

氦同位素与氢分子碰撞的振转激发分波截面研究*

王晓璐¹⁾²⁾ 徐梅²⁾ 令狐荣锋¹⁾²⁾ 孙克斌¹⁾ 杨向东^{1)†}

1) (四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065)

2) (贵州师范大学物理与电子科学学院, 贵阳 550001)

(2009 年 5 月 10 日收到; 2009 年 6 月 5 日收到修改稿)

用密耦近似方法和 Tang-Toennies 势模型计算了 $E = 0.7$ eV 时, 氦原子的四种同位素 ^3He , ^4He , ^9He , ^{10}He 与氢分子 H_2 碰撞体系的振转激发分波截面. 通过分析各碰撞体系分波截面的差异, 探讨了 $\text{He} (^3\text{He}, ^4\text{He}, ^9\text{He}, ^{10}\text{He})\text{-H}_2$ 碰撞体系的弹性碰撞、纯转动激发和振转激发情况下, 其分波截面随量子数和体系约化质量的变化规律.

关键词: 振转激发, 分波截面, 同位素替代

PACC: 3440, 3450

1. 引言

原子与分子碰撞激发在原子分子物理学研究中占有十分重要的地位, 其研究为冲击波、声波、风洞流扩张的快速压缩过程中出现的弛豫现象、气相反应和输运性质、气体激光、转动激发的共振荧光过程及星际空间云团的冷却过程等科技领域提供了适用的方法和大量的参考信息. 从大量文献^[1-6]可以看出, 在原子分子碰撞过程中, 振动和转动激发截面的研究是当前原子-分子碰撞研究的主攻方向.

氦原子与氢分子碰撞作为简单的原子分子碰撞体系的物理模型, 其势能面是两个中性闭壳层系统各向异性相互作用的最简单例子, 所以氦原子和氢分子碰撞无论在实验上, 还是在理论上都引起人们的普遍关注. 由于氢分子的振转能级间隔较宽, 因此, 密耦近似方法非常适用于该碰撞体系. 另外, 因为原子分子间的相互作用势主要由核外电子的运动决定, 而在很小程度上依赖原子核, 所以同位素替代有可能提供更多有价值的信息. 但对于同位素替代效应的研究尚处于探索阶段, 并且, 一直以来对低入射能量下, He-H_2 碰撞体系的转动激发分

波截面的研究很多^[7-16], 但是在较高入射能量下, 对 He-H_2 碰撞体系的振转激发分波截面的研究却很少. 因此, 本文拟采用密耦近似方法^[17,18]和 Tang 和 Toennies 的势模型^[19-22]对 $\text{He} (^3\text{He}, ^4\text{He}, ^9\text{He}, ^{10}\text{He})\text{-H}_2$ 碰撞体系的分波截面进行量子力学计算. 探讨在 He 的同位素替代情形下, $\text{He} (^3\text{He}, ^4\text{He}, ^9\text{He}, ^{10}\text{He})\text{-H}_2$ 碰撞体系的弹性碰撞、纯转动激发和振转激发的分波截面随量子数和体系约化质量的变化规律.

2. 理论计算方法

在 Born-Oppenheimer 近似下, 原子 (A) 和双原子分子 (BC) 碰撞体系的总波函数 $\psi_{\alpha}^{(+)}(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ 满足 Schrödinger 方程为

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

总 Hamiltonian 可表示为

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

式中, θ 如图 1 所示, $\cos\theta = \mathbf{R} \cdot \mathbf{r}$, $\mu_{A,BC}$ 和 μ_{BC} 分别是总体系和双原子分子的约化质量, $V(\mathbf{R}, \mathbf{r}, \cos\theta)$ 是碰撞体系的相互作用势.

* 国家自然科学基金 (批准号: 10974139, 10964002, 60971078), 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基金 (批准号: 2005105), 贵州省优秀科技教育人才省长专项基金 (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 2007-1-01) 资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: xdyang@scu.edu.cn

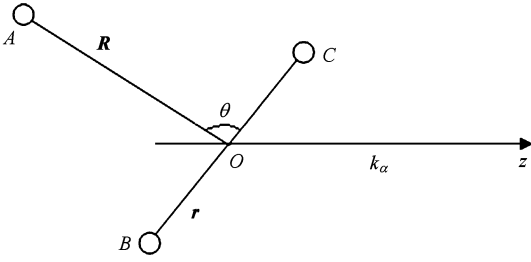


图 1 原子与双原子分子碰撞几何图

体系的总波函数可以写成

$$\psi_a^{(+)}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \frac{1}{k_\alpha R} \sum_{n_\gamma, l_\gamma, J_\gamma} g_{n_\gamma, l_\gamma, J_\gamma}^J g_{n_\alpha, l_\alpha, M_\alpha}^J(R) \times \varphi_{n_\gamma, l_\gamma}(r) Y_{JM_\alpha}^{l_\gamma}(\mathbf{R}, \mathbf{r}), \quad (3)$$

式中 $g(R)$ 是入射原子相对分子质心运动的径向波函数, $\varphi(r)$ 是双原子分子振转波函数的径向部分, $Y(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ 代表原子围绕分子转动和靶分子转动的总角函数. 双原子分子的振动波函数 $\varphi_{n_\gamma, l_\gamma}(r)$ 满足径向方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu_{BC}} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{J_\gamma(J_\gamma + 1)\hbar^2}{2\mu_{BC}r^2} + V_{BC}(r) \right] \times \varphi_{n_\gamma, l_\gamma}(r) = \varepsilon_{n_\gamma, l_\gamma} \varphi_{n_\gamma, l_\gamma}(r). \quad (4)$$

把(2), (3)和(4)式代入(1)式, 然后两边乘上 $\varphi_{n_\beta, l_\beta}^*$ $Y_{JM_\alpha}^{l_\beta}(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ 并积分, 可得

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial R^2} - \frac{l_\beta(l_\beta + 1)}{R^2} + k_\beta^2 \right) g_{n_\beta, l_\beta, J_\beta}^J g_{n_\alpha, l_\alpha, M_\alpha}^J(R) = \frac{2\mu_{A,BC}}{\hbar^2} \sum_{n_\gamma, l_\gamma, J_\gamma} V_{n_\beta, l_\beta, J_\beta, n_\gamma, l_\gamma, J_\gamma}^J(R) g_{n_\beta, l_\beta, J_\beta, n_\alpha, l_\alpha, M_\alpha}^J(R). \quad (5)$$

方程(5)就是计算原子与双原子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_γ , 原子绕分子转动量子数 l_γ , 和靶分子自身转动量子数 J_γ 求和. 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式给出:

$$\sigma_{n_\alpha, l_\alpha \rightarrow n_\beta, l_\beta}^J = \frac{1}{(2J_\alpha + 1)} \frac{4\pi}{k_\alpha^2} \sum_{M_\alpha} (2l_\beta + 1) \times |T_{n_\beta, l_\beta, J_\beta, n_\alpha, l_\alpha, M_\alpha}^J|^2. \quad (6)$$

3. 计算结果及讨论

当入射原子能量 $E = 0.7 \text{ eV}$, 分别计算氦同位素 ^3He , ^4He , ^9He , ^{10}He 与氢分子 H_2 碰撞体系的分波截面. 其中, 弹性碰撞 00-00 分波截面的计算结果如图 2 所示.

从图 2 可以看出, 对于 $\text{He} (^3\text{He}, ^4\text{He}, ^9\text{He}, ^{10}\text{He})\text{-H}_2$ 碰撞系统的弹性碰撞分波截面, 入射能量

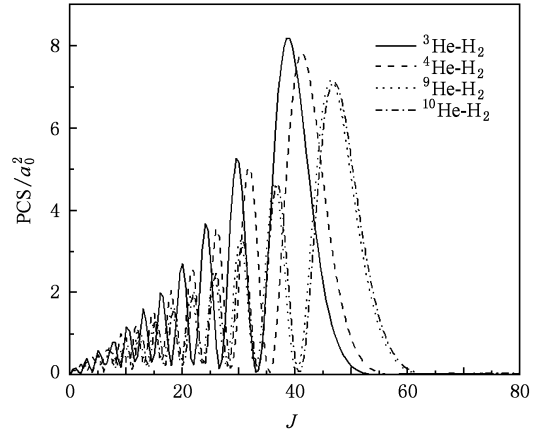


图 2 $\text{He} (^3\text{He}, ^4\text{He}, ^9\text{He}, ^{10}\text{He})\text{-H}_2$ 碰撞体系 00-00 分波截面 ($E = 0.7 \text{ eV}$)

一定时, 分波截面均随转动量子数 J 的增加而发生多次振荡, 且振荡幅度越来越大, 直到达到一个极大值 σ_{\max} , 然后迅速收敛; 但截面振荡的极大值位置随入射原子质量的增加会逐渐向 J 增大的方向移动, 且极大值依次变小. 这是因为当研究中心力场中的散射问题时, 考虑半经典公式^[23] $L \leq ka$, 粒子被中心场散射的条件是其轨道角动量量子数 L 应不大于入射粒子对应的德布罗意波波数 k 与中心场有效势作用半径 a 的乘积, 而入射粒子对应的德布罗意波波数 k 与入射粒子的质量 μ 以及动能 E 有如下关系: $k = \sqrt{2\mu E}/\hbar$, 因此, 我们可以得到收敛的总截面所需计算的分波数可表示为 $L \leq a \sqrt{2\mu E}/\hbar$. 如果只考虑分子的转动激发, 入射通道的总角动量与轨道角动量相等, 即 $J = L \leq a \sqrt{2\mu E}/\hbar$. 又由于在 Born-Oppenheimer 近似下, 同位素替代不改变体系的相互作用势能面的形状, 所以, 对不同的碰撞体系 ($^3\text{He-H}_2$, $^4\text{He-H}_2$, $^9\text{He-H}_2$, $^{10}\text{He-H}_2$), 应有相同的有效势作用半径 a . 这样, 体系收敛所需的分波数与入射能量和体系约化质量的乘积 μE 的开方成正比, 即 $J \propto \sqrt{\mu E}$. 因此, 入射能量一定时, 随着体系的约化质量逐渐增加, 弹性分波截面振荡极大值的位置依次向 J 增大的方向移动. 并且, 随着入射原子质量的增加, 产生非弹性激发跃迁的概率将增大, 所以极大值依次变小.

图 3—图 6 分别是入射能量 $E = 0.7 \text{ eV}$ 时, $\text{He} (^3\text{He}, ^4\text{He}, ^9\text{He}, ^{10}\text{He})\text{-H}_2$ 碰撞体系 00-02, 00-04, 00-06, 00-08 的非弹性碰撞转动激发分波截面. 可以看出, 非弹性碰撞的转动激发分波截面随量子数 J 的变化曲线的形状相似, 截面出现一个极大值 σ_{\max} 后

便很快趋于零. 入射能量相同时, 随着同位素原子质量(即入射原子质量)的增加, 散射极大值的位置向 J 增大的方向移动. 其中, 00-08 转动激发发生时, 分波截面的极大值随着 He 同位素约化质量的增加, 出现较显著的变化, 如图 6 所示. 这是由于 00-08 转动激发能 $E = 0.4993$ eV, 和 00-10 振动激发能 $E = 0.5156$ eV 十分接近, 因此, 曲线融合了转动激发和振动激发的特征, 这从图 6 和图 7 的比较可以看出.

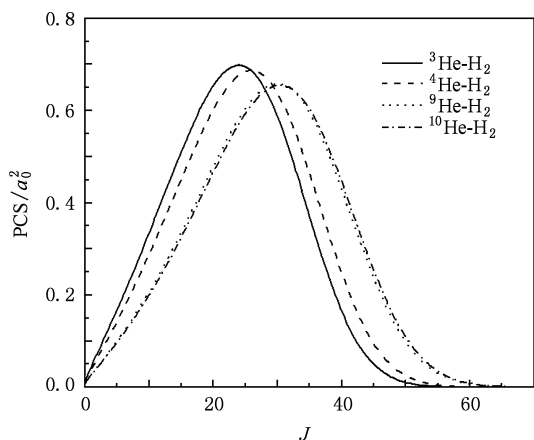


图 3 He(^3He , ^4He , ^9He , ^{10}He)- H_2 碰撞体系 00-02 分波截面 ($E = 0.7$ eV)

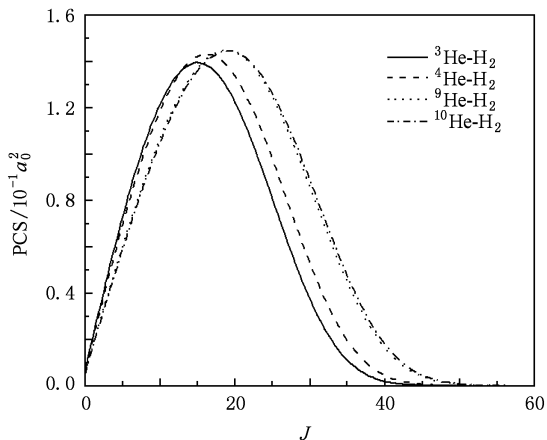


图 4 He(^3He , ^4He , ^9He , ^{10}He)- H_2 碰撞体系 00-04 分波截面 ($E = 0.7$ eV)

图 7—图 9 分别表示入射能量 $E = 0.7$ eV 时, He(^3He , ^4He , ^9He , ^{10}He)- H_2 碰撞体系 00-10, 00-12, 00-14 的非弹性碰撞振转激发分波截面随量子数 J 增加的变化. 从图中可以看出, He(^3He , ^4He , ^9He ,

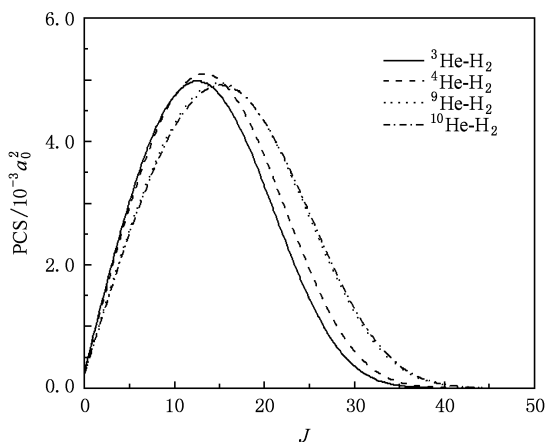


图 5 He(^3He , ^4He , ^9He , ^{10}He)- H_2 碰撞体系 00-06 分波截面 ($E = 0.7$ eV)

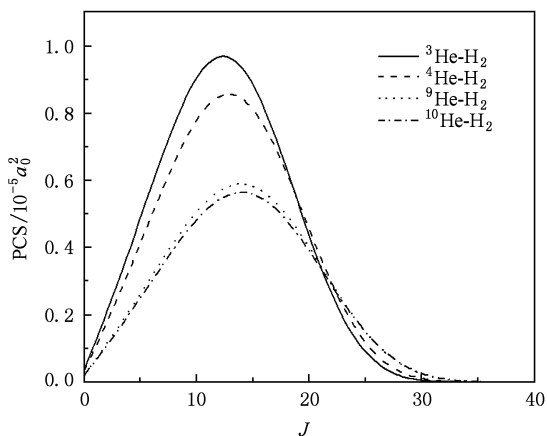


图 6 He(^3He , ^4He , ^9He , ^{10}He)- H_2 碰撞体系 00-08 分波截面 ($E = 0.7$ eV)

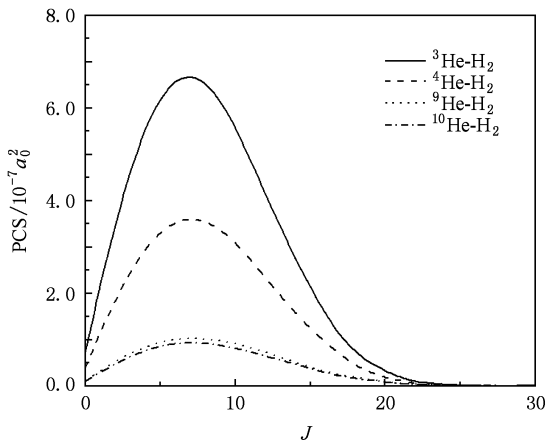


图 7 He(^3He , ^4He , ^9He , ^{10}He)- H_2 碰撞体系 00-10 分波截面 ($E = 0.7$ eV)

^{10}He)- H_2 碰撞的振转激发分波截面 00-10, 00-12, 00-

14 随量子数 J 增加的变化趋势十分接近,但 $^3\text{He}-\text{H}_2$ 和 $^4\text{He}-\text{H}_2$ 碰撞分波截面的极大值几乎相差一倍;而 $^9\text{He}-\text{H}_2$ 和 $^{10}\text{He}-\text{H}_2$ 碰撞分波截面的极大值相差不大.

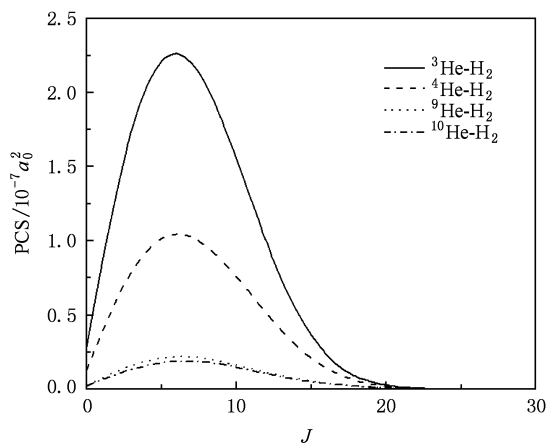


图 8 He(^3He , ^4He , ^9He , ^{10}He)- H_2 碰撞体系 00-12 分波截面 ($E = 0.7 \text{ eV}$)

本文系统计算了氦同位素 ^3He , ^4He , ^9He , ^{10}He

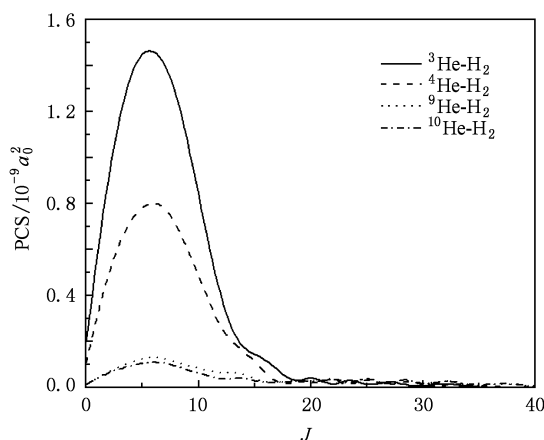


图 9 He(^3He , ^4He , ^9He , ^{10}He)- H_2 碰撞体系 00-14 分波截面 ($E = 0.7 \text{ eV}$)

与氢分子 H_2 碰撞的 00-00, 00-02, 00-04, 00-06, 00-08, 00-10, 00-12, 00-14 转动和振动激发截面, 各碰撞体系的分波截面收敛分波数 J , 碰撞截面极大值位置 J_{max} 及极大值大小 $\sigma_{\text{max}}(a_0^2)$ 如表 1 所示.

表 1 不同 He- H_2 碰撞体系的 00-00, 00-02, 00-04, 00-06, 00-08, 00-10, 00-12, 00-14 分波截面的极大值位置 J_{max} 及大小 $\sigma_{\text{max}}(a_0^2)$ 和分波截面收敛分波数 J

		00-00	00-02	00-04	00-06	00-08	00-10	00-12	00-14
$^3\text{He}-\text{H}_2$	σ_{max}	8.17	0.70	0.14	4.98×10^{-3}	9.68×10^{-6}	6.67×10^{-7}	2.26×10^{-7}	1.46×10^{-9}
	J_{max}	39	24	15	12	12	7	6	6
	J	54	52	42	37	32	25	22	18
$^4\text{He}-\text{H}_2$	σ_{max}	7.84	0.69	0.14	5.10×10^{-3}	8.56×10^{-6}	3.60×10^{-7}	1.04×10^{-7}	8.00×10^{-10}
	J_{max}	41	26	16	13	13	7	6	6
	J	57	55	44	38	33	24	21	17
$^9\text{He}-\text{H}_2$	σ_{max}	7.14	0.66	0.15	4.96×10^{-3}	5.89×10^{-6}	1.02×10^{-7}	2.18×10^{-8}	1.32×10^{-10}
	J_{max}	46	30	19	15	14	7	6	6
	J	63	62	51	43	35	24	20	15
$^{10}\text{He}-\text{H}_2$	σ_{max}	7.14	0.66	0.15	4.92×10^{-3}	5.65×10^{-6}	9.29×10^{-8}	1.88×10^{-8}	1.10×10^{-10}
	J_{max}	47	30	19	15	14	7	7	6
	J	64	63	51	44	36	24	20	14

综合分析表 1, 我们可以看出

1) 当入射原子质量一定时, He(^3He , ^4He , ^9He , ^{10}He)- H_2 各碰撞体系中, 00-00, 00-02, 00-04, 00-06, 00-08, 00-10, 00-12, 00-14 碰撞分波截面的收敛速度均越来越快; 各碰撞分波截面的极大值也在迅速减小. 以 $^3\text{He}-\text{H}_2$ 为例, 计算所需分波数分别为 54, 52, 42, 37, 32, 25, 22, 18; 极大值分别为 $8.17a_0^2$, $0.70a_0^2$, $0.14a_0^2$, $4.98 \times 10^{-3}a_0^2$, $9.68 \times 10^{-6}a_0^2$, 6.67×10^{-7}

a_0^2 , $2.26 \times 10^{-7}a_0^2$, $1.46 \times 10^{-9}a_0^2$.

2) 当入射原子质量一定时, He(^3He , ^4He , ^9He , ^{10}He)- H_2 各碰撞体系中, 00-00, 00-02, 00-04, 00-06, 00-08, 00-10, 00-12, 00-14 碰撞分波截面的极大值出现的位置总体向 J 减小的方向移动. 以 $^3\text{He}-\text{H}_2$ 为例, J_{max} 分别为 39, 24, 15, 12, 12, 7, 6, 6. 由此可以看到: 在入射原子质量一定的情况下, 当 He- H_2 碰撞体系只有转动激发发生时, 碰撞分波截面的极大值

位置随激发态增高, 迅速向 J 减小的方向移动; 而在振转激发同时发生时, 碰撞分波截面的极大值位置变化不大, 如 $^3\text{He}-\text{H}_2$ 系统, 00-10, 00-12, 00-14 的极大值位置 J_{\max} 分别为 7, 6, 6.

3) 随着 He 同位素质量的增加, He (^3He , ^4He , ^9He , ^{10}He)- H_2 各碰撞体系中, 弹性碰撞 00-00 的极大值位置 J_{\max} 逐渐变大, 分别为 39, 41, 46, 47; 而收敛速度会变慢, 计算所需分波数 J 分别为 54, 57, 63, 64.

4) 纯转动激发 00-02, 00-04, 00-06, 00-08 的分波截面变化规律与弹性碰撞 00-00 相似, 但是当振转激发同时发生时, 00-10, 00-12, 00-14 碰撞分波截面收敛的速度不同于前面纯转动激发, 会随同位素质量的增加, 计算所需分波数 J 缓慢变小, 如对 00-14, 收敛分波数 J 分别为 18, 17, 15, 14. 也就是说, 转动激发的分波截面随入射原子质量的增加, 收敛速度越来越慢; 但振转激发的分波截面随入射原子质量的增加, 收敛速度有变快的趋势. 以 00-02 和 00-14 分波截面为例, 00-02 计算所需的分波数为 52, 55, 62, 63, 而 00-14 计算所需的分波数为 18, 17, 15, 14.

4. 结 论

本文通过计算入射原子能量 $E = 0.7 \text{ eV}$, He (^3He , ^4He , ^9He , ^{10}He)- H_2 碰撞体系的分波截面, 探

讨了各碰撞体系的弹性碰撞、纯转动激发和振转激发情况下, 其分波截面随量子数和体系约化质量的变化规律, 总结出:

当入射原子质量一定时, He- H_2 各碰撞体系中, 激发态越高, 分波截面收敛速度越快; 碰撞分波截面的极大值随能级的升高迅速减小, 低激发态比高激发态更容易被激发; 并且, 碰撞分波截面的极大值出现的位置总体表现出向量子数 J 减小的方向移动. 其中, 只有转动激发发生时, 碰撞分波截面的极大值位置随激发态增高, 迅速向 J 减小的方向移动; 而在振转激发同时发生时, 碰撞分波截面的极大值位置变化不大.

随着 He 同位素质量的增加, He- H_2 各碰撞体系中, 第一, 弹性碰撞的极大值位置逐渐变大, 而收敛速度会变慢; 纯转动激发分波截面的变化规律与弹性碰撞相似, 随入射原子质量的增加, 收敛速度越来越慢; 但振转激发的分波截面随入射原子质量的增加, 收敛速度有变快的趋势. 第二, 弹性碰撞和转动激发的分波截面极大值没有随着 He 同位素质量的增加而出现较大的变化, 但 00-08 截面同时表现出转动激发和振动激发的特征. 振转激发的分波截面极大值随着 He 同位素质量的增加, 出现明显的减小, 其中, $^3\text{He}-\text{H}_2$ 和 $^4\text{He}-\text{H}_2$ 碰撞分波截面的极大值几乎相差一倍, 而 $^9\text{He}-\text{H}_2$ 和 $^{10}\text{He}-\text{H}_2$ 碰撞分波截面的极大值相差不大.

- [1] Takayanagi K 1965 *Adv. At. Mol. Phys.* **1** 149
- [2] Yang X D, Zhang J Y, Jing F Q 1998 *Chin. Phys. Lett.* **1** 14
- [3] Yang X D, Jiang D Q, Zhang J Y 2001 *J. Sichuan University (Engineering Science Edition)* **33** 30 (in Chinese) [杨向东、蒋德琼、张继彦 2001 四川大学学报(工程科学版) **33** 30]
- [4] 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]
- [5] Yu C R, Wang R K, Zhang J, Yang X D 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 229 (in Chinese) [余春日、汪荣凯、张杰、杨向东 2009 物理学报 **58** 229]
- [6] Yu C R, Wang R K, Yang X D, Yin X C 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 2906 (in Chinese) [余春日、汪荣凯、杨向东、尹训昌 2008 物理学报 **57** 2906]
- [7] Shen G X, Linghu R F, Wang R K, Yang X D 2007 *Chin. Phys.* **16** 3352
- [8] Yu C R, Feng E Y, Wang R K, Yang X D 2006 *Chin. Phys.* **15** 2571
- [9] Zhu J, Xie W, Yang X D 1998 *J. At. Mol. Phys.* **15** 533 (in Chinese) [朱俊、谢文、杨向东 1998 原子与分子物理学报 **15** 533]
- [10] Zhang R, Liu G 2001 *J. At. Mol. Phys.* **18** 457 (in Chinese) [张茹、刘刚 2001 原子与分子物理学报 **18** 457]
- [11] Xu M, Shen G X, Wang R K, Linghu R F 2008 *J. Sichuan Normal University* **31** 576 (in Chinese) [徐梅、沈光先、汪荣凯、令狐荣锋 2008 四川师范大学学报 **31** 576]
- [12] Shen G X, Wang R K, Linghu R F, Yang X D 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 155 (in Chinese) [沈光先、汪荣凯、令狐荣锋、杨向东 2008 物理学报 **57** 155]
- [13] Wang C X, Sun G H, Yang X D 2000 *J. Sichuan University (Engineering Science Edition)* **32** 114 (in Chinese) [王彩霞、孙桂华、杨向东 2000 四川大学学报(工程科学版) **32** 114]
- [14] 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]

- [15] Feng Y B, Zhang J Y, Jiang D Q 2000 *J. At. Mol. Phys.* **17** 477 (in Chinese) [冯一兵、张继彦、蒋德琼 2000 原子与分子物理学报 **17** 477]
- [16] Deng X R, Feng Y B, Jiang D Q 2005 *J. Sichuan Normal University(Natural Science)* **28** 452 (in Chinese) [邓学儒、冯一兵、蒋德琼 2005 四川师范大学学报(自然科学版) **28** 452]
- [17] Curtiss C F 1970 *J. Chem. Phys.* **52** 1078
- [18] Gordon M D, Secrest D 1970 *J. Chem. Phys.* **52** 120
- [19] Tang K T, Toennies J P 1984 *J. Chem. Phys.* **80** 3726
- [20] Tang K T, Toennies J P 1981 *J. Chem. Phys.* **74** 1148
- [21] Tang K T, Toennies J P 2003 *J. Chem. Phys.* **118** 4976
- [22] Partridge H, Stallcop J R, Levin E 2001 *J. Chem. Phys.* **115** 6471
- [23] Bransden B H 1979 *Atomic Collisions Theory* (the Benjamin/cummings publishing company inc.)

Theoretical study on the partial wave cross sections of vibrational and rotational excitation for the collisions of He isotope with H₂ *

Wang Xiao-Lu¹⁾²⁾ Xu Mei²⁾ Linghu Rong-Feng¹⁾²⁾ Sun Ke-Bin¹⁾ Yang Xiang-Dong^{1)†}

1) (Institute of Atomic and Molecular Physics, Sichuan University, Chengdu 610065, China)

2) (School of Physics and Electronic Science, Guizhou Normal University, Guiyang 550001, China)

(Received 10 May 2009; revised manuscript received 5 June 2009)

Abstract

In this paper, the close-coupling method and the Tang-Toennies potential are applied to the collisions of ³He, ⁴He, ⁹He and ¹⁰He with H₂ systems when the incident energy is 0.7 eV. The vibrational and rotational excitation cross sections are calculated. By analyzing the partial wave cross sections, the changing tendencies of the partial wave cross sections with the quantum number and reduced mass in the isotopic substitution systems are obtained.

Keywords: vibrational and rotational excitation, partial wave cross section, isotope substitution

PACC: 3440, 3450

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10974139, 10964002, 60971078), the Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education of China (Grant No. 20050610010), the Key Program of the Natural Science Foundation of the 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. QSZHZ2006(113)) and Scientific Research Foundation of Young Teacher of Guizhou Normal University (Grant No. XKQ 2007-1-01).

† Corresponding author. E-mail: xdyang@scu.edu.cn