

He-HF 体系势能模型对散射截面影响的理论研究^{*}

余春日^{1)B)} 汪荣凯^{2)B)} 程新路³⁾ 杨向东^{3)†}

1) 安庆师范学院物理与电气工程学院, 安庆 246011)

2) 贵州师范大学理学院, 贵阳 550001)

3) 四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065)

(2006 年 2 月 18 日收到, 2006 年 9 月 18 日收到修改稿)

用 BFW 势函数拟合在 CCSD(T) aug-cc-pVQZ 理论水平下计算的 He-HF 相互作用能, 获得了 He 原子与 HF 分子相互作用的各向异性势, 并与其他势模型进行比较, 验证了拟合势的可靠性, 然后采用量子密耦(Close-Coupling)方法分别计算了 He-HF 碰撞体系在五种不同势能模型下的微分散射截面、分波散射截面和总截面, 并对计算结果进行了详细的比较和分析. 研究表明, 势能球平均零点能位置、势阱深度、排斥势的强度以及势能在势阱附近的方向性都对散射截面有较大影响.

关键词: 势能模型, 密耦方法, 散射截面

PACC: 3440, 3430, 3450E

1. 引 言

惰性气体原子与卤化氢分子的相互作用在化学激光、化学反应动力学、等离子体物理等科技领域中具有重要意义, 因而一直成为实验和理论十分关注的研究对象^[1-10]. 但卤化氢具有强腐蚀性, 对实验设备损害非常严重, 实验难度远远大于其他分子, 所以散射实验数据较少. 因此, 从理论上研究氦原子与卤化氢分子碰撞激发规律就显得尤为重要. 针对 He-HF 系统, Collins 和 Lane(CL)^[5] 使用膺势方法提出了 He-HF/HCl 碰撞体系的理论相互作用势, 但研究表明它的精确度不高; Boughton 等(BFW)^[6] 根据散射实验数据和描述惰性气体相互作用的势能模型提出了 He-HF 相互作用的半经验表达式, 但这个势模型是球对称形式, 不能用于非弹性散射研究; Moszynski 及其合作者^[7] 应用对称性微扰理论(SAPT)导出了 He-HF 系统的相互作用势, 并由此计算了 He-HF 体系的微分截面、转动激发截面及振转光谱等, 其结果都与实验符合得很好. 但 SAPT 势能面除了表达式形式复杂外, 还至少需要 136 个参数, 所以难以进行更充分地研究. 因此, 如何从理论上提供一个既能准确描述系统相互作用的各向异性特征, 又能比较

容易地确定势参数且表达形式简洁的势能函数是深入研究原子与分子相互作用机理的关键.

我们在进一步的研究中发现: 针对 He-HF 体系提出的 BFW 势函数^[6] 用于原子与分子碰撞体系的相互作用具有如下优点: 一是体现了相互作用势的特征参数势阱深度 ϵ 和势阱位置 R_m ; 二是便于拟合从头计算的相互作用势数据和散射数据; 三是便于展开成散射计算中常用的 Legendre 多项式形式. 所以, 本文选用 BFW 势函数拟合在 CCSD(T) aug-cc-pVQZ 理论水平下计算的 He-HF 相互作用能, 获得 He 原子与 HF 分子相互作用的各向异性势, 并采用量子密耦方法分别计算了在五种不同势能模型下的散射截面, 研究了势能球平均零点能位置、势阱深度、排斥势的强度以及势能在势阱附近的方向性对散射截面的影响.

2. He-HF 体系各向异性相互作用势

一般情况下, 碰撞体系的相互作用势 $V(R, r, \theta)$ 可写成

$$V(R, r, \theta) = \sum_{\lambda} V_{\lambda}(R, r) P_{\lambda}(\cos \theta), \quad (1)$$
$$\lambda = 0, 1, 2, \dots$$

^{*} 安徽省高等学校省级自然科学研究项目, 国家自然科学基金(批准号: 10574096, 10676025) 和高等学校博士学科点专项科研基金(批准号: 20050610010) 资助的课题.

[†] E-mail: xd yang@scu.edu.cn

用矩阵可表示为

$$= \begin{pmatrix} V(R, r, \theta_1) \\ V(R, r, \theta_2) \\ V(R, r, \theta_3) \\ \vdots \\ V(R, r, \theta_i) \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} P_0(\theta_1) & P_1(\theta_1) & P_2(\theta_1) & \dots & P_\lambda(\theta_1) \\ P_0(\theta_2) & P_1(\theta_2) & P_2(\theta_2) & \dots & P_\lambda(\theta_2) \\ P_0(\theta_3) & P_1(\theta_3) & P_2(\theta_3) & \dots & P_\lambda(\theta_3) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ P_0(\theta_i) & P_1(\theta_i) & P_2(\theta_i) & \dots & P_\lambda(\theta_i) \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} V_0(R, r) \\ V_1(R, r) \\ V_2(R, r) \\ \vdots \\ V_\lambda(R, r) \end{pmatrix}, \quad (2)$$

其中 $V_\lambda(R, r)$ 为径向势函数, $P_\lambda(\cos\theta)$ 为 Legendre 函数, R 是原子 A 到双原子分子 BC 质心的距离, r 是双原子分子 BC 的平衡核间距, θ 为原子相对于双原子分子的方向角, 如图 1 所示.

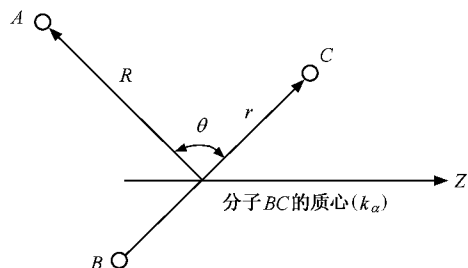


图 1 原子与双原子分子碰撞的几何图形

将(2)式左乘 P^{-1} , 即得

$$V_\lambda(R, r) = P^{-1} V(R, r, \theta). \quad (3)$$

不同 θ 方向上的势均采用 BFW 势函数形式^[6], 可表示为

$$V(R, r, \theta) = \varepsilon \left[\exp(\alpha(1-x)) \sum_{n=0}^3 A_n (x-1)^n - \frac{C_6}{x^6 + \delta} - \frac{C_8}{x^8 + \delta} \right], \quad (4)$$

其中, $x = \frac{R}{R_m}$, ε 是势阱深度, R_m 是势阱位置, α ,

$A_0, A_1, A_2, A_3, C_6, C_8$ 和 δ 是拟合参数.

用(4)式拟合在 CCSD(T)/aug-cc-pVQZ 理论水平下计算的 He-HF 相互作用能数据^[1] (r 取在 CCSD

(T)/aug-cc-pVQZ 理论水平下的优化值 0.918 \AA), 得到基态 ($X^1\Sigma^+$) He-HF 体系在 11 个方向上的势能函数, 其中在 $\theta = 0^\circ, 90^\circ, 180^\circ$ 的 3 个方向上的势能曲线如图 2 所示, 拟合参数列于表 1. 由(3)式计算出径向势能点后, 用(4)式进行非线性最小二乘法拟合, 得到 11 个径向系数, 其中前 5 个径向系数 $V_\lambda(R, r)$ ($\lambda = 0, 1, 2, 3, 4$) 随 R 的变化关系曲线如图 3 所示, 拟合参数列于表 2.

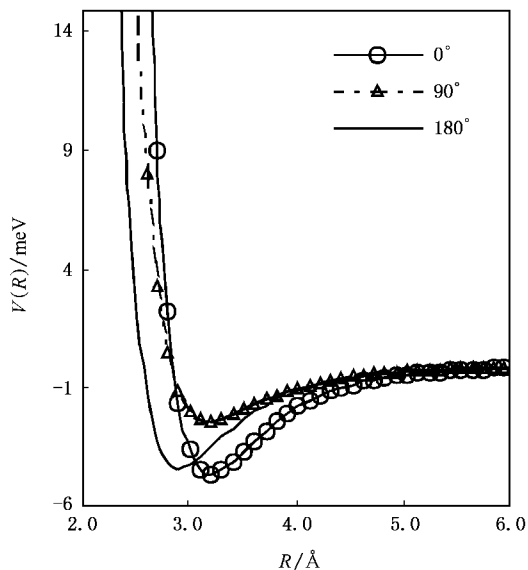


图 2 $\theta = 0^\circ, 90^\circ$ 和 180° 方向上的势能曲线

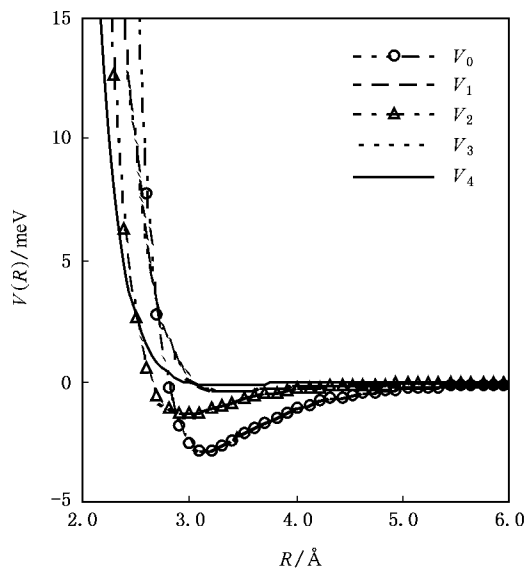


图 3 He-HF 拟合势能表面的径向系数

表 1 He-HF 不同方向势能函数的拟合参数

$\theta(K^\circ)$	ϵ/meV	$R_m/\text{\AA}$	α	A_0	A_1	A_2	A_3	C_6	C_8	δ
0	5.3274	3.1578	16.2150	0.7076	-0.2926	-7.0292	-14.0544	1.1484	0.4871	-0.0424
20	4.6835	3.1601	17.4679	0.8504	1.9435	-0.8184	-6.8650	1.1399	0.6430	-0.0366
40	3.4018	3.1758	17.0763	0.8680	2.5504	2.1693	-0.0008	1.2760	0.6153	0.0124
60	2.3996	3.2164	15.7937	0.8959	1.9198	1.1235	0.0035	1.4165	0.5006	0.0111
80	1.9445	3.2554	16.7769	0.8755	2.5081	2.4467	-0.0644	1.4762	0.3720	-0.0147
90	1.8767	3.2611	15.2235	0.7352	0.0746	-3.4140	-7.2241	1.6548	-0.0464	-0.0732
100	1.8803	3.2555	17.3545	0.8366	2.6260	2.7460	-0.3371	1.5108	0.2782	-0.0261
120	2.0467	3.2149	18.9085	0.8183	2.7993	-0.0034	-18.0575	1.5760	0.0000	-0.1337
140	2.3586	3.1364	17.6084	0.8503	2.8816	3.6074	-0.0327	1.5641	0.2009	-0.0463
160	2.7407	3.0572	11.2369	292.111	804.661	1323.32	2594.13	-154.344	466.076	0.0635
180	2.9343	3.0210	10.8531	3.0853	3.9180	11.1426	21.7721	0.4121	4.0000	0.0800

表 2 He-HF 径向系数的拟合参数

系数	ϵ/meV	$R_m/\text{\AA}$	α	A_0	A_1	A_2	A_3	C_6	C_8	δ
V_0	2.8325	3.1540	13.0000	1.1387	0.3187	1.3781	4.2971	1.2301	0.9261	0.0100
V_1	0.3628	3.3820	13.3339	0.0625	-6.2843	-9.2426	0.0002	0.6426	0.4166	-0.0030
V_2	1.3237	2.9610	13.9690	0.5473	-2.3743	-9.0397	-7.9687	0.7715	0.9238	0.0956
V_3	0.3348	3.3930	17.7133	0.7655	1.9532	1.3061	-0.0054	0.4836	1.5285	0.1396
V_4	0.1419	3.2680	20.7174	0.9153	4.6562	8.8722	6.2663	-0.3904	2.5312	0.1190

为了检验拟合势的可靠性,我们把拟合势、SAPT 势、BFW 势、ESMSV 势以及 CL 势的各个径向系数作了比较,如图 4—8 所示,主要参数列于表 3,其中 σ 为势能零点位置,表中参数是通过势函数计算得到的.从图表中可以清楚地看到:拟合势与 ESMSV 势、BFW 势以及 SAPT 势的径向系数符合得很好.例如,从在散射中起主要作用的球对称项 $V_0(R)$ 来看,它们的势阱深度 ϵ 、势阱位置 R_m 和零点能位置 σ 都非常接近,拟合势的阱深 ϵ 为 2.8216 meV(相对拟合值的绝对误差为 0.0109 meV),SAPT 势为 2.8325 meV, BFW 势和 ESMSV 势为 2.8870 meV;拟合势的势阱位置 R_m 为 3.153 Å(相对拟合值的绝对误差为 0.010 Å),SAPT 势为 3.154 Å, BFW 势和 ESMSV 势为 3.09 Å;拟合势和 SAPT 势的零点能位置 σ 均为 2.799 Å, BFW 势为 2.760 Å, ESMSV 势为 2.810 Å;拟合势与 SAPT 势的其他径向系数也都符合得很好.这表明本文的拟合势是可靠的,它不但具备了精确度较高的 SPAT 势的基本特征,而且表达形式简洁,所需参数也大为减少;相比之下,各向异性的 CL 势与拟合势和 SAPT 势存在着明显的差别,其 $V_0(R)$ 项的 ϵ 仅为 0.9375 meV,远远小于其他几个势能面; R_m 是 3.337 Å, σ 为 3.006 Å,二者都

比其他几个势能面大.相应地, V 随 R 变化的函数关系与其他势也相差很大, CL 势有更强的短程排斥势.势能的这些差异在散射截面的计算结果中会明显地表现出来,后文将作详细讨论.

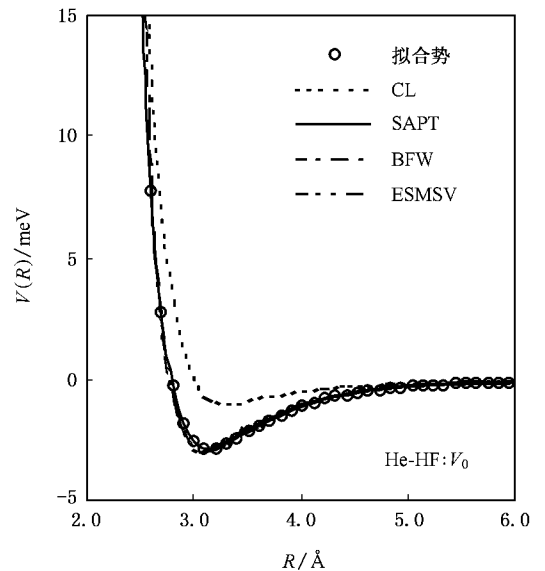


图 4 He-HF 拟合势、SAPT、BFW、ESMSV 和 CL 势径向系数的比较

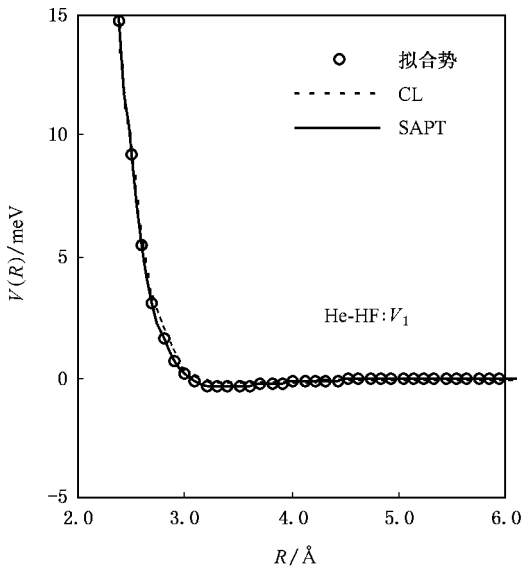


图 5 He-HF 拟合势 ,SAPT ,BFW ,ESMSV 和 CL 势径向系数的比较

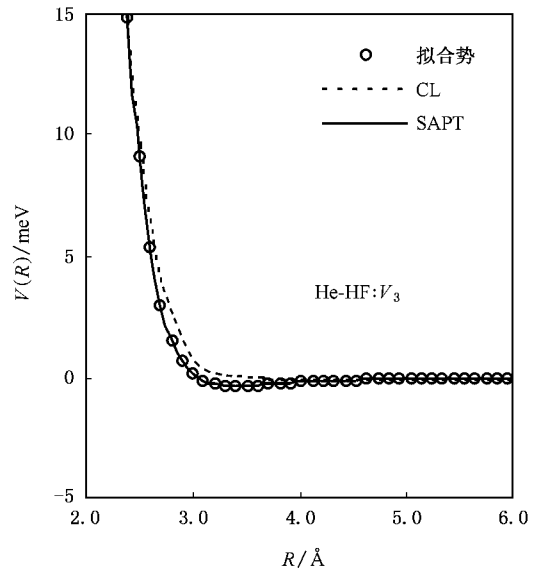


图 7 He-HF 拟合势 ,SAPT ,BFW ,ESMSV 和 CL 势径向系数的比较

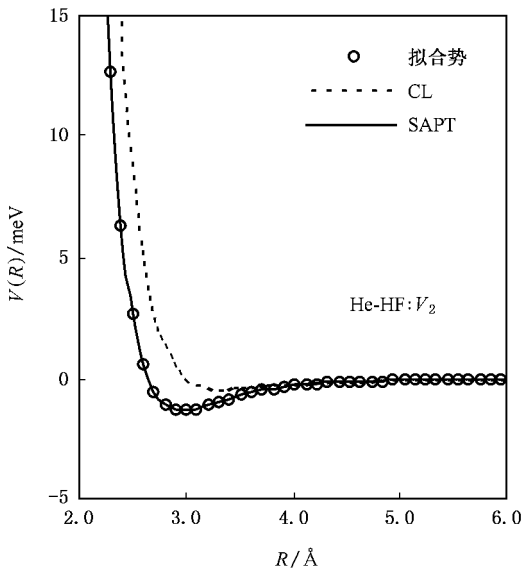


图 6 He-HF 拟合势 ,SAPT ,BFW ,ESMSV 和 CL 势径向系数的比较

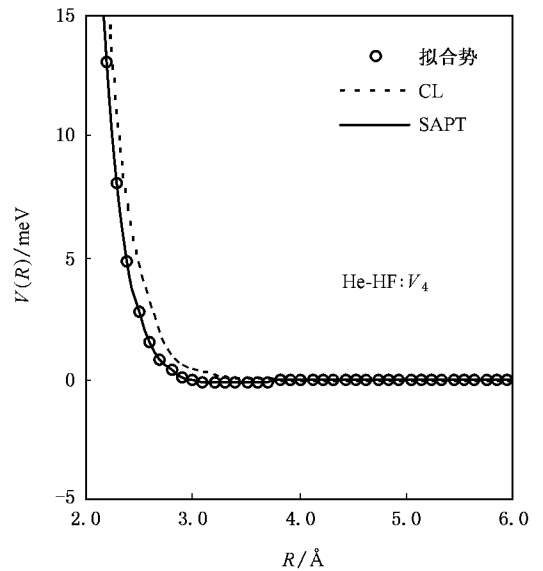


图 8 He-HF 拟合势 ,SAPT ,BFW ,ESMSV 和 CL 势径向系数的比较

表 3 拟合势与 SAPT ,BFW ,ESMSV 和 CL 势主要参数的比较

系数	参数	拟合势	SAPT ^[7]	CL ^[5]	BFW ^[6]	ESMSV ^[11]
V ₀	R _m /Å	3.153	3.154	3.337	3.090	3.090
	ε/meV	2.8216	2.8325	0.9375	2.8870	2.8870
	σ/Å	2.799	2.799	3.006	2.760	2.810
V ₁	R _m /Å	3.378	3.382	3.579	-	-
	ε/meV	0.3628	0.3628	0.149	-	-
	σ/Å	3.053	3.054	3.226	-	-
V ₂	R _m /Å	2.961	2.961	3.334	-	-
	ε/meV	1.3239	1.3236	0.4158	-	-
	σ/Å	2.647	2.647	2.995	-	-
V ₃	R _m /Å	3.391	3.393	4.282	-	-
	ε/meV	0.3349	0.3348	0.0101	-	-
	σ/Å	3.057	3.060	3.898	-	-
V ₄	R _m /Å	3.268	3.268	5.020	-	-
	ε/meV	0.1416	0.1419	0.0003	-	-
	σ/Å	2.964	2.965	4.627	-	-

3. 量子散射动力学计算

根据密耦方法^[12], 碰撞过程 $A + BC(v_\alpha, j_\alpha) \rightarrow A + BC(v_\beta, j_\beta)$ 的微分散射截面表示为

$$\frac{d\sigma_{v_\alpha j_\alpha \rightarrow v_\beta j_\beta}}{d\Omega} = \frac{1}{(2j_\alpha + 1)} \times \frac{k_\beta}{k_\alpha} \sum_{M_\alpha M_\beta} |f_{v_\beta j_\beta M_\beta, v_\alpha j_\alpha M_\alpha}(\theta, \phi)|^2, \quad (5)$$

其中 v_j 和 M 分别表示分子的振动量子数、转动量子数和转动量子数在空间固定坐标轴上的投影, k 表示波矢.

从初态 $(v_\alpha j_\alpha M_\alpha)$ 到终态 $(v_\beta j_\beta M_\beta)$ 的散射振幅为

$$f_{v_\beta j_\beta M_\beta, v_\alpha j_\alpha M_\alpha}(\theta, \phi) = \left(\frac{4\pi}{k_\alpha k_\beta}\right)^{1/2} \times \sum_{l_\beta} [2l_\beta + 1]^{1/2} A_{l_\beta}(v_\alpha j_\alpha M_\alpha \rightarrow v_\beta j_\beta M_\beta) Y_{l_\beta M_\alpha \rightarrow M_\beta}(\theta, \phi), \quad (6)$$

其中

$$A_{l_\beta}(v_\alpha j_\alpha M_\alpha \rightarrow v_\beta j_\beta M_\beta) = \sum_J l_\beta M_\alpha - M_\beta j_\beta M_\beta |JM_\alpha \rangle T_{v_\alpha j_\alpha l_\alpha, v_\beta j_\beta M_\beta}^J, \quad (7)$$

式中 l 表示轨道角量子数, J 表示总角动量子数, $Y_{l_\beta M_\alpha \rightarrow M_\beta}(\theta, \phi)$ 是球谐函数, $T_{v_\alpha j_\alpha l_\alpha, v_\beta j_\beta M_\beta}^J$ 是跃迁矩阵元.

碰撞过程 $A + BC(v_\alpha, j_\alpha) \rightarrow A + BC(v_\beta, j_\beta)$ 的分波散射总截面表示为

$$\sigma_{v_\alpha j_\alpha \rightarrow v_\beta j_\beta}^J = \frac{1}{2j_\alpha + 1} \frac{4\pi}{k_\alpha^2} \sum_{l_\beta M_\alpha} (2l_\beta + 1) |T_{v_\alpha j_\alpha l_\alpha, v_\beta j_\beta M_\beta}^J|^2. \quad (8)$$

碰撞过程 $A + BC(v_\alpha, j_\alpha) \rightarrow A + BC(v_\beta, j_\beta)$ 的散射总截面表示为

$$\sigma_{v_\alpha j_\alpha \rightarrow v_\beta j_\beta} = \frac{1}{2j_\alpha + 1} \frac{4\pi}{k_\alpha^2} \sum_{M_\alpha M_\beta} (2l_\beta + 1) \times |A_{l_\beta}(v_\alpha j_\alpha M_\alpha \rightarrow v_\beta j_\beta M_\beta)|^2 = \frac{1}{2j_\alpha + 1} \frac{4\pi}{k_\alpha^2} \sum_{l_\beta M_\alpha} (2l_\beta + 1) |T_{v_\beta j_\beta l_\beta, v_\alpha j_\alpha M_\alpha}^J|^2. \quad (9)$$

3.1. 微分散射截面

考虑到零点能位置和势阱深度是影响微分散射截面振荡极值位置的两个重要参数^[13], 我们用本文的拟合势、SAPT 势、BFW 势、ESMSV 势以及 CL 势计算了 He-HF 体系碰撞能量为 86 meV 时的总微分散射截

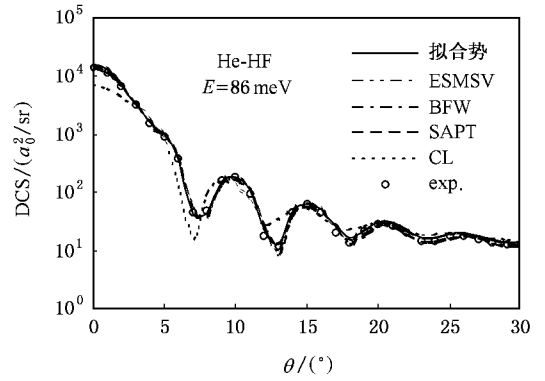


图9 He-HF 体系不同势下总微分散射截面与实验数据的比较

面, 如图9所示, 并与截面的实验结果相比较. 从图中可以看出: 采用拟合势、SAPT 势和 ESMSV 势计算的微分散射截面和截面的实验结果^[8]比较, 无论是在衍射振荡的位置上还是振荡幅度上都符合得很好; 采用 BFW 势计算的微分散射截面与实验结果的主要差别体现在第二极小值小于实验值; 而采用 CL 势计算的微分散射截面则与实验值有明显的差异, 主要表现在两个方面: 首先, 用 CL 势计算的微分散射截面的衍射振荡间隔明显地小于实验值. 引起这个差别的主要原因是 CL 势的零点能位置 σ 与其他势明显不同. 根据碰撞理论, 微分散射截面的衍射振荡间隔遵从以下规律:

$$\Delta\theta = \frac{\pi\hbar}{\mu v_R \sigma}, \quad (10)$$

其中 $\Delta\theta$ 是振荡间隔, μ 是体系的约化质量, v_R 是相对碰撞速度, σ 是零点能位置. (10) 式是从散射截面数据确定分子间相互作用的依据之一. 由此可见, 产生振荡间隔差别的主要原因是势能面的球对称项 $V_0(R)$ 的零点能位置不同 (这里体系的约化质量 μ 和相对碰撞速度 v_R 都相同), 从表3可知: 拟合势和 SAPT 势 $V_0(R)$ 项的零点能位置 σ 均为 2.799\AA , BFW 势为 2.760\AA , ESMSV 势为 2.810\AA , 这些势能面的零点能位置 σ 都非常接近; 而 CL 势的零点能位置 σ 为 3.006\AA , 比其他几个势能面都大, 所以 CL 势的微分散射截面与其他势能面相比有较小的衍射振荡间隔. 由于拟合势、SAPT 势和 ESMSV 势的计算结果与实验符合得更好, 我们认为它们的参数更可靠. 其次是振荡幅度的不同. 用 CL 势计算的微分散射截面在第一极小值位置明显小于实验值和采用其他势的计算值, 在第二、三极小值位置又偏大, 在二、三两个极大值位置又偏小. 引起这个差别的主要原因是 CL

势的阱深比其他几种势小得多.从表 3 可知:在 $V_c(R)$ 项中,拟合势的阱深 ϵ 为 2.8216 meV, SAPT 势为 2.8325 meV, BFW 势和 ESMSV 势为 2.8870 meV. 这些势能面的阱深 ϵ 都非常接近;而 CL 势的阱深 ϵ 仅为 0.9375 meV, 比其他势小得多;其他展开项中也存在类似的差别.显然,从散射截面数据的角度来看,拟合势和 SAPT 势比 CL 势更能准确地反映 He-HF 碰撞体系相互作用的各向异性特征.

图 10 是采用拟合势、SAPT 势和 CL 势计算的碰撞能量在 86 meV 时的总非弹性微分截面随散射角 θ 的变化曲线.从图中可见:当散射角 θ 小于约 35° 时,非弹性微分散射截面随 θ 振荡,其振荡间隔与总微分散射截面分类似,拟合势与 SAPT 势的振荡间隔基本一致,CL 势的小一些;当散射角大于约 35° 时,非弹性截面趋于平稳.三个势能面的总非弹性微分截面的大小也有很大差别,CL 势的非弹性截面最小,其总非弹性截面仅占总截面的 0.933%,而 SAPT 势为 1.396%,拟合势为 1.387%.这是因为,一方面三个势能面的各向异性强弱不同,CL 势阱深的方向性远远小于拟合势和 SAPT 势,较小的方向性导致了较小的非弹性散射截面;另一方面三个势能面短程排斥势的强弱不同,CL 势的短程排斥势比拟合势和 SAPT 势强得多,非弹性截面也就更小.

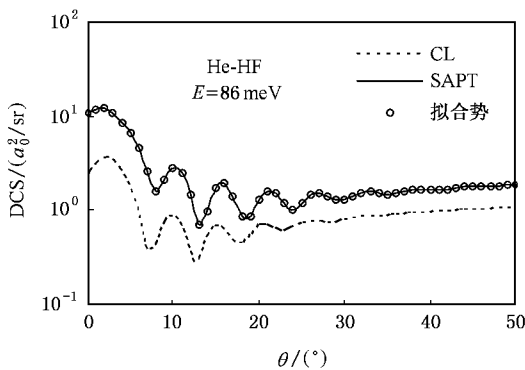


图 10 He-HF 不同势下总非弹性微分截面的比较

3.2. 分波散射截面

图 11 为采用本文的拟合势、SAPT 势、BFW 势、ESMSV 势以及 CL 势计算的 He-HF 体系碰撞能量为 86 meV 时的总分波截面随角动量量子数 J 的变化曲线.从图中可以看出:对确定的入射能量 E ,用不同的势计算出的总分波截面的变化规律是一致的,都是随 J 的增加而不断振荡,振荡幅度越来越大,在达到一个最大值后,还出现了明显的尾部效应(表

现为分波截面达到最大值后又出现一个较小的极大值).这是因为当入射粒子的角动量增大到粒子在经典散射情形下已不可能与散射势场发生相互作用时,由于量子效应,粒子仍会受到势场的散射.

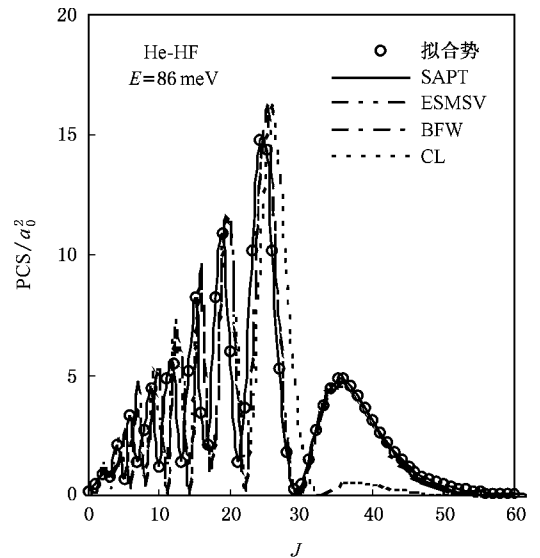


图 11 He-HF 体系不同势下总分波截面的比较

从图中还可以看出:拟合势和 SAPT 势的总分波截面几乎重合,而 BFW 势、ESMSV 势和 CL 势的各级振荡位置和振荡幅度与它们有所不同.首先, BFW 势和 ESMSV 势与拟合势以及 SAPT 势的振荡极值位置基本重合,振荡间隔基本相同;而 CL 势的分波截面振荡间隔较大.分波截面振荡间隔 ΔJ 符合以下关系:

$$\Delta J \propto \mu v_R \sigma, \quad (11)$$

其中 μ 为体系的约化质量, v_R 为相对碰撞速度, σ 为零点能位置.由于拟合势、BFW 势、ESMSV 势和 SAPT 势的零点能位置基本相同,CL 势的零点能位置比其他四种势都大,所以用 CL 势计算的分波截面有较大的振荡间隔,其他势的振荡间隔就要小一些.其次,就同一级极值而言, BFW 势、ESMSV 势和 CL 势振荡幅度要大于拟合势和 SAPT 势对应的振荡幅度.这是由于 BFW 势和 ESMSV 势是各向同性的,而 CL 势的势阱较浅、各向异性较弱的缘故,这与微分截面的情况类似.另外,拟合势、BFW 势、ESMSV 势、SAPT 势和 CL 势对应的尾部效应的幅度分别为 $4.87a_0^2$, $4.76a_0^2$, $4.64a_0^2$, $4.87a_0^2$ 和 $0.64a_0^2$, 其中 a_0 为玻尔半径.可见,拟合势、BFW 势、ESMSV 势、SAPT 势尾部效应的幅度基本相同,而 CL 势尾部效应的幅度较小.这与它们的阱深排列顺序(参见表 3)基

本一致. 因此, 分波截面的振荡幅度也反映了原子与分子间相互作用的某些方位特征.

图 12 是采用拟合势、SAPT 势和 CL 势计算的碰撞能量在 86 meV 时的总非弹性分波散射截面随角动量子数 J 的变化曲线. 由图可见, 总非弹性分波截面无振荡现象, 并且拟合势和 SAPT 势的总非弹性分波截面随 J 的变化基本相同, 而 CL 势的分波截面值明显偏小. 产生这个差别的主要原因与总非弹性微分散射截面相同, 即势能面的各向异性越强、短程排斥势越弱, 对应的非弹性截面越大.

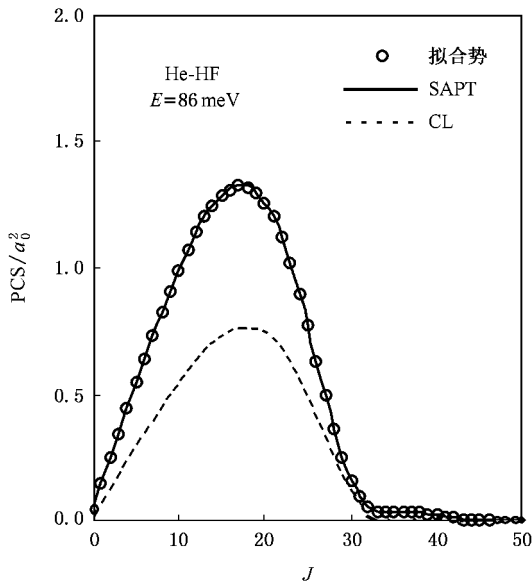


图 12 He-HF 体系不同势下总非弹性分波截面的比较

3.3. 总截面

图 13 是 He-HF 碰撞体系在不同势下的总截面随入射能量的变化曲线. 从图中可看出: 五种势的总截面都是随入射能量的增加减小得越来越慢. 这是因为当入射粒子的能量较低时, 碰撞体系的相互作用势相对入射粒子的动能较强, 散射概率较大, 而当入射粒子的能量较高时, 碰撞体系的相互作用势相对入射粒子的动能较弱, 散射概率就较小. 从图中还可以看出: 相同能量下五种势对应的总截面各不相同.

同, 排斥势强的 CL 势的总截面明显小于排斥势较弱的其他四种势的总截面, 且能量越小, 差别越大. 可见, 排斥势越强, 产生散射的概率越小; 排斥势越弱, 产生散射的概率越大.

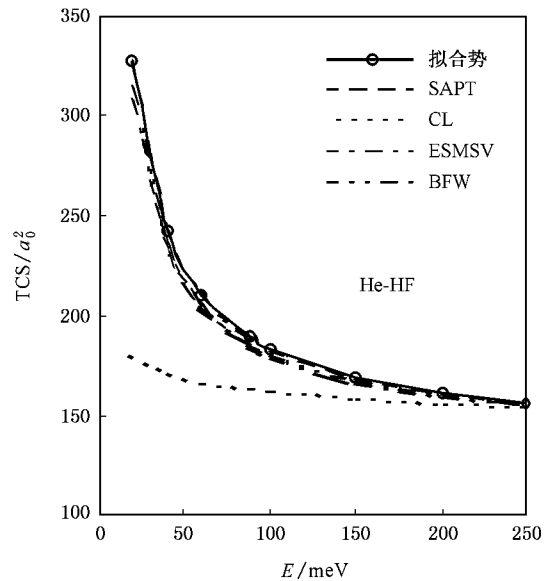


图 13 He-HF 体系不同势下总截面的比较

4. 结 论

1. 用拟合势计算出的 He-HF 碰撞体系的微分散射截面的结果与实验结果符合得很好. 这表明本文的拟合势是比较准确的, 可以描述氦原子与 HF 分子相互作用的各向异性特征.

2. 各向异性势提供的原子与分子相互作用的信息比球对称势要丰富得多. 势能表面的各向异性特征、排斥势的强弱和势能的球平均势能参数都对散射截面特别是激发截面有较大影响. 因此, 为了全面描述原子与分子间相互作用的基本特征, 就必须建立有准确方向性的各向异性势模型. 除了计算和测量其总散射截面外, 还要特别关注它的非弹性散射截面. 对非弹性截面的研究是全面探索原子与分子相互作用机理的重要途径.

[1] Zhang Y, Shi H Y, Wang W Z 2001 *Acta Phys. Chim. Sin.* **17** 1013 (in Chinese) [张 愚、史鸿运、王伟周 2001 物理化学学报 **17** 1013]

[2] Zhu J, Wang C X, Sun G H, Yang X D 1999 *J. Sichuan University (Natural Science Edition)* **36** 476 (in Chinese) [朱

俊、王彩霞、孙桂华、杨向东 1999 四川大学学报(自然科学版) **36** 476]

[3] Yang C L, Zhu Z H 1999 *Acta Phys. Sin.* **48** 1852 (in Chinese) [杨传路、朱正和 1999 物理学报 **48** 1852]

[4] Yu C R, Feng E Y 2006 *J. At. Mol. Phys.* **23** 166 (in Chinese)

- [余春日、凤尔银 2006 原子与分子物理学报 **23** 166]
- [5] Collins L A , Lane N F 1976 *Phys. Rev. A* **14** 1358
- [6] Boughton C V , Miller R E , Vohralik P F , Watts R O 1986 *Mol. Phys.* **58** 827
- [7] Moszynski R , Wormer P E S , Jeziorski B , Avoird A 1994 *J. Chem. Phys.* **101** 2811
- [8] Battaglia F , Gianturco F A , Palma A 1984 *J. Chem. Phys.* **80** 4997
- [9] Yu C R , Huang S Z , Feng E Y , Wang R K , Cheng X L , Yang X D 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 2215 (in Chinese) [余春日、黄时中、凤尔银、汪荣凯、程新路、杨向东 2006 物理学报 **55** 2215]
- [10] Yu C R , Feng E Y , Wang R K , Yang X D 2006 *Chin. Phys.* **15** 2571
- [11] Yang X D , Wang C X , Sun G H , Jing F Q 2000 *J. Sichuan University (Natural Science Edition)* **37** 553 (in Chinese) [杨向东、王彩霞、孙桂华、经福谦 2002 四川大学学报(自然科学版) **37** 553]
- [12] Choi B H , Tang K T 1975 *J. Chem. Phys.* **63** 1775
- [13] Sun G H , Jiang D Q , Feng Y B , Yang X D 1999 *J. Sichuan Union University (Engineering Science Edition)* **3** 147 (in Chinese) [孙桂华、蒋德琼、冯一兵、杨向东 1999 四川联合大学学报(工程科学版) **3** 147]

Theoretical study of the effect of potential models on scattering cross sections for He-HF system *

Yu Chun-Ri^{1)B)} Wang Rong-Kai^{2)B)} Cheng Xin-Lu³⁾ Yang Xiang-Dong^{3)†}

1) *School of Physics & Electrical Engineering , Anqing Teachers College , Anqing 246011 , China*

2) *School of Physics and Chemistry , Guizhou Normal University , Guiyang 550001 , China*

3) *Institute of Atomic and Molecular Physics , Sichuan University , Chengdu 610065 , China*

(Received 18 February 2006 ; revised manuscript received 18 September 2006)

Abstract

An anisotropic intermolecular potential of the He-HF complex has been obtained by utilizing the BFW analytic function to fit the intermolecular energy data , which have been calculated at the theoretical level of the single and double excitation coupled-cluster method with noniterative perturbation treatment of triple excitation CCSD (T). And the reliability of the potential has been verified by comparing it with other potential models. The differential , partial and total scattering cross sections for collisions between He atoms and HF molecules have been calculated respectively by using the quantum close-coupling method at five different potential models , and the calculated results have been compared and analysed in detail. The research shows that the scattering cross sections are sensitive to the position where potential is zero , the well depth , the strength of the repulsive wall of the spherically averaged and to the anisotropy of the region of the well depth. We hope that the results can provide profitable reference for determining exactly the interaction potential of the atomic-molecular collision systems from the scattering cross sections.

Keywords : potential model , close-coupling method , scattering cross sections

PACC : 3440 , 3430 , 3450E

* Project supported by the Natural Science Foundation of the Anhui Higher Education Institutions of China , the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10574096 , 10676025) and the Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education of China (Grant No. 20050610010).

† E-mail : xdyang@scu.edu.cn