

# АСИМПТОТИЧНА ТЕОРІЯ НЕПРУЖНИХ ПРОЦЕСІВ З ПЕРЕРОЗПОДІЛОМ ПРИ ІОН-МОЛЕКУЛЯРНИХ ЗІТКНЕННЯХ

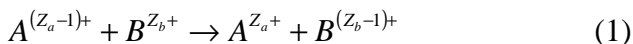
І.Ф. Галамба, Т.А. Абросімова

Кафедра теоретичної фізики

Аналітично досліджено асимптотичні властивості квазімолекулярної системи, яка складається з багатозарядного атомарного іона та: а) двоатомної гомоядерної молекули; б) полярної молекули. В рамках квазікласичного підходу одержано аналітичні вирази для головного члена розкладу експоненціально малої одноелектронної обмінної взаємодії багатозарядного іону з молекулами. Враховано ефекти переносу імпульсу електрона у процесі перезарядки. Методом сильного зв'язку обчислено повні та парціальні перерізи процесів перезарядки при повільних зіткненнях  $Ar^{q+} + H_2$  ( $q = 6, 14, 16$ ),  $Be^{2+} + CO$  та  $Be^{2+} + C_3H_8$ .

## 1. ВСТУП

Процеси одноелектронного захоплення при повільних зіткненнях багатозарядних іонів  $B^{Z_b+}$  з молекулами  $A^{(Z_a-1)+}$  виду



становлять значний інтерес для астрофізики, фізики плазми та хімії дипольно-зв'язаних аніонів, тому в останні роки вони стали предметом інтенсивних експериментальних досліджень (див. [1-6]). У формулі (1)  $Z_a$  і  $Z_b$  - ефек-

тивні заряди відповідно молекулярного залишку  $A^{Z_a+}$  та іона  $B^{Z_b+}$ .

Для теоретичних досліджень процесів (1) важливими є відомості про обмінну взаємодію  $\Delta E(R)$  електронних станів квазімолекулярної системи  $[AB]^{(Z_a+Z_b-1)+}$  [7]. При низькоенергетичних зіткненнях обмінну взаємодію достатньо знати при великих відстанях  $R$  між атомними частинками, оскільки саме такі відстані асоціюються з великими перерізами процесів. Проте, точне обчислення експоненціально малої обмінної взаємодії  $\Delta E(R)$  в асимптотичній області великих  $R$  за допомогою традиційних *ab-initio* методів наразі вимагає значних обчислювальних зусиль. Особливо це стосується процесів зіткнень нейтральних молекул з багатозарядними іонами, для яких необхідно враховувати велике число високозбуджених квазімолекулярних станів.

Однією із привабливих альтернатив стандартним *ab-initio* підходам для обчислення асимптотики одноелектронної обмінної взаємодії є метод поверхневих інтегралів [7], у рамках якого обмінна взаємодія  $\Delta E(R)$  зображається в термінах інтегралу по поверхні  $S$ , що відокремлює області локалізації електрона в початковому  $\Psi_a$  та кінцевому  $\Psi_b$  станах квазімолекул  $A^{(Z_a-1)+} + B^{Z_b+}$  та  $A^{Z_a+} + B^{(Z_b-1)+}$ , відповідно:

$$\Delta E(R) = \int_S d\bar{S} (\Psi_a^* \nabla \Psi_b - \Psi_b^* \nabla \Psi_a). \quad (2)$$

Зазвичай (див., наприклад, [7]), при обчисленні поверхневого інтегралу (2) замінюють хвильові функції  $\Psi_{a(b)}$  наближеними розв'язками  $\Psi_{a(b)}^{(0)} \chi_{a(b)}$ , де  $\Psi_{a(b)}^{(0)}$  - хвильова

функція ізольованої частинки  $A^{(Z_a-1)^+} (B^{(Z_b-1)^+})$ . Збурення хвильових функцій  $\Psi_a$  та  $\Psi_b$  відповідно іонами  $B^{Z_b^+}$  і  $A^{Z_a^+}$ , що знаходяться на великих відстанях  $R$ , можна врахувати за допомогою поправкових функцій  $\chi_a = \exp(-S_1^{(a)} - S_2^{(a)} - \dots)$  та  $\chi_b = \exp(-S_1^{(b)} - S_2^{(b)} - \dots)$ , де  $S_1^{(a,b)}$ ,  $S_2^{(a,b)}$  і т.д. - величини послідовно вищого порядку малості за степенями  $1/R$ , які обчислюються методами теорії збурень Релея-Шредінгера. При цьому, врахування лише  $S_1^{(a,b)}$  приводить до відомого методу Ландау-Херрінга (або методу поправкової функції) [7].

Якщо ж у міжцентровій області, при  $r_a \sim r_b \sim R/2$  (див. рис. 1), потенціал  $V_b = -Z_b / r_b$  взаємодії молекулярного електрона з багатозарядним іоном  $B^{Z_b^+}$  швидко змінюється (випадок  $Z_b \gg Z_a$ ), то врахування лише головного члена розкладу  $S_1^{(a)}$ , як було показано у роботі [8], недостатньо для знаходження правильної асимптотики одноелектронної молекулярної хвильової функції  $\Psi_a$ . Коректний квазікласичний метод знаходження правильних асимптотик квазімолекулярних хвильових функцій  $\Psi_a$  та  $\Psi_b$  при  $Z_b \gg Z_a$  у випадку іон-атомних взаємодій був запропонований у праці [9] і недавно узагальнений на випадок іон-молекулярних взаємодій у роботі [10]. У даній роботі вказаний квазікласичний метод використовується для дослідження низькоенергетичних процесів одноелектронного обміну за участю двоатомних гомоядерних молекул та полярних молекул. Зазначимо, що для полярних молекул необхідно додатково враховувати вплив дипольного моменту кістяка на асимптотику хвильової функції тунелюючого електрона [11]. У даній роботі для описання взаємодії тунелюючого електрона з кістяком полярної молекули ми

використовуємо модель точкового диполя [12]. Крім того, здійснено модифікацію запропонованого підходу з метою врахування ефектів переносу імпульсу електрона в реакції (1). У роботі використовується атомна система одиниць ( $e^2 = \hbar = m_e = 1$ ).

## 2. ХВИЛЬОВА ФУНКЦІЯ КВАЗІМОЛЕКУЛЯРНОЇ СИСТЕМИ $[AB]^{(Z_a+Z_b-1)+}$

### 2.1. Взаємодія іонів $B^{Z_b+}$ з двоатомними гомоядерними молекулами $A_2^{(Z_a-1)+}$

Електронний гамільтоніан системи  $[A_2B]^{(Z_a+Z_b-1)+}$  залежить від трьох параметрів: відстані  $R$  від центра мас двоатомної молекули  $A_2^{Z_a+}$  до іона  $B^{Z_b+}$ , відстані  $d$  між однаковими ядрами молекулярного іона  $A_2^{Z_a+}$  і кута  $\beta$  між векторами  $\vec{d}$  і  $\vec{R}$  (рис. 1).

Розглянемо рівняння Шредінгера, що описує рух електрона в аксіально-симетричному полі  $V_a$  іона двоатомної молекули  $A_2^{Z_a+}$  та сферично-симетричному полі  $V_b$  атомарного іона  $B^{Z_b+}$

$$(-\Delta/2 + V_a(r_a) + V_b(r_b) - E)\Psi(\vec{r}_a) = 0, \quad (3)$$

де  $\Psi(\vec{r}_a)$  та  $E$  - відповідно хвильова функція та енергія активного електрона,  $\vec{r}_a$  та  $\vec{r}_b = \vec{r}_a - \vec{R}$  - радіус-вектори електрона відносно молекулярного іона  $A_2^{Z_a+}$  та атомарного іона  $B^{Z_b+}$  (рис. 1). Ефективні потенціали  $V_a$  і  $V_b$  мають наступну асимптотичну поведінку:

$$\begin{aligned} V_a(r_a) &\xrightarrow{r_a \rightarrow \infty} -Z_a / r_a, \\ V_b(r_b) &\xrightarrow{r_b \rightarrow \infty} -Z_b / r_b. \end{aligned} \quad (4)$$

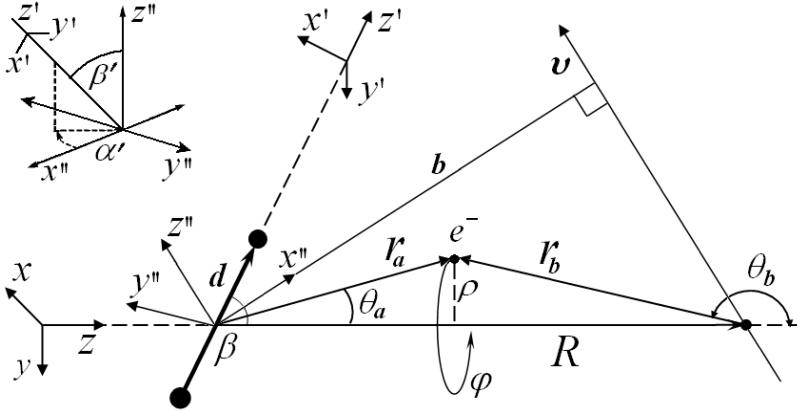


Рис. 1. Геометрія квазімолекули  $[AB]^{(Z_a+Z_b-1)+}$ .

Визначимо одноелектронну трицентрову хвильову функцію  $\Psi_a(\vec{r})$  у далекій підбар'єрній області, де  $r_a \sim R/2$ . Використовуючи в рівнянні (3) асимптотичні вирази (4) для потенціалів  $V_a$  і  $V_b$ , одержимо

$$\left( \frac{\Delta}{2} + \frac{Z_a}{r_a} + \frac{Z_b}{r_b} + E_a \right) \Psi_a(\vec{r}_a) = 0, \quad (5)$$

де  $E_a = E_a^{(0)} - Z_b / R + O(1/R^2)$ . Рівняння (5) будемо розв'язувати з наступною граничною умовою:

$$\Psi_a(\vec{r}_a) \xrightarrow{2n_a^2 \ll r_a \ll R} \Psi_a^{(0)}(\vec{r}_a). \quad (6)$$

Асимптотика нормованої власної незбуреної функції  $\Psi_a^{(0)}$  двоатомної молекули  $A_2^{(Z_a-1)+}$  у координатній системі  $\{x, y, z\}$  має вид [10]:

$$\Psi_a^{(0)}(\vec{r}_a) = r_a^{Z_a n_a - 1} \exp(-r_a / n_a) \times \sum_{s=0}^{\infty} \sum_{l_k = -(s+|m_a|)}^{s+|m_a|} a_s^{m_a \ell_a} D_{km_a}^{s+|m_a|}(0, \beta, 0) Y_{s+|m_a|}^k(\theta_a, \varphi_a), \quad (7)$$

де  $D_{km}^{\ell}(\alpha, \beta, \gamma)$  - функції Вігнера.

Розв'язок рівняння (5) у міжцентровій області ( $z \sim R/2$ ) шукаємо у вигляді:

$$\Psi_a(\vec{r}_a) \underset{r_a \sim R/2}{\approx} \frac{Q_a(\vec{r}_a)}{r_a} \sum_{s=0}^{\infty} \sum_{l_k = -(s+|m_a|)}^{s+|m_a|} a_s^{m_a \ell_a} D_{km_a}^{s+|m_a|}(0, \beta, 0) Y_{s+|m_a|}^k(\theta_a, \varphi_a). \quad (8)$$

Використовуючи метод, розроблений у роботах [10, 11], одержимо вираз для асимптотики одноелектронної трицентрової хвильової функції  $\Psi_a(\vec{r}_a)$  квазімолекули  $A_2^{(Z_a-1)+} + B^{Z_b+}$  у далекій підбар'єрній області ( $z \sim R/2$ ) у квазікласичному наближенні:

$$\Psi_a(\vec{r}_a) \underset{r_a \sim R/2}{\approx} \frac{Q_a(z)}{z} \exp\left(-\frac{\rho^2 p(z)}{2z}\right) \sum_{s=0}^{\infty} \sum_{l_k = -(s+|m_a|)}^{s+|m_a|} a_s^{m_a \ell_a} D_{km_a}^{s+|m_a|}(0, \beta, 0) Y_{s+|m_a|}^k(\theta_a, \varphi_a) \quad (9)$$

де

$$Q_a(z) = \frac{1}{\sqrt{n_a p(z)}} \left( \frac{n_a^2 Z_a}{2e} \right)^{n_a Z_a} \exp\left(-\int_{z_1}^z p(z') dz'\right), \quad n_a = (2|E_a|)^{-1/2}, \quad (10)$$

$p(z)$  - квазіімпульс при русі електрона в напрямку осі  $\vec{R}$ :

$$p^2(z) = 2 \left( \left| E_a \right| - \frac{Z_a}{z} - \frac{Z_b}{R-z} \right).$$

## 2.2. Взаємодія іонів $B^{Z_b+}$ з полярними молекулами $A_p^{(Z_a-1)+}$

У рамках моделі точкового диполя [12] потенціал  $V_a(r_a)$  запишемо у вигляді

$$V_a(r_a) = -\frac{Z_a}{r_a} - \frac{\vec{d} \vec{r}}{r_a^3}. \quad (11)$$

Потенціал  $V_b(r_b)$ , як і раніше, має асимптотику (4). У одно-частинковому наближенні хвильову функцію  $\Psi_a^{(0)}$  можна записати у вигляді [12]

$$\Psi_a^{(0)}(\vec{r}_a') = R^{(0)}(r_a) Z(\theta'_a, \phi'_a).$$

Розкладаючи диполь-сферичні функції  $Z(\theta'_a, \phi'_a)$  за повною ортонормованою системою сферичних функцій  $Y_\ell^{m_a}(\theta'_a, \phi'_a)$

$$Z(\theta'_a, \phi'_a) = \sum_{\ell=|m_a|}^{\infty} a_\ell^{m_a} Y_\ell^{m_a}(\theta'_a, \phi'_a), \quad (12)$$

зобразимо асимптотику незбуреної хвильової функції  $\Psi_a^{(0)}$  полярної молекули у вигляді:

$$\Psi_a^{(0)}(\vec{r}_a)_{1 < r_a < R} \approx \frac{(2/n_a)^{n_a Z_a + 1}}{2Z_a^{1/2} \Gamma^{1/2}(2n_a Z_a)} r_a^{n_a Z_a - 1} e^{-r_a/n_a} \sum_{\ell=|m_a|}^{\infty} a_{\ell}^{m_a} Y_{\ell}^{m_a}(\theta'_a, \phi'_a), \quad (13)$$

де  $\Gamma(x)$  - гамма-функція.

Коефіцієнти  $a_{\ell}^{m_a}$  розкладу в (12) є розв'язками системи рекурентних співвідношень [12]

$$2d \left[ \frac{\ell^2 - m_a^2}{4\ell^2 - 1} \right]^{1/2} a_{\ell-1}^{m_a} + [\ell(\ell+1) - \lambda(\lambda+1)] a_{\ell}^{m_a} + 2d \left[ \frac{(\ell+1)^2 - m_a^2}{(2\ell+1)(2\ell+3)} \right]^{1/2} a_{\ell+1}^{m_a} = 0$$

Використовуючи [11], одержимо остаточний вираз для асимптотики одноелектронної трицентрової хвильової функції  $\Psi_a(\vec{r}_a)$  квазімолекули  $A_p^{(Z_a-1)^+} + B^{Z_b^+}$  у далекій підбар'єрній області у квазікласичному наближенні:

$$\Psi_a(\vec{r}_a)_{r_a \sim R/2} \approx \frac{Q_a(z)}{z} \exp\left(-\frac{\rho^2 p(z)}{2z}\right) \sum_{\ell=|m_a|}^{\infty} \sum_{k=-\ell}^{\ell} a_{\ell}^{m_a} D_{km_a}^{\ell}(0, \beta, 0) Y_{\ell}^k(\theta_a, \phi_a) \quad (14)$$

де

$$Q_a(z) = \frac{1}{n_a^{3/2} Z_a^{1/2} \Gamma^{1/2}(2n_a Z_a)} \left( \frac{n_a Z_a}{e} \right)^{n_a Z_a} \frac{1}{p^{1/2}(z)} \exp\left(-\int_{z_1}^z p(z') dz'\right) \quad (15)$$

### 3. ОДНОЕЛЕКТРОННА ОБМІННА ВЗАЄМОДІЯ

Обчислимо тепер поверхневий інтеграл (2), використовуючи одержані вище трицентрові хвильові функції  $\Psi_a$  (формули (9) і (14)). Виконуючи обчислення у циліндричних координатах  $\{\rho, z, \varphi \equiv \varphi_a \equiv \varphi_b\}$ , одержимо обмінну вза-



ємодію двоатомної гомоядерної молекули з багатозарядним іоном у квазікласичному варіанті асимптотичного методу теорії атомних зіткнень:

$$\Delta E(R) = (-1)^{\ell_b} B_0 \cdot B_{\ell_b}^{m_b} \frac{2^{|m_b|+1} |m_b|!}{\sqrt{n_a n_b}} \left( \frac{n_b^2 Z_b}{2e} \right)^{n_b Z_b} \left( \frac{2}{Z_b} \right)^{n_a Z_a} \left( \frac{R}{n_a} \right)^{2n_a Z_a - |m_b| - 1} \times \quad (16)$$

$$\times \left( \sqrt{\frac{R}{2n_a^2 Z_b}} + \sqrt{\frac{R}{2n_a^2 Z_b} + 1} \right)^{\frac{2(Z_b - Z_a)}{\sqrt{n_a^2 + 2Z_b/R}}} \exp(-R/n_a) \sum_{s=|m_b|}^{\infty} a_s^{m_a \ell_a} B_{s+|m_a|}^{m_b} D_{m_b, m_a}^{s+|m_a|}(0, \beta, 0)$$

У випадку взаємодії молекули з багатозарядним іоном, коли  $Z_b \gg Z_a$ , для міжцентрових відстаней  $R \gg n_a^3 Z_b^2$  із (16) одержимо наступну асимптотичну границю для  $\Delta E$ :

$$\Delta E(R) = (-1)^{\ell_b} B_0 B_{\ell_b}^{m_b} \frac{(2n_a)^{|m_b|+1} |m_b|!}{\sqrt{n_a n_b}} \left( \frac{2}{n_a^2 Z_b} \right)^{n_a Z_b} \left( \frac{n_b^2 Z_b}{2e} \right)^{n_b Z_b} \times \quad (17)$$

$$\times R^{n_a(Z_a + Z_b) - |m_b| - 1} \exp(-R/n_a) \sum_{s=|m_b|}^{\infty} a_s^{m_a \ell_a} B_{s+|m_a|}^{m_b} D_{m_b, m_a}^{s+|m_a|}(0, \beta, 0).$$

Тим же способом, що й (16), можемо одержати і матричний елемент обмінної взаємодії полярної молекули з багатозарядним іоном; результат має вигляд:

$$\Delta E(R) = \frac{(-1)^{\ell_b} B_0 (n_b Z_a)^{-1/2} (n_a Z_b)^{-n_a Z_a}}{\Gamma^{1/2} (2n_a Z_a) n_a^{3/2} |m_b|!} \left( \frac{n_b^2 Z_b}{2e} \right)^{n_b Z_b} \times$$

$$\times \left( \frac{2R}{n_a} \right)^{2n_a Z_a - |m_b| - 1} \left( \sqrt{\frac{R}{2n_a^2 Z_b}} + \sqrt{\frac{R}{2n_a^2 Z_b} + 1} \right)^{\frac{2(Z_b - Z_a)}{\sqrt{n_a^2 + 2Z_b/R}}} \exp(-R/n_a) \times$$

$$\times \sum_{\ell=|m_a|}^{\infty} a_{\ell}^{m_a} D_{m_b m_a}^{\ell}(0, \beta, 0) \sqrt{(2\ell_b + 1)(2\ell + 1) \frac{(\ell_b + |m_b|)! (\ell + |m_b|)!}{(\ell_b - |m_b|)! (\ell - |m_b|)!}}. \quad (18)$$

Вирази (16), (18) для обмінної взаємодії  $\Delta E(R)$  одержані нами у припущенні про адіабатичний характер процесу перезарядки, тобто для малих відносних швидкостей зіткнення  $v$ . Унаслідок цього вони не враховують ефектів переносу імпульсу електрона у реакції (1), які стають особливо відчутними при швидкостях зіткнення  $v > 1$  а.о. Для врахування таких ефектів використаємо модифікацію потенціалу обмінної взаємодії, яка приводить до поняття “динамічного” потенціалу обмінної взаємодії  $\tilde{\Delta E}(R; v)$ , що параметрично залежить від швидкості зіткнення:

$$\tilde{\Delta E}(R; v) = {}_1F_1\left(|m_b| + 1; 1; -\frac{v_{\tau}^2 R n_a}{8}\right) \Delta E(R), \quad (19)$$

де обмінна взаємодія  $\Delta E(R)$  визначається виразами (16) (або (18));  $v_{\tau}$  - тангенціальна компонента відносної швидкості зіткнення  $v$ :  $v_{\tau} = vb(b^2 + v^2 t^2)^{-1/2}$ . Якщо  $v_{\tau} = 0$ , то  ${}_1F_1(|m_b| + 1; 1; 0) = 1$  і (19) переходить у попередній результат (16) (або (18)).

#### 4. ПЕРЕРІЗИ ОДНОЕЛЕКТРОННОЇ ПЕРЕЗАРЯДКИ

Застосуємо одержані в попередньому розділі результати для обчислення перерізів процесів одноелектронного захоплення (1) у повільних зіткненнях іонів  $Ar^{q+}$  ( $q = 6, 14, 16$ ) з молекулами водню  $H_2[{}^1\Sigma_g^+]$ , та  $Be^{2+}$  з полярними молекулами  $CO$  і  $C_3H_8$ . Геометрію зіткнення

показано на рис. 1. Ми запровадимо нову координатну систему  $\{x'', y'', z''\}$ , у якій відносна швидкість  $v$  напрямлена паралельно осі  $z''$ , а прицільний параметр  $b$  - вздовж осі  $x''$ . Центр мас молекулярного іона помістимо у початок декартової системи координат  $\{x'', y'', z''\}$ , орієнтація осей якої визначається значеннями двох кутів  $\{\alpha', \beta'\}$  ( $0 \leq \alpha' \leq 2\pi, 0 \leq \beta' \leq \pi$ ). Оскільки вказані реакції одноелектронного захоплення експериментально досліджено при не дуже малих швидкостях зіткнення, у наших обчисленнях методом сильного зв'язку вважатимемо, що відносний рух важких частинок описується класичною прямолінійною траєкторією  $R(t) = (b^2 + v^2 t^2)^{1/2}$ ; обертанням молекулярної осі  $\bar{d}$  протягом характерного часу зіткнення нехтуємо. У рамках стандартного підходу електронну хвильову функцію  $\Psi_{el}$  системи частинок, що зіштовхуються, запишемо у виді розкладу за діабатичним базисом хвильових функцій  $\Psi_k$ :

$$\Psi_{el} = \sum_{k=1}^N a_k \Psi_k \exp\left(-\frac{i}{v} \int_{z_0''}^{z''} E_k^{(d)} dz\right). \quad (20)$$

При цьому задача про обчислення амплітуд ймовірностей квантових переходів  $a_k$  зводиться до розв'язання системи рівнянь сильного зв'язку:

$$\frac{da_k}{dz''} = -\frac{i}{v} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^N a_j H_{jk} \exp\left[-\frac{i}{v} \int_{z_0''}^{z''} (E_j^{(d)} - E_k^{(d)}) dz\right], \quad (21)$$

де  $z'' = \sqrt{R^2 - b^2}$  і  $z_0''$  - величини, що визначають початкові умови для чисельного інтегрування в (21),  $E_j^{(d)} \equiv H_{jj}$  - діа-

батична енергія відповідного квазімолекулярного стану. При великих між'ядерних відстанях  $R$  діабатичні потенціали початкової та кінцевих іонних конфігурацій у нульовому порядку можуть бути зображені наступним чином:

$$\begin{aligned} H_{11} &= -\frac{1}{2n_a^2} + \frac{(Z_a - 1)Z_b}{R} + O(R^{-2}), \\ H_{mn} &= -\frac{1}{2n_b^2} + \frac{(Z_b - 1)Z_a}{R} + O(R^{-2}) \end{aligned} \quad (22)$$

Систему диференціальних рівнянь (21) розв'язуємо з початковими умовами

$$|a_k(z = -z_0)\rangle = \delta_{1k}, \quad k = 1, 2, \dots, N, \quad (23)$$

при фіксованих значеннях параметрів: швидкості  $v$ , прицільного параметра  $b$ , між'ядерної відстані  $d$  та кутів  $\alpha'$ ,  $\beta'$  орієнтації молекулярної осі  $\vec{d}$ . Імовірність  $P_k(v, b, \vec{d})$  та парціальні перерізи  $\sigma_k(v, \vec{d})$  захоплення електрона у певний кінцевий стан  $|k\rangle$  даються наступними виразами:

$$P_k(v, b, \vec{d}) = |a_k(z = +z_0)|^2, \quad (24)$$

$$\sigma_k(v, \vec{d}) = 2\pi \int P_k(v, b, \vec{d}) b db. \quad (25)$$

Повний переріз  $\sigma_k(v, d)$ , усереднений за кутами орієнтації молекулярної осі, визначається співвідношенням

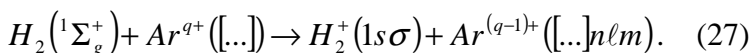
$$\sigma_k(v, \vec{d}) = \frac{1}{4\pi} \int_0^\pi \sin \beta' d\beta' \int_0^{2\pi} \sigma_k(v, d, \alpha', \beta') d\alpha', \quad (26)$$

а повний переріз електронного захоплення  $\sigma_{tot}(v, d)$  є су-

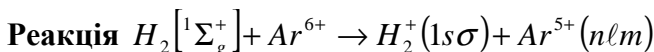
мою за всіма кінцевими станами  $\sigma_{tot}(v, d) = \sum_{k=2}^N \sigma_k(v, d)$ .

Для одержання повного перерізу, усередненого за кутами орієнтації молекулярної осі, ми обчислювали перерізи  $\sigma_k(v, \vec{d})$  при трьох базисних орієнтаціях: а)  $\{\alpha' = \beta' = 0\}$ , б)  $\{\alpha' = 0', \beta' = \pi/2\}$ , в)  $\{\alpha' = \beta' = \pi/2\}$ .

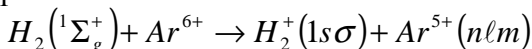
Перейдемо до аналізу результатів обчислення перерізів одноелектронного захоплення у реакціях



Тут символами  $[\dots]$  позначено електронні конфігурації  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$ ,  $1s^2 2s^2$  та  $1s^2$ , які у реакціях зарядового обміну (27) вважалися “замороженими”, для: а)  $q = 6$ ; б)  $q = 14$ ; в)  $q = 16$ . Перерізи процесів перезарядки в реакціях (27) були обчислені в діапазоні енергій зіткнення від 5,0 до  $2 \cdot 10^3$  eВ/а.о.м. Інтегрування систем рівнянь сильного зв'язку (21) здійснювалося з використанням представлень (16) та (17) для матричних елементів одноелектронної обмінної взаємодії  $H_{ij}$ , одержаних нами відповідно у квазі-класичному наближенні та у методі Ландау-Херрінга.



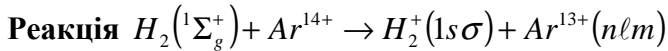
При обчисленні парціальних та повних перерізів одноелектронного захоплення



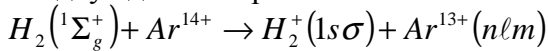
базисний набір включав наступні електронні стани квазі-молекули  $[ArH_2]^{6+}$ :

1. Початковий канал:  $H_2[1^1\Sigma_g^+] + Ar^{6+}$ .
2. 17 кінцевих станів, що дисоціюють у  $H_2^+(1s\sigma) + Ar^{5+}(n\ell m)$ ,  $n = 3, 4, 5, 6$ ;  $m = 0$ .

Обчислені нами повні перерізи  $\sigma_{tot}$  представлені на рисунку 2(а) разом із експериментальними результатами [1, 2] та обчисленнями [1] методом молекулярних орбіталей (МО).



У випадку одноелектронного захоплення



наш базис включав такі електронні стани квазімолекули  $[ArH_2]^{14+}$ :

1. Початковий канал:  $H_2(^1\Sigma_g^+) + Ar^{14+}$ .
2. 32 нижніх кінцевих станів, що дисоціюють у  $H_2^+(1s\sigma) + Ar^{13+}(nlm)$ ,  $n = 5, 6, 7, 8, 9$ ;  $m = 0$ .

Наші результати для повних перерізів приведені на рисунку 2(б) у порівнянні із експериментальними даними [3, 4].

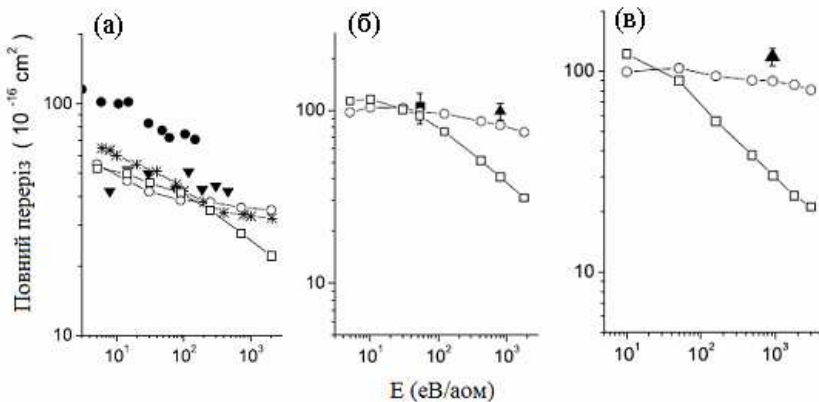
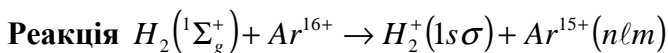
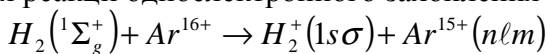


Рис. 2. Повний переріз одноелектронного захоплення при зіткненні  $H_2$  з іонами: а)  $Ar^{6+}$ ; б)  $Ar^{14+}$ ; в)  $Ar^{16+}$ . Експеримент: а)  $\bullet$  – [1],  $\blacktriangledown$  – [2]; б)  $\blacksquare$  – [3],  $\blacktriangle$  – [4]; в)  $\blacktriangle$  – [5]. Теорія: \* - МО [1]; наші обчислення:  $\circ$  – квазікласика;  $\square$  – асимптотика.



Для реакції одноелектронного захоплення



наш базис включав такі електронні стани квазімолекули  $[ArH_2]^{16+}$ :

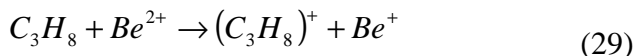
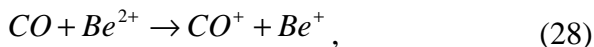
1. Початковий канал:  $H_2(1\Sigma_g^+) + Ar^{16+}$ .
2. 34 нижніх кінцевих станів, що дисоціюють у  $H_2^+(1s\sigma) + Ar^{15+}(nlm)$ ,  $n = 6, 7, 8, 9, 10$ ;  $m = 0$ .

Наші результати приведені на рисунку 2(в) разом із експериментальними даними [5].

Як слідує з рис. 2, одержаний нами переріз процесу (27а) в цілому добре узгоджуються з експериментальними даними [2] і обчисленнями методом МО [1]. При дуже малих енергіях зіткнення обчислені нами перерізи приблизно у два рази менші, ніж відповідні експериментальні перерізи [1]. Для реакцій (27б) і (27в) недостатня кількість експериментальних вимірів не дає можливість зробити висновок про точність наших розрахунків. Однак, беручи до уваги величину експериментальних похибок, можна стверджувати, що наші перерізи добре узгоджуються з даними експериментів [3, 4] і лише незначно менші результату праці [5].

### Реакції за участю полярних молекул

Реакції одноелектронного захоплення за участю полярних молекул



відбуваються без зміни електронного стану іонного залишку  $Be^{2+}(1s^2, 1S)$ , тому квазімолекулярні системи  $(C_3H_8Be)^{2+}$  та  $(COBe)^{2+}$  розглядаємо у одноелектронному наближенні

із замороженими іонним кістяком і молекулярними іонами відповідно  $C_3H_8^+$  та  $CO^+$ . У наших обчисленнях повних перерізів методом сильного зв'язку було враховано початковий канал системи  $M + Be^{2+}$  та 6 нижніх кінцевих електронних станів  $M^+ + Be^+(1s^2nl, m=0)$  (тут позначено  $M = C_3H_8, CO$ ). Обчислені нами повні перерізи процесів одноелектронного захоплення (29), (30) разом із експериментальними даними [6] приведено на рис. 3. На рис. 4 представлено обчислені перерізи процесів перезарядки  $C_3H_8 + Be^{2+}$  як функції енергії зіткнення і кута  $\beta'$ . Як видно з рис. 4, в області малих енергій зіткнення ( $< 2$  кеВ/а.о.м.) наша теорія передбачає для системи  $C_3H_8 + Be^{2+}$  сильну залежність перерізів від орієнтації дипольного моменту  $\vec{d}_1$  відносно напрямку швидкості. Для даної реакції:  $d(C_3H_8^+) = 1.44D$  ( $1D = 0.393a.o.$ ).

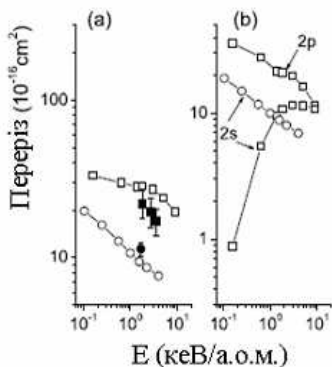


Рис. 3. Повні а) та парціальні парціальні б) перерізи перезарядки при зіткненні  $Be^{2+}$  з полярними молекулами. Експеримент[6]:  
 ■ –  $C_3H_8$ ; ● –  $CO$ . Наші обчислення: □ –  $C_3H_8$ ; ○ –  $CO$ .

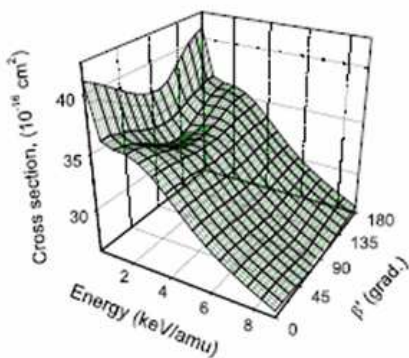


Рис. 4. Результати обчислення у квазікласичному наближенні кутової та енергетичної залежності перерізу реакції:  
 $C_3H_8 + Be^{2+} \rightarrow C_3H_8^+ + Be^+$ .



## ЛІТЕРАТУРА

1. Public Domain of Center the Center for Applied Scientific Computing. Lawrence Livermore National Laboratory. - <http://www.llnl.gov/CASC/odepack/>.
2. Coulson C.A. Constant of the motion for the twocentre Kepler problem // Proc. Cambr. Phil. Soc. – 1938. – Vol.34. – P. 204.
3. Errea L.F., Gorfinkiel J.D., Macias A., Mendez L., Riera A. Molecular treatment of single (dissociative and nondissociative) and double electron capture in  $He^{2+} + H_2$  collisions // J. Phys. B. – 1977. - Vol.30. – P. 3855–3869.
4. Can C., Gray T.J., Varghese S.L., Hall J.M., Tunnell L.N. Double- and single-electron capture in  $Ar^{q+} + H_2$  collisions in the energy range from 50 eV to 2 keV // Phys. Rev. A. – 1985. – V.31. – P. 72-84.
5. Kravis S., Saitoh H., Okuno K., Soejima K., Kimura M., Shimamura I., Awaya Y., Kaneko Y., Oura M., Shimamura N. Charge transfer cross section of  $Ar^{q+} (2 \leq q \leq 10)$  on  $H_2$  // Phys. Rev. A. – 1995. – V.52. – P. 1206-1217.
6. M.V. Khoma, M. Imai, O.M. Karbovanets, Y. Kikuchi, M. Saito, Y. Haruyama, M.I. Karbovanets, I.Yu. Kretinin, A. Itoh, R.j. Buenker. A simple theoretical approach of charge transfer processes in collisions of atomic ions with polar targets // Chem. Phys. - 2008. - Vol.352. - P. 142-146.
7. Chibisov M.I., Janev R.K. Asymptotic exchange interactions in ion-atom systems // Physics Reports. – 1988. – Vol.166. - №1. – P. 1 - 87.
8. Bardsley J.N., Holstein T., Junker B.R. and Sinha S. Calculation of ion-atom interactions relating to resonant charge-transfer collisions// Phys. Rev. A. – 1975. – Vol.11. – P. 1911 - 1920.

9. М.И. Чибисов. О перезарядке атомов на многозарядных ионах // ЖЭТФ. - 1979. – Т.76. - Вып.6. – С.1898 - 1906.
10. Карбованець О.М. Квазікласичний підхід в теорії обмінної взаємодії багатозарядних іонів з двоатомними молекулами // Науковий вісник Ужгородського ун-ту. Серія Фізика. – 2008. – Вип. 23. – С. 7-15.
11. О.М. Карбованець. Хвильові функції квазімолекулярної системи “іон + полярна молекула” // Науковий вісник Ужгородського ун-ту. Серія Фізика. – 2008. – Вип. 23. – С. 45-52.
12. Зон Б.А. Ридберговские состояния в полярных молекулах. // ЖЭТФ. - 1992. – Т.102, вып.1(7). – С. 36-46.