УДК 539.186; 539.196

О.М. Карбованець, М.І. Карбованець, В.Ю. Лазур, М.В. Хома
Ужгородський національний університет, 88000, Ужгород, вул. Волошина, 54

ДВОЕЛЕКТРОННА ОБМІННА ВЗАЄМОДІЯ В КВАЗІМОЛЕКУЛЯРНИХ СИСТЕМАХ З ДИПОЛЬНИМ ДАЛЕКОДІЙНИМ ПОТЕНЦІАЛОМ

У рамках асимптотичної теорії одержане аналітичне представлення для матричного елемента обмінної взаємодії, що визначає процес прямого двоелектронного захоплення у повільних зіткненнях полярних молекул із полярними молекулярними іонами.

Ключові слова: полярні молекули, повільні зіткнення, двоелектронна обмінна взаємодія, асимптотична теорія.

Вступ

Процеси двоелектронного захоплення при повільних іон-атомних зіткненнях вже тривалий час є об'єктами інтенсивних досліджень як експериментаторів, так і теоретиків (див. [1-3] і приведенні там посилання). Одним із принципових результатів досліджень іон-атомних зіткнень стало розуміння того, що двоелектронні процеси відбуваються завдяки міжелектронним кореляціям, тоді як для одноелектронних процесів роль міжелектронних кореляцій несуттєва [4]. Сукупність одержаних в численних працях результатів утворила необхідне підґрунтя для дослідження двоелектронних процесів з перерозподілом в іон-молекулярних зіткненнях. Серед них особливо цікавими є процеси одно- та двоелектронної перезарядки за участю полярних молекул, властивості яких суттєво відрізняються від властивостей неполярних молекул. Для зарядово-обмінних реакцій за участю полярних молекул характерною є просторова анізотропія міжчастинкової взаємодії, викликана наявністю в полярних молекулах власного сталого дипольного моменту. Вказана анізотропія суттєво впливає на динаміку процесів з перерозподілом при повільних зіткненнях багатозарядних іонів з полярними молекулами і потребує детального вивчення.

Позаяк динаміка низькоенергетичних квазірезонансних іон-атомних зіткнень визначається, переважно, великими міжатомними відстанями R у порівнянні з характерними розмірами взаємодіючих частинок, то для їх теоретичного дослідження широко застосовувалися методи асимптотичної теорії атомних зіткнень [1]. Проте, для реакцій за участю молекул асимптотична теорія розроблена в значно меншій мірі і обмежується, як правило, описанням процесів одноелектронного захоплення. Так, у роботах [5,6] асимптотичний метод вперше був застосований до теоретичного дослідження одноелектронної перезарядки при повільних зіткненнях полярних молекул з багатозарядними іонами. Одноелектронна обмінна взаємодія була обчислена в [5,6] у квазікласичному наближенні, а незбурена полярна молекула розглядалася в моделі точкового диполя [7]. У працях [8,9] методом Ландау-Херрінґа досліджувалися процеси одноелектронного захоплення у зіткненнях полярних молекул із власними катіонами та дипольно-зв'язаними аніонами.

Що стосується застосування асимптотичного методу до дослідження процесів двоелектронного захоплення при повільних зіткненнях іонів з полярними молекулами, то, наскільки нам відомо, воно обмежується роботою [10]. Матричні елементи двоелектронної обмінної взаємодії, відповідальні за вказані процеси, були обчислені в [10] у рамках квазікласичного варіанту асимптотичної теорії.

У даній роботі асимптотична теорія [10] поширена на дослідження процесів двоелектронного захоплення в квазімолекулярних двоцентрових системах з ефективними потенціалами, які,окрім кулонівської, включають взаємодії тунелюючих електронів з точковими диполями. Дослідження такої модельної задачі є важливим з огляду на можливість її використання для дослідження процесів двоелектронної перезарядки при зіткненні полярних молекул $A^{(Z_a-2)+}$ з двозарядними іонами полярних молекул B^{Z_b+}:

$$A^{(Z_a-2)+} + B^{Z_b+} \to A^{Z_a+} + B^{(Z_b-2)+} \qquad (1)$$

(Z_a і Z_b – ефективні заряди іонів A^{Z_a+} і B^{Z_b+}, для нейтральних полярних молекул $Z_a = Z_b = 2$).

У даній роботі одержане аналітичне представлення для головного члена розкладу за степенями $R^{-1} << 1$асимптотики матричного елемента H_{ab}двоелектронної обмінної взаємодії у контексті зіткнень полярних молекул з полярними молекулярними іонами виду (1).

У роботі використовується атомна система одиниць ($e^2 = \hbar = m_e = 1$).

Постановка задачі

Будемо вважати, що молекулярні іони A^{Z_a+} і B^{Z_b+} не змінюють свого стану в процесі зіткнення і зведемо задачу до розгляду руху двох активних електронів у полі двох іонів: A^{Z_a+} і B^{Z_b+}. У двоелектронному наближенні електронний гамільтоніан квазімолекули $(AB)^{(Z_a+Z_b-2)+}$ має вид:

$$\hat{H}_{el} = \sum_{i=1}^{2}\left(-\Delta_i/2 + V_a(\vec{r}_{ia}) + V_b(\vec{r}_{ib})\right) + r_{12}^{-1}, \qquad (2)$$

де $\vec{r}_{ia(b)}$ – радіус-вектор i-го електрона відносно центра мас A^{Z_a+}(B^{Z_b+}); r_{12} – відстань між електронами (рис.1). Потенціали $V_{a(b)}$ взаємодії електрона з іонними залишками A^{Z_a+} і B^{Z_b+}мають наступну асимптотичну поведінку:

$$V_{a,b}(\vec{r}) \xrightarrow[r\to\infty]{} -Z_{a,b}/r. \qquad (3)$$

Позначимо через $\vec{d}_{1a}$ і $\vec{d}_{2a}$ дипольні моменти відповідно молекулярних іонів $A^{(Z_a-1)+}$ і A^{Z_a+}, а через $\vec{d}_{1b}$ і $\vec{d}_{2b}$ - дипольні моменти іонів $B^{(Z_b-1)+}$ і B^{Z_b+}. Запровадимо системи координат $\{x, y, z\}$ та $\{\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}\}$із спільним початком O у центрі мас частинки $A^{(Z_a-1)+}$ так, щоб вісь Oz була направлена вздовж вектора $\vec{R}$, а вісь $O\tilde{z}$ - уздовж вектора $\vec{d}_a$. Перехід від $\{\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}\}$ до $\{x, y, z\}$ визначається трьома кутами Ейлера $\alpha_1, \beta_1, \gamma_1$ [11]. Уведемо також систему координат $\{\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}\}$ з початком O' у центрі мас іона B^{Z_b+}із віссю$O'\bar{z}$ уздовж $\vec{d}_b$. Орієнтація системи $\{\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}\}$ відносно $\{x, y, z\}$ задається кутами Ейлера $\alpha_2, \beta_2, \gamma_2$. Необхідні позначання приведені на рис. 1.

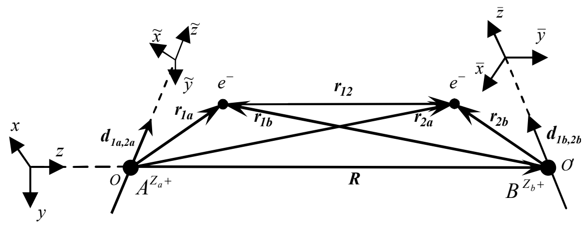

Рис.1. Геометрія квазімолекули

Позначимо через m_{1a} і m_{2a} проекції на вісь $O\tilde{z}$ орбітальних моментів двох активних електронів у початковому стані, коли вони центровані на іоні A^{Z_a+}. Нехай m_{1b}, m_{2b} - проекції на вісь $O'\bar{z}$ орбітальних моментів цих електронів,центрованих на іоні B^{Z_b+}у кінцевому стані. Обмежимося випадком, коли перші потенціали іонізації молекул $A^{(Z_a-2)+}$ і$B^{(Z_b-2)+}$ менші будь-якого другого потенціалу іонізації цих частинок. Із асимптотичної теорії відомо, що двоелектронна обмінна взаємодія H_{ab} визначається асимптотиками двоелектронних хвильових функцій квазімолекулярної системи $(AB)^{(Z_a+Z_b-2)+}$ у всьому конфігураційному просторі двоелектронних координат [1]. Як показано в [1,10], для асимптотики H_{ab} можна одержати таке представлення через одноелектронні орбіталі:

$$H_{ab} \underset{R\to\infty}{\cong} (-1)^S \times$$
$$\times \left\langle \Psi_b^{(0)}(\vec{r}_{1b})\Psi_{ba}(\vec{r}_{2a}) \middle| r_{12}^{-1} \middle| \Psi_{ab}(\vec{r}_{1b})\Psi_a^{(0)}(\vec{r}_{2a}) \right\rangle . \quad (4)$$

Тут Ψ_{ab} – хвильова функція "зовнішнього" електрона молекули $A^{(Z_a-2)+}$ у околі іона B^{Z_b+}, $\Psi_a^{(0)}$ – хвильова функція основного електронного стану іона $A^{(Z_a-1)+}$. Аналогічно, Ψ_{ba} – хвильова функція "зовнішнього" електрона молекули $B^{(Z_b-2)+}$ у околі молекулярного залишку A^{Z_a+}, а $\Psi_b^{(0)}$ – хвильова функція основного стану молекулярного іона $B^{(Z_b-1)+}$. Функції $\Psi_a^{(0)}$ і $\Psi_b^{(0)}$ вважаємо відомими, як незбурені хвильові функції основних станів іонів $A^{(Z_a-1)+}$ і $B^{(Z_b-1)+}$.

Перейдемо до знаходження хвильових функцій Ψ_{ab} і Ψ_{ba} квазімолекулярних систем $A^{(Z_a-2)+} + B^{Z_b+}$ і $A^{Z_a+} + B^{(Z_b-2)+}$ у областях конфігураційного простору двоелектронних координат, що дають основний внесок у асимптотику обмінного матричного елемента (4) – відповідно в околах іонів B^{Z_b+} і A^{Z_a+}.

Одноелектронна хвильова функція квазімолекулярної системи $A^{(Z_a-2)+} + B^{Z_b+}$

Знайдемо асимптотику хвильової функції Ψ_{ab} полярної молекули у околі молекулярного іона, де взаємодія тунелюючого електрона з чужим центром B^{Z_b+} є великою, а зі своїм центром $A^{(Z_a-1)+}$ - малим збуренням. Хвильова функція $\Psi_{ab}(\vec{r}_b)$ задовольняє двоцентрове рівняння Шредінґера:

$$\left(-\Delta/2 + U_a(r_a) + V_b(r_b) - E_{1a}\right)\Psi_{ab}(\vec{r}_b) = 0, \quad (5)$$

де $\vec{r}_b = \vec{r}_a - \vec{R}$; $U_a(r_a)$ і $V_b(r_b)$ - потенціали взаємодії електрона з іонами $A^{(Z_a-1)+}$ і B^{Z_b+}.

Енергія електрона E_{1a} в квазімолекулярній системі $A^{(Z_a-2)+} + B^{Z_b+}$ при $R \to \infty$ збігається до енергії зв'язку $E_{1a}^{(0)} = -1/2n_{1a}^2$ зовнішнього електрона незбуреної молекули $A^{(Z_a-2)+}$. У рамках моделі точкового диполя ефективні аксіально-симетричні потенціали $U_a(\vec{r}_a)$ і $V_b(\vec{r}_b)$, що включають взаємодію з відповідними кулонівським полем молекулярних залишків та дипольними моментами $\vec{d}_{1a}$ і $\vec{d}_{2b}$ молекулярних іонів $A^{(Z_a-1)+}$ і B^{Z_b+}, мають вид:

$$U_a(\vec{r}_a) = -(Z_a - 1)/r_a - \vec{d}_{1a}\vec{r}_a / r_a^3, \quad (6)$$

$$V_b(\vec{r}_b) = -Z_b / r_b - \vec{d}_{2b}\vec{r}_b / r_b^3. \quad (7)$$

Розв'язок рівняння Шредінґера (5) при $r_a \sim 1$ повинен переходити у асимптотику незбуреної хвильової функції полярної молекули $\Psi_a^{(0)}(\vec{r}_a)$, яка у моделі точкового диполя (6) в координатах $\{\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}\}$ має вид [6,10]:

$$\Psi_{ab}(\vec{\tilde{r}}_a) \xrightarrow[1<r_a<<R]{} \Psi_a^{(0)}(\vec{\tilde{r}}_a) = \frac{(2/n_{1a})^{n_{1a}(Z_a-1)+1}}{2(Z_a-1)^{1/2}\Gamma^{1/2}(2n_{1a}(Z_a-1))} r_a^{n_{1a}(Z_a-1)-1} e^{-r_a/n_{1a}} Z_{Lm_{1a}}^{(1)}(\tilde{\theta}_a, \tilde{\phi}_a), \quad (8)$$

$\Gamma(t)$ - гамма-функція. Дипольно-сферичні функції $Z_{Lm_{1a}}^{(1)}(\tilde{\theta}_a, \tilde{\phi}_a)$ задовольняють рівняння [7]:

$$\left[-\frac{1}{\sin\tilde{\theta}_a}\frac{\partial}{\partial\tilde{\theta}_a}\left(\sin\tilde{\theta}_a\frac{\partial}{\partial\tilde{\theta}_a}\right) - \frac{1}{\sin^2\tilde{\theta}_a}\frac{\partial^2}{\partial\tilde{\phi}_a^2} - 2d_{1a}\cos\tilde{\theta}_a\right] Z_{Lm_{1a}}^{(1)}(\tilde{\theta}_a, \tilde{\phi}_a) = \eta_{Lm_{1a}} Z_{Lm_{1a}}^{(1)}(\tilde{\theta}_a, \tilde{\phi}_a). \quad (9)$$

Розкладаючи функції $Z^{(1)}_{Lm_{1a}}\left(\tilde{\theta}_a,\tilde{\phi}_a\right)$ за повною ортонормованою системою сферичних функцій $Y_{\ell m_{1a}}\left(\tilde{\theta}_a,\tilde{\phi}_a\right)$:

$$Z^{(1)}_{Lm_{1a}}\left(\tilde{\theta}_a,\tilde{\phi}_a\right)=\sum_{\ell\geq|m_{1a}|}a^{m_{1a}}_{L\ell}\left(d_{1a}\right)Y_{\ell m_{1a}}\left(\tilde{\theta}_a,\tilde{\phi}_a\right), \quad (10)$$

зобразимо $\Psi^{(0)}_a\left(\vec{r}_a\right)$ у (8) у виді (у системі координат $\{x,y,z\}$) [10]:

$$\Psi^{(0)}_a\left(\vec{r}_a\right)\underset{1<r_a<<R}{\approx}\frac{\left(2/n_{1a}\right)^{n_{1a}(Z_a-1)+1}r_a^{n_{1a}(Z_a-1)-1}}{2\left(Z_a-1\right)^{1/2}\Gamma^{1/2}\left(2n_{1a}\left(Z_a-1\right)\right)}e^{-r_a/n_{1a}}\sum_{\ell\geq|m_{1a}|}\sum_{k=-\ell}^{\ell}a^{m_{1a}}_{L\ell}\left(d_{1a}\right)D^{\ell}_{km_{1a}}\left(\alpha_1,\beta_1,\gamma_1\right)Y_{\ell m_{1a}}\left(\theta_a,\phi_a\right), \quad (11)$$

де $D^{\ell}_{km_{1a}}\left(\alpha,\beta,\gamma\right)$ - функції Віґнера. Коефіцієнти розкладу $a^{m_{1a}}_{L\ell}\left(d_{1a}\right)$задовольняють рекурентну систему:

$$2d_{1a}\left[\frac{\ell^2-m^2_{1a}}{4\ell^2-1}\right]^{1/2}a^{m_{1a}}_{L\ell-1}+\left[\ell\left(\ell+1\right)-\eta_{Lm_{1a}}\right]a^{m_{1a}}_{L\ell}+2d_{1a}\left[\frac{\left(\ell+1\right)^2-m^2_{1a}}{\left(2\ell+1\right)\left(2\ell+3\right)}\right]^{1/2}a^{m_{1a}}_{L\ell+1}=0. \quad (12)$$

У міжцентровій області електронних координат, де потенціали $U_a\left(r_a\right)$ і $V_b\left(r_b\right)$ можна замінити їх кулонівськими асимптотиками, розв’язок рівняння (5) при $\theta_a\approx 0$ (тобто близько до осі $\vec{R}$) має вид[6,10]:

$$\Psi_a\left(\vec{r}_a\right)\underset{r_a\sim R/2}{\approx}\frac{1}{n_{1a}\pi^{1/2}\Gamma^{1/2}\left(2n_{1a}\left(Z_a-1\right)+1\right)}\left(\frac{n_{1a}\left(Z_a-1\right)}{e}\right)^{n_{1a}(Z_a-1)}\frac{1}{z_a\left|p_a\left(z_a\right)\right|^{1/2}}\exp\left(-\int_{z_{1a}}^{z_a}\left|p_a(z)\right|dz\right)\times$$

$$\times\exp\left(-\frac{\rho^2p_a\left(z_a\right)}{2z_a}\right)\sum_{\ell\geq|m_{1a}|}\sum_{k=-\ell}^{\ell}a^{m_{1a}}_{L\ell}\left(d_{1a}\right)D^{\ell}_{km_{1a}}\left(\alpha_1,\beta_1,\gamma_1\right)\frac{1}{2^{|k|}|k|!}\left[\frac{\left(2\ell+1\right)\left(\ell+|k|\right)!}{2\left(\ell-|k|\right)!}\right]^{1/2}\left(\frac{\rho}{z_a}\right)^{|k|}e^{ik\phi_a}, \quad (13)$$

де z_a - проекція $\vec{r}_a$ на вісь $\vec{R}$, ρ - відстань від осі $\vec{R}$, $p_a(z)$ - квазіімпульс при русі електрона уздовж $\vec{R}$:

$$p^2_a\left(z_a\right)=2\left(-\left|E_{1a}\right|+\left(Z_a-1\right)/z_a+Z_b/\left(R-z_a\right)\right).$$

Точки повороту z_{1a},z_{2a} на між'ядерній осі визначаються співвідношенням $p_a\left(z_{1a}\right)=$ $=p_a\left(z_{2a}\right)=0$.При $r_a\sim 1$ розв’язок (13) переходить у асимптотику незбуреної хвильової функції полярної молекули (11).Для знаходження хвильової функції $\Psi_{ab}\left(\vec{r}_b\right)$у околі B^{Z_b+}зручно перейти від диференціального рівняння (5) до еквівалентного інтегрального рівняння (див. [1,10]):

$$\Psi_{ab}\left(\vec{r}_b\right)=-\frac{1}{2}\int_{\Sigma}\left[\Psi_{ab}\left(\vec{r}\,'_b\right)\nabla G_b\left(\vec{r}_b,\vec{r}\,'_b;E_{1a}\right)-G_b\left(\vec{r}_b,\vec{r}\,'_b;E_{1a}\right)\nabla\Psi_{ab}\left(\vec{r}\,'_b\right)\right]d\vec{\Sigma}. \quad (14)$$

Тут G_b- одноелектронна двоцентрова функція Гріна квазімолекулярної системи $A^{(Z_a-2)+}+B^{Z_b+}$, яка задовольняє рівняння

$$\left(-\frac{\Delta}{2}+U_a\left(\left|\vec{R}-\vec{r}_b\right|\right)+V_b\left(r_b\right)-E_{1a}\right)G_b\left(\vec{r}_b,\vec{r}\,'_b;E_{1a}\right)=$$
$$=\delta\left(\vec{r}_b-\vec{r}\,'_b\right). \quad (15)$$

Інтегральне рівняння (14) дозволяє обчислити $\Psi_{ab}(\vec{r}_b)$методом ітерацій, причому вже перша ітерація (вибір у якості функції $\Psi_{ab}(\vec{\bar{r}}_b')$вінтегралі (14)функцію (13)) приводить до правильного виразу для головного члена асимптотичного розкладу хвильової функції $\Psi_{ab}(\vec{r}_b)$.Розкладемо функцію Гріна $G_b(\vec{\bar{r}}_b,\vec{\bar{r}}_b';E_{1a})$(а також дельта-функцію $\delta(\vec{\bar{r}}_b-\vec{\bar{r}}_b')$)в (15) за повною ортонормованою системою дипольно-сферичних функцій $Z^{(2)}_{\bar{\ell}\bar{m}}(\bar{\theta}_b,\bar{\phi}_b)$ [12]:

$$G_b(\vec{\bar{r}}_b,\vec{\bar{r}}_b';E_{1a})=-\frac{2}{r_b r_b'}\sum_{\bar{\ell}=0}^{\infty}\sum_{\bar{m}=-\bar{\ell}}^{+\bar{\ell}} g_{\bar{\ell}\bar{m}}(r_b,r_b';E_{1a})Z^{(2)}_{\bar{\ell}\bar{m}}(\bar{\theta}_b,\bar{\phi}_b)Z^{(2)*}_{\bar{\ell}\bar{m}}(\bar{\theta}_b',\bar{\phi}_b'), \qquad (16)$$

де $g_{\bar{\ell}\bar{m}}(r_b,r_b';E_{1a})$ - функція Гріна радіального руху. Функції $Z^{(2)}_{\bar{\ell}\bar{m}}(\bar{\theta}_b,\bar{\phi}_b)$ задовольняють рівняння (11) із такими замінами в останньому: $d_{1a}\to d_{2b}$, $\eta_{Lm_{1a}}\to s_{\bar{\ell}\bar{m}}(s_{\bar{\ell}\bar{m}}+1)$.

Підставивши розклад(16) у (15), одержимо рівняння на радіальну функцію Гріна (при $1\le r_b\le R/2$, $\left|\vec{R}-\vec{\bar{r}}_b\right|>>1$):

$$\left\{\frac{d^2}{dr_b^2}+2\left[E_{1a}+\frac{Z_a-1}{\left|\vec{R}-\vec{\bar{r}}_b\right|}+\frac{Z_b}{r_b}-\frac{s_{\bar{\ell}\bar{m}}(s_{\bar{\ell}\bar{m}}+1)}{2r_b^2}\right]\right\}g_{\bar{\ell}\bar{m}}(r_b,r_b';E_{1a})=\delta(r_b-r_b'). \qquad (17)$$

Функцію $g_{\bar{\ell}\bar{m}}$ можна представитиу виді [13]:

$$g_{\bar{\ell}\bar{m}}(r_b,r_b';E_{1a})=W_b^{-1}f_{1\bar{\ell}\bar{m}}(r_<)f_{2\bar{\ell}\bar{m}}(r_>), \qquad (18)$$
$$W_b=f_{1\bar{\ell}\bar{m}}f_{2\bar{\ell}\bar{m}}'-f_{2\bar{\ell}\bar{m}}f_{1\bar{\ell}\bar{m}}'=-2/n_{1a},$$
$$r_<=\min(r_b,r_b'),\qquad r_>=\max(r_b,r_b'),$$

де $f_{1\bar{\ell}\bar{m},2\bar{\ell}\bar{m}}(r)$ - лінійно незалежні розв'язки однорідного рівняння

$$\frac{d^2 f_{i\bar{\ell}\bar{m}}(r)}{dr^2}+2\left[E_{1a}+\frac{Z_a-1}{\left|\vec{R}-\vec{\bar{r}}\right|}+\frac{Z_b}{r}-\frac{s_{\bar{\ell}\bar{m}}(s_{\bar{\ell}\bar{m}}+1)}{2r^2}\right]f_{i\bar{\ell}\bar{m}}(r)=0,\quad i=1,2, \qquad (19)$$

$$f_{1\bar{\ell}\bar{m}}(r)\underset{r\to\infty}{=}r^{-n_{1a}Z_b}e^{r/n_{1a}},\quad f_{2\bar{\ell}\bar{m}}(r)\underset{r\to\infty}{=}r^{n_{1a}Z_b}e^{-r/n_{1a}}. \qquad (20)$$

Як видно із (14), асимптотика Ψ_{ab} за змінною r_a визначається асимптотикою функції Гріна $G_b(\vec{\bar{r}}_b,\vec{\bar{r}}_b';E_{1a})$ при $r_b'\sim R>>1$, $r_b\sim 1$, тому $r_<=r_b$ і$r_>=r_b'$. У цій області конфігураційного простору електронних координат членом$(Z_a-1)/\left|\vec{R}-\vec{\bar{r}}_b\right|_{r_b\sim 1}<<1$ в рівнянні (19) можна знехтувати, а в якості $f_{1\bar{\ell}\bar{m}}(r_b)$ взяти розв'язок $f^{(0)}_{1\bar{\ell}\bar{m}}(r_b)$ рівняння (19) без цього потенціалу, тобто

$$\frac{d^2 f^{(0)}_{1\bar{\ell}\bar{m}}(r_b)}{dr_b^2}+2\left(E_{1a}+\frac{Z_b}{r_b}-\frac{s_{\bar{\ell}\bar{m}}(s_{\bar{\ell}\bar{m}}+1)}{2r_b^2}\right)f^{(0)}_{1\bar{\ell}\bar{m}}(r_b)=0. \qquad (21)$$

Знайдемо розв'язок $f_{2\bar{\ell}\bar{m}}(r_b')$ рівняння (19) у асимптотичній області $r_b' >> 1$, де малим членом $\sim r_b'^{-2}$ можна знехтувати. У цьому випадку розв'язок рівняння (19), нормований на асимптотику функції $f_{2\bar{\ell}\bar{m}}$ (20),у квазікласичному наближенні має вид [10]:

$$f_{2\bar{\ell}\bar{m}}(r_b') \underset{r_b'>>1}{=} \frac{1}{n_{1a}^{1/2}} \left(\frac{n_{1a}^2 Z_b}{2e} \right)^{n_{1a} Z_b} \frac{1}{|p(z_b')|^{1/2}} \exp\left(-\int_{z_{1b}'}^{z_b'} |p(z)| dz \right) \exp\left(-\frac{\rho^2 p(z_b')}{2z_b'} \right), \tag{22}$$

$$p^2(z_b') = 2\left(-|E_{1a}| + \frac{Z_a - 1}{R - z_b'} + \frac{Z_b}{z_b'} \right), \qquad z_a' + z_b' = R. \tag{23}$$

Тут z_b' – проекція вектора $\vec{r}_b'$ на вісь $\vec{R}$;

$$p(z_{1b}') = p(z_{2b}') = 0, \; z_{1b,2b}' = R - z_{2a,1a}'.$$

Розкладаючи у представленні (16) диполько-сферичні функції $Z_{\bar{\ell}\bar{m}}^{(2)}(\bar{\theta}_b, \bar{\phi}_b)$ за сферичними функціями $Y_{\lambda(\mu)\bar{m}}(\bar{\theta}_b, \bar{\phi}_b)$ (див. (10)), використовуючи (18), (22) і значення $Y_{\mu s}^{*}(\theta_b', \phi_b')$ при малих кутах $\theta_b' \approx 0$, запишемо остаточний вираз для асимптотики функції Гріна $G_b(\vec{\bar{r}}_b, \vec{\bar{r}}_b'; E_{1a})$за змінною $r_b' \sim R >> 1$ (при цьому $r_b \approx 1$):

$$G_b(\vec{\bar{r}}_b, \vec{\bar{r}}_b'; E_{1a}) \underset{1 \approx r_b << r_{ba}' \sim R}{\approx} \frac{n_{1a}}{4\pi} \left(\frac{n_{1a}^2 Z_b}{2e} \right)^{n_{1a} Z_b} \exp\left(-\int_{z_a'}^{z_{2a}} |p_b(z)| dz \right) \exp\left(-\frac{\rho^2 \bar{p}(z_b')}{2z_b'} \right) \frac{1}{z_b z_b'} \times$$

$$\times \sum_{\bar{\ell}=0}^{\infty} \sum_{\bar{m}=-\bar{\ell}}^{+\bar{\ell}} \sum_{\lambda \ge |\bar{m}|} \sum_{\mu \ge |\bar{m}|} (-1)^{\lambda + |\bar{m}|} a_{\bar{\ell}\lambda}^{\bar{m}}(d_{2b}) a_{\bar{\ell}\mu}^{\bar{m}}(d_{2b}) \left[\frac{(2\lambda+1)(\lambda - |\bar{m}|)!}{(\lambda + |\bar{m}|)!} \right]^{1/2} f_{1\bar{\ell}\bar{m}}^{(0)}(r_b) \times$$

$$\times P_\lambda^{|\bar{m}|}(\bar{\theta}_b) e^{i\bar{m}\bar{\phi}_b} \sum_{s=-\mu}^{\mu} D_{s\bar{m}}^{\mu}(\alpha_2, \beta_2, \gamma_2) \frac{1}{2^{|s|}|s|!} \left[\frac{(2\mu+1)(\mu+|s|)!}{(\mu-|s|)!} \right]^{1/2} \left(\frac{\rho}{z_b'} \right)^{|s|} e^{-is\phi_b'}. \tag{24}$$

Тут $P_\lambda^{|\bar{m}|}(\bar{\theta}_b)$– приєднані поліноми Лежандра; $a_{\bar{\ell}\lambda}^{\bar{m}}(d_{2b})$ і $a_{\bar{\ell}\mu}^{\bar{m}}(d_{2b})$ задовольняють рекурентну систему (12), у якій зроблені заміни: $\vec{d}_{1a} \to \vec{d}_{2b}$ і $\eta_{Lm_{1a}} \to s_{\bar{\ell}\bar{m}}(s_{\bar{\ell}\bar{m}} + 1)$.

Підставивши (13) і (24) у (14) та обчисливши одержаний інтеграл, знайдемо асимптотику хвильової функції $\Psi_{ab}(\vec{\bar{r}}_b)$ полярної молекули у околі іона $B^{Z_b +}$:

$$\Psi_{ab}(\vec{\bar{r}}_b) \underset{r_b \approx 1}{\approx} D_a(R) \sum_{\ell \ge |m_{1a}|}^{\infty} \sum_{k=-\ell}^{+\ell} \frac{n_{1a}^{|k|}}{2^{|k|}|k|!} a_{L\ell}^{m_{1a}}(d_{1a}) D_{km_{1a}}^{\ell}(\alpha_1, \beta_1, \gamma_1) \left[\frac{(2\ell+1)(\ell+|k|)!}{(\ell-|k|)!} \right]^{1/2} \frac{1}{R^{|k|+1}} \times$$

$$\times \sum_{\bar{\ell}=0}^{\infty} \sum_{\bar{m}=-\bar{\ell}}^{+\bar{\ell}} \frac{f_{1\bar{\ell}\bar{m}}^{(0)}(r_b)}{r_b} \sum_{\lambda \ge |\bar{m}|} \sum_{\mu \ge |\bar{m}|} (-1)^{\lambda+\mu+|\bar{m}|} a_{\bar{\ell}\lambda}^{\bar{m}}(d_{2b}) a_{\bar{\ell}\mu}^{\bar{m}}(d_{2b}) D_{k\bar{m}}^{\mu}(\alpha_2, \beta_2, \gamma_2) \times$$

$$\times \left[\frac{(2\mu+1)(\mu+|k|)!}{(\mu-|k|)!} \right]^{1/2} \left[\frac{(2\lambda+1)(\lambda-|\bar{m}|)!}{(\lambda+|\bar{m}|)!} \right]^{1/2} P_\lambda^{|\bar{m}|}(\bar{\theta}_b) e^{i\bar{m}\bar{\phi}_b}, \tag{25}$$

$$D_a(R)=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{n_{1a}}{2\pi\Gamma(2n_{1a}(Z_a-1)+1)}}\left(\frac{n_{1a}^2 Z_b}{2e}\right)^{n_{1a}Z_b}\left(\frac{n_{1a}(Z_a-1)}{e}\right)^{n_{1a}(Z_a-1)}\exp(-\mathrm{I}_a(R)), \qquad (26)$$

$$\mathrm{I}_a(R)=\frac{1}{n_{1a}[(R-z_{1a})z_{2a}]^{1/2}}\Big\{\left[-R^2+(z_{1a}+z_{2a})R-z_{1a}z_{2a}\right]K(k_a)+(R-z_{1a})z_{2a}E(k_a)+$$
$$+\left[R^2-(z_{1a}+2z_{2a})R+z_{1a}z_{2a}+z_{2a}^2\right]\Pi(\nu_a,k_a)\Big\}, \qquad (27)$$
$$\nu_a=(z_{2a}-z_{1a})/(R-z_{1a}), \quad \nu_a=(\nu_a R/z_{2a})^{1/2},$$

$K(k)$, $E(k)$ і $\Pi(\nu,k)$ - повні еліптичні інтеграли першого, другого та третього роду.

Аналогічно можна одержати вираз і для хвильової функції $\Psi_{ba}(\vec{\tilde{r}}_a)$ полярної молекули $B^{(Z_b-2)+}$ у околі молекулярного іона A^{Z_a+}. Втім, її неважко одержати із виразу для $\Psi_{ab}(\vec{\bar{r}}_b)$, зробивши у (25)-(27) такі заміни: $(\alpha_1,\beta_1,\gamma_1)\leftrightarrow(\alpha_2,\beta_2,\gamma_2)$; $a\leftrightarrow b$; $\bar{\theta}_b,\bar{\phi}_b\to\tilde{\theta}_a,\tilde{\phi}_a$; $\bar{\ell},\bar{m}\to\tilde{\ell},\tilde{m}$.

Обмінний матричний елемент для прямого двоелектронного захоплення

Для обчислення матричного елемента двоелектронної взаємодії H_{ab} в (4) необхідно визначити функції $f^{(0)}_{1\bar{\ell}\bar{m}}(r_{1b})$, що є розв'язком рівняння (21), та $f^{(0)}_{1\tilde{\ell}\tilde{m}}(r_{2a})$, яка задовольняє подібне рівняння у випадку хвильової функції $\Psi_{ba}(\vec{\tilde{r}}_a)$. Розв'язок $f^{(0)}_{1\bar{\ell}\bar{m}}(r_{1b})$рівняння (21) має вид [10]:

$$f^{(0)}_{1\bar{\ell}\bar{m}}(r_{1b})=\left(\frac{2}{n_{1a}}\right)^{n_{1a}Z_b}\frac{\Gamma(1+s_{\bar{\ell}\bar{m}}-n_{1a}Z_b)}{\Gamma(2s_{\bar{\ell}\bar{m}}+2)}\mathrm{M}_{n_{1a}Z_b;s_{\bar{\ell}\bar{m}}+1/2}\left(\frac{2r_{1b}}{n_{1a}}\right), \qquad (28)$$

Нормована хвильова функція $\Psi_b^{(0)}$ для модельного потенціалу (7) має вид [5]:

$$\Psi_b^{(0)}(\vec{\bar{r}}_{1b})=B_2 r_{1b}^{n_{2b}Z_b-1}e^{-r_{1b}/n_{2b}}\sum_{n\geq|m_{2b}|}a_{L'n}^{m_{2b}}(d_{2b})\mathrm{Y}_{nm_{2b}}(\bar{\theta}_{1b},\bar{\phi}_{1b}), \qquad B_2=\frac{1}{2Z_b^{1/2}\Gamma^{1/2}(2n_{2b}Z_b)}\left(\frac{2}{n_{2b}}\right)^{n_{2b}Z_b+1}. \qquad (29)$$

Представивши потенціал міжелектронної взаємодії r_{12}^{-1} в (4) в дипольному наближенні:

$$\frac{1}{r_{12}}=-\frac{8\pi}{3R^3}\sum_{q=-1}^{+1}\sum_{j=-1}^{+1}\sum_{i=-1}^{+1}\frac{r_{2a}\mathrm{Y}_{1j}(\tilde{\theta}_{2a},\tilde{\phi}_{2a})D^1_{qj}(\alpha_1,\beta_1,\gamma_1)r_{1b}\mathrm{Y}_{1i}(\bar{\theta}_{1b},\bar{\phi}_{1b})D^1_{-qi}(\alpha_2,\beta_2,\gamma_2)}{(1+q)!(1-q)!}, \qquad (30)$$

одержимо наступний вираз для H_{ab}:

$$H_{ab}=\frac{8\pi(-1)^{S+1}}{3R^3}\sum_{q=-1}^{+1}\sum_{j=-1}^{+1}\sum_{i=-1}^{+1}\frac{D^1_{qj}(\alpha_1,\beta_1,\gamma_1)D^1_{-qi}(\alpha_2,\beta_2,\gamma_2)}{(1+q)!(1-q)!}H_{1b}H_{2a}, \qquad (31)$$

$$H_{1b} = \int \Psi_{ab}(\vec{r})\Psi_b^{(0)*}(\vec{r}) r \mathrm{Y}_{1i}(\theta,\phi) d\vec{r} \,, \tag{32}$$

$$H_{2a} = \int \Psi_{ba}^{*}(\vec{r})\Psi_a^{(0)}(\vec{r}) r \mathrm{Y}_{1j}(\theta,\phi) d\vec{r} \,. \tag{33}$$

Обчисливши інтеграл (32) з одержаними хвильовими функціями (25), (28) та (29), знайдемо H_{1b}:

$$H_{1b} = 3^{1/2} B_2 D_a(R) \sum_{\ell \ge |m_{1a}|} \sum_{k=-\ell}^{+\ell} \frac{a_{L\ell}^{m_{1a}}(d_{1a})}{|k|!}\left(\frac{n_{1a}}{2}\right)^{|k|}\left[\frac{(2\ell+1)(\ell+|k|)!}{(\ell-|k|)!}\right]^{1/2} D_{km_{1a}}^{\ell}(\alpha_1,\beta_1,\gamma_1) R^{-|k|-1} \times$$
$$\times \sum_{\overline{\ell}=0}^{\infty} \sum_{\overline{m}=-\overline{\ell}}^{\overline{\ell}} \sum_{\lambda \ge |\overline{m}|} \sum_{\mu \ge |\overline{m}|} (-1)^{-\mu} a_{\overline{\ell}\lambda}^{\overline{m}}(d_{2b}) a_{\overline{\ell}\mu}^{\overline{m}}(d_{2b}) D_{k\overline{m}}^{\mu}(\alpha_2,\beta_2,\gamma_2)\left[\frac{(2\lambda+1)(2\mu+1)(\mu+|k|)!}{(\mu-|k|)!}\right]^{1/2} \times$$
$$\times \sum_{n \ge |m_{2b}|} a_{L'n}^{m_{2b}}(d_{2b})(2n+1)^{1/2}\begin{pmatrix}\lambda & n & 1\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\lambda & n & 1\\ \overline{m} & m_{2b} & i\end{pmatrix} J_b(n_{2b}, s_{\overline{\ell}\overline{m}}). \tag{34}$$

Радіальний інтеграл $J_b(n_{2b}, s_{\overline{\ell}\overline{m}})$ в (34) дорівнює:

$$J_b(n_{2b}, s_{\overline{\ell}\overline{m}}) = \left(\frac{2}{n_{1a}}\right)^{n_{1a}Z_b + s_{\overline{\ell}\overline{m}}+1} \frac{\Gamma(1+s_{\overline{\ell}\overline{m}} - n_{1a}Z_b)\Gamma(n_{2b}Z_b + s_{\overline{\ell}\overline{m}}+3)}{\Gamma(2s_{\overline{\ell}\overline{m}}+2)}\left(\frac{n_{1a}n_{2b}}{n_{1a}+n_{2b}}\right)^{n_{2b}Z_b + s_{\overline{\ell}\overline{m}}+3} \times$$
$$\times {}_2F_1\left(-n_{1a}Z_b + s_{\overline{\ell}\overline{m}} + 1, n_{2b}Z_b + s_{\overline{\ell}\overline{m}} + 3; 2s_{\overline{\ell}\overline{m}} + 2; \frac{2n_{2b}}{n_{1a}+n_{2b}}\right), \tag{35}$$

де ${}_2F_1(...)$ – гіпергеометрична функція, а $(:::)$ - 3j–символи Вігнера. Аналогічно можна обчислити інтеграл H_{2a} в (33). Однак, простіше H_{2a} можна одержати із виразів (34), (35), виконавши в них (а також в (29)) такі заміни: $a \leftrightarrow b$, $B_2 \to A_2$, $(\alpha_1,\beta_1,\gamma_1) \leftrightarrow (\alpha_2,\beta_2,\gamma_2)$, $\overline{\ell},\overline{m} \to \widetilde{\ell},\widetilde{m}$.

Одержані загальні результати для H_{ab} (31), H_{1b} (34), (35) та H_{2a} дозволяють знайти обмінні матричні елементи і для прямого двоелектронного захоплення у випадку зіткнень полярних молекул з атомними іонами. Так, формула (31) для цього випадку набуде виду:

$$H_{ab} = \frac{8\pi(-1)^{S+1}}{3R^3} \sum_{m_{1b},m_{2b}} C_{\ell_{1b}m_{1b},\ell_{1b}m_{1b}}^{L_b M_{L_b}} \times$$
$$\times \sum_{q=-1}^{+1}\sum_{j=-1}^{+1} \frac{D_{qj}^{1}(0,\beta,0)}{(1+q)!(1+q)!} H_{1b}H_{2a} \,. \tag{36}$$

Тут $\ell_{1b}m_{1b}$, $\ell_{2b}m_{2b}$ - орбітальні моменти і їх проекції на вісь $\vec{R}$ електронів, центрованих на іоні B^{Z_b+}; L_b і M_{L_b} – їх повний орбітальний момент та його проекція на вісь $\vec{R}$; $C_{\ell_1 m_1,\ell_2 m_2}^{LM}$ – коефіцієнти Клебша-Гордона. Вибір системи координат $\{\widetilde{x},\widetilde{y},\widetilde{z}\}$ описаний в [5,10]. Щоб одержати вирази для H_{1b} та H_{2a} у формулі (36), перейдемо до границі об'єднаних атомів у молекулярному іоні B^{Z_b+}, поклавши $d_{1b,2b} = 0$. У результаті для H_{1b} одержимо [10]:

$$H_{1b}=\sqrt{3}B_2D_a(R)(2\ell_{2b}+1)^{1/2}\sum_{\ell\geq|m_{1a}|}a_{L\ell}^{m_{1a}}(d_{1a})\sum_{k=-\ell}^{+\ell}\frac{1}{|k|!}\left(\frac{n_{1a}}{2}\right)^{|k|+1/2}\left[\frac{(2\ell+1)(\ell+|k|)!}{(\ell-|k|)!}\right]^{1/2}R^{-|k|-1}\times$$

$$\times D_{km_{1a}}^{\ell}(0;\beta;0)\sum_{\ell'\geq|k|}(-1)^{-\ell'}(2\ell'+1)\left[\frac{(\ell'+|k|)!}{(\ell'-|k|)!}\right]^{1/2}\begin{pmatrix}\ell' & \ell_{2b} & 1\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\ell' & \ell_{2b} & 1\\ k & m_{2b} & -q\end{pmatrix}J_b(n_{2b},s_{\ell'}),\quad (37)$$

де

$$J_b(n_{2b},s_{\ell'})=\left(\frac{2}{n_{1a}}\right)^{n_{1a}Z_b+s_{\ell'}+1}\frac{\Gamma(1+s_{\ell'}-n_{1a}Z_b)\Gamma(s_{\ell_{2b}}+s_{\ell'}+4)}{\Gamma(2s_{\ell'}+2)}\left(\frac{n_{1a}n_{2b}}{n_{1a}+n_{2b}}\right)^{s_{\ell_{2b}}+s_{\ell'}+4}\times$$

$$\times{}_2F_1\left(-n_{1a}Z_b+s_{\ell'}+1,s_{\ell_{2b}}+s_{\ell'}+4;2s_{\ell'}+2;\frac{2n_{2b}}{n_{1a}+n_{2b}}\right),\quad (38)$$

Аналогічно можна одержати і вираз для H_{2a}:

$$H_{2a}=3^{1/2}A_2D_b(R)\sum_{\tilde{\ell}=0}^{\infty}\sum_{\tilde{m}=-\tilde{\ell}}^{+\tilde{\ell}}\sum_{\lambda\geq|\tilde{m}|}\sum_{\mu\geq|\tilde{m}|}a_{\tilde{\ell}\lambda}^{\tilde{m}}(d_{2a})a_{\tilde{\ell}\mu}^{\tilde{m}}(d_{2a})\left[\frac{(2\mu+1)(\mu+|m_{1b}|)!}{(\mu-|m_{1b}|)!}\right]^{1/2}D_{m_{1b}\tilde{m}}^{\mu}(0;\beta;0)\times$$

$$\times\sum_{n\geq|m_{2a}|}a_{L'n}^{m_{2a}}(d_{2a})(2n+1)^{1/2}(2\lambda+1)^{1/2}\begin{pmatrix}\lambda & n & 1\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\lambda & n & 1\\ \tilde{m} & m_{2a} & j\end{pmatrix}J_a(n_{2a},s_{\tilde{\ell}\tilde{m}}),\quad (39)$$

де

$$J_a(n_{2a},s_{\tilde{\ell}\tilde{m}})=\left(\frac{2}{n_{1b}}\right)^{n_{1b}Z_a+s_{\tilde{\ell}\tilde{m}}+1}\left(\frac{n_{2a}n_{1b}}{n_{2a}+n_{1b}}\right)^{n_{2a}Z_a+s_{\tilde{\ell}\tilde{m}}+3}\frac{\Gamma(1+s_{\tilde{\ell}\tilde{m}}-n_{1b}Z_a)\Gamma(n_{2a}Z_a+s_{\tilde{\ell}\tilde{m}}+3)}{\Gamma(2s_{\tilde{\ell}\tilde{m}}+2)}\times$$

$$\times{}_2F_1\left(-n_{1b}Z_a+s_{\tilde{\ell}\tilde{m}}+1,n_{2a}Z_a+s_{\tilde{\ell}\tilde{m}}+3;2s_{\tilde{\ell}\tilde{m}}+2;\frac{2n_{2a}}{n_{2a}+n_{1b}}\right).\quad (40)$$

Вирази (37)-(40) співпадають з відповідними формулами (64)-(67) роботи [10], одержаними для випадку двоелектронного захоплення в іон-молекулярних зіткненнях.

Із одержаного результату для H_{ab} (диви (31) і наступні формули) слідує, що квазірезонансний перехід двох електронів здійснюється у результаті накладання двох підбар'єрних переходів, непружних для кожного електрона окремо. Звідси випливає, що квазікласичний вираз для двоелектронної обмінної взаємодії (31) (як і (36)) справедливий для міжцентрових відстаней R таких, що

$$R>>R_0=\max(R_0^i,\,R_0^f),\qquad (41)$$

де R_0^i і R_0^f - відстані між молекулою та іоном, при яких зникають потенціальні бар'єри при тунелюванні електронів із енергіями відповідно E_{1a} і E_{1b}

$$R_0^i=\left(2\sqrt{(Z_a-1)Z_b}+(Z_a-1)+Z_b\right)/|E_{1a}|,\quad (42)$$

$$R_0^f=\left(2\sqrt{Z_a(Z_b-1)}+Z_a+(Z_b-1)\right)/|E_{1b}|.\quad (43)$$

Умову застосовності (41) запропонованого в даній роботі методу можна інтерпретувати як вимогу, що для асимптотично великих R області класично дозволеного електронного руху навколо кожного із іонів відокремлені широким потенціальним бар'єром, тому електронні переходи здійснюються в класично заборонених областях.

Висновки

У роботі одержане аналітичне представлення у термінах повних еліптичних інтегралів для головного члена розкладу двоелектронної обмінної взаємодії H_{ab} полярної молекули з полярним молекулярним іоном у квазікласичному варіанті асимптотичної теорії. Знайдені вирази для H_{ab} можуть бути використані для обчислення перерізів процесів двоелектронної перезарядки (як резонансної, так і нерезонансної) при повільних зіткненнях полярних молекул з полярними молекулярними іонами. У границі об'єднаних атомів в молекулі $B^{(Z_b-2)+}$ одержане представлення для H_{ab} відтворює результати роботи [10].

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Chibisov M.I., Janev R.K. Asymptotic exchange interactions in ion-atom systems // Physics Reports. – 1988. – Vol.166. - №1. – P.1-87.
2. Bransden B.H., McDowell M.H.C. Charge Exchange and the Theory of Ion-Atom Collisions – Oxford, Clarendon. – 1992. – 488 p.
3. Beyer H.F., Shevelko V.P. Introduction to the Physics of Highly Charged Ions – Bristol and Philadelphia, Institute of Physics Publishing. – 2003. - 361 p.
4. McGuire J.H. Electron Correlation Dynamics in Atomic Collisions – Cambridge, Cambridge University Press. – 1977. - 302 p.
5. Khoma M.V., Imai M., Karbovanets O.M., Kikuchi Y., Saito M., Haruyama Y., Karbovanets M.I., Kretinin I.Yu., Itoh A., Buenker R.J. A simple theoretical approach of charge transfer processes in collisions of atomic ions with polar targets // Chemical Physics. – 2008. – V.352. – P. 142–146.
6. Карбованець О.М., Карбованець М.І., Лазур В.Ю., Хома М.В. Метод поверхневих інтегралів в теорії обмінної взаємодії полярних молекул з багатозарядними йонами // ЖФД. – 2010. – Т.14. - № 4. – 4301 (11 с).
7. Зон Б.А. Ридберговские состояния в полярных молекулах // ЖЭТФ. – 1992. – Т.102. – Вып.1(7). – С.36-46.
8. Буслов Е.Ю., Зон Б.А. Перезарядка полярной молекулы на собственном катионе // ЖЭТФ. – 2011. – Т.139. – Вып.1. – С. 46-54.
9. Буслов Е.Ю., Зон Б.А. Роль вращательных состояний при перезарядке дипольно-связаного аниона на полярной молекуле // Хим. Физ. – 2011. – Т.30. – №9. – С. 13-20.
10. O.M. Karbovanets, M.I. Karbovanets, V.Yu. Lazur, M.V. Khoma. Two-electron exchange interaction between polar molecules and atomic ions – Asymptotic appoach // Eur. Phys. J. D – 2015. – V.69: 94. –(10 p.)
11. Варшалович Д.А., Москалёв А.М., Херсонский В.К. Квантовая теория углового момента. – Ленинград: Наука. - 1975. – 439 с.
12. Chernov V.E., Zon B.A. Quantum defect method for polar molecules: one-electron Green function // J. Phys. B. – 1996. – Vol.29. – P.4161-4164.
13. Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. - М.: Наука. - 1971. – 544 с.

Стаття надійшла до редакції 20.05.2015

O.M. Karbovanets, M.I. Karbovanets, V.Yu. Lazur, M.V. Khoma
Uzhhorod National University, Voloshin Str., 54, Uzhhorod, 88000

TWO-ELECTRON EXCHANGE INTERACTION IN THE QUASIMOLECULAR SYSTEMS WITH LONG-RANGE DIPOLE POTENTIAL

In the framework of the asymptotic theory the analytic representation for the matrix element of exchange interaction responsible for two electron capture in slow collision of polar molecule with polar molecular ion has been obtained.
Keywords: polar molecules, slow collisions, two-electron exchange interaction, asymptotic theory.

А.М. Карбованец, М.И. Карбованец, В.Ю. Лазур, М.В. Хома
Ужгородский национальный университет, ул. Волошина, 54, Ужгород, 88000

ДВУХЭЛЕКТРОННОЕ ОБМЕННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В КВАЗИМОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМАХ С ДИПОЛЬНЫМ ДАЛЬНОДЕЙСТВУЮЩИМ ПОТЕНЦИАЛОМ

В рамках асимптотической теории получено аналитическое представление для матричного элемента обменного взаимодействия, ответственного за процесс прямого двухэлектронного захватапри медленных столкновениях полярных молекул с полярными молекулярными ионами.
Ключевые слова: полярные молекулы, медленные столкновения, двухэлектронное обменноевзаимодействие, асимптотическая теория