ХВИЛЬОВІ ФУНКЦІЇ КВАЗІМОЛЕКУЛЯРНОЇ СИСТЕМИ “ІОН + ПОЛЯРНА МОЛЕКУЛА”

О.М. Карбованець

Ужгородський національний університет, 88000, Ужгород, вул. Волошина, 54

Аналітично досліджено асимптотичні властивості квазімолекулярної системи $(AB)^{(Z_a+Z_b-2)+}$, яка складається з полярної молекули $A^{(Z_a-2)+}$ та багатозарядного атомарного іона B^{Z_b+}. Для описання полярної молекули використано наближення точкового диполя. В рамках квазікласичного підходу обчислено асимптотики (при великих відстанях *R* між взаємодіючими частинками) хвильових функцій системи $(AB)^{(Z_a+Z_b-2)+}$ у всьому конфігураційному просторі електронних координат.

1. Вступ

У останні роки інтенсивно розвиваються експериментальні дослідження процесів одно-

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

та двоелектронної перезарядки

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

при повільних зіткненнях багатозарядних іонів B^{Z_b+} з полярними молекулами $A^{(Z_a-2)}$ (див. праці [1-3]). Це пояснюється важливістю вказаних процесів при розв’язанні низки проблем астрофізики [4,5], фізики плазми [6] та хімії дипольно-зв’язаних аніонів [7]. У той же час реакції (1), (2) теоретично менш досліджені, що пов’язано із складністю використання традиційних *ab-initio* методів для знаходження матричних елементів обмінної взаємодії, відповідальних за вказані процеси. Для обчислення асимптотики обмінної енергії у випадку реакції одноелектронного обміну (1) у нашій недавній роботі [8] був використаний альтернативний метод поверхневих інтегралів. Асимптотики хвильових функцій у міжцентровій області та головний член експоненціально малої одноелектронної обмінної взаємодії між квазімолекулярними конфігураціями $A^{(Z_a-2)+} + B^{Z_b+}$ і $A^{(Z_a-1)+} + B^{(Z_b-1)+}$ знайдено в [8] у рамках стандартного квазікласичного наближення. Там же методом сильного зв’язку обчислено повні перерізи процесів одноелектронного захоплення у реакціях $CO + H^+, B^{2+}, Be^{2+}$ та $C_3H_8 + Be^{2+}$.

Що стосується процесів двоелектронної перезарядки (2), то їх теоретичне вивчення в рамках асимптотичної теорії [9] базується на використанні потенціалів двоелектронної обмінної взаємодії

$$\Delta(R) = 2\langle\psi_{ab}(\vec{r}_1)\psi_a(\vec{r}_2)|r_{12}^{-1}|\psi_b(\vec{r}_1)\psi_{ba}(\vec{r}_2)\rangle, \quad (3)$$

для визначення яких необхідно знати асимптотики двоелектронних хвильових функцій квазімолекулярної системи $(AB)^{(Z_a+Z_b-2)+}$. Метою даної роботи є обчислення в рамках непертурбативного квазікласичного підходу хвильових функцій системи $(AB)^{(Z_a+Z_b-2)+}$ у всьому конфігураційному просторі електронних координат. Нецентральне поле полярної молекули моделювалося ефективним потенціалом, що включав взаємодію з кулонівським полем залишкового молекулярного іона та точковим диполем $\vec{d}$ [10].

2. Хвильові функції у міжцентровій області

Розглянемо рівняння Шредінґера, що описує рух електрона в аксіально-симетричному потенціалі $V_{1a}(r_a)$ іона полярної молекули $A^{(Z_a-1)+}$ та сферично симетричному потенціалі $V_{1b}(r_b)$ атомарного іона B^{Z_b+}

$$\left(-\frac{\Delta}{2} + V_{1a}(r_a) + V_{1b}(r_b) - E\right)\Psi_a(\vec{r}_a) = 0, \quad (4)$$

$\vec{r}_b = \vec{r}_a - \vec{R}$, R - між’ядерна відстань.

У рамках моделі точкового диполя потенціал $V_{1a}(r_a)$ запишемо у вигляді

$$V_{1a}(r_a) = -\frac{Z_a - 1}{r_a} - \frac{\vec{d}_1 \vec{r}}{r_a^3}, \qquad (5)$$

а потенціал $V_{1b}(r_b)$ має наступну асимптотичну поведінку:

$$V_{1b}(r_b) \underset{r_b \to \infty}{=} -\frac{Z_b}{r_b}. \qquad (6)$$

У виразах (5) і (6) $(Z_a - 1)$ і Z_b - асимптотичні заряди відповідно молекулярного залишку (для нейтральної молекули $Z_a = 2$) і багатозарядного іона $B^{Z_b +}$, а $\vec{d}_1$ - дипольний момент молекулярного залишку $A^{(Z_a - 1)+}$.

Знайдемо асимптотичний розв'язок $\Psi_a(\vec{r}_a)$ рівняння (4) у підбар'єрній області ($r_a \sim R/2$), використовуючи метод, розроблений у роботах [8,11]. Припустимо, що стан електрона у полі іонного залишку $B^{Z_b +}$ не вироджений. У границі, коли $R \to \infty$, спектр власних значень енергії рівняння (4) збігається з власними значеннями $E_a^{(0)}$ або $E_b^{(0)}$ відповідно ізольованих іонів $A^{(Z_a - 2)+}$ та $B^{(Z_b - 1)+}$. Позначимо через E_a збурені рівні енергії у випадку, коли електрон перебуває у зв'язаному стані полярної молекули $A^{(Z_a - 2)+}$ (квазімолекула $A^{(Z_a - 2)+} + B^{Z_b +}$), та E_b якщо електрон зв'язаний з атомним іоном $B^{Z_b +}$ (квазімолекула $A^{(Z_a - 1)+} + B^{(Z_b - 1)+}$). Запровадимо системи координат $\{x, y, z\}$ та $\{\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}\}$ із спільним центром O у центрі мас полярної молекули, так, щоб вісь z була направлена вздовж вектора $\vec{R}$, а вісь $\tilde{z}$ - вздовж напрямку дипольного моменту $\vec{d}_1$ (див. [11], рис. 1). Координатні осі $(\tilde{x}, x)$ та $(\tilde{y}, y)$ зручно вибрати так, щоб $O\tilde{y} \parallel Oy$; при цьому перехід від $\{\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}\}$ до $\{x, y, z\}$ можна здійснити одним поворотом навколо осі Oy' (або Oy) на кут β.

Використовуючи в рівнянні (4) у вказаній області конфігураційного простору вирази (5), (6) для потенціалів V_{1a} і V_{1b}, одержимо

$$\left(\frac{\Delta}{2} + \frac{Z_a - 1}{r_a} + \frac{Z_b}{r_b} + E_a \right) \Psi_a(\vec{r}_a) = 0, \qquad (7)$$

де $E_a = E_a^{(0)} - Z_b / R + O(1/R^2)$. Рівняння (7) будемо розв'язувати з наступною граничною умовою:

$$\Psi_a(\vec{r}_a) \xrightarrow[1 < r_a << R]{} \Psi_a^{(0)}(\vec{r}_a). \qquad (8)$$

Тут $\Psi_a^{(0)}(\vec{r}_a)$ - нормована власна функція ізольованої полярної молекули, яка в моделі точкового диполя задовольняє рівняння Шредінґера:

$$\frac{1}{r_a^2} \frac{\partial}{\partial r_a} \left(r_a^2 \frac{\partial \Psi_a^{(0)}}{\partial r_a} \right) + \frac{1}{r_a^2} \left[\frac{1}{\sin \tilde{\theta}_a} \frac{\partial}{\partial \tilde{\theta}_a} \left(\sin \tilde{\theta}_a \frac{\partial}{\partial \tilde{\theta}_a} \right) + \right.$$
$$\left. + \frac{1}{\sin^2 \tilde{\theta}_a} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{\varphi}_a^2} + 2d \cos \tilde{\theta}_a \right] \Psi_a^{(0)} -$$
$$- 2\left(-E_{1a} - \frac{Z_a - 1}{r} \right) \Psi_a^{(0)} = 0. \qquad (9)$$

У одночастинковому наближенні хвильову функцію $\Psi_a^{(0)}$ можна записати у вигляді [12]

$$\Psi_a^{(0)}(\tilde{\vec{r}}_a) = R^{(0)}(r_a) Z(\tilde{\theta}_a, \tilde{\varphi}_a). \qquad (10)$$

Запроваджені в (10) диполь-сферичні функції $Z(\tilde{\theta}_a, \tilde{\varphi}_a)$ задовольняють рівнянню [12]

$$-\frac{1}{\sin \tilde{\theta}_a} \frac{\partial}{\partial \tilde{\theta}_a} \left(\sin \tilde{\theta}_a \frac{\partial Z(\tilde{\theta}_a, \tilde{\varphi}_a)}{\partial \tilde{\theta}_a} \right) -$$
$$- \frac{1}{\sin^2 \tilde{\theta}_a} \frac{\partial^2 Z(\tilde{\theta}_a, \tilde{\varphi}_a)}{\partial \tilde{\varphi}_a^2} + \qquad (11)$$
$$+ 2d_1 \cos \tilde{\theta}_a Z(\tilde{\theta}_a, \tilde{\varphi}_a) = \lambda(\lambda + 1) Z(\tilde{\theta}_a, \tilde{\varphi}_a)$$

і при $d_1 = 0$ збігаються до звичайних сферичних функцій $Y_{\ell m_1}(\tilde{\theta}_a, \tilde{\varphi}_a)$.

Використовуючи функції $Z(\tilde{\theta}_a, \tilde{\varphi}_a)$, відокремимо змінні у рівнянні (9) і запишемо рівняння для радіальних функцій $R^{(0)}$:

$$\frac{1}{r_a^2} \frac{d}{dr_a} \left(r_a^2 \frac{dR^{(0)}}{dr_a} \right) + \qquad (12)$$
$$+ 2\left(E_{1a} + \frac{Z_a - 1}{r_a} - \frac{\lambda(\lambda + 1)}{2r_a^2} \right) R^{(0)} = 0.$$

Розв'язок рівняння (12) формально не відрізняється від розв'язку відповідної кулонівської задачі, коли $d_1 = 0$, що дозволяє записати асимптотику радіальної функції $R^{(0)}$ у вигляді:

$$R^{(0)}(\vec{r}_a) \underset{1 < r_a << R}{\approx} (2/n_{1a})^{n_{1a}(Z_a - 1) + 1} \times \qquad (13)$$

$$\times\frac{1}{2\sqrt{Z_a-1}\sqrt{\Gamma\left(2n_{1a}(Z_a-1)\right)}}r_a^{n_{1a}(Z_a-1)-1}e^{-r_a/n_{1a}},$$

де $n_{1a}=1/\sqrt{2|E_{1a}|}$.

Розкладаючи диполь-сферичні функції $Z(\tilde{\theta}_a,\tilde{\varphi}_a)$ за сферичними функціями $Y_{\ell m_1}(\tilde{\theta}_a,\tilde{\varphi}_a)$ (m_1 - проекція моменту електрона на напрямок дипольного моменту)

$$Z(\tilde{\theta}_a,\tilde{\varphi}_a)=\sum_{\ell=|m_1|}^{\infty}a_\ell^{m_1}Y_{\ell m_1}(\tilde{\theta}_a,\tilde{\varphi}_a),\qquad(14)$$

запишемо остаточний вираз для асимптотики повної хвильової функції (10) у вигляді:

$$\Psi_a^{(0)}(\vec{r}_a)\underset{1<r_a<<R}{\approx}\frac{(2/n_{1a})^{n_{1a}(Z_a-1)+1}}{2\sqrt{Z_a-1}\sqrt{\Gamma\left(2n_{1a}(Z_a-1)\right)}}\times$$
$$\times r_a^{n_{1a}(Z_a-1)-1}e^{-r_a/n_{1a}}\sum_{\ell=|m_1|}^{\infty}a_\ell^{m_1}Y_{\ell_1}(\tilde{\theta}_a,\tilde{\varphi}_a).\qquad(15)$$

Коефіцієнти $a_\ell^{m_1}$ розкладу (14) є розв’язками системи рекурентних співвідношень

$$2d_1\left(\frac{\ell^2-m_1^2}{4\ell^2-1}\right)^{1/2}a_{\ell-1}^{m_1}+\left[\ell(\ell+1)-\lambda(\lambda+1)\right]a_\ell^{m_1}+$$
$$+\left[\frac{(\ell+1)^2-m_1^2}{(2\ell+1)(2\ell+3)}\right]^{1/2}a_{\ell+1}^{m_1}=0.\qquad(16)$$

Здійснимо у (15) перехід від системи $\{\tilde{x},\tilde{y},\tilde{z}\}$ до $\{x,y,z\}$ [13]:

$$\Psi_a^{(0)}(\vec{r}_a)\underset{1<r_a<<R}{\approx}\frac{(2/n_{1a})^{n_{1a}(Z_a-1)+1}r_a^{n_{1a}(Z_a-1)-1}}{2\sqrt{Z_a-1}\sqrt{\Gamma\left(2n_{1a}(Z_a-1)\right)}}\times(17)$$
$$\times e^{-r_a/n_{1a}}\sum_{\ell=|m_1|}^{\infty}\sum_{k=-\ell}^{\ell}a_\ell^{m_1}D_{km_1}^{\ell}(0,\beta,0)Y_{\ell k}(\theta_a,\varphi_a),$$

де $D_{km_1}^{\ell}(\alpha,\beta,\gamma)$ - функції Вігнера.

Розв’язок рівняння (7) із граничною умовою (8) у міжцентровій області $(z,z'\sim R)$ знаходимо за допомогою методу, розробленого у наших попередніх роботах [8,11]. Запишемо лише кінцевий вираз для асимптотики одноелектронної хвильової функції полярної молекули у міжцентровій області у квазікласичному наближенні (тобто, асимптотику квазікласичного розв’язку рівняння Шредінґера (4)) [8]:

$$\Psi_a(\vec{r}_a)\underset{r_a\sim R/2}{\approx}\frac{2^{1/2}}{n_{1a}\Gamma^{1/2}\left(2n_{1a}(Z_a-1)+1\right)}\times$$
$$\times\left(\frac{n_{1a}(Z_a-1)}{e}\right)^{n_{1a}(Z_a-1)}\frac{1}{z\sqrt{p(z)}}\times\qquad(18)$$
$$\times\exp\left(-\int_{z_1}^{z}p(z')dz'\right)\exp\left(-\frac{\rho^2p(z)}{2z}\right)\times$$
$$\times\sum_{\ell=|m_1|}^{\infty}\sum_{k=-\ell}^{\ell}a_\ell^{m_1}D_{km_1}^{\ell}(0,\beta,0)Y_{\ell k}(\theta_a,\varphi_a).$$

Тут $p(z)$ - квазіімпульс при русі електрона уздовж осі $\vec{R}$

$$p^2(z)=2\left(|E_a|-\frac{Z_a-1}{z}-\frac{Z_b}{R-z}\right),\qquad(19)$$

а точки повороту на між'ядерній осі визначаються співвідношенням (21) роботи [11].

У границі об’єднаних атомів із (18) можна одержати вираз для асимптотики хвильової функції $\Psi_b(\vec{r}_b)$ багатозарядного іона у міжцентровій області у квазікласичному наближенні (див. [11]). Результат має вигляд:

$$\Psi_b(\vec{r}_b)\underset{r_b\sim R/2}{\approx}\frac{B_1}{\sqrt{n_{1b}}}\frac{(-1)^{\ell_2}}{z'p(z')}\left(\frac{n_{1b}^2Z_b}{2e}\right)^{n_{1b}Z_b}\times$$
$$\times\exp\left(-\int_{z_2}^{z'}p(z'')dz''\right)\times\qquad(20)$$
$$\times\exp\left(-\frac{\rho^2p(z')}{2z'}\right)Y_{\ell_2m_2}(\theta'',\varphi'),$$

де $n_{1b}=\left(2\left|E_b^{(0)}\right|\right)^{1/2}$, а B_1 - асимптотичний коефіцієнт хвильової функції валентного електрона в багатозарядному іоні $B^{(Z_b-1)+}$:

$$\Psi_b^{(0)}(\vec{r}_a)\underset{r_b>>2n_b^2}{=}(-1)^{\ell_2}B_1r_b^{Z_bn_b-1}\times$$
$$\times e^{-r_b/n_b}Y_{\ell_2m_2}(\theta_b,\varphi_b).\qquad(21)$$

3. Асимптотика хвильової функції полярної молекули у околі багатозарядного іона

Із асимптотичної теорії [9] відомо, що основний внесок у двоелектронні матричні елементи обмінної взаємодії (2) дають області конфігураційного простору двоелектронних координат, що відповідають розведеним по різним центрам двом "активним" електронам. Тому нам необхідна асимптотика хвильової функції Ψ_{ab} полярної молекули у околі багатозарядного іона

B^{Z_b+} (на це вказує другий нижній індекс у Ψ_{ab}), де вона сильно збурена полем цього іона. Для визначення асимптотики Ψ_{ab} використаємо наступне інтегральне зображення [9]

$$\Psi_{ab}(\vec{r}_b) = -\frac{1}{2}\oint_S \left[\Psi_a(\vec{r}_b')\vec{\nabla}G_b(\vec{r}_b,\vec{r}_b';E_{1a}) - \right.$$

$$\left. - G_b(\vec{r}_b,\vec{r}_b';E_{1a})\vec{\nabla}\Psi_a(\vec{r}_b')\right]d\vec{S}\,. \qquad (22)$$

Тут $G_b(\vec{r}_b,\vec{r}_b';E_{1a})$ - одноелектронна двоцентрова функція Гріна квазімолекули $A^{(Z_a-2)+}+B^{Z_b+}$), яка є розв'язком рівняння

$$\left(-\frac{\Delta}{2}+V_{1a}\left(\left|\vec{R}-\vec{r}_b\right|\right)+V_{1b}(r_b)-\right.$$

$$\left.-E_{1a}\right)G_b(\vec{r}_b,\vec{r}_b';E_{1a}) = \delta(\vec{r}_b-\vec{r}_b'). \quad (23)$$

У околі багатозарядного іона B^{Z_b+}, при $r_a \approx R$, $1 \approx r_b', r_b << R$ функція $G_b(\vec{r}_b,\vec{r}_b';E_{1a})$ збігається з одноцентровою функцією Гріна $G_b^{(0)}(\vec{r}_b,\vec{r}_b';E_{1a})$, яка є розв'язком рівняння з потенціалом V_{1b}:

$$\left(-\frac{\Delta}{2}+V_{1b}(r_b)-E_{1a}\right)G_b^{(0)}(\vec{r}_b,\vec{r}_b';E_{1a}) =$$

$$= \delta(\vec{r}_b-\vec{r}_b'). \qquad (24)$$

Оскільки потенціал V_{1b} сферично симетричний, функцію Гріна $G_b^{(0)}(\vec{r}_b,\vec{r}_b';E_{1a})$ можна зобразити у вигляді розкладу за повною ортонормованою системою сферичних функцій $Y_{\ell'm'}(\theta_b,\varphi_b)$ на одиничній сфері [14-16]:

$$G_b^{(0)}(\vec{r}_b,\vec{r}_b';E_{1a}) = \qquad (25)$$

$$-\frac{2}{r_b r_b'}\sum_{\ell'\geq|m'|} g_{\ell'}^{(0)}(\vec{r}_b,\vec{r}_b';E_{1a})Y_{\ell'm'}(\theta_b,\varphi_b)Y^*_{\ell'm'}(\theta_b',\varphi_b')$$

,

де $g_{\ell'}^{(0)}(\vec{r}_b,\vec{r}_b';E_{1a})$ - функція Гріна радіального руху:

$$g_{\ell'}^{(0)}(\vec{r}_b,\vec{r}_b';E_{1a}) = \frac{1}{W_b}\, f_{1\ell'}^{(0)}(r_>)f_{2\ell'}^{(0)}(r_<), \qquad (26)$$

$$W_b = f_{1\ell'}^{(0)}f_{2\ell'}'^{(0)} - f_{2\ell'}^{(0)}f_{1\ell'}'^{(0)} = const\,,$$

$$r_< = \min(r_b,r_b'), \quad r_> = \max(r_b,r_b').$$

Тут $f_{1\ell'}^{(0)}(r)$ і $f_{2\ell'}^{(0)}(r)$ - лінійно незалежні розв'язки однорідного рівняння [14]:

$$\frac{d^2 f_{i\ell'}^{(0)}}{dr^2} + 2\left(E_{1a}-V_{1b}-\frac{\ell'(\ell'+1)}{2r^2}\right)f_{i\ell'}^{(0)} = 0\,, \quad (27)$$

причому

$$f_{1\ell'}^{(0)}(r) \underset{r\to\infty}{=} r^{n_{1a}Z_b}e^{-r/n_{1a}}\,, \quad f_{2\ell'}^{(0)}(r) \underset{r\to\infty}{=} r^{-n_{1a}Z_b}e^{r/n_{1a}}\,,$$

$$W_b = -2/n_{1a}\,. \qquad (28)$$

Як видно із (22), для знаходження Ψ_{ab} нам потрібна асимптотика функції Гріна $G_b(\vec{r}_b,\vec{r}_b';E_{1a})$ при $r_b' \sim R >> 1$, $r_b \sim 1$. Отже, у нашому випадку $r_< = r_b$ і $r_> = r_b'$. Оскільки основна залежність функції Гріна $G_b(\vec{r}_b,\vec{r}_b';E_{1a})$ від кутових змінних (θ_b',φ_b') описується сферичною функцією $Y_{\ell'm'}(\theta_b',\varphi_b')$, то замість функції $f_{2\ell'}(r_b)$ візьмемо розв'язок $f_{2\ell'}^{(0)}(r_b)$ одноцентрового рівняння (27). Однак при $r_b' \sim R >> 1$ у якості $f_{1\ell'}(r_b')$ необхідно брати розв'язок двоцентрового рівняння

$$\frac{d^2 f_{1\ell'}(r_b')}{dr'^2} + 2\left[E_{1a}-V_{1a}\left(\left|\vec{R}-\vec{r}_b'\right|\right)-\right.$$

$$\left.-V_{1b}(r_b')-\frac{\ell'(\ell'+1)}{2r_b'^2}\right]f_{1\ell'}(r_b') = 0\,.$$

Використавши для потенціалів V_{1a}, V_{1b} вирази (5), (6) і знехтувавши членами $\sim r_b'^{-2}$, які малі при $r_b' \sim R >> 1$, зведемо останнє рівняння до вигляду:

$$\frac{d^2 f_{1\ell'}(r_b')}{dr'^2} - p_b^2(r_b')f_{1\ell'}(r_b') = 0\,, \qquad (29)$$

де $p_b(r_b')$ - квазіімпульс:

$$p_b^2(r_b') = 2\left(|E_{1a}| - \frac{Z_a-1}{\left|\vec{R}-\vec{r}_b'\right|} - \frac{Z_b}{r_b'}\right). \qquad (30)$$

Використовуючи метод, описаний у роботі [11], запишемо квазікласичний розв'язок рівняння (30) у наступному вигляді:

$$f_{1\ell'}(r_b') = f_{1\ell'}(z_b')\exp\left(-\frac{\rho^2 p_b(z_b')}{2z_b'}\right), \quad (31)$$

$$f_{1\ell'}(z_b')=\frac{C}{\sqrt{|p_b(z_b')|}}\exp\left(-\int_{z_2}^{z_b'}|p_b(z')|dz'\right). \quad (32)$$

Константу C знайдемо, "зшиваючи" (31), (32) із асимптотикою $f_{1\ell'}^{(0)}(r_b')$ (25) при $1<<r_b'<<R$. У результаті для функції $f_{1\ell'}(r_b')$ остаточно одержимо:

$$f_{1\ell'}(r_b')=\frac{1}{\sqrt{n_{1a}}}\left(\frac{n_{1a}^2Z_b}{2e}\right)^{n_{1a}Z_b}\frac{1}{\sqrt{|p_b(z_b')|}}\times$$
$$\times\exp\left(-\int_{z_2}^{z_b'}|p_b(z')|dz'\right)\exp\left(-\frac{\rho^2p_b(z_b')}{2z_b'}\right). \quad (33)$$

Використовуючи (33), а також розклад для $Y_{\ell'm'}^*(\theta_b',\varphi_b')$

$$Y_{\ell'm'}^*(\theta_b',\varphi_b')\underset{\theta_b'\approx 0}{\approx}B_{\ell'}^{m'}\left(\frac{\rho}{z_b'}\right)^{|m'|}\frac{e^{-im'\varphi_b'}}{\sqrt{2\pi}}, \quad (34)$$

$$B_{\ell'}^{m'}=\frac{(-1)^{\ell'}}{2^{|m'|}m'!}\left[\frac{(2\ell'+1)(\ell'+|m'|)!}{2(\ell'-|m'|)!}\right]^{1/2},$$

запишемо остаточний вираз для асимптотики функції Гріна $G_b(\vec r_b,\vec r_b';E_{1a})$ за змінною $r_b'\sim R>>1$ (при цьому $r_b\approx 1$):

$$G_b(\vec r_b,\vec r_b';E_{1a})\underset{1\approx r_b<<r_b'\sim R}{\approx}\frac{n_{1a}}{2^{|m'|+1}|m'|!\sqrt{2\pi}}\times$$
$$\times\left(\frac{n_{1a}^2Z_b}{2e}\right)^{n_{1a}Z_b}\left(\frac{\rho}{z_b'}\right)^{|m'|}\frac{e^{-im'\varphi_b'}}{z_b'}\times \quad (35)$$
$$\times\exp\left(-\int_{z_a'}^{z_2}p(z')dz'\right)\exp\left(-\frac{\rho^2p_b(z_b')}{2z_b'}\right)\times$$
$$\times\sum_{\ell'\ge|m'|}(-1)^{|m'|}\frac{2\ell'+1}{\sqrt{2\pi}}\frac{f_{2\ell'}^{(0)}(r_b)}{r_b}P_{\ell'}^{|m'|}(\theta_b)e^{im'\varphi_b}.$$

Для обчислення інтегралу в (22), запишемо асимптотику хвильової функції (18) із врахуванням асимптотичної поведінки сферичної функції $Y_{\ell k}(\theta_a',\varphi_a')$ при $\theta_a'\approx 0$. У результаті замість (18) одержимо:

$$\Psi_a(\vec r_a')\underset{r_a\sim R/2}{\approx}\frac{1}{n_{1a}\pi^{1/2}\Gamma^{1/2}(2n_{1a}(Z_a-1)+1)}\times$$
$$\times\left(\frac{n_{1a}(Z_a-1)}{e}\right)^{n_{1a}(Z_a-1)}\frac{1}{z_a'\sqrt{p_a(z_a')}}\times$$
$$\times\exp\left(-\int_{z_1}^{z_a'}p(z)dz\right)\exp\left(-\frac{\rho^2p_a(z_a')}{2z_a'}\right)\times \quad (36)$$
$$\times\sum_{\ell=|m_1|}^{\infty}\sum_{k=-\ell}^{\ell}a_\ell^{m_1}(d_1)D_{km_1}^{\ell}(0,\beta,0)\frac{1}{2^{|k|}|k|!}\times$$
$$\times\left[\frac{(2\ell+1)(\ell+|k|)!}{2(\ell-|k|)!}\right]^{1/2}\left(\frac{\rho}{z_a'}\right)^{|k|}e^{ik\varphi_a'}.$$

Обчислюючи тепер інтеграл (22) методом стаціонарної фази із використанням виразів (35) і (36), знайдемо асимптотику хвильової функції Ψ_{ab} полярної молекули у околі багатозарядного іона B^{Z_b+}:

$$\Psi_{ab}(\vec r_b)\underset{r_b\approx 1}{\approx}\frac{-(n_{1a}/2)^{|m'|+1/2}}{|m'|!\Gamma^{1/2}(2n_{1a}(Z_a-1)+1)}\times \quad (37)$$
$$\times\left(\frac{n_{1a}^2Z_b}{2e}\right)^{n_{1a}Z_b}\left(\frac{4}{n_{1a}^3Z_b}\right)^{n_{1a}(Z_a-1)}R^{2n_{1a}(Z_a-1)-|m'|-1}\times$$
$$\times e^{-R/n_{1a}}\left[\sqrt{\frac{R}{2n_{1a}^2Z_b}}+\sqrt{\frac{R}{2n_{1a}^2Z_b}+1}\right]^{\frac{2(Z_b-Z_a+1)}{\sqrt{n_{1a}^2+2Z_b/R}}}\times$$
$$\times\sum_{\ell\ge|m_1|}a_\ell^{m_1}(d_1)D_{m'm_{1a}}^{\ell}(0;\beta;0)\left[\frac{(2\ell+1)(\ell+|m'|)!}{2(\ell-|m'|)!}\right]^{1/2}\times$$
$$\times\sum_{\ell'\ge|m'|}(-1)^{|m'|}\frac{2\ell'+1}{\sqrt{2\pi}}\frac{f_{2\ell'}^{(0)}(r_b)}{r_b}P_{\ell'}^{|m'|}(\theta_b)e^{im'\varphi_b}.$$

4. Асимптотика хвильової функції багатозарядного іона у околі полярної молекули

Поряд із функцією Ψ_{ab} (37) знайдемо також асимптотику хвильової функції Ψ_{ba} багатозарядного іона $B^{(Z_b-2)+}$ у околі іона полярної молекули A^{Z_a+}. Для визначення асимптотики Ψ_{ba} використаємо наступне інтегральне зображення (див. (22))

$$\Psi_{ba}(\vec r_a)=-\frac{1}{2}\oint_S\left[\Psi_b(\vec r_a')\vec\nabla G_a(\vec r_a,\vec r_a';E_{1b})-\right.$$
$$\left.-G_a(\vec r_a,\vec r_a';E_{1b})\vec\nabla\Psi_b(\vec r_a')\right]d\vec S. \quad (38)$$

Тут $G_a(\vec r_a,\vec r_a';E_{1b})$ - одноелектронна двоцентрова функція Гріна квазімолекули $A^{Z_a+}+B^{(Z_b-2)+}$, яка є розв'язком рівняння (у системі координат $\{\tilde x,\tilde y,\tilde z\}$; штрихи опустимо для спрощення формул)

$$\left(-\frac{\Delta}{2}+V_{2a}(r_a)+V_{2b}\left(\left|\vec R-\vec{\tilde r}_a\right|\right)-\right.$$

$$-E_{1b})G_a\left(\vec{\tilde{r}}_a,\vec{\tilde{r}}'_a;E_{1b}\right)=\delta\left(\vec{\tilde{r}}_a-\vec{\tilde{r}}'_a\right), \qquad (39)$$

де $V_{2a}(r_a)$ - потенціал взаємодії електрона з молекулярним залишком A^{Z_a+}, а $V_{2b}(r_b)$ - потенціал взаємодії електрона зі сферично-симетричним полем багатозарядного іона $B^{(Z_b-)1+}$. У рамках моделі точкового диполя потенціал $V_{2a}(r_a)$ запишемо у вигляді

$$V_{2a}(r_a)=-\frac{Z_a}{r_a}-\frac{\vec{d}_2\vec{\tilde{r}}}{r_a^3}, \qquad (40)$$

$\vec{d}_2$ - дипольний момент молекулярного залишку A^{Z_a+}.

Потенціал $V_{2b}(r_b)$ має наступну асимптотичну поведінку:

$$V_{2b}(r_b)\underset{r_b\to\infty}{=}-\frac{Z_b-1}{r_b}. \qquad (41)$$

У околі молекулярного іона A^{Z_a+}, при $r_b\approx R$, $1\approx r'_a, r_a << R$ функція $G_a\left(\vec{\tilde{r}}_a,\vec{\tilde{r}}'_a;E_{1b}\right)$ збігається з функцією Гріна $G_a^{(0)}\left(\vec{\tilde{r}}_a,\vec{\tilde{r}}'_a;E_{1b}\right)$ молекулярного іона A^{Z_a+}, яка є розв'язком рівняння з потенціалом V_{2a}:

$$\left(-\frac{\Delta}{2}+V_{2a}(r_a)-E_{1b}\right)G_a^{(0)}\left(\vec{\tilde{r}}_a,\vec{\tilde{r}}'_a;E_{1b}\right)=$$
$$=\delta\left(\vec{\tilde{r}}_a-\vec{\tilde{r}}'_a\right). \qquad (42)$$

У рамках моделі точкового диполя функцію Гріна $G_a^{(0)}\left(\vec{\tilde{r}}_a,\vec{\tilde{r}}'_a;E_{1b}\right)$ можна зобразити у вигляді розкладу за повною ортонормованою системою диполь-сферичних функцій $Z_{\tilde{\ell}\tilde{m}}\left(\tilde{\theta}_a,\tilde{\varphi}_a\right)$ [17]:

$$G_a^{(0)}\left(\vec{\tilde{r}}_a,\vec{\tilde{r}}'_a;E_{1b}\right)=-\frac{2}{r_a r'_a}\times \qquad (43)$$
$$\times\sum_{\tilde{\ell}\ge|\tilde{m}|}\tilde{g}_{\tilde{\ell}}^{(0)}(r_a,r'_a;E_{1b})Z_{\tilde{\ell}\tilde{m}}\left(\tilde{\theta}_a,\tilde{\varphi}_a\right)Z^*_{\tilde{\ell}\tilde{m}}\left(\tilde{\theta}'_a,\tilde{\varphi}'_a\right),$$

де $\tilde{g}_{\tilde{\ell}}^{(0)}(r_a,r'_a;E_{1b})$ - функція Гріна радіального руху:

$$\tilde{g}_{\tilde{\ell}}^{(0)}(r_a,r'_a;E_{1b})=\frac{1}{W_a}\tilde{f}_{1\tilde{\ell}}^{(0)}(r_>)\tilde{f}_{2\tilde{\ell}}^{(0)}(r_<), \qquad (44)$$

$$W_a=\tilde{f}_{1\tilde{\ell}}^{(0)}\tilde{f}_{2\tilde{\ell}}'^{(0)}-\tilde{f}_{2\tilde{\ell}}^{(0)}\tilde{f}_{1\ell}'^{(0)}=const,$$

$$r_<=\min(r_a,r'_a),\quad r_>=\max(r_a,r'_a).$$

Тут $\tilde{f}_{1\tilde{\ell}}^{(0)}(r)$ і $\tilde{f}_{2\tilde{\ell}}^{(0)}(r)$ - лінійно незалежні розв'язки однорідного рівняння:

$$\frac{d^2\tilde{f}_{i\tilde{\ell}}^{(0)}}{dr^2}+2\left(E_{1b}-V_{2a}-\frac{\tilde{\ell}\left(\tilde{\ell}+1\right)}{2r^2}\right)\tilde{f}_{i\tilde{\ell}}^{(0)}=0, \qquad (45)$$

причому

$$\tilde{f}_{1\tilde{\ell}}^{(0)}(r)\underset{r\to\infty}{=}r^{n_{1b}Z_a}e^{-r/n_{1b}},\quad \tilde{f}_{2\tilde{\ell}}^{(0)}(r)\underset{r\to\infty}{=}r^{-n_{1b}Z_a}e^{r/n_{1b}},$$

$$W_a=-2/n_{1b}. \qquad (46)$$

Розкладаючи у виразі для $G_a^{(0)}\left(\vec{\tilde{r}}_a,\vec{\tilde{r}}'_a;E_{1b}\right)$ диполь-сферичні функції $Z_{\tilde{\ell}\tilde{m}}\left(\tilde{\theta}_a,\tilde{\varphi}_a\right)$ за сферичними функціями $Y_{\lambda\tilde{m}}\left(\tilde{\theta}_a,\tilde{\varphi}_a\right)$ (див. (14)), замість (43) одержимо

$$G_a^{(0)}\left(\vec{\tilde{r}}_a,\vec{\tilde{r}}'_a;E_{1b}\right)=-\frac{2}{r_a r'_a}\sum_{\tilde{\ell}\ge|\tilde{m}|}\tilde{g}_{\tilde{\ell}}^{(0)}(r_a,r'_a;E_{1b})\times$$
$$\times\sum_{\lambda\ge|\tilde{m}|}a_{\tilde{\ell}}^{\lambda}\sum_{\mu\ge|\tilde{m}|}a_{\tilde{\ell}}^{\mu}Y_{\lambda\tilde{m}}\left(\tilde{\theta}_a,\tilde{\varphi}_a\right)Y^*_{\mu\tilde{m}}\left(\tilde{\theta}'_a,\tilde{\varphi}'_a\right). \qquad (47)$$

Коефіцієнти розкладу $a_{\tilde{\ell}}^{\lambda}$ і $a_{\tilde{\ell}}^{\mu}$ задовольняють рекурентній системі виду (16), у якій дипольний момент d_1 молекулярного залишку $A^{(Z_a-1)+}$ замінено на дипольний момент d_2 молекулярного залишку A^{Z_a+}.

Оскільки асимптотика Ψ_{ba} визначається значенням інтеграла (38) у міжцентровій області, здійснимо у сферичній функції $Y^*_{\mu\tilde{m}}\left(\tilde{\theta}'_a,\tilde{\varphi}'_a\right)$ в (47) перехід від координат $\{\tilde{x},\tilde{y},\tilde{z}'\}$ до $\{x,y,z\}$. Використавши також формули (44), (46), із виразу (47) одержимо:

$$G_a^{(0)}\left(\vec{\tilde{r}}_a,\vec{\tilde{r}}'_a;E_{1b}\right)=\frac{n_{1b}}{r_a r'_a}\sum_{\tilde{\ell}\ge|\tilde{m}|}\tilde{f}_{1\tilde{\ell}}(r_>)\tilde{f}_{2\tilde{\ell}}(r_<)\times$$
$$\times\sum_{\lambda\ge|\tilde{m}|}a_{\tilde{\ell}}^{\lambda}\sum_{\mu\ge|\tilde{m}|}a_{\tilde{\ell}}^{\mu}Y_{\lambda\tilde{m}}\left(\tilde{\theta}_a,\tilde{\varphi}_a\right)\times \qquad (48)$$
$$\times\sum_{s=-\mu}^{\mu}D^{\mu}_{s\tilde{m}}(0,\beta,0)Y^*_{\mu s}\left(\tilde{\theta}'_a,\tilde{\varphi}'_a\right)$$

(зазначимо, що $Y_{\lambda\tilde{m}}\left(\tilde{\theta}_a,\tilde{\varphi}_a\right)$, як і раніше, записана у системі координат $\{\tilde{x},\tilde{y},\tilde{z}\}$).

Для визначення асимптотики функції Гріна $G_a\left(\vec{\tilde{r}}_a,\vec{\tilde{r}}'_a;E_{1b}\right)$ за змінною $r'_a\sim R>>1$ будемо застосовувати метод, описаний у розділі 3 при побудові асимптотики

$G_b(\vec{r}_b,\vec{r}_b';E_{1a})$. Так, замість формули (33) тепер одержимо наступний вираз:

$$\tilde{f}_{1\tilde{\ell}}(r_a')=\frac{1}{\sqrt{n_{1b}}}\left(\frac{n_{1b}^2Z_a}{2e}\right)^{n_{1b}Z_a}\frac{1}{\sqrt{|p_a(z_a')|}}\times$$
$$\times\exp\left(-\int_{z_1}^{z_a'}|p_a(z')|dz'\right)\exp\left(-\frac{\rho^2p_a(z_a')}{2z_a'}\right). \quad (49)$$

Використовуючи (49), асимптотику $Y_{\mu s}^*(\theta_a',\varphi_a')$ при $\theta_a'\approx 0$ виду (34), а також зв'язок сферичних функцій з приєднаними функціями Лежандра

$$Y_{\lambda\tilde{m}}(\tilde{\theta}_a,\tilde{\varphi}_a)=(-1)^{\lambda+|\tilde{m}|}\left[\frac{(2\lambda+1)(\lambda-|\tilde{m}|)}{4\pi(\lambda+|\tilde{m}|)}\right]^{1/2}\times$$
$$\times P_\lambda^{|\tilde{m}|}(\tilde{\theta}_a)e^{i\tilde{m}\tilde{\varphi}_a},$$

одержимо кінцевий вираз для асимптотики за змінною $r_a'\sim R>>1$ функції Гріна $G_a(\tilde{\vec{r}}_a,\tilde{\vec{r}}_a';E_{1b})$ у моделі точкового диполя:

$$G_a(\tilde{\vec{r}}_a,\tilde{\vec{r}}_a';E_{1b})\underset{1\approx r_a<<r_a'\sim R}{\approx}\frac{n_{1b}}{2\pi}\left(\frac{n_{1b}^2Z_a}{2e}\right)^{n_{1a}Z_b}\times$$
$$\times\exp\left(\int_{z_1}^{z_a'}p_a(z)dz\right)\exp\left(-\frac{\rho^2p_a(z_a')}{2z_a'}\right)\frac{1}{z_az_a'}\times$$
$$\times\sum_{\ell\ge|\tilde{m}|}\sum_{\lambda\ge|\tilde{m}|}\sum_{\mu\ge|\tilde{m}|}\sum_{s=-\mu}^{\mu}a_\ell^\lambda(d_2)a_\ell^\mu(d_2)D_{s\tilde{m}}^\mu(0,\beta,0)\times$$
$$\times\frac{1}{2^{|s|}|s|!}\left[\frac{(2\mu+1)(\mu+|s|)!}{2(\mu-|s|)!}\right]^{1/2}\left(\frac{\rho}{z_a'}\right)^{|s|}e^{-is\varphi_a'}\times$$
$$\times(-1)^{\lambda+|\tilde{m}|}\left[\frac{(2\lambda+1)(\lambda-|\tilde{m}|)!}{2(\lambda+|\tilde{m}|)!}\right]^{1/2}\times$$
$$\times\tilde{f}_{2\tilde{\ell}}^{(0)}(r_a)P_\lambda^{|\tilde{m}|}(\tilde{\theta}_a)e^{im\tilde{\varphi}_a}. \quad (50)$$

Для обчислення інтегралу в (38), запишемо асимптотику хвильової функції іона $B^{(Z_b-)1+}$ у міжцентровій області у вигляді формули (20), у якій перейдемо до асимптотики сферичної функції виду (34) і замінимо Z_b на Z_b-1:

$$\Psi_b(\vec{r}_b)\underset{r_b\sim R/2}{\approx}\frac{(-1)^{\ell_1'}B_1}{2^{|m_{1b}|}|m_1'|!z_b'}\left(\frac{n_{1b}^2(Z_b-1)}{2e}\right)^{n_{1b}(Z_b-1)}\times$$
$$\times\left[\frac{(2\ell_1'+1)(\ell_1'+|m_1'|)!}{2(\ell_1'-|m_1'|)!}\right]^{1/2}\left(\frac{\rho}{z_b'}\right)^{|m_1'|}\frac{e^{im_1'\varphi_b'}}{\sqrt{2\pi}}\times$$
$$\times\exp\left(-\int_{z_2}^{z'}p(z'')dz''\right)\exp\left(-\frac{\rho^2p_b(z_b')}{2z_b'}\right). \quad (51)$$

Обчислюючи тепер інтеграл (38) методом стаціонарної фази із використанням виразів (50) і (51), знайдемо асимптотику хвильової функції Ψ_{ba} іона B^{Z_b+} у околі молекулярного іона A^{Z_a+}:

$$\Psi_{ab}(\vec{r}_b)\underset{r_b\approx 1}{\approx}\frac{(-1)^{\ell_1'+1}B_1}{|m_1'|!}\left(\frac{n_{1b}}{2}\right)^{|m_1'|+1}\left(\frac{n_{1b}^2Z_a}{2e}\right)^{n_{1b}Z_a}\times$$
$$\times\left(\frac{2}{n_{1b}^2Z_a}\right)^{n_{1b}(Z_b-1)}R^{2n_{1b}(Z_b-1)-|m_1'|-1}\times$$
$$\times e^{-R/n_{1b}}\left[\sqrt{\frac{R}{2n_{1b}^2Z_a}}+\sqrt{\frac{R}{2n_{1b}^2Z_a}+1}\right]^{\frac{2(Z_a-Z_b+1)}{\sqrt{n_{1b}^2+2Z_a/R}}}\times$$
$$\times\left[\frac{(2\ell_1'+1)(\ell_1'+|m_1'|)!}{2(\ell_1'-|m_1'|)!}\right]^{1/2}\times$$
$$\times\sum_{\lambda\ge|\tilde{m}|}\sum_{\mu\ge|\tilde{m}|}(-1)^{\lambda+|\tilde{m}|}D_{m_1'\tilde{m}}^\mu(0;\beta;0)\times$$
$$\times\left[\frac{(2\mu+1)(\mu+|m_1'|)!}{(\mu-|m_1'|)!}\right]^{1/2}\left[\frac{(2\lambda+1)(\lambda-|\tilde{m}|)!}{(\lambda+|\tilde{m}|)!}\right]^{1/2}\times$$
$$\times\sum_{\tilde{\ell}\ge|\tilde{m}|}\frac{a_{\tilde{\ell}}^\lambda a_{\tilde{\ell}}^\mu}{\sqrt{2\pi}}\frac{\tilde{f}_{2\tilde{\ell}}^{(0)}(r_a)}{r_a}P_\lambda^{|\tilde{m}|}(\tilde{\theta}_a)e^{i\tilde{m}\varphi_a}. \quad (52)$$

5. Висновки

У роботі в рамках квазікласичного підходу досліджено асимптотичні властивості квазімолекулярної системи $(AB)^{(Z_a+Z_b-2)+}$, яка складається з полярної молекули $A^{(Z_a-2)+}$ та багатозарядного атомарного іона B^{Z_b+}. Одержано парціальний розклад одноелектронної двоцентрової функції Гріна за диполь-сферичними функціями з використанням наближення точкового диполя для полярної молекули. Розроблений підхід дав можливість аналітично розв'язати задачу про вплив точкового дипольного моменту кістяка полярної молекули на асимптотику одноелектронних квазімолекулярних хвильових функцій. Методом функції Гріна обчислено асимптотики (при великих відстанях R між взаємодіючими частинками) хвильових функцій системи $(AB)^{(Z_a+Z_b-2)+}$ у всьому конфігураційному просторі електронних координат.

Висловлюю подяку науковому керівнику проф. Лазуру В.Ю., який звернув увагу автора на дану задачу і надав допомогу при її розв’язанні.

Література

1. Otranto S., Olson R.E. // Phys. Rev. A. – 2008. – Vol.77. – P.022709.
2. Bodewits D., Hoekstra R. // Phys. Rev. A. - 2007. - Vol.76. - P.032703.
3. Bodewits D., Hoekstra R., Seredyuk B., McCullough R.W., Jones G.H., Tielens A. // Astrophys. J. - 2006. - Vol.642. - P. 593.
4. Cravens T.E. // Science. – 2002. – Vol.296. – P. 1042.
5. Kharchenko V., Rigazio M., Dalgarno A., Krasnopolsky V.A. // Astrophys. J. Lett. - 2003. - Vol.585. - P. L73.
6. Janev R.K., Wang J.G., Kato T. // Mat. Interact. Data for Fusion. - 2002. - Vol.10. - P. 129.
7. Liu Y., Cannon M., Suess L., Dunning F.B., Chernov V.E., Zon B.A. // Chem. Phys. Lett. - 2006. - Vol.433. - P. 1.
8. 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. // Chem. Phys. - 2008. - Vol.352. - P. 142.
9. Chibisov M.I., Janev R.K. // Physics Reports. – 1988. – Vol.166.- №1.–P.1.
10. Chernov V.E., Kiyan I.Yu., Helm H., Zon B.A. // Phys. Rev. A. – 2005. – Vol.71. – P.033410.
11. Карбованець О.М. // Наук. вісник Ужгородського ун-ту. Серія Фізика. – 2008. – Вип. 23. – С. 7-15.
12. Зон Б.А. // ЖЭТФ. - 1977. – Т.112. - Вып.1(7). – С. 115.
13. Варшалович Д.А., Москалёв А.М., Херсонский В.К. Квантовая теория углового момента. – Ленинград: Наука, 1975. – 439 с.
14. Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. - М.: Наука, 1971. – 544 с.
15. Laurenzi B.J. // J. Chem. Phys.– 1971. – V. 55. – №6. – P.2681.
16. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. - М.: Наука, 1976.– 319 с.
17. Chernov V.E., Zon B.A. // J. Phys. B.: At. Mol. Opt. Phys. – 1996. – Vol.29. – P. 4161.

WAVE FUNCTIONS OF A QUASIMOLECULAR SYSTEM “ION+POLAR MOLECULE”

O.M. Karbovanets

Uzhhorod National University, 88000, Uzhhorod, Voloshin, 54

An analytic study of the asymptotic properties of the quasimolecular system $(AB)^{(Z_a+Z_b-2)+}$ consisting of a polar molecule and a highly charged atomic ion was carried out. The polar molecule was described within dipole point approximation. The wave functions of the system $(AB)^{(Z_a+Z_b-2)+}$ were calculated asymptotically correctly (for large distances *R* between interacting particles) in the framework of the semiclassical approach.