

He-HF(DF,TF)碰撞体系散射截面的 理论计算^{*}

汪荣凯¹⁾ 沈光先^{1,2)} 余春日³⁾ 杨向东^{2)†}

1) 贵州师范大学理学院, 贵阳 550001)

2) 四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065)

3) 安庆师范学院物理与电气工程学院, 安庆 246011)

(2007 年 12 月 1 日收到, 2008 年 3 月 21 日收到修改稿)

运用质心变换-拟合的方法, 使用 Murrell-Sorbie 势能函数拟合在对称性匹配微扰理论下精确计算 He-HF 体系的相互作用能数据, 得到了 He 原子与同位素分子 HF(DF,TF)复合物的相互作用势的解析形式. 在此基础上, 完成了入射 He 原子能量分别为 50 meV, 59.5 meV, 86 meV, 100 meV 和 120 meV 时, He-HF(DF,TF)碰撞体系散射截面的密耦计算, 获得了弹性、非弹性和总积分截面等信息, 并讨论了散射截面的变化趋势及特征.

关键词: He-HF(DF,TF)复合物, 密耦近似, 散射截面, 质心偏移

PACC: 3440, 3450

1. 引言

原子与分子间相互作用势的研究是原子分子碰撞振动和转动激发研究的基础和前提^[1,2], 提供一个足够准确的势能面用于解释或预言散射计算中的可观测数据是至关重要的. 惰性气体原子与卤化氢分子的相互作用一直是实验和理论研究中十分关注的研究对象^[3-10]. 但是, 在卤化氢分子系列中, HF 分子是典型的代表, 具有平衡键长最短, 极性最强, 酸性最强等特性, 具有极强的腐蚀性, 对实验设备损害非常严重, 实验难度远远大于其他性质的双原子分子, 因此惰性气体原子与 HF 分子散射实验数据较少^[11-15], 尤其是惰性气体原子与同位素分子 DF 的散射实验数据则更少. 同时, 长期以来人们注重对惰性气体原子与 HF 分子散射的理论研究^[16-22], 而对同位素分子 DF 等散射的理论研究却较少^[23,24].

在原子与双原子分子碰撞的理论研究中, 原子与双原子分子的相互作用势常是展开为便于散射计算的 Legendre 函数多项式形式. 我们用质心变换-拟合的方法构造了 He 原子与同位素分子 HF(DF,TF)在质心坐标系中的相互作用势, 避免了求解径向系

数时复杂的数学微积分^[25,26], 具有简单性和方便性. 然后采用公认精确度高的密耦近似方法^[27,28]计算了 He-HF(DF,TF)碰撞体系的散射截面, 计算 He-HF 体系的结果与实验^[15]符合很好. 研究表明, 我们构造的势模型较好地描述了 He-HF(DF,TF)体系相互作用的各向异性特征. 由于作者未见 He-TF 同位素体系的散射实验和理论研究的文献报道, 对 He-TF 同位素碰撞体系散射的理论计算并预测其散射截面的变化规律和特征, 为进一步研究 He-TF 等同位素体系提供理论依据和参考.

2. 计算方法

原子与双原子分子体系的碰撞过程 $A + BC(n_a, j_a) \rightarrow A + BC(n_\beta, j_\beta)$, 根据密耦近似, 从 (n_a, j_a) 态跃迁到 (n_β, j_β) 态的积分截面计算公式为

$$\sigma_{n_a j_a \rightarrow n_\beta j_\beta} = \frac{1}{2j_\alpha + 1} \frac{4\pi}{k_\alpha^2} \sum_{J, l, M_\alpha} (2l_\beta + 1) |T_{n_\beta j_\beta, n_a j_a}^J|_{M_\alpha}^2, \quad (1)$$

其中 n, j 和 M 分别表示分子的振动量子数、转动量子数及其空间固定轴上的投影量子数, l 表示轨道

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 30574096)和高等学校博士学科点专项科研基金(批准号: 20050610010)资助的课题.

[†] E-mail: xdyang@scu.edu.cn

角动量子数, k 表示动量, J 表示总角动量子数, $T_{n_{\beta}^j l_{\beta}^j m_{\alpha}^j m_{\alpha}}^j$ 是跃迁矩阵元.

3. 计算结果与讨论

3.1. He-HF(DF,TF)体系的相互作用势

在 He-HF(DF,TF)碰撞体系中,由于忽略振动激发的影响,使用刚性转子模型质心坐标系(Jacobi坐标)如图1所示. R' 表示 He 原子与 HF 分子质心的距离, θ' 为 R' 向量与 HF 分子键轴间的夹角; $\theta' = 0^\circ$ 表示 He-H-F 的线形结构, $\theta' = 180^\circ$ 表示 He-F-H 的线形结构,其中 HF 分子平衡键长取平衡值 $r = 0.09168 \text{ nm}^{[29]}$.

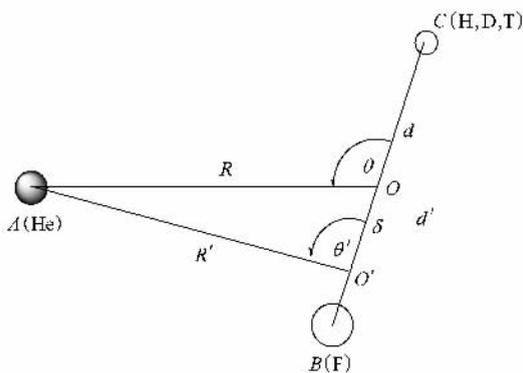


图1 原子与双原子分子碰撞的质心偏移几何图形

在 Born-Oppenheimer 近似下,同位素替代分子不影响分子中电子的运动状态,因而不改变原子-分子体系的相互作用势.对于 He-HF(DF,TF)碰撞体系,氢同位素原子的质量不同,将使 HF 分子键轴质心向 C 方向发生偏移,其相互作用势不变,即

$$V(R, r, \theta) = V(R', r', \theta'), \quad (2)$$

在图1中,以 C 分别代表 H, T 原子讨论质心偏移的几何关系. O' 点是双原子分子原质心位置, d' 是 C(H)原子到原质心 O' 点的距离; O 点是双原子分子新质心位置, d 是 C(T)原子到新质心 O 点的距离; $\delta = d' - d$ 是质心偏移量,其几何关系为

$$R^2 + d^2 - 2Rd \cos \theta = R'^2 + d'^2 - 2R'd' \cos \theta', \quad (3)$$

并且,

$$R^2 = R'^2 + (d' - d)^2 - 2R'(d' - d) \cos \theta'. \quad (4)$$

解(3)(4)二次联立方程,得到满足意义的解 R' , $\cos \theta'$ 分别为

$$R' = \sqrt{d^2 + R^2 + 2Rd' \cos \theta + d'^2 - 2d(R \cos \theta + d')}, \quad (5)$$

$$\cos \theta' = \frac{d' - d + R \cos \theta}{R'}. \quad (6)$$

通过坐标变换即可从原质心坐标的相互作用势 $V(R', r', \theta')$ 得到新质心坐标下的相互作用势 $V(R, r, \theta)$. 我们使用 Moszynski 等人^[4]用对称性匹配微扰理论 SAPI(symmetry-adapted perturbation theory)方法计算 He-HF 体系的相互作用能数据,从 $\theta = 0^\circ$ 到 180° 范围内间隔 20° 和 $\theta = 90^\circ$ 共 11 个方位上取相互作用能数据作为 He-HF 碰撞体系的势能面来构造了 He-HF(DF,TF)体系相互作用的各向异性势解析表达式是

$$V(R, r, \theta) = \sum_{k=0}^{10} V_k(R, r) P_k(\cos \theta), \quad (7)$$

(7)式可用矩阵表示为

$$V(R, r, \theta) = P V_k(R, r). \quad (8)$$

将(8)式左乘 P^{-1} , 即得

$$V_k(R, r) = P^{-1} V(R, r, \theta), \quad (9)$$

式中 r 为常数,径向系数 $V_k(R, r) = V_k(R)$ 是与 R 有关的函数, $P_k(\cos \theta)$ 为 Legendre 函数. 径向系数 $V_k(R)$ 用五参数的 Murrell-Sorbie 势能函数^[30]进行非线性最小二乘法拟合,拟合公式为

$$V(R) = -D_e(1 + a_1 \rho + a_2 \rho^2 + a_3 \rho^3) \exp(-a_1 \rho), \quad (10)$$

其中, $\rho = R - R_e$, R 是 He 原子与 HF(DF,TF)分子质心之间的距离, D_e, R_e, a_1, a_2, a_3 是拟合参数,我们将拟合相互作用势径向系数的拟合参数列于表1中,图2和图3分别是 He-HF 和 He-TF 体系相互作用势能面等势图,将 He-HF(DF,TF)体系相互作用势特征参数的比较列于表2中.

从图2,图3和表2可以看到,这个势能面具有各向异性的特征,He-HF(DF,TF)体系势能面上存在两个极小值,都为线形结构,第一极小值在 0° ,即 He-H-F 构型,He-HF,He-DF 和 He-TF 体系的极小值位置 R_{\min} 分别为 0.3193 nm , 0.3152 nm 和 0.3120 nm , 势能分别为 -39.77 cm^{-1} , -39.97 cm^{-1} 和 -39.45 cm^{-1} (文献值 -39.68 cm^{-1});第二极小值在 180° ,即 He-F-H 构型,He-HF,He-DF 和 He-TF 体系的极小值位置 R_{\min} 分别为 0.2866 nm , 0.2906 nm 和 0.2944 nm , 势能分别为 -36.17 cm^{-1} , -36.07 cm^{-1} 和 -36.64 cm^{-1} (文献值 -36.13 cm^{-1});在 He-HF(DF,TF)体系中,从第一极小值到第二极小值存在一个鞍点,其鞍

表 1 He-HF(DF,TF)相互作用势拟合的径向系数

	D_e/cm^{-1}	$R_e/0.1 \text{ nm}$	$a_1/10 \text{ nm}^{-1}$	$a_2/10^2 \text{ nm}^{-2}$	$a_3/10^3 \text{ nm}^{-3}$
He-HF					
V_0	22.86671	3.15402	2.52785	-0.49160	0.93607
V_1	2.91812	3.34715	3.59843	0.91818	-0.23630
V_2	10.81469	2.96290	2.70846	-1.19969	0.94088
V_3	2.72947	3.35271	2.29189	-2.34180	2.14123
V_4	1.28703	3.25170	2.66566	-1.83115	1.04980
V_5	0.47988	3.41125	3.47924	1.32378	0.34056
V_6	0.51525	3.12814	3.16452	1.37728	1.28174
V_7	0.74607	3.01024	1.99102	-1.90707	-0.44538
V_8	1.99877	2.18709	3.28318	-5.59033	5.04587
V_9	0.27466	2.94042	0.97471	-1.74341	0.32548
V_{10}	0.03915	3.42560	0.73736	-1.27239	0.23629
He-DF					
V_0	22.96979	3.14922	2.53871	-0.46434	0.94543
V_1	2.05456	3.26404	3.34767	-0.75803	-1.31399
V_2	12.93281	2.86620	2.79965	-1.21481	1.07095
V_3	2.52067	3.35597	3.57483	1.02442	0.00178
V_4	1.50010	3.11869	3.50449	0.44851	0.00063
V_5	0.42365	3.40794	3.50885	1.59619	0.40761
V_6	0.66881	2.91891	3.12562	0.65712	1.60849
V_7	0.74442	2.99174	2.29408	-1.13027	-1.50148
V_8	2.85445	2.13600	3.26796	-5.82418	4.01996
V_9	0.25494	3.04478	1.94243	-1.01265	-1.42471
V_{10}	0.02359	3.52866	0.61933	-1.13500	0.21264
He-TF					
V_0	22.97753	3.14777	2.54760	-0.44009	0.95275
V_1	1.47702	3.05477	1.23813	-2.91849	0.71856
V_2	14.70677	2.80526	2.86425	-1.31838	1.21882
V_3	2.16300	3.37809	3.54936	0.95100	-0.04107
V_4	2.04932	2.92719	2.75529	-2.08026	1.09424
V_5	0.36391	3.42926	3.53133	1.82344	0.45486
V_6	1.07595	2.68212	3.07403	-0.71296	1.74124
V_7	0.56357	3.07206	0.95553	-1.93870	0.42003
V_8	3.18398	2.13891	3.25310	-5.85898	3.53787
V_9	0.18406	3.19472	0.81233	-1.97345	0.42337
V_{10}	0.00835	2.30994	2.92278	-74.77305	89.51586

表 2 He-HF(DF,TF)体系相互作用势特征参数的比较

	势阱位置			势能零点位置			$\theta_{\text{sa}}/(\text{°})$	R_{min}/nm
	$\theta = 0^\circ$	$\theta = 90^\circ$	$\theta = 180^\circ$	$\theta = 0^\circ$	$\theta = 90^\circ$	$\theta = 180^\circ$		
	R_{min}/nm	R_{min}/nm	R_{min}/nm	R_0/nm	R_0/nm	R_0/nm		
He-HF	0.3193	0.3195	0.2866	0.2857	0.2835	0.2538	83.9	0.3195
He-DF	0.3152	0.3195	0.2906	0.2815	0.2835	0.2580	83.9	0.3190
He-TF	0.3120	0.3194	0.2944	0.2779	0.2834	0.2619	84.5	0.3187

点位置($\theta_{\text{sa}}, R_{\text{min}}$)分别为($83.9^\circ, 0.3195 \text{ nm}$), ($83.9^\circ, 0.3190 \text{ nm}$)和($84.5^\circ, 0.3187 \text{ nm}$), 势能分别为 -18.63 cm^{-1} , -18.61 cm^{-1} 和 -18.59 cm^{-1} (平均值 -18.61 cm^{-1}). 将拟合势能面 He-HF 的特征参数

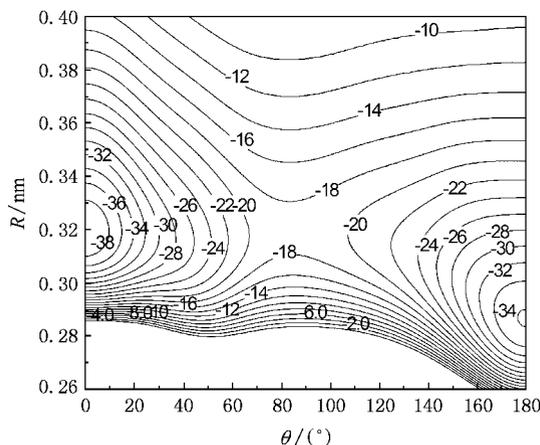


图2 He-HF体系相互作用势能面等势图

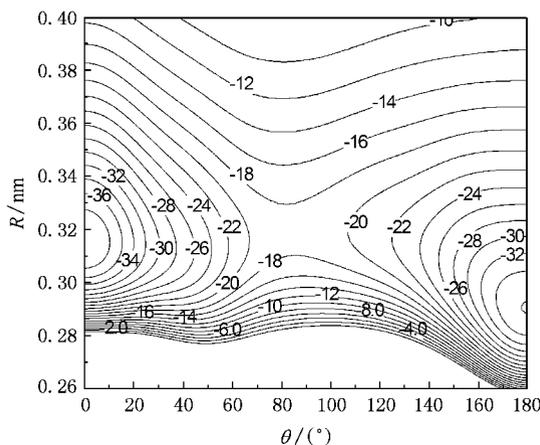
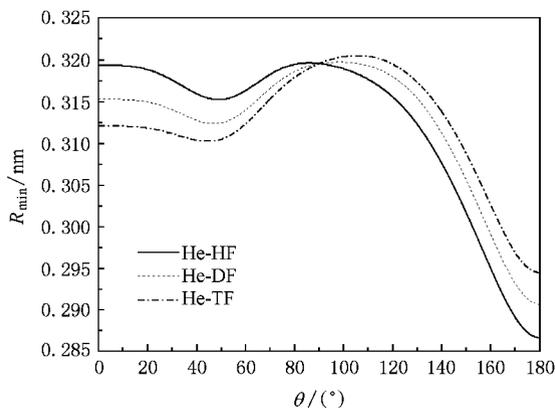


图3 He-TF体系相互作用势能面等势图

图4 He-HF(DF,TF)体系相互作用势极小值位置 R_{\min} 随方位角 θ 的变化

-3.01% 势能值最大误差仅为 $\pm 0.51 \text{ cm}^{-1}$, 说明我们用坐标变换-拟合的方法所构造 He-HF(DF,TF) 的势能面是可行的. 从表 2 还可以看出: 对于 He-HF, He-DF 和 He-TF 体系的相互作用势能面, 随着氢同位素原子质量的增加, HF(DF,TF) 分子质心位置向质量大的同位素氢原子偏移; 在 $\theta = 0^\circ$ 的 He-H-F 的线形结构中, 势阱位置 R_{\min} 和势能零点位置 R_0 逐渐减小; 在 $\theta = 180^\circ$ 的 He-F-H 的线形结构中, 势能极小值位置 R_{\min} 和势能零点位置 R_0 逐渐增大; 在 $\theta = 90^\circ$ 的 He-HF 的结构中, 势能极小值位置 R_{\min} 和势能零点位置 R_0 逐渐减小, 但减小的程度不大; 对于 He-HF(DF,TF) 体系相互作用势鞍点的位置 ($\theta_{\text{sa}}, R_{\text{min}}$) 则随着氢同位素原子质量的增加, 鞍点的方位角 θ_{sa} 逐渐增大, He 原子与 HF(DF,TF) 分子质心的距离 R_{min} 逐渐减小. 从图 4 中的 He-HF(DF,TF) 碰撞体系相互作用势能的极小值位置 R_{\min} 随方位角 θ 的变化曲线可以看出, 该碰撞体系相互作用势是一个具有方向性较强的各向异性势.

3.2. 散射截面的计算

我们用密耦方法计算了在 He-HF, He-DF 和 He-TF 拟合势下, 入射 He 原子能量分别为 50 meV, 59.5 meV, 86 meV, 100 meV 和 120 meV 时分别与基态同位素分子 HF, DF 和 TF 碰撞的弹性积分截面 EICS (elastic integral cross section), 转动激发态-态积分截面 (rotational-excitation state-to-state integral cross section), 非弹性积分截面 IICS (inelastic integral cross section) 和总积分截面 TICS (total integral cross section). 计算结果列于表 3 中, 弹性、非弹性、总积分截面和转动激发态-态积分截面随入射能量的变化曲线如图 5 至图 7 所示, 并对散射数据进行分析后得到如下结果.

1) 在图 5 中, 绘制了 He-HF, He-DF 和 He-TF 碰撞体系的总积分截面 (TICS) 随入射 He 原子能量的变化曲线. 从图中可以看出, He-HF, He-DF 和 He-TF 碰撞体系的总积分截面曲线基本重合, 随着入射能量的增加, 总积分截面均逐渐减小. 在同一入射能量时, He-HF, He-DF 和 He-TF 碰撞体系的总积分截面值基本相同, 最大差值仅为 $0.63 a_0^2$. 由计算结果可以说明, 由于靶分子同位素质量的改变, 不改变碰撞体系的相互作用势, 在总体上基本不改变碰撞体系的总积分截面.

2) 从图 5 中的弹性积分截面 (EICS, $l=0$) 随入射

与文献 [4] 比较, 方位角 θ 为 0° , 90° 和 180° 时的极小值位置相对误差分别为 -2.03% , -1.78% 和

表 3 He-HF(DF,TF)碰撞体系的积分截面

碰撞体系	0-0 $/a_0^2$	0-1 $/a_0^2$	0-2 $/a_0^2$	0-3 $/a_0^2$	0-4 $/a_0^2$	0-5 $/a_0^2$	0-6 $/a_0^2$	0-7 $/a_0^2$	0-8 $/a_0^2$	TICS $/a_0^2$	IICS $/a_0^2$
50 meV											
He-HF	200.83	15.35	3.60	0.70						220.48	19.64
He-DF	209.39	4.29	3.17	3.98	0.26	0.02				221.11	11.72
He-TF	211.89	0.09	2.91	5.98	0.04	0.03	0.01			220.96	9.07
59.5 meV											
He-HF	186.77	15.99	4.95	0.95	0.08					208.73	21.96
He-HF ^[15]	实验值	15.28	4.36	1.42	0.15						21.32
He-DF	196.50	4.45	3.22	4.60	0.41	0.05	0.00			209.23	12.73
He-TF	199.47	0.07	2.43	6.98	0.06	0.05	0.04	0.00		209.09	9.62
86 meV											
He-HF	162.71	16.17	8.30	1.26	0.51	0.02				188.96	26.25
He-DF	174.17	4.50	3.59	5.88	0.84	0.24	0.02	0.00		189.27	15.07
He-TF	177.60	0.11	1.78	9.30	0.11	0.12	0.13	0.00	0.00	189.15	11.55
100 meV											
He-HF	154.80	15.78	9.75	1.30	0.78	0.09				182.49	27.69
He-DF	166.61	4.41	3.83	6.35	1.07	0.40	0.03			182.70	16.09
He-TF	169.97	0.19	1.67	10.27	0.14	0.19	0.19	0.00	0.00	182.62	12.65
120 meV											
He-HF	146.56	15.03	11.38	1.31	1.11	0.28	0.00			175.67	29.11
He-DF	158.47	4.25	4.13	6.83	1.38	0.67	0.06	0.01	0.00	175.82	17.35
He-TF	161.53	0.36	1.65	11.38	0.20	0.32	0.30	0.01	0.01	175.76	14.23

能量的变化曲线可以看出, He-HF, He-DF 和 He-TF 碰撞体系的弹性积分截面均随着入射能量的增加而减小. 在同一入射能量时, He-HF, He-DF 和 He-TF 碰撞体系的弹性积分截面从小到大的次序是 $\sigma_{\text{EICS}}(\text{He-HF}) < \sigma_{\text{EICS}}(\text{He-DF}) < \sigma_{\text{EICS}}(\text{He-TF})$.

3) 图 6 是非弹性积分截面(IICS)随入射能量的变化曲线. 从图 6 中可以看出, He-HF, He-DF 和 He-TF 碰撞体系的非弹性积分截面均随入射能量的增加而增大. 在同一入射能量时, He-HF, He-DF 和 He-TF 碰撞体系的非弹性积分截面从小到大的次序是 $\sigma_{\text{IICS}}(\text{He-TF}) < \sigma_{\text{IICS}}(\text{He-DF}) < \sigma_{\text{IICS}}(\text{He-HF})$.

4) 从表 3 和图 7 可以看出, 对 He-HF, He-DF 和 He-TF 碰撞体系的转动激发态-态积分截面($j_a = 0 \rightarrow j_b \geq 1$), 当入射 He 原子能量为 59.5 meV 时, 我们用拟合势计算 He-HF 体系的转动激发态-态积分截面和非弹性积分截面与实验^[15]比较符合很好. 在同一入射能量时, He-HF 碰撞体系的转动激发态-态积分

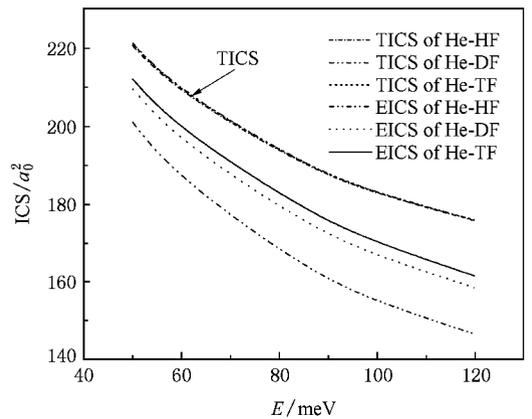


图 5 弹性和总积分截面随入射能量的变化

截面主要发生在转动能级 $j_a = 0 \rightarrow j_b = 1$ 的跃迁, 随着入射能量的增加, 该转动激发态-态积分截面由增加到极大值后有逐渐减小的趋势; He-TF 碰撞体系则主要发生在转动能级 $j_a = 0 \rightarrow j_b = 3$ 的跃迁, 而 He-

DF 碰撞体系主要发生在转动能级 $j_\alpha = 0 \rightarrow j_\beta = 1$, $j_\alpha = 0 \rightarrow j_\beta = 2$ 和 $j_\alpha = 0 \rightarrow j_\beta = 3$ 的跃迁, 并且这三个主要发生的转动激发态-态积分截面差值较小, 我们计

算 He-DF 碰撞体系转动激发态-态积分截面与文献 [24] 的结果是极为相近的.

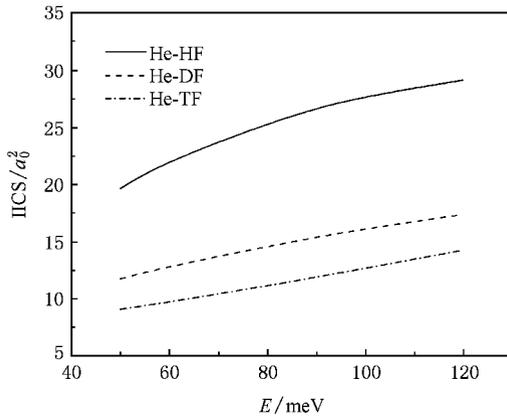


图 6 非弹性积分截面随入射能量的变化

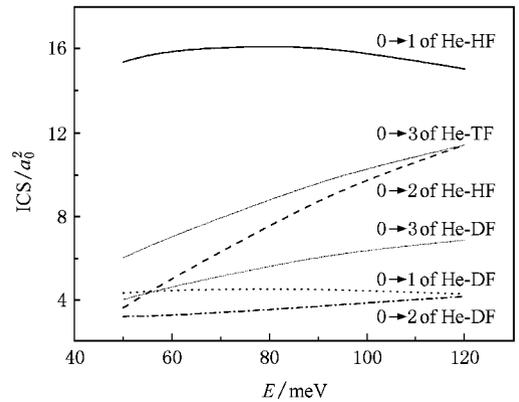


图 7 转动激发态-态积分截面随入射能量的变化

4. 结 论

1. 运用质心变换-拟合的方法构造 He 与同位素分子 HF(DF,TF)在质心坐标系下的相互作用势模型, 表现了相互作用势的各向异性特征, 该方法简单可行.

2. 对 He-HF(DF,TF)碰撞体系, 靶分子同位素

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积分截面. 随着入射能量的增加, 总积分截面均逐渐减小; 在同一入射能量时, 总积分截面值基本相同.

3. 对 He-HF(DF,TF)碰撞体系, 在同一入射能量时, He-TF 体系表现出较多的弹性散射, He-HF 表现出较多的非弹性散射, 而 He-DF 体系表现的弹性和非弹性散射强度介于 He-HF 和 He-TF 体系之间.

- [1] Ovchinnikova M Y 1985 *Chem. Phys.* **93** 101
- [2] Smith M J, Rabitz H 1991 *Chem. Phys.* **150** 361
- [3] Held W D, Piper E, Ringer G, Toennies J P 1980 *Chem. Phys. Lett.* **75** 260
- [4] Moszynski R, Wormer P E S, Jeziorski B, van der Avoird A 1994 *J. Chem. Phys.* **101** 2811
- [5] Meuwly M, Hutson J M 1999 *J. Chem. Phys.* **110** 8338
- [6] Zhang Y, Shi H Y, Wang W Z 2001 *Acta Phys. Chim. Sin.* **17** 1013 (in Chinese) [张 愚、史鸿运、王伟周 2001 物理化学学报 **17** 1013]
- [7] Fajin J L C, Fernandez B, Mikoszz A, Farrelly D 2006 *Mol. Phys.* **104** 1413
- [8] Yu C R, Huang S Z, Shi S H, Cheng X L, Yang X D 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 5739 (in Chinese) [余春日、黄时中、史守华、程新路、杨向东 2007 物理学报 **56** 5739]
- [9] Yu C R, Feng E Y, Cheng X L, Yang X D 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 4441 (in Chinese) [余春日、凤尔银、程新路、杨向东 2007 物理学报 **56** 4441]
- [10] Yu C R, Shi S H, Wang R K, Yang X D 2007 *Chin. Phys. Lett.* **34** 3345
- [11] Becker C H, Tiedemann P W, Valentini J J, Lee Y T, Walker R B 1979 *J. Chem. Phys.* **71** 481
- [12] Barnes J A, Keil M, Kutina R E, Polanyi J C 1980 *J. Chem. Phys.* **72** 6306
- [13] Barnes J A, Keil M, Kutina R E, Polanyi J C 1982 *J. Chem. Phys.* **76** 913
- [14] Boughton C V, Miller R E, Vohralik P F, Watts R O 1986 *Mol. Phys.* **58** 827
- [15] Chapman W B, Nesbitt D J, Weida M J 1997 *J. Chem. Phys.* **106** 2248
- [16] Moszynski R, de Weerd F, Groenenboom G C, van der Avoird A 1996 *Chem. Phys. Lett.* **263** 107
- [17] Yang X D, Wang C X, Sun G H, Jing F Q 2000 *J. Sichuan University (Natural Science Edition)* **37** 553 (in Chinese) [杨向东、王彩霞、孙桂华、经福谦 2000 四川大学学报(自然科学版) **37** 553]

- [18] Sun G H , Yang X D , Zhu J , Wang C X 2002 *Chin. Phys.* **11** 910
- [19] Yu C R , Wang R K Fen E Y , Yang X D 2006 *J. Sichuan University* (Natural Science Edition) **43** 160 (in Chinese) [余春日、汪荣凯、凤尔银、杨向东 2006 四川大学学报(自然科学版) **43** 160]
- [20] Yu C R , Wang R K 2006 *J. At. Mol. Phys.* **23** 510 (in Chinese) [余春日、汪荣凯 2006 原子与分子物理学报 **23** 510]
- [21] Zeng Y , Yu C R , You J C 2006 *J. At. Mol. Phys.* **23** 1111 (in Chinese) [曾 勇、余春日、尤建村 2006 原子与分子物理学报 **23** 1111]
- [22] Yu C R , Wang R K , Cheng X L , Yang X D 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 2577 (in Chinese) [余春日、汪荣凯、程新路、杨向东 2007 物理学报 **56** 2577]
- [23] Battaglia F , Gianturco F A , Palma A 1984 *J. Chem. Phys.* **80** 4997
- [24] Collins L A , Lane N F 1976 *Phys. Rev. A* **14** 1358
- [25] Kreek H , Le Roy R J 1975 *J. Chem. Phys.* **63** 338
- [26] Liu W K , Grabenstetter J E , Le Roy R J , McCourt F R 1978 *J. Chem. Phys.* **68** 5028
- [27] Choi B H , Tang K T 1975 *J. Chem. Phys.* **63** 1775
- [28] 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)]
- [29] Huber K P , Herzberg G 1979 *Molecular Spectra and Molecular Structure IV. Constant of Diatomic Molecules*. (New York : Van Nostrand Reinhold Company) p304
- [30] Zhu Z H , Yu H G 1997 *Molecular structures and Molecular Potential Energy Functions* (Beijing Science Press) p109 (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)] p109

Theoretical calculation of the scattering cross section for He-HF(DF ,TF) collision system *

Wang Rong-Kai¹⁾ Shen Guang-Xian¹⁾²⁾ Yu Chun-Ri³⁾ Yang Xiang-Dong^{2)†}

¹⁾ School of Physics and Chemistry , Guizhou Normal University , Guiyang 550001 , China)

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

³⁾ School of Physics & Electric Engineering , Anqing Teachers College , Anqing 246011 , China)

(Received 1 December 2007 ; revised manuscript received 21 March 2008)

Abstract

For the first time , the interaction potentials of the He-HF(DF ,TF) van der Waals complexes have been obtained by center of mass transformation and then employing Murrell-Sorbie potential function to fit the accurate interaction energy data , which have been computed at symmetry-adapted perturbation theory (SAPT) level. On the basis of the above results , the close coupling calculation of scattering cross sections for collision of He with HF(DF ,TF) is performed by employing the fitted interaction potential. This calculation is performed at the incident energies of 50 , 59.5 , 86 , 100 and 120 meV , respectively. The information of the elastic , inelastic and total integral cross sections were obtained , and the change tendency and characteristics of scattering cross section are discussed for He-HF(DF ,TF) collision system.

Keywords : He-HF(DF ,TF) complexes , close coupling approximation , scattering cross section , center of mass excursion

PACC : 3440 , 3450

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10574096) , the Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education of China (Grant No. 20050610010).

† E-mail : xdyang@scu.edu.cn