

Ar-H₂(D₂, T₂)碰撞体系的振转相互作用势及散射截面的理论计算

底马可 沈光先 赵云强 曾若生 汪荣凯

Theoretical calculation of the vib-rotational interaction potential and the scattering cross section for the Ar-H₂ (D₂, T₂) collision system

Di Ma-Ke Shen Guang-Xian Zhao Yun-Qiang Zeng Ruo-Sheng Wang Rong-Kai

引用信息 Citation: [Acta Physica Sinica](#), 64, 133101 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.133101

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.133101>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I13>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

SeN₂ 自由基解析势能函数的耦合簇理论研究

Coupled-cluster single-double theory study on the analytic potential energy function of the SeN₂ radicals

物理学报.2014, 63(6): 063101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.063101>

用代数-能量自洽法研究双原子分子解析势能函数

Studies on the analytical curves of diatomic molecules using algebraic and energy-consistent method

物理学报.2014, 63(4): 043102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.043102>

外电场作用下 ZnO 分子的结构特性研究

Structural properties of ZnO molecules under an external electric field

物理学报.2013, 62(7): 073103 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.073103>

理论研究 B₂ 分子 X³Σ_g⁻-³Π_u 态的光谱性质

Study on spectroscopic properties of B₂ (X³Σ_g⁻, A³Π_u) molecule

物理学报.2012, 61(20): 203101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.203101>

HNO 分子基态的结构与解析势能函数研究

The structure and analytical potential energy function of the ground state of HNO molecule

物理学报.2011, 60(11): 113102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.60.113102>

Ar-H₂(D₂, T₂)碰撞体系的振转相互作用势及散射截面的理论计算*

底马可¹⁾ 沈光先²⁾ 赵云强¹⁾ 曾若生^{1)†} 汪荣凯^{1)‡}

1)(贵州师范大学化学与材料科学学院, 贵阳 550001)

2)(贵州师范大学物理与电子科学学院, 贵阳 550001)

(2014年11月17日收到; 2015年2月5日收到修改稿)

用量子力学从头算的耦合簇CCSD(T)方法, 使用相关一致基组aug-cc-pV5Z并加3s3p2d1f1g高斯键函数计算了Ar原子与H₂分子的振转相互作用和电荷分布, 采用Boys和Bernardi提出的均衡法消除了基组重叠误差(BSSE). 然后用Tang-Toennies势能函数拟合得到Ar-H₂体系相互作用势的解析表达式. 在该相互作用势下, 用密耦方法计算了Ar原子入射能量为83 meV时, Ar-H₂(D₂, T₂)碰撞体系的散射截面. 计算Ar-D₂体系的微分截面与实验值比较符合很好. 计算结果及分析表明, 在长程吸引势的散射中, 色散能起主要作用; 在短程排斥势的散射中, 交换能起重要作用. 当碰撞参数在0.27 nm至0.47 nm的范围时, Ar-H₂(D₂, T₂)碰撞体系的径向偶极发生两次转向.

关键词: Ar-H₂(D₂, T₂)复合物, CCSD(T), 相互作用势, 散射截面

PACS: 31.15.bw, 31.50.Bc, 34.35.+a, 34.50.s

DOI: 10.7498/aps.64.133101

1 引言

研究原子与分子的相互作用势对于研究原子与分子物理是至关重要的, 一旦确定了精确的势能面, 原则上所有可观测的物理量均可计算^[1,2]. 因此, 长期以来许多实验和理论工作者都致力于相互作用势能面的研究, 并在不断地创新和发展^[3]. 原子与分子碰撞截面实验是检验相互作用势最好的方法之一. 随着量子物理计算理论的逐渐完善和计算机技术的不断发展, 用高精度的量子力学从头算(*ab initio*)已成为确定势能面的有力工具^[4]. 在散射问题的研究中, 人们不仅对作用系统的相互作用势感兴趣, 而且更感兴趣的是散射粒子的角分布以及散射过程中粒子各种性质的变化^[5], 例如偶极变化、能量传递、弛豫现象^[6]、猝灭过程^[7]和输运性质

等. 对于惰性气体原子Rg(He, Ne, Ar, Kr, Xe)与H₂分子碰撞作为最简单的原子与双原子分子碰撞系统而受到研究者的高度重视. 在Rg-H₂体系中, 因Ar-H₂系统有较宽的光谱范围^[8-12]、碰撞^[13-16]等性能数据而最受人们的关注, 并从实验和理论上研究Ar-H₂系统的相互作用势^[17-24]及散射过程的物理量及性质, 如拉曼谱线碰撞加宽和位移^[25], 振动弛豫速率^[26], 猝灭速率^[27]和碰撞复合^[28]等. 最近, 2013年, Espinho等^[29]从微波Ar-H₂等离子体系统进行了真空紫外发射特性实验研究. 2014年, Haskapoulos研究小组从碰撞各向同性光谱性质, 研究了H₂-Rg(He, Ne, Ar, Kr, Xe)复合物系统分子间的极化性^[30], 并从理论上计算了Ar-H₂系统的各向同性碰撞诱导的拉曼光谱强度^[31]. 从文献可以看出, 人们对Ar-H₂复合物系统的研究一直在不断地深入.

* 国家自然科学基金(批准号: 21101038, 21461006, 51472053)和贵州省科技厅与贵州师范大学联合基金(批准号: 黔科合J字LKS[2009]01)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zengrsh@gznu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: wrk0731@163.com

本文用量子力学从头算的耦合簇CCSD(T)方法^[32]和aug-cc-pV5Z相关一致基组^[33,34]并加3s3p2d1f1g高斯键函数计算了Ar原子与H₂分子的振转相互作用和电荷分布,并用Boys和Bernardi提出的均衡法(Full Counterpoise)^[35]消除基组重叠误差(BSSE).通过Tang-Toennies势能函数^[18]拟合构造得到Ar-H₂体系相互作用势的解析表达式.虽然同位素分子的质量不同,但不改变分子的相互作用及电荷分布^[36].我们用密耦方法^[37,38]计算在该相互作用势下Ar原子与H₂(D₂, T₂)分子碰撞的散射截面,分析了在散射过程中的分波截面与电荷分布及偶极转向的变化特征.同时,用对称性匹配分子间微扰理论SAPT(Symmetry-adapted Intermolecular Perturbation Theory)^[39]对相互作用势进行能量分解计算,进一步讨论了分解的能量形式对散射截面作用的本质.本文研究Ar-H₂(D₂, T₂)体系在散射过程中的电荷分布及偶极转向为相关实验提供相应的理论依据,并希望得到实验验证.

2 Ar-H₂体系的相互作用势及电荷分布

2.1 Ar-H₂体系的相互作用势

计算Ar-H₂体系的振转相互作用势,采用多个H₂分子核间距的Ar-H₂体系的刚性转子模型质心坐标系(Jacobi坐标)来构造,如图1所示. H₂分子的质心以同位素分子¹H¹H确定, R 表示Ar原子与H₂分子质心的距离, θ 为 R 向量与H₂分子键轴间的夹角. H₂分子的核间距 r 分别取值 $r_{-1} = 0.063728$ nm, $r_e = 0.074144$ nm(平衡值)^[40]和 $r_{+1} = 0.087600$ nm.

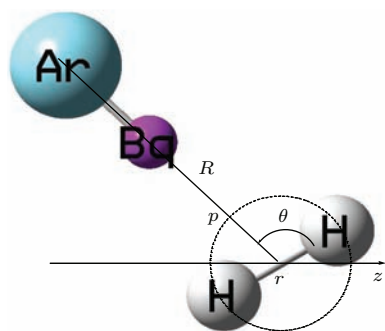


图1 Ar原子与H₂分子相互作用的几何图形

Fig. 1. Geometric drawing of interaction between Ar atom and H₂ molecule.

对Ar-H₂体系采用从头计算的单双迭代,包含非迭代三重激发微扰的耦合簇CCSD(T)方法和相关一致基组aug-cc-pV5Z,并加3s3p2d1f1g基集的高斯键函数(bonding function). 体系中键函数的位置B_q加在以H₂分子质心为圆心,以H₂分子质心至H原子的距离为半径的圆,且在Ar原子与H₂分子质心的连线并与圆相交 p 点的中点.当 R 值确定时,键函数位置的整个轨迹为一个圆.这样的选取是为了避免在 R 较小时,键函数中心过于接近H₂分子.计算Ar-H₂体系的相互作用时, R 的取值范围为0.20—1.05 nm.由于Ar-H₂体系具有角对称性,方位角 θ 分别取0°, 15°, 30°, 45°, 60°, 75°和90°共7个方位.所有的从头计算均在Gaussian 03程序包^[41]中完成.

采用超分子近似,相互作用能 $V(R, r, \theta)$ 为Ar-H₂的能量减去两个单体Ar和H₂的能量,即

$$V(R, r, \theta) = E_{\text{Ar-H}_2} - E_{\text{Ar}} - E_{\text{H}_2}, \quad (1)$$

经基组重叠误差(BSSE)校正,相互作用能 $V(R, r, \theta)$ 为

$$\begin{aligned} V(R, r, \theta) = & E_{\text{Ar-H}_2} [\chi_{\text{Ar}} + \chi_{\text{H}_2} + \chi_{\text{bf}}] \\ & - E_{\text{Ar}} [\chi_{\text{Ar}} + \chi_{\text{H}_2} + \chi_{\text{bf}}] \\ & - E_{\text{H}_2} [\chi_{\text{Ar}} + \chi_{\text{H}_2} + \chi_{\text{bf}}], \quad (2) \end{aligned}$$

其中 χ 表示基组.

由从头计算Ar-H₂体系的相互作用能数据,我们构造其相互作用各向异性势解析表达式为

$$\begin{aligned} V(R, r, \theta) = & \sum_{\lambda=0}^{12} V_{\lambda}(R, r) P_{\lambda}(\cos \theta), \\ \lambda = & 0, 2, 4, \dots, 12. \quad (3) \end{aligned}$$

在(3)式中,径向系数 $V_{\lambda}(R, r)$ 是 R 和 r 的函数, $P_{\lambda}(\cos \theta)$ 为Legendre函数.(3)式可用矩阵表示为

$$V(R, r, \theta) = P V_{\lambda}(R, r), \quad (4)$$

将(4)式左乘 P^{-1} ,即得

$$V_{\lambda}(R, r) = P^{-1} V(R, r, \theta), \quad (5)$$

用Tang-Toennies势能函数对径向系数 $V_{\lambda}(R, r)$ 进行非线性最小二乘法拟合,拟合公式为

$$\begin{aligned} V(R, r) = & A \exp(-bR) - \sum_{n=3}^5 \left[1 - \left(\sum_{K=0}^{2n} \frac{(bR)^K}{K!} \right) \right. \\ & \left. \times \exp(-bR) \right] \frac{C_{2n}(r)}{R^{2n}}, \quad (6) \end{aligned}$$

在(6)式中, R 是Ar原子与H₂分子质心之间的距离, r 是H₂分子的核间距.当 n 分别为3, 4和5

时, 参数 $C_{2n}(r)$ 分别为 $C_6(r)$, $C_8(r)$ 和 $C_{10}(r)$. 将 $C_{2n}(r)$ 展开为 r 的多项式, 即分别为

$$C_6(r) = p_0 + p_1\rho + p_2\rho^2 + p_3\rho^3, \quad (7)$$

$$C_8(r) = q_0 + q_1\rho + q_2\rho^2 + q_3\rho^3, \quad (8)$$

$$C_{10}(r) = s_0 + s_1\rho + s_2\rho^2 + s_3\rho^3, \quad (9)$$

在 (7)–(9) 式中, $\rho = r - r_e$, r_e 是 H_2 分子的平衡核间距; A , b , p_0 , p_1 , p_2 , p_3 , q_0 , q_1 , q_2 , q_3 , s_0 , s_1 , s_2 和 s_3 是拟合参数.

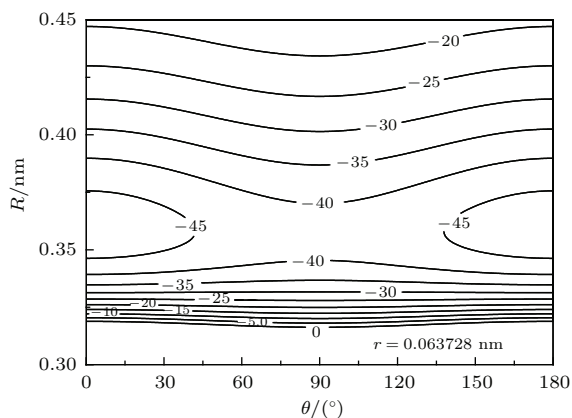


图2 当 $r = 0.063728$ nm 时, Ar- H_2 体系相互作用势能面等值图, 势能值单位为 cm^{-1}

Fig. 2. Contours of the interaction potential energy surface of Ar- H_2 system at $r = 0.063728$ nm. The unit of potential energy is cm^{-1} .

图2至图4是Ar- H_2 体系的势能面等值图, 在整个势能面等值图中有两个极小点和一个鞍点, 分别处于线型结构($\theta = 0^\circ, 180^\circ$)和T型结构($\theta = 90^\circ$). Ar- H_2 拟合势的特征参数列于表1中, 括号中的势能值是本文从头计算结果. 从图2至图4和表1中可以看出, 当 H_2 核间距 r 分别为0.063728 nm, 0.074144 nm和0.087600 nm时, 在线型结构($\theta = 0^\circ, 180^\circ$)中, 全域极小点($\theta = 0^\circ, 180^\circ$)的位置 $R_{\min}$ 分别为0.3591 nm, 0.3627 nm和0.3681 nm, 全域极小点的势能值分别为 -47.899 cm^{-1} , -53.528 cm^{-1} 和 -59.714 cm^{-1} . 在T型结构中, 鞍点的位置 $R_{\min}$ 分别为0.3564 nm, 0.3588 nm和0.3617 nm, 鞍点的势能值分别为 -41.821 cm^{-1} , -45.367 cm^{-1} 和 -49.189 cm^{-1} . 在表1中, 将本文Ar- H_2 拟合势在 $r = 0.074144$ nm时的特征参数与文献值比较, 可以看出, 全域极小点的 $R_{\min}$ 值在0.361 nm左右, 势能值在 -55 cm^{-1} 左右; 鞍点的 $R_{\min}$ 值在0.358 nm左右, 势能值在 -47 cm^{-1} 左右. 本文Ar- H_2 拟合势的特

征参数与文献值比较, 其结果是极为接近的. 使用键函数的CCSD(T)/aug-cc-pV5Z+3s3p2d1f1g方法和基组计算的势能值可以达到未加键函数时CCSD(T)/CBS(D-5)完全基组的计算精度.

从图2至图4中还可以看出, 全域极小点和鞍点的位置 $R_{\min}$ 随 H_2 分子核间距 r 的增加而增大; 全域极小点和鞍点的势能值 $V_{\min}$ 随 H_2 分子核间距 r 的增加而降低. 将全域极小点和鞍点势能值的差值与全域极小点势能值之比简单作为各向异性的量度, 则当 H_2 分子核间距 r 分别为0.063728 nm, 0.074144 nm和0.087600 nm时, 各向异性的量度值分别为12.69%, 15.25%和17.63%, 说明它具有较弱的各向异性. 随着 H_2 分子核间距 r 的增加, Ar- H_2 体系相互作用势的各向异性增强.

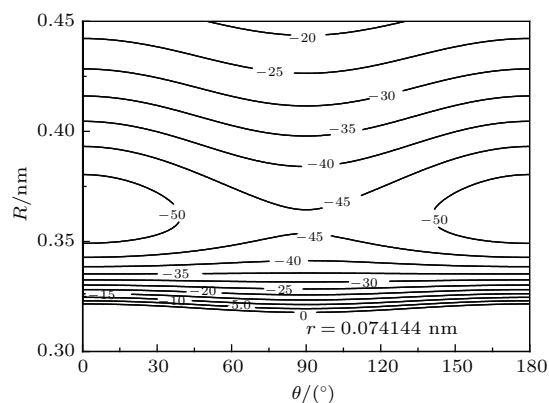


图3 当 $r = 0.074144$ nm 时, Ar- H_2 体系相互作用势能面等值图, 势能值单位为 cm^{-1}

Fig. 3. Contours of the interaction potential energy surface of Ar- H_2 system at $r = 0.074144$ nm. The unit of potential energy is cm^{-1} .

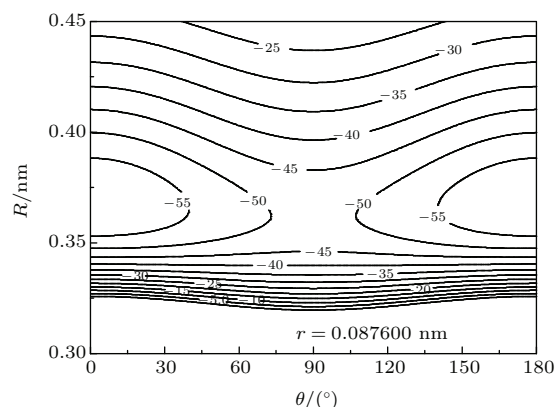


图4 当 $r = 0.087600$ nm 时, Ar- H_2 体系相互作用势能面等值图, 势能值单位为 cm^{-1}

Fig. 4. Contours of the interaction potential energy surface of Ar- H_2 system at $r = 0.087600$ nm. The unit of potential energy is cm^{-1} .

表1 Ar-H₂ 拟合势的特征参数及比较
Table 1. Characteristic parameters and comparison of fitted potential for Ar-H₂ system.

	全域极小点 ($\theta = 0^\circ, 180^\circ$)		鞍点 ($\theta = 90^\circ$)	
	$R_{\min}/\text{nm}$	$V_{\min}/\text{cm}^{-1}$	$R_{\min}/\text{nm}$	$V_{\min}/\text{cm}^{-1}$
$r = 0.063728 \text{ nm}$	0.3591	-47.899(-47.933)	0.3564	-41.821(-41.875)
$r = 0.074144 \text{ nm}$	0.3627	-53.528(-53.069)	0.3588	-45.367(-45.367)
$r = 0.087600 \text{ nm}$	0.3681	-59.714(-58.972)	0.3617	-49.189(-48.855)
文献 $r = 0.074144 \text{ nm}$				
CCSD(T)/aug-cc-pV5Z [24]	0.3628	-51.99	0.3596	-43.80
CCSD(T)/CBS (D-5) [24]	0.3616	-53.5	0.3582	-45.7
XC(fit) [23]	0.3610	-56.6	0.3578	-47.8
TT3(6, 8) [20]	0.3609	-56.6	0.3567	-48.4
SATP [21]	0.359	-57.6	0.356	-48.1

注: 括号中的值是本文从头计算的势能值.

2.2 Ar-H₂ 体系的电荷分布

用如上计算方法及基组, 计算了当 H₂ 分子核间距 r 分别为 0.063728 nm, 0.074144 nm 和 0.087600 nm 时, Ar-H₂ 体系原子的 Mulliken 电荷数据. 图 5 是当 $r = 0.074144 \text{ nm}$ 时, 在不同方位角时 Ar 原子的 Mulliken 电荷随 R 的变化. 计算结果得到, 随着 R 的增加, 在约 $0.28 \text{ nm} < R < 0.45 \text{ nm}$ 的范围, 相应方位角的 Ar 原子带负电荷.

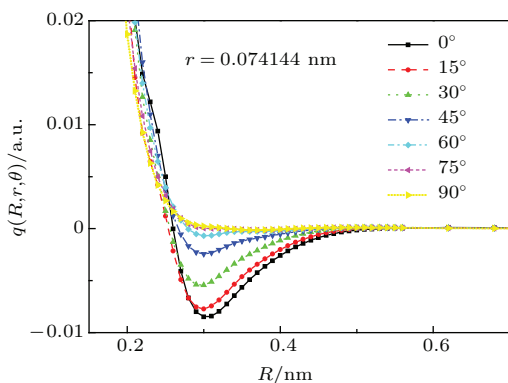


图5 $r = 0.074144 \text{ nm}$ 时, Ar 原子的电荷随 R 的变化
Fig. 5. Charge of Ar atom varies with R at $r = 0.074144 \text{ nm}$.

同样, 将 Ar 原子的 Mulliken 电荷展开为 Legendre 函数 $P_\lambda(\cos \theta)$ 的多项式形式为

$$q(R, r, \theta) = \sum_{\lambda=0}^{12} q_\lambda(R, r) P_\lambda(\cos \theta), \quad \lambda = 0, 2, 4, \dots, 12, \quad (10)$$

(10) 式用矩阵表示为

$$q(R, \theta, r) = P q_\lambda(R, r), \quad (11)$$

在 (11) 式中, $q_\lambda(R, r)$ 是电荷分布的径向系数. 其中, $q_0(R, r)$ 是 Ar 原子球形电荷分布的径向系数, $q_{\lambda \geq 2}(R, r)$ 是 Ar 原子各向异性电荷分布的径向系数.

3 散射截面的计算及讨论

我们用密耦方法计算了在 Ar-H₂ 的振转相互作用势下, Ar 原子入射能量为 83 meV 时, 分别与基态 H₂(D₂, T₂) 分子碰撞的态-态微分截面 (state-to-state differential cross section)、态-态积分截面 (state-to-state integral cross section) 和态-态分波截面 (state-to-state partial cross section) $\sigma_{n_\alpha=0, j_\alpha=0 \rightarrow n_\beta, j_\beta}^J$. 其弹性分波截面 EPCS (elastic partial cross section) 为 $\sigma_{n_\alpha=0, j_\alpha=0 \rightarrow n_\beta=0, j_\beta=0}^J$, 非弹性分波截面 IPCS (inelastic partial cross section) 为 $\sigma_{n_\alpha=0, j_\alpha=0 \rightarrow n_\beta, j_\beta}^J$ ($n_\alpha = n_\beta, j_\beta > 0; n_\alpha < n_\beta, j_\beta \geq 0$), 总分波截面 TPCS (total partial cross section) 为 $\sigma_{\text{TPCS}}^J = \sigma_{\text{EPCS}}^J + \sigma_{\text{IPCS}}^J$.

3.1 态-态微分截面

将 Ar-D₂ 碰撞体系的微分截面计算值与实验值 [16] 比较以确认本文 Ar-H₂ 拟合势的精确性和可靠性, 比较结果列于表 2 中. 从表 2 中可以看出, 在

表2 $E = 83$ meV 时, Ar-D₂ 的微分截面计算值与实验值^[16] 的比较Table 2. Comparison for calculation and experimental values of differential cross section of Ar-D₂ system at $E = 83$ meV.

弹性微分截面 ($j_\alpha = 0 \rightarrow j_\beta = 0$)			非弹性微分截面 ($j_\alpha = 0 \rightarrow j_\beta = 2$)		
$\theta/(^{\circ})$	实验值/ a_0^2	计算值/ a_0^2	$\theta/(^{\circ})$	实验值/ a_0^2	计算值/ a_0^2
72.7	8.067 ± 0.161	8.065	72.2	0.486 ± 0.096	0.457
85.5	6.910 ± 0.139	6.998	85.5	0.621 ± 0.068	0.533
98.3	6.192 ± 0.125	6.237	98.8	0.646 ± 0.079	0.613

散射角分别为 72.7° , 85.5° 和 98.3° 时, 计算 $j_\alpha = 0 \rightarrow j_\beta = 0$ 弹性微分截面值分别为 $8.065a_0^2$, $6.998a_0^2$ 和 $6.237a_0^2$, 实验值分别为 $8.067 \pm 0.161a_0^2$, $6.910 \pm 0.139a_0^2$ 和 $6.192 \pm 0.125a_0^2$; 在散射角分别为 72.2° , 85.5° 和 98.8° 时, 计算 $j_\alpha = 0 \rightarrow j_\beta = 2$ 转动激发非弹性微分截面值分别为 $0.457a_0^2$, $0.533a_0^2$ 和 $0.613a_0^2$, 实验值分别为 $0.486 \pm 0.096a_0^2$, $0.621 \pm 0.068a_0^2$ 和 $0.646 \pm 0.079a_0^2$. 比较弹性 $j_\alpha = 0 \rightarrow j_\beta = 0$ 和非弹性 $j_\alpha = 0 \rightarrow j_\beta = 2$ 的微分截面计算值与实验值符合很好, 基本均在实验误差范围内, 说明本文的 Ar-H₂ 相互作用势是比较精确和可靠的.

3.2 态-态积分截面

将计算 Ar-H₂(D₂, T₂) 碰撞体系的态-态积分截面值和由 H₂(D₂, T₂) 分子的光谱常数及双原子分子振转能级公式^[42](忽略高次项),

$$\begin{aligned} \frac{E(n, j)}{hc} &= T(n, j) \\ &= \omega_e \left(n + \frac{1}{2} \right) - \omega_e x_e \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 \\ &\quad + B_e j(j+1) - D_e j^2(j+1)^2 \\ &\quad - \alpha_e(j+1) \left(n + \frac{1}{2} \right), \end{aligned} \quad (12)$$

表3 Ar-H₂ (D₂, T₂) 碰撞体系的态-态积分截面和 H₂ (D₂, T₂) 分子的振转能级差Table 3. State-to-state integral cross section of Ar-H₂(D₂, T₂) collision system and difference of vibration-rotation energy level of H₂ (D₂, T₂) molecule.

转动跃迁		Ar-H ₂		Ar-D ₂		Ar-T ₂	
n	$j_\alpha \rightarrow j_\beta$	$\Delta E/\text{meV}$	态-态积分截面/ a_0^2	$\Delta E/\text{meV}$	态-态积分截面/ a_0^2	$\Delta E/\text{meV}$	态-态积分截面/ a_0^2
0	0 $\rightarrow$ 0	0	3.73×10^2	0	4.97×10^2	0	5.75×10^2
0	0 $\rightarrow$ 2	43.920	1.49×10^0	22.195	6.79×10^0	14.909	1.12×10^1
0	0 $\rightarrow$ 4	144.765		73.588	1.55×10^{-3}	49.695	4.97×10^{-2}
0	0 $\rightarrow$ 6	298.610		153.228		104.359	

计算得到 H₂(D₂, T₂) 分子的振转能级差 ΔE 列于表 3 中. 在表 3 中, n 是 H₂(D₂, T₂) 分子的振动量子数, $j_\alpha \rightarrow j_\beta$ 是转动量子数跃迁. 图 6 是由 H₂(D₂, T₂) 分子的光谱常数与双原子分子 Murrell-Sorbie 势能函数的关系^[43] 计算 H₂(D₂, T₂) 分子在平衡核间距 r_e 附近的势能曲线, 图中仅示出 H₂ 分子的振转能级.

从表 3 可以看出, 在同一入射能量时, 弹性积分截面 $j_\alpha = 0 \rightarrow j_\beta = 0$ 的大小次序是 Ar-T₂ > Ar-D₂ > Ar-H₂. Ar 原子入射能量为 83 meV, 小于 H₂ 分子 $j_\beta = 4$ 的转动能级 144.765 meV, Ar-H₂ 体系只能发生最大跃迁为 $j_\alpha = 0 \rightarrow j_\beta = 2$ 的散射. 从图 6 中可以看出 H₂ 分子转动激发的离心偏移作用使 H₂ 分子的最大核间距 r 为 0.08690 nm. 而 Ar 原子入射能量为 83 meV 时, 分别小于 D₂ 和 T₂ 分子在 $j_\beta = 6$ 的转动能级, 其值分别为 153.228 meV 和 104.359 meV, 所以 Ar-D₂ 和 Ar-T₂ 体系都只能发生最大跃迁为 $j_\alpha = 0 \rightarrow j_\beta = 4$ 的散射, 转动激发的离心偏移作用使 D₂ 和 T₂ 分子的最大核间距 r 分别为 0.08302 nm 和 0.08257 nm. 由于 T₂ 分子的转动能级间隔最小, 在相同的转动跃迁 $j_\alpha = 0 \rightarrow j_\beta \geq 2$ 中, Ar-T₂ 体系的非弹性态-态积分截面值最大, 最容易被转动激发.

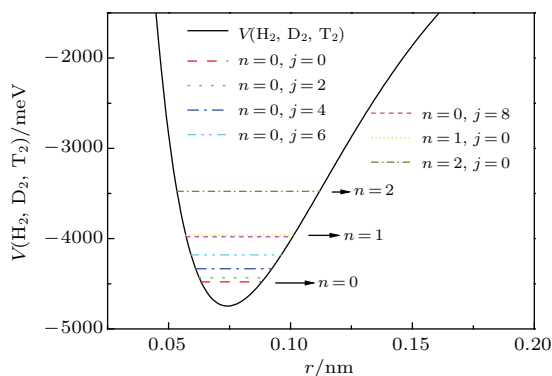


图6 $\text{H}_2(\text{D}_2, \text{T}_2)$ 分子在平衡核间距 r_e 附近的势能曲线
Fig. 6. Potential energy curves of $\text{H}_2(\text{D}_2, \text{T}_2)$ molecules near equilibrium internuclear distance.

3.3 分波截面随量子数 J 的变化

图7和图8分别是 $E = 83 \text{ meV}$ 时, EPCS和IPCS随量子数 J 的变化曲线. 在图7中, EPCS随量子数 J 的变化特征是在一定的入射能量时, 随着量子数 J 的增加, EPCS产生有规律的散射振荡, 并且散射振幅越来越大, 直至达到有规律的散射振荡最大值, 随后EPCS迅速减小. 随着量子数 J 的进一步增加, EPCS 又出现一个极大值, 称为尾部极大, 而后EPCS缓慢减小, 直至EPCS收敛(收敛值设为 $10^{-4}a_0^2$). 对于 $\text{Ar-H}_2(\text{D}_2, \text{T}_2)$ 碰撞体系, 在半经典的中心力场模型的势散射中^[44], 有 $J = a\sqrt{2\mu E}/\hbar$ 的关系, 其中 a 为中心力场有效作用半径, μ 是体系的约化质量, E 是入射能量. 当 a 和 E 为确定值时, J 与 $\sqrt{\mu}$ 成正比, 即 $J \propto \sqrt{\mu}$. 碰撞体系 Ar-H_2 , Ar-D_2 和 Ar-T_2 的约化质量分别为 1.9188650, 3.6593426 和 5.2409991, 在同一有效作用半径及入射能量下, μ 越大, J 值越大, 分波数越多, 则 $\text{Ar-H}_2(\text{D}_2, \text{T}_2)$ 碰撞体系EPCS有规律的散射振荡最大值对应的量子数 J 的比较关系为 $J(\text{Ar-}$

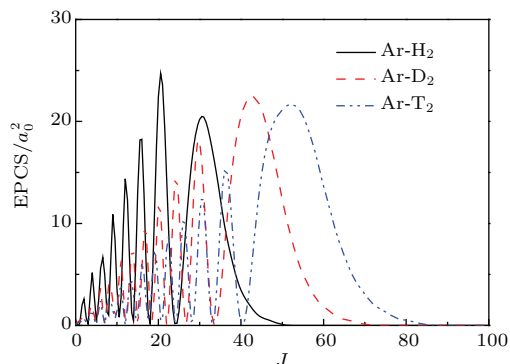


图7 $E = 83 \text{ meV}$ 时, EPCS随量子数 J 的变化
Fig. 7. EPCS varies with quantum number J at $E = 83 \text{ meV}$.

$\text{H}_2) < J(\text{Ar-D}_2) < J(\text{Ar-T}_2)$. 在图8中, $\text{Ar-H}_2(\text{D}_2, \text{T}_2)$ 碰撞体系的IPCS仅有一个极大值, 尾部效应不明显. IPCS极大值对应的量子数 J 的比较关系为 $J(\text{Ar-H}_2) < J(\text{Ar-D}_2) < J(\text{Ar-T}_2)$, IPCS极大值 $\sigma_{\text{IPCS-max}}^J$ 的比较关系为 $\sigma_{\text{IPCS-max}}^J(\text{Ar-H}_2) < \sigma_{\text{IPCS-max}}^J(\text{Ar-D}_2) < \sigma_{\text{IPCS-max}}^J(\text{Ar-T}_2)$. EPCS和IPCS随量子数 J 的变化特征及规律与文献^[45, 46]研究 $\text{He-H}_2(\text{D}_2, \text{T}_2)$ 的结果是一致的.

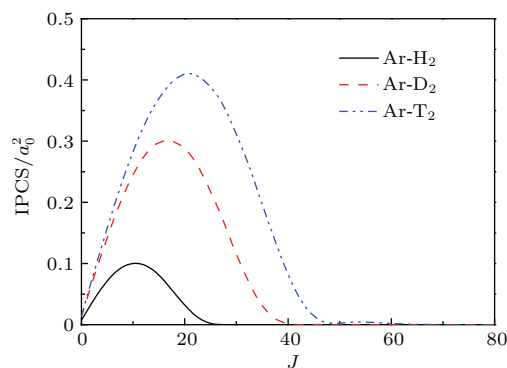


图8 $E = 83 \text{ meV}$ 时, IPCS随量子数 J 的变化
Fig. 8. IPCS varies with quantum number J at $E = 83 \text{ meV}$.

3.4 分波截面随碰撞参数 b_l 的变化

由于 $\text{H}_2(\text{D}_2, \text{T}_2)$ 分子散射前处于 $j_\alpha = 0$ 的转动态, 碰撞体系的总角动量子数 J 等于入射通道的轨道角动量子数 l , 而 l 可与经典碰撞中的碰撞参数 b_l 通过以下近似公式相联系^[42]:

$$b_l \approx \frac{l\hbar}{P} = \frac{l\hbar}{\sqrt{2\mu E}}, \quad (13)$$

其中, μ 是体系的约化质量, E 是入射能量. b_l 即为中心力场有效作用半径 a , 也即是 R 值. 由此可以得到总角动量子数 J , 分波截面的位置、球形电荷分布 q_0 及球型势 V_0 与碰撞参数 b_l 的对应关系. 计算 $\text{Ar-H}_2(\text{D}_2, \text{T}_2)$ 碰撞体系EPCS和IPCS的最大值, 尾部极大和收敛分波对应的量子数 J 与碰撞参数 b_l 的值列于表4中.

从表4中可以看出, $\text{Ar-H}_2(\text{D}_2, \text{T}_2)$ 碰撞体系EPCS的振荡最大峰、振荡最大峰与尾部极大间的极小值、尾部极大值和收敛分波对应的碰撞参数 b_l 值变化不大, 对应的碰撞参数 b_l 的平均值分别为 0.2463 nm, 0.2781 nm, 0.3574 nm 和 0.6343 nm, 各特征的碰撞参数 b_l 相对偏差小于 $\pm 2.4\%$. IPCS的最大值和收敛分波对应的碰撞参数 b_l 值差别较大.

表4 Ar-H₂(D₂, T₂) 碰撞体系 EPCS 的振荡最大峰、极小值、尾部极大值及收敛分波和 IPCS 的最大值及收敛分波对应的量子数 J 与碰撞参数 b_l 的比较Table 4. Comparison of corresponding quantum numbers J and impact parameters b_l of Ar-H₂ (D₂, T₂) collision system for oscillation maximum peak, minimum value, maximum value of tail, convergence of partial cross section of EPCS, and maximum value and convergence of partial cross section of IPCS.

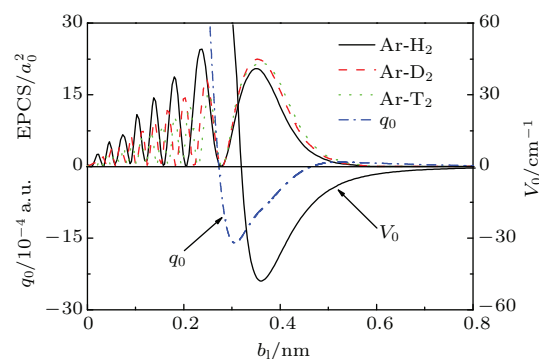
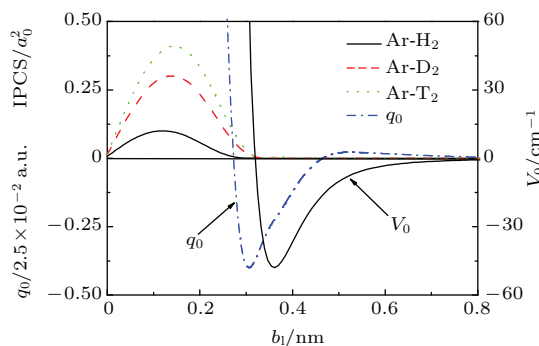
	H ₂ -Ar			D ₂ -Ar			T ₂ -Ar		
	J	b_l/nm	PCS/a_0^2	J	b_l/nm	PCS/a_0^2	J	b_l/nm	PCS/a_0^2
EPCS									
振荡最大峰	21	0.2406	23.62	30	0.2489	18.09	36	0.2495	15.13
极小值	24	0.2749	0.18	34	0.2820	0.24	40	0.2773	0.24
尾部极大值	31	0.3551	20.42	43	0.3567	22.42	52	0.3604	21.66
收敛分波	56	0.6415		76	0.6305		91	0.6308	
IPCS									
极大值	10	0.1146	0.10	17	0.1410	0.30	21	0.1456	0.41
收敛分波	28	0.3208		43	0.3567		73	0.5060	

图9和图10分别是在 $E = 83$ meV 时, EPCS, q_0 和 V_0 随碰撞参数 b_l 的变化曲线和 IPCS, q_0 和 V_0 随碰撞参数 b_l 的变化曲线. 从图9和图10中可以看到, 在 Ar 原子与 H₂(D₂, T₂) 分子碰撞的散射过程中, 体系的电荷分布随体系结构的变化而变化. 我们将分波截面、球型势 V_0 和径向 Ar 原子电荷分布 q_0 与对应的碰撞参数 b_l 相联系, 用中心力场模型讨论 Ar-H₂(D₂, T₂) 体系的散射特征、电荷分布及相互作用机理. 为进一步讨论在散射过程中 Ar-H₂(D₂, T₂) 体系的相互作用本质, 我们用 SAPT 对 Ar-H₂ 体系的相互作用能进行能量分解计算, 其 SAPT 相互作用能 $E_{\text{int}}^{\text{SAPT}}$ 可表达为

$$E_{\text{int}}^{\text{SAPT}} = E_{\text{pol}} + E_{\text{ind}} + E_{\text{disp}} + E_{\text{exch}} + E_{\text{exch-ind}} + E_{\text{exch-disp}}, \quad (14)$$

式中, E_{pol} 为静电能、 E_{ind} 为诱导能、 E_{disp} 为色散能、 E_{exch} 为交换能、 $E_{\text{exch-ind}}$ 为交换-诱导能和 $E_{\text{exch-disp}}$ 为交换-色散能. 所有构型的能量分解计算均在 Molpro2010 程序包 [47] 中完成, 并进行变换得到球型势下的分解能量. 分解的各能量随 b_l 的变化如图11所示. 从图11可以看出, 在 Ar-H₂(D₂, T₂) 体系的相互作用区间, 静电能 $E_0(\text{pol})$ 、诱导能 $E_0(\text{ind})$ 和色散能 $E_0(\text{disp})$ 均为负值, 是吸引作用的能量; 交换能 $E_0(\text{exch})$ 、交换-诱导能 $E_0(\text{exch-ind})$ 和交换-色散能 $E_0(\text{exch-disp})$ 均为正值, 是排斥作用的能量. 将某种形式能量的绝对值对能量分解的各能量绝对值之和的比值为该种能量的贡献

分数, 其各能量的贡献分数和球型势 V_0 随 b_l 的变化如图12所示.

图9 $E = 83$ meV 时, EPCS, q_0 和 V_0 随碰撞参数 b_l 的变化Fig. 9. EPCS, q_0 and V_0 vary with impact parameter b_l at $E = 83$ meV.图10 $E = 83$ meV 时, IPCS, q_0 和 V_0 随碰撞参数 b_l 的变化Fig. 10. IPCS, q_0 and V_0 vary with impact parameter b_l at $E = 83$ meV.

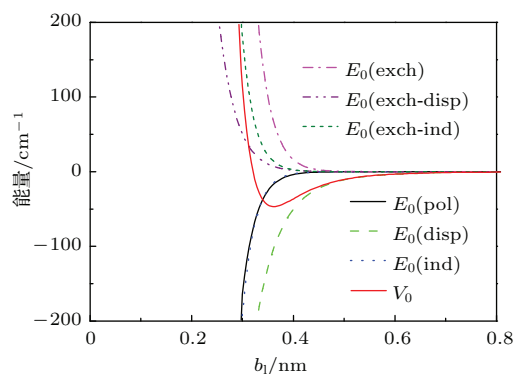
图 11 分解的各能量随 b_l 的变化

Fig. 11. Decomposed energy varies with impact parameter b_l .

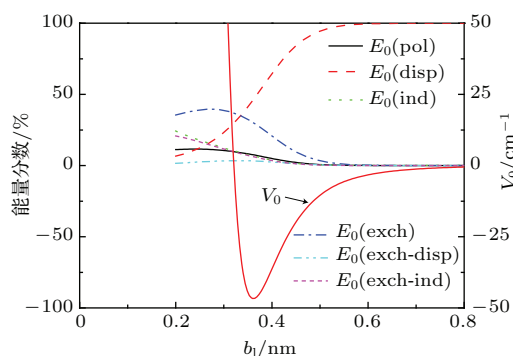
图 12 分解的各能量分数和球型势 V_0 随 b_l 的变化

Fig. 12. Energy contribution fraction and spherical potential V_0 vary with impact parameter b_l .

从图9的EPCS, q_0 和 V_0 随碰撞参数 b_l 的变化曲线和图12对比可以看出, 当Ar原子远离 $H_2(D_2, T_2)$ 分子时, 两者无相互作用, Ar原子和 $H_2(D_2, T_2)$ 分子的净电荷分别为零. 当Ar原子从 $b_l = \infty \rightarrow b_l$ 接近 $H_2(D_2, T_2)$ 分子时, 由于Ar原子电子云的弥散性, 弥散至 $H_2(D_2, T_2)$ 分子而使Ar原子显现正电荷. 在长程吸引区, 当 $b_l \approx 0.634$ nm时, 处于EPCS收敛分波位置, 长程吸引作用开始产生弹性散射, 色散能贡献为99.7%. 当 $R \approx 0.520$ nm时, Ar原子的正净电荷达到极大值 $q_0 = +9.05 \times 10^{-5}$ a.u., 并开始有明显微弱的尾部散射, 色散能贡献为96.7%. 当 $b_l = 0.4674$ nm时, Ar原子的净电荷为零, 此时Ar- $H_2(D_2, T_2)$ 径向偶极发生转向, 尾部散射增强, 色散能贡献分数为88.6%. 在 0.4674 nm $> b_l \geq 0.3606$ nm区间, 随着 b_l 的减小, 达到球型势 V_0 的极小值位置 0.3606 nm时, Ar原子的净负电荷迅速增加. 在该区间是球型势吸引作用增大的区域, 也是尾部效应迅速增大的区域, 色散能贡献分数从88.6%降至46.1%. 由于Ar原子核对电子吸引的库仑作用增

大和Ar原子对 $H_2(D_2, T_2)$ 分子的诱导作用加强, 使 $H_2(D_2, T_2)$ 分子的电子向Ar原子转移, 其静电能和诱导能的贡献增加, 势能值降低, 产生吸引力散射. 当 $b_l = 0.3606$ nm时, 球型势 V_0 处于极小值, 其静电能, 色散能和诱导能的贡献分数分别为7.8%, 46.1%和7.1%. 当EPCS的尾部效应达到极大值时, 对应的碰撞参数 b_l 值为 0.3446 nm, 与球型势极小值位置 0.3606 nm仅相差约 0.016 nm, EPCS尾部效应极大值的位置几乎对应于球型势极小值的位置. 当 $b_l = 0.2781$ nm时, 是EPCS振荡最大峰与尾部极大值间的极小值平均位置. 当 $b_l = 0.2708$ nm时, Ar原子的净电荷再次为零, 此时Ar- $H_2(D_2, T_2)$ 碰撞体系径向偶极再次发生转向. 计算表明EPCS振荡最大峰与尾部极大值间的极小值的平均位置和径向偶极再次发生转向的位置也是极为相近的, 仅相差 0.0073 nm, 即EPCS极小值的平均位置几乎对应于在短程排斥区Ar- $H_2(D_2, T_2)$ 体系径向偶极转向的位置. 当碰撞参数 b_l 小于 0.2708 nm时, EPCS在短程排斥势产生有规律的振荡散射, 其交换能 $E_0(\text{exch})$ 的排斥作用对EPCS有规律的振荡散射具有重要的作用.

从图10的IPCS, q_0 和 V_0 随碰撞参数 b_l 的变化曲线和图12的对比中可以看出, 当Ar原子从 $b_l = \infty \rightarrow b_l$ 接近 $H_2(D_2, T_2)$ 分子时, IPCS收敛分波的碰撞参数 b_l 值分别为 0.3208 nm, 0.3567 nm和 0.5060 nm. 当 $b_l = 0.3170$ nm时, 为球型势 V_0 的势能零点, IPCS才显示出作为增大的起点. 随着 b_l 的减小, IPCS逐渐增大. Ar- $H_2(D_2, T_2)$ 碰撞体系的IPCS极大值对应的碰撞参数分别为 0.1146 nm, 0.1410 nm和 0.1456 nm. 可以说明Ar- T_2 在相对较弱的排斥作用下, T_2 分子就可以产生极大激发, 而Ar- H_2 要在相对较强的排斥作用下, H_2 分子才可以产生极大激发, 这是由于 T_2 分子的转动能级间隔在 $H_2(D_2, T_2)$ 分子中最小的缘故.

4 结 论

本文重新构造了Ar- $H_2(D_2, T_2)$ 体系的振转相互作用势模型, 用密耦方法计算了Ar- $H_2(D_2, T_2)$ 碰撞体系的散射截面, 并进行比较分析后得到如下结果:

1) 用CCSD(T)/aug-cc-pV5Z+3s3p2d1f1g方法和基组对Ar原子与 H_2 分子的相互作用势进行计算, 并消除基组重叠误差(BSSE), 通过计算散射

截面与实验比较, 得到较为准确的相互作用势.

2) Ar-H₂(D₂, T₂) 体系在散射中发生径向偶极转向两次, 分别在长程吸引区和短程排斥区各一次. 在长程吸引区, 色散能对尾部效应的散射具有主要贡献. 在短程排斥区, 交换能对EPCS的振荡散射和IPCS的散射具有重要贡献.

3) Ar-H₂(D₂, T₂) 体系在散射中, EPCS尾部效应极大值的位置几乎对应于球型势极小值的位置. EPCS振荡最大峰与尾部极大间的极小值的平均位置几乎对应于在短程排斥区Ar-H₂(D₂, T₂) 体系径向偶极转向的位置.

参考文献

- [1] Liang Z X, Zhang Z D, Liu W M 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 050402
- [2] Chen J G, Wang R Q, Zhai Z, Chen J, Fu P M, Wang B B, Liu W M 2012 *Phys. Rev. A* **86** 033417
- [3] Wei H, Le Roy R J, Wheatley R, Meath W J 2005 *J. Chem. Phys.* **122** 084321
- [4] Li Y F, Linghu R F, Xu M 2013 *J. Sichuan Univ.* (Natural Science Edition) **50** 1053 (in Chinese) [李应发, 令狐荣锋, 徐梅 2013 四川大学学报(自然科学版) **50** 1053]
- [5] Zeng J Y 2000 *Quantum Mechanics* Vol. 1 (Third Edition) (Beijing: Science Press) pp650–651 (in Chinese) [曾谨言 2000 量子力学卷 I(第三版)(北京: 科学出版社) 第650—651页]
- [6] Gong M Y, Xu X T, Feng E Y 2011 *Chin. Phys. B* **20** 113401
- [7] Gong M Y, Hu X L, Chen X, Niu M, Feng E Y 2010 *Chin. Phys. B* **19** 063401
- [8] McKellar A R W, Welsh H L 1971 *J. Chem. Phys.* **55** 595
- [9] Waaijer M, Reuss J 1981 *Chem. Phys.* **63** 263
- [10] McKellar A R W 1982 *Faraday Discuss. Chem. Soc.* **73** 89
- [11] McKellar A R W 1996 *J. Chem. Phys.* **105** 2628
- [12] Bissonnette C, Chuaqui C E, Crowell K G, Le Roy R J, Wheatley R J, Meath W J 1996 *J. Chem. Phys.* **105** 2639
- [13] Rulis M, Smith K M, Scoles G 1978 *Can. J. Phys.* **56** 753
- [14] Toennies J P, Welz W, Wolf G 1979 *J. Chem. Phys.* **71** 614
- [15] Buck U 1982 *Faraday Discuss. Chem. Soc.* **73** 187
- [16] Buck U, Meyer H, Le Roy R J 1984 *J. Chem. Phys.* **80** 5589
- [17] Le Roy R J, Carley J S 1980 *Adv. Chem. Phys.* **42** 353
- [18] Tang K T, Toennies J P 1981 *J. Chem. Phys.* **74** 1148
- [19] Rodwell W R, Scoles G 1982 *J. Phys. Chem.* **86** 1053
- [20] Le Roy R J, Hutson J M 1987 *J. Chem. Phys.* **86** 837
- [21] Williams H L, Szalewicz K, Jeziorski B, Moszynski R, Rybak S 1993 *J. Chem. Phys.* **98** 1279
- [22] Moszynski R, Jeziorski B, Rybak S, Szalewicz K, Williams H L 1994 *J. Chem. Phys.* **100** 5080
- [23] Bissonnette C, Chuaqui C E, Crowell K G, Le Roy R J, Wheatley R J, Meath W J 1996 *J. Chem. Phys.* **105** 2639
- [24] Woon D E, Peterson K A, Dunning J T H 1998 *J. Chem. Phys.* **109** 2233
- [25] Waldron L, Liu W K, Le Roy R J 2002 *J. Mol. Struc.* **591** 245
- [26] Navrotskaya I, Geva E 2007 *J. Phys. Chem. A* **111** 460
- [27] Balakrishnan N, Hubartt B C, Ohlinger L, Forrey R C 2009 *Phys. Rev. A* **80** 012704
- [28] Paolini S, Ohlinger L, Forrey R C 2011 *Phys. Rev. A* **83** 042713
- [29] Espinho S, Felizardo E, Tatarova E, Dias F M, Ferreira C M 2013 *Appl. Phys. Lett.* **102** 114101
- [30] Glaz W, Bancewicz T, Godet J L, Gustafsson M, Maroulis G, Haskopoulos A 2014 *J. Chem. Phys.* **141** 074315
- [31] Gustafsson M, Glaz W, Bancewicz T, Godet J L, Maroulis G, Haskopoulos A 2014 *J. Phys. Conference Series* **548** 012027
- [32] Pople J A, Head-Gordon M, Raghavachari K 1987 *J. Chem. Phys.* **87** 5968
- [33] Kendall R A, Dunning J T H, Harrison R J 1992 *J. Chem. Phys.* **96** 6796
- [34] Woon D E, Dunning J T H 1993 *J. Chem. Phys.* **98** 1358
- [35] Boys S F, Bernadi F 1970 *Mol. Phys.* **19** 533
- [36] Wang R K, Shen G X, Yu C R, Yang X D 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 6932 (in Chinese) [汪荣凯, 沈光先, 余春日, 杨向东 2008 物理学报 **57** 6932]
- [37] Choi B H, Tang K T 1975 *J. Chem. Phys.* **63** 1775
- [38] Yang X D 1992 *Theoretical Calculation and Program of Atomic and Molecular Collision* (Chengdu: University of Electronic Science and Technology Press) (in Chinese) [杨向东 1992 原子和分子碰撞理论计算及程序(成都: 电子科技大学出版社)]
- [39] Jeziorski B, Moszynski R, Szalewicz K 1994 *Chem. Rev.* **94** 1887
- [40] Huber K P, Herzberg G 1979 *Molecular Spectrum and Molecular Structure (IV) Constants of Diatomic Molecules* (New York: Van Nostrand Reinhold Company) p250
- [41] Frisch M J, Trucks G W, Schlegel H B, Scuseria G E, Robb M A, Cheeseman J R, Montgomery J A, Vreven J T, Kudin K N, Burant J C, Millam J M, Iyengar S S, Tomasi J, Barone V, Mennucci B, Cossi M, Scalmani G, Rega N, Petersson G A, Nakatsuji H, Hada M, Ehara M, Toyota K, Fukuda R, Hasegawa J, Ishida M, Nakajima T, Honda Y, Kitao O, Nakai H, Klene M, Li X, Knox J E, Hratchian H P, Cross J B, Bakken V, Adamo C, Jaramillo J, Gomperts R, Stratmann R E, Yazyev O, Austin A J, Cammi R, Pomelli C, Ochterski J W, Ayala P Y, Morokuma K, Voth G A, Salvador P, Dannenberg J J, Zakrzewski V G, Dapprich S, Daniels A D, Strain M C, Farkas O, Malick D K, Rabuck A D, Raghavachari

- K, Foresman J B, Ortiz J V, Cui Q, Baboul A G, Clifford S, Cioslowski J, Stefanov B B, Liu G, Liashenko A, Piskorz P, Komaromi I, Martin R L, Fox D J, Keith T, Al-Laham M A, Peng C Y, Nanayakkara A, Challacombe M, Gill P M W, Johnson B, Chen W, Wong M W, Gonzalez C, Pople J A Gaussian 03, Revision D.01, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2004
- [42] Zhu Z H, Yu H G 1997 *Molecular Structure and Potential Energy Function* (Beijing: Science Press) pp98–99 (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98—99页]
- [43] Murrell J N, Carter S, Farantos S C, Huxley P, Varandas A J C 1984 *Molecular Potential Energy Functions* (New York: John Wiley & Sons Ltd) pp3–10
- [44] Bransden B H 1983 *Atomic Collision Theory* (Benjamin: Cummings Publishing Company) p12
- [45] 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]
- [46] Shen G X, Wang R K, Linghu R F, Yang X D 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 013101 (in Chinese) [沈光先, 汪荣凯, 令狐荣锋, 杨向东 2011 物理学报 **60** 013101]
- [47] Werner H J, Knowles P J, Knizia G, Manby F R, Schutz M, and others MOLPRO, version 2010.1, a package of ab initio programs, see <http://www.molpro.net>

Theoretical calculation of the vib-rotational interaction potential and the scattering cross section for the Ar-H₂ (D₂, T₂) collision system*

Di Ma-Ke¹⁾ Shen Guang-Xian²⁾ Zhao Yun-Qiang¹⁾ Zeng Ruo-Sheng^{1)†} Wang Rong-Kai^{1)‡}

1) (School of Chemistry and Material Science, Guizhou Normal University, Guiyang 550001, China)

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

(Received 17 November 2014; revised manuscript received 5 February 2015)

Abstract

Based on the *ab initio* coupled-cluster CCSD(T) method in quantum mechanics, the charge distribution of Ar atom and its vib-rotational interaction with H₂ molecule are calculated using augmented correlation consistent basis sets aug-cc-pV5Z and 3s3p2d1f1g Gaussian bonding function, and the basis set superposition error (BSSE) is eliminated using Boy and Bernardi's full counterpoise method. Afterwards, the analytical expression of the interaction potential of the Ar-H₂ system is fitted with Tang-Toennies potential function. With this interaction potential, the scattering cross section of Ar-H₂(D₂, T₂) collision system is calculated by using close-coupling method when the incident energy of Ar atoms is 83 meV. The calculated differential cross section of Ar-D₂ collision system is consistent with the experimental results. Calculated result and analysis show that the dispersion energy plays a key role in the long-range attractive potential scattering, and the exchange energy plays an important role in the short-range repulsive potential scattering. The direction of the radial dipole of the Ar-H₂ (D₂, T₂) collision system is turned twice in the range of impact parameters from 0.27 to 0.47 nm.

Keywords: Ar-H₂(D₂, T₂) complex, CCSD(T), interaction potential, scattering cross section

PACS: 31.15.bw, 31.50.Bc, 34.35.+a, 34.50.s

DOI: 10.7498/aps.64.133101

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 21101038, 21461006, 51472053) and the United Foundation of Science and Technology Department of Guizhou Province and Guizhou Normal University, China (Grant No. 2009J01).

† Corresponding author. E-mail: zengrsh@gznu.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: wrk0731@163.com