

Ne 原子与 H₂ 分子碰撞的同位素替代效应研究*

令狐荣锋^{1) 2)} 徐 梅¹⁾ 王晓璐^{1) 2)} 吕 兵^{1) 2)} 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 6 月 30 日收到; 2009 年 7 月 30 日收到修改稿)

使用密耦近似 (Close-Coupling) 方法、采用 Tang-Toennies 势模型计算了惰性气体原子 Ne 与 H₂ 分子及同位素 D₂ 分子在碰撞能量为 83.8 meV 时的微分散射截面及分波截面, 并与实验值和文献值进行比较. 计算得到的微分散射截面值与实验值符合得较好, 分波截面值与文献值也相符合. 使用同样的方法和模型, 文中对 Ne-H₂ (D₂, T₂) 三个体系的微分截面和分波截面进行了系统计算和比较分析, 得出对称同位素替代碰撞体系的散射截面规律.

关键词: Ne-H₂ (D₂, T₂) 碰撞, Tang-Toennies 势模型, 密耦方法, 同位素替代

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, 原子分子碰撞在很多物理过程中扮演着重要角色, 如气体激光、共振荧光过程、等离子体物理、气相弛豫过程、气相反应和输运性质、大气物理、星际空间云团的冷却过程等等^[1]. 碰撞作用机理及计算方法的研究成果为以上各领域实验现象的解释、可观测量的预言提供了大量的参考信息. 随着交叉分子束实验技术的发展, 碰撞散射实验成为获得原子分子间相互作用势信息的理想途径, 碰撞过程的计算研究是测试、验证假设势能模型的有效方法.

通过对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 H₂ 分子之间的相互作用及碰撞十分关注^[2-14], 这是因为通过对原子与 H₂ 分子及其同位素分子碰撞的研究, 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, 可以得到一些从实验中难以得到的数据. 对于 He-H₂ 碰撞系统, 已有较多研究, 其中 Tadeusz^[15] 用从头算势能面计算了

He-H₂ 系统的振转去激发截面, 结果与实验符合较好; Tang 和 Teonies^[16] 在理论和实验上对 He-H₂ 的相互作用势及散射截面进行了深入的研究; John 等^[17] 用准经典轨道方法对 He-H₂ 碰撞系统的分子能量转移进行了计算, 对碰撞振动弛豫和高温离解过程进行了讨论等. 我们曾用 Tang-Toennies (T-T) 势模型和密耦近似方法^[18-20] 计算了 He 同位素与 H₂, D₂, T₂, 及 He 与卤化氢分子等体系, 取得了一些成果, 计算结果与文献和实验相符.

对于 Ne-H₂ 碰撞系统, 实验研究和理论计算的报道都较少, Faubel 等^[21] 通过分子束实验研究了 Ne-H₂ 体系的弹性和非弹性微分截面, 并从理论上研究了分波截面. 最近 Lique^[22] 用从头算得到了 Ne-H₂ 的相互作用势数据, 并计算了该体系的微分截面. 本文采用 T-T 势模型通过密耦近似 (close-coupling) 方法, 计算了惰性气体原子 Ne 与 H₂, D₂ 分子碰撞能量为 $E = 83.8$ meV 时的微分散射截面及分波截面, 并与 Faubel 和 Lique 的结果进行比较, 本文计算的微分散射截面值与实验值符合得较好, 分波截面值与文献值也相符合, 说明本文采用的势模型和截面计算方法是可行的. 因此, 本文使用同样的方法, 对 Ne-H₂, Ne-D₂, Ne-T₂ 三个体系的

* 国家自然科学基金 (批准号: 10964002, 10974139)、高等学校博士学科点专项科研基金 (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: QSZHZ2006(113)) 和贵州省科学技术基金 (批准号: QKHJZ [2009]2066) 资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: xdyang@scu.edu.cn

微分截面和分波截面进行了系统计算和比较分析, 得出了 Ne 与 H₂ 分子对称同位素替代碰撞体系的散射截面规律.

2. 体系的相互作用势

对于 H₂ 分子的势能函数, 本文采用 Murrell-Sorbie 函数拟合. Murrell-Sorbie 函数已被公认为较准确的双原子分子的势能函数. 本文通过与实验值比较, 选择 QCISD/6-311 + + G(3df, 3pd) 对 H₂ 分子进行单点能扫描, 对应于不同核间距的势能值拟合为如下形式的标准势能函数 Murrell-Sorbie (M-S) 势函数^[23]:

$$V = -D_e(1 + a_1\rho + a_2\rho^2 + a_3\rho^3)\exp(-a_1\rho), \quad (1)$$

其中 $\rho = R - R_e$, R 为核间距, R_e 为平衡核间距, D_e , a_1, a_2, a_3 为拟合参数, H₂ 分子的势阱参数与实验值的比较和 M-S 函数拟合参数列入表 1 中.

对于原子与双原子分子相互作用势, 人们在长期的研究中, 在分子势能函数的基本模型的基础上, 提出了许多原子与双原子分子相互作用的势模型, 但 Ne 原子与 H₂ 分子间的相互作用解析势不多见. T-T 势^[16]充分考虑了自洽场短程势、长程吸引色散势和其他效应(如交换色散、高阶项等), 较准确地反映了真实体系的相互作用, 是一种比较好的势模型. T-T 势模型计算的阱参数与实验值十分符合. 该模型如下:

表 1 H₂ 分子的势阱参数与实验值的比较和 M-S 函数拟合参数

D_e/eV	实验 D_e/eV	R_e/nm	实验 R_e/nm	a_1/nm^{-1}	a_2/nm^{-2}	a_3/nm^{-3}
4.705	4.747	0.0742	0.0741	47.484	515.286	4894.84

$$V(R, r, \theta) = V_0(R) + V_2(R)P_2(\cos\theta), \quad (2)$$

其中, $V_0(R)$ 为球对称势, $V_2(R)P_2(\cos\theta)$ 为各向异性势, θ 为 R 与分子键轴的夹角, 而 $V_0(R)$ 和 $V_2(R)$ 又可表示为:

$$V_0(R) = \frac{1}{3}[V_{11}(R) + 2V_{\perp}(R)], \quad (3)$$

$$V_2(R) = \frac{2}{3}[V_{11}(R) - V_{\perp}(R)], \quad (4)$$

式中 $V_{11}(R) = V(R, 0^\circ)$, $V_{\perp}(R) = V(R, 90^\circ)$, 而 V_{11}, V_{\perp} 由三部分组成

$$V_{11} = V_{\text{SCF}11} - V_{\text{DISP}11} + V_{\text{CORR}11}, \quad (5)$$

$$V_{\perp} = V_{\text{SCF}\perp} - V_{\text{DISP}\perp} + V_{\text{CORR}\perp}, \quad (6)$$

其中 $V_{\text{SCF}}(R)$ 为短程自洽场排斥势, $V_{\text{DISP}}(R)$ 为长程 Van de Waals 色散吸引势, $V_{\text{CORR}}(R)$ 是交换色散修正势, 可分别表示如下:

$$V_{\text{SCF}}(R) = A\exp(-bR), \quad (7)$$

$$V_{\text{DISP}}(R) = \sum_{n \geq 3}^{n'-1} \frac{C_{2n}}{R^{2n}} + f_{2n'}(R) \frac{C_{2n}}{R^{2n}}, \quad (8)$$

$$V_{\text{CORR}}(R) = [M(1) + M(2)] \times \left[b - \frac{2b}{R} \right] A\exp(-bR), \quad (9)$$

其中, A, b 是 Bohn-Mayer 势参数, $f_{2n'}(R)$ 是色散势的衰减函数, n' 是 $V_{\text{DISP}}(R)$ 收敛后的最大 n 加 1, 即 $n' = n + 1$, C_{2n} 是色散系数, $M(i)$ 是交换色散势参数.

Tang 和 Toennies 通过理论计算并与实验值比较得到 Ne 与 H₂ 的相互作用的色散参数 $C_6, C_8, C_{10}, \Gamma_6, \Gamma_8$ 和 Γ_{10} . 本文使用 Hariharan 计算的短程自洽场排斥势数据, 拟合了 $A^{\parallel}, A^{\perp}, b^{\parallel}$ 和 b^{\perp} 值, 该模型相互作用的参数见表 2.

表 2 Ne-H₂ 相互作用的色散参数

C_6	C_8	C_{10}	Γ_6	Γ_8	Γ_{10}	A^{\parallel}	$A^{\parallel}_{\text{本文}}$	A^{\perp}	$A^{\perp}_{\text{本文}}$	b^{\parallel}	$b^{\parallel}_{\text{本文}}$	b^{\perp}	$b^{\perp}_{\text{本文}}$
8.46	128.98	2431.21	0.092	0.264	0.258	45.42	44.67	29.028	29.071	2.042	2.032	2.031	2.033

将表 2 参数代入以上模型中, 计算得出 Ne-H₂ 体系的势阱位置和深度, 计算值和实验值符合得很好, 说明 T-T 势模型准确表达了体系的原子与分子相互作用势. 表 3 列出了 Ne 与 H₂ 相互作用的势参数与实验值的比较.

表 3 Ne-H₂ 相互作用的势参数与实验值的比较

	计算值	实验值
$V_{0m}(R)/\text{meV}$	3.10	3.00
$R_{0m}/\text{\AA}$	3.28	3.42
$V_{0m}(R)/\text{meV}$	0.28	0.28
$R_{0m}/\text{\AA}$	3.850	3.850

根据 Bohn-Oppenheimer 近似,同位素的替代不改变体系的相互作用势能面的形状,因此,对 Ne-D₂,Ne-T₂ 两体系,本文采用了与 Ne-H₂ 体系相同的势能面.

3. 密耦近似方法

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

$$(\mathbf{H} - E)\psi_{\alpha}^{(+)}(\mathbf{R},\mathbf{r}) = 0, \quad (10)$$

式中 \mathbf{r} 是双原子分子中两核之间的相对位置矢量, \mathbf{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, α 表示入射通道量子数的完全集. 体系的 Hamilton 算符为:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu_{A,BC}} \nabla_{\mathbf{R}}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu_{BC}} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + V(\mathbf{R},\mathbf{r},\cos\theta), \quad (11)$$

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

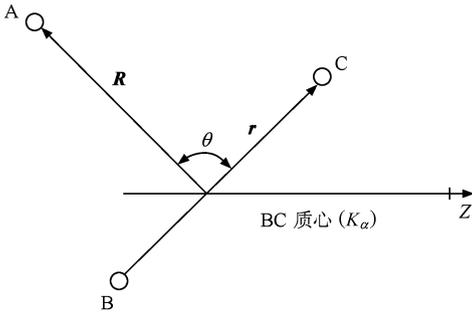


图 1 原子与双原子分子碰撞的几何图形

如图 1 所示,从 $(n_{\alpha}J_{\alpha})$ 到 $(n_{\beta}J_{\beta})$ 的微分散射截面由下面公式给出^[1]:

$$\frac{d\sigma_{n_{\alpha}J_{\alpha} \rightarrow n_{\beta}J_{\beta}}}{d\Omega} = \frac{1}{2J_{\alpha} + 1} \cdot \frac{K_{\beta}}{K_{\alpha}M_{\alpha}M_{\beta}} \sum_{l_{\beta}} |f_{n_{\beta}J_{\beta}M_{\beta},n_{\alpha}J_{\alpha}M_{\alpha}}(\theta,\varphi)|^2, \quad (12)$$

式中

$$\begin{aligned} & f_{n_{\beta}J_{\beta}M_{\beta},n_{\alpha}J_{\alpha}M_{\alpha}}(\theta,\varphi) \\ &= \left(\frac{4\pi}{K_{\alpha}K_{\beta}}\right)^{1/2} \sum_{l_{\beta}} [2l_{\beta} + 1]^{1/2} A_{l_{\beta}} \\ & \quad \times (n_{\alpha}J_{\alpha}M_{\alpha} \rightarrow n_{\beta}J_{\beta}M_{\beta}), \quad (13) \\ & A_{l_{\beta}}(n_{\alpha}J_{\alpha}M_{\alpha} \rightarrow n_{\beta}J_{\beta}M_{\beta}) \end{aligned}$$

$$= \sum_J \langle l_{\beta}M_{\alpha} - M_{\beta}J_{\beta}M_{\beta} | JM_{\alpha} \rangle T_{n_{\beta}J_{\beta}M_{\beta},n_{\alpha}J_{\alpha}M_{\alpha}}^J, \quad (14)$$

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为

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

4. Ne-H₂(D₂,T₂) 碰撞体系的散射截面

采用上述势模型和近似方法,本文对碰撞能量为 $E = 83.8$ meV 时 Ne-H₂,Ne-D₂,Ne-T₂ 体系的微分截面和分波截面进行了计算和比较分析,得出了 H₂ 分子对称同位素替代碰撞体系的散射截面的规律.

4.1. 微分截面

图 2 是本文计算的 Ne-H₂ 体系在碰撞能量为 $E = 83.8$ meV 时微分截面值的角分布与实验值和文献值的比较图. 小方框是 Faubel 等^[21] 的实验值,实线为本文计算值,虚线为 Lique^[22] 的计算值. 从图中可看出:在弹性碰撞 00-00 时,本文计算的微分散射截面值与实验值符合得很好,与文献值也相符合;对于非弹性碰撞 00-02,本文计算值与实验值有一定的误差,在小角度部分与 Lique 的计算结果相比与实验值更为接近,说明本文采用的势模型和截面的计算方法是较为可靠和准确的.

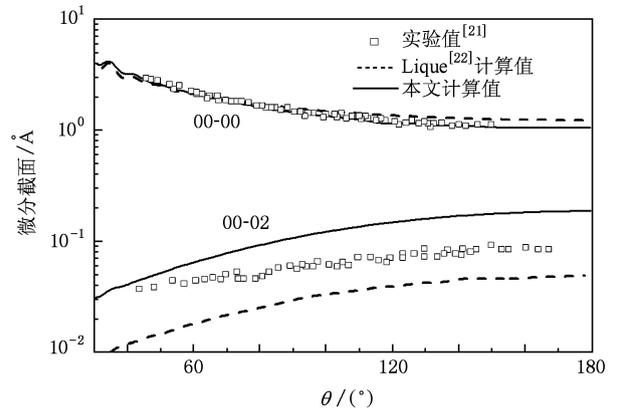


图 2 碰撞能量为 $E = 83.8$ meV 时 Ne-H₂ 弹性 00-00 和非弹性 00-02 碰撞微分截面与实验值和文献值的比较

因此本文用同样的势模型和截面的计算方法,计算了碰撞能量为 $E = 83.8$ meV 时 Ne-D₂,Ne-T₂ 等

氢同位素体系的微分截面,如图 3 和图 4 所示. 图 3 是三个体系的 00-00 跃迁的微分截面随散射角变化的角分布曲线.

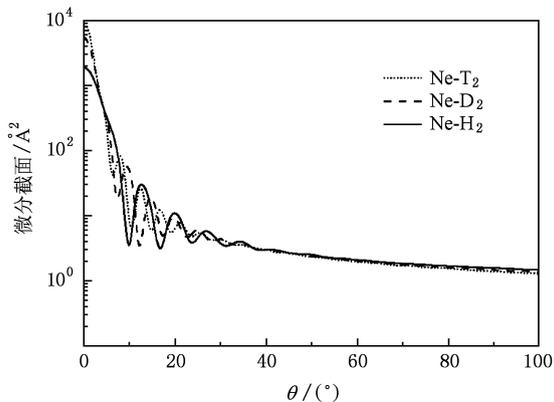


图 3 碰撞能量为 $E = 83.8$ meV 时 Ne-H₂, Ne-D₂, Ne-T₂ 体系的弹性 00-00 微分截面随散射角的变化规律

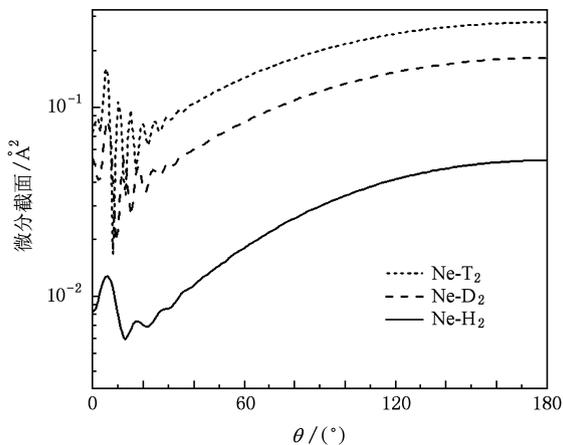


图 4 碰撞能量为 $E = 83.8$ meV 时 Ne-H₂, Ne-D₂, Ne-T₂ 体系的非弹性 00-02 微分截面随散射角的变化规律

从图中可以看出,在散射角很小时(0° — 3°),三个体系的微分截面差别很大,较重体系 Ne-T₂ 的微分截面值最大,较轻体系 Ne-H₂ 的微分截面最小,在散射角 3° — 6° ,三个体系的微分截面值相差不大,而在 6° — 35° 各体系微分截面迅速振荡减小,但较重体系 Ne-T₂ 的截面值趋于平缓所需的角度值则较小,而较轻体系截面值趋于平缓所需的角度值则较大. 在 35° — 60° 区间,各体系微分截面值基本趋于相同,在 60° — 180° 区间,可以看出三个体系微分截面值的差别也很小,较重体系的截面值略小于较轻体系的截面值,这表明了三个同位素靶分子对

氖原子碰撞微分截面的散射规律.

从图 3 中还可以看出, Ne-H₂, Ne-D₂, Ne-T₂ 三个体系各级振荡间隔分别为 $\Delta\theta = 7^\circ, 5^\circ, 4^\circ$, 遵从以下规律: $\Delta\theta \sim \frac{h}{\sqrt{2\mu E}}$, 其中 μ 是体系的约化质量, E 是碰撞能量,可以看出在相同的能量碰撞时,随着体系约化质量增大,体系的振荡间隔减小. 三个体系的第一个振荡极小值出现位置也有差别, Ne-H₂ 在 10° , 而 Ne-D₂ 与 Ne-T₂ 体系的第一振荡极小值分别出现在 7° 和 6° 的位置,这个现象同样可以用对应的衍射角分布规律得到解释:由 de Broglie 长公式 $\lambda = h/\sqrt{2\mu E}$ (μ 是体系的约化质量, E 是入射能量) 和衍射公式 $2d\sin\theta = n\lambda$, 在相同入射原子能量下,对于不同体系,则有 $\sin\theta \propto n/\sqrt{\mu}$, μ 越大,同一级衍射极小值位置越小.

图 4 是碰撞能量为 $E = 83.8$ meV 时三个体系的 00-02 跃迁的微分截面随散射角的分布曲线. 从图中可以看出,三个体系非弹性散射振荡主要发生小角区,在散射角为 0° — 30° 区间,三个体系的微分截面都是振荡增加,较重 Ne-T₂ 的体系振荡幅度大,之后三个体系的微分截面值单调增加,而且较重体系的截面值比较轻体系的截面值大.

4.2. 分波截面

图 5 是 Ne-D₂ 体系碰撞能量为 $E = 83.8$ meV 时本文计算的弹性分波截面和 Faubel 等^[21] 的计算值的比较曲线,从图中可看出两曲线的振荡规律和趋势基本符合,所需的收敛分波数一致. 本文使用同样的势模型和截面的计算方法,计算了 Ne-H₂, Ne-D₂, Ne-T₂ 体系的弹性分波截面和非弹性分波截面,如图 6 和图 7 所示.

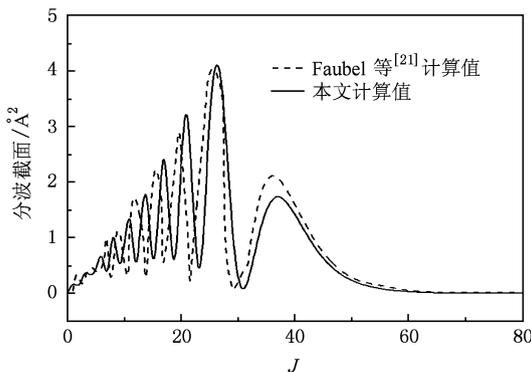


图 5 碰撞能量为 $E = 83.8$ meV 时 Ne-D₂ 体系本文计算的弹性分波截面和 Faubel 等的计算值的比较曲线

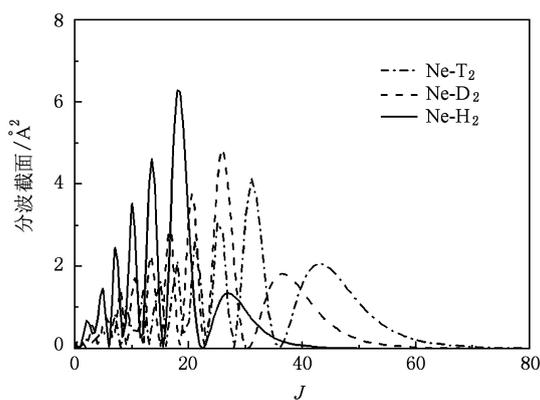


图6 Ne-H₂, Ne-D₂, Ne-T₂ 体系在碰撞能量为 $E = 83.8$ meV 时弹性 00-00 分波截面随总角动量量子数 J 的变化曲线

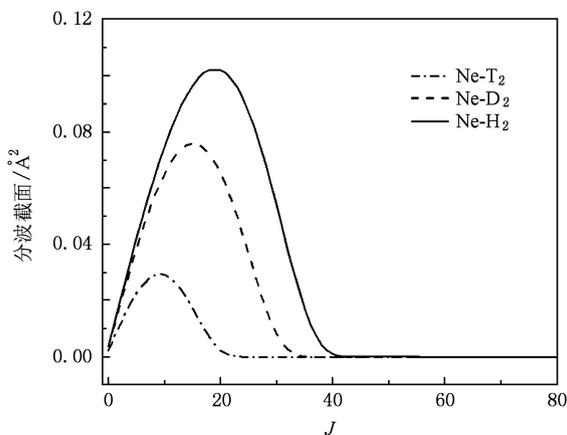


图7 Ne-H₂, Ne-D₂, Ne-T₂ 体系在碰撞能量为 $E = 83.8$ meV 时的非弹性 00-02 分波截面随总角动量量子数 J 的变化曲线

图6是这三个体系在相同碰撞能量为 $E = 83.8$ meV 弹性分波截面随总角动量量子数 J 的变化曲线,从图中可以看出:三个碰撞体系的弹性分波截面随 J 的变化曲线的形状相似,分波截面随 J 的增大而不断振荡,且振幅越来越大,最后达到一个最大值后,较快地趋近于0,但都出现了明显的尾部效应.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,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作用时,由于量子效应,粒子仍会受到势场的散射而产生的.在相同碰撞能量时,体系的约化质量越高,量子效应越明显.三个体系的散射极大值的位置随着体系约化质量的增加向大 J 方向移动,收敛所需的量子数也随着增加. Ne-H₂ 体系需要

$J = 42$ 个分波收敛,而 Ne-D₂, Ne-T₂ 分别需要 $J = 59, J = 72$ 才收敛.其物理实质可如下解释:用半经典公式 $L \leq ka$ 表示对中心场中的势散射,即只有粒子的轨道角动量量子数 L 不大于入射粒子对应的 de Broglie 波数 k 与中心场有效作用半径 a 的乘积时,粒子才能被散射中心场散射;又 $k = \sqrt{2\mu E}/\hbar$,所以 $L \leq \sqrt{2\mu E}a/\hbar$,由于仅考虑分子的转动激发,即 $j_\alpha = 0$,因而入射通道的总角动量与轨道角动量相等,即 $J = L_\alpha$,故 $J \leq \sqrt{2\mu E}a/\hbar$,即对于同一入射能量和同一散射势场 $J \propto \sqrt{\mu}$,得到收敛的截面所需的分波数和体系的约化质量的平方根成正比,所以相同碰撞能量时较重体系的分波截面收敛所需的分波数就多.

图7是 Ne-H₂, Ne-D₂, Ne-T₂ 三体系的非弹性 00-02 分波截面随总角动量量子数 J 的变化曲线.从图中可以看出:碰撞体系的弹性和非弹性分波截面随 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,没有出现振荡现象.三体系中,较重体系的截面的极大值反而较小,对应的量子数也较小;而较轻体系的截面的极大值较大,对应的量子数也较大.

5. 结 论

1) 经过与实验值和文献值的比较说明,使用 T-T 势模型和密耦方法,可以准确地得到 Ne 与 H₂ 分子及其同位素 D₂, T₂ 分子的碰撞体系的散射截面.

2) 对于相同的碰撞能量,Ne 与 H₂ 分子及其同位素 D₂, T₂ 分子的弹性和非弹性碰撞微分截面主要发生在小角部分,弹性碰撞时随着体系约化质量增大,体系的振荡间隔减小.

3) 相对碰撞能量一定时,随着体系约化质量的增加,三个同位素体系的弹性分波截面最大值的位置向大 J 的方向移动,截面值减小,而尾部效应逐渐增强.

4) 对于 Ne 与 H₂ 分子及其同位素 D₂, T₂ 分子的非弹性散射分波截面,其规律都是截面只经过一个极大值便趋于零,其峰值的位置随着体系的约化质量的增加而向小 J 的方向移动,但截面值则逐渐减少.

- [1] Scole G 1988 *Atomic and Molecular Beam Methods* (Oxford: Oxford University) p18
- [2] Yu C R, Zhang J, Jiang G S 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 2376 (in Chinese)[余春日、张杰、江贵生 2009 物理学报 **58** 2376]
- [3] Tang K T, Toennies J P 1982 *J. Chem. Phys.* **76** 2524
- [4] Yang X D 1991 *J. Sci. China Ser. A* **34** 48
- [5] Yang X D, Hu D, Jing F Q 1998 *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* **31** 826
- [6] Yan S Y, Zhou Y J 1999 *J. At. Mol. Phys.* **16** 77 (in Chinese) [阎世英、周雅君 1999 原子与分子物理学报 **16** 77]
- [7] Shi D H, Sun J F, Zhu Z L, Yang X, Liu Y F, Ma H Z 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 4435 (in Chinese)[施德恒、孙金锋、朱遵略、杨向东、刘玉芳、马恒中 2007 物理学报 **56** 4435]
- [8] Yu C R, Feng E Y, Cheng X L, Yang X D 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 4441[余春日、凤尔银、程新路、杨向东 2007 物理学报 **56** 4441]
- [9] Shen G X, Linghu R F, Wang R K, Yang X D 2007 *Chin. Phys.* **16** 3352
- [10] Shen G X, Wang R K, Linghu R F, Yang X D 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 3452 (in Chinese) [沈光先、汪荣凯、令狐荣锋、杨向东 2008 物理学报 **57** 3452]
- [11] Yu C R, Wang R K, Yang X D, Yin X C 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 2906 (in Chinese) [沈光先、汪荣凯、杨向东、尹训昌 2008 物理学报 **57** 2906]
- [12] 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]
- [13] Choi B H, Tang K T 1976 *J. Chem. Phys.* **65** 5528
- [14] Bowers M S, Faubel M, Tang K T 1987 *J. Chem. Phys.* **87** 5687
- [15] Tadeusz O 1981 *Chem. Phys.* **61** 405
- [16] Tang K T, Toennies J P 1978 *J. Chem. Phys.* **68** 5501
- [17] John E D, Susanne R, H T 1980 *Chem. Phys.* **50** 175
- [18] Shen G X, Wang R K, Linghu R F, Yang X D 2008 *Acta Phys. Sin.* **58** 3827 (in Chinese) [沈光先、汪荣凯、令狐荣锋、杨向东 2008 物理学报 **58** 3827]
- [19] Yu C R, Wang R K, Cheng X L, Yang X D 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 2577 (in Chinese) [沈光先、汪荣凯、程新路、杨向东 2008 物理学报 **57** 2577]
- [20] Dai W, Feng H, Sun W G, Tang Y J, Shen L Y, Jiang Z 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 0143 (in Chinese) [戴伟、冯灏、孙卫国、唐永建、申立于、江周 2008 物理学报 **57** 0143]
- [21] Faubel M, Glanturco F A, Fagnetti F, Rusan L Y, Tappe U, Teonies J P 1994 *J. Chem. Phys.* **101** 8800
- [22] Lique F 2009 *Chem. Phys. Lett.* **471** 54
- [23] Zhu Z H 1996 *Atomic and Molecular Reaction Statis* (Beijing: Science Press) (in Chinese)[朱正和 1996 原子分子反应静力学(北京:科学出版社)]

The effect of symmetrical isotopic substitution in Ne-H₂ collision^{*}

Linghu Rong-Feng¹⁾²⁾ Xu Mei²⁾ Wang Xiao-Lu¹⁾²⁾ Lü Bing¹⁾²⁾ Yang Xiang-Dong^{1)†}

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

2) (*School of Science, Guizhou Normal University, Guiyang 550001, China*)

(Received 30 June 2009; revised manuscript received 30 July 2009)

Abstract

The differential and partial wave scattering cross sections of Ne-H₂(D₂, T₂) collisions have been calculated by close-coupling approximation method using Tang-Toennies potential model at the incident energy of 83.8 meV. The calculated differential cross sections are in good agreement with the experimental data and the partial wave cross sections match well with the published data. With the same method and potential model, the differential cross sections and the partial wave cross sections of Ne-H₂(D₂, T₂) collisions have been derived and analyzed. The rules of the effect of symmetrical isotopic substitution are obtained.

Keywords: Ne-H₂(D₂, T₂) collision, Tang-Toennies potential model, close-coupling method, symmetrical isotopic substitution

PACC: 3440, 3450

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10964002, 10974139), the Specialized Research Fund for the Doctoral Program Higher Education of China (Grant No. 20050610010), the Natural Science Foundation of the Education Bureau of Guizhou Province, China (Grant No. 2005105) and the Governor's Foundation for Science and Education Elites of Guizhou Province [Grant No. QSZHZ2006(113)], the Science Technology Foundation of Guizhou Province of China [Grant No. QKHJZ(2009)2066].

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