

^{20}Ne (^{34}Ne) 原子与 $^{18}\text{Na}_2$ ($^{23}\text{Na}_2$, $^{37}\text{Na}_2$) 分子 低温下冷碰撞的同位素效应研究*

臧华平¹⁾ 李文峰¹⁾ 令狐荣锋¹⁾²⁾ 程新路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)

(2010年4月9日收到; 2010年8月10日收到修改稿)

本文用多体刚性椭球模型计算了相对入射能量为 190 meV 时, 氖的同位素原子 ^{20}Ne , ^{34}Ne 与钠的同位素分子 $^{18}\text{Na}_2$, $^{23}\text{Na}_2$, $^{37}\text{Na}_2$ 替代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, 在此基础上计算并分析了相互作用势的不同区域对 ^{20}Ne - $^{18}\text{Na}_2$, $^{23}\text{Na}_2$, $^{37}\text{Na}_2$ 各碰撞体系转动激发积分散射截面的贡献情况. 通过分析各碰撞体系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 ^{20}Ne , ^{34}Ne - $^{18}\text{Na}_2$, $^{23}\text{Na}_2$, $^{37}\text{Na}_2$ 碰撞体系转动激发积分散射截面随转动量子数和体系约化质量变化的规律.

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

当前, 对超冷分子的研究成为一个极具活力的研究领域^[1-5], 冷分子碰撞和反应是近几年非常活跃的研究课题^[6,7]. 用冷原子光缔合^[8,9]、缓冲气载带冷却^[10,11]、磁/电场调节引发连续-束缚态 Feshbach 共振^[12,13]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、波色-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.

人们对 Ne - Na_2 碰撞体系的研究一直保持着浓厚的兴趣, Jones 等人提出了 Ne - Na_2 体系的势能面, 并用 IOS 近似方法计算研究了微分散射截面和积分

散射截面等^[14]. Osborne 等人分别用单体刚性椭球模型 (single hard-shell model) 研究了 ^{20}Ne - Na_2 碰撞体系的振转激发速率常数^[15]. 多体刚性椭球模型是在单体刚性椭球模型基础上发展而来的, 比较成功地解决了单体刚性椭球模型在处理稀有气体原子与碱金属分子碰撞时的局限性^[16], 能够对碰撞所引起的钠分子转动激发的根源给予比较清晰地解释, 是计算 Ne - Na_2 碰撞体系转动激发积分散射截面的有效方法^[15,17,18].

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^[19-22], 这是由于参与碰撞过程的某些原子或分子具有数种同位素, 通过研究此类原子与分子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^[23,24], 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 ^{20}Ne - Na_2 碰撞进行了一

* 国家自然科学基金 (批准号: 10974139, 10964002), 高等学校博士学科点专项科研基金 (批准号: 20050610010), 贵州省科学技术基金 (批准号: [2009]2066), 贵州省高层次人才科研条件特助项目 (批准号: TZJF-2008 年 42 号).

† 通讯联系人. E-mail: xdyang@scu.edu.cn

定的研究,但尚未见氖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,从理论上研究氖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,本文拟对氖同位素原子 ^{20}Ne , ^{34}Ne 与钠同位素分子 $^{18}\text{Na}_2$, $^{23}\text{Na}_2$, $^{37}\text{Na}_2$ 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

选择一组刚性椭球面表示氖原子与钠分子间的相互作用,每个椭球面表示一个等势面,入射氖原子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 -钠分子质心,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 $\alpha = 0^\circ, \alpha = 90^\circ$ 时根据一定 V 值计算出的 R 值, V 是Schinke等人提出的氖原子与钠分子间相互作用势的解析表达式^[14], R 是入射原子到 O 的距离, α 为 R 与钠分子键轴间的夹角.

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:

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

假设入射氖原子在 xOy 平面沿 x 轴正方向射向椭球面,如图1所示.

$(X,Y,Z), (x,y,z)$ 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 n 到的垂直距离.

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_i 的关系,如果 $E_n \leq V_i$,那么入射原子与此椭球面发生碰撞,如果 $E_n > V_i$,那么入射原子不与此椭球

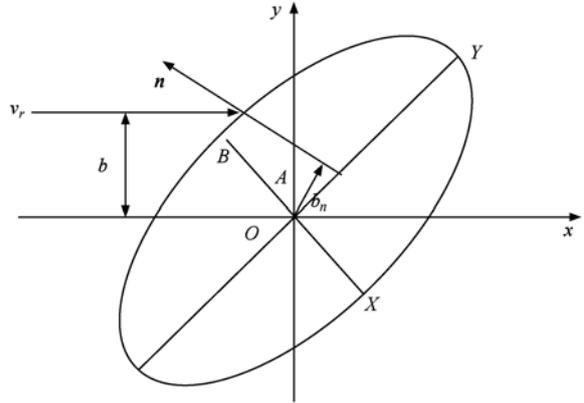


图1 入射原子与椭球面碰撞的平面图形

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.假设碰撞前钠分子不转动,碰撞后钠分子的转动角动量 j' 为

$$j' = \frac{2Il}{\mu b_n^2 + I}, \quad (3)$$

式中, μ 是Ne- Na_2 碰撞体系的约化质量, I 是 Na_2 分子转动惯量, $l = \mu v_n b_n$.

通过下式把钠分子的转动角动量 j' 化成相应的量子转动态 J' :

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

那么, $j' = J'\hbar, J'$ 是钠分子的转动角动量量子数.

为了计算Ne- Na_2 碰撞体系的转动激发积分散射截面,采用了蒙特卡罗(MC)方法来模拟大量氖原子与钠分子碰撞的过程,总模拟次数 N 为1000000次.在B-O近似下,同位素替代不影响体系的相互作用势,对Ne- Na_2 的同位素替代体系 $^{20}\text{Ne}, ^{34}\text{Ne}-^{18}\text{Na}_2, ^{23}\text{Na}_2, ^{37}\text{Na}_2$,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 σ 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 σ_{tot} 是

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

n_{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

人们公认 IOS 近似方法是计算 Ne-Na₂ 碰撞比较准确的一种理论方法^[14,17]. 本文选用多体刚性椭球模型, 选择 13 个椭球等势面计算了相对入射能量为 190 meV 时, ²⁰Ne-²³Na₂ 碰撞体系的态态转动激发积分散射截面. 计算结果表示在图 2 中, 13 个椭球等势面的相关参数列在表 1 中.

表 1 $E_r = 190$ meV 时, Ne-Na₂ 碰撞所选用的椭球等势面相关参数 (A_i, B_i 分别是第 i 个椭球面的长、短半轴, V 是计算 A_i, B_i 时取的势能值, V_i 是第 i 个椭球等势面实际所取的势能值)

$A_i/\text{\AA}$	$B_i/\text{\AA}$	V/meV	V_i/meV	i
6.20	5.42	1.0	1.9	1
5.92	5.19	2.0	2.9	2
5.76	5.03	3.0	3.5	3
5.65	4.91	4.0	4.2	4
5.56	4.82	5.0	5.0	5
5.49	4.74	6.0	6.0	6
5.42	4.67	7.0	7.0	7
5.30	4.55	9.0	11.0	8
5.02	4.31	15.0	15.0	9
4.86	4.16	20.0	27.0	10
4.45	3.78	40.0	45.0	11
4.14	3.45	70.0	98.0	12
3.98	3.23	100.0	190.0	13

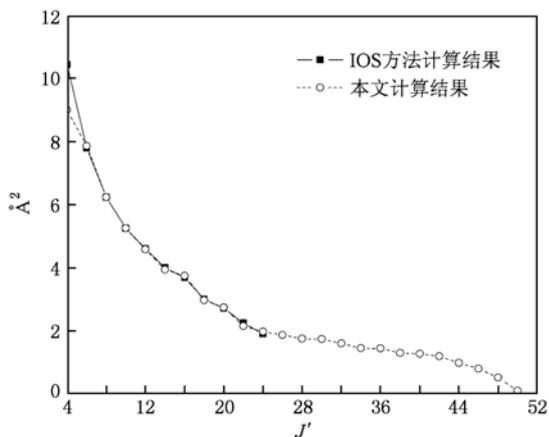


图 2 $E_r = 190$ meV, 本文计算的 ²⁰Ne-²³Na₂ 碰撞体系转动激发积分散射截面结果与 IOS 方法计算结果比较

从图 2 可以看出, 本文计算的 ²⁰Ne-²³Na₂ 碰撞体系的态态转动激发积分散射截面与文献中 IOS 近似方法计算结果^[14] 符合得较好, 而且本文对 $J' > 24$ 的更高转动激发态的积分散射截面也进行了计算, 得到收敛性较好的散射截面. 这说明我们使用多体刚性椭球模型计算氖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 $E_r = 190$ meV 时, ²⁰Ne, ³⁴Ne-¹⁸Na₂, ²³Na₂, ³⁷Na₂ 碰撞体系转动激发积分散射截面, 计算结果分别表示在图 3 和图 4 中.

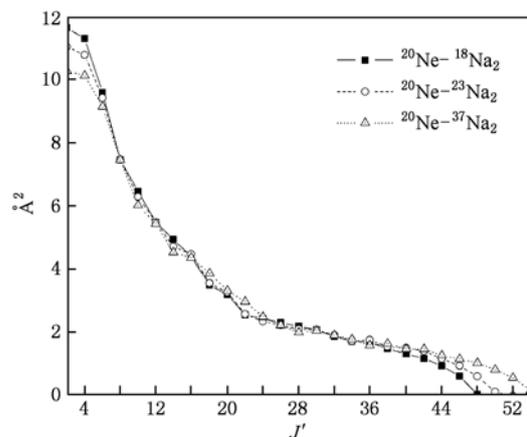


图 3 $E_r = 190$ meV, ²⁰Ne-¹⁸Na₂, ²³Na₂, ³⁷Na₂ 碰撞态态转动激发积分散射截面随 J' 的变化

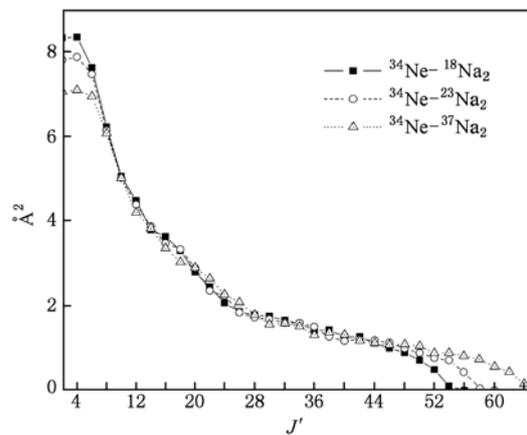


图 4 $E_r = 190$ meV, ³⁴Ne-¹⁸Na₂, ²³Na₂, ³⁷Na₂ 碰撞态态转动激发积分散射截面随 J' 的变化

从图 3 和图 4 可以看出, 入射能量 $E_r = 190$ meV 时的各碰撞体系的转动激发积分散射截面 σ 变化规律相似, 都是随着转动量子态 J' 的升高 σ 逐渐减小, 都是 $\sigma(J = 0 \rightarrow J' = 2)$ 最大, 直到最后收

敛,大体上呈负指数衰减形式,这与该体系弱的各项异性相关,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;在低激发态,积分散射截面 σ (同一激发态 J')随钠分子质量的增加逐渐减小,如 $J' = 2, 4$ 时,从图4看到 $^{34}\text{Ne-}^{18}\text{Na}_2, ^{23}\text{Na}_2, ^{37}\text{Na}_2$ 碰撞体系的转动激发积分散射截面 $\sigma(J = 0 \rightarrow J' = 2), \sigma(J = 0 \rightarrow J' = 4)$ 分别为 $8.33, 7.80, 7.06 \text{ \AA}^2; 8.34, 7.87, 7.09 \text{ \AA}^2$;随着激发态的升高,积分散射截面 σ (同一激发态 J')随钠分子质量的增加而增加,如 $J' = 56, 58$ 时,从图4看到 $^{34}\text{Ne-}^{18}\text{Na}_2, ^{23}\text{Na}_2, ^{37}\text{Na}_2$ 碰撞体系的转动激发积分散射截面 $\sigma(J = 0 \rightarrow J' = 56), \sigma(J = 0 \rightarrow J' = 58)$ 分别为 $0.00, 0.43, 0.81 \text{ \AA}^2; 0.00, 0.04, 0.74 \text{ \AA}^2$. 这与作者预先研究的He-Na₂同位素替代碰撞体系的态态转动激发积分散射截面的变化规律相似^[26, 27],这些规律对研究其他稀有气体原子与钠分子碰撞的同位素效应有一定的借鉴意义. 随着钠分子质量的增加,转动激发积分散射截面 σ 收敛越来越慢,即能够被激发到的最大转动量子态 J'_{max} 越来越高,如从图3和图4中看到 $^{20}\text{Ne}, ^{34}\text{Ne-}^{18}\text{Na}_2, ^{23}\text{Na}_2, ^{37}\text{Na}_2$ 碰撞体系的转动激发积分散射截面收敛时, J'_{max} 分别约为48, 50, 54; 54, 58, 64. 这可做如下解释^[25]:用半经典公式 $L \leq ka$ 表示对中心力场中的

势散射,粒子被散射中心场散射的条件是其轨道角动量子数 L 应不大于入射粒子对应的德布罗意波波数 k 与中心场有效作用半径 a 的乘积,其中波数 k 与入射粒子的质量 μ 及动能 E 的关系为 $k = \sqrt{2\mu E}/\hbar$. 于是,要得到收敛的总截面所需计算的转动激发态量子数可写成如下表达式: $k \leq \sqrt{2\mu E}/\hbar$. 如果我们只考虑分子转动激发,入射通道的总角动量与轨道角动量相等,即 $J = L, J \leq \sqrt{2\mu E}/\hbar$,且在B-O近似下,同位素替代不改变体系的相互作用势能面的形状,因而 $^{20}\text{Ne}, ^{34}\text{Ne-}^{18}\text{Na}_2, ^{23}\text{Na}_2, ^{37}\text{Na}_2$ 碰撞体系应有相同的有效势作用半径 a . 这样最高转动激发态量子数与体系约化质量和相对入射能量的开方成正比. 因此,当相对入射能量为一定时,能够被激发到的最高转动量子数 J'_{max} 和体系约化质量 μ 的平方根成正比,即 $J'_{\text{max}} \propto \sqrt{\mu}$,最高转动激发态量子数 J'_{max} 随体系约化质量的增加而逐渐变大.

3.2. 总转动激发积分散射截面

我们计算了相对入射能量 $E_r = 190 \text{ meV}$ 时, $^{20}\text{Ne}, ^{34}\text{Ne-}^{18}\text{Na}_2, ^{23}\text{Na}_2, ^{37}\text{Na}_2$ 碰撞体系的总转动激发积分散射截面 σ_{tot} ,结果表示在表2中.

表2 $^{20}\text{Ne}, ^{34}\text{Ne-}^{18}\text{Na}_2, ^{23}\text{Na}_2, ^{37}\text{Na}_2$ 碰撞体系总转动激发积分散射截面($\sigma_{\text{tot}}/\text{\AA}^2$)

E_r/meV	$^{20}\text{Ne-}^{18}\text{Na}_2$	$^{20}\text{Ne-}^{23}\text{Na}_2$	$^{20}\text{Ne-}^{37}\text{Na}_2$	$^{34}\text{Ne-}^{18}\text{Na}_2$	$^{34}\text{Ne-}^{23}\text{Na}_2$	$^{34}\text{Ne-}^{37}\text{Na}_2$
190	75.60	75.73	76.29	76.45	76.61	76.97

从表2中可以看出, $\sigma_{\text{tot}}(^{20}\text{Ne} - ^{18}\text{Na}_2) < \sigma_{\text{tot}}(^{20}\text{Ne} - ^{23}\text{Na}_2) < \sigma_{\text{tot}}(^{20}\text{Ne} - ^{37}\text{Na}_2) < \sigma_{\text{tot}}(^{34}\text{Ne} - ^{18}\text{Na}_2) < \sigma_{\text{tot}}(^{34}\text{Ne} - ^{23}\text{Na}_2) < \sigma_{\text{tot}}(^{34}\text{Ne} - ^{37}\text{Na}_2)$,但是总转动激发积分散射截面 σ_{tot} 相差不大,这与体系相互作用势有密切的关系,随着钠分子同位素质量的改变,体系的相互作用势保持不变,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.

3.3. 相互作用势的不同区域对转动激发积分散射截面的影响

我们利用多体刚性椭球模型计算了相对碰撞能量 $E_r = 190 \text{ meV}$ 时,相互作用势的不同区域对 $^{20}\text{Ne-}^{18}\text{Na}_2, ^{23}\text{Na}_2, ^{37}\text{Na}_2$ 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、表4、表5中.

表3—5中,给出了相互作用势的0—1.9, 0—2.9, 0—3.5, 0—4.2, 0—5, 0—6, 0—7, 0—11, 0—

15, 0—27, 0—45, 0—98, 0—190 meV 区域,即第1, 1—2, 1—3, 1—4, 1—5, 1—6, 1—7, 1—8, 1—9, 1—10, 1—11, 1—12, 1—13个椭球等势面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, 4, 5可以看出相互作用势对不同碰撞体系转动激发积分散射截面的影响有一定的规律性,即转动激发积分散射截面主要受各向异性排斥势的影响,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,不仅高能区域对其有影响,而且低能区域对其也有影响,但是受低能区域的影响较大,如从表3—5中可以看出在 $^{20}\text{Ne-}^{18}\text{Na}_2, ^{23}\text{Na}_2, ^{37}\text{Na}_2$ 碰撞体系中,对 $\sigma(J = 0 \rightarrow J' = 2), \sigma(J = 0 \rightarrow J' = 4)$ 有贡献的势能区域都为0—190 meV,而0—27 meV的较低能区域即第1—10个椭球等势面对其的贡献却约分别达到了71.16%, 71.12%, 70.95%; 70.73%, 70.63%, 70.59%, 又如对 $\sigma(J = 0 \rightarrow J' =$

表 3 相互作用势的不同区域对²⁰Ne-¹⁸Na₂ 碰撞体系转动激发积分散射截面($\sigma/\text{\AA}^2$)的贡献

σ	0—190	0—98	0—45	0—27	0—15	0—11	0—7	0—6	0—5.0	0—4.2	0—3.5	0—2.9	0—1.9
00—02	9.71	9.11	8.26	6.91	6.06	5.06	4.19	3.63	2.95	2.31	1.68	1.06	0.48
00—04	9.43	8.88	8.00	6.67	5.63	4.62	3.74	3.14	2.48	1.85	1.30	0.74	0.29
00—06	8.00	7.39	6.45	5.12	3.99	3.09	2.24	1.62	1.07	0.62	0.27	0.07	
00—08	6.23	5.66	4.65	3.33	2.22	1.38	0.69	0.29	0.06				
00—10	5.40	4.74	3.62	2.27	1.11	0.47							
00—12	4.58	3.91	2.57	1.32	0.35	0.04							
00—14	4.13	3.50	1.92	0.77									
00—16	3.68	3.00	1.41	0.38									
00—18	2.93	2.24	0.76										
00—20	2.68	1.90	0.41										
00—22	2.14	1.32											
00—24	2.04	1.21											
00—26	1.93	1.07											
00—28	1.84	0.86											
00—30	1.74	0.61											
00—32	1.57	0.01											
00—34	1.45												
00—36	1.42												
00—38	1.25												
00—40	1.11												
00—42	0.99												
00—44	0.80												
00—46	0.52												
00—48	0.04												

表 4 相互作用势的不同区域对²⁰Ne-²³Na₂ 碰撞体系转动激发积分散射截面($\sigma/\text{\AA}^2$)的贡献

σ	0—190	0—98	0—45	0—27	0—15	0—11	0—7	0—6	0—5.0	0—4.2	0—3.5	0—2.9	0—1.9
00—02	9.21	8.64	7.83	6.55	5.76	4.79	3.96	3.42	2.77	2.58	1.58	1.00	0.45
00—04	8.99	8.48	7.64	6.35	5.40	4.47	3.63	3.05	2.42	1.83	1.29	0.75	0.30
00—06	7.86	7.27	6.39	5.15	4.07	3.22	2.42	1.81	1.26	0.78	0.39	0.13	
00—08	6.23	5.67	4.72	3.44	2.38	1.56	0.90	0.44	0.14	0.02			
00—10	5.25	4.65	3.60	2.30	1.22	0.58	0.06						
00—12	4.58	3.91	2.75	1.53	0.57	0.13							
00—14	3.94	3.34	1.89	0.82	0.03								
00—16	3.74	3.11	1.58	0.58									
00—18	2.97	2.35	0.89	0.07									
00—20	2.74	2.01	0.59										
00—22	2.16	1.44	0.14										
00—24	1.97	1.19											
00—26	1.87	1.09											
00—38	1.76	0.96											
00—30	1.75	0.80											
00—32	1.60	0.51											
00—34	1.45	0.03											
00—36	1.48												
00—38	1.30												
00—40	1.27												
00—42	1.19												
00—44	0.98												
00—46	0.80												
00—48	0.52												
00—50	0.11												

表5 相互作用势的不同区域对 $^{20}\text{Ne}-^{37}\text{Na}_2$ 碰撞体系转动激发积分散射截面($\sigma/\text{\AA}^2$)的贡献

σ	0—190	0—98	0—45	0—27	0—15	0—11	0—7	0—6	0—5	0—4.2	0—3.5	0—2.9	0—1.9
00—02	8.57	8.02	7.26	6.08	5.35	4.45	3.67	3.17	2.57	2.01	1.46	0.91	0.40
00—04	8.45	7.96	7.19	5.99	5.13	4.26	3.47	2.92	2.33	1.76	1.27	0.75	0.32
00—06	7.63	7.09	6.29	5.12	4.14	3.31	2.58	2.00	1.41	0.97	0.57	0.22	0.04
00—08	6.23	5.71	4.80	3.60	2.62	1.01	1.19	0.72	0.35	0.11	0.01		
00—10	5.03	4.49	3.59	2.41	1.44	0.79	0.22	0.04					
00—12	4.54	3.93	2.91	1.74	0.84	0.35							
00—14	3.79	3.21	2.02	0.96	0.20								
00—16	3.65	3.11	1.72	0.73									
00—18	3.23	2.65	1.25	0.37									
00—20	2.78	2.13	0.78										
00—22	2.49	1.84	0.50										
00—24	2.09	1.33	0.09										
00—26	1.87	1.11											
00—28	1.67	1.00											
00—30	1.72	0.93											
00—32	1.60	0.71											
00—34	1.49	0.53											
00—36	1.34	0.12											
00—38	1.38												
00—40	1.24												
00—42	1.24												
00—44	1.07												
00—46	0.98												
00—48	0.87												
00—50	0.70												
00—52	0.48												
00—54	0.15												

6) 有贡献的势能区域分别为 1.9—190, 1.9—190, 0—190 meV, 而 0—27 meV 的较低能区域即第 1—10 个椭球等势面对其的贡献却约分别达到了 64.00%, 65.52%, 67.10%; 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, 而且受高势能区域的影响较大, 如从表 3—5 中可以看出在 $^{20}\text{Ne}-^{18}\text{Na}_2$, $^{23}\text{Na}_2$, $^{37}\text{Na}_2$ 碰撞中, 相互作用势的 0—45 meV 即第 1—11 个椭球等势面对 $\sigma(J=0 \rightarrow J'=26)$ 的贡献几乎为 0, 而相互作用势的 45—98 meV 即第 11—12 个椭球等势面对其的贡献分别约为 55.44%, 58.29%, 59.36%,

又如相互作用势的 0—98 meV 即第 1—12 个椭球等势面对 $\sigma(J=0 \rightarrow J'=48)$, $\sigma(J=0 \rightarrow J'=50)$ 的贡献几乎为 0, 而几乎全部来自于相互作用势的 98—190 meV 即第 13 个椭球等势面的贡献. 由于小角散射多发生在与较外层椭球面的碰撞, 大角散射多发生在与较内层椭球面的碰撞, 从以上的分析可以看出激发态越高, 大角散射占的比例越大, 高激发态散射主要发生在大角部分. 这是由于只有当入射原子和靶分子很接近时, 才能使二者产生较强的相互作用, 这一方面既能导致粒子之间发生能量转移, 从而诱导钠分子内部产生转动激发; 另一方面强烈的相互作用又能导致巨大的动量转移从而引起大角度散射. 这与作者预先研究的 He- Na_2 同位素

替代碰撞体系的情形相似^[26, 27], 这与 He-Na₂, Ne-Na₂ 体系相互作用势的相似性较大是密切相关的, 对进一步研究相互作用势对其他稀有气体原子与钠分子碰撞的转动激发积分散射截面的影响有一定的参考价值.

4. 结 论

本文用多体刚性椭球模型计算了相对入射能量为 $E_i = 190$ meV 时, 氖同位素原子²⁰Ne, ³⁴Ne 与钠的同位素分子¹⁸Na₂, ²³Na₂, ³⁷Na₂ 碰撞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, 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²⁰Ne, ³⁴Ne-¹⁸Na₂, ²³Na₂, ³⁷Na₂ 碰撞体系转动激发积分散射截面随钠分子质量变化的规律, 在此基础上计算了相互作用势的不同区域对²⁰Ne-¹⁸Na₂, ²³Na₂, ³⁷Na₂ 碰撞体系转动激发积分散射截面的贡献情况, 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. 研究结果对稀有气体原子与钠分子碰撞体系的分子束散射实验和进一步的理论研究有一定的借鉴作用. 基于以上计算和讨论, 可得到如下结论:

1. 转动激发积分散射截面主要受各向异性排斥势的影响, 低转动激发态积分散射截面受各向异性排斥势低能区域的影响较大, 高转动激发态积分散射截面主要受高势能区域的影响; 低激发态被激发的概率大于高激发态被激发的概率; 激发态越高, 大角散射的概率越大; 当相对入射能量一定时, 随着碰撞体系约化质量的增加, 转动激发积分散射截面(同一激发态 J') 在低激发态, 随体系约化质量的增加而逐渐减小, 在高激发态, 随体系约化质量的增加而逐渐增加.

2. 当相对入射能量一定时, 随着体系约化质量的增加, 转动激发积分散射截面收敛越来越慢, 即能够被激发到的最大转动量子态 J' 越来越高.

-
- [1] Yin Y L, Xia Y, Yin J P 2008 *Chin. Phys. B* **17** 3672
- [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** 5272 (in Chinese) [孙晓鹏、冯志芳、李卫东、贾锁堂 2007 物理学报 **56** 5272]
- [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] Weber T, Herbig J, Mark M 2003 *Science* **299** 232
- [6] Qiu Y, He J, 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]
- [7] Wu H Y, Yin L 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 490 (in Chinese) [武宏宇、尹澜 2006 物理学报 **55** 0490]
- [8] Fioretti A, Comparat D, Crubellier A 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 4402
- [9] Donley E A, Claussen N R, Thompson S T 2002 *Nature* **417** 529
- [10] Weinstein J D, Carvalho R, Guillet T 1998 *Nature* **359** 148
- [11] Bethlem H L, Berden G, Meijer G 1999 *Phys. Rev. Lett.* **83** 1558
- [12] Jochim S, Bartensein M, Altmeyer A 2003 *Science* **302** 2101
- [13] Greiner M, Regal C A, Jin D S 2003 *Nature* **426** 537
- [14] Jones P L, Hefter U, Mattheus A, Witt J, Bergmann K, Muller W, Meyer W, Schinke R 1982 *Phys. Rev. A* **26** 1283
- [15] Osborne M A, McCaffery A J 1994 *J. Chem. Phys.* **101** 5604
- [16] Marks A J 1994 *J. Chem. Soc. Faraday Trans.* **90** 2857
- [17] Clare S, Marks A J, McCaffery A J 2000 *J. Phys. Chem. A* **104** 7181
- [18] McCaffery A J 2004 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **6** 1637
- [19] Shen G X, Wang R K, Linghu R F, Yang X D 2007 *Chin. Phys.* **16** 3352
- [20] 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]
- [21] Shen G X, Wang R K, Linghu R F, Yang X D 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 0155 (in Chinese) [沈光先、汪荣凯、令狐荣锋、杨向东 2009 物理学报 **57** 0155]
- [22] 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 **58** 0229]
- [23] 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]
- [24] 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]
- [25] Brian H B 1979 *Atomic Collisions Theory* (Benjamin: Cummings Publishing Company inc) p372
- [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] Zang H P, Li W F, Linghu R F, Cheng X L, Yang X D 2010
Acta Phys. Sin. **59** 4591 (in Chinese) [臧华平、李文峰、令

狐荣锋、程新路、杨向东 2010 物理学报 **59** 4591]

Study of isotope effect in $^{20}\text{Ne} (^{34}\text{Ne}) - ^{18}\text{Na}_2$ ($^{23}\text{Na}_2$, $^{37}\text{Na}_2$) low-temperature collisions*

Zang Hua-Ping¹⁾ Li Wen-Feng¹⁾ Linghu Rong-Feng¹⁾²⁾ Cheng Xin-Lu¹⁾ 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 9 April 2010; revised manuscript received 10 August 2010)

Abstract

Multiple ellipsoid model is applied to the ^{20}Ne , $^{34}\text{Ne} - ^{18}\text{Na}_2$, $^{23}\text{Na}_2$ and $^{37}\text{Na}_2$ collision systems. The integral cross-sections for rotational excitation and total collision cross-sections at the incident energy of 190 meV are calculated. Moreover, at the related incident energy, the contributions of different regions of the potential to the integral cross-sections of rotational excitation for $^{20}\text{Ne} - ^{18}\text{Na}_2$, $^{23}\text{Na}_2$ and $^{37}\text{Na}_2$ collision systems are investigated. By analyzing the differences of these integral cross-sections, the change rules of the integral cross sections with the change of rotational angular quantum number of Na_2 molecule, as well as with the change of the reduced mass of symmetric isotopic substituted system are obtained.

Keywords: multiple hard-ellipsoid model, integral cross sections 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 Doctoral Program Foundation of Institution of Higher Education of China (Grant No. 20050610010), the Science-technology Foundation of Guizhou Province of China (Grant No. [2009] 2066), the Special Project for Research Conditions of High-level Talents of Guizhou Province (Grant No. TZJF2008.42).

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