup>, Е.А. Нодь<sup>2</sup>

<sup>1</sup> ИЭФ НАН Украины, 88000, Ужгород, ул. Университетская, 21

<sup>2</sup> Ужгородский национальный университет, Украина, 88000, Ужгород, ул. Волошина, 54

## ОДНОЧАСТИЧНЫЙ ПОДХОД К ПРОБЛЕМЕ C<sub>2</sub>-ФРАГМЕНТАЦИИ ИОНОВ ФУЛЛЕРЕНА C<sub>60</sub><sup>q+</sup> (q = 1, 2, 3) ЭЛЕКТРОННЫМ УДАРОМ

В данной работе оценена возможность объяснения C<sub>2</sub>-фрагментации ионов фуллерена C<sub>60</sub><sup>q+</sup> (q = 1, 2, 3) электронным ударом в рамках „одночастичного” подхода, на основе расчетов сечений рассеяния e – C. При этом сечения прямой ионизации вычислялись по формуле Лотца для оболочек 2*p*, 2*s* и двойной ионизации из 2*p*-оболочки. Суммарное сечение возбуждения из основного состояния углерода 2*s*<sup>2</sup>2*p*<sup>2</sup> <sup>3</sup>P в 27 выше расположенных состояний было рассчитано методом *R*-матрицы с *B*-сплайнами.

**Ключевые слова:** C<sub>2</sub>-фрагментация, ионы фуллерена C<sub>60</sub><sup>q+</sup>, атом углерода, рассеяние электронов, метод *R*-матрицы с *B*-сплайнами, сечения рассеяния.

PACS 34.80.Dp, 34.80.Gs

L.O. Bandurina<sup>1</sup>, S.V. Gedeon<sup>2</sup>, A.-K.V. Dolynaj<sup>2</sup>, E.A. Nagy<sup>2</sup><sup>1</sup>IEP NAN of Ukraine, 88000, Uzhgorod, Universytetska Str., 21<sup>2</sup>Uzhgorod State University, Ukraine, 88000, Uzhgorod, Voloshina Str., 54

## THE SINGLE-PARTICLE APPROACH TO THE PROBLEM OF C<sub>2</sub> FRAGMENTATION OF FULLERENE IONS C<sub>60</sub><sup>q+</sup> (q = 1, 2, 3) BY ELECTRON IMPACT

**Background:** Experiments on the C<sub>2</sub> fragmentation of fullerene ions C<sub>60</sub><sup>q+</sup> (q = 1, 2, 3), which is induced by electron impact, indicate the presence of two different mechanisms of these processes: plasmon excitation (at low energies of the incident electron) and ionization processes (at higher energies). At this one of the two free electrons recombine with of fullerene molecule. The aim of this paper is the examine the possibility of explaining the C<sub>2</sub> fragmentation of fullerene ions C<sub>60</sub><sup>q+</sup> by electron impact in the framework of "oneparticle" approach, based on the study of e – C scattering processes.

**Methods:** The atomic structure and the excitation cross sections of e – C obtained by the B-spline R-matrix method. The close coupling expansion includes 28 spectroscopic states of carbon atoms, composed from 1s<sup>2</sup>2s<sup>2</sup>2p<sup>2</sup>, 1s<sup>2</sup>2s<sup>2</sup>2p3l (l = 1, 2, 3), 1s<sup>2</sup>2s<sup>2</sup>2p4s, 1s<sup>2</sup>2s2p<sup>3</sup>, 1s<sup>2</sup>2p<sup>4</sup> configurations, and 8 pseudo-state. The cross sections of 2s and 2p ionization and 2p double ionization of an C atom was calculated by the Lotz formula.

**Results:** We determine the excitation total cross sections from four lower 2s<sup>2</sup>2p<sup>2</sup> <sup>3</sup>P, <sup>1</sup>D, <sup>1</sup>S, and 2s2p<sup>3</sup> <sup>5</sup>S states of carbon atoms on the all overlying states. It is shown that the sum of cross sections the total excitation (σ<sub>EX</sub>) and the ionization of 2s<sup>2</sup>2p<sup>2</sup> configurational shell (σ<sub>DI</sub>) depends little on the final term of this shell. The excitation of the 2s2p<sup>3</sup> <sup>5</sup>S metastable state is strongly suppressed. Comparison of the total cross sections of e–C collision with the C<sub>2</sub> fragmentation cross sections indicates that they are differentiated to each other both on the structure of the energy dependence, as and in magnitude.

**Conclusions:** It is suggested that under the "oneparticle" approach to the problem of C<sub>2</sub> fragmentation of the C<sub>60</sub><sup>q+</sup> fullerene ions should be taken as the basis the sp<sup>3</sup>-hybridizational states of 2s2p<sup>3</sup> configuration of each of the two carbon atoms forming of molecule C<sub>2</sub>. It is also necessary to consider the possibility of re-scattering of free electrons.

**Key words:** C<sub>2</sub> fragmentation, fullerene ions C<sub>60</sub><sup>q+</sup>, the carbon atom, electron scattering, the B-spline R-matrix method, scattering cross sections.

PACS NUMBER: 34.80.DP, 34.80.GS

### REFERENCES

- Hathiramani D. Electron-impact induced fragmentation of fullerene ions / D. Hathiramani, K. Aichele, W. Arnold, K. Huber, E. Salzborn, P. Scheier // Phys. Rev. Lett. – 2000. – V. 85, Num. 17. – P. 3604-3607.
- Matt S. Kinetic energy release distributions and evaporation energies for metastable fullerene ions / S. Matt, O. Echt, M. Sonderegger, R. David, P. Scheier, J. Laskin, C. Lifshitz, T.D. Märk // Chem. Phys. Lett. – 1999. – V. 303, Iss. 3-4. – P. 379-386.
- Dünser B. Sequential reaction channels of metastable C<sub>60</sub><sup>4+</sup> / B. Dünser, O. Echt, P. Scheier, T.D. Märk // Phys. Rev. Lett. – 1997. – V. 79, Iss. 20. – P. 3861-3864.
- Scheier P. Charge separation processes of multiply-charged fullerene ions C<sub>60-2m</sub><sup>z+</sup>, with 0 ≤ m ≤ 7 and 3 ≤ z ≤ 7 / P. Scheier, B. Dünser, T.D. Märk // J. Phys. Chem. – 1995. – V. 99, Iss. 42. – P. 15428-15437.
- Lezius M. Interaction of free electrons with C<sub>60</sub>: ionization and attachment reactions / M. Lezius, P. Scheier, M. Foltin, B. Dünser, T. Rauth, V. M. Akimov, W.

- Krätschmer, T.D. Märk // *Int. J. Mass Spectrom. Ion Process.* – 1993. – V. 129. – P. 49-56.
6. Zatsarinny O. Electron-impact excitation of carbon / O. Zatsarinny, K. Bartschat, L. Bandurina, V. Gedeon // *Phys. Rev. A.* – 2005. – V. 71, Iss. 4. – P. 042702 (9).
7. Wang Y. *B*-spline *R*-matrix-with-pseudostates calculations for electron-impact excitation and ionization of carbon / Y. Wang, O. Zatsarinny, K. Bartschat // *Phys. Rev. A.* – 2013. – V. 87, Iss. 1. – P. 012704 (8).
8. Lotz W. Electron-impact ionization cross-sections and ionization rate coefficients for atoms and ions from hydrogen to calcium / W. Lotz // *Zeitschrift für Physik.* – 1968. – Bd. 216. – S. 241-247.
9. Zatsarinny O. BSR: *B*-spline atomic *R*-matrix codes / O. Zatsarinny // *Comput. Phys. Commun.* – 2006. – V. 174, No 4. – P. 273-356.
10. Burke V.M. FARM – A flexible asymptotic *R*-matrix package / V.M. Burke, C.J. Noble // *Comput. Phys. Commun.* – 1995. – V. 85, No 3. – P. 471-500.

© Ужгородський національний університет