

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ДЕРЖАВНИЙ ВИЩИЙ НАВЧАЛЬНИЙ ЗАКЛАД
“УЖГОРОДСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ”

Карбованець Олександр Мирославович



УДК 539.186; 539.196

**АДІАБАТИЧНА АСИМПТОТИЧНА ТЕОРІЯ
ОДНО- І ДВОЕЛЕКТРОННОЇ ПЕРЕЗАРЯДКИ ЗА УЧАСТЮ
ПОЛЯРНИХ ТА ГОМОЯДЕРНИХ МОЛЕКУЛ**

01.04.04 – фізична електроніка

Автореферат
дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Ужгород – 2015

Дисертацією є рукопис

Робота виконана на кафедрі теоретичної фізики державного вищого навчального закладу “Ужгородський національний університет” Міністерства освіти і науки України.

Науковий керівник: доктор фізико-математичних наук, професор,
Лазур Володимир Юрійович,
завідувач кафедри теоретичної фізики,
ДВНЗ “Ужгородський національний університет”
МОН України

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук,
провідний науковий співробітник
Брижик Лариса Свиридівна,
провідний науковий співробітник відділу нелінійної
фізики конденсованого стану, Інститут теоретичної
фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України

доктор фізико-математичних наук,
старший науковий співробітник
Ремета Євген Юрійович,
старший науковий співробітник
відділу теорії елементарних взаємодій,
Інститут електронної фізики НАН України

Захист відбудеться “27” січня 2016 р. о 11⁰⁰ год. на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 61.051.01 при державному вищому навчальному закладі “Ужгородський національний університет” Міністерства освіти і науки України за адресою: 88000, м. Ужгород, вул. Волошина, 54, ауд. № 181.

З дисертацією можна ознайомитися у бібліотеці ДВНЗ “Ужгородський національний університет” (м. Ужгород, вул. Університетська, 14).

Автореферат розісланий “25” грудня 2015 р.

Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради Д 61.051.01
доктор фіз.-мат. наук, професор



Міца В.М.

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Непружні зіткнення атомних та молекулярних частинок, особливо багатоелектронних, супроводжуються низкою процесів зміни їх зарядових та електронних станів. Найпростішими, добре вивченими прикладами є одноелектронні іон-атомні процеси (перезарядка та іонізація), в яких змінює свій стан лише один електрон, а решту можна вважати “замороженими”. Такі процеси мають високу ефективність і відіграють важливу роль при інжекції і діагностиці плазми в сучасних термоядерних пристроях, суттєвим чином проявляються у різних лабораторних системах та явищах природи, визначають властивості фотосфери та корони Сонця, різноманітних атмосферних явищ, тощо. Однак, при теплових енергіях зіткнення настільки ж, а часто і більш ймовірними, ніж одноелектронні, виявляються двоелектронні процеси, наприклад, двоелектронна перезарядка та перезарядка з одночасним збудженням чи іонізацією. Характерна особливість цих процесів полягає в тому, що електронні переходи між початковим і кінцевим станами відбуваються переважно при великих відстанях R між взаємодіючими частинками у порівнянні з їх розмірами. Це дозволяє для розрахунку матричних елементів обмінної взаємодії використовувати теорію, асимптотичну за між'ядерною відстанню, перевагою якої є простота та універсальність результатів. Формули асимптотичної теорії успішно використовуються для обчислення потенціалів одно- та двоелектронної обмінної взаємодії в іон-атомних системах. Інша ситуація спостерігається для непружних процесів зіткнення молекул з атомними та молекулярними іонами. Тут теорія розроблена в значно меншій мірі і не може претендувати на кількісний опис експериментальних даних. Це відноситься насамперед до реакцій подвійної перезарядки молекул на атомних та молекулярних іонах, і в ще більшій мірі – до процесів з перерозподілом за участю полярних молекул. Причини помітного відставання у побудові кількісної теорії таких процесів криються у підвищених вимогах до точності опису обмінних та кореляційних ефектів. До того ж, для процесів за участю полярних молекул слід очікувати сильний прояв орієнтаційних ефектів, пов'язаних з кутовою анізотропією дипольних потенціалів молекулярних залишків. Незважаючи на очевидні перспективи застосування таких ефектів в сучасних технологіях, фундаментальні закономірності впливу дипольних моментів молекулярних залишків на величину перерізів атомно-молекулярних реакцій залишаються до цього часу недостатньо вивченими. Тому спеціального дослідження вимагають вельми загальні питання про роль орієнтаційних та обмінно-кореляційних ефектів у динаміці процесів переходу одного чи двох електронів від однієї молекулярної (атомної) частинки до іншої. Зазначимо також, що детально розроблені асимптотичні (за великими міжатомними відстанями) методи теорії атомних зіткнень непридатні для обчислення перерізів одно- та двоелектронної перезарядки полярних та гомоядерних молекул на багатозарядних іонах, оскільки у цьому випадку, як правило, суттєвими є не надто великі міжцентрові відстані. У

зв'язку з цим великого значення набуває удосконалення існуючих та розробка нових теоретичних підходів до вивчення непружних зіткнень багатозарядних іонів з полярними та гомоядерними молекулами, які мають більш широку область застосовності, ніж стандартний асимптотичний підхід.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дисертаційна робота виконана на кафедрі теоретичної фізики ДВНЗ “Ужгородський національний університет”. Основні її результати були одержані автором протягом 2006–2015 років в процесі виконання держбюджетних тем: 1) “Асимптотичні моделі багатоцентрових систем у фізиці елементарних взаємодій” (2006 – 2008 рр., № ДР – 0105U007695); 2) “Релятивістська версія асимптотичної теорії процесів з перерозподілом при повільних іон-іонних та іон-атомних зіткненнях” (2009 – 2011 рр., № ДР – 0109U000872); 3) “Релятивістські та квантово-електродинамічні ефекти при взаємодії багатозарядних іонів з важкими атомами та з постійними електричним і магнітним полями” (2012 – 2014 рр., № ДР – 0112U001552); 4) “Інтегральні рівняння Додда-Грейдера в теорії одно- та двоелектронних процесів з перерозподілом у високоенергетичних іон-атомних зіткненнях” (2015 – 2017 рр., № ДР – 0115U001099).

Мета і завдання дисертації. Метою дисертаційної роботи є розвинення адіабатичної асимптотичної теорії двох груп процесів з перерозподілом: 1) одноелектронної перезарядки багатозарядних іонів на гомоядерних і полярних молекулах та дипольно-зв'язаних аніонах (ДЗА); 2) двоелектронної перезарядки полярних молекул на багатозарядних іонах та власних катіонах.

Для досягнення мети необхідно було розв'язати такі завдання:

1. На основі техніки функцій Гріна побудувати асимптотики квазікласичного типу для електронних хвильових функцій квазімолекули в підбар'єрній області та в околі чужого силового центру.
2. Отримати асимптотичні вирази для матричних елементів обмінної взаємодії, що відповідають за процеси одноелектронної перезарядки багатозарядних іонів на гомоядерних і полярних молекулах та ДЗА.
3. Побудувати аналітичні вирази для матричних елементів обмінної взаємодії, що характеризують процеси двоелектронної перезарядки полярної молекули на двозарядному катіоні та атомному іоні.
4. Провести розрахунки парціальних і повних перерізів процесів одноелектронної перезарядки багатозарядних іонів на гомоядерних і полярних молекулах, а також резонансної двоелектронної перезарядки при повільних зіткненнях полярних молекул з власними двозарядними катіонами.
5. З'ясувати принципові особливості та основні механізми досліджуваних процесів, дослідити вплив на їх характеристики різних фізичних факторів – орієнтаційних, обмінно-кореляційних, бар'єрних, переносу імпульсу.

Об'єктом дисертаційного дослідження є процеси одно- та двоелектронної перезарядки полярних і гомоядерних молекул на молекулярних та атомних іонах.

Предметом дисертаційного дослідження є потенціали обмінної взаємодії та парціальні і повні перерізи процесів одно- і двоелектронної перезарядки при повільних зіткненнях багатозарядних іонів та катіонів з полярними та гомоядерними молекулами.

Методи дослідження. Основу розвиненої аналітичної теорії процесів з перерозподілом складає асимптотичний підхід, відмітною особливістю якого є простота та універсальність результатів. Розв'язок багатоцентрових квантовомеханічних задач зображається старшими членами асимптотичного розкладу за малим параметром, походження якого визначається фізичними умовами досліджуваної системи. Точність обчислень контролюється наступними членами розкладу і визначається величиною асимптотичного параметра.

Наукова новизна одержаних результатів. В дисертаційній роботі вперше:

1. В квазікласичному наближенні отримано аналітичні вирази для матричних елементів одноелектронної обмінної взаємодії багатозарядних іонів з двоатомними гомоядерними молекулами, полярними молекулами та ДЗА.
2. На основі отриманих аналітичних виразів для потенціалів обмінної взаємодії розраховано парціальні та повні перерізи реакцій одноелектронної перезарядки молекул H_2 на іонах H^+ і Ar^{q+} ($q = 6, 8, 14, 16$), полярних молекул CO і C_3H_8 на іонах H^+ , B^{2+} та Be^{2+} . Для систем $B^{2+} + CO$, $Be^{2+} + CO$ та $Be^{2+} + C_3H_8$ теоретичні розрахунки перерізів одноелектронного захоплення проведені вперше. Виявлено сильну залежність перерізів реакцій $B^{2+} + CO \rightarrow B^+ + CO^+$ і $Be^{2+} + C_3H_8 \rightarrow Be^+ + C_3H_8^+$ від орієнтації дипольних моментів молекулярних іонів CO^+ і $C_3H_8^+$ відносно напрямку швидкості налітаючих іонів.
3. Розроблено новий метод побудови асимптотики чотирицентрової хвильової функції молекулярного електрона в околі збурюючого полярного катіона, який пов'язаний з використанням квазікласичного наближення та функції Гріна кулоно-дипольного потенціалу.
4. Обчислено матричні елементи, що відповідають за обмін двома електронами між полярними молекулами та багатозарядними іонами. Виконано послідовний теоретичний аналіз впливу величини та орієнтації дипольного моменту остова на потенціал двоелектронної обмінної взаємодії іона N^{3+} з полярною молекулою HF .
5. Одержано явні асимптотичні вирази для матричних елементів обмінної взаємодії, що відповідають за процеси двоелектронної перезарядки полярної молекули на двозарядному катіоні. Обчислено переріз резонансної двоелектронної перезарядки молекули CO на власному катіоні CO^{2+} . Виявлено сильний вплив взаємної орієнтації дипольних моментів молекулярних залишків на переріз перезарядки $CO^{2+} + CO \rightarrow CO + CO^{2+}$.

Практичне значення одержаних результатів. Одержані в дисертації результати можуть знайти застосування при моделюванні елементарних процесів у астрофізичній та лабораторній плазмі, а також при розв'язанні нових задач, пов'язаних з нерезонансними переходами електронів. Виявлена в дисертації велика чутливість потенціалів обмінної взаємодії до орієнтації молекулярних залишків є вельми привабливою для технологічних застосувань, наприклад таких, як квантові обчислення. Отримані асимптотичні вирази для потенціалів обмінної взаємодії можуть бути використані для систематичних розрахунків одно- та двоелектронних процесів з перерозподілом. Проведені в дисертаційній роботі розрахунки конкретних реакцій за участю полярних молекул дозволили нашим партнерам по спільним працям [2,3] правильно спланувати експеримент та пояснити його результати.

Достовірність одержаних результатів обумовлена використанням добре розроблених і всебічно апробованих методів (ВКБ, стаціонарної фази, функції Гріна, поверхневих інтегралів) асимптотичної теорії атомних зіткнень, ретельним тестуванням програм чисельного розрахунку перерізів реакцій, а також детальним порівнянням результатів з наявними експериментальними даними та теоретичними результатами інших авторів. Для кожної із розв'язаних у дисертації квантовомеханічних задач приведено кількісне формулювання точності, з якою отримано результат. Одержані результати опубліковані у фахових виданнях і оприлюднені на наукових конференціях.

Особистий внесок здобувача. Результати, що складають основу дисертаційної роботи отримані автором особисто. У працях, що виконані зі спів-авторами, особистий внесок здобувача полягав у виконанні аналітичних розрахунків, розробці комп'ютерних програм та проведенні числових розрахунків перерізів досліджуваних реакцій. Зокрема, у працях [1-5], [8-13], [18-20] дисертант отримав аналітичні зображення для чотирицентрових квазімолекулярних хвильових функцій, обчислив матричні елементи одно- та двоелектронної обмінної взаємодії багатозарядних іонів і катіонів з гомоядерними та полярними молекулами, а також провів розрахунки повних та парціальних перерізів реакцій перезарядки. У праці [7] дисертант одержав аналітичне зображення для обмінного матричного елементу взаємодії іона з ДЗА.

Автор брав участь у постановці задач дослідження, аналізі та обговоренні одержаних результатів, формулюванні основних наукових положень і висновків, підготовці отриманих результатів до опублікування.

Апробація результатів дисертації. Результати досліджень, що викладені у дисертації, доповідалися або були представлені на таких конференціях: 25th International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (Freiburg, Germany, 2007); 14th International Conference on the Physics of Highly Charged Ions (Chofu, Tokyo, Japan, 2008); The 13th Small Triangle Meeting on Theoretical Physics (Stara Lesna, Slovakia, 2011); The 6-th Conference on Elementary Processes in Atomic System (Bratislava, Slovakia, 2014); X, XI Міжнародній молодіжній науково-практичній конференції "Людина і космос"

(Дніпропетровськ, Україна, 2008, 2009); Міжнародній конференції студентів і молодих вчених з теоретичної й експериментальної фізики “Еврика-2008”, “Еврика-2010”, “Еврика-2011” (Львів, Україна, 2008, 2010, 2011); Міжнародній конференції молодих вчених та аспірантів “ІЕФ-2007”, “ІЕФ-2013” (Ужгород, Україна, 2007, 2013), щорічних підсумкових наукових конференціях викладачів та наукових співробітників фізичного факультету Ужгородського національного університету (Ужгород, Україна, 2005–2015 рр.).

Публікації. За результатами дисертації опубліковано 20 наукових праць [1-20], у тому числі 10 статей у фахових наукових журналах [1-10] і 10 – у матеріалах і тезах доповідей наукових конференцій [11-20].

Структура і обсяг роботи. Дисертація складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків, списку використаної літератури та додатку. Робота викладена на 168 сторінках, містить 20 рисунків і 8 таблиць. Список літератури налічує 171 джерело.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У вступі обґрунтовано актуальність теми дисертації, наведено зв'язок дисертаційної роботи з науковими темами, сформульовано мету і завдання роботи, визначено об'єкт, предмет та методи дослідження, відзначено наукову новизну і практичне значення отриманих результатів та обґрунтовано їх достовірність, а також наведено інформацію про апробацію результатів, особистий внесок здобувача та перелік публікацій автора за темою дисертації.

У першому розділі дисертаційної роботи міститься огляд літератури, присвяченої теоретичним і експериментальним дослідженням процесів одно- та двоелектронної перезарядки при повільних атомно-молекулярних зіткненнях. Стисло викладено основи теорії неадіабатичних переходів, яка дає наочну фізичну інтерпретацію квантових переходів при зіткненнях. Розглянуто особливості асимптотичного підходу в теорії атомних зіткнень та етапи його розвитку.

Другий розділ дисертації присвячений побудові електронних хвильових функцій квазімолекул, що утворюються у процесах з перерозподілом електронів при повільних зіткненнях багатозарядних іонів з полярними та гомоядерними молекулами. Такі процеси мають, як правило, обмінну природу: один чи кілька активних електронів здійснюють перехід від однієї атомної частинки до іншої. Для обчислення ймовірностей таких переходів необхідно знати електронні хвильові функції як у між'ядерній області, так і в околі чужого силового центру. Взаємодія електрона з чужим іоном в цих областях не є малою і не може розглядатися як збурення. Для більшості конкретних процесів з перерозподілом за участю багатозарядних іонів область неадіабатичних переходів знаходиться не на надто великих міжцентрових відстанях R і суттєвим є перекриття хвильових функцій з різних центрів. Добре відомий асимптотичний метод Ландау-Херрінга непридатний для опису таких процесів при проміжних міжцентрових відстанях R внаслідок

наближень, що використовуються при обчисленні поправок до хвильових функцій на взаємодію з чужим іоном.

Основою розвиненої в дисертації аналітичної теорії процесів з перебудовою є квазікласичний підхід, або метод ВКБ, який ґрунтується на фізично наочній картині підбар'єрного руху електрона і в явному вигляді враховує точну форму потенціального бар'єру, що розділяє взаємодіючі частинки вздовж міжцентрової осі. На відміну від методу Ландау-Херрінга та теорії збурень, квазікласичне наближення не пов'язане з малістю взаємодії і тому має більш широку область застосовності, дозволяючи досліджувати кількісні закономірності у поведінці та властивостях квазімолекулярних систем. Крім того, метод ВКБ дозволяє отримати аналітичні вирази для потенціалів обмінної взаємодії при довільних значеннях зарядності іону та побудувати квазікласичний анзац розв'язку, який задовольняє рівнянню Шредінгера з точністю до малих членів.

Характерною особливістю розвиненої в дисертаційній роботі адіабатичної теорії процесів з перерозподілом є використання різних методів побудови електронних хвильових функцій квазімолекули для різних областей руху електронів. Так, для обчислення матричних елементів обмінної взаємодії, що відповідає за процес одноелектронної перезарядки, необхідно визначити квазімолекулярні хвильові функції у міжцентровій області. Критерієм застосовності отриманих далі результатів є вимога, щоб міжцентрова відстань була набагато більша відстані R_0 , при якій зникає потенціальний бар'єр по осі між силовими центрами. З іншого боку, такі хвильові функції необхідні для постановки граничних умов при знаходженні квазімолекулярних хвильових функцій в околі чужого збурюючого центру. При їх побудові необхідно враховувати специфіку аксіально-симетричного поля полярних та гомоядерних молекул. У випадку полярних молекул таке поле моделюється ефективним кулоно-дипольним потенціалом $V_i(\vec{r})$ ($i = a, b$), який враховує взаємодію з кулонівським полем заряду Z_i та точковим диполем \vec{d}_i залишкового молекулярного іону $A_p^{Z_a+}$ або $B_p^{Z_b+}$: $V_i(\vec{r}_i) = -Z_i/r_i - \vec{d}_i \vec{r}_i / r_i^3$ (для дипольно-зв'язаного аніона $Z_a = 0$).

Виходячи з таких позицій, у розділі 2 отримані квазікласичні вирази для спотворених полем віддаленого багатозарядного іона електронних хвильових функцій двоатомної гомоядерної молекули (підрозділ 2.2), полярної молекули та дипольно-зв'язаного аніона (підрозділ 2.3), які асимптотично точно описують поведінку електрона в підбар'єрній області $r_a \sim r_b \sim R/2$.

При обчисленні потенціалів $H_{ab}(R)$ двоелектронної обмінної взаємодії полярних молекул з атомними чи молекулярними іонами необхідно знати хвильову функцію $\Psi_{ab}(\vec{r}_b)$ активного молекулярного електрона в околі чужого катіона. Раніше розв'язок такого роду задач вдавалося отримати лише для іон-атомних систем та асимптотично великих між'ядерних відстаней

$R \gg 2n_a^2 Z_b$. Метод ВКБ дозволяє отримати квазікласичне зображення для чотирицентрових функцій $\Psi_{ab}(\vec{r}_b)$ і при не надто великих міжцентрових відстанях $R > R_0$. Для побудови таких функцій у підрозділі 2.4 використовується зображення $\Psi_{ab}(\vec{r}_b)$ у вигляді багатовимірної інтегралу по деякій гіперповерхні Σ у конфігураційному просторі:

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

Тут $G_b(\vec{r}_b, \vec{r}'_b; E_{1a})$ – одноелектронна функція Гріна квазімолекулярної системи $A_p^{(Z_a-2)+} + B_p^{Z_b+}$, $d\vec{\Sigma} = \vec{n}_{\Sigma} d\Sigma$, а \vec{n}_{Σ} – одиничний вектор нормалі до поверхні Σ ; у якості Σ зручно вибрати площину, яка перпендикулярна вектору \vec{R} і перетинає його в точці $R/2$. У зв'язку з обчисленням поверхневого інтегралу (1) у цьому ж підрозділі отримано квазікласичне зображення для парціального розкладу чотирицентрової функції Гріна $G_b(\vec{r}_b, \vec{r}'_b; E_{1a})$ за дипольно-сферичними функціями при $r'_b \gg r_b \sim 1$. При цьому умова квазікласичності радіального руху використовується лише за змінною r'_b зі збереженням квантової постановки задачі за іншою змінною \vec{r}_b , що дозволяє явно виразити амплітуду чотирицентрової хвильової функції $\Psi_{ab}(\vec{r}_b)$ через квазікласичну проникність потенціального бар'єру, який розділяє партнерів по зіткненню вздовж міжцентрової осі \vec{R} . Підставивши побудований таким чином вираз для $G_b(\vec{r}_b, \vec{r}'_b; E_{1a})$ і аналогічний квазікласичний вираз для $\Psi_{ab}(\vec{r}'_b) \approx \Psi_a(\vec{r}'_b)$ у формулу (1) та обчисливши поверхневий інтеграл за допомогою багатовимірного методу стаціонарної фази, отримаємо:

$$\begin{aligned} \Psi_{ab}(\vec{r}_b) = & D_a(Z_a, Z_b, n_{1a}) \sum_{\ell \geq |m_{1a}|}^{\infty} \sum_{k=-\ell}^{+\ell} \frac{n_{1a}^{|k|}}{2^{|k|} |k|!} a_{L\ell}^{m_{1a}}(d_{1a}) D_{km_{1a}}^{\ell}(\alpha_1, \beta_1, \gamma_1) \left[\frac{(2\ell+1)(\ell+|k|)!}{(\ell-|k|)!} \right]^{1/2} \times \\ & \times R^{-|k|-1} \exp\left(-\int_{z_{1a}}^{z_{2a}} |p(z)| dz\right) \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \frac{f_{1lm}^{(0)}(r_b)}{r_b} \sum_{\lambda, \mu \geq |m|} (-1)^{\lambda+\mu+|m|} a_{l\lambda}^m(d_{2b}) a_{l\mu}^m(d_{2b}) \times \\ & \times D_{km}^{\mu}(\alpha_2, \beta_2, \gamma_2) \left[\frac{(2\mu+1)(2\lambda+1)(\mu+|k|)!(\lambda-|m|)!}{(\mu-|k|)!(\lambda+|m|)!} \right]^{1/2} P_{\lambda}^{|m|}(\theta_b) e^{im\phi_b}. \quad (2) \end{aligned}$$

Тут $f_{1lm}^{(0)}(r_b)$ – парціальні хвильові функції, які визначаються як розв'язки радіального рівняння Шредінгера з модельним центральним-симетричним потенціалом $\bar{V}_b(r_b) = -Z_b/r_b + \eta_{lm}/r_b^2$, а η_{lm} – власні значення рівняння для дипольно-сферичних функцій $Z_{lm}(\theta_b, \phi_b)$; $D_{mm'}^{\ell}(\alpha, \beta, \gamma)$ – функції Вігнера, d_{1a} і d_{2b} – дипольні моменти молекулярних остовів $A_p^{(Z_a-1)+}$ і $B_p^{Z_b+}$, $a_{ll'}^m(d)$ – коефіцієнти розкладу дипольно-сферичних функцій $Z_{lm}(\theta_b, \phi_b)$ за сферичними фу-

нкціями $Y_{lm}(\theta_b, \phi_b)$, $p(z)$ – квазіімпульс електрона вздовж міжцентрової осі \vec{R} , z_{1a} і z_{2a} – точки повороту на між'ядерній осі, а величина $D_a(Z_a, Z_b, n_{1a})$ – відома функція параметрів Z_a, Z_b, n_{1a} . Парціальні функції $f_{lm}^{(0)}(r_b)$ ортогональні до всіх власних функцій в полі $\bar{V}_b(r_b)$, енергії яких лежать нижче, ніж енергія зв'язку E_{1a} електрона в молекулі $A_p^{(Z_a-2)+}$. З цієї причини побудовані в розділі 4 повні двоелектронні хвильові функції початкового і кінцевого станів ортогональні одна одній, що значно спрощує обчислення матричних елементів обмінної взаємодії.

Для великих міжцентрових відстаней $R \gg 2n_a^2 Z_b$ і близьких значень зарядів $Z_a \sim Z_b$ формула (2) для $\Psi_{ab}(\vec{r}_b)$ переходить у асимптотичний вираз для одноелектронної хвильової функції полярної молекули $A_p^{(Z_a-2)+}$ в околі збурюючого катіона $B_p^{Z_b+}$, який можна отримати асимптотичним методом Ландау-Херрінга. У випадку сферично-симетричних потенціалів $V_a(r)$, та $V_b(r)$ чотирицентрова функція (2) переходить у двоцентрову хвильову функцію зовнішнього атомного електрона в околі багатозарядного іона B^{Z_b+} .

У **третьому розділі** у квазікласичному наближенні для електронних хвильових функцій розвинуто асимптотичну (за великими міжцентровими відстанями) теорію для розрахунку потенціалів одноелектронної обмінної взаємодії $\Delta E(R)$ багатозарядного іону з полярною та двоатомною гомоядерною молекулами, а також з дипольно-зв'язаним аніоном. Для шуканої величини $\Delta E(R)$ використовується зображення у вигляді інтегралу по деякій гіперповерхні S , що розділяє області локалізації електрона у початковому Ψ_a та кінцевому Ψ_b каналах реакції $A_p^{(Z_a-1)+} + B^{Z_b+} \rightarrow A_p^{Z_a+} + B^{(Z_b-1)+}$:

$$\Delta E(R) = \int_S (\Psi_a^* \vec{\nabla} \Psi_b - \Psi_b^* \vec{\nabla} \Psi_a) d\vec{S}, \quad (3)$$

де $d\vec{S} = \vec{n}_S dS$, \vec{n}_S – одиничний вектор нормалі до поверхні S . У якості хвильових функцій $\Psi_a(\vec{r})$ і $\Psi_b(\vec{r})$ використовуються побудовані у квазікласичному наближенні (розділ 2) електронні хвильові функції початкового $A_p^{(Z_a-1)+} + B^{Z_b+}$ та кінцевого $A_p^{Z_a+} + B^{(Z_b-1)+}$ станів, які визначають поведінку електрона в підбар'єрній області. Поверхневий інтеграл у формулі (3) обчислювався за допомогою багатовимірною методу стаціонарної фази. При цьому величина $\Delta E(R)$ виражається через відомі параметри молекули і багатозарядного іона: заряди іонів Z_a, Z_b , енергії зв'язку E_{1a} (E_{1b}) електрона в молекулі $A_p^{(Z_a-1)+}$ (іоні $B^{(Z_b-1)+}$), проекцію орбітального моменту m_a електрона на молекулярну вісь, а також орбітальний момент ℓ_b електрона в багатозарядному іоні $B^{(Z_b-1)+}$ та його проекцію m_b на міжцентрову вісь. Зокрема, для

одноелектронної обмінної взаємодії $\Delta E(R)$ багатозарядного іона з полярною молекулою одержано наступне зображення:

$$\Delta E(R) = \frac{(-1)^{\ell_b} B_0}{|m_b|! \sqrt{n_a n_b Z_a \Gamma(2n_a Z_a)}} \left(\frac{n_a Z_a}{e} \right)^{n_a Z_a} \left(\frac{n_b^2 Z_b}{2e} \right)^{n_b Z_b} \left(\frac{n_a}{2} \right)^{|m_b|} \exp \left(- \int_{z_1}^{z_2} |p(z)| dz \right) \times$$

$$\times R^{-|m_b|-1} \sum_{\ell=|m_a|}^{\infty} a_{L\ell}^{m_a}(d_a) D_{m_b m_a}^{\ell}(0, \beta, 0) \sqrt{(2\ell_b + 1)(2\ell + 1)} \frac{(\ell_b + |m_b|)! (\ell + |m_b|)!}{(\ell_b - |m_b|)! (\ell - |m_b|)!}. \quad (4)$$

Таким чином, ми виразили матричний елемент обмінної взаємодії $\Delta E(R)$ через квазікласичну проникність потенціального бар'єру, що розділяє партнерів по зіткненню. Зв'язок матричного елемента $\Delta E(R)$ з проникністю бар'єру є природним, оскільки ми розглядаємо випадок, коли обмін – перехід електрона від однієї частинки до іншої – відбувається під бар'єром. У підрозділах 3.2–3.3 показано, що отримані квазікласичні вирази для $\Delta E(R)$ правильно описують обмінну взаємодію як у проміжній області $R > R_0$, так і в асимптотичній границі $R \gg 2n_a^2 Z_b$.

Побудовані у другому розділі електронні хвильові функції $\Psi_a(\vec{r}_a)$, $\Psi_b(\vec{r}_b)$ квазімолекули не враховують ефект перенесення імпульсу електроном при перезарядці; при повільних зіткненнях частинок $A_p^{(Z_a-1)+}$ і B^{Z_b+} цей ефект малий і ним можна знехтувати. Однак, при великих швидкостях зіткнення $v > v_0$ (де v_0 – характерна орбітальна швидкість зв'язаних електронів) врахування перенесення імпульсу змінює переріз перезарядки на порядок. У зв'язку з цим у підрозділі 3.2 дисертації результати розвиненої адіабатичної теорії узагальнюються на випадок довільних швидкостей зіткнення шляхом включення в електронні хвильові функції $\Psi_a(\vec{r}_a)$ і $\Psi_b(\vec{r}_b)$ так званих трансляційних факторів, які враховують перенос імпульсу електроном при переході від однієї частинки до іншої. Така модифікація електронних хвильових функцій $\Psi_a(\vec{r}_a)$, $\Psi_b(\vec{r}_b)$ використовується далі при обчисленні потенціалів одноелектронної обмінної взаємодії полярних та гомоядерних молекул з багатозарядними іонами. Отриманий таким чином “динамічний” потенціал обмінної взаємодії $\tilde{\Delta E}(R; v)$ дає змогу розраховувати перерізи перезарядки при довільних, але нерелятивістських швидкостях зіткнення.

Для демонстрації можливостей розвиненої вище аналітичної теорії у підрозділі 3.4 методом сильного зв'язку з використанням квазікласичного виразу для енергії обмінної взаємодії $\Delta E(R)$ розраховано парціальні σ_n та повні σ перерізи перезарядки молекули водню H_2 на іонах H^+ та Ar^{q+} із зарядом $q = 6, 8, 14, 16$. У випадку зіткнення іонів Ar^{q+} з молекулами H_2 базисний набір хвильових функцій включав, окрім початкового $H_2[{}^1\Sigma_g^+] + Ar^{q+}$, від 17 (для $q = 6$) до 34 (для $q = 16$) кінцевих електронних

станів квазімолекули $H_2^+(1s\sigma) + Ar^{(q-1)+}(n\ell m)$. Траєкторії руху взаємодіючих частинок H_2 та Ar^{q+} вважалися прямолінійними. Результати розрахунків повних перерізів, усереднених за кутами орієнтації молекулярної осі, добре узгоджуються з експериментальними даними [1*]-[4*] та розрахунками методом молекулярних орбіталей (МО) [1*] у інтервалі енергій зіткнення $E = 5,0 \div 2 \cdot 10^3 \text{ eV/a.o.m.}$ (див. рис. 1). Із рис. 1в, 1г видно, що для перезарядки молекули H_2 на багатозарядних іонах Ar^{14+} та Ar^{16+} у інтервалі енергій зіткнення $100 \text{ eV/a.o.m.} \leq E \leq 2 \text{ keV/a.o.m.}$ асимптотична теорія Ландау-Херрінга дає суттєво занижені величини повних перерізів у порівнянні з експериментальними даними [3*], [4*] та результатами наших розрахунків з використанням квазікласичних формул для потенціалів обмінної взаємодії $\Delta E(R)$.

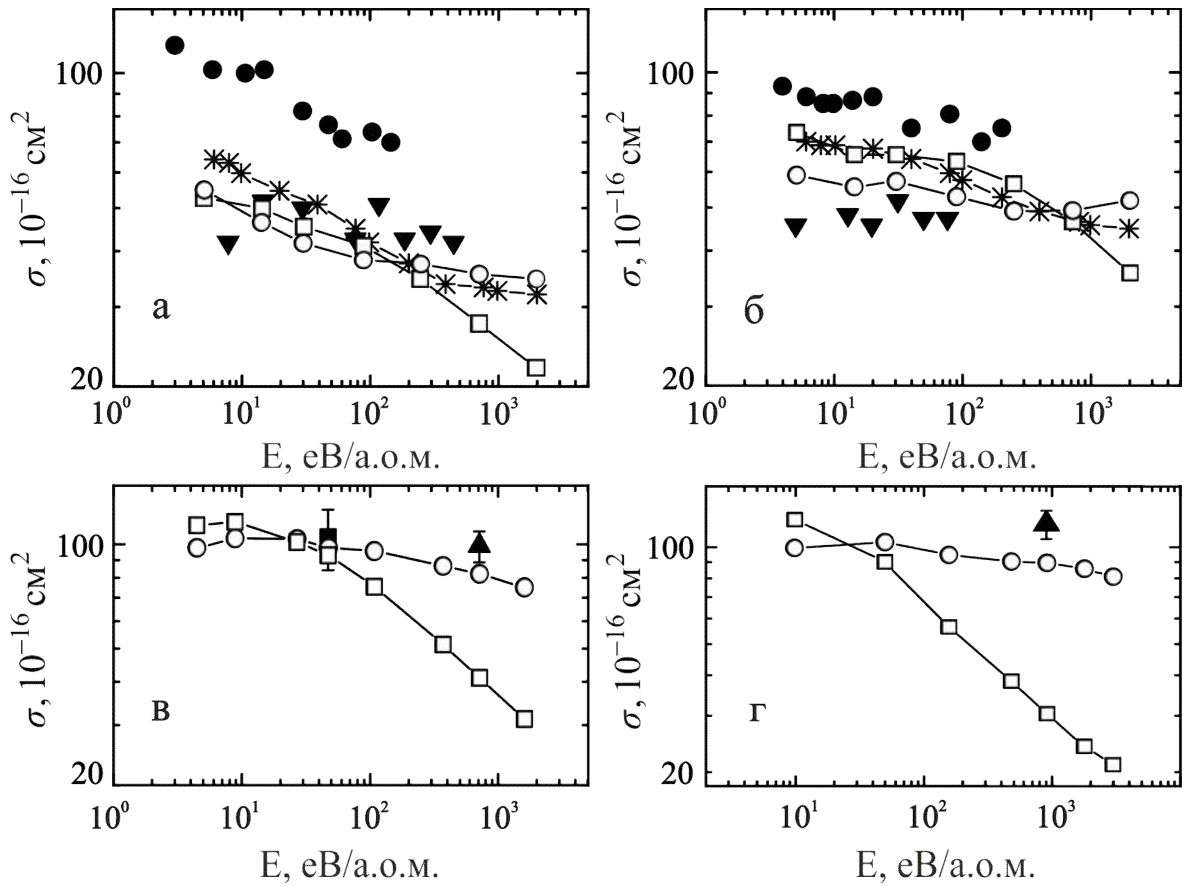


Рис. 1. Повні перерізи перезарядки $Ar^{q+} + H_2 \rightarrow Ar^{(q-1)+} + H_2^+$, усереднені за орієнтаціями молекулярної осі: а) $q = 6$, б) $q = 8$, в) $q = 14$; г) $q = 16$.

Теорія: \circ – квазікласичний підхід; \square – метод Ландау-Херрінга;

* – метод МО [1*]. Експеримент: \bullet – [1*], \blacktriangledown – [2*], \blacksquare – [3*], \blacktriangle – [4*].

У підрозділі 3.4 з використанням асимптотичних та квазікласичних виразів для $\Delta E(R)$ визначені заселеності кінцевих електронних $3d$ -, $4s$ -, $4p$ -, $4d$ -,

$4f$ -, $5s$ - та $5p$ -станів іона Ar^{5+} , що утворюється в процесі зіткнення молекули H_2 з іоном Ar^{6+} . Результати розрахунків σ_n парціальних перерізів з квазікласичними виразами для $\Delta E(R)$ добре узгоджуються з експериментальними даними у інтервалі швидкостей зіткнення $0,01 \text{ a.o.} \leq v \leq 0,3 \text{ a.o.}$. Виявлена при цьому помітна розбіжність між асимптотичними та квазікласичними розрахунками парціальних перерізів перезарядки σ_n пояснюється незастосовністю методу Ландау-Херрінга для неасимптотичних міжцентрових відстаней R , які суттєві у випадку зіткнення $Ar^{q+} + H_2$.

У цьому ж підрозділі квазікласичний вираз (4) для енергії обмінної взаємодії $\Delta E(R)$ використовується для обчислення парціальних та повних перерізів перезарядки полярних молекул CO і C_3H_8 на іонах H^+ , B^{2+} та Be^{2+} . Повну електронну енергію і дипольні моменти полярних молекул CO , C_3H_8 та їх катіонів обчислено методом об'єднаних кластерів CCSD(T) у базисі QZVP, використовуючи квантовомеханічний пакет програм ORCA [5*]. У випадку реакції $CO + B^{2+} \rightarrow CO^+ + B^+$ базисний набір функцій у кінцевих каналах реакції включав 5 синглетних та 4 триплетні стани іона B^+ . Результати обчислень парціальних σ_n та повних σ перерізів в залежності від енергії зіткнення приведені на рис. 2а. Розраховані абсолютні величини повних перерізів перезарядки добре узгоджуються з експериментальним значенням [6*]. Подібна ситуація спостерігається і для перезарядки молекули C_3H_8 на іоні Be^{2+} (див. рис. 2б); тут використання квазікласичних формул для потенціалів обмінної взаємодії дає правильну кількісну картину заселення $2s$ - та $2p$ -стан іона Be^+ . Встановлено також, що для реакції $Be^{2+} + CO \rightarrow Be^+ + CO^+$ захоплення електрона у основний $2s$ -стан іона Be^+ домінуює у всьому дослідженому інтервалі енергії зіткнення $E = 0,1 \div 4 \text{ кеВ/ a.o.m.}$

Виявлено сильну залежність перерізів реакцій $B^{2+} + CO \rightarrow B^+ + CO^+$ і $Be^{2+} + C_3H_8 \rightarrow Be^+ + C_3H_8^+$ від орієнтації дипольних моментів молекулярних іонів CO^+ і $C_3H_8^+$ відносно напрямку швидкості налітаючих іонів (рис. 3). Правильність розвинуеного квазікласичного підходу підтверджується добрим узгодженням розрахованих перерізів з експериментальними даними.

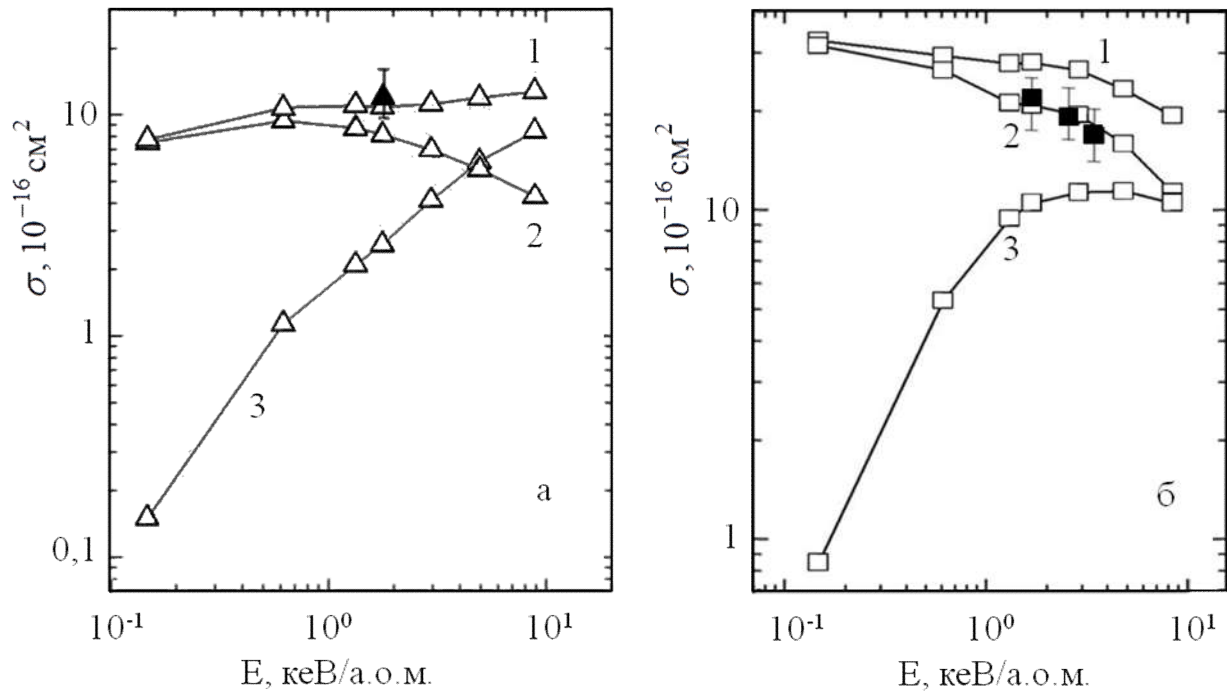


Рис. 2. Усереднені за орієнтаціями молекулярних остовів перерізи перезарядки для систем а) $B^{2+} + CO$ і б) $Be^{2+} + C_3H_8$. Теорія: а) 1 – повний переріз, 2 – переріз заселення триплетних станів B^+ , 3 – переріз заселення синглетних станів B^+ ; б) 1 – повний переріз, 2 – переріз заселення $2s$ -стану Be^+ , 3 – переріз заселення $2p$ -стану Be^+ . Експеримент: \blacktriangle , \blacksquare – [6*].

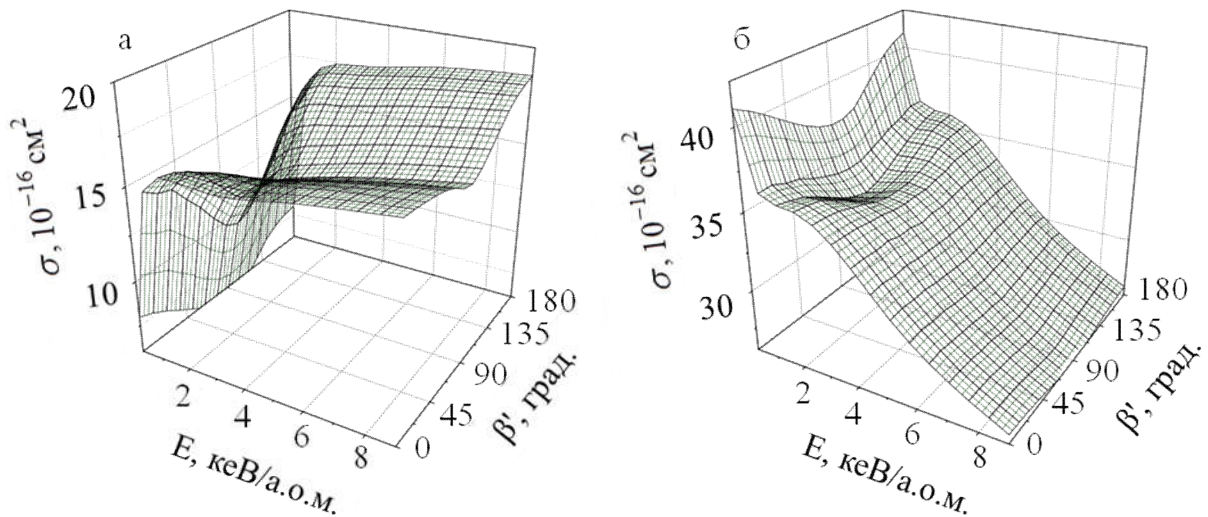


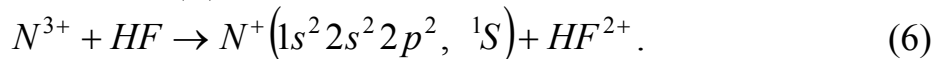
Рис. 3. Повний переріз одноелектронної перезарядки як функція енергії зіткнення і кута орієнтації β' для системи: а) $B^{2+} + CO$; б) $Be^{2+} + C_3H_8$.

У четвертому розділі розвинено асимптотичну (за великими міжцентровими відстанями) теорію процесів двоелектронного обміну при повільних зіткненнях полярних молекул $A_p^{(Z_a-2)+}$ з багатозарядними іонами $B_b^{Z_b+}$ та полярними двозарядними катіонами $B_p^{Z_b+}$ ($Z_b = 2$). Для обчислення матрич-

них елементів двоелектронної обмінної взаємодії H_{ab} використовується стандартне зображення:

$$H_{ab}(R) = \langle \Psi_b | \hat{H} | \Psi_a \rangle - \langle \Psi_b | \Psi_a \rangle \langle \Psi_a | \hat{H} | \Psi_a \rangle, \quad (5)$$

де $\Psi_a(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ і $\Psi_b(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ – двоелектронні хвильові функції початкового і кінцевого діабатичних станів квазімолекули, \hat{H} – електронний гамільтоніан системи. У підрозділі 4.2 проведено загальне дослідження матричного елемента (5), котре дозволило з'ясувати можливі механізми одночасного переходу двох електронів від однієї частинки до іншої. Показано, що у випадку, коли перші потенціали іонізації кожної з частинок $A_p^{(Z_a-2)+}$ і $B_p^{(Z_b-2)+}$ менші за другий потенціал іонізації будь-якої з них, основний внесок у матричний елемент двоелектронної обмінної взаємодії $H_{ab}(R)$ робить конфігурація розведених по різним ядрам електронів. При цьому домінуючим механізмом заселення кінцевих електронних станів іона $B_p^{(Z_b-2)+}$ є так звані “перехресні” переходи двох електронів, які можливі лише в результаті міжелектронної взаємодії. Їх можна розглядати як накладання двох корельованих електронних переходів, непружних для кожного електрона окремо. Для обчислення матричного елемента двоелектронної обмінної взаємодії (5) використовується квазікласичне зображення (2) для одноелектронної хвильової функції $\Psi_{ab}(\vec{r}_b)$ полярної молекули $A_p^{(Z_a-2)+}$ в околі збурюючого молекулярного іону $B_p^{Z_b+}$. Отримані таким чином квазікласичні вирази для потенціалів двоелектронної обмінної взаємодії полярних молекул з багатозарядними іонами справедливі як у проміжній області, так і в асимптотичній границі $R \gg 2n_a^2 Z_b$. На цій основі у підрозділі 4.3 проведено чисельні розрахунки енергії двоелектронної обмінної взаємодії $H_{ab}(R)$ в процесі подвійної перезарядки:



Результати розрахунку $H_{ab}(R)$ як функції міжцентрової відстані R для трьох значень кутів орієнтації β дипольного моменту молекулярного залишку HF^{2+} приведені у табл. 1 (від'ємні числа в круглих дужках означають степінь 10, на яку треба помножити відповідні дані таблиці).

Таблиця 1.

Значення $H_{ab}(R)$ для реакції (6)

$H_{ab}(R), a.o.$	$R, a.o.$			
	13	15	17	18
$\beta = \pi/2$	8,554(-12)	7,140(-14)	5,890(-16)	5,330(-17)
$\beta = \pi/4$	2,926(-12)	2,444(-14)	2,018(-16)	1,826(-17)
$\beta = \pi/8$	7,285(-13)	6,089(-15)	5,028(-17)	4,551(-18)

Як видно із таблиці, потенціал обмінної взаємодії $H_{ab}(R)$ сильно залежить від кута орієнтації β молекулярного залишку відносно міжцентрової осі \vec{R} і, як слід було очікувати, різко спадає із зростанням відстані R між частинками.

Розроблений квазікласичний метод побудови потенціалів двоелектронної обмінної взаємодії поширено (підрозділ 4.4) на випадок взаємодії полярних молекул з двозарядними катіонами. При описанні аксіально-симетричного поля полярних молекул застосовується ідеологія модельних потенціалів з урахуванням взаємної орієнтації дипольних моментів молекулярних залишків. Вперше отримано асимптотичні вирази для матричних елементів обмінної взаємодії, що відповідають за процеси подвійної перезарядки полярної молекули на двозарядному катіоні. З їх допомогою розраховано перерізи двоелектронної резонансної перезарядки $CO^{2+} + CO \rightarrow CO + CO^{2+}$. Результати розрахунку перерізів, усереднених за орієнтаціями молекулярних залишків, показують, що в області швидкостей $v = 0,005 \div 0,1$ а.о. переріз двоелектронного захоплення швидко зростає зі зменшенням швидкості зіткнення v і при $v = 0,005$ а.о. досягає величини $\sigma = 3,9 \cdot 10^{-15}$ см². Це дає підстави для висновку, що для даної реакції основним механізмом захоплення двох електронів є одноступінчатий двоелектронний перехід. Виявлено просторову анізотропію перерізу реакції $CO^{2+} + CO \rightarrow CO + CO^{2+}$ відносно орієнтації дипольних моментів молекулярних остовів CO^+ та CO^{2+} .

У **висновках** сформульовано основні результати, отримані в дисертаційній роботі. Математичні деталі обчислень бар'єрних інтегралів винесено у **Додаток А**.

ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА ВИСНОВКИ

1. Розвинуто асимптотичну теорію процесів одноелектронного обміну при повільних зіткненнях багатозарядних іонів з полярними та гомоядерними молекулами. В рамках квазікласичного наближення одержано замкнуті аналітичні вирази для матричних елементів одноелектронної обмінної взаємодії багатозарядного іона з двоатомною гомоядерною та полярною молекулами, а також з дипольно-зв'язаним аніоном, які дозволяють розглядати переходи електронів з різними проекціями орбітальних моментів на молекулярну вісь, а також неадіабатичні переходи при проміжних та великих міжцентрових відстанях.
2. На основі розвинутого формалізму розраховані парціальні та повні перерізи процесів одноелектронної перезарядки, які відбуваються при повільних зіткненнях іонів H^+ , B^{2+} та Be^{2+} з полярними молекулами CO і C_3H_8 , а також іонів H^+ та Ar^{q+} ($q = 6, 8, 14, 16$) з молекулами водню H_2 . Результати розрахунків добре узгоджуються з експериментальними даними [1*]-[4*], [6*]. З'ясовано, що для процесів перезарядки молекул H_2 на іонах Ar^{14+} та Ar^{16+} асимптотична теорія Ландау-Херрінга дає суттєво занижені перерізи порівняно з експериментальними результатами і перерізами, обчисленими з використанням одержаної квазікласичної формули для обмінної взаємодії.
3. Встановлено, що в реакції $Be^{2+} + CO \rightarrow Be^+ + CO^+$ найбільш імовірним є захоплення електрона в основний $2s$ -стан іона Be^+ , а для системи $Be^{2+} + C_3H_8$ – у $2s$ - та $2p$ -стани іона Be^+ . Показано, що у випадку перезарядки $B^{2+} + CO \rightarrow B^+ + CO^+$ в області енергій зіткнення $E = 0,1 \div 1$ кеВ/а.о.м. відбувається інтенсивне захоплення електронів у триплетні стани іона B^+ , у той час як при $E \geq 10$ кеВ/а.о.м. домінуючим є заселення синглетних станів. Виявлено сильну залежність перерізів реакцій $B^{2+} + CO \rightarrow B^+ + CO^+$ і $Be^{2+} + C_3H_8 \rightarrow Be^+ + C_3H_8^+$ від орієнтації дипольних моментів молекулярних іонів CO^+ і $C_3H_8^+$ відносно напрямку швидкості налітаючих іонів B^{2+} і Be^{2+} .
4. Розроблено асимптотичну (за великими міжцентровими відстанями) теорію процесів двоелектронного обміну при повільних зіткненнях полярних молекул з багатозарядними іонами та полярними катіонами. У квазікласичному наближенні з використанням техніки двоцентрових функцій Гріна побудовано асимптотику хвильової функції молекулярного електрона в околі збурюючого полярного катіона.
5. Отримано явні аналітичні вирази для матричних елементів обмінної взаємодії, що визначають процеси прямого та постадійного захоплення двох електронів у низькоенергетичних зіткненнях іонів з полярними молекулами. Встановлено, що основний внесок у двоелектронну обмінну взає-

модію робить конфігурація, коли електрони розходяться по різним ядрам і домінуючим механізмом заселення кінцевих станів налітаючого іона є корельовані перехресні переходи електронів. На прикладі квазімолекулярної системи $N^{3+} + HF$ виконано послідовний теоретичний аналіз впливу величини та орієнтації дипольного моменту остова на потенціал двоелектронної обмінної взаємодії іона N^{3+} з полярною молекулою HF .

6. Отримано замкнуті аналітичні представлення для потенціалу двоелектронної обмінної взаємодії, що визначають процеси резонансної та нерезонансної двоелектронної перезарядки полярної молекули на двозарядному катіоні. Виявлено сильний вплив дипольних моментів молекулярних залишків CO^+ та CO^{2+} на переріз двоелектронної перезарядки $CO^{2+} + CO \rightarrow CO + CO^{2+}$. Показано, що електронні кореляції впливають як на абсолютну величину перерізів подвійної перезарядки, так і на вигляд їх залежності від швидкості зіткнення.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

- 1*. Kravis S. Single- and double-charge-exchange cross sections for $Ar^{q+} + H_2$ ($q=6, 7, 8, 9$, and 11) collisions from 6 eV to 11 keV / S. Kravis, H. Saitoh, K. Okuno [et. al.] // Phys. Rev. A. – 1995. – V. 52. – P. 1206–1212.
- 2*. Can C. Electron-capture cross sections for low-energy highly charged neon and argon ions from molecular and atomic hydrogen / C. Can, T. J. Gray, S. L. Varghese [et. al.] // Phys. Rev. A. – 1985. – V. 31. – P. 72–83.
- 3*. Mann R. Total one-electron capture cross sections for Ar^{q+} and I^{q+} ions in slow collisions on H_2 and He / R. Mann // Z. Phys. D. – 1986. – V. 3. – P. 85–90.
- 4*. Vancura J. Absolute total and one- and two-electron transfer cross sections for Ar^{q+} ($8 \leq q \leq 16$) on He and H_2 at 2.3q keV / J. Vancura, V. J. Marchetti, J. J. Perotti, V. O. Kostroun // Phys. Rev. A. – 1993. – V. 47. – P. 3758–3768.
- 5*. Neese F. The ORCA program system / F. Neese // Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science. – 2012. – V. 2. – P. 73–78.
- 6*. Imai M. Production and Compilation of Charge Changing Cross Sections of Ion-Atom and Ion-Molecule Collisions / M. Imai, T. Shirai, M. Saito [et. al.] // J. Plasma Fusion Res. Series. – 2006. – Vol. 7. – P. 323–326.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

Публікації в наукових фахових виданнях

1. Khoma M. V. On the semiclassical approach in the theory of ion-diatomic 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).
2. 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**, Y. Kikuchi, M. Saito, Y. Haruyama, M. I. Karbovanets, I. Yu. Kretinin, A. Itoh, R. J. Buenker // *Chemical Physics*. – 2008. – V. 352. – P. 142–146.
3. Khoma M. V. Charge transfer processes in collisions of slow highly charged ions with polar molecules CO and C_3H_8 / M. V. Khoma, Makoto Imai, **O. M. Karbovanets**, Y. Kikuchi, M. Saito, Y. Haruyama, M. I. Karbovanets, I. Yu. Kretinin, A. Itoh, R. J. Buenker // *Journal of Physics : Conference Series*. – 2009. – V. 163. – P. 012055.
 4. **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. – Vol. 69. – P. 94 (1–10).
 5. **Карбованець О. М.** Метод поверхневих інтегралів у теорії обмінної взаємодії полярної молекули з багатозарядним йоном / **О. М. Карбованець**, М. І. Карбованець, В. Ю. Лазур, М. В. Хома // *ЖФД*. – 2010. – Т. 14. – № 4. – С. 4301 (11 с.).
 6. **Карбованець О. М.** Квазікласичний підхід в теорії обмінної взаємодії багатозарядних іонів з двоатомними молекулами / **О. М. Карбованець** // *Наук. вісн. Ужг. ун-ту. Серія Фізика*. – 2008. – № 23. – С. 7–15.
 7. **Карбованець О. М.** Обмінна взаємодія іона з дипольно-зв'язаним аніоном / **О. М. Карбованець**, М. І. Карбованець, В. Ю. Лазур, М. В. Хома // *Наук. вісн. Ужг. ун-ту. Серія Фізика*. – 2009. – № 25. – С. 115–121.
 8. **Карбованець О. М.** Двоелектронна обмінна взаємодія полярних молекул з іонами / **О. М. Карбованець**, М. І. Карбованець // *Наук. вісн. Ужг. ун-ту. Серія Фізика*. – 2010. – № 28. – С. 107–116.
 9. **Карбованець О. М.** Двоелектронний обмін при повільних зіткненнях іонів з полярними молекулами / **О. М. Карбованець**, М. І. Карбованець, В. Ю. Лазур, М. В. Хома // *Наук. вісн. Ужг. ун-ту. Серія Фізика*. – 2013. – № 34. – С. 115–124.
 10. **Карбованець О. М.** Двоелектронна обмінна взаємодія в квазі-молекулярних системах з дипольним далекодієвим потенціалом / **О. М. Карбованець**, М. І. Карбованець, В. Ю. Лазур, М. В. Хома // *Наук. вісн. Ужг. ун-ту. Серія Фізика*. – 2015. – № 38. – С. 45–55.

Матеріали наукових конференцій

11. **Karbovanets O. M.** One-electron exchange interaction between diatomic molecules and atomic ions. Semiclassical and asymptotic approaches / **O. M. Karbovanets**, V. Yu. Lazur, M. V. Khoma, M. I. Karbovanets // 25th International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions “XXV ICPEAC” (25–31 July 2007, Freiburg, Germany) : Abstracts of Contributed Papers. – V. 1. – P. Th128.
12. **Karbovanets O. M.** Charge exchange of diatomic molecules by atomic ions / **O. M. Karbovanets**, M. V. Khoma, V. Yu. Lazur, M. I. Karbovanets // Кон-

- ференція молодих учених та аспірантів “ІЕФ-2007” (14–19 травня 2007 р., Ужгород, Україна) : Програма і тези доповідей. – Ужгород : Інститут електронної фізики НАН України, 2007. – С. 130.
13. **Karbovanets O. M.** Semiclassical model of the electron capture in collisions of highly charged ions with diatomic molecules / **O. M. Karbovanets**, M. V. Khoma, M. I. Karbovanets // X Міжнародна молодіжна науково-практична конференція “Людина і Космос” (9–11 квітня 2008 р., Дніпропетровськ, Україна) : Зб. тез. – Дніпропетровськ : НЦАОМ, 2008. – С. 61.
 14. **Karbovanets O. M.** Semiclassical approach in the theory of electron capture in slow ion-diatomic collisions / **O. M. Karbovanets** // Міжнародна конференція студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики “ЕВРИКА-2008” (19–21 травня 2008 р., Львів, Україна) : Тези доповідей. – Львів : ЛНУ імені Івана Франка, 2008. – С. А8.
 15. **Карбованець О. М.** Одноелектронне захоплення при повільних зіткненнях $CO+B^{2+}$ / **О. М. Карбованець** // XI Міжнародна науково-практична конференція “Людина і Космос” (8–10 квітня 2009 р., Дніпропетровськ, Україна) : Зб. тез. – Дніпропетровськ : НЦАОМ, 2009. – С. 67.
 16. **Карбованець О. М.** Двоелектронна перезарядка полярних молекул на багатозарядних іонах / **О. М. Карбованець** // XI Міжнародна науково-практична конференція “Людина і Космос” (8–10 квітня 2009 р., Дніпропетровськ, Україна) : Зб. тез. – Дніпропетровськ : НЦАОМ, 2009. – С. 68.
 17. **Карбованець О. М.** Асимптотика обмінної взаємодії дипольно-зв’язаного аніона з багатозарядним іоном / **О. М. Карбованець** // Міжнародна конференція студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики “ЕВРИКА-2010” (19–21 травня 2010 р., Львів, Україна) : Тези доповідей. – Львів : ЛНУ імені Івана Франка, 2010. – С. В5.
 18. **Karbovanets O. M.** Charge exchange of polar molecules by multicharged ions / **O. M. Karbovanets**, M. I. Karbovanets, M. V. Khoma, V. Yu. Lazur // The 13th Small Triangle Meeting on Theoretical Physics (November 14–16, 2011, Stara Lesna, Slovakia) : Proceeding. – Kosice : EQUILIBRIA, 2012. – P. 64–71.
 19. Галамба І. Ф. Резонансний обмін двома електронами у повільних зіткненнях полярних молекул з молекулярними йонами / І. Ф. Галамба, **О. М. Карбованець** // Міжнародна конференція студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики “ЕВРИКА-2011” (18–20 травня 2011 р., Львів, Україна) : Тези доповідей. – Львів : ЛНУ імені Івана Франка, 2011. – С. В3.
 20. **Карбованець О. М.** Асимптотична теорія двоелектронних процесів з перерозподілом при повільних зіткненнях полярних молекул з атомними та молекулярними іонами / **О. М. Карбованець**, Н. В. Зеленьак, М. І. Панас // Міжнародна конференція молодих учених і аспірантів “ІЕФ-2013” (20–23 травня 2013 р., Ужгород, Україна) : Програма і тези доповідей. – Ужгород : Аутдор-Шарк, 2013. – С. 78–79.

АНОТАЦІЯ

Карбованець О.М. Адіабатична асимптотична теорія одно- і двоелектронної перезарядки за участю полярних та гомоядерних молекул. – Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізикоматематичних наук за спеціальністю 01.04.04 – фізична електроніка. – Державний вищий навчальний заклад “Ужгородський національний університет” Міністерства освіти і науки України, Ужгород, 2015.

Розвинуто асимптотичну теорію процесів одно- і двоелектронної перезарядки за участю полярних та гомоядерних молекул. В рамках квазікласичного наближення одержано замкнуті аналітичні вирази для матричних елементів одноелектронної обмінної взаємодії багатозарядного іона з двоатомною гомоядерною та полярною молекулами, а також з дипольно-зв'язаним аніоном. На основі техніки функцій Гріна побудована асимптотика квазікласичного типу для чотирицентрової хвильової функції квазімолекулярного електрона в усьому конфігураційному просторі. Отримано замкнуті аналітичні представлення для потенціалів двоелектронної обмінної взаємодії, що визначають процеси перезарядки полярної молекули на багатозарядному іоні та двозарядному катіоні. Проведено розрахунки парціальних і повних перерізів одноелектронної перезарядки багатозарядних іонів на гомоядерних і полярних молекулах та резонансної двоелектронної перезарядки при повільних зіткненнях полярних молекул з власними двозарядними катіонами.

Ключові слова: чотирицентрова функція Гріна, парціальні розклади, асимптотика, обмінна взаємодія, повільні іон-молекулярні зіткнення, одно- і двоелектронна перезарядка.

АННОТАЦИЯ

Карбованець А.М. Адиабатическая асимптотическая теория одно- и двухэлектронной перезарядки при участии полярных и гомоядерных молекул. – Рукопись.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физикоматематических наук по специальности 01.04.04 – физическая электроника. – Государственное высшее учебное заведение “Ужгородский национальный университет” Министерства образования и науки Украины, Ужгород, 2015.

Развита асимптотическая теория процессов одно- и двухэлектронной перезарядки с участием полярных и гомоядерных молекул. В рамках квазиклассического приближения получены замкнутые аналитические представления для матричных элементов одноэлектронного обменного взаимодействия многозарядного иона с двухатомной гомоядерной и полярной молекулами, а также с дипольно-связанным анионом. На основании техники функций Грина построена асимптотика квазиклассического типа для четырехцентровой волновой функции квазімолекулярного электрона во всем конфигурационном пространстве. Получены замкнутые аналитические представления

для потенциалов двухэлектронного обменного взаимодействия, определяющие процессы перезарядки полярной молекулы на многозарядном ионе и двухзарядном катионе. Проведены расчеты парциальных и полных сечений одноэлектронной перезарядки многозарядных ионов на гомоядерных и полярных молекулах, а также резонансной двухэлектронной перезарядки при медленных столкновениях полярных молекул с собственными двухзарядными катионами.

Ключевые слова: четырехцентровая функция Грина, парциальные разложения, асимптотика, обменное взаимодействие, медленные ион-молекулярные столкновения, одно- и двухэлектронная перезарядка.

SUMMARY

Karbovanets O.M. Adiabatic asymptotic theory of one- and two-electron charge exchange involving the polar molecules and homonuclear molecules. – Manuscript.

Thesis in pursuit to acquire the scientific degree of Candidate of Physical and Mathematical Sciences, specialty 01.04.04 – Physical Electronics. – State Higher Educational Establishment "Uzhhorod National University", Ministry of Education and Science of Ukraine, Uzhhorod, 2015.

Asymptotic theory of the processes of one- and two- electron charge exchange involving the polar and homonuclear molecules has been developed. Within the framework of semiclassical approach the closed analytical expressions for matrix elements of one-electron exchange interaction of the multicharged ion with diatomic homonuclear and polar molecules as well as dipole- bounded anion have been obtained. On the basis of the Green's function technique, the semiclassical type expression for asymptotics of the four-centre wave function of the quasimolecular electron has been constructed in the whole configuration space. Closed analytical expressions of the two-electron exchange interaction potential, defining charge exchange processes of the polar molecule on the multicharged ion and double-charged cation have been obtained. The partial and total cross sections of one-electron charge exchange of multicharged ions on homonuclear and polar molecules and resonance two-electron charge exchange in slow collisions of polar molecules with their own doubly charged cations have been calculated.

Key words: four-centre Green function, partial expansion, asymptotics, exchange interaction, slow ion-molecular collisions, one- and two- electron charge exchange.

Формат 60x84/16. Папір офс. Гарнітура Times New Roman.

Друк офс. Ум. друк. арк. 1,16. Обл.-вид. арк. 0,89.

Тираж 100 шт. Замовлення № 70.

Видавництво «Бреза».

м. Ужгород, вул. Університетська, 21/220. Тел./факс: (0312) 64-37-22

Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 4815 від 15.06.2011р.

Друк: ФОП Сабов А.М., тел.: 050-43-22-437