

# He-Na<sub>2</sub> 体系低温下的冷碰撞研究<sup>\*</sup>

王 悦<sup>1)</sup> 董德智<sup>1)</sup> 李伟艳<sup>1)</sup> 夙尔银<sup>2)</sup> 崔执凤<sup>2)</sup>

1) 铜陵学院电气工程系, 铜陵 244000)

2) 安徽师范大学物理与电子信息学院, 芜湖 241000)

(2008 年 12 月 10 日收到, 2009 年 1 月 7 日收到修改稿)

在已经拟合好的 He-Na<sub>2</sub> 体系势能面上, 根据原子-双原子分子的非反应性碰撞动力学的相关基本理论, 在空间固定坐标系下, 采用严格的密耦方法求解了 He 原子和 Na<sub>2</sub> 分子的转动非弹性碰撞动力学方程, 并对 He-Na<sub>2</sub> 体系的微分散射截面、积分截面作了详细的分析, 结果与实验符合得比较好. 结果表明 (1) 弹性散射 ( $\Delta j = 0$ ) 截面远大于非弹性截面 (2) 较小  $\Delta j$  的跃迁主要产生前向散射, 随着  $\Delta j$  的增加, 后向散射的几率增加 (3) 对非弹性碰撞, 以  $\Delta j = 2$  的跃迁为主 (4) 微分截面上呈现由于量子干涉而形成的振荡结构, 且随碰撞能的减小, 振荡结构越加明显; (5) 在较小碰撞能时, 弹性截面上显现清晰的碰撞参数彩虹, 这对减少冷却囚禁中分子损失是有利的.

关键词: He-Na<sub>2</sub> 体系, 密耦方法, 微分散射截面, 积分截面

PACC: 3440, 3450

## 1. 引 言

受超冷原子玻色-爱因斯坦凝聚 (BEC) 实验的鼓舞, 人们对超冷分子的研究兴趣正在快速的增长. 冷分子碰撞和反应是近几年非常活跃的研究课题<sup>[1-3]</sup>. 人们应用冷原子光缔合<sup>[4,5]</sup>、缓冲气载带冷却<sup>[6,7]</sup>、磁/电场调节引发连续-束缚态 Feshbach 共振<sup>[8,9]</sup>等方法, 实现了对碱金属双原子分子 (同核和异核), 以及如 CaH, NH<sup>[10,11]</sup>等一些极性分子的冷却和囚禁. 这些冷却方法中, 光缔合和 Feshbach 共振方法产生的分子一般处于高激发的振转态上, 而缓冲气 (一般为 He) 载带冷却方法与分子的初始振转量子态密切相关. 利用超冷原子的光缔合过程形成冷分子 (Li<sub>2</sub>, Na<sub>2</sub>, K<sub>2</sub>, Rb<sub>2</sub>, Cs<sub>2</sub>) BEC<sup>[12]</sup>的研究也不断取得进展.

随着分子冷却和囚禁以及慢分子束技术的发展, 实验上研究冷和超冷分子的碰撞特性、化学反应特点及控制已成为可能. 为研究分子间的碰撞问题, 特别是低温下的冷碰撞问题, 已有不少的方法, 主要有密耦方法 (close coupling, 简称 CC) 耦合态方法

(coupled states, 简称 CS) 有效势方法 (effective potential, 简称 EP) IOS 近似方法 (infinite order sudden approximation). CC 方法主要用于处理化学反应重组型碰撞, 从薛定谔方程出发, 严格求解碰撞的各种截面. 对于简单的单原子分子和双原子分子的碰撞体系来说, CC 方法是一种严格的量子力学方法, 其局限性在于计算量很大, 很耗时. 其他几种方法则是在密耦方法中引入一定的近似. CS 方法采用不考虑体坐标系 (body-fixed frame)<sup>[13]</sup> 和空间固定坐标系 (space-fixed)<sup>[14]</sup> 的区别, 同时不考虑相互作用的离心力即克里奥力. 所以 CS 方法一般只适用于弱的各向异性体系如 H-H<sub>2</sub>, He-H<sub>2</sub>, 并且也只对  $J = 0$  ( $J$  为体系总角动量) 的跃迁符合得比较好. EP 方法是在 CC 方法基础上, 忽略振动与振动耦合. 对于弱的各向异性体系如 H-H<sub>2</sub>, He-H<sub>2</sub>, H-CO 体系, EP 方法与 CC 方法符合得比较好, 但对于强的各向同性体系如 He-HCN 结果就不令人满意, 仅有 20% 符合. IOS 近似方法是完全忽略振动的影响, 并认为转动是连续的. 可以说这种方法处理的是纯转动问题. IOS 方法与 CC 方法计算微分散射截面在处理大体体系如 Ar-TiF, rN<sub>2</sub>, rF<sub>2</sub>, rCl<sub>2</sub>, rBr<sub>2</sub> 和 -I<sub>2</sub> 符合得都比较

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金 (批准号: 10874001) 教育部科学技术研究重点项目 (批准号: 208057) 安徽省自然科学基金 (批准号: 1070416236) 和铜陵学院自然科学基金 (批准号: 2008txykj005) 资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯联系人. E-mail: fengbf@mail.ahnu.edu.cn; wangyue8001@sohu.com

好,但当  $J$  值变大时,误差就比较大了,所以对于处理大的  $J$  值散射截面时,必须用更严格的方法.

为了仔细研究 He 与  $\text{Na}_2$  体系的碰撞特性,我们采用最严密的密耦方法,在已经拟合好的三维势能面上<sup>[15]</sup>计算了 He 与  $\text{Na}_2$  体系的非反应性碰撞.计算可以在体坐标,也可以在空间坐标系中,但是为了和实验的结果作对比,我们这里将选择体坐标系.

## 2. 理论方法

如上所述,我们在空间固定坐标系下,采用严格的密耦方法求解 He 原子和  $\text{Na}_2$  分子的转动非弹性碰撞动力学方程.体系构型用 Jacobi 坐标  $(R, r, \theta)$  描述, $R$  是 He 原子与  $\text{Na}_2$  分子质心的距离, $r$  是  $\text{Na}_2$  分子的键长,计算中固定取  $r = 5.8175 a_0$ , $\theta$  是  $R, r$  间的夹角, $\theta = 0^\circ$  相应于 He- Na- Na 线性构型.由于相互作用势的各向异性,采用耦合角动量表象较方便,即

$$\phi_{jl}^{JM}(\hat{R}, \hat{r}) = \sum_{m_j m_l} (j l m_j m_l | j l J M) Y_{j m_j}(\hat{r}) Y_{l m_l}(\hat{R}), \quad (1)$$

式中  $J$  为体系的总角动量, $j$  为  $\text{Na}_2$  分子的转动角动量, $l$  为轨道角动量.将总散射波函数在耦合角动量表象中展开,有

$$\phi_{jl}^{JM}(\hat{R}, \hat{r}) = \sum_{j'l'} R^{-1} u_{j'l'}^{jl}(R) \phi_{j'l'}^{JM}(\hat{R}, \hat{r}), \quad (2)$$

这里  $(j, l)$  和  $(j', l')$  指标分别表征碰撞前后体系的状态,它们通过势能的各向异性而耦合.径向系数  $u_{j'l'}^{jl}$  满足如下方程:

$$\left( \frac{d^2}{dR^2} + k_{j'l'}^2 - \frac{l'(l'+1)}{R^2} \right) u_{j'l'}^{jl}(R) = 2\mu \sum_{j''l''} j'l' | V(R, \theta) | j''l'' u_{j''l''}^{jl}(R). \quad (3)$$

为方便势能矩阵元的计算,相互作用势用 Legendre 多项式展开,有

$$V(R, \theta) = \sum_{\lambda} V_{\lambda}(R) P_{\lambda}(\cos \theta). \quad (4)$$

积分  $j'l' | V(R, \theta) | j''l''$  可解析表达.密耦合方程通过数值求解.匹配  $u_{j'l'}^{jl}$  和径向波函数的渐进解,得到跃迁矩阵元  $T_{j \rightarrow j'}^j$  和散射振幅  $f_{j m_j \rightarrow j' m_{j'}}(\hat{R})$ .微分截面表示为

$$\frac{d\sigma_{j \rightarrow j'}}{d\Omega} = \frac{k_{j'}}{(2j+1)k_j} \sum_{m_j m_{j'}} |f_{j m_j \rightarrow j' m_{j'}}|^2. \quad (5)$$

从初始态  $j$  向态  $j'$  跃迁的暗度 (opacity) 函数  $P_{j \rightarrow j'}^j$ , 以及分波截面  $\sigma_{j \rightarrow j'}^j$  分别由下式给出:

$$P_{j \rightarrow j'}^j = \frac{1}{(2j+1)} \sum_{m'} |T_{j \rightarrow j'}^j|^2, \quad (6)$$

$$\sigma_{j \rightarrow j'}^j = \frac{(2J+1)\pi}{k_j^2} P_{j \rightarrow j'}^j. \quad (7)$$

总(积分)截面由分波截面对  $J$  求和而得到.由于随着  $J$  值的增加,跃迁矩阵元  $T_{j \rightarrow j'}^j$  趋于零,求和收敛可做截止处理.对耦合方程(3)用杂化改良的对数-导数爱里传播子 (hybrid modified log-derivative Airy propagator)<sup>[16]</sup>方法求解.

我们在文献[15]中已经对 He- $\text{Na}_2$  势能面的主要特征进行了讨论,即:1)势能面上有两个势阱,较深的势阱在长程区,出现在 He 处于  $\text{Na}_2$  分子的中垂线上,较浅的势阱在短程区域,出现在 He 从其中一个 Na 端接近时.2)相互作用势具有弱的各向异性. He 原子以不同的 Jacobi 角  $\theta$  接近  $\text{Na}_2$  分子时,体系的相互作用能变化不大.对  $R > 13.5 a_0$ ,势能面基本上是吸引的,而对  $R < 13.5 a_0$ ,势能面呈现明显的排斥特性.以下我们将用拟合出的势能函数和密耦方法对 He- $\text{Na}_2$  体系的微分散射截面、积分截面作详细的分析.

## 3. He- $\text{Na}_2$ 体系的微分散射截面

利用分子束技术和激光光谱、飞行时间质谱及离子成像等实验手段,已能从实验上测得态分辨的微分截面<sup>[17,18]</sup>.对微分散射截面的分析,为碰撞动力学和相互作用势的研究提供了有益的信息.本文对(4)式展开系数  $V_{\lambda}(R)$  用 32 点 Gauss-Legendre 积分计算,Legendre 项取到  $\lambda_{\max} = 12$ .再通过适当改变传播子的步长、传播的范围以及基底中包含的转动态数,来进一步检验计算结果的收敛性.图 1 为碰撞能在  $90 \text{ meV}$  ( $726 \text{ cm}^{-1}$ ) 时, He- $\text{Na}_2$  体系在 CC 方法下的非弹性态-态微分截面与质心散射角关系图.从图中不难发现有如下几个主要特征:

1) 弹性散射 ( $\Delta j = 0$ ) 截面远大于非弹性截面.这是由于 He- $\text{Na}_2$  体系是一个弱相互作用体系,  $\text{Na}_2$  是同核双原子分子,没有永久电偶极矩,势能面以各向同性为主要特征,在(4)式中表现为  $V_0$  项远大于其他的非谐性项.

2) He 和  $\text{Na}_2$  的碰撞  $\Delta j$  较小时主要是前向散射.随着  $\Delta j$  的增加,后向散射的概率增加.从经典力学的角度理解  $\Delta j$  较小意味着碰撞引起能量和角动量的转移数值较小,“一擦而过”式的碰撞即可实现,

碰撞前后分子运动的轨迹没有发生大的改变. 随着  $\Delta j$  的增加, 转移的能量和角动量数值增大, 只有 He 原子和 Na<sub>2</sub> 分子的“紧密接触”, 产生大的扭转力矩, 才可能有效实现能量和角动量的转移. 此时碰撞将主要为势能面的排斥部分, 碰撞前后分子运动的轨迹将产生较大的改变.

3) 对非弹性碰撞而言, 以  $\Delta j = 2$  的跃迁为主. 这是 (4) 式展开中  $V_2$  项大于其他高次非谐性项的反映.

4) 对  $j' = 2, 4, 6, 8, 10$  等情形, 微分截面上呈现出振荡结构. 这是从势能面上不同位置处散射的波函数叠加产生的量子干涉效应, 也是势能面存在各向异性的结果.

为了细致地探究势能面上弱的各向异性以及长程部分对散射截面的影响, 我们进一步计算了  $j \rightarrow j'$  的态-态微分截面. 如图 2 是碰撞能为 90 meV 时 Na<sub>2</sub> 分子从  $j \rightarrow j' = 28$  跃迁的态-态分波截面. 对比图 1 我们可以看出  $j \rightarrow j' = 28$  的散射截面与  $j = 0 \rightarrow j'$  的行为是很相似的. 随着碰撞能的减小, 曲线上的振荡结构越加明显, 且振荡峰加宽, 位置向大散射角方向移动. 对这一变化, 我们定性理解为: 较小碰撞能时, 能量转移过程只发生在势能面的外围(长程和“软”的排斥部分)这一区域势能面的各向异性特征明显, 引起从势能面上不同位置处散射的波函数间的量子干涉效应增强, 从而对散射动力学的行为产生影响.

在图 3 的弹性散射  $j = 0 \rightarrow j' = 0$  的微分截面上, 还十分清楚地呈现了我们常在原子-原子散射中见到的“彩虹”现象<sup>[19]</sup>. “彩虹”大致分为两种类型: 碰

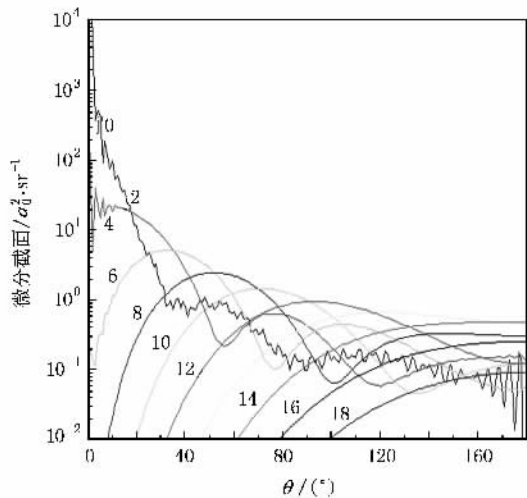


图 1 能量为 90 meV (726 cm<sup>-1</sup>) 时 He-Na<sub>2</sub> 体系在 CC 方法下  $j = 0 \rightarrow j'$  的微分散射截面

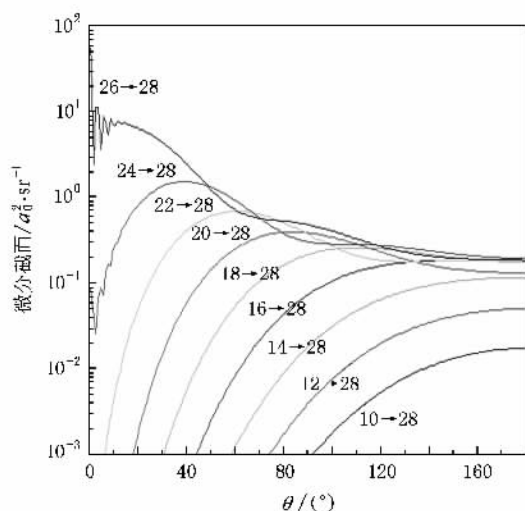


图 2 能量为 90 meV (726 cm<sup>-1</sup>) 时 He-Na<sub>2</sub> 体系在 CC 方法下  $j \rightarrow j' = 28$  的微分散射截面

撞参数彩虹和转动彩虹. 前者类比于原子-原子/分子散射的经典力学处理时, 微分截面在一  $\vartheta_r$  角处发散, 而在量子动力学计算中, 微分截面在该  $\vartheta_r$  角处收敛为一极小. 此极小在纯排斥相互作用时是不出现的. 因此它是弱吸引相互作用体系散射的一个重要特征.  $\vartheta_r$  常称为“彩虹角”. 在外观上表现为大散射截面(“亮边”)处于彩虹角的左侧区域, 而在彩虹角的右侧截面很小(“暗边”). 转动彩虹则发生于当碰撞取样各向异性的相互作用势的排斥核时, 它提供了对势能面排斥核各向异性的直接探测. 它的外观表现与碰撞参数彩虹正好相反, 即彩虹的暗边在彩虹角左侧, 彩虹的亮边在彩虹角的右侧. 由以上讨论可知, 图 3 中  $j = 0 \rightarrow j' = 0$  的微分截面基本属于碰撞参数彩虹的特征结构, 且随着碰撞能的减小, 彩虹角  $\vartheta_r$  向角度增加的方向移动.

进一步我们把角度固定在  $\theta = 60^\circ$  研究了态-态微分截面, 如图 4(a), 可以看出转动最大出现在  $j = 0 \rightarrow j_{\max} = 6$ , 第二个最大出现在  $j' = 2$ . 随着角度的增大, 体系的各项异性逐渐明显, 此时“转动彩虹”的特性将比小角度更明显. 同时从图中可以看出对  $j = 0 \rightarrow j'$  当  $\Delta j = 10$  以后截面基本是保持同样的形状平移. 4(b) 是图 4(a) 中单独把  $\Delta j = 28 - j$  提出来的态-态微分截面, 类似地我们与实验<sup>[20]</sup>作对比画出  $j \rightarrow j' = 28$  时  $\theta_{\text{LAB}} = 12.5^\circ$  和  $\theta_{\text{LAB}} = 8^\circ$  两个角度的微分截面图, 如图 5(a)(b). 在这两个图中  $j = 22$  处我们把实验和理论数据归一化, 图中实验值与理论值符合得较好. 这更说明我们选择的势能面是很精确的.

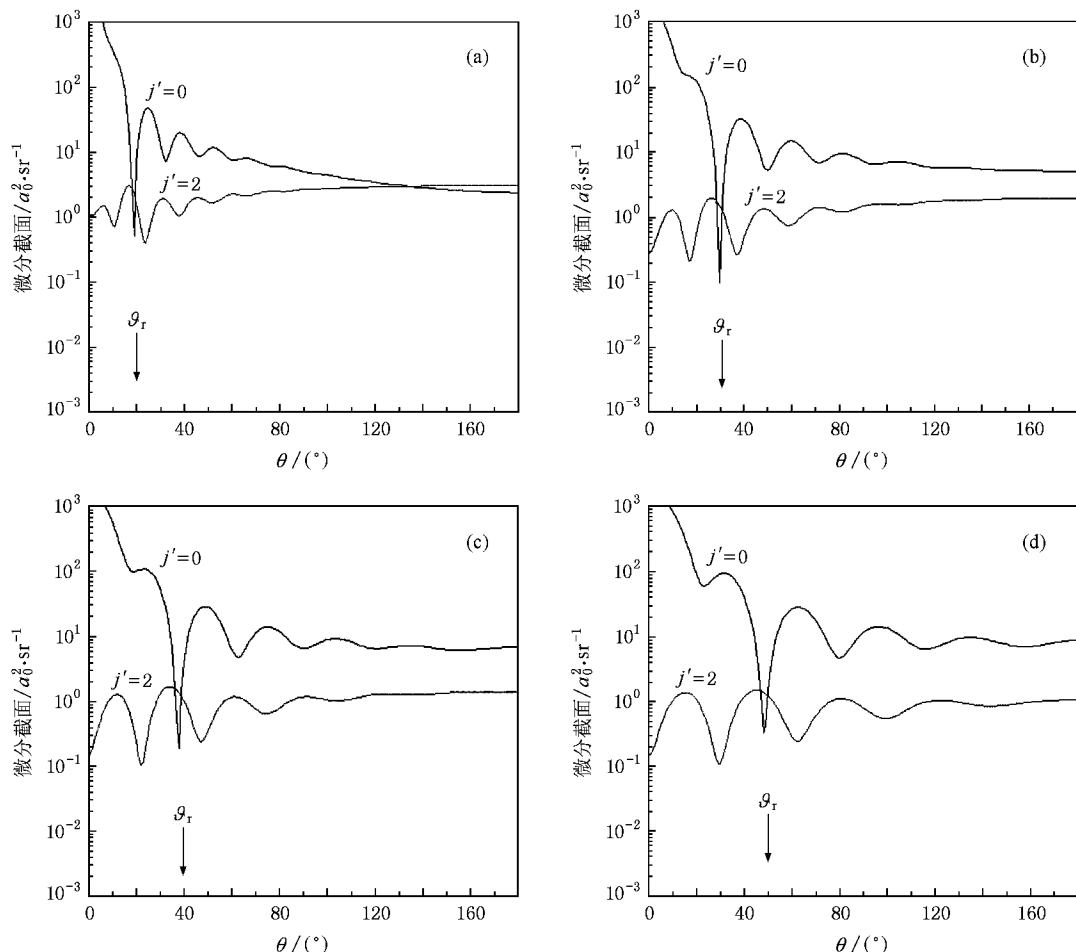


图3 He-Na<sub>2</sub>体系在CC方法下  $j=0 \rightarrow j'=0, 2$  的微分散射截面 (a)  $E=20 \text{ cm}^{-1}$  (b)  $E=8 \text{ cm}^{-1}$  (c)  $E=5 \text{ cm}^{-1}$  (d)  $E=3 \text{ cm}^{-1}$

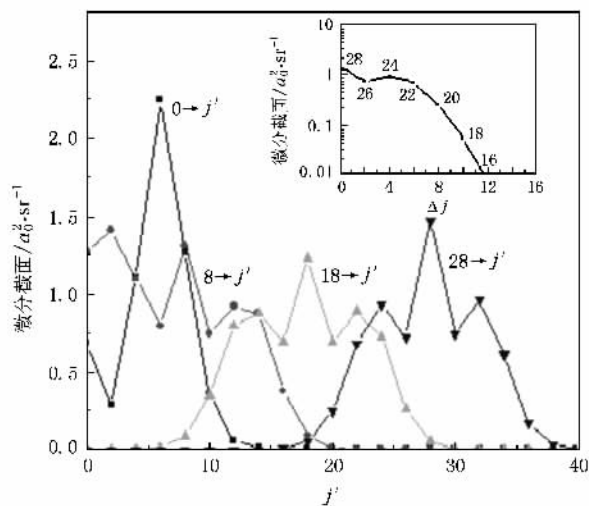


图4 角度固定在  $\theta=60^\circ$  的态-态微分截面 内插图为  $\Delta j=28-j$  的态-态微分截面

#### 4. He-Na<sub>2</sub> 散射体系的积分截面

将微分截面对角度积分,可以得到态-态跃迁的积分(总)截面.如图6,图中标出了8个不同能量下的密耦积分截面.与微分截面的“转动彩虹”相比,通常称之为积分截面的“转动彩虹”.从图中可以看出:与微分截面的“转动彩虹”相比,He-Na<sub>2</sub>体系的积分截面的“转动彩虹”对不同能量表现出的行为大体相同,基本上都呈现出单调递减的特征.这与该体系的弱的各项异性相关.同时随着能量的增加, $j'$ 的积分截面曲线变化更明显.

图7中我们对  $403 \text{ cm}^{-1} \leq E \leq 1815 \text{ cm}^{-1}$ ,  $j=0 \rightarrow j'$  的积分截面进行了具体的分析,在图中所示的能量范围,弹性跃迁截面几乎不随能量变化,大小约为  $100 \text{ \AA}^2$ .  $j'=2-8$  时,曲线变化也不很明显.  $j' \geq 10$  时,截面先随能量的增加而增大,能量继续增加,曲

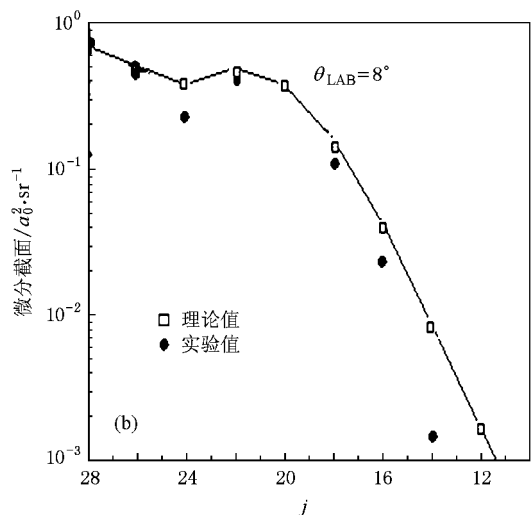
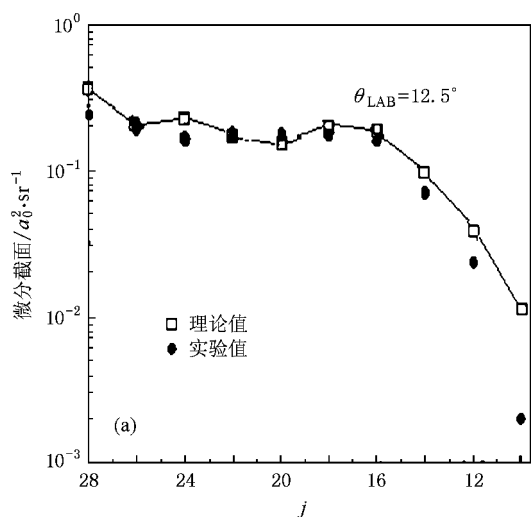


图 5 实验室角度分别在  $\theta_{LAB} = 12.5^\circ$  和  $\theta_{LAB} = 8^\circ$  时  $j \rightarrow j' = 28$  的微分散射截面理论与实验的比较 碰撞能固定在 900 meV 即  $726 \text{ cm}^{-1}$ . (a)  $\theta_{LAB} = 12.5^\circ$  (b)  $\theta_{LAB} = 8^\circ$

线变化也趋缓.

### 5. He 和 Na<sub>2</sub> 分子冷碰撞下转动弛豫

与上面研究的碰撞激发过程相反的另一过程——碰撞弛豫过程,也是量子动力学研究的重要内容.实验上,人们为了对某一动态的过程予以细致的观察,往往应用各种技术手段,使研究对象受激而偏离其平衡状态或平衡位置,并希望较长时间保持这种状态.然而,分子间的碰撞弛豫却试图使对象恢复至平衡位置.原子-分子冷碰撞是影响分子冷却效率和囚禁分子数密度的关键因素.研究实验样品分子在低能下的碰撞动力学行为,对其低温下碰撞弹性

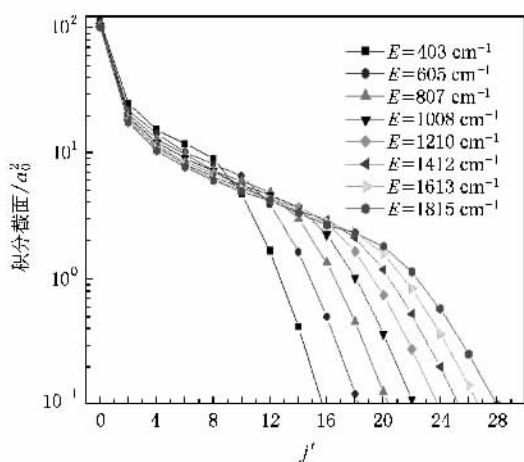


图 6 He-Na<sub>2</sub> 在 CC 方法下的  $0 \rightarrow j'$  碰撞的积分截面

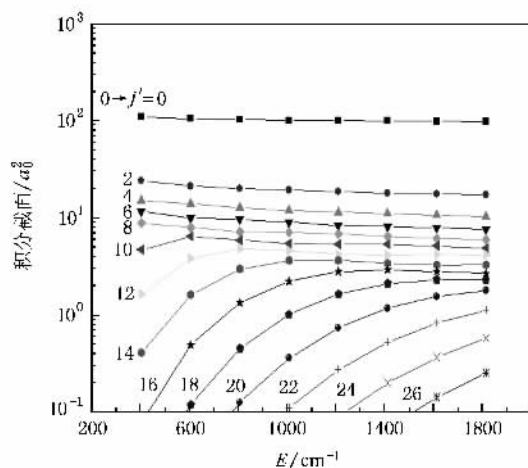


图 7  $j = 0 \rightarrow j'$ , He-Na<sub>2</sub> 在 CC 方法下的积分截面及  $0 \rightarrow j' = 0$  时的所有转动态平均积分截面

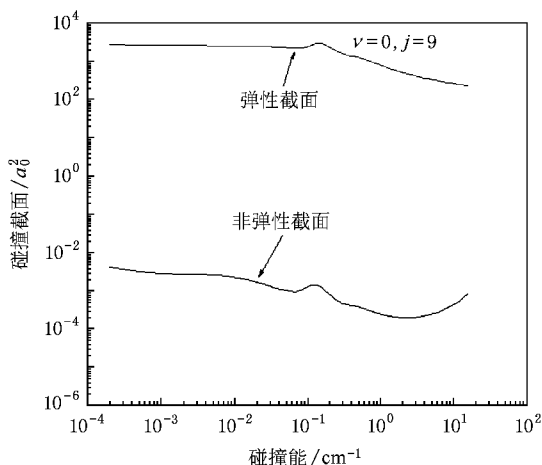


图 8  $\nu = 0, j = 9$  时的碰撞截面随碰撞能的变化关系

和非弹性猝灭速率相对大小从理论上作出预期,对

实验工作具有十分重要的指导意义。

以下我们将从理论方面,研究低碰撞能和冷温度下,激发态  $\text{Na}_2$  分子和 He 原子碰撞弛豫,希望能为可能的 He 缓冲气载带冷却  $\text{Na}_2$  分子实验提供一些有意义的信息。

计算方法基本相同,主要针对基振动态的不同初始转动激发态情形。图 8 是  $\text{Na}_2$  分子处于  $\nu=0, j=9$  时的碰撞弛豫截面随碰撞能的变化关系。图中上部曲线为弹性碰撞,下部分曲线为  $\nu=0, j=9$  的初始态向  $\nu=0, j'=7, 5, 3, 1$  的转动非弹性猝灭跃迁截面的和。

从图上我们可以发现:弹性截面远大于非弹性截面,大体上前者是后者的  $10^6$  倍,远大于较高碰撞能时的相应激发截面的比值。由于非弹性猝灭碰撞改变分子的内态,产生内能向平动能的转移,小的非弹性猝灭截面对减小冷却分子的囚禁损失和蒸发降温是有利的,对  $\text{Na}_2$  分子而言,这可以增加通过辐射光子转移能量的概率。

图 9 进一步详细给出了非弹性转动跃迁的情况。从图中我们可以看到以下几个特征:

1) 弹性截面远大于非弹性截面,这与 (4) 式中  $V_0$  项远大于其他的非谐性项是一致的,反映了势能面上以各向同性为主的特征。同时非弹性截面上  $\nu=0, j=9$  向  $\nu=0, j'=7$  的弛豫截面最大,其次是  $\nu=0, j'=5$ , 即弛豫主要向邻近的转动能级发生,角动量量子数差  $\Delta j$  增大,弛豫截面减小。

2) 碰撞能很低时,弹性截面趋于常数值,非弹性截面随碰撞能的增加线性减小,遵循 Wigner 定则预

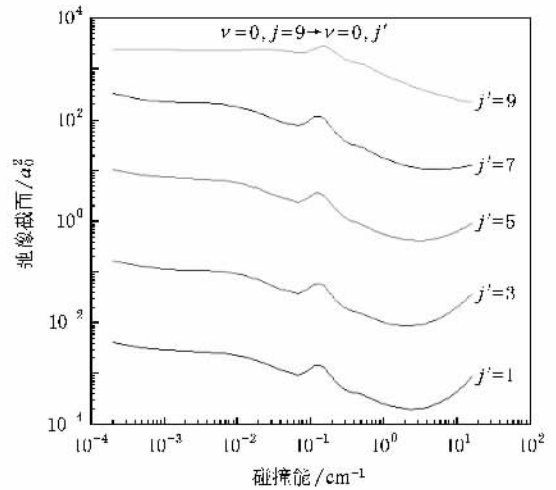


图 9  $\nu=0, j=9$  时的弛豫截面随碰撞能的变化关系

言的趋势。同时当碰撞能在  $0.12 \text{ cm}^{-1}$  左右,截面上出现了明显的共振现象。这是由于离心势垒的作用, He 和  $\text{Na}_2$  分子“临时”形成 He- $\text{Na}_2$  聚合体 (complex) 并处于聚合体的一准束缚态,然后通过离心势垒的隧道贯穿再直接解离,回到两个分开的单体状态。这一现象也存在于其他体系的研究中<sup>[21-29]</sup>。

## 6. 结 论

本文在 He- $\text{Na}_2$  体系的三维势能面上,研究了 He- $\text{Na}_2$  体系的微分散射截面和积分截面,以及在低能时体系冷碰撞的转动弛豫特性。与实验较符合,希望我们的工作对以后实验的研究能有更多的帮助。

[1] Qiu Y, He J, Wang Y H, Wang Q, Zhang T C, Wang J M 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 6227 (in Chinese) [邱英、何军、王彦华、王婧、张天才、王军民 2008 物理学报 **57** 6227]

[2] Mu R W, Li Y L, Ji X M, Yin J P 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 6333 (in Chinese) [沐仁旺、李雅丽、纪宪明、印建平 2006 物理学报 **55** 6333]

[3] Wu H Y, Yin L 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 0490 (in Chinese) [武宏宇、尹澜 2006 物理学报 **55** 0490]

[4] Fioretti A, Comparat D, Crubellier A 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 4402

[5] Donley E A, Claussen N R, Thompson S T 2002 *Nature* **417** 529

[6] Weinstein J D, Carvalho R, Guillet T 1998 *Nature* **359** 148

[7] Bethlem H L, Berden G, Meijer G 1999 *Phys. Rev. Lett.* **83** 1558

[8] Jochim S, Bartensin M, Altmeyer A 2003 *Science* **302** 2101

[9] Greiner A, Regal C A, Jin D S 2003 *Nature* **426** 537

[10] Weinstein J, Guillet T, Doyle J M 1998 *Nature* **395** 148

[11] Egorov D, Campbell W C, Friedrich B 2004 *Eur. Phys. J. D* **31** 307

[12] Zoller P 2002 *Nature* **417** 493

[13] Launay J M 1977 *J. Phys. B* **10** 3665

[14] Arthurs A M, Dalgarno A 1960 *Proc. Roy. Soc. London A* **256** 540

[15] Wang Y, Huang W Y, Feng E Y, Cui Z F 2008 *Sci. Chin. Ser. B* **51** 539

[16] Manolopoulos D E, Alexander M H 1987 *J. Chem. Phys.* **86** 2044

[17] Kohguchi H, Suzuki T, Alexander M H 2001 *Science* **294** 832

[18] Lorenz K T, Chandler D W, Barr J W 2001 *Science* **293** 2063

[19] Wolfgang M, Reinhard S 1981 *J. Chem. Phys.* **75** 1219

- [ 20 ] Reinhard S , Wolf G , Wilfried M 1980 *J. Chem. Phys.* **74** 976
- [ 21 ] Yu C R , Song X S , Cheng X L , Yang X D , Shen C S 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 3446 ( in Chinese ) [ 余春日、宋晓书、程新路、杨向东、申传胜 2008 物理学报 **57** 3446 ]
- [ 22 ] Stoecklin T , Voronin A , Rayez J C 2002 *Phys. Rev. A* **66** 042703
- [ 23 ] Stoecklin T , Voronin A , Rayez J C 2003 *Phys. Rev. A* **68** 032716
- [ 24 ] Flasher J C , Forrey R C 2002 *Phys. Rev. A* **65** 032710
- [ 25 ] Stoecklin T , Voronin A , Rayez J C 2003 *Chem. Phys.* **294** 117
- [ 26 ] Stoecklin T , Voronin A , Rayez J C 2004 *Chem. Phys.* **298** 175
- [ 27 ] Balakrishnan N , Groenenboom G C , Krens R V , Dalgarno A 2003 *J. Chem. Phys.* **118** 7386
- [ 28 ] Cybulski H R , Krens V , Sadeghpour H R , Dalgarno A 2005 *J. Chem. Phys.* **122** 94307
- [ 29 ] Krens R V , Sadeghpour H R , Dalgarno A , Zgid D 2003 *Phys. Rev. A* **68** 051401

## Low-temperature collisions of Na<sub>2</sub> with He<sup>\*</sup>

Wang Yue<sup>1)</sup> Dong De-Zhi<sup>1)</sup> Li Wei-Yan<sup>1)</sup> Feng Er-Yin<sup>2)†</sup> Cui Zhi-Feng<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup> Department of Electrical Engineering , Tongling University , Tongling 244000 , China )

<sup>2)</sup> College of Physics and Electronic Information , Anhui Normal University , Wuhu 241000 , China )

( Received 10 December 2008 ; revised manuscript received 7 January 2009 )

### Abstract

The close coupling calculation of rotationally inelastic collision of He with Na<sub>2</sub> is first performed by employing a recently computed *ab initio* potential energy surface. The process of rovibrational energy excitation and relaxation of Na<sub>2</sub> in collision with He has been studied in detail based on the single and double excitations coupled cluster with a noniterative perturbation treatment of triple excitations CCSD( T ) potential energy surface. Our results are in good agreement with the experimental results. Our results show that : ( 1 ) The elastic cross section (  $\Delta j = 0$  ) is much larger than the inelastic cross section. ( 2 ) The largest amplitude occurs at small scattering angles. At low  $\Delta j$  transition , the He projectile is predominantly forward scattering. Backward scattering occurs as  $\Delta j$  increases. ( 3 ) For inelastic cross section , the most effective transition is that with  $\Delta j = 2$ . ( 4 ) The fast narrow diffraction oscillations in the cross sections are the obvious characteristics for the low  $\Delta j$  inelastic transitions , which decreases with increasing  $j$ . ( 5 ) The elastic differential-cross-sections ( DCS ) provides a useful visualization of rotational rainbows at low translational energy. It is beneficial to reducing the loss in molecular cooling and trapping.

**Keywords** : He-Na<sub>2</sub> collision system , close coupling calculations , differential cross section , integral cross section

**PACC** : 3440 , 3450

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant No. 10874001 ) , the Key Program of Science and Technology Research of Ministry of Education of China ( Grant No. 208057 ) , the Natural Science Foundation of Anhui Province , China ( Grant No. 070416236 ) , and the Natural Science Foundation of Tongling University , China ( Grant No. 2008tlxykj005 ).

† Corresponding author. E-mail : fengbf@mail.ahnu.edu.cn ; wangyue8001@sohu.com