

# 不同能量的氢原子与同位素分子 $H_2$ ( $D_2$ , $T_2$ ) 碰撞分波截面的理论计算\*

沈光先<sup>1)†</sup> 汪荣凯<sup>1)</sup> 令狐荣锋<sup>1)</sup> 杨向东<sup>2)†</sup>

1) 贵州师范大学理学院, 贵阳 550001)

2) 四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065)

(2007 年 3 月 8 日收到, 2007 年 5 月 11 日收到修改稿)

用 Tang-Toennies 势模型和密耦近似方法计算了不同能量下惰性气体原子 He 与  $H_2$  及其同位素  $D_2$ ,  $T_2$  替代碰撞体系的振转激发碰撞截面. 通过分析 He- $H_2$ ( $D_2$ ,  $T_2$ ) 各碰撞体系分波截面的差异, 总结出在  $H_2$  分子的对称同位素替代情形下 He- $H_2$ ( $D_2$ ,  $T_2$ ) 碰撞体系分波截面随量子数和体系约化质量变化的规律. 结果表明, 体系的约化质量及入射原子相对碰撞能量的变化均给体系的碰撞截面带来不同程度的影响.

关键词: 散射截面, 密耦方法, 同位素

PACC: 3440, 3450

## 1. 引 言

原子与分子碰撞实验及理论研究是原子分子物理十分重要的研究方向之一, 而原子与分子间振动和转动激发及非弹性碰撞则是碰撞问题研究中的一个主攻方面, 它的诸多研究成果在大气物理、气体激光、凝聚态物理、等离子体物理等许多领域中有着十分广泛的应用, 对物理学基础理论的探索、实验技术的革新及原子分子设计产生了极大的推进作用. 随着研究的逐渐深入, 原子与分子间振动和转动激发及非弹性碰撞研究在大量实际问题, 如原子分子碰撞能量转移过程中气体激光、转动激发的共振荧光过程, 冲击波、声波、风洞流扩张快速压缩过程中的弛豫现象、气象反应和输运性质, 分子转动激发和化学激光中的能量转移与辐射衰变, 以及星际空间云团冷却过程等科技领域扮演着越来越重要的角色.

随着交叉分子束实验技术的发展, 人们已开始通过散射实验来获得原子与分子特别是原子和双原子分子间相互作用势的有关信息. 由于原子分子间

的相互作用势主要由核外电子的运动决定, 只在很小程度上依赖于原子核, 所以同位素替代有可能提供更多有价值的信息. 如通过对原子与氢分子及其同位素碰撞计算的研究, 可以了解它们的振动和转动激发截面及其随能量变化的规律.

对大量有关原子与分子间振动和转动激发及非弹性碰撞研究文献的检索表明, 人们对惰性气体原子与双原子分子之间的相互作用及碰撞十分关注<sup>[1-10]</sup>, 这是因为通过对原子分子碰撞振动和转动激发的理论研究及散射截面的理论计算, 可以得到一些从实验中难以得到的数据. 本文采用 Tang-Toennies 势模型<sup>[11]</sup>和密耦近似方法<sup>[12,13]</sup>对 He- $H_2$ ( $D_2$ ,  $T_2$ ) 碰撞体系进行理论计算, 探讨和总结在  $H_2$  分子的对称同位素替代情形下 He- $H_2$ ( $D_2$ ,  $T_2$ ) 碰撞体系分波截面随量子数和体系约化质量变化的规律.

## 2. 理论计算方法

根据 Born-Oppenheimer 近似, 原子 A 和双原子

\* 国家自然科学基金(批准号:10574096), 高等学校博士点专项科研基金(批准号:20050610010), 贵州省教育厅自然科学重点项目(批准号:2005105), 贵州省优秀科技教育人才省长基金(批准号:黔省专合字(2006)113号), 贵州师范大学青年教师科研基金(批准号:校科青2004-1-12)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: shguangxian@sohu.com

分子 BC 碰撞体系的总波函数  $\psi_{\alpha}^{+}(\hat{R}, \hat{r})$  满足的 Schrödinger 方程为

$$(H - E)\psi_{\alpha}^{+}(\hat{R}, \hat{r}) = 0, \quad (1)$$

式中  $\hat{r}$  是双原子分子中两核之间的相对位置矢量,  $\hat{R}$  是入射原子 A 相对靶分子 BC 质心的相对位置矢量, 如图 1 所示.  $E$  是体系的总能量 ( $+$ ) 表示波函数满足外向边界条件,  $\alpha$  表示入射通道量子数的完全集. 体系的 Hamiltonian 算符为

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu_{A,BC}} \nabla_{\hat{R}}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu_{BC}} \nabla_{\hat{r}}^2 + V(R, r, \cos\theta), \quad (2)$$

其中  $\mu_{A,BC}$  和  $\mu_{BC}$  分别为总体系和双原子分子的约化质量  $\cos\theta = \hat{R} \cdot \hat{r}$ .

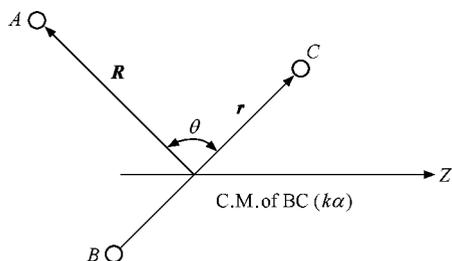


图 1 原子与双原子分子碰撞的几何图形

体系的总波函数可以写为

$$\psi_{\alpha}^{+}(\hat{R}, \hat{r}) = \frac{1}{K_{n_{\alpha}J_{\alpha}}} R \sum_{n_{\gamma}J_{\gamma}l_{\gamma}} g_{n_{\gamma}J_{\gamma}l_{\gamma}}^{J_{\alpha}} g_{n_{\alpha}J_{\alpha}M_{\alpha}}^{J_{\alpha}}(R) \times \phi_{n_{\gamma}J_{\gamma}}(r) Y_{JM_{\alpha}}^{J_{\alpha}}(\hat{R}, \hat{r}), \quad (3)$$

式中  $g(R)$  是入射原子相对分子质心运动的径向波函数,  $\phi(r)$  是双原子分子振-转波函数的径向部分, 下标  $\alpha$  表示入射通道, 下标  $\gamma$  表示其他可能发生的通道,  $n_{\alpha}$  是分子初态的振动量子数,  $\eta_{n_{\alpha}J_{\alpha}}$  是初态通道的相对动量,  $l_{\gamma}, J_{\gamma}$  分别表示  $\gamma$  通道中原子绕分子转动和靶分子转动的量子数.  $Y(\hat{R}, \hat{r})$  代表原子绕分子转动和分子中原子转动的总角函数.

当  $R \rightarrow \infty$  时, 总波函数的渐近形式为

$$\psi_{\alpha}^{+}(\hat{R}, \hat{r}) \xrightarrow{R \rightarrow \infty} e^{ik_{n_{\alpha}J_{\alpha}}z} \phi_{n_{\alpha}J_{\alpha}}(r) Y_{JM_{\alpha}}^{J_{\alpha}}(\hat{r}) + \sum_{n_{\gamma}J_{\gamma}l_{\gamma}} \frac{1}{R} e^{ik_{n_{\gamma}J_{\gamma}}R} \phi_{n_{\gamma}J_{\gamma}}(r) Y_{J_{\gamma}l_{\gamma}}^{J_{\gamma}}(\hat{r}) f_{n_{\gamma}J_{\gamma}l_{\gamma}}^{J_{\alpha}}(R) \quad (4)$$

双原子分子的振转波函数  $\phi_{n_{\gamma}J_{\gamma}}(r)$  满足径向方程

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu_{BC}} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{J_{\gamma}(J_{\gamma} + 1)\hbar^2}{2\mu_{BC}r^2} + V_{BC}(r) \right] \phi_{n_{\gamma}J_{\gamma}}(r) = \varepsilon_{n_{\gamma}J_{\gamma}} \phi_{n_{\gamma}J_{\gamma}}(r). \quad (5)$$

把(2)(3)(5)式代入(1)式, 然后两边乘上

$\phi_{n_{\beta}J_{\beta}}^* Y_{JM_{\alpha}}^{J_{\beta}}(\hat{R}, \hat{r})$  并积分可得

$$\left( \frac{d^2}{dR^2} - \frac{l_{\beta}(l_{\beta} + 1)}{R^2} + k_{n_{\beta}J_{\beta}}^2 \right) g_{n_{\beta}J_{\beta}}^{J_{\beta}}(R) = \frac{2\mu_{A,BC}}{\eta^2} \sum_{n_{\gamma}J_{\gamma}l_{\gamma}} V_{n_{\beta}J_{\beta}l_{\gamma}}^{J_{\beta}}(R) g_{n_{\beta}J_{\beta}l_{\gamma}}^{J_{\beta}}(R). \quad (6)$$

方程(6)就是计算原子和分子碰撞径向波函数的密耦方程, 式中右边对所有可能的振动量子数  $n_{\gamma}$ 、原子绕分子转动量子数  $l_{\gamma}$  和靶分子自身转动的量子数  $J_{\gamma}$  求和. 其中相互作用矩阵元

$$V_{n_{\beta}J_{\beta}l_{\gamma}}^{J_{\beta}}(R) = \int r^2 dr \phi_{n_{\beta}J_{\beta}}^*(r) \phi_{n_{\gamma}J_{\gamma}}(r) \times \int d\hat{r} d\hat{R} Y_{JM_{\alpha}}^{J_{\beta}}(\hat{R}, \hat{r}) \times \int V(R, r, \cos\theta) Y_{JM_{\alpha}}^{J_{\beta}}(\hat{R}, \hat{r}) \quad (7)$$

式中  $V(R, r, \cos\theta) = V(R, r, \cos\theta) - V_{BC}(r)$ ,  $V_{BC}(r)$  表示双原子分子的势能函数, 且

$$V_{BC}(r) = V(R, r, \cos\theta) |_{R \rightarrow \infty}.$$

从  $(n_{\alpha}J_{\alpha})$  到  $(n_{\beta}J_{\beta})$  的微分散射截面由下面公式给出<sup>[11]</sup>:

$$\frac{d\sigma_{n_{\alpha}J_{\alpha} \rightarrow n_{\beta}J_{\beta}}}{d\Omega} = \frac{1}{2J_{\alpha} + 1} \cdot \frac{K_{\beta}}{K_{\alpha}} \times \sum_{M_{\alpha}M_{\beta}} \left| f_{n_{\beta}J_{\beta}M_{\beta}}^{n_{\alpha}J_{\alpha}M_{\alpha}}(\theta, \varphi) \right|^2, \quad (8)$$

式中

$$f_{n_{\beta}J_{\beta}M_{\beta}}^{n_{\alpha}J_{\alpha}M_{\alpha}}(\theta, \varphi) = \left( \frac{4\pi}{K_{\alpha}K_{\beta}} \right)^{1/2} \sum_{l_{\beta}} [2l_{\beta} + 1]^{1/2} A_{l_{\beta}}(n_{\alpha}J_{\alpha}M_{\alpha} \rightarrow n_{\beta}J_{\beta}M_{\beta}) \times Y_{l_{\beta}M_{\alpha} - M_{\beta}}^{l_{\beta}}(\theta, \varphi), \quad (9)$$

$$A_{l_{\beta}}(n_{\alpha}J_{\alpha}M_{\alpha} \rightarrow n_{\beta}J_{\beta}M_{\beta}) = \sum_J l_{\beta} M_{\alpha} - M_{\beta} J M_{\alpha} T_{n_{\beta}J_{\beta}}^{J_{\beta}}(n_{\alpha}J_{\alpha}M_{\alpha}). \quad (10)$$

由于当  $R \rightarrow \infty$  时, 总波函数  $\psi_{\alpha}^{+}(\hat{R}, \hat{r})$  必须满足(4)式表示的边界条件, 由此可得

$$g_{n_{\beta}J_{\beta}l_{\gamma}}^{J_{\beta}}(R) \xrightarrow{R \rightarrow \infty} [4\pi(2l_{\beta} + 1)]^{1/2} i^{l_{\beta}} \cdot (k_{\alpha}R) \times \left\{ l_{\beta} O_{J_{\beta}M_{\alpha}} | JM_{\alpha} \delta_{n_{\alpha}n_{\beta}} \delta_{J_{\alpha}J_{\beta}} \delta_{l_{\alpha}l_{\beta}}(k_{\beta}R) + \left( \frac{K_{\beta}}{K_{\alpha}} \right)^{1/2} T_{n_{\beta}J_{\beta}}^{J_{\beta}}(n_{\alpha}J_{\alpha}M_{\alpha}) \cdot i \hbar_{l_{\beta}}^{(1)}(k_{\beta}R) \right\}. \quad (11)$$

从  $(n_{\alpha}J_{\alpha})$  跃迁到  $(n_{\beta}J_{\beta})$  的振转激发散射总截面

$$\sigma_{n_{\alpha}J_{\alpha} \rightarrow n_{\beta}J_{\beta}} = \frac{1}{2J_{\alpha} + 1} \frac{4\pi}{K_{\alpha}^2} \sum_{M_{\alpha}M_{\beta}} (2l_{\beta} + 1) \times \left| A_{l_{\beta}}(n_{\alpha}J_{\alpha}M_{\alpha} \rightarrow n_{\beta}J_{\beta}M_{\beta}) \right|^2$$

$$= \frac{1}{2J_\alpha + 1} \frac{4\pi}{K_\alpha^2} \sum_{J_\beta M_\alpha} (2l_\beta + 1) |T_{n_\beta J_\beta l_\beta, n_\alpha J_\alpha M_\alpha}^J|^2. \quad (12)$$

从  $(n_\alpha J_\alpha)$  跃迁到  $(n_\beta J_\beta)$  的振转激发的分波散射总截面由下列公式给出:

$$\sigma_{n_\alpha J_\alpha \rightarrow n_\beta J_\beta}^J = \frac{1}{2J_\alpha + 1} \frac{4\pi}{K_\alpha^2} \sum_{l_\beta M_\alpha} (2l_\beta + 1) |T_{n_\beta J_\beta l_\beta, n_\alpha J_\alpha M_\alpha}^J|^2. \quad (13)$$

### 3. 计算结果及讨论

取入射原子的相对碰撞能量为  $E = 0.50, 0.60,$  和  $0.70 \text{ eV}$ , 扩展研究了 He 原子与  $H_2, D_2, T_2$  分子碰撞体系的分波截面, 计算结果如图 2 至图 7 所示(以总角动量量子数  $J$  为横坐标, 以分波截面值为纵坐标作图, 截面值的单位为  $a_0^2$ ).

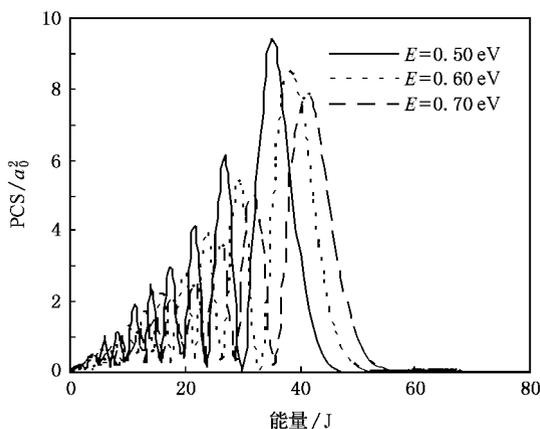


图 2 不同能量下 He- $H_2$  00-00 弹性碰撞分波截面

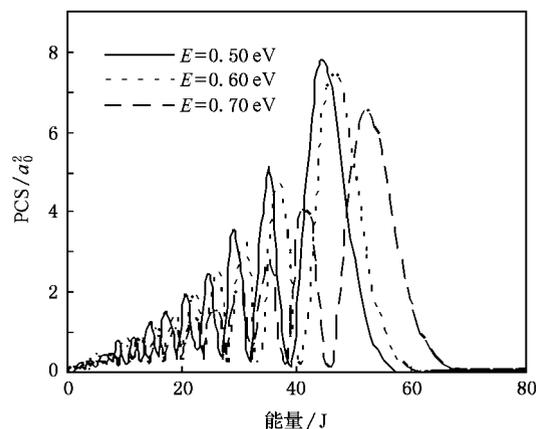


图 3 不同能量下 He- $D_2$  00-00 弹性碰撞分波截面

图 2、图 3、图 4 分别给出了入射能量  $E = 0.50,$   $0.60$  和  $0.70 \text{ eV}$  时 He 与  $H_2, D_2, T_2$  分子碰撞体系的

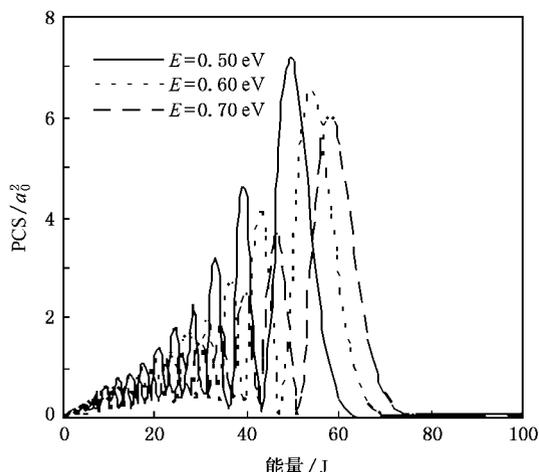


图 4 不同能量下 He- $T_2$  00-00 弹性碰撞分波截面

00-00 弹性碰撞分波截面. 从图中可以看出: 取不同能量时, 弹性分波截面的变化规律非常相似, 即分波截面均随  $J$  的增加而不断振荡, 且振幅越来越大, 直到达到一个极大值, 然后收敛, 但振荡的各极大值的位置依次向大  $J$  的方向移动, 且未出现明显的尾部效应. 这可作如下理解<sup>[14]</sup>: 在同一体系中, 体系约化质量相同, 得到收敛的截面所需的分波数和入射能量  $E$  的平方根成正比, 即  $J \propto \sqrt{E}$ , 因此, 随着入射能量的增加, 弹性分波截面振荡极大值的位置依次向后移动. 从图 2、图 3、图 4 中还可以看到, 随着入射原子的相对碰撞能量的增加, 分波截面的振荡次数增加, 振荡区间增大, 且振荡极大值依次变小, 详细数据见表 1 所示.

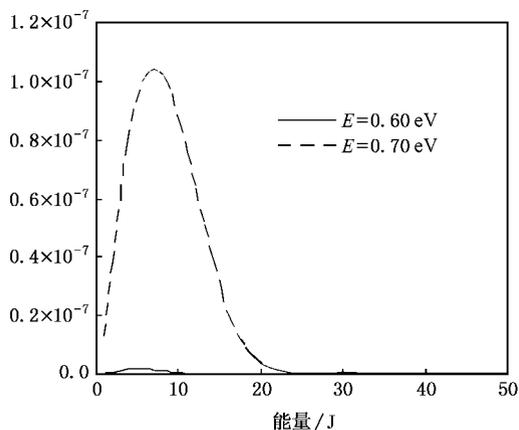


图 5 不同能量下 He- $H_2$  00-12 非弹性碰撞分波截面

图 5、图 6、图 7 分别给出了入射能量  $E = 0.50,$   $0.60$  和  $0.70 \text{ eV}$  时 He 与  $H_2, D_2, T_2$  分子碰撞体系的 00-12 非弹性碰撞分波截面. 从图 5、图 6、图 7 可以

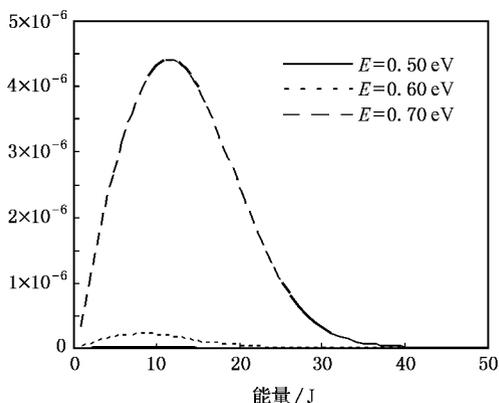


图 6 不同能量下 He-D<sub>2</sub> 00-12 非弹性碰撞分波截面

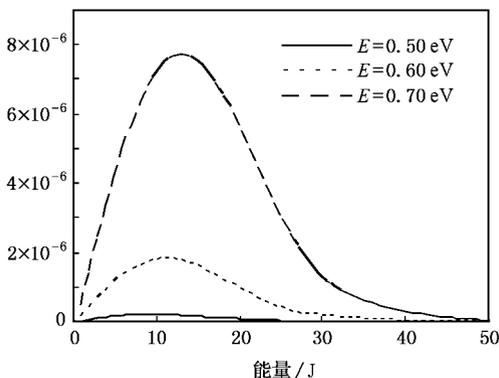


图 7 不同能量下 He-T<sub>2</sub> 00-12 非弹性碰撞分波截面

看出:在入射能量和约化质量不同时,碰撞体系的非弹性分波截面随  $J$  的变化曲线的形状相似,即截面只经过一个极大值便很快趋于零,但在峰值幅度方面却有较大的差异:1)对同一入射原子,在碰撞能量相同时,随着同位素分子质量的增加,非弹性散射分波截面峰值随之增加.这主要是由于 H<sub>2</sub>、D<sub>2</sub>、T<sub>2</sub> 三种分子在振转能级间距方面的差异造成的,因为 T<sub>2</sub> 分

子的振转能级间距最小,在相同的碰撞能量下,从  $v_j = 00$  被激发到  $v_j = 12$  或更高能级的概率最大.因而 He-T<sub>2</sub> 体系的 00-12 振转激发截面的峰值最大,He-D<sub>2</sub> 体系次之,He-H<sub>2</sub> 体系由于振转能级间距较大,在入射能量  $E = 0.50$  eV 时,则不能被激发到  $v_j = 12$  或更高能级.2)当约化质量一定时,非弹性散射分波截面峰值随入射原子能量的增加而增加,散射极大值的位置随入射原子能量的增加而向大  $J$  方向移动,详细数据见表 1 所示.

表 1 不同能量时弹性分波截面最大值及非弹性分波截面峰值的位置及大小

	能量/eV	H <sub>2</sub>	D <sub>2</sub>	T <sub>2</sub>
弹性分波截面最大值	0.50	(35, 9.45)	(44, 7.78)	(49, 7.18)
	0.60	(38, 8.51)	(47, 7.38)	(54, 6.53)
	0.70	(41, 7.84)	(52, 6.53)	(58, 6.01)
非弹性分波截面峰值	0.50		(8, 2.90 × 10 <sup>-8</sup> )	(9, 2.10 × 10 <sup>-7</sup> )
	0.60	(5, 1.86 × 10 <sup>-9</sup> )	(9, 2.13 × 10 <sup>-7</sup> )	(11, 1.81 × 10 <sup>-6</sup> )
	0.70	(7, 1.04 × 10 <sup>-7</sup> )	(12, 4.38 × 10 <sup>-6</sup> )	(13, 7.70 × 10 <sup>-6</sup> )

### 4. 结 论

基于以上计算和讨论,可得到如下结论:

1. 当入射原子的相对碰撞能量一定时,随着体系约化质量的增加,弹性分波截面最大值的位置向大  $J$  的方向移动,而截面值减少.
2. 当体系的约化质量一定时,随着能量的增加,弹性分波截面最大值的位置仍向大  $J$  的方向移动,截面值仍减少.
3. 对于非弹性散射分波截面,其峰值的位置随着体系的约化质量及入射原子的相对碰撞能量的增加而向大  $J$  的方向移动,但截面值则逐渐增加.

[1] Yang X D 1990 *Science in China (Series A)* **8** 833 (in Chinese)  
[杨向东 1990 中国科学(A辑) **8** 833]

[2] Yang X D, Zhang J Y, Jing F Q 1998 *Chin. Phys. Lett.* **1** 14

[3] Jiang D Q, Wang X Q, Yang X D 2002 *J. At. Mol. Phys.* **19** 75 (in Chinese)[蒋德琼、王小琴、杨向东 2002 原子与分子物理学报 **19** 75]

[4] 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]

[5] Jiang G, Xie H P, Tan M L, Zhang H 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 665 (in Chinese)[蒋刚、谢和平、谭明亮、朱正和 2000 物理

学报 **49** 665]

[6] 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]

[7] Yu C R, Feng E Y, Wang R K, Yang X D 2006 *Chin. Phys.* **15** 2571

[8] Yu C R, Yang X D 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 2577 (in Chinese)  
[余春日、杨向东 2007 物理学报 **56** 2577]

[9] Yu C R, Yang X D 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 4441 (in Chinese)  
[余春日、杨向东 2007 物理学报 **56** 4441]

- [ 10 ] Shen G X , Linghu R F , Wang R K , Yang X D 2007 *Chin. Phys.* **16** 3352
- [ 11 ] Tang K T , Toennies J P 1981 *J. Chem. Phys.* **74** 1148
- [ 12 ] Gurtiss C F 1970 *J. Chem. Phys.* **52** 1078
- [ 13 ] Gordon M D , Secrest D 1970 *J. Chem. Phys.* **52** 120
- [ 14 ] Brian H B 1979 *Atomic Collisions Theory* ( Benjamin :cummings publishing company inc )

## Theoretical calculation of the partial cross section in $\text{He-H}_2(\text{D}_2, \text{T}_2)$ collisions<sup>\*</sup>

Shen Guang-Xian<sup>1,2)</sup> Wang Rong-Kai<sup>1)</sup> Linghu Rong-Feng<sup>1)</sup> Yang Xiang-Dong<sup>2)</sup>†

<sup>1</sup> *School of Sciences , Guizhou Normal University , Guiyang 550001 , China*

<sup>2</sup> *Institute of Atomic and Molecular Physics , Sichuan University , Chengdu 610065 , China*

( Received 8 March 2007 ; revised manuscript received 11 May 2007 )

### Abstract

Tang-Toennies potential model and close-coupling method were applied to the  $\text{He-H}_2(\text{D}_2, \text{T}_2)$  system ,and the vibrational and rotational excitation cross sections at different incidence energy have been calculated. By analyzing the differences of these partial wave cross sections , the change rules of the partial wave cross sections with increase of quantum number , and with change of reduced mass of symmetric isotopic substituted system have been obtained. Based on the calculation , influence on the cross sections exerted by the variations in the reduced mass of systems and in the relative incoming energy of incident atom is discussed.

**Keywords** : cross section , close-coupling method , isotope

**PACC** : 3440 , 3450

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China( Grant No.10574096 ) ,the Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education of China( Grant No. 20050610010 ) ,the Natural Science Foundation of Education Bureau of Guizhou Province ,China( Grant No. 2005105 ) ,the Nomarch 's Foundation for Outstanding Science and Education Scholars of Guizhou Province , China( Grant No. QSZHZ 2006( 113 )) and scientific research Foundation of young teacher of Guizhou Normal University ( Grant No. XKQ 2004-1-12 ).

† E-mail :shguangxian @ sohu.com