

# ОБМІННА ВЗАЄМОДІЯ ІОНА З ДИПОЛЬНО-ЗВ'ЯЗАНИМ АНІОНОМ

О.М. Карбованець<sup>1</sup>, М.І. Карбованець<sup>1</sup>, В.Ю. Лазур<sup>1</sup>, М.В. Хома<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Ужгородський національний університет, кафедра теоретичної фізики, вул. Волошина, 54  
Ужгород, 88000, Україна

<sup>2</sup>Університет м. Зіген, кафедра теоретичної хімії, Зіген, 57076, ФРН

Досліджено асимптотичні властивості квазімолекулярної системи, яка складається з дипольно-зв'язаного аніона  $A_p^-$  та багатозарядного іона  $B^{Z_b+}$ . Враховано вплив точкового дипольного моменту полярної молекули на асимптотику одноелектронних хвильових функцій системи  $(A_p B)^{(Z_b-1)+}$  при великих відстанях між взаємодіючими частинками. В рамках квазікласичного підходу одержано аналітичне зображення для головного члена асимптотики одноелектронної обмінної взаємодії багатозарядного іона із дипольно-зв'язаним аніоном.

## 1. Вступ

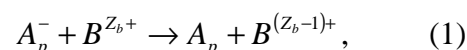
Дипольно-зв'язані аніони (ДЗА), тобто від'ємні молекулярні іони, у яких надлишковий електрон зв'язаний з нейтральною молекулою завдяки її дипольному моменту, впродовж останніх років становлять значний інтерес як для експериментаторів, так і для теоретиків [1, 2]. У результаті численних досліджень було встановлено, що нейтральні полярні молекули з дипольним моментом  $d > 2,5 D$  можуть утворювати дипольно-зв'язані негативні іони, в яких зовнішній електрон слабо зв'язаний дипольним потенціалом молекули. Як правило, електрон утримується на дифузній орбіталі великої протяжності (десятки ангстрем) з малою енергією зв'язку (десятки меВ), що вказує на високу активність ДЗА у різноманітних реакціях, зокрема, зарядово-обмінних.

Розрізняють декілька типів зарядово-обмінних реакцій за участю ДЗА. Самі ДЗА можуть утворюватися при зіткненні полярних молекул із рідбергівськими атомами, які також містять слабо зв'язаний електрон на дифузній орбіталі [3]. Іншим типом зарядово-обмінних реакцій є перезарядка при зіткненні ДЗА з полярними молекулами. Прикладом такої реакції є перезарядка ДЗА  $CH_3CN^-$  на полярній мо-

лекулі  $CH_3NO_2$ , яка досліджувалася у роботі [4].

Наразі більшість теоретичних досліджень ДЗА обмежуються *ab initio* обчисленнями енергій споріднення полярної молекули до електрона, тоді, як застосування *ab initio* методів до описання процесів зарядового обміну стикаються із суттєвими труднощами. Тому, не дивлячись на високу точність багатоелектронних варіаційних обчислень, у теоретичних дослідженнях до цих пір широко використовують прості одноелектронні локальні модельні потенціали, які довели свою ефективність як для задовільного описання структури ДЗА, так і для дослідження елементарних процесів за їх участю, зокрема, фотовідриву електронів від ДЗА [5], а також одноелектронного обміну [6].

У даній роботі досліджуються процеси одноелектронного захоплення при повільних зіткненнях іонів  $B^{Z_b+}$  з ДЗА  $A_p^-$  виду



де  $Z_b$  - ефективний заряд іона  $B^{Z_b+}$ .

Для теоретичного дослідження процесів зарядового обміну (1) необхідно знати асимптотику (при великих між'ядерних відстанях  $R$ ) обмінної взаємодії  $\Delta E(R)$

електронних станів квазімолекулярної системи  $(A_p B)^{(Z_b-1)^+}$  [7]. Зазначимо, що точне обчислення  $\Delta E(R)$  в асимптотичній області великих  $R$  за допомогою традиційних *ab initio* методів наразі вимагає значних обчислювальних зусиль: обмінна взаємодія  $\Delta E(R)$  експоненціально спадає зі збільшенням  $R$  і доволі швидко досягає того ж порядку величини, що і похибки, які зумовлені використанням обмеженого базису у варіаційних обчисленнях. Тому актуальним є розвиток аналітичних методів для знаходження електронних квазімолекулярних функцій і обмінних матричних елементів у асимптотичній області  $R \gg 1$ , які б задавали правильні граничні умови для числових розрахунків при скінчених значеннях  $R$ .

Для обчислення асимптотики одноелектронної обмінної взаємодії ефективним є метод поверхневих інтегралів [7], у якому  $\Delta E(R)$  зображається в термінах інтегралу по поверхні  $S$ , що відокремлює області локалізації електрона в початковому  $\Psi_a$  та кінцевому  $\Psi_b$  станах квазімолекул  $A_p^- + B^{Z_b+}$  та  $A_p + B^{(Z_b-1)^+}$ , відповідно:

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

У наших попередніх працях методом поверхневих інтегралів було досліджено процеси зарядового обміну при повільних зіткненнях багатозарядних іонів з двоатомними гомоядерними [8] та полярними молекулами [9]. Для знаходження правильних асимптотик квазімолекулярних хвильових функцій  $\Psi_{a,b}$  і головного члена експоненціально малої одноелектронної обмінної взаємодії у працях [8, 9] було використано квазікласичний метод, а полярна молекула розглядалася в моделі точкового диполя.

У даній роботі ми поширили квазікласичний метод [8, 9] на випадок реакцій перезарядки (1) і одержали аналітичне зображення для асимптотики обмінної взаємодії дипольно-зв'язаного аніона з багатозарядним іоном, в тому числі і з урахуванням ефектів трансляції імпульсу електро-

на.

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

## 2. Хвильова функція системи $(A_p B)^{(Z_b-1)^+}$ та одноелектронна обмінна взаємодія

Для реакцій за участю ДЗА необхідно враховувати вплив дипольного моменту полярної молекули на асимптотику хвильової функції тунелюючого електрона вже у головному порядку відповідного асимптотичного розкладу [9].

У одноелектронному наближенні вважаємо, що “активний” електрон рухається в аксіально-симетричному потенціалі  $V_a(\vec{r}_a)$  полярної молекули  $A_p$  та сферично симетричному потенціалі  $V_b(r_b)$  іона  $B^{Z_b+}$ . Потенціал  $V_a(\vec{r}_a)$  у рамках моделі точкового диполя дається виразом [9]

$$V_a(\vec{r}_a) = -\frac{\vec{d} \cdot \vec{r}_a}{r_a^3}, \quad (3)$$

де  $\vec{d}$  - дипольний момент полярної молекули  $A_p$ . Потенціал  $V_b(r_b)$  має наступну асимптотику:

$$V_b(r_b) \xrightarrow{r_b \rightarrow \infty} -\frac{Z_b}{r_b}, \quad (4)$$

де  $\vec{r}_b = \vec{r}_a - \vec{R}$  (див. рис. 1).

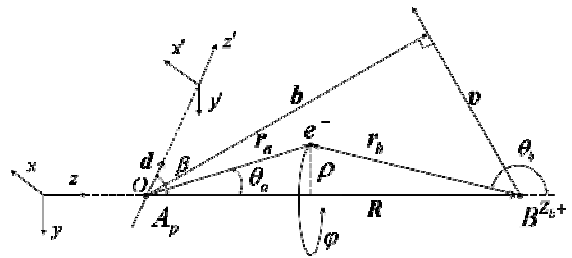


Рисунок 1. Геометрія квазімолекули.

Запровадимо системи координат  $\{x, y, z\}$  та  $\{x', y', z'\}$  із спільним центром  $O$  у центрі мас  $A_p^-$ , так, щоб вісь  $z$  була направлена уздовж вектора  $\vec{R}$ , а вісь  $z'$  - уздовж напрямку дипольного моменту  $\vec{d}$  (див. рис. 1). Перехід від  $\{x', y', z'\}$  до  $\{x, y, z\}$  визначається трьома кутами Ей-

лера  $\alpha, \beta, \gamma$  [10]. Позаяк взаємна орієнтація осей  $(x', x)$  та  $(y', y)$  задалегідь не фіксована, візьмемо  $Oy' \parallel Oy$ . У цьому випадку  $\alpha = \gamma = 0$  і перехід від  $\{x', y', z'\}$  до  $\{x, y, z\}$  можна здійснити поворотом навколо осі  $Oy'$  (або  $Oy$ ) на кут  $\beta$  ( $\beta$  - кут між  $\vec{d}$  і  $\vec{R}$ ).

Позначимо через  $E_a$  збурені рівні енергії у випадку, коли електрон перебуває у зв'язаному стані аніона  $A_p^-$  (квазімолекула  $A_p^- + B^{Z_b+}$ ), та  $E_b$ , якщо електрон зв'язаний з іоном  $B^{Z_b+}$  (квазімолекула  $A_p + B^{(Z_b-1)+}$ ):

$$E_{a,b} = E_{a,b}^{(0)} - Z_{b,a} / R + O(1/R^2),$$

де  $E_a^{(0)}$  та  $E_b^{(0)}$  відповідно енергії ізольованих частинок  $A_p^{(Z_a-1)+}$  та  $B^{(Z_b-1)+}$ .

Запишемо рівняння Шредінгера, що описує рух “активного” електрона ДЗА у далекій підбар’єрній області ( $r_a \sim R/2$ ):

$$\left( \frac{\Delta}{2} + \frac{\vec{d}\vec{r}_a}{r_a^3} + \frac{Z_b}{r_b} + E_a \right) \Psi_a(\vec{r}_a) = 0. \quad (5)$$

Рівняння (5) розв’язуємо з наступною граничною умовою:

$$\Psi_a(\vec{r}_a) \xrightarrow{1 < r_a < R} \Psi_a^{(0)}(\vec{r}_a), \quad (6)$$

де  $\Psi_a^{(0)}$  - незбурена хвильова функція ДЗА, яка задовольняє рівнянню

$$\left( \frac{\Delta}{2} + \frac{\vec{d}\vec{r}_a}{r_a^3} + E_a^{(0)} \right) \Psi_a^{(0)}(\vec{r}_a) = 0. \quad (7)$$

Для знаходження асимптотичного розв’язку рівняння (5) використаємо метод, розроблений у роботах [8, 9]. У одночастинковому наближенні  $\Psi_a^{(0)}$  можна записати у вигляді (у системі  $\{x', y', z'\}$ ):

$$\Psi_a^{(0)}(\vec{r}_a) = R^{(0)}(r_a) Z(\theta'_a, \phi'_a). \quad (8)$$

Диполь-сферичні функції  $Z(\theta'_a, \phi'_a)$  задовольняють рівнянню [9]

$$\{\hat{L}^2 - 2d \cos \theta'_a\} Z(\theta'_a, \phi'_a) = \eta Z(\theta'_a, \phi'_a),$$

де  $\hat{L}^2$  - оператор квадрату моменту кількості руху. Власні значення  $\eta$  можна представити у вигляді  $\eta = \lambda(\lambda + 1)$ , де  $\lambda$  - ефективний орбітальний момент. У випадку  $d = 0$  диполь-сферичні функції  $Z(\theta'_a, \phi'_a)$  збігаються до звичайних сферичних функцій  $Y_{\ell_a}^{m_a}(\theta'_a, \phi'_a)$ ; при цьому  $\lambda = \ell_a$ ,  $\ell_a \geq |m_a|$ , де  $m_a$  - проекція орбітального моменту  $\ell_a$ .

Відокремивши змінні у (7), одержимо рівняння для радіальних функцій  $R^{(0)}(r_a)$

$$\frac{1}{r_a^2} \frac{d}{dr_a} \left( r_a^2 \frac{dR^{(0)}}{dr_a} \right) + 2 \left( E_a - \frac{\eta}{2r_a^2} \right) R^{(0)} = 0,$$

розв’язок якого можна записати у вигляді:

$$R_{n_a \eta}^{(0)}(r_a) = \frac{N_{n_a \eta}}{\sqrt{r_a}} K_{\sigma}(r_a / n_a). \quad (9)$$

Тут  $K_{\sigma}(r_a / n_a)$  - функція Макдональда (модифікована функція Бесселя 2-го роду) [11], а  $n_a$  та  $\sigma$  визначаються співвідношеннями:  $n_a = (2|E_a|)^{-1/2}$ ,  $\sigma = \sqrt{\eta + 1/4}$ . Як зазначалося вище, ми припускаємо, що надлишковий електрон зв'язаний з нейтральною полярною молекулою тільки завдяки її дипольному моменту. У цьому випадку дипольно-зв'язані стани виникають при  $\eta < -1/4$ , коли  $\sigma$  є уявною. Поклавши  $\sigma = is$  і обчисливши коефіцієнт нормування  $N_{n_a \eta}$  радіальної хвильової функції (9), одержимо [5]:

$$N_{n_a \eta} = \frac{1}{n_a} \left( \frac{2 \sinh \pi s}{\pi s} \right)^{1/2}, \quad (10)$$

$$s = \sqrt{|\eta| - 1/4}, \quad \eta < -1/4.$$

Використовуючи (10), запишемо асимптотику незбуреної радіальної хвильової функції (9) за змінною  $r_a$ :

$$R_{n_a \eta}^{(0)}(r_a) = \left( \frac{\sinh \pi s}{n_a} \right)^{1/2} \frac{e^{-r_a/n_a}}{r_a}. \quad (11)$$

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

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

Коефіцієнти розкладу  $a_{\ell}^{m_a}$  задовольняють системі рекурентних співвідношень [9]

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

Із врахуванням (12), зобразимо асимптотику повної хвильової функції (11) у системі координат  $\{x, y, z\}$  у вигляді:

$$\Psi_a^{(0)}(\vec{r}_a) \approx \left( \frac{\sinh \pi s}{n_a} \right)^{1/2} \frac{e^{-r_a/n_a}}{r_a} \times \sum_{\ell=|m_a|}^{\infty} \sum_{k=-\ell}^{\ell} a_{\ell}^{m_a} D_{km_a}^{\ell}(0, \beta, 0) Y_{\ell}^k(\theta_a, \varphi_a), \quad (13)$$

де  $D_{km}^{\ell}(\alpha, \beta, \gamma)$  - функції Вігнера [10].

Розв'язок рівняння (5) із граничною умовою (6), (13) у міжцентровій області ( $z \sim R/2$ ) шукаємо у вигляді:

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

Функція  $Q_a(z)$  в області  $r_a \sim R/2$  задовольняє рівнянню:

$$\frac{d^2 Q_a(z)}{dz^2} - p^2(z) Q_a(z) = 0, \quad (15)$$

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

$$p^2(z) = 2 \left( |E_a| - \frac{Z_b}{R-z} \right). \quad (16)$$

При одержанні рівняння (15) ми знехтували членами порядку  $R^{-2}$  (і вище), які малі при  $R \gg 1$ .

У квазікласичному наближенні розв'язок рівняння (15) має вигляд (див. праці [8, 9]):

$$Q_a(z) = \frac{\sinh^{1/2} \pi s}{n_a p^{1/2}(z)} \exp\left(-\int_{z_1}^z p(z') dz'\right), \quad (17)$$

де  $z_1, z_2$  - точки повороту на між'ядерній

осі:  $z_1 = 0, z_2 = R - Z_b / |E|$ .

З урахуванням (17), одержимо наступний вираз для асимптотики одноелектронної хвильової функції  $\Psi_a(\vec{r}_a)$  (14) квазімолекули  $A_p^- + B^{Z_b+}$  у далекій підбар'єрній області у квазікласичному наближенні:

$$\Psi_a(\vec{r}_a) \approx \frac{\sinh^{1/2} \pi s}{n_a p^{1/2}(z)} \times \exp\left(-\int_{z_1}^z p(z') dz'\right) \exp\left(-\frac{\rho^2 p(z)}{2z}\right) \times \sum_{\ell=|m_a|}^{\infty} \sum_{k=-\ell}^{\ell} a_{\ell}^{m_a} D_{km_a}^{\ell}(0, \beta, 0) Y_{\ell}^k(\theta_a, \varphi_a). \quad (18)$$

Асимптотика одноелектронної хвильової функції  $\Psi_b(\vec{r}_b)$  квазімолекули  $A_p + B^{(Z_b-1)+}$  у міжцентровій області була одержана у роботі [8]; результат має вигляд:

$$\Psi_b(\vec{r}_b) \approx \frac{(-1)^{l_b} Q_b(z')}{z'} \times \exp\left(-\frac{\rho^2 p(z')}{2z'}\right) Y_{l_b}^{m_b}(\theta_b, \varphi_b), \quad (19)$$

де

$$Q_b(z') = \frac{B_0}{\sqrt{n_b p(z')}} \left( \frac{n_b^2 Z_b}{2e} \right)^{n_b Z_b} \exp\left(\int_{z_2}^{z'} p(z'') dz''\right) \quad (20)$$

Тут  $n_b = (2|E_b|)^{-1/2}$ , а  $B_0$  - асимптотичний коефіцієнт хвильової функції валентного електрона в багатозарядному іоні  $B^{(Z_b-1)+}$ :

$$\Psi_b^{(0)}(\vec{r}_a) = (-1)^{l_b} B_0 r_b^{Z_b n_b - 1} e^{-r_b/n_b} Y_{l_b}^{m_b}(\theta_b, \varphi_b).$$

Обчисливши поверхневий інтеграл (2) із одержаними хвильовими функціями  $\Psi_a$  (18) та  $\Psi_b$  (19) методом, описаним у роботі [8], для обмінної взаємодії  $\Delta E(R)$  одержимо:

$$\Delta E(R) = (-1)^{l_b} B_0 \sqrt{\frac{\sinh \pi s}{n_b}} \left( \frac{n_b^2 Z_b}{2e} \right)^{n_b Z_b} \times \left( \frac{n_a}{2} \right)^{|m_b|} R^{-|m_b|-1} \exp\left(-\int_{z_1}^{z_2} p(z) dz\right) \times \frac{1}{|m_b|!} \sqrt{\frac{(2l_b+1)(l_b+|m_b|)!}{(l_b-|m_b|)!}} \times \sum_{\ell=|m_a|}^{\infty} a_{\ell}^{m_a} D_{m_b m_a}^{\ell}(0, \beta, 0) \sqrt{(2\ell+1) \frac{(\ell+|m_b|)!}{(\ell-|m_b|)!}}. \quad (21)$$

Як видно з одержаного результату (21), обмінна взаємодія  $\Delta E(R)$  виражається через квантову проникливість потенціального бар'єру, що розділяє взаємодіючі частинки. Квантова проникливість бар'єра визначається, в основному, напрямком уздовж осі  $\vec{R}$ , а в перпендикулярному до  $\vec{R}$  напрямку вона експоненціально зменшується із збільшенням відстані  $\rho$  від  $\vec{R}$ .

Обчисливши в (21) бар'єрний інтеграл, одержимо вираз для обмінної взаємодії дипольно-зв'язаного аніона з багатозарядним іоном у квазікласичному наближенні:

$$\Delta E(R) = (-1)^{\ell_b} B_0 \sqrt{\frac{\sinh \pi s}{n_b} \left( \frac{n_a + n_b}{2n_a \sqrt{e}} \right)^{2n_b Z_b}} \times \left( \frac{n_a}{2} \right)^{|m_b|} R^{n_b Z_b - |m_b| - 1} \exp(-R/n_a) \times \frac{1}{|m_b|!} \sqrt{\frac{(2\ell_b + 1)(\ell_b + |m_b|)!}{(\ell_b - |m_b|)!}} \times \sum_{\ell=|m_a|}^{\infty} a_{\ell}^{m_a} D_{m_b m_a}^{\ell}(0, \beta, 0) \sqrt{(2\ell + 1) \frac{(\ell + |m_b|)!}{(\ell - |m_b|)!}}. \quad (22)$$

У формулі (22) у показник експоненти входить лише енергія зв'язку аніона  $E_a$ , що відповідає фізичній картині підбар'єрного переходу електрона. Від кулонівської форми бар'єра у формулі (22) присутня степінь міжцентрової відстані  $R^{n_b Z_b - 1}$ . Формула (22) застосовна у випадку, коли ширина потенціального бар'єра набагато більша від розміру аніона, який  $\sim n_a$ , тобто при  $R \gg n_a$ . У границі об'єднаних атомів формула (22) переходить у відповідний двоцентровий результат роботи [12].

Вираз (22) для обмінної взаємодії  $\Delta E(R)$  одержаний нами у припущенні про адиабатичний характер процесу перезарядки, тобто для малих відносних швидкостей зіткнення  $v$ . Унаслідок цього він не враховує ефектів переносу імпульсу електрона у реакції (1), які стають особливо відчутними при швидкостях зіткнення  $v > 1$  а.о. (див., наприклад, [13]). Для врахування та-

ких ефектів використаємо концепцію “динамічного” потенціалу обмінної взаємодії  $\tilde{\Delta E}(R; v)$ , який параметрично залежить від швидкості зіткнення [14]. Процедура одержання  $\tilde{\Delta E}(R; v)$  докладно описана у роботі [8], тому приведемо лише остаточний результат:

$$\tilde{\Delta E}(R; v) = {}_1F_1 \left( |m_b| + 1; 1; -\frac{v_{\tau}^2 R n_a}{8} \right) \Delta E(R), \quad (23)$$

де обмінна взаємодія  $\Delta E(R)$  визначається виразом (22). У формулі (23)  ${}_1F_1(\alpha, \beta, z)$  - вироджена гіпергеометрична функція, а  $v_{\tau} = vb(b^2 + v^2 t^2)^{-1/2}$  - тангенціальна компонента відносної швидкості зіткнення  $v$  ( $b$  - прицільний параметр). Якщо  $v_{\tau} = 0$ , то  ${}_1F_1(|m_b| + 1; 1; 0) = 1$  і (23) переходить у попередній результат (22).

### 3. Заключні зауваження

У даній роботі в рамках асимптотичної теорії атомних зіткнень досліджено асимптотичні властивості квазімолекулярної системи  $(A_p B)^{(Z_b - 1)^+}$ , яка складається з дипольно-зв'язаного аніона  $A_p^-$  та багатозарядного атомного іона  $B^{Z_b^+}$ . Одержані аналітичні представлення (22) та (23) для головного члена розкладу (за малими степенями  $1/R$ ) асимптотики обмінної взаємодії багатозарядного іона з дипольно-зв'язаним аніоном справедливі за умови, що енергетичний рівень  $E_a$  знаходиться значно нижче вершини потенціального бар'єру, що розділяє взаємодіючі частинки. “Динамічний” потенціал обмінної взаємодії  $\tilde{\Delta E}(R; v)$  (23) враховує ефекти, пов'язані з поступальним рухом ядерної підсистеми частинок, що дозволяє обчислювати повні та парціальні перерізи у значно ширшому діапазоні енергій зіткнення.

### Література

1. Compton R.N. and Hammer N.I. In Advances in gas-phase ion chemistry, edited

by N. Adams and I. Babcock. New York: Elsevier Science, 2001. – Vol. 4. – P. 257-

- 291.
2. Jordan K.D. and Wang F. Theory of dipole-bound anions // *Annu. Rev. Phys. Chem.* – 2003. – Vol.54. – P. 367-396.
  3. Compton R.N., Carman H.S., Defrancois Jr. C., Hendricks J., Lyapustina S.A., Bowen K.H. On the binding of electrons to nitromethane: Dipole and valence bound anions // *J. Chem. Phys.* – 1996. – Vol.105. – P. 3472–3478.
  4. Liu Y., Cannon M., Suess L., Dunning F.B., Chernov V.E., Zon B.A. Electron transfer in collisions of dipole-bound anions with polar targets // *Chem. Phys. Lett.* – 2006. – Vol.433. – P. 1-4.
  5. Chernov V.E., Dolgikh A.V., Zon B.A. Analytic description of dipole-bound anion photodetachment // *Phys. Rev. A.* - 2005. - Vol.72. - P. 052701.
  6. Chernov V.E., Dolgikh A.V., Zon B.A. Electron exchange between a dipole-bound anion and a polar molecule and dimer formation in dipole-bound anions // *Phys. Rev. A.* - 2009. - Vol.80. - P. 022702.
  7. Chibisov M.I., Janev R.K. Asymptotic exchange interactions in ion-atom systems // *Physics Reports.* – 1988. – Vol.166. – №1. – P. 1 - 87.
  8. Khoma M.V., Karbovanets O.M., Karbovanets M.I., Buenker R.J. On the semi-classical approach in the theory of ion-diatomic exchange interaction: its application to charge exchange reactions // *Phys. Scr.* - 2008. - Vol.78. - 065201.
  9. 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 of atomic ions with polar targets // *Chem. Phys.* - 2008. - Vol.352. - P. 142-146.
  10. Варшалович Д.А., Москалёв А.М., Херсонский В.К. Квантовая теория углового момента. – Ленинград: Наука, 1975. – 439 с.
  11. Бейтмен Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции. Эллиптические и автоморфные функции. Функции Ламе и Матье. – Москва: Наука, 1967. - 300 с.
  12. Чибисов М.И. О перезарядке атомов на многозарядных ионах // *ЖЭТФ.* - 1979. – Т.76. - Вып.6. – С.1898 - 1906.
  13. Пресняков Л.П., Шевелько В.П., Янев Р.К. Элементарные процессы с участием многозарядных ионов. – М.: Энергоатомиздат. 1986. – 200 с.
  14. Думан Е.Л., Тищенко Н.П., Шматов И.П. Вклад поступательного движения ядер в энергию обменного взаимодействия иона и атома // *ДАН СССР.* - 1989. – Т.305. – С. 1365 - 1368.

## THE EXCHANGE INTERACTION OF AN ION WITH A DIPOLE-BOUND ANION

**O.M. Karbovanets<sup>1</sup>, M.I. Karbovanets<sup>1</sup>, V.Yu. Lazur<sup>1</sup>, M.V. Khoma<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>Uzhhorod National University, Department of Theoretical Physics, 88000, Uzhhorod  
54 Voloshina St., Uzhhorod, UA-88000, Ukraine

<sup>2</sup>Theoretische Chemie, Universität Siegen, D-57076 Siegen, Germany

An analytic study of the asymptotic properties of a quasimolecular system consisting of a dipole-bound anion  $A_p^-$  and a highly charged ion  $B^{Z_b^+}$  was carried out. The influence of point dipole of the polar molecule on the asymptotic of the one-electron wave functions of the system  $(A_p B)^{(Z_b-1)^+}$  for large distances between interacting particles was taken into account. The analytical expression for the leading term of the asymptotic of one-electron exchange interaction of a highly charged ion with a dipole-bound anion was obtained in the framework of a semi-classical approach.

## ОБМЕННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ИОНА С ДИПОЛЬНО-СВЯЗАННЫМ АНИОНОМ

**А.М. Карбованец<sup>1</sup>, М.И. Карбованец<sup>1</sup>, В.Ю. Лазур<sup>1</sup>, М.В. Хома<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>Ужгородский национальный университет, кафедра теоретической физики, ул. Волошина, 54  
Ужгород, 88000, Украина

<sup>2</sup>Университет г. Зиген, кафедра теоретической химии, Зиген, 57076, ФРГ

Исследованы асимптотические свойства квазимолекулярной системы, состоящей из дипольно-связанного аниона  $A_p^-$  и многозарядного иона  $B^{Z_b^+}$ . Учтено влияние точечного дипольного момента полярной молекулы на асимптотику одноэлектронных волновых функций системы  $(A_p B)^{(Z_b-1)^+}$  при больших расстояниях между взаимодействующими частицами. В рамках квазиклассического подхода получено аналитическое представление для главного члена асимптотики одноэлектронного обменного взаимодействия многозарядного иона с дипольно-связанным анионом.