

Ne 同位素替代下 Ne-HF 碰撞截面的理论计算*

王晓璐¹⁾²⁾ 令狐荣锋³⁾ 杨建会⁴⁾ 吕兵¹⁾²⁾ 高涛²⁾ 杨向东^{2)†}

1) (贵州师范大学物理与电子科学学院, 贵阳 550001)

2) (四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065)

3) (贵州师范学院物理与电子科学学院, 贵阳 550018)

4) (乐山师范学院物理与电子工程学院, 乐山 614004)

(2011 年 6 月 1 日收到; 2011 年 8 月 26 日收到修改稿)

采用 Huxley 势函数拟合 QCISD(T)/aug-cc-pVTZ 计算的相互作用势能面, 通过精确度较高的密耦近似方法计算了 $E = 100$ meV 时, 氖原子的三种同位素 ^{16}Ne , ^{20}Ne , ^{34}Ne 与 HF 分子碰撞系统的微分截面和分波截面. 探讨了 Ne 的同位素替代引起的 Ne-HF 碰撞激发截面的变化规律.

关键词: 各向异性势, 密耦近似, 截面, 同位素替代

PACS: 31.15.A-, 31.15.-p, 34.20.Gj

1 引言

原子与分子碰撞过程的研究对天体物理、高层大气物理、原子分子反应动力学、激光物理、化学激光等很多领域有重要的意义. 原子分子碰撞提供的各种原子分子的科学数据, 在能源、环境、医学、材料和生命科学以及国防研究中都发挥着重要作用. 近年来, 从不同散射实验获得的高质量实验数据^[1-6]可以极好地测试原子与分子间相互作用势能表面的特征. 其中, 稀有气体和卤族氢化物的 Van der Waals 弱相互作用通常被作为中性非共价相互作用的比较经典的研究模型, 应用越来越广泛. 目前, 人们针对惰性气体原子与卤族氢化物分子的相互作用提出了多种相互作用势模型^[7-12]. 本文拟基于 QCISD(T) 方法和 aug-cc-pVTZ 基组全空间扫描的相互作用势能面数据, 采用 Huxley 势函数^[13]拟合得到较为可靠的势模型, 通过密耦近似方法^[14,15]对 Ne-HF 碰撞系统进行量子力学计算. 探讨 Ne 的同位素替代引起的 Ne-HF 碰撞截面的变化规律.

2 理论计算方法

根据 Born-Oppenheimer 近似, 我们假定电子运动分离开来, 忽略了电子角动量对总角动量的贡献, 则原子 $A(\text{Ne})$ 和双原子分子 $BC(\text{HF})$ 碰撞系统的总波函数 $\psi_{\alpha}^{(+)}(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ 满足 Schrödinger 方程

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

总 Hamiltonian 可表示为

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

如图 1 所示, 式中 $\cos\theta = \mathbf{R} \cdot \mathbf{r}$, $\mu_{A,BC}$ 表示总系统的约化质量, μ_{BC} 是双原子分子的约化质量, $V(R, r, \cos\theta)$ 是碰撞体系的相互作用势.

体系的总波函数可以写成

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

式中 $g(R)$ 是入射原子相对分子质心运动的径向波函数, $\phi(r)$ 是双原子分子振转波函数的径向部分,

* 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), 贵州省科学技术基金 (批准号: 黔科合 J 字 [2012]2285 号) 和贵州师范大学博士科研基金资助的课题.

† E-mail: xdyang@scu.edu.cn

$Y(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ 表示原子围绕分子转动和靶分子转动的总角函数. 把 (2),(3) 式代入 (1) 式, 可得

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial^2}{\partial R^2} - \frac{l_\beta(l_\beta + 1)}{R^2} + k_\beta^2 \right) g_{n_\beta J_\beta l_\beta, n_\alpha J_\alpha M_\alpha}^J(R) \\ &= \frac{2\mu_{A,BC}}{\hbar^2} \sum_{n_\gamma J_\gamma l_\gamma} V_{n_\beta J_\beta l_\beta, n_\gamma J_\gamma l_\gamma}^J(R) \\ & \quad \times g_{n_\beta J_\beta l_\beta, n_\alpha J_\alpha M_\alpha}^J(R). \end{aligned} \quad (4)$$

方程 (4) 就是计算原子与双原子分子碰撞径向波函数的密耦方程, 方程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. 则从 $(n_\alpha J_\alpha)$ 态跃迁到 $(n_\beta J_\beta)$ 态的微分散射截面可由下式给出 [16]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \sigma_{n_\alpha J_\alpha \rightarrow n_\beta J_\beta}}{\partial \Omega} &= \frac{1}{(2J_\alpha + 1)} \cdot \frac{K_\beta}{K_\alpha} \\ & \quad \times \sum_{M_\alpha M_\beta} |f_{n_\beta J_\beta M_\beta, n_\alpha J_\alpha M_\alpha}(\theta, \phi)|^2. \end{aligned} \quad (5)$$

对 (5) 式作角度积分可得到从 $(n_\alpha J_\alpha)$ 态跃迁到 $(n_\beta J_\beta)$ 态的总截面公式

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

从 $(n_\alpha J_\alpha)$ 态跃迁到 $(n_\beta J_\beta)$ 态的振转激发分波散射截面可由下式给出:

$$\begin{aligned} \sigma_{n_\alpha J_\alpha \rightarrow n_\beta J_\beta}^J &= \frac{1}{(2J_\alpha + 1)} \frac{4\pi}{k_\alpha^2} \sum_{M_\alpha l_\beta} (2l_\beta + 1) \\ & \quad \times |T_{n_\beta J_\beta l_\beta, n_\alpha J_\alpha M_\alpha}^J|^2. \end{aligned} \quad (7)$$

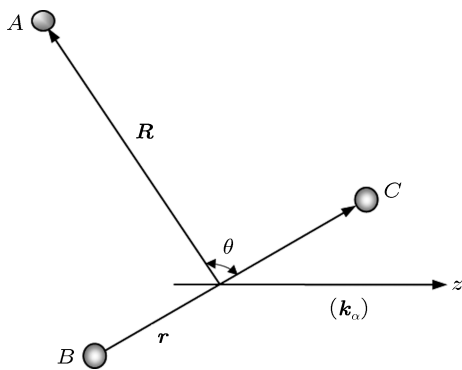


图1 Ne原子与HF分子碰撞几何图

3 计算结果及讨论

3.1 Ne-HF 碰撞系统的相互作用势计算

Ne 原子与 HF 分子碰撞系统的相互作用势离散点的计算, 我们是在单双取代并加入三重激发项校正的二次组态相互作用 (QCISD(T)) 方法下, 采用 aug-cc-pVTZ 基组, 如图 1 所示, HF 分子的键长 r 取优化值 0.9168 \AA , 在 $\theta = 0^\circ, 20^\circ, 40^\circ, 60^\circ, 80^\circ, 90^\circ, 100^\circ, 120^\circ, 140^\circ, 160^\circ, 180^\circ$ 共 11 个方向上进行计算. 我们采用了 Boys 和 Bernardi 提出的 counterpoise 方法 [17,18], 提高计算的相互作用势离散点数据的精确性, 在计算的基础上消除基组重叠误差 (BSSE), 共计算了 891 个几何构型的势能点.

Ne-HF 的 QCISD(T) 势能面在 0° 到 180° 共 11 个方向上的变化情况如图 2 所示.

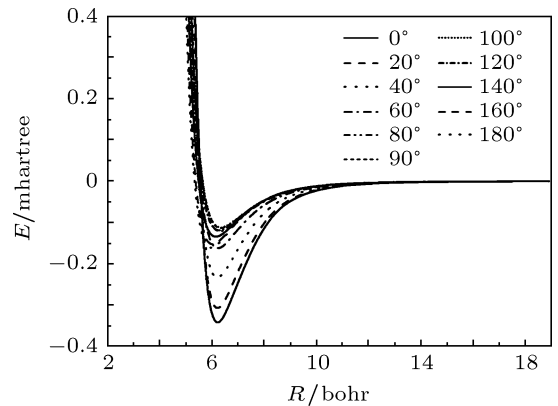


图2 Ne-HF 的势能曲线 (1 hartree = 27.21 eV)

根据 Ne-HF 的 QCISD(T) 势能面, 我们可以构造各向异性势解析表达式

$$V(R, r, \theta) = \sum_{n=0}^{10} V_n(R, r) P_n(\cos \theta), \quad (8)$$

$P_n(\cos \theta)$ 为 Legendre 函数.

(8) 式可用矩阵表示为

$$V(R, r, \theta) = P V_n(R, r). \quad (9)$$

(9) 式左乘 P^{-1} , 则有

$$V_n(R, r) = P^{-1} V(R, r, \theta). \quad (10)$$

靶分子的核间距用 r 表示, 由于仅讨论转动激发, 故核间距可取一常数, 可解得 Ne-HF 系统基态 ($X^1\Sigma^+$) 对应各向异性势的径向系数 $V_0(R, r), V_1(R, r), V_2(R, r), \dots, V_{10}(R, r)$. 用 Huxley 势函数对径向系数点进行非线性最小二乘法拟合, 拟合公式为

$$V(R) = A(1 + a_1 R + a_2 R^2 + a_3 R^3) \exp(-a_4 R)$$

$$-\tanh(R - R_e/2) \times (C_6 R^{-6} + C_8 R^{-8} + C_{10} R^{-10}), \quad (11)$$

式中 $A, R_e, a_1, a_2, a_3, a_4, C_6, C_8, C_{10}$ 共九个参数均作为拟合参数. 则径向系数 $V_n(R, r)$

($n = 0, 1, 2, \dots, 10$) 随 R 的变化关系如图 3 所示.

NeHF 系统径向系数前 5 项的拟合参数如表 1 所示.

表 1 Ne-HF 径向系数的拟合参数

	A/cm^{-1}	R_e/a_0	$a_1/10^2 a_0^{-1}$	$a_2/10^1 a_0^{-2}$	a_3/a_0^{-3}	a_4/a_0^{-1}	$C_6/10^6 \text{cm}^{-1} \cdot a_0^6$	$C_8/10^8 \text{cm}^{-1} \cdot a_0^8$	$C_{10}/10^{10} \text{cm}^{-1} \cdot a_0^{10}$
V_0	4.09375	2.59744	4846.183	-1733.64	230.9073	2.10495	12827.74	2600736	-2.1×10^7
V_1	5.48765	3.63872	-201.904	77.09588	-2.68258	1.66385	-4787.12	1436987	-1.2×10^7
V_2	1.15656	2.56033	-2927.79	921.132	-90.7011	1.29401	-120750	1779415	-9419162
V_3	3.06626	2.19787	-1062.28	-207.858	71.20972	1.91327	12398.72	-185207	-1376989
V_4	0.74106	3.08446	9.77276	-2.13943	0.12012	0.4692	23256.18	-204667	57079.36

为了检验我们计算得到的相互作用势的可靠性和散射截面密偶计算结果的可靠性, 我们计算了入射能量 $E = 48.35 \text{ meV}$ 下, Ne 原子与 HF 分子碰撞的微分截面, 并与相同碰撞能量下的 CEPA 势^[19] 和余春日等拟合势^[19] 的计算结果进行了比较, 如图 4 所示.

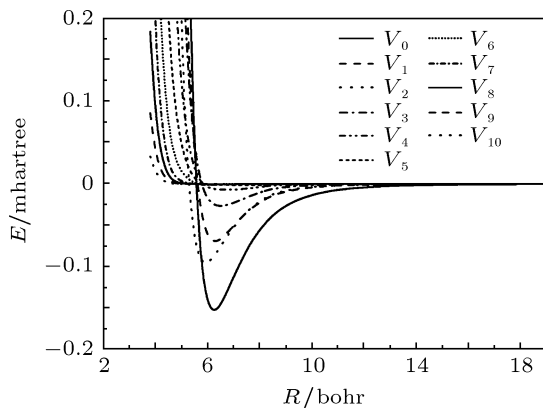


图 3 Ne-HF 的拟合势径向系数

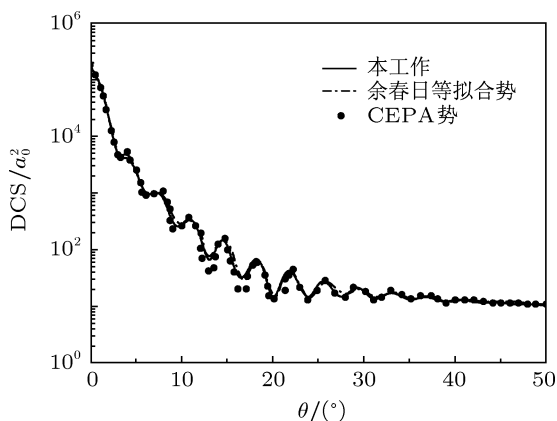


图 4 计算势与余春日等的拟合势, CEPA 势的微分截面的比较 ($E = 48.35 \text{ meV}$)

从图 4 可以看出, 我们构造的势模型与余春日等采用张愚^[20] 计算的 NeHF 复合物的势能面拟合得到的相互作用势, 在微分截面的计算结果上符合得非常好, 说明我们在 QCISD(T) 方法下, 采用 aug-cc-pVTZ 基组计算的相互作用势能面是比较可靠的. 同时与 CEPA 势的微分截面在衍射振荡位置和振荡幅度上从 0° 到 50° , 具有相同的变化规律, 符合得较好. 并且, 在入射原子能量为 48.35 meV 时, 余春日等拟合势计算得到的总非弹性截面^[19] 为 8.55 \AA^2 , CEPA 势的总非弹性截面^[21] 为 9.05 \AA^2 , 我们计算得到的总非弹性截面为 9.74 \AA^2 , 实验得到的总非弹性截面^[21] 为 $15(3) \text{ \AA}^2$ 因此, 用上述拟合势计算 $E = 100 \text{ meV}$ 时 Ne-HF 碰撞的微分截面和分波截面的结果应该还是比较可靠的.

3.2 Ne 同位素替代下 Ne-HF 碰撞系统的微分截面研究

当入射能量为 100 meV 时, 我们计算了 Ne 同位素替代下 $^{16}\text{Ne-HF}$, $^{20}\text{Ne-HF}$, $^{34}\text{Ne-HF}$ 碰撞系统的微分截面和弹性微分截面, 如图 5 和图 6 所示.

根据图 5 可以看出, 微分截面的角分布在 0° 时是最大. 其中, $^{34}\text{Ne-HF}$ 系统的角分布在 0° 时最大, $^{16}\text{Ne-HF}$ 系统最小, 说明微分截面的角分布在 0° 时会随着入射原子质量的增加, 出现明显增大. 微分截面均出现衍射振荡现象并迅速减小, 随着角度继续增大, 振幅越来越小, 逐渐消失. 在 Ne 同位素替代情况下, 微分截面的同一级衍射振荡极小值位置随着入射原子质量的增加, 向小散射角方向逐渐移动. 这是因为根据德布罗意波长公式 $\lambda = h/\sqrt{2\mu E}$

和衍射公式 $2d \sin \theta = n\lambda$, 其中, μ 是系统的约化质量, 可得到入射能量 E 相同时, $\sin \theta \propto n/\sqrt{\mu}$. 所以, 同位素氖原子质量增大, 衍射振荡极小值位置向小散射角方向逐渐移动. 同时, 衍射振荡的平均间隔减小, $^{16}\text{Ne-HF}$, $^{20}\text{Ne-HF}$, $^{34}\text{Ne-HF}$ 碰撞系统分别为 2.83° , 2.67° , 2.63° . 这是由于若我们把衍射振荡的平均间隔以 $\Delta\theta$ 表示, 用 σ 表示势能零点位置, 则衍射振荡的平均间隔满足规律^[22] $\Delta\theta \approx \frac{\pi\hbar}{\sigma\sqrt{2\mu E}}$. 式中, 同位素替代不改变 Ne-HF 碰撞系统的相互作用势, 故 σ 不变, 当入射能量 E 一定时, 随着入射原子 Ne 的质量增加, 碰撞系统衍射振荡的平均间隔减小. 图 5 与图 6 表示微分截面和弹性微分截面具有相似的变化趋势, 变化规律近似. 但是从图 6 中 Ne 同位素替代引起的弹性微分截面的变化可以看出, $^{16}\text{Ne-HF}$ 碰撞系统的弹性微分截面在 10° 时, 振幅出现一个最大值; $^{20}\text{Ne-HF}$ 碰撞系统的弹性微分截面在 9° 时, 振幅出现一个明显的最大值; $^{34}\text{Ne-HF}$ 碰撞系统的弹性微分截面在 8° 时, 振幅也出现一个明显的最大值.

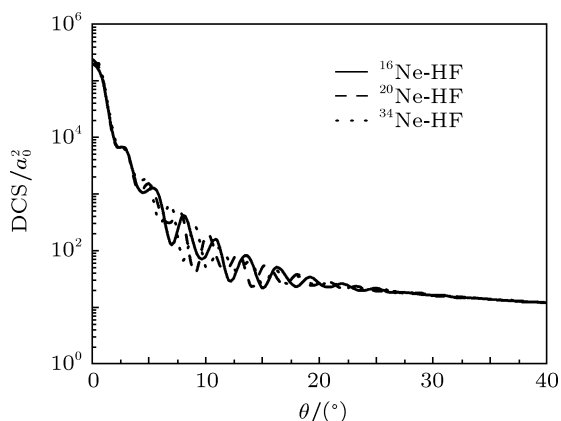


图 5 Ne 同位素替代引起的微分截面随散射角的变化 ($E = 100 \text{ meV}$)

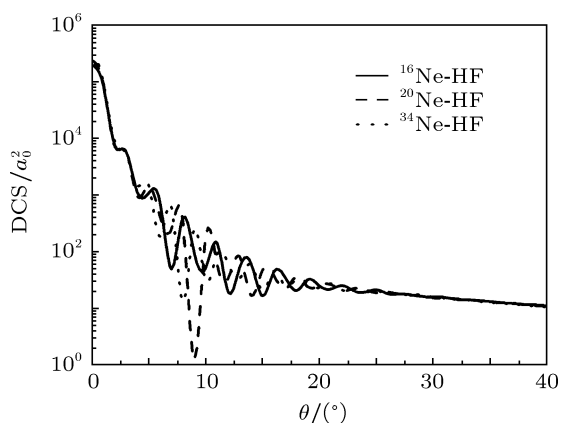


图 6 Ne 同位素替代引起的弹性微分截面随散射角的变化 ($E = 100 \text{ meV}$)

图 7 为入射能量 E 为 100 meV 时, $^{16}\text{Ne-HF}$, $^{20}\text{Ne-HF}$, $^{34}\text{Ne-HF}$ 碰撞系统的 00-01, 00-02, 00-03, 00-04, 00-05 态 - 态微分截面.

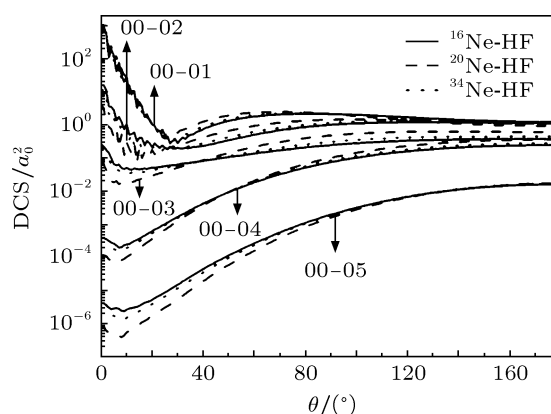


图 7 Ne 同位素替代引起的非弹性微分截面随散射角的变化 ($E = 100 \text{ meV}$)

从图 7 可以知道, 非弹性散射的振荡主要出现在小角区域. 高激发跃迁的态 - 态微分截面在大角区域明显比小角区域大, 说明高激发态散射主要发生在大角部分. 这是因为当入射原子和靶分子之间很接近时, 原子与分子间较强的相互作用导致粒子之间出现能量转移, 引起靶分子产生转动激发, 同时巨大的能量转移引起大角散射. 这也说明了大角散射和转动激发为何总是同时出现. 随着 Ne 同位素质量的增加, 低激发态的微分截面在 0° 时很接近, 但是处于高激发态时, 却出现入射原子质量越大, 微分截面在 0° 时明显减小的趋势. 如图 7 中的 00-05 态 - 态微分截面就非常明显.

3.3 Ne 同位素替代下 Ne-HF 碰撞系统的分波截面研究

图 8 和图 9 分别是 Ne 同位素替代引起的分波截面 (partial cross-section, PCS), 弹性分波截面 (elastic partial cross-section, EPCS) 和总非弹性分波截面 (total inelastic partial cross-section, TIPCS) 随量子数 J 的变化关系. 在入射能量为 100 meV 下, 分波截面和弹性分波截面有非常相似的规律. 随着氖同位素原子质量的增加, $^{16}\text{Ne-HF}$, $^{20}\text{Ne-HF}$, $^{34}\text{Ne-HF}$ 碰撞系统的分波截面和弹性碰撞分波截面均随转动量子数 J 的增加发生越来越强烈的振荡, 当振荡到一个极大值 σ_{max} 后, 尾部出现很强的尾部效应, 之后分波截面迅速收敛. 这种现象说明在最靠近 R 的远距离处, Ne-HF 相互作用势的尾部有很强的吸引支^[23]. 截面振荡的极大值对应

的转动量子数越来越大,极大值变小,分波截面收敛变慢.如 $^{16}\text{Ne-HF}$, $^{20}\text{Ne-HF}$, $^{34}\text{Ne-HF}$ 碰撞系统的分波截面极大值位置依次为 49, 53, 60, 极大值分别为 $10.03a_0^2$, $9.32a_0^2$, $8.34a_0^2$, 截面收敛值 J 分别为 135, 144, 161. 又如 $^{16}\text{Ne-HF}$, $^{20}\text{Ne-HF}$, $^{34}\text{Ne-HF}$ 碰撞系统的弹性分波截面极大值位置依次为 49, 53, 60, 极大值分别为 $9.74a_0^2$, $9.07a_0^2$, $8.06a_0^2$, 分波截面收敛值 J 分别为 135, 144, 161. 总非弹性分波截面出现一个极大值后,也出现了比较明显的尾部效应,其极大值位置依次为 33, 36, 42, 极大值分别为 $1.09a_0^2$, $1.10a_0^2$, $1.10a_0^2$, 分波截面收敛值 J 分别为 115, 121, 135. 由此我们可以看出,对于 Ne-HF 碰撞系统,分波截面主要以弹性分波截面为主,入射原子同位素替代引起分波截面和弹性碰撞分波截面的极大值依次变小,但是总非弹性分波截面却呈现增大的趋势.这是因为在 Born-Oppenheimer 近似下,同位素替代不会引起系统的相互作用势能面形状发生改变,所以 $\text{Ne}(^{16}\text{Ne}, ^{20}\text{Ne}, ^{34}\text{Ne})\text{-HF}$ 碰撞系统有相同的有效势作用半径 a . 这样,根据半经典公式^[24] $L \leq ka$, 有 $J = L \leq a\sqrt{2\mu E}/\hbar$, 即 $J \propto \sqrt{\mu E}$ (μE 表示入射能量和体系约化质量的乘积), 则可知同一入射能量下,随着系统的约化质量逐渐增加,分波截面振荡极大值的位置依次向 J 增大的方向移动. 非弹性激发跃迁的概率将增大,所以总非弹性分波截面的极大值呈现增大的趋势,而弹性分波截面的极大值依次变小. 由于分波截面主要以弹性分波截面的贡献为主,所以分波截面的极大值也依次变小.

图 10 和图 11 分别是 Ne 同位素替代引起的非弹性 00-01, 00-02, 00-03, 00-04, 00-05 碰撞转动激发分波截面随量子数 J 的变化关系.

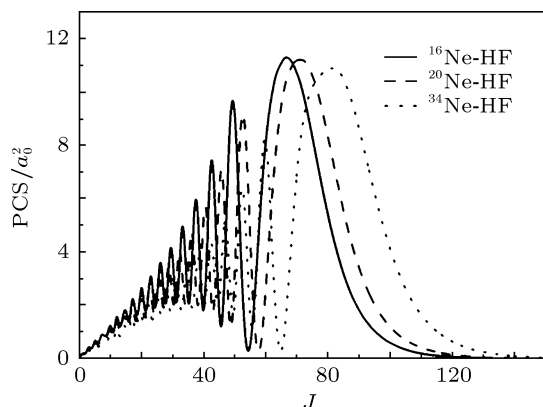


图 8 Ne 同位素替代引起的分波截面随 J 的变化 ($E = 100 \text{ meV}$)

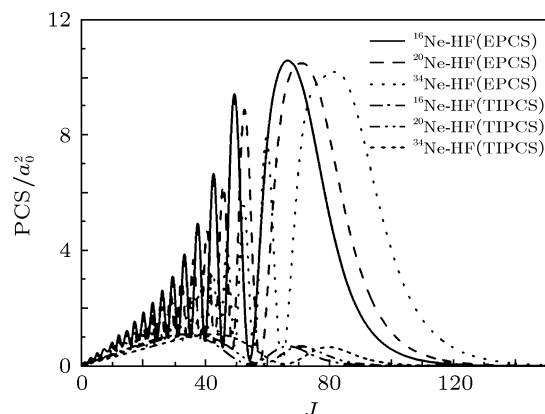


图 9 Ne 同位素替代引起的弹性分波截面和总非弹性分波截面随 J 的变化 ($E = 100 \text{ meV}$)

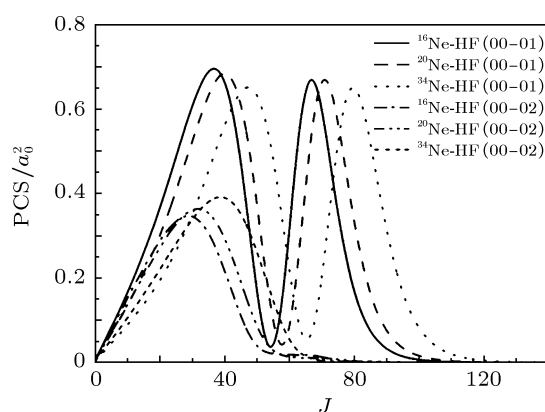


图 10 Ne 同位素替代引起的 00-01, 00-02 分波截面随 J 的变化 ($E = 100 \text{ meV}$)

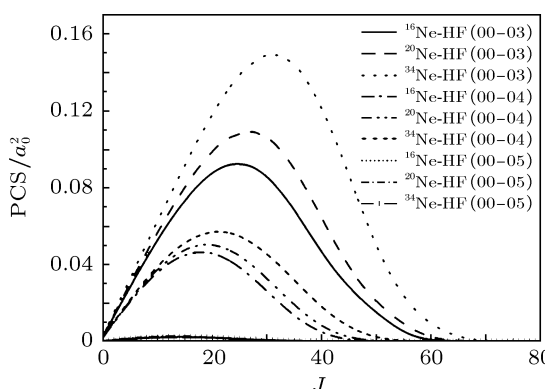


图 11 Ne 同位素替代引起的 00-03, 00-04, 00-05 分波截面随 J 的变化 ($E = 100 \text{ meV}$)

经过计算,如图 10 和图 11 所示, $^{16}\text{Ne-HF}$, $^{20}\text{Ne-HF}$, $^{34}\text{Ne-HF}$ 碰撞系统的非弹性 00-01 碰撞转动激发分波截面的极大值位置依次为 37, 40, 47, 极大值分别为 $0.696a_0^2$, $0.685a_0^2$, $0.653a_0^2$, 分波截面收敛值 J 分别为 115, 121, 135. 非弹性 00-02 转动激发分波截面的极大值位置依次为 29, 32, 39, 极大值分别为 $0.348a_0^2$, $0.364a_0^2$, $0.392a_0^2$, 分波

截面收敛值 J 分别为 84, 88, 92. 非弹性 00-03 转动激发分波截面的极大值位置依次为 25, 27, 31, 极大值分别为 $0.092a_0^2$, $0.109a_0^2$, $0.149a_0^2$, 分波截面收敛值 J 分别为 60, 65, 70. 非弹性 00-04 转动激发分波截面的极大值位置依次为 18, 19, 21, 极大值分别为 $0.046a_0^2$, $0.050a_0^2$, $0.057a_0^2$, 分波截面收敛值 J 分别为 45, 48, 53. 非弹性 00-05 转动激发分波截面的极大值位置依次为 12, 13, 14, 极大值分别为 $2.64 \times 10^{-3}a_0^2$, $2.58 \times 10^{-3}a_0^2$, $2.25 \times 10^{-3}a_0^2$, 分波截面收敛值 J 分别为 25, 26, 27. 结合图 9, 我们可以得到: 总非弹性分波截面主要由非弹性 00-01 碰撞转动激发分波截面决定. 非弹性 00-01 和 00-05 转动激发分波截面随着入射同位素质量的增加, 极大值越来越小, 但是在 00-02, 00-03, 00-04 转动激发截面, 极大值随着入射同位素质量的增加反而越来越大. 所以即使 00-01 截面对总非弹性分波截面的贡献最大, 但是由于其他截面的贡献, 总非弹性分波截面的极大值仍然呈现增大的趋势, 如图 9 所示. 在低激发态下, 转动激发分波截面随着入射同位素质量的增加, 向转动量子数 J 增大的方向移动得较多, 而激发态越高, 极大值出现的位置越接近. 另外, 在入射能量为 100 meV, 非弹性 00-01 碰撞转动激发分波截面有很明显的尾部效应, 00-02 截面仍然有尾部效应, 但是很弱, 到了 00-03, 00-04, 00-05 尾部效应消失. 说明激发态越低, 尾部效应越明显, 随着激发态升高, 尾部效应逐渐减弱, 达到高激发态就不再产生尾部效应.

4 结论

综上所述, 我们通过密耦近似方法得到入射原子 Ne 同位素替代引起的 Ne-HF 碰撞截面的变化规律总结如下:

1. 在 Ne 同位素替代情况下, 微分截面的角分布均在 0° 时最大, 并且随着入射原子质量的增加

明显增大. 微分截面均出现衍射振荡现象并迅速减小, 随着角度继续增大, 振幅越来越小, 逐渐消失. 同一级衍射振荡极小值位置随着入射原子质量的增加, 向小散射角方向逐渐移动. 同时, 衍射振荡的平均间隔减小. 弹性微分截面与微分截面变化规律近似, 是微分截面的主要构成.

2. 非弹性散射的振荡主要出现在小角区域, 高激发态散射主要发生在大角部分. 随着 Ne 同位素质量的增加, 低激发态的微分截面在 0° 时很接近, 但是处于高激发态时, 出现入射原子质量越大, 微分截面在 0° 时明显减小的趋势.

3. 弹性分波截面是分波截面的主要构成. 随着氖同位素原子质量的增加, 碰撞系统的分波截面和弹性碰撞分波截面均随转动量子数 J 的增加发生越来越强烈的振荡, 当振荡到一个极大值后, 尾部出现很强的尾部效应, 之后分波截面迅速收敛. 这种现象说明在最靠近 R 的远距离处, Ne-HF 相互作用势的尾部均有很强的吸引支. 截面振荡的极大值对应的转动量子数越来越大, 极大值变小, 分波截面收敛变慢. 总非弹性分波截面出现一个极大值后, 也出现了比较明显的尾部效应. 入射原子同位素替代引起分波截面和弹性碰撞分波截面的极大值依次变小, 但是总非弹性分波截面却呈现增大的趋势.

4. 总非弹性分波截面主要由非弹性 00-01 碰撞转动激发分波截面决定. 但是即使 00-01 截面对总非弹性分波截面的贡献最大, 由于其他激发截面的贡献, 总非弹性分波截面的极大值仍然呈现增大的趋势.

5. 在低激发态下, 转动激发分波截面随着入射同位素质量的增加, 向转动量子数 J 增大的方向移动, 而激发态越高, 极大值出现的位置越接近. 另外, 激发态越低, 尾部效应越明显. 随着激发态升高, 尾部效应逐渐减弱, 达到高激发态就不再产生尾部效应.

[1] Moszynski R, de Weerd F, Groenenboom G C, van der Avoird A 1996 *Chem. Phys. Lett.* **263** 107
 [2] Held W D, Piper E, Ringer G, Toennies J P 1980 *Chem. Phys. Lett.* **75** 260
 [3] Toennies J P, Weiz W, Wolf G 1976 *J. Chem. Phys.* **64** 5305
 [4] Höche H, Toennies J P, Vollmer R 1993 *Phys. Rev. Lett.* **71** 1208
 [5] Faubel M, Glanturco F A, Fagnetti F, Rusan L Y, Tappe U, Toennies J P 1994 *J. Chem. Phys.* **101** 8800

[6] Bauer W, Rusin L Y, Toennies J P, Walaschewski K 1977 *J. Chem. Phys.* **66** 3837
 [7] Toennies J P, Vilesov A F 2004 *Angewandte Chemie International Edition* **43** 2622
 [8] Murrell J N, Sorbie K S 1983 *J. Chem. Soc. Faraday Trans. II* **79** 323
 [9] Tang K T, Toennies J P 1981 *J. Chem. Phys.* **74** 1148
 [10] Partridge H, Stallcop J R, Levin E 2001 *J. Chem. Phys.* **115** 6471

- [11] Tang K T, Toennies J P 2003 *J. Chem. Phys.* **118** 4976
- [12] Thuis H H W, Stolte S 1980 *J. Reuss. Chem. Phys.* **52** 211
- [13] Zhu Z H, Yu H G 1997 *Molecular Structures and Molecular Potential Energy Functions* (Beijing: Science Press) 103 (in Chinese) [朱正和, 俞华根 1997 分子结构与分子势能函数 (北京: 科学出版社) 第 103 页]
- [14] Gurtiss C F 1970 *J. Chem. Phys.* **52** 1078
- [15] Beneventi L, Casavecchia P, Volpi G G 1991 *J. Chem. Phys.* **95** 5827
- [16] Choi B H, Tang K T 1975 *J. Chem. Phys.* **63** 1775
- [17] Boys S F, Bernadi F 1970 *Mol. Phys.* **19** 533
- [18] Simon S, Duran M, Dannenberg J J 1996 *J. Chem. Phys.* **105** 11024
- [19] 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]
- [20] Zhang Y 2003 *Guizhou Science* **21** 9 (in Chinese) [张愚 2003 贵州科学 **21** 9]
- [21] Chapman W B, Weida M J, Nesbitt D J 1997 *J. Chem. Phys.* **106** 2248
- [22] Bemstein R B 1997 *Atom-Molecule Collision Theory: A Guide for the Experimentalist* (New York: Plenum Press)
- [23] Vohralik P F, Miller R E, Watts R O 1989 *J. Chem. Phys.* **90** 2182
- [24] Bransden B H 1979 *Atomic Collisions Theory* (the Benjamin/cummings publishing company inc.)

The calculation of excitation cross-sections of collisions between Ne isotope atoms with HF molecule*

Wang Xiao-Lu¹⁾²⁾ Linghu Rong-Feng³⁾ Yang Jian-hui⁴⁾ Lü Bing¹⁾²⁾
Gao Tao²⁾ Yang Xiang-Dong^{2)†}

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

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

3) (School of Physics and Electronic Science, Guizhou Normal College, Guiyang 550018, China)

4) (School of Physics and Electronic Engineering, Leshan Teachers College, Leshan 614004, China)

(Received 1 June 2011; revised manuscript received 26 August 2011)

Abstract

In this paper, we use the Huxley potential function to fit the interaction energy data, which have been calculated at the theoretical level of the QCISD(T)/aug-cc-pVTZ. Differential and partial cross-sections of ^{16}Ne , ^{20}Ne , ^{34}Ne atoms and HF molecule collisions are calculated by the accurate close-coupling approximation method when the incident energy is 100meV. We study the changing tendencies of Ne-HF collisional cross-sections with Ne isotopic substitution.

Keywords: anisotropic potential, close-coupling approximation, cross-section, isotopic substitution

PACS: 31.15.A-, 31.15.-p, 34.20.Gj

* 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 Science-Technology Foundation of Guizhou Province, China (Grant No. [2012] 2285), and the Scientific Research Foundation for Doctors of Guizhou Normal University.

† E-mail: xdyang@scu.edu.cn