

УДК 539.186, 539.196
 PACS 34.50.-s; 34.70.+e; 31.15.Gy; 34.80.Dp
 DOI 10.24144/2415-8038.2019.45.104-115

М.Я. Євич, М.І. Карбованець

Ужгородський національний університет, 88000, Ужгород, вул. Волошина, 54, Україна,
 e-mail: m.karbovanets@gmail.com

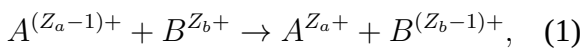
ПЕРЕЗАРЯДКА У ДВІЧІ ЗБУДЖЕНІ СТАНИ ПРИ ПОВІЛЬНИХ ІОН-МОЛЕКУЛЯРНИХ ЗІТКНЕННЯХ

У межах квазікласичного методу обчислено асимптотику (при великих відстанях R між взаємодіючими частинками) потенціалу обмінної взаємодії двоатомної гомоядерної молекули $A^{(Z_a-1)+}$ з атомним іоном $B^{(Z_b-1)+}$, що відповідає за двоелектронний процес одноелектронного захоплення у двічі збуджені іонні стани.

Ключові слова: повільні іон-молекулярні зіткнення, одноелектронне захоплення, двічі збуджені стани, асимптотична теорія.

Вступ

Одно- та багатоелектронні процеси з перерозподілом (перезарядка та іонізація) при повільних зіткненнях іонів B^{Z_b+} з атомами чи молекулами $A^{(Z_a-1)+}$ становлять значний інтерес як для теорії атомних зіткнень, так і для прикладних галузей, таких як фізика плазми, астрофізика та квантова хімія (диви, наприклад, [1,2]). Експериментально і теоретично встановлено [3], що при малих швидкостях зіткнення $v \ll v_0 Z_b^{1/2}$ (v_0 – характерна швидкість валентного електрона в основному стані налітаючого іона B^{Z_b+}) домінуючими є процеси одноелектронного захоплення виду



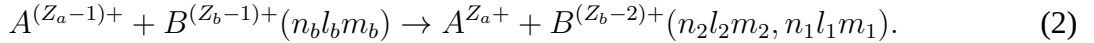
а процеси іонізації менш ймовірні (тут Z_a і Z_b – асимптотичні заряди відповідно молекулярного A^{Z_a+} та атомного B^{Z_b+} залишків). Характерною особливістю цих процесів є те, що електронні переходи між початковим і кінцевим станами відбуваються переважно при великих відстанях R між взаємодіючими частинками у порівнянні з їх розмірами. Ця обставина дозволяє для розрахунку матричних елементів одноелектронної обмінної взаємодії $\Delta E(R)$, що визначає

процес (1), використовувати асимптотичну (за між'ядерною відстанню $R \gg 1$ а.о.) теорію атомних зіткнень. Так, при дослідженні асимптотичними методами процесів одноелектронного захоплення у повільних іон-молекулярних зіткненнях було отримано квазікласичні вирази для спотворених полем віддаленого багатозарядного іона електронних хвильових функцій двоатомної гомоядерної (праці [4,5]) та полярної (праці [6,7]) молекул, які асимптотично точно описують поведінку електрона в підбар'єрній області $r_a \sim r_b \sim R/2$ ($r_{a,b}$ – відстань електрона від частинки $A(B)$). Потенціали обмінної взаємодії $\Delta E(R)$ були обчислені в [4–7] методом поверхневих інтегралів [1].

Незважаючи на те, що одноелектронні процеси (зокрема, перезарядка (1)), як правило, найбільш ефективні, при теплових енергіях зіткнення настільки ж, а деколи і більш ймовірними виявляються різноманітні двоелектронні процеси. Деякі з них, такі як двоелектронна перезарядка та перезарядка з одночасним збудженням чи іонізацією утвореного іона мішені, теоретично вивчені достатньо повно, в тому числі і асимптотичними методами (диви [8,9]). У той же час для низки інших важливих і

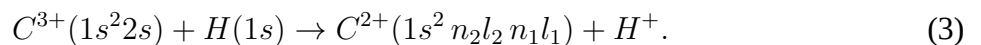
ефективних двоелектронних процесів теорія розроблена в значно меншій мірі і не може претендувати на кількісний опис наявних експериментальних даних. Сказане стосується, насамперед, досліджених в даній робо-

ті двоелектронних процесів одноелектронного захоплення у двічі збуджені іонні стани $|n_2 l_2 m_2, n_1 l_1 m_1\rangle$ при повільних зіткненнях іонів $B^{(Z_b-1)+}$ з двоатомними гомоядерними молекулами $A^{(Z_a-1)+}$:



Необхідність врахування двоелектронних реакцій виду (2) при розрахунку перерізів одноелектронної перезарядки (1) продемонструємо на прикладі процесу селективного

захоплення електрона у певні іонні стани при повільних зіткненнях іонів C^{3+} з атомами гідрогену (диви праці [10, 11] і наведені там посилання):



Експериментально встановлено, що основними каналами процесу (3) є заселення таких станів іона C^{2+} : триплетних станів $(2s3s)^3S$, $(2s3p)^3P$, $(2s3d)^3D$ і синглетних станів $(2s3s)^1S$, $(2p^2)^1S$, $(2s3p)^1P$, $(2p^2)^1D$, $(2s3d)^1D$. Процеси (3) теоретично досліджувалися раніше різними методами, найбільш ґрунтовними з яких є методи молекулярних орбіталей [10] та двоцентрових атомних орбіталей [11]. З точки зору теорії особливо цікавими є двоелектронні процеси захоплення електрона атома гідрогену у двічі збуджені стани $(2p^2)^1S$ та $(2p^2)^1D$ іона C^{2+} , перерізи яких виявилися того ж порядку величини, що і для одноелектронних процесів. Тому базисні набори хвильових функцій в [10, 11] включали, поряд із одноелектронними, і двоелектронні орбіталі, що дозволило описати експериментально спостережувані канали селективного захоплення електронів в реакції (3).

При розробці асимптотичної теорії процесів (2) необхідно враховувати наявні співвідношення між значеннями енергій електрона в початковому E_a і кінцевому E_b станах, тобто в молекулі $A^{(Z_a-1)+}$ та іоні $B^{(Z_b-2)+}$. Тут можливі два випадки: 1) енергії E_a і E_b близькі, $E_a \approx E_b$; 2) значення E_a та E_b сильно відрізняються і $|E_b| > |E_a|$. Для цих двох випадків теорія процесів (2) будується по-різному.

Так, у першому випадку, коли $E_a \approx E_b$, основний внесок у двоелектронну обмінну взаємодію $H_{ab}(R)$, що відповідає за дво-

електронний процес (2), робить конфігурація, коли тунелюючий молекулярний електрон здійснює перехід у міжцентровій області ($r_a \sim R/2 \gg 1$ а.о.), а інший електрон – в околі власного іона $B^{(Z_b-1)+}$ ($r_b \approx 1$ а.о.). Такі корельовані електронні переходи, що призводять до заселення кінцевих двічі збуджених станів іона $B^{(Z_b-2)+}$, можливі лише в результаті міжелектронної взаємодії. Для обчислення матричних елементів обмінної взаємодії $H_{ab}(R)$ при $E_a \approx E_b$ необхідно знати квазімолекулярні хвильові функції тунелюючого електрона у міжцентровій області. Як вказувалося вище, така задача була розв'язана аналітично в працях [4–7]. У даній роботі в межах квазікласичного варіанту асимптотичної теорії [4, 5] обчислено асимптотику двоелектронного матричного елементу $H_{ab}(R)$, що відповідає за корельовану двоелектронну обмінну взаємодію при повільних зіткненнях іонів $B^{(Z_b-1)+}$ з двоатомними гомоядерними молекулами $A^{(Z_a-1)+}$ і призводить до одноелектронного захоплення у двічі збуджені іонні стани в реакції (2) (у випадку $E_a \approx E_b$). Крім цього, нами одержано нове аналітичне зображення для асимптотики одноелектронної обмінної взаємодії $\Delta E(R)$ двоатомної гомоядерної молекули з багатозарядним йоном у термінах повних еліптичних інтегралів, що узагальнює результат, отриманий в працях [4, 5].

Якщо ж енергії E_a та E_b сильно відрізняються ($|E_b| > |E_a|$), то обидва активні електрони здійснюють непружні корельова-

ні переходи в околі налітаючого іона ($r_a, r_b \approx 1$ а.о.) і для обчислення двоелектронного матричного елемента $H_{ab}(R)$ у цьому випадку необхідно знати хвильову функцію $\Psi_{ab}(\vec{r}_b)$ активного молекулярного електрона в околі чужого іона. Такий випадок буде розглянуто у нашій наступній статті.

У роботі використано атомну систему одиниць ($e^2 = \hbar = m_e = 1$).

Квазімолекулярна хвильова функція та одноелектронна обмінна взаємодія

Орієнтуючись на досліджувану в даній праці задачу, позначимо асимптотичний заряд налітаючого іона в реакції (1) як $(Z_b - 1)$ і розглянемо загальний випадок взаємодії двоатомних гомоядерних молекул $A^{(Z_a-1)+}$ з атомними іонами $B^{(Z_b-1)+}$.

Першим необхідним етапом дослідження асимптотичних властивостей квазімолекулярних систем $(AB)^{(Z_a+Z_b-2)+}$ є знаходження одноелектронних хвильових функцій початкового $\Psi_a(\vec{r}_a)$ і кінцевого $\Psi_b(\vec{r}_b)$ станів у міжцентровій області конфігураційного простору $r_a \sim r_b \sim R/2 \gg 1$ а.о. Як зазначалося у Вступі, така задача досліджувалася в межах асимптотичної теорії в працях [4,5]. Там же було одержано і матричні елементи одноелектронної обмінної взаємодії, що відповідають за процеси захоплення електрона в реакції (1). З метою узгодження позначень для подальшого дослідження варто коротко нагадати схему обчислення одноелектронних квазімолекулярних функцій в міжцентровій області під потенціальним бар'єром, що розділяє взаємодіючі частинки.

Електронний гамільтоніан квазімолекули $(AB)^{(Z_a+Z_b-2)+}$ залежить від трьох параметрів: відстані R від центра мас двоатомної молекули $A^{(Z_a-1)+}$ до іона $B^{(Z_b-1)+}$, відстані d між однаковими ядрами молекулярного іона A^{Z_a+} і кута β між векторами \vec{d} і \vec{R} (рис. 1).

Розглянемо рівняння Шредінгера, що описує рух тунелюючого електрона в аксіально-симетричному потенціалі V_a іона двоатомної молекули A^{Z_a+} та сферично-

симетричному потенціалі V_b атомного іона $B^{(Z_b-1)+}$:

$$\left(-\frac{\Delta}{2} + V_a(r_a) + V_b(r_b) - E\right)\Psi(\vec{r}_a) = 0, \quad (4)$$

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^{Z_a+} та атомного іона $B^{(Z_b-1)+}$ (рис. 1). Ефективні потенціали V_a і V_b мають наступну асимптотичну поведінку:

$$\begin{aligned} V_a(r_a) &\xrightarrow{r_a \rightarrow \infty} -\frac{Z_a}{r_a}, \\ V_b(r_b) &\xrightarrow{r_b \rightarrow \infty} -\frac{Z_b - 1}{r_b}. \end{aligned} \quad (5)$$

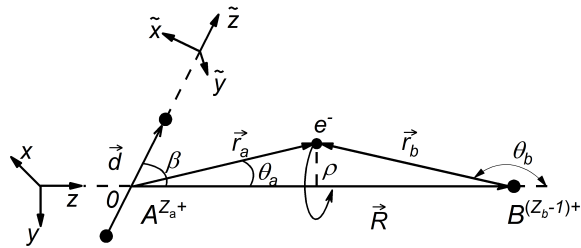


Рис. 1: Геометрія квазімолекули $(AB)^{(Z_a+Z_b-2)+}$ для реакції (1).

Позначимо через E_a збурені рівні енергії у випадку, коли електрон перебуває у зв'язаному стані двоатомної молекули $A^{(Z_a-1)+}$ (квазімолекула $A^{(Z_a-1)+} + B^{(Z_b-1)+}$), та E_b , якщо електрон зв'язаний з атомним іоном $B^{(Z_b-2)+}$ (квазімолекула $A^{Z_a+} + B^{(Z_b-2)+}$).

Будемо розглядати випадок, коли стан тунелюючого молекулярного електрона у полі іонного залишку $B^{(Z_b-1)+}$ невироджений. Знайдемо одноелектронну трицентрову хвильову функцію $\Psi_a(\vec{r}_a)$ у далекій підбар'єрній області, де $r_a \sim R/2$. Вибір систем координат $\{x, y, z\}$ та $\{\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}\}$, які використовуються при побудові $\Psi(\vec{r})$, детально описано в працях [4,5] і приведено на рис. 1. Використовуючи в рівнянні (4) асимптотичні вирази (5) для потенціалів V_a і V_b , одержимо

$$\left(\frac{\Delta}{2} + \frac{Z_a}{r_a} + \frac{Z_b - 1}{r_b} + E_a\right)\Psi_a(\vec{r}_a) = 0, \quad (6)$$

де $E_a = E_a^{(0)} - (Z_b - 1)/R + O(1/R^2)$; $E_a^{(0)}$ — незбурена енергія електрона в $A^{(Z_a-1)+}$. Рівняння (6) розв'язуємо з такою граничною умовою:

$$\Psi_a(\vec{r}_a) \xrightarrow{2n_a^2 \ll r_a \ll R} \Psi_a^{(0)}(\vec{r}_a), \quad (7)$$

$$\Psi_a^{(0)}(\vec{r}_a) \underset{2n_a^2 \ll r_a \ll R}{=} r_a^{Z_a n_a - 1} \exp\left(-\frac{r_a}{n_a}\right) \sum_{s=0,1}^{\infty} \sum_{k=-s+|m_a|}^{s+|m_a|} a_s^{m_a l_a} D_{km_a}^{s+|m_a|}(0, \beta, 0) Y_{s+|m_a|,k}(\theta_a, \phi_a). \quad (8)$$

Тут $D_{mm'}^j(\alpha, \beta, \gamma)$ — функції Вігнера, m_a — проекція орбітального моменту l_a електрона на молекулярну вісь \vec{d} , $n_a = (-2E_a^{(0)})^{-1/2}$, а θ_a, ϕ_a — сферичні кути вектора \vec{r}_a в координатній системі $\{x, y, z\}$. Коефіцієнти $a_s^{m_a l_a}$ обчислюють, порівнюючи асимптотику хви-

де нормована власна функція $\Psi_a^{(0)}$ незбуреної двоатомної молекули $A^{(Z_a-1)+}$ в області $1 \text{ а.о.} \ll r_a \ll R$ може бути зображена у вигляді одноцентрової хвильової функції [4, 5]:

льової функції (8) з точною (чисельною) електронною хвильовою функцією (диви [4, 5]).

Квазікласичний розв'язок рівняння (6) для одноелектронної трицентрової хвильової функції $\Psi_a(\vec{r}_a)$ квазімолекули $A^{(Z_a-1)+} + B^{(Z_b-1)+}$ у далекій підбар'єрній області було знайдено в працях [4, 5] і має вигляд:

$$\Psi_a(\vec{r}_a) \underset{r_a \sim R/2}{=} \frac{1}{z \sqrt{n_a p(z)}} \left(\frac{n_a^2 Z_a}{2e}\right)^{n_a Z_a} \exp\left(-\frac{\rho^2 p(z)}{2z}\right) \exp\left(-\int_{z_1}^z p(z') dz'\right) \times \sum_{s=0,1}^{\infty} \sum_{k=-s+|m_a|}^{s+|m_a|} a_s^{m_a l_a} D_{km_a}^{s+|m_a|}(0, \beta, 0) Y_{s+|m_a|,k}(\theta_a, \phi_a). \quad (9)$$

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

$$p^2(z) = 2 \left(-|E_a| + \frac{Z_a}{z} + \frac{Z_b - 1}{R - z} \right), \quad (10)$$

z — компонента вектора \vec{r}_a уздовж \vec{R} , ρ — відстань від осі \vec{R} : $r \approx z + \rho^2/2z + \dots$, $\rho^2 = x^2 + y^2$, $\rho \ll R$, $z \sim R$, а точки повороту $z_{1,2}$ на між'ядерній осі визначаються із умови: $p(z_{1,2}) = 0$.

Використовуючи хвильову функцію (9), неважко одержати вираз для асимптотики одноелектронної трицентрової хвильової функції $\Psi_b(\vec{r}_b)$ квазімолекули $A^{Z_a+} + B^{(Z_b-2)+}$ в міжцентрові області $r_b \sim R/2$. Для цього достатньо у виразі (9) перейти до границі об'єднаних атомів (двоцентрова границя) та виконати наступні заміни: $Z_a \rightarrow Z_b - 1$, $n_a \rightarrow n_b$, $l_a \rightarrow l_b$, $m_a \rightarrow m_b$, $z_1 \rightarrow z_2$, $z \rightarrow z' = R - z$, $\theta_a \rightarrow \pi - \theta_b$, $\phi_a \rightarrow \phi_b$. Результат має вигляд:

$$\Psi_b(\vec{r}_b) \underset{r_b \sim R/2}{\approx} \frac{(-1)^{l_b} B_0}{z' \sqrt{n_b p(z')}} \left(\frac{n_b^2 (Z_b - 1)}{2e}\right)^{n_b (Z_b - 1)} \exp\left(-\frac{\rho^2 p(z')}{2z'}\right) \times \exp\left(\int_{z_2}^{z'} p(z'') dz''\right) Y_{l_b m_b}(\theta_b, \phi_b). \quad (11)$$

Тут $n_b = (-2E_b^{(0)})^{-1/2}$, а B_0 — асимптотичний коефіцієнт хвильової функції валентного електрона в іоні $B^{(Z_b-2)+}$ [12].

Для обчислення одноелектронної обмінної взаємодії $\Delta E(R)$, що визначає процес перезарядки (1), застосуємо метод по-

верхневих інтегралів [1], в якому $\Delta E(R)$ виражається через інтеграл по деякій гіперповерхні \vec{S} , що відокремлює області локалізації електрона у початковому Ψ_a та кінцевому Ψ_b станах відповідно квазімолекул $A^{(Z_a-1)+} + B^{(Z_b-1)+}$ та $A^{Z_a+} + B^{(Z_b-2)+}$:

$$\Delta E(R) = \int_S d\vec{S} (\Psi_a^* \nabla \Psi_b - \Psi_b^* \nabla \Psi_a) \quad (12)$$

У якості поверхні інтегрування \vec{S} в (12) зручно вибрати площину, яка перпендикулярна до між'ядерної осі \vec{R} і проходить через її середину. Використовуючи одержані вище трицентрові хвильові функції (9) і (11) та виконуючи в (12) інтегрування у циліндричних координатах, одержимо:

$$\Delta E(R) = \frac{(-1)^{l_b} B_0}{\sqrt{n_a n_b}} |m_b|! \left(\frac{n_a^2 Z_a}{2e} \right)^{n_a Z_a} \left(\frac{n_b^2 (Z_b - 1)}{2e} \right)^{n_b (Z_b - 1)} B_{l_b}^{m_b} \left(\frac{R}{2n_a} \right)^{-|m_b| - 1} \times \exp \left(- \int_{z_1}^{z_2} p(z) dz \right) \sum_{s=|m_b|}^{\infty} a_s^{m_a l_a} B_{s+|m_a|}^{m_b} D_{m_b m_a}^{s+|m_a|}(0, \beta, 0), \quad (13)$$

де запроваджено позначення:

$$B_l^m = \frac{1}{2^{|m|} m!} \left[\frac{(2l + 1)(l + |m|!)}{2(l - |m|!)} \right]^{1/2}. \quad (14)$$

Обчисливши бар'єрний інтеграл $\int_{z_1}^{z_2} p(z) dz$ в (13), надамо обмінній взаємодії $\Delta E(R)$ остаточного вигляду (деталі обчислення бар'єрного інтегралу дивити в [7]):

$$\Delta E(R) = \frac{(-1)^{l_b} B_0}{\sqrt{n_a n_b}} |m_b|! \left(\frac{n_a^2 Z_a}{2e} \right)^{n_a Z_a} \left(\frac{n_b^2 (Z_b - 1)}{2e} \right)^{n_b (Z_b - 1)} B_{l_b}^{m_b} \left(\frac{R}{2n_a} \right)^{-|m_b| - 1} \times \exp \left\{ - \frac{1}{n_a \sqrt{(R - z_1) z_2}} \left[(-R^2 + (z_1 + z_2)R - z_1 z_2) K(\zeta) + (R - z_1) z_2 E(\zeta) + (R^2 - (z_1 + 2z_2)R + z_1 z_2 + z_2^2) \Pi(\nu, \zeta) \right] \right\} \sum_{s=|m_b|}^{\infty} a_s^{m_a l_a} B_{s+|m_a|}^{m_b} D_{m_b m_a}^{s+|m_a|}(0, \beta, 0). \quad (15)$$

Тут $K(\zeta)$, $E(\zeta)$, $\Pi(\nu, \zeta)$ – повні еліптичні інтеграли відповідно першого, другого та третього роду [7], а параметри ν та ζ визначаються співвідношеннями: $\nu = \frac{z_2 - z_1}{R - z_1}$, $\zeta = \sqrt{\frac{\nu R}{z_2}}$.

Знайдений вираз (15) для асимптотики одноелектронної обмінної взаємодії $\Delta E(R)$ двоатомної гомоядерної молекули з багатозарядним йоном узагальнює результат, отриманий в працях [4, 5], і переходить в останній, якщо для бар'єрного інтегралу в (13) використати його наближений розклад із [1]. Представлення (15) справедливе за умови, що відстань R між взаємодіючими частинками набагато більша тієї відстані R_0 , при якій зникає потенціальний бар'єр вздовж осі між частинками (тобто, коли точки повороту $z_{1,2}$

збігаються).

Одержаний вираз (15) для обмінної взаємодії $\Delta E(R)$ не враховує ефектів переносу імпульсу електрона у реакції (1), які стають особливо відчутними при швидкостях зіткнення $v > 1$ а.о. Вказані ефекти врахуємо, увівши трансляційні фактори (дивити, наприклад, [4]), що приводить до «динамічного» потенціалу обмінної взаємодії $\tilde{\Delta E}(R, v)$, який параметрично залежить від швидкості зіткнення v :

$$\tilde{\Delta E}(R, v) = {}_1F_1 \left(|m_b| + 1; 1; - \frac{v_\tau^2 R n_a}{8} \right) \Delta E(R), \quad (16)$$

де ${}_1F_1(\alpha, \beta, z)$ – вироджена гіпергеометрична функція, v_τ – тангенціальна компонента

відносної швидкості зіткнення v , а обмінна взаємодія $\Delta E(R)$ задається виразом (15).

Двоелектронна обмінна взаємодія для перезарядки у двічі збуджені стани

Дослідимо асимптотику електронної частини двоелектронного обмінного матричного елемента $H_{ab}(R)$, який визначає процес (2). Квазімолекулярну систему $(AB)^{(Z_a+Z_b-2)+}$ розглядаємо у двоелектронному наближенні. Вважаємо, що молекулярний A^{Z_a+} та іонний B^{Z_b+} кістяки в реакції (2) містять замкнуті електронні оболонки і не змінюють свого стану в процесі зіткнення. Тоді задача зводиться до дослідження руху двох активних електронів у полі двох іонів: молекулярного – A^{Z_a+} і атомного – B^{Z_b+} (рис. 2).

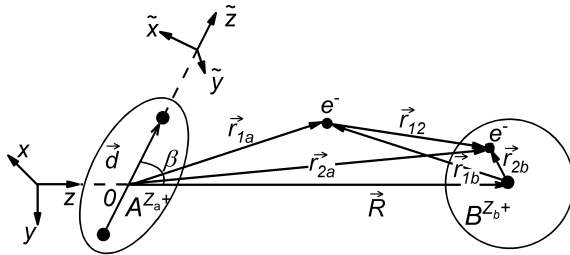


Рис. 2: Геометрія квазімолекули $(AB)^{(Z_a+Z_b-2)+}$ для реакції (2).

У рамках двоелектронного наближення електронний гамільтоніан квазімолекули визначається виразом

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^2 \left[-\frac{\Delta_i}{2} + V_a(r_{ia}) + V_b(r_{ib}) \right] + \frac{1}{r_{12}}, \quad (17)$$

де \vec{r}_{ia} (\vec{r}_{ib}) – радіус-вектор i -го електрона відносно центру мас A^{Z_a+} (B^{Z_b+}) ($i = 1, 2$) (диви рис. 2); Δ_i – оператор Лапласа за координатами i -го електрона; r_{12} – відстань між електронами, що здійснюють переходи. Потенціали $V_a(r_{ia})$ і $V_b(r_{ib})$ взаємодії i -го електрона з іонними залишками A^{Z_a+} і B^{Z_b+} мають таку асимптотичну поведінку:

$$V_{a,b}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} -\frac{Z_{a,b}}{r}. \quad (18)$$

Основною задачею є обчислення матричного елемента $H_{ab}(R)$ двоелектронної обмінної взаємодії, що визначає двоелектронний процес (2). У рамках асимптотичної теорії величина $H_{ab}(R)$ задається співвідношенням [1]:

$$H_{ab}(R) = \langle \Psi_b | \hat{H} | \Psi_a \rangle - \langle \Psi_b | \Psi_a \rangle \langle \Psi_a | \hat{H} | \Psi_a \rangle, \quad (19)$$

де $\Psi_a(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ і $\Psi_b(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ – двоелектронні хвильові функції початкового та кінцевого станів квазімолекул $A^{(Z_a-1)+} + B^{(Z_b-1)+}$ та $A^{Z_a+} + B^{(Z_b-2)+}$. Перш за все, знайдемо двоелектронну хвильову функцію Ψ_a , що описує електронну підсистему в початковому стані квазімолекули $A^{(Z_a-1)+} + B^{(Z_b-1)+}$. Позначимо через S сумарний спіновий момент виділеної електронної пари, M_S – його проекцію на вісь $O\tilde{z}$, а m_{1a} та m_{2a} – проекції орбітальних моментів активних електронів на цю ж вісь. Тоді симетризована двоелектронна хвильова функція Ψ_a , що описує електронну підсистему в початковому стані, може бути записана у вигляді (у системі координат $\{\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}\}$):

$$\Psi_a = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Phi_{1a} + (-1)^S \Phi_{2a}] \chi_{SM_S}, \quad (20)$$

де χ_{SM_S} – спінова двоелектронна функція, $\Phi_{1a}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ і $\Phi_{2a}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \equiv \Phi_{1a}(\vec{r}_1 \leftrightarrow \vec{r}_2)$ – двоелектронні координатні хвильові функції початкового стану.

Перейдемо до побудови двоелектронної хвильової функції кінцевого стану Ψ_b . Позначимо через $l_1 m_1$, $l_2 m_2$ орбітальні моменти і їх проекції на міжцентрову вісь \vec{R} електронів у кінцевому (двічі збудженому) стані іона $B^{(Z_b-2)+}$. Нехай L , S – їх повний орбітальний і спіновий моменти, а M_L і M_S – відповідні їм проекції на вісь \vec{R} . Тоді хвильова функція Ψ_b у схемі LS -зв'язку має вид (у системі координат $\{x, y, z\}$):

$$\Psi_b = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{m_1, m_2} C_{l_1 m_1, l_2 m_2}^{LM_L} \times [\Phi_{1b} + (-1)^S \Phi_{2b}] \chi_{SM_S}, \quad (21)$$

де $\Phi_{1b}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ і $\Phi_{2b}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \equiv \Phi_{1b}(\vec{r}_1 \leftrightarrow \vec{r}_2)$ – двоелектронні координатні хвильові функції кінцевого стану, $C_{l_1 m_1, l_2 m_2}^{LM_L}$ – коефіцієнти Клебша-Гордона.

Оскільки активні електрони здійснюють переходи на великих відстанях $\sim R/2 \gg 1$ а.о., двоелектронні хвильові функції $\Phi_{1a}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ і $\Phi_{1b}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ можна зобразити у вигляді добутку одноелектронних функцій, які не враховують кореляційну взаємодію між електронами:

$$\Phi_{1a}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi_a(\vec{r}_{1a}) \varphi_i(\vec{r}_{2b}) \quad (22)$$

$$\Phi_{1b}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi_{f_1}(\vec{r}_{1b}) \varphi_{f_2}(\vec{r}_{2b}), \quad (23)$$

де $\varphi_a(\vec{r}_{1a})$ – хвильова функція тунелюючого електрона молекули $A^{(Z_a-1)+}$, $\varphi_i(\vec{r}_{2b})$ – електронна хвильова функція основного стану іона $B^{(Z_b-1)+}$, $\varphi_{f_1}(\vec{r}_{1b})$ і $\varphi_{f_2}(\vec{r}_{2b})$ – одно-

електронні хвильові функції двічі збуджених станів іона $B^{(Z_b-2)+}$. Функції $\varphi_a(\vec{r}_{1a})$ та $\varphi_{f_1}(\vec{r}_{1b})$ є хвильовими функціями тунелюючого електрона у початковому і кінцевому станах, які потрібно знати у міжцентровій області, тобто для $r_{1a} \approx r_{1b} \approx R/2$. При обчисленні $H_{ab}(R)$ у якості $\varphi_a(\vec{r}_{1a})$ та $\varphi_{f_1}(\vec{r}_{1b})$ ми візьмемо знайдені вище функції (9) та (11). При цьому в функції (11) замінимо $(n_b, l_b, m_b) \rightarrow (n_1, l_1, m_1)$.

Підставивши співвідношення (20) – (23) у вираз (19), для матричного елемента двоелектронної обмінної взаємодії $H_{ab}(R)$ одержимо таке представлення:

$$H_{ab}(R) = \sum_{m_1, m_2} C_{l_1 m_1, l_2 m_2}^{L M L} [H_1(R) + (-1)^S H_2(R)], \quad (24)$$

$$H_1(R) = \left\langle \varphi_{f_1}(\vec{r}_{1b}) \varphi_{f_2}(\vec{r}_{2b}) \left| \hat{H} \right| \varphi_a(\vec{r}_{1a}) \varphi_i(\vec{r}_{2b}) \right\rangle, \quad (25)$$

$$H_2(R) = \left\langle \varphi_{f_2}(\vec{r}_{1b}) \varphi_{f_1}(\vec{r}_{2b}) \left| \hat{H} \right| \varphi_a(\vec{r}_{1a}) \varphi_i(\vec{r}_{2b}) \right\rangle. \quad (26)$$

Для синглетних двоелектронних іонних станів $|n_2 l_2 m_2, n_1 l_1 m_1\rangle$ значення спіну виділеної електронної пари $S = 0$, а для триплетних – $S = 1$. Оскільки хвильові функції $\varphi_i(\vec{r}_{2b})$ та $\varphi_{f_2}(\vec{r}_{2b})$ ортогональні як власні функції одного і того ж гамільтоніана, то в матричних елементах $H_1(R)$, $H_2(R)$ ненульовий внесок робить лише міжелектронна взаємодія. Позаяк активні електрони здійснюють переходи на великих відстанях $r_{12} = |\vec{R} - \vec{r}_{1a} + \vec{r}_{2b}| \approx R/2 \gg 1$ а.о., розкладемо потенціал їх взаємодії r_{12}^{-1} в ряд за обернени-

ми степенями великого $|\vec{R} - \vec{r}_{1a}| \gg 1$ а.о., обмежившись при цьому першим кореляційним членом:

$$\frac{1}{r_{12}} \approx -\frac{r_{2b} \cos \theta}{|\vec{R} - \vec{r}_{1a}|^2} \approx -\frac{4r_{2b} \cos \theta}{R^2}$$

(θ – кут між векторами $\vec{r}_{1b} = \vec{R} - \vec{r}_{1a}$ та \vec{r}_{2b}). Враховуючи сказане та записавши інтеграл по \vec{r}_{1b} у циліндричних координатах, для матричного елемента (25) одержимо:

$$H_1(R) = -4 \int_0^{R/2} dz \int_{\vec{S}} d\vec{S} \varphi_{f_1}^*(\vec{r}_{1b}) \varphi_a(\vec{r}_{1a}) \frac{1}{R^2} \int d\vec{r}_{2b} \varphi_{f_2}^*(\vec{r}_{2b}) \varphi_i(\vec{r}_{2b}) r_{2b} \cos \theta. \quad (27)$$

У виразі (27) поверхня інтегрування \vec{S} – площина, яка перпендикулярна до між'ядерної осі \vec{R} і ділить її навпіл. Водночас інтегрування за змінною \vec{r}_{2b} в (27) проводиться по всьому простору. Подібне до (27) представлення одержується і для матричного елемента $H_2(R)$ в (26).

Для подальших обчислень необхідно конкретизувати хвильові функції $\varphi_i(\vec{r}_{2b})$ та

$\varphi_{f_2}(\vec{r}_{2b})$. Вони задовольняють рівняння Шредингера

$$\left(-\frac{\Delta_2}{2} + V_b(r_{2b}) - E_{i, f_2} \right) \varphi_{i, f_2}(\vec{r}_{2b}) = 0, \quad (28)$$

у якому ми знехтували потенціалом взаємодії $V_a(r_{2a})$ внутрішнього електрона іона $B^{(Z_b-2)+}$ з віддаленим молекулярним іоном A^{Z_a+} у порівнянні з $V_b(r_{2b})$. Взаємодію еле-

ктрона з іонним залишком B^{Z_b+} опишемо таким модельним потенціалом $V_b(r_{2b})$ [13]:

$$V_b(r_{2b}) = -\frac{Z_b}{r_{2b}} + \sum_{l'} C_{l'} \frac{1}{r_{2b}^2} \hat{P}_{l'}, \quad (29)$$

де $\hat{P}_{l'}$ – оператор проектування на підпростір сферичних функцій із заданим значенням орбітального квантового числа l' . Нормована хвильова функція електрона у основному стані іона $B^{(Z_b-1)+}$ для модельного потенціалу (29) має вигляд [14]:

$$\varphi_i(\vec{r}_{2b}) = B_1 r_{2b}^{s_{l_b}} e^{-\frac{r_{2b}}{n_b}} Y_{l_b m_b}(\theta_{2b}, \phi_{2b}), \quad (30)$$

де

$$B_1 = \left(\frac{2}{n_b}\right)^{s_{l_b}+3/2} \frac{1}{\Gamma^{1/2}(2s_{l_b}+3)} \quad (31)$$

($\Gamma(x)$ – гамма-функція Ейлера).

Нормована хвильова функція збудженого стану $\varphi_{f_2}(\vec{r}_{2b})$ іона $B^{(Z_b-1)+}$ для модельного потенціалу (29) має вигляд [15]:

$$\varphi_{f_2}(\vec{r}_{2b}) = B_2 r_{2b}^{s_{l_2}} e^{-\frac{r_{2b}}{n_2}} {}_1F_1\left(-p; 2s_{l_2}+2; \frac{2r_{2b}}{n_2}\right) Y_{l_2 m_2}(\theta_{2b}, \phi_{2b}), \quad (32)$$

$$B_2 = \left(\frac{2}{n_2}\right)^{s_{l_2}+2} \frac{1}{2Z_b^{1/2} \Gamma^{1/2}(2s_{l_2}+2)} \left[\frac{\Gamma(n_2 Z_b + 2s_{l_2} + 1)}{(n_2 Z_b - s_{l_2} - 1)!} \right]^{1/2}. \quad (33)$$

Тут $p = (n_2 Z_b - s_{l_2} - 1)$ – ціле додатне число (для основного стану $p = 0$).

Для знаходження шуканого представлення для двоелектронного матричного елемента двоелектронної взаємодії $H_{ab}(R)$ обчислимо інтеграли $H_1(R)$, $H_2(R)$ в (25), (26), використовуючи знайдені зображен-

ня для одноелектронних хвильових функцій $\varphi_a(\vec{r}_{1a})$, $\varphi_{f_1}(\vec{r}_{1b})$, $\varphi_i(\vec{r}_{2b})$ та $\varphi_{f_2}(\vec{r}_{2b})$. Підставивши в інтеграли (27) вирази (9), (11), (30) і (32) та виконуючи інтегрування за змінними \vec{r}_{1a} (у циліндричних координатах) та \vec{r}_{2b} (у сферичних координатах), для матричного елемента $H_1(R)$ одержимо:

$$\begin{aligned} H_1(R) = & (-1)^{l_1} B_0 B_1 B_2 B_{l_1}^{m_1} \frac{1}{R} \left(\frac{2n_a}{R}\right)^{|m_1|+1} m_1! \left(\frac{n_a^2 Z_a}{2e}\right)^{n_a Z_a} \left(\frac{n_2^2 (Z_b - 1)}{2e}\right)^{n_2 (Z_b - 1)} \times \\ & \sqrt{(2l_b + 1)(2l_2 + 1)} \begin{pmatrix} l_b & l_2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_b & l_2 & 1 \\ m_b & m_2 & 0 \end{pmatrix} \left(\frac{n_2 n_b}{n_2 + n_b}\right)^{s_{l_2} + s_{l_b} + 4} \times \\ & \Gamma(s_{l_2} + s_{l_b} + 4) \cdot {}_2F_1\left(-n_2 Z_b + s_{l_2} + 1; s_{l_2} + s_{l_b} + 4; 2s_{l_2} + 2; \frac{2n_b}{n_2 + n_b}\right) \times \\ & \exp\left\{-\frac{1}{n_a \sqrt{(R - z_1) z_2}} \left[(-R^2 + (z_1 + z_2)R - z_1 z_2) K(\zeta) + (R - z_1) z_2 E(\zeta) + \right.\right. \\ & \left.\left.(R^2 - (z_1 + 2z_2)R + z_1 z_2 + z_2^2) \Pi(\nu, \zeta)\right]\right\} \sum_{s=|m_1|}^{\infty} a_s^{m_a l_a} B_{s+|m_a|}^{m_1} D_{m_1 m_a}^{s+|m_a|}(0, \beta, 0). \quad (34) \end{aligned}$$

Тут ${}_2F_1(\alpha; \beta; \gamma; z)$ – гіпергеометрична функція; $\begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \end{pmatrix}$ – $3j$ -символ Вігнера; s_{l_b} , s_{l_2} – ефективні орбітальні квантові числа для модельного потенціалу (29) (їх обчислення детально описано в [9]). Величини $B_{l_1}^{m_1}$ та $B_{s+|m_a|}^{m_1}$ визначаються формулою (14). Матричний елемент $H_2(R)$ можна одержати із виразу (34) для $H_1(R)$, виконавши в остан-

ньому заміни: $n_{1b} \leftrightarrow n_{2b}$; $l_1 \leftrightarrow l_2$; $m_1 \leftrightarrow m_2$.

Висновки

У статті розроблено квазікласичну версію асимптотичної теорії для дослідження двоелектронних процесів одноелектронної перезарядки з утворенням двічі збуджених іон-

них станів при повільних іон-молекулярних зіткненнях. Одержано нові аналітичні представлення (24), (34) для асимптотики матричного елемента двоелектронної обмінної взаємодії іонів з двоатомними гомоядерними молекулами в реакції (2) у випадку близьких енергій E_a та E_b тунелюючого електрона у початковому та кінцевому станах, тобто в молекулі $A^{(Z_a-1)+}$ та іоні $B^{(Z_b-2)+}$.

Знайдене представлення для матричного елемента обмінної взаємодії $H_{ab}(R)$, що описує двоелектронний процес одноеле-

ктронного захоплення у двічі збуджені іонні стани в реакціях (2) (формули (24), (34)), є доволі простим і зручним для систематичних розрахунків перерізів процесів з перерозподілом виду (2). Розвиненню запропонованого в цій праці підходу на випадок, коли вказані енергії E_a та E_b сильно відрізняються ($|E_a| > |E_b|$), а також обчисленню повних і парціальних перерізів одно- та двоелектронних процесів типу (1) і (2) присвячені наші подальші дослідження.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- [1] Chibisov M. I. Asymptotic exchange interactions in ion-atom systems / M. I. Chibisov, R. K. Janev // *Phys. Rep.* – 1988. – V. 166. – № 1. – P. 1–87.
- [2] Scott T. C. Asymptotically exact calculation of the exchange energies of one-active-electron diatomic ions with the surface integral method / T. C. Scott, M. Aubert-Frecon, G. Hadinger *et. al.* // *J. Phys. B.* – 2004. – V. 37. – P. 4451–4469.
- [3] Bransden B. H. Charge Exchange and the Theory of Ion-Atom Collisions / B. H. Bransden, M. H. C. McDowell. – Oxford: Clarendon, 1992. – 488 p.
- [4] Khoma M. V. On the semiclassical approach in the theory of ion-diatom exchange interaction: its application to charge exchange reactions / M. V. Khoma, O. M. Karbovanets, M. I. Karbovanets, R. J. Buenker // *Physica Scripta.* – 2008. – V. 78. – P. 065201 (10pp).
- [5] Карбованець О. М. Квазікласичний підхід в теорії обмінної взаємодії багатозарядних іонів з двоатомними молекулами / О. М. Карбованець // *Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Фізика.* – 2008. – № 23. – С. 7–15.
- [6] Khoma M. V. A simple theoretical approach of charge transfer processes in collisions of atomic ions with polar targets / M. V. Khoma, M. Imai, O. M. Karbovanets *et. al.* // *Chemical Physics.* – 2008. – V. 352. – P. 142–146.
- [7] Карбованець О. М. Метод поверхневих інтегралів в теорії обмінної взаємодії полярних молекул з багатозарядним йоном / О. М. Карбованець, М. І. Карбованець, В. Ю. Лазур, М. В. Хома // *ЖФД.* – 2010. – Т. 14. – № 4. – P. 4301 (11 с.).
- [8] Khoma M. V. Asymptotic theory of the one- and two-electron processes in slow collisions of atomic ions with diatomic molecules / M. V. Khoma, V. Yu. Lazur, R. K. Janev // *Phys. Rev. A.* – 2009. – V. 80. – P. 032706 (1–20).
- [9] Karbovanets O. M. Two-electron exchange interaction between polar molecules and atomic ions. Asymptotic approach / O. M. Karbovanets, M. I. Karbovanets, M. V. Khoma, V. Yu. Lazur // *European Physical Journal D.* – 2015. – V. 69. – P. 94 (1–10).
- [10] Errea L. F. Charge exchange and excitation in $C^{3+} + H$ collisions: II. Partial and total cross section calculations / L. F. Errea, B. Herrero, L. Mendez, A. Riera // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 1991. – V. 24. – P. 4061–4075.

- [11] Tseng H. C. Total and state-selective electron capture cross sections for $C^{3+} + H$ collisions / H. C. Tseng, C. D. Lin // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 1999. – V. 32. – P. 5271–5278.
- [12] Chibisov M. I. Charge exchange of atoms on multiply charged ions / M. I. Chibisov // *ЖЕТР.* – 1979. – V. 49. – No. 6. – P. 962–966.
- [13] Simons G. New model potential for pseudopotential calculation / G. Simons // *J. Chem. Phys.* – 1971. – V. 55. – No. 2. – P. 756–761.
- [14] Лендъел В. И. Введение в теорию атомных столкновений / В. И. Лендъел, В. Ю. Лазур, М. И. Карбованец, Р. К. Янев. – Львов : Выща школа, 1989. – 192 с.
- [15] Ивакин И. А. Перезарядка с возбуждением иона: Асимптотическая теория / И. А. Ивакин, М. И. Карбованец, В. Н. Островский // *Оптика и спектроскопия.* – 1987. – Т. 63. – Вып. 3. – С. 494–500.

Стаття надійшла до редакції 25.06.2019

М.Я. Евич, М.И. Карбованец

Ужгородский национальный университет, 88000, Ужгород, ул. Волошина, 54, Украина

ПЕРЕЗАРЯДКА В ДВАЖДЫ ВОЗБУЖДЕННЫЕ СОСТОЯНИЯ ПРИ МЕДЛЕННЫХ ИОН-МОЛЕКУЛЯРНЫХ СТОЛКНОВЕНИЯХ

В рамках квазиклассического метода вычислено асимптотику (при больших расстояниях R между сталкивающимися частицами) потенциала обменного взаимодействия двухатомной гомоядерной молекулы $A^{(Z_a-1)+}$ с атомным ионом $B^{(Z_b-1)+}$, ответственного за двухэлектронный процесс одноэлектронного захвата в дважды возбужденные ионные состояния.

Ключевые слова: медленные ион-молекулярные столкновения, одноэлектронный захват, дважды возбужденные состояния, асимптотическая теория.

М. Ya. Yevych, M. I. Karbovanets

Uzhhorod National University, 88000, Uzhhorod, Voloshin, 54, Ukraine

CHARGE-TRANSFER PROCESSES INTO DOUBLY EXCITED STATES IN A SLOW ION-MOLECULE COLLISIONS

Purpose. To construct a closed analytical expression for the two-electron exchange interaction potential, which define the charge transfer processes into the doubly excited states in collisions of the homonuclear diatomic molecules with multicharged ions.

Methods. The semiclassical method and the asymptotic version of the surface integral method have been used for construction of the asymptotically correct two-center wave function and the two-electron exchange interaction.

Results. We have constructed the semiclassical representation for the two-center electronic wave function of the quasimolecular systems, which consist of the homonuclear diatomic molecule and atomic ion, for the region of a large separation between heavy particles. The analytical expression (in terms of full elliptic integrals) of the asymptotic of a two-electron exchange interaction responsible for the formation of doubly excited ionic states has been obtained.

Conclusions. An analytical study of the asymptotic properties (at large distances between interacting particles) of the quasimolecular system that consists of an ion and a homonuclear diatomic molecule has been carried out. The new analytical expression for the leading term of the two-electron exchange interaction responsible for capture into the doubly excited states has been obtained in the framework of the semiclassical version of the asymptotic approach. It is assumed that the energies of the tunneling electron before and after the recharge process are not much different. The expressions obtained for exchange interaction can be used for the study of the two-electron transfer processes into a doubly excited state at the collision of a homonuclear diatomic molecule with an atomic ion.

Keywords: slow ion-molecule collisions, charge transfer, doubly excited states, asymptotic theory.

REFERENCES

- [1] Chibisov, M. I., Janev, R. K. (1988), «Asymptotic exchange interactions in ion-atom systems», *Phys. Rep.*, V. 166, No. 1, pp. 1–87.
- [2] Scott, T. C., Aubert-Frecon, M., Hadinger, G., Andrae, D. (2004), «Asymptotically exact calculation of the exchange energies of one-active-electron diatomic ions with the surface integral method», *J. Phys. B.*, V. 37, pp. 4451–4469.
- [3] Bransden, B. H., McDowell, M. H. C. (1992), *Charge Exchange and the Theory of Ion-Atom Collisions*, Oxford, Clarendon, 488 p.
- [4] Khoma, M. V., Karbovanets, O. M., Karbovanets, M. I., Buenker, R. J. (2008), «On the semiclassical approach in the theory of ion-diatom exchange interaction: its application to charge exchange reactions», *Physica Scripta*, V. 78, pp. 065201 (10).
- [5] Karbovanets, O. M. (2008), «Quasiclassical approach in the theory of exchange interaction of multiply charged ions with diatomic molecules», [*«Kvaziklasychnyi pidkhid v teorii obminnoi vzaiemodii bahatozariadnykh ioniv z dvoatomnymy molekulamy»*], *Scientific Herald of Uzhhorod University. Series Physics [Nauk. Visn. Uzhhorod. Univ. Ser. Fiz.]*, Iss. 23. pp. 7–15.
- [6] Khoma, M. V., Imai, M., Kikuchi, Y., Saito, M., Haruyama, Y., Karbovanets, M. I., Kretinin, I. Yu., Itoh, A., Buenker, R. J. (2008), «A simple theoretical approach of charge transfer processes in collisions of atomic ions with polar targets», *Chemical Physics*, V. 352, pp. 142–146.
- [7] Karbovanets, O. M., Karbovanets, M. I., Lazur, V. Yu., Khoma, M. V. (2010), «The method of surface integrals in the theory of exchange interaction of polar molecules with multiply charged ions», [*«Metod poverkhnevnykh intehraliv v teorii obminnoi vzaiemodii poliarnykh molekul z bahatozariadnymy yonamy»*], *J. Phys. Studies*, V. 14. No. 4, pp. 4301.
- [8] Khoma, M. V., Lazur, V. Yu., Janev, R. K. (2009), «Asymptotic theory of the one- and two-electron processes in slow collisions of atomic ions with diatomic molecules», *Phys. Rev. A.*, V. 80, pp. 032706.
- [9] Karbovanets, O. M., Karbovanets, M. I., Khoma, M. V., Lazur, V. Yu. (2015), «Two-electron exchange interaction between polar molecules and atomic ions. Asymptotic approach», *European Physical Journal D*, V. 69, pp. 94 (1–10).

- [10] Errea, L. F., Herrero, B., Mendez, L., Riera, A. (1991), «Charge exchange and excitation in $C^{3+} + H$ collisions: II. Partial and total cross section calculations», *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, V. 24, pp. 4061–4075.
- [11] Tseng, H. C., Lin, C. D. (1999), «Total and state-selective electron capture cross sections for $C^{3+} + H$ collisions», *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, V. 32, pp. 5271–5278.
- [12] Chibisov, M. I. (1979), «Charge exchange of atoms on multiply charged ions», *JETP*, V. 49, No. 6, pp. 962–966.
- [13] Simons, G. (1971), «New model potential for pseudopotential calculation», *J. Chem. Phys.*, V. 55, № 2, pp. 756–761.
- [14] Lendel, V. I., Lazur, V. Yu., Karbovanets, M. I., Yanev, R. K. (1989), Introduction to the theory of atomic collisions, [Vvedeniye v teoriyu atomnykh stolknoveniy], Lviv, [L'vov : Vyscha shkola], 192 p.
- [15] Ivakin, I. A., Karbovanets, M. I., Ostrovsky, V. N. (1987), «Charge exchange with ion excitation: asymptotic theory», *Opt. Spectrosc.*, V. 63, pp. 288–292.

©Ужгородський національний університет