

# 钠分子同位素替代对低温下的 He-Na<sub>2</sub> 冷碰撞体系转动激发积分散射截面的影响\*

臧华平<sup>1)</sup> 李文峰<sup>1)</sup> 令狐荣锋<sup>1)2)</sup> 程新路<sup>1)</sup> 杨向东<sup>1)†</sup>

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)

(2010年1月29日收到; 2010年3月24日收到修改稿)

用多体刚性椭球模型计算了不同能量下氦的同位素原子<sup>4</sup>He, <sup>10</sup>He 与钠的同位素分子<sup>18</sup>Na<sub>2</sub>, <sup>23</sup>Na<sub>2</sub>, <sup>37</sup>Na<sub>2</sub> 替代碰撞体系的转动激发积分散射截面. 通过分析<sup>4</sup>He, <sup>10</sup>He-<sup>18</sup>Na<sub>2</sub>, <sup>23</sup>Na<sub>2</sub>, <sup>37</sup>Na<sub>2</sub> 各转动激发积分散射截面的差异, 总结出在钠分子的对称同位素替代情形下<sup>4</sup>He, <sup>10</sup>He-<sup>18</sup>Na<sub>2</sub>, <sup>23</sup>Na<sub>2</sub>, <sup>37</sup>Na<sub>2</sub> 碰撞体系转动激发积分散射截面随钠分子转动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. 另外, 计算了相对入射能量为 100 meV 时, 相互作用势的不同区域对<sup>10</sup>He-<sup>18</sup>Na<sub>2</sub>, <sup>23</sup>Na<sub>2</sub>, <sup>37</sup>Na<sub>2</sub> 各碰撞体系转动激发积分散射截面的贡献情况.

**关键词:** 多体刚性椭球模型, 转动激发积分散射截面, 钠同位素分子, 椭球等势面

**PACS:** 03. 65. -w, 03. 65. Nk, 03. 65. Sq

## 1. 引言

超冷分子的研究是一个极具活力的研究领域<sup>[1-4]</sup>, 冷分子碰撞和反应是近几年非常活跃的研究课题<sup>[5,6]</sup>. 用冷原子光缔合<sup>[7,8]</sup>、缓冲气载带冷却<sup>[9,10]</sup>、磁/电场调节引发连续-束缚态 Feshbach 共振<sup>[11,12]</sup> 等方法实现了碱金属双原子分子(同核或异核)的冷却或囚禁. 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. 超冷分子物理的发展为广义相对论时空特性的探索、玻色-爱因斯坦凝聚体和费米简并气体量子相变的精密测量、量子计算机的发展等开辟了新的路径, 具有重要的理论和实际意义. 因此, 研究钠分子的相关特性对冷分子物理的研究和应用具有重要价值, 本文拟对氦原子与钠分子碰撞体系的转动激发积分散射截面进行研究.

人们对 He-Na<sub>2</sub> 碰撞的研究一直保持着浓厚的兴趣, Bowman 等<sup>[13,14]</sup> 和 Schepper 等<sup>[15]</sup> 分别用单刚性体刚性椭球模型 (Single Hard-Shell Model) 讨论了彩虹现象等, Schinke 等<sup>[16]</sup> 提出了 He-Na<sub>2</sub> 体系的势能面, 用 IOS (infinite order sudden) 近似方法计算研究了微分散射截面和积分散射截面等, McCaffery<sup>[17]</sup> 研究了 He-Na<sub>2</sub> 碰撞体系的振转激发速率常数. 本文采用的多体刚性椭球模型是在单刚性体刚性椭球模型基础上发展而来的, 比较成功地解决了单刚性体刚性椭球模型在处理 He-Na<sub>2</sub> 碰撞体系时的局限性<sup>[18]</sup>, 能够对碰撞所引起的钠分子转动激发给予比较清晰的解释, 是计算 He-Na<sub>2</sub> 碰撞体系转动激发积分散射截面的有效方法<sup>[17-20]</sup>.

对同位素替代效应的研究是原子分子碰撞诸多研究方向的前沿之一<sup>[21-23]</sup>. 这是由于参与碰撞过程的某些元素具有数种同位素, 通过研究碰撞过程中的同位素替代效应, 可以获得实际体系中各种同位素效应的大小并确定在测量中由此效应引起的精度变化. 此外, 同位素替代有可能提供更多原子

\* 国家自然科学基金(批准号: 10974139, 10964002)、贵州省科学技术基金(批准号: 黔科合 J 字[2009]2066 号)和高等学校博士点专项科研基金(批准号: 20050610010)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: xdyang@scu.edu.cn

和双原子分子间相互作用势的有价值信息. 然而, 除了对  $H_2, D_2, T_2$  分子与原子碰撞的同位素替代效应的研究较多外<sup>[24,25]</sup>, 对其他分子与原子碰撞的同位素替代效应的研究至今报道甚少. 迄今为止, 虽然对<sup>4</sup>He-Na<sub>2</sub> 碰撞进行了一定的研究, 但尚未见氦同位素原子与钠同位素分子碰撞的相关报道. 此外, 由于散射实验对仪器设备的要求非常高, 实验难度较大, 因此散射实验数据极少. 这样, 从理论上研究氦同位素原子与钠同位素分子的碰撞激发并给出规律性结论就显得尤为重要. 有鉴于此, 本文拟对氦同位素原子<sup>4</sup>He, <sup>10</sup>He 与钠同位素分子<sup>18</sup>Na<sub>2</sub>, <sup>23</sup>Na<sub>2</sub>, <sup>37</sup>Na<sub>2</sub> 碰撞的转动激发积分散射截面进行理论计算和研究.

## 2. 理论计算方法<sup>[18]</sup>

选择一组刚性椭球面表示 He 与 Na<sub>2</sub> 间的相互作用, 每个椭球面表示一个等势面, 入射 He 与椭球等势面碰撞而发生散射. 椭球等势面的选择与相对入射能量  $E_r$  有关,  $E_r$  越高, 需要的椭球等势面个数越多, 这些椭球等势面有共同的中心  $O$ , 即 Na<sub>2</sub> 分子质心, 在分子固定坐标系  $(X, Y, Z)$  中第  $i$  个椭球面可表示为

$$\frac{X^2}{A_i^2} + \frac{Y^2}{B_i^2} + \frac{Z^2}{B_i^2} = 1, \quad (1)$$

式中  $A_i, B_i$  分别是第  $i$  个椭球的长、短半轴, 对应  $\alpha = 0^\circ, 90^\circ$  时根据一定  $V$  值计算出的  $R$  值,  $V$  是 Schinke 等<sup>[16]</sup> 提出的 He 与 Na<sub>2</sub> 间的相互作用势,  $R$  是入射原子到  $O$  的距离,  $\alpha$  为  $R$  与 Na<sub>2</sub> 分子键轴间的夹角.

计算转动激发积分散射截面时, 第  $i$  个椭球等势面实际取的势能值  $V_i$  与推导  $A_i, B_i$  所取的势能值  $V$  不一定严格相等,  $V_i$  一般按下式要求选择:

$$V_{i-1} < V \leq V_i. \quad (2)$$

假设入射 He 在  $xOy$  平面沿  $x$  轴正方向射向椭球面, 如图 1 所示.

首先判断入射原子是否与最外层椭球等势面存在碰撞点, 若有, 比较法向动能  $E_n = \frac{\mu v_n^2}{2}$  与势能  $V_1$  的关系, 如果  $E_n \leq V_1$ , 那么入射原子与此椭球面发生碰撞, 如果  $E_n > V_1$ , 那么入射原子不与此椭球面碰撞, 继续沿  $x$  轴作直线运动, 直到与某一个椭球面发生碰撞或者错过所有的椭球面. 假设碰撞前 Na<sub>2</sub> 不转动, 碰撞后 Na<sub>2</sub> 的转动角动量  $j'$  为

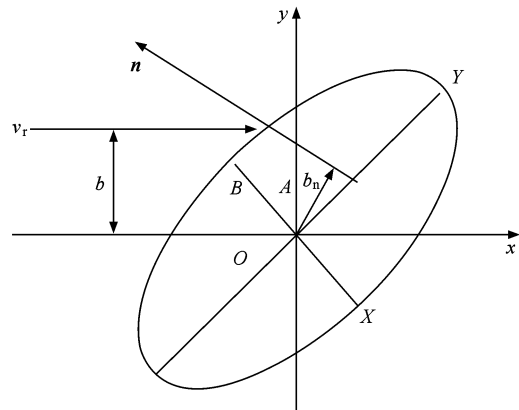


图 1 入射原子与椭球面碰撞的平面图形  $(X, Y, Z), (X, y, z)$  分别是分子固定坐标系和空间固定坐标系 ( $Z, z$  轴未标出),  $v_r$  是入射原子初相对运动速度,  $v_n = v_r \cdot n$  是碰撞点相对速度法向分量,  $n$  是碰撞点椭球面单位法向量,  $b$  为碰撞参数,  $b_n$  是有效碰撞参数, 为钠分子质心到  $n$  的垂直距离

(3)

式中  $\mu$  是 He-Na<sub>2</sub> 碰撞体系的约化质量,  $I$  是 Na<sub>2</sub> 分子转动惯量,  $l = \mu v_n b_n$ .

通过下式把 Na<sub>2</sub> 的转动角动量  $j'$  化成相应的量子转动态  $J'$ :

$$\hbar(J' - 1) \leq j' < \hbar(J' + 1), \quad (4)$$

那么,  $j' = J'\hbar, J'$  是 Na<sub>2</sub> 的转动角动量量子数.

为了计算 He-Na<sub>2</sub> 碰撞体系的转动激发积分散射截面, 采用了蒙特卡罗 (MC) 方法来模拟大量 He 与 Na<sub>2</sub> 碰撞的过程, 总模拟次数  $N$  为 1000000 次. 在 B-O (Born-Oppenheimer) 近似下, 同位素替代不影响体系的相互作用势, 对 He-Na<sub>2</sub> 的同位素替代体系<sup>4</sup>He, <sup>10</sup>He-<sup>18</sup>Na<sub>2</sub>, <sup>23</sup>Na<sub>2</sub>, <sup>37</sup>Na<sub>2</sub>, 不仅其势能面不变, 靶分子的质心也没有因为同位素替代而发生移动, 故其在质心坐标系中的势能函数保持不变.

$J = 0 \rightarrow J'$  的态态转动激发积分散射截面  $\sigma$  由下式给出:

$$\sigma(J = 0 \rightarrow J') = \frac{n(J')}{N} \pi b_{\max}^2, \quad (5)$$

式中,  $n(J')$  是产生转动角动量量子数  $J'$  的 MC 模拟次数,  $b_{\max} = A_{i\max}, A_{i\max}$  是最外层椭球的长半轴.

总转动激发积分散射截面  $\sigma_{\text{tot}}$  是

$$\sigma_{\text{tot}} = \sum_{J'=2,4,6,\dots} \sigma(J = 0 \rightarrow J') = \frac{n_{\text{hits}}}{N} \pi b_{\max}^2, \quad (6)$$

其中  $n_{\text{hits}}$  是 MC 模拟中入射原子与所有椭球等势面碰撞的总次数.

### 3. 计算结果及讨论

#### 3.1. 态态转动激发积分散射截面

IOS 近似方法是计算氦原子与钠分子碰撞比较准确的一种理论方法<sup>[16]</sup>. 我们在文献[26]中已经使用多体刚性椭球模型计算了 He-<sup>23</sup>Na<sub>2</sub> 碰撞体系的态态转动激发积分散射截面, 结果表明与 IOS 近似方法计算结果符合得较好, 与 Marks<sup>[18]</sup> 的计算结果相比, 我们计算的结果与 IOS 方法计算结果符合得更好一些. 这说明我们使用多体刚性椭球模型计算氦原子与钠分子碰撞是比较可靠的. 在此基础上, 我们计算了相对碰撞能量  $E_r = 50$  100 200 meV 时 <sup>4</sup>He, <sup>10</sup>He-<sup>18</sup>Na<sub>2</sub>, <sup>23</sup>Na<sub>2</sub>, <sup>37</sup>Na<sub>2</sub> 同位素替代碰撞体系的转动激发积分散射截面, 计算结果分别表示在图 2—7 中.

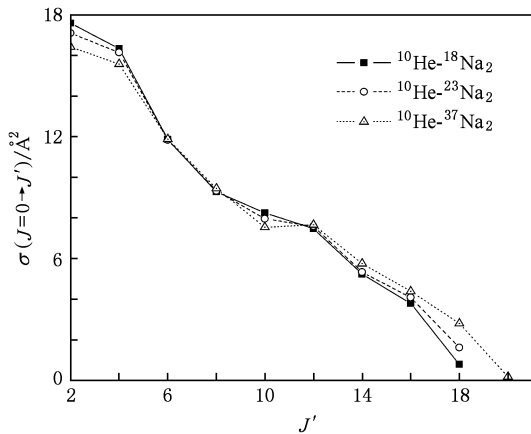


图 2  $E_r = 50$  meV, <sup>10</sup>He-<sup>18</sup>Na<sub>2</sub>, <sup>23</sup>Na<sub>2</sub>, <sup>37</sup>Na<sub>2</sub> 碰撞态态转动激发积分散射截面随  $J'$  的变化

图 2—4 分别是相对入射能量  $E_r = 50, 100, 200$  meV 时 <sup>10</sup>He-<sup>18</sup>Na<sub>2</sub>, <sup>23</sup>Na<sub>2</sub>, <sup>37</sup>Na<sub>2</sub> 碰撞体系的转动激发积分散射截面. 可以看出, 对于确定的入射能量  $E_r$ , 态态转动激发积分散射截面  $\sigma$  随转动量子态  $J'$  变化的规律非常相似, 即  $\sigma$  随着转动量子态  $J'$  的升高逐渐减小, 都是  $J = 0 \rightarrow J' = 2$  的转动激发积分散射截面值  $\sigma$  最大, 直到最后收敛, 大体上呈负指数衰减形式, 这与该体系弱的各向异性相关. 这说明低转动激发态被激发的概率要大于高转动激发态被激发的概率. 在相同的入射能量下, 随着钠分子质量的增加, 转动激发积分散射截面  $\sigma$  收敛越来越慢, 即能够被激发到的最大转动量子态  $J'$  越来越

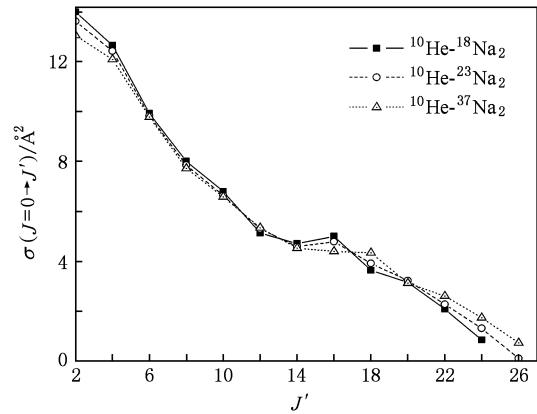


图 3  $E_r = 100$  meV, <sup>10</sup>He-<sup>18</sup>Na<sub>2</sub>, <sup>23</sup>Na<sub>2</sub>, <sup>37</sup>Na<sub>2</sub> 碰撞态态转动激发积分散射截面随  $J'$  的变化

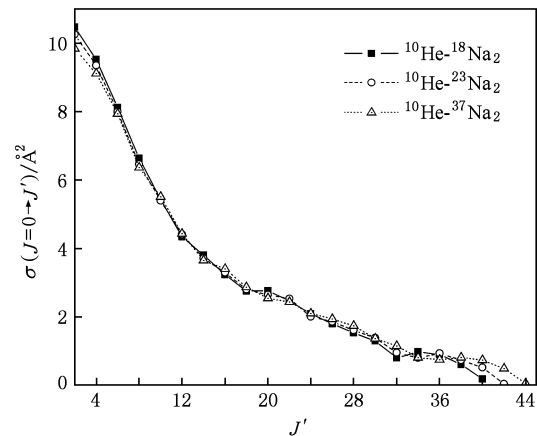


图 4  $E_r = 200$  meV, <sup>10</sup>He-<sup>18</sup>Na<sub>2</sub>, <sup>23</sup>Na<sub>2</sub>, <sup>37</sup>Na<sub>2</sub> 碰撞态态转动激发积分散射截面随  $J'$  的变化

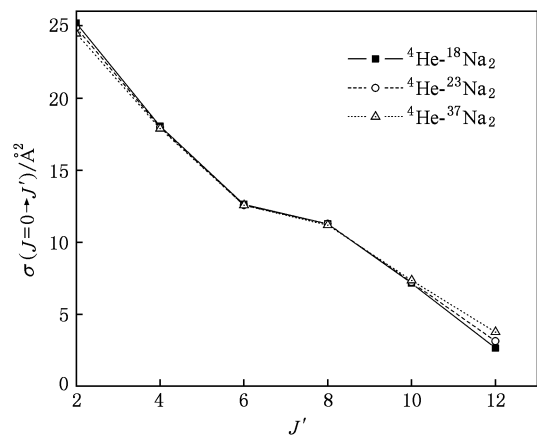


图 5  $E_r = 50$  meV, <sup>4</sup>He-<sup>18</sup>Na<sub>2</sub>, <sup>23</sup>Na<sub>2</sub>, <sup>37</sup>Na<sub>2</sub> 碰撞态态转动激发积分散射截面随  $J'$  的变化

高, 如  $E_r = 200$  meV 时, 从图 4 中看到 <sup>10</sup>He-<sup>18</sup>Na<sub>2</sub>, <sup>23</sup>Na<sub>2</sub>, <sup>37</sup>Na<sub>2</sub> 碰撞体系的转动激发积分散射截面收

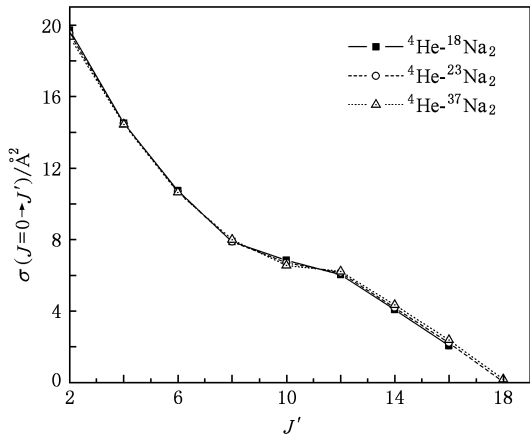


图6  $E_r = 100$  meV,  ${}^4\text{He}-{}^{18}\text{Na}_2$ ,  ${}^{23}\text{Na}_2$ ,  ${}^{37}\text{Na}_2$  碰撞态转动激发积分散射截面随  $J'$  的变化

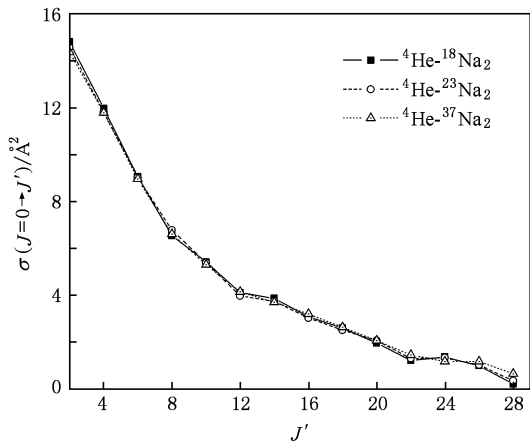


图7  $E_r = 200$  meV,  ${}^4\text{He}-{}^{18}\text{Na}_2$ ,  ${}^{23}\text{Na}_2$ ,  ${}^{37}\text{Na}_2$  碰撞态转动激发积分散射截面随  $J'$  的变化

敛时,  $J'$  分别约为 40, 42, 44; 在低激发态, 积分散射截面值  $\sigma$  (同一激发态  $J'$ ) 随钠分子质量的增加逐渐减小, 如  $J' = 2$  时, 从图 2 看到  ${}^{10}\text{He}-{}^{18}\text{Na}_2$ ,  ${}^{23}\text{Na}_2$ ,  ${}^{37}\text{Na}_2$  碰撞体系的转动激发积分散射截面  $\sigma(J = 0 \rightarrow J' = 2)$  分别约为 17.60, 17.11, 16.43  $\text{\AA}^2$  ( $1\text{\AA} = 0.1$  nm); 随着激发态的升高, 积分散射截面值  $\sigma$  (同一激发态  $J'$ ) 随钠分子质量的增加而增加, 如  $J' = 18$  时, 从图 4 中看到  ${}^{10}\text{He}-{}^{18}\text{Na}_2$ ,  ${}^{23}\text{Na}_2$ ,  ${}^{37}\text{Na}_2$  碰撞体系的转动激发积分散射截面  $\sigma(J = 0 \rightarrow J' = 18)$  分别

为 0.80, 1.62, 2.81  $\text{\AA}^2$ . 这与作者在文献 [26] 的  ${}^3\text{He}$ ,  ${}^4\text{He}$ ,  ${}^7\text{He}$ ,  ${}^{10}\text{He}-\text{Na}_2$  同位素替代碰撞体系的态态转动激发分波截面的变化规律一致. 图 5—7 分别是相对入射能量  $E_r = 50, 100, 200$  meV 时  ${}^4\text{He}-{}^{18}\text{Na}_2$ ,  ${}^{23}\text{Na}_2$ ,  ${}^{37}\text{Na}_2$  碰撞体系的转动激发积分散射截面. 可以看出,  ${}^4\text{He}-{}^{18}\text{Na}_2$ ,  ${}^{23}\text{Na}_2$ ,  ${}^{37}\text{Na}_2$  碰撞体系的转动激发积分散射截面随钠分子质量变化的规律与  ${}^{10}\text{He}-{}^{18}\text{Na}_2$ ,  ${}^{23}\text{Na}_2$ ,  ${}^{37}\text{Na}_2$  碰撞体系相似, 但变化不是很明显, 这与  ${}^4\text{He}-{}^{18}\text{Na}_2$ ,  ${}^{23}\text{Na}_2$ ,  ${}^{37}\text{Na}_2$  碰撞体系的约化质量比较接近有密切关系.

另外, 从图 2—4 也可以看出, 当体系约化质量一定时, 随相对入射能量的升高, 在低激发态, 积分散射截面值 (同一激发态  $J'$ ) 逐渐减小, 如  $E_r = 50, 100, 200$  meV 时,  ${}^{10}\text{He}-{}^{23}\text{Na}_2$  碰撞体系所对应的  $\sigma(J = 0 \rightarrow J' = 4)$  分别为 16.15, 12.43, 9.35  $\text{\AA}^2$ ; 在高转动激发态, 积分散射截面值 (同一激发态  $J'$ ) 随相对入射能量的增加而增加, 如  $E_r = 50, 100, 200$  meV 时,  ${}^{10}\text{He}-{}^{23}\text{Na}_2$  碰撞体系所对应的  $\sigma(J = 0 \rightarrow J' = 24)$  分别为 0.00, 1.31, 2.00  $\text{\AA}^2$ . 相对入射能量越高, 积分散射截面收敛得越慢, 即钠分子能够被激发到更高的转动激发态, 如  $E_r = 50, 100, 200$  meV 时,  ${}^{10}\text{He}-{}^{18}\text{Na}_2$ ,  ${}^{23}\text{Na}_2$ ,  ${}^{37}\text{Na}_2$  碰撞体系的钠分子最高转动激发态  $J'_{\text{max}}$  分别是 18, 24, 40; 18, 26, 42; 20, 26, 44. 这可做如下解释<sup>[27]</sup>: 在同一体系中, 体系约化质量相同, 得到收敛的转动激发积分散射截面所需计算的转动激发态量子数  $J'_{\text{max}}$  和入射能量  $E$  的平方根成正比, 即  $J'_{\text{max}} \propto \sqrt{E}$ . 因此, 随着入射能量的增加, 钠分子能够被激发到的转动激发态越来越高. 从图 5—7 可以看出,  ${}^4\text{He}-{}^{18}\text{Na}_2$ ,  ${}^{23}\text{Na}_2$ ,  ${}^{37}\text{Na}_2$  碰撞体系的转动激发积分散射截面随相对入射能量变化的规律与  ${}^{10}\text{He}-{}^{18}\text{Na}_2$ ,  ${}^{23}\text{Na}_2$ ,  ${}^{37}\text{Na}_2$  碰撞体系相似.

### 3.2. 总转动激发积分散射截面

我们计算了不同能量下  ${}^4\text{He}$ ,  ${}^{10}\text{He}-{}^{18}\text{Na}_2$ ,  ${}^{23}\text{Na}_2$ ,  ${}^{37}\text{Na}_2$  碰撞体系的总转动激发积分散射截面  $\sigma_{\text{tot}}$ , 结果表示在表 1 中.

表 1 不同能量  ${}^4\text{He}$ ,  ${}^{10}\text{He}-{}^{18}\text{Na}_2$ ,  ${}^{23}\text{Na}_2$ ,  ${}^{37}\text{Na}_2$  碰撞体系的总转动激发积分散射截面

$E_r / \text{meV}$	$\sigma_{\text{tot}} / \text{\AA}^2$					
	${}^4\text{He}-{}^{18}\text{Na}_2$	${}^4\text{He}-{}^{23}\text{Na}_2$	${}^4\text{He}-{}^{37}\text{Na}_2$	${}^{10}\text{He}-{}^{18}\text{Na}_2$	${}^{10}\text{He}-{}^{23}\text{Na}_2$	${}^{10}\text{He}-{}^{37}\text{Na}_2$
50	76.86	76.94	77.14	80.67	81.05	81.73
100	71.89	71.96	72.19	75.96	75.88	76.07
200	67.26	66.97	67.31	69.67	69.63	69.98

从表 1 中可以看出,对于确定的相对入射能量和相同的入射氦原子,随着钠分子同位素质量的增加,总转动激发积分散射截面  $\sigma_{tot}$  相差不大;对于确定的钠分子同位素质量,随着相对入射能量的增加,总转动激发积分散射截面  $\sigma_{tot}$  逐渐减小,如  $E_r = 50, 100, 200$  meV 时,  $^{10}\text{He}-^{23}\text{Na}_2$  碰撞体系所对应的  $\sigma_{tot}$  分别为 81.05, 75.88, 69.98  $\text{\AA}^2$ . 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.

### 3.3. 相互作用势不同区域对转动激发积分散射截面的影响

我们把上面计算  $^{10}\text{He}-^{18}\text{Na}_2, ^{23}\text{Na}_2, ^{37}\text{Na}_2$  碰撞所

选用的椭球等势面的相关参数列在表 2 中,利用多体刚性椭球模型计算了相对碰撞能量  $E_r = 100$  meV 时,相互作用势不同区域对  $^{10}\text{He}-^{18}\text{Na}_2, ^{23}\text{Na}_2, ^{37}\text{Na}_2$  碰撞体系转动激发积分散射截面的贡献情况,结果表示在表 3 中.

表 2  $E_r = 100$  meV 时, He- $\text{Na}_2$  碰撞所选用的椭球等势面相关参数

$A_i/\text{\AA}$	$B_i/\text{\AA}$	$V/\text{meV}$	$V_i/\text{meV}$	$i$
6.41	5.60	1	2	1
6.11	5.33	2	3	2
5.93	5.15	3	4	3
5.79	5.03	4	5	4
5.51	4.76	7	9	5
5.38	4.64	9	18	6
4.52	3.85	40	50	7
4.27	3.61	60	70	8
4.10	3.44	80	100	9

表 3 相互作用势不同区域对  $^{10}\text{He}-^{18}\text{Na}_2, ^{23}\text{Na}_2, ^{37}\text{Na}_2$  碰撞体系态态转动激发积分散射截面的影响

碰撞体系	势能区域 /meV	$\sigma/\text{\AA}^2$												
		J=0→ J'=2	J=0→ J'=4	J=0→ J'=6	J=0→ J'=8	J=0→ J'=10	J=0→ J'=12	J=0→ J'=14	J=0→ J'=16	J=0→ J'=18	J=0→ J'=20	J=0→ J'=22	J=0→ J'=24	J=0→ J'=26
		$^{10}\text{He}-^{18}\text{Na}_2$	0—100	14.00	12.67	9.93	8.01	6.80	5.14	4.71	5.00	3.63	3.15	2.08
	0—70	13.25	11.95	9.17	7.21	5.95	4.23	3.76	3.78	2.25	0.85			
	0—50	12.81	11.39	8.55	6.60	5.25	3.52	2.80	2.24	1.20				
	0—18	7.63	4.78	2.92	1.63	0.21								
	0—9	5.91	2.35	0.56										
	0—5	3.96	0.72											
	0—4	2.55	0.21											
	0—3	1.33												
	0—2	0.45												
$^{10}\text{He}-^{23}\text{Na}_2$	0—100	13.62	12.43	9.84	7.86	6.63	5.30	4.59	4.78	3.91	3.23	2.27	1.31	0.1
	0—70	12.89	11.73	9.09	7.07	5.83	4.42	3.71	3.66	2.66	1.28	0.07		
	0—50	12.43	11.15	8.49	6.46	5.24	3.77	2.82	2.24	1.55	0.14			
	0—18	8.80	7.53	4.82	2.92	1.68	0.44							
	0—9	7.51	5.91	2.52	0.70									
	0—5	5.54	3.98	0.91										
	0—4	3.98	2.59	0.31										
	0—3	2.45	1.40	0.02										
	0—2	1.10	0.49											
$^{10}\text{He}-^{37}\text{Na}_2$	0—100	13.06	12.09	9.79	7.73	6.58	5.35	4.53	4.40	4.35	3.13	2.61	1.74	0.73
	0—70	12.35	9.05	6.98	5.79	4.53	3.65	3.42	3.27	1.67	0.51			
	0—50	11.94	10.86	8.48	6.37	5.22	3.90	2.85	2.32	1.84	0.69			
	0—18	8.42	7.42	4.95	3.04	1.80	0.78							
	0—9	7.19	5.88	2.82	0.87									
	0—5	5.33	4.01	1.23										
	0—4	3.82	2.69	0.49										
	0—3	2.36	1.49	0.08										
	0—2	1.05	0.55											

表 3 给出了相互作用势各向异性排斥势的 0—2, 0—3, 0—4, 0—5, 0—9, 0—18, 0—50, 0—70,

0—100 meV 区域对各碰撞体系不同转动激发态积分散射截面的贡献情况. 从表 3 可以看出, 对低转动

激发态积分散射截面有贡献的势能区域范围较大, 不仅相互作用势的高能区域对散射截面有影响, 而且低能区域对其也有影响, 但是受相互作用势低能区域的影响较大, 如在 $^{10}\text{He}-^{18}\text{Na}_2$ ,  $^{23}\text{Na}_2$ ,  $^{37}\text{Na}_2$  碰撞体系中, 对  $\sigma(J=0 \rightarrow J'=2)$  有贡献的势能区域都约为 0—100 meV, 对  $\sigma(J=0 \rightarrow J'=4)$  有贡献的势能区域分别约为 4—100, 0—100, 0—100 meV, 而 0—18 meV 的低能区域对其的贡献却分别达到了约 54.50%, 64.61%, 64.47%; 随着转动激发态的升高, 对其积分散射截面有影响的势能区域越来越窄, 对高转动激发态积分散射截面有贡献的势能区域范围要小于对低激发态积分散射截面有贡献的势能区域范围, 而且高激发态积分散射截面受高势能区域的影响较大, 如 $^{10}\text{He}-^{18}\text{Na}_2$ ,  $^{23}\text{Na}_2$ ,  $^{37}\text{Na}_2$  碰撞中, 对  $\sigma(J=0 \rightarrow J'=24)$  有贡献的势能区域均约为 70—100 meV, 在 $^{10}\text{He}-^{23}\text{Na}_2$ ,  $^{37}\text{Na}_2$  碰撞体系中, 对  $\sigma(J=0 \rightarrow J'=26)$  有贡献的势能区域均约为 70—100 meV. 这表明转动激发积分散射截面主要受各向异性排斥势的影响, 长程排斥区对低转动激发积分散射截面影响较大, 高转动激发积分散射截面主要受短程排斥区的影响. 另外, 从表 3 可以看出, 随着体系约化质量的增加, 相互作用势的高能区域对高转动激发态积分散射截面贡献越来越大, 例如, 相互作用势的 70—100 meV 区域对 $^{10}\text{He}-^{18}\text{Na}_2$ ,  $^{23}\text{Na}_2$ ,  $^{37}\text{Na}_2$  碰撞体系对应的  $\sigma(J=0 \rightarrow J'=26)$  的贡献分别约为 0.00, 0.1, 0.73  $\text{\AA}^2$ ; 对  $\sigma(J=0 \rightarrow J'=24)$  的贡献分别约为 0.85, 1.31, 1.74  $\text{\AA}^2$ .

#### 4. 结 论

本文在作者文献[27]工作的基础上, 进一步采

用多体刚性椭球模型计算了相对入射能量  $E_r = 50, 100, 200$  meV 时, 钠的同位素替代分子与 $^4\text{He}$ ,  $^{10}\text{He}$  原子碰撞体系的态态转动激发积分散射截面和总转动激发积分散射截面, 以及相对入射能量  $E_r = 100$  meV 时, 相互作用势的不同区域对 $^{10}\text{He}-^{18}\text{Na}_2$ ,  $^{23}\text{Na}_2$ ,  $^{37}\text{Na}_2$  碰撞体系转动激发积分散射截面的贡献情况, 并讨论了钠同位素替代对转动激发积分散射的影响, 总结出 $^4\text{He}$ ,  $^{10}\text{He}-^{18}\text{Na}_2$ ,  $^{23}\text{Na}_2$ ,  $^{37}\text{Na}_2$  碰撞体系转动激发积分散射截面随相对入射能量和钠分子质量变化的规律, 分析了相互作用势的不同区域对转动激发积分散射截面的影响. 基于以上计算和讨论, 得到如下结论:

1) 当体系约化质量一定时, 随相对入射能量的升高, 态态转动激发积分散射截面收敛越慢, 在低转动激发态, 态态转动激发积分散射截面值(同一激发态  $J'$ ) 逐渐减小, 在高转动激发态, 态态转动激发积分散射截面值(同一激发态  $J'$ ) 随相对入射能量的增加而增加.

2) 当相对入射能量和入射氦原子相同时, 对 $^4\text{He}$ ,  $^{10}\text{He}-^{18}\text{Na}_2$ ,  $^{23}\text{Na}_2$ ,  $^{37}\text{Na}_2$  碰撞体系, 钠分子同位素质量的改变, 不改变体系的相互作用势, 在总体上基本不改变碰撞体系的总转动激发积分散射截面.

3) 对低转动激发态积分散射截面有贡献的势能区域范围较大, 随着转动激发态的升高, 对其积分散射截面有影响的势能区域范围越来越窄, 对高转动激发态积分散射截面有贡献的势能区域范围要小于对低转动激发态积分散射截面有贡献的势能区域范围; 随着体系约化质量的增加, 相互作用势的高能区域对高转动激发态积分散射截面贡献越来越大.

- [1] 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]
- [2] Góral K, Santos L, Lewenstein M 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 170406
- [3] Sun X P, Feng Z F, Li W D, Jia S T 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 5727 (in Chinese) [孙晓鹏、冯志芳、李卫东、贾锁堂 2007 物理学报 **56** 5727]
- [4] Zhou S Y, Xu Z, Qu Q Z, Zhou S Y, Liu L, Wang Y Z 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 1590 (in Chinese) [周蜀渝、徐震、屈求智、周善钰、刘亮、王育竹 2009 物理学报 **58** 1590]
- [5] 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]
- [6] 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]
- [7] Fioretti A, Comparat D, Crubellier A 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 4402
- [8] Donley E A, Claussen N R, Thompson S T 2002 *Nature* **417** 529
- [9] Weinstein J D, Carvalho R, Guillet T 1998 *Nature* **359** 148
- [10] Bethlem H L, Berden G, Meijer G 1999 *Phys. Rev. Lett.* **83** 1558

- [11] Jochim S, Bartensein M, Altmeyer A 2003 *Science* **302** 2101
- [12] Greiner A, Regal C A, Jin D S 2003 *Nature* **426** 537
- [13] Bowman J M 1979 *Chem. Phys. Lett.* **62** 309
- [14] Bowman J M, Lee K T 1979 *Chem. Phys. Lett.* **60** 212
- [15] Schepper W, Ross U, Beck D 1979 *Z. Phys. A* **290** 131
- [16] Schinke R, Muller W, Meyer W, McGuire P 1981 *J. Chem. Phys.* **74** 3916
- [17] McCaffery A J 2004 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **6** 1637
- [18] Marks A J 1994 *J. Chem. Soc. Faraday Trans.* **90** 2857
- [19] Clare S, Marks A J, McCaffery A J 2000 *J. Phys. Chem. A* **104** 7181
- [20] Osborne M A, McCaffery A J 1994 *J. Chem. Phys.* **101** 5604
- [21] 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 ]
- [22] Shen G X, Wang R K, Linghu R F, Yang X D 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 3827 (in Chinese) [沈光先、汪荣凯、令狐荣锋、杨向东 2009 物理学报 **58** 3827 ]
- [23] Yu C R, Wang R K, Zhang J, Yang X D 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 0229 (in Chinese) [余春日、汪荣凯、张杰、杨向东 2008 物理学报 **57** 0229 ]
- [24] Jiang G, Xie H P, Tan M L, Zhu Z H 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 665 (in Chinese) [蒋刚、谢洪平、谭明亮、朱正和 2000 物理学报 **49** 665 ]
- [25] 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 ]
- [26] Li W F, Linghu R F, Cheng X L, Yang X D 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 4591 (in Chinese) [李文峰、令狐荣锋、程新路、杨向东 2010 物理学报 **59** 4591 ]
- [27] Brian H B 1979 *Atomic Collisions Theory* (Benjamin: Cummings Publishing Company Inc) p372

## Influence of isotope substitution of sodium molecule on the integral cross sections of rotational excitation in low-temperature collisions of He-Na<sub>2</sub>\*

Zang Hua-Ping<sup>1)</sup> Li Wen-Feng<sup>1)</sup> Linghu Rong-Feng<sup>1)2)</sup> Cheng Xin-Lu<sup>1)</sup> Yang Xiang-Dong<sup>1)†</sup>

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 29 January 2010; revised manuscript received 24 March 2010)

### Abstract

Multiple ellipsoid model is applied to the <sup>4</sup>He, <sup>10</sup>He-<sup>18</sup>Na<sub>2</sub>, <sup>23</sup>Na<sub>2</sub>, and <sup>37</sup>Na<sub>2</sub> collision systems, and integral cross-sections for rotational excitation and the total collision cross-sections at the incident energy of 50, 100 and 200 meV are calculated. By analyzing the differences of these integral cross-sections, the change rules of the integral cross sections with the increase of rotational angular quantum number of Na<sub>2</sub> molecule, as well as with the change of the reduced mass of symmetric isotopic substituted system are 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. Moreover, at the relative incident energy of 100 meV, the contributions of different regions of the potential to integral cross-sections of rotational excitation for <sup>10</sup>He-<sup>18</sup>Na<sub>2</sub>, <sup>23</sup>Na<sub>2</sub> and <sup>37</sup>Na<sub>2</sub> collision systems are investigated.

**Keywords:** multiple hard-ellipsoid model, integral cross section for rotational excitation, sodium isotopic molecule, ellipsoid equipotential surface

**PACS:** 03.65.-w, 03.65.Nk, 03.65.Sq

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10974139, 10964002), the Science and Technology Foundation of Guizhou province of China (Grant No. [2009]2066), and the Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education of China (Grant No. 20050610010).

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