

Ne-HF 体系的相互作用势及散射截面的密耦计算*

余春日^{1)†} 宋晓书²⁾ 程新路³⁾ 杨向东³⁾ 申传胜¹⁾

1) 安庆师范学院物理与电气工程学院, 安庆 246133)

2) 贵州师范大学理学院, 贵阳 550001)

3) 四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065)

(2007 年 9 月 14 日收到, 2007 年 11 月 20 日收到修改稿)

利用非线性最小二乘法拟合在 CCSD(T)_{aug-cc-pVQZ} 理论水平下计算的相互作用能, 得到了基态 Ne-HF 体系相互作用势的解析表达式. 基于拟合的 CCSD(T) 势, 通过密耦计算得到了入射能量分别为 60, 75, 100 和 150 meV 时, Ne-HF 散射的微分截面和分波截面, 详细讨论了散射截面随能量的变化趋势以及态-态激发截面对总非弹性散射截面的影响.

关键词: 相互作用势, 散射截面, 密耦计算, Ne-HF 体系

PACC: 3440, 3430, 3450E

1. 引 言

弱相互作用分子的振-转能量转移, 在物理、化学以及生命科学的许多过程中起着重要的作用, 为研究分子的能级结构、化学反应动力学、分子晶体的形成和 DNA 的复制等提供了大量参考信息^[1-5], 因而引起人们实验和理论研究的持久兴趣^[6-14]. 稀有气体与卤化氢 (rare-gas-hydrogen-halide, 简称 Rg-HX) 分子组成的范德瓦耳斯分子体系一直被看作是研究分子间弱相互作用的典范. 对于 Ne-HF 体系, Nesbitt 等人^[15]首次观测到 Ne-HF 分子的高分辨红外光谱, 随后 Fraser 等人^[16]观测到 Ne-HF 分子的微波光谱, Lovejoy 等人^[17]观察到含重氢复合物 Ne-DF 的近红外光谱. 在理论上, O'Neil 等人^[18]使用相关电子对近似 (the correlated electron pair approximation, 简称 CEPA) 构造了 Ne-HF 复合物从头算势能面, 并在此势能面上进行了振转光谱计算, 理论预测与实验结果符合较好; Lovejoy 等人^[17]为了复制观察到的 Ne-DF 分子光谱, 调整了 CEPA 势, 再现了 Ne-HF 分子光谱, 结果与实验光谱数据符合较好; 张愚^[19]采用单双迭代 (包括非迭代三重激发) 耦合簇理论 (single and double excitations coupled-cluster with a noniterative

perturbation treatment of triple excitations, 简称 CCSD(T)) 方法和大基组 (augmented correlation-consistent polarized quadruple zeta basis set, 简称 aug-cc-pVQZ) 计算了 Ne-HF 复合物的势能面, 结果表明, 相互作用能均表现出良好的收敛行为, 而且 aug-cc-pVQZ 基组用于计算弱键范德瓦耳斯复合物的相互作用能已经足够了. 但迄今为止, 对 Ne-HF 体系的散射实验及其动力学研究^[20]很少. 本文报道了基于 Ne-HF 复合物 CCSD(T) 势能面的量子动力学研究结果. 首先利用非线性最小二乘法拟合在 CCSD(T)_{aug-cc-pVQZ} 理论水平下计算的 Ne-HF 相互作用能数据, 获得了基态 Ne-HF 复合物 CCSD(T) 势的解析表达式, 然后, 采用量子密耦方法计算了 Ne-HF 体系在不同碰撞能量时的微分截面和分波截面, 详细讨论了态-态转动激发截面对总非弹性散射截面的影响和散射截面随能量的变化趋势. 希望研究结果对该体系的散射实验和进一步的理论研究能提供有益的参考.

2. Ne-HF 体系的相互作用势

Ne-HF 复合物的从头算 CCSD(T) 势能面由张愚^[19]完成. 计算中采用标准的 Jacobi 坐标系 (R, r, θ), 矢量 r 的方向是从 F 原子核的中心位置指向 H

* 国家自然科学基金 (批准号: 10676025) 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: cryu2@126.com

原子核的中心位置,长度值 r 即为 HF 分子的键长, 取在 CCSD(T)aug-cc-pVQZ 理论水平下的优化值 0.0918 nm, 且固定 HF 为平衡构型; 矢量 R 的方向是从 HF 的质心位置指向 Ne 原子核的中心位置, 长度值为 R ; θ 为矢量 R 和矢量 r 之间的夹角, $\theta = 0^\circ$ 对应于线型 Ne—H—F 构型, 角度 θ 在 0° — 180° 范围内取 11 个值, 取值间隔 $\Delta\theta = 20^\circ$, 共计算了 99 个几何构型的势能点, 并采用 Boys 等人^[21]提出的均衡法 (counterpoise method) 消除基组重叠误差 (BSSE)。

Ne-HF 复合物 CCSD(T) 势能面作为 R 的函数在几个特定方向上的行为如图 1 所示. 从图 1 可以看出, 在 CCSD(T) 势能面上存在两个极小值, 都为线型结构, 第一极小值在 $\theta = 0^\circ$ 方向, 即 Ne—H—F 构型, 对应的分子间距离 R_m 为 0.322 nm, 势能为 -78.826 cm^{-1} , 第二极小值在 $\theta = 180^\circ$ 方向, 即 Ne—F—H 构型, R_m 为 0.311 nm, 势能为 -43.711 cm^{-1} , 第一极小值的势阱深度约为第二极小值势阱深度的两倍, 这主要是由于 F 原子的半径比较小. 从第一极小值到第二极小值存在一个鞍点, 在 $\theta = 90^\circ$ 方向, 即 T 构型, R_m 为 0.328 nm, 势能为 -31.498 cm^{-1} . 这是因为 HF 单体在分子轴线方向比与之垂直方向的电子密度小, 因此, 对于给定的分子间距, 两种线形构型时分子间的排斥作用比 T 构型时弱.

为方便动力学计算, 我们用非线性最小二乘法将离散的从头算势能点^[19]拟合解析势能函数 $V(R, \theta)$, 按通常做法, 将 $V(R, \theta)$ 用 Legendre 函数 $P_\lambda(\cos\theta)$ 展开成如下形式:

$$V(R, \theta) = \sum_{\lambda=0}^n V_\lambda(R) P_\lambda(\cos\theta), \quad (1)$$

用矩阵可表示为

$$V(R, \theta) = P V_\lambda(R), \quad (2)$$

将 (2) 式左乘 P^{-1} , 即得

$$V_\lambda(R) = P^{-1} V(R, \theta). \quad (3)$$

径向系数 $V_\lambda(R)$ 采用 Huxley 势函数形式^[22], 可表示为

$$V_\lambda(R) = A \left(1 + \sum_{n=1}^3 a_n R^n \right) \exp(-a_4 R) - \tanh(R - R_m/2) \left(C_6 R^{-6} + C_8 R^{-8} + C_{10} R^{-10} \right), \quad (4)$$

其中, $\tanh x = \left(\frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} \right)$, R_m 是势阱位置, $A, a_1, a_2, a_3, a_4, C_6, C_8$ 和 C_{10} 是拟合参数, 如表 1 所示, 前 5 个径向系数 $V_\lambda(R)$ ($\lambda = 0, 1, 2, 3, 4$) 随 R 的变化关系曲线如图 2 所示, 通过计算得到对应于这 5

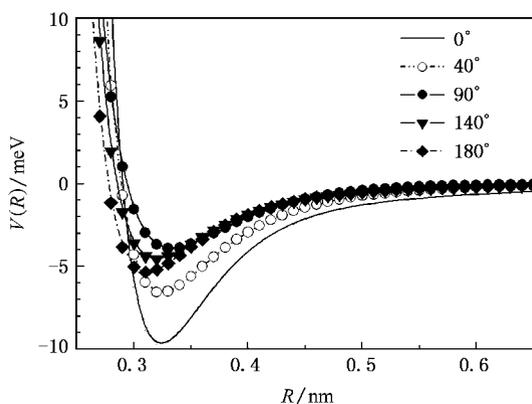


图 1 Ne-HF 体系在几个特定方向上的势能曲线

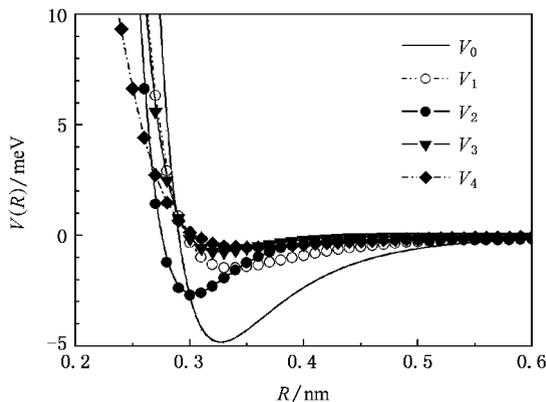


图 2 Ne-HF 体系拟合势能表面的径向系数

表 1 Ne-HF 体系径向系数的拟合参数

系数	R_m/nm	A/meV	$a_1/10^2 \text{ nm}^{-1}$	$a_2/10^3 \text{ nm}^{-2}$	$a_3/10^4 \text{ nm}^{-3}$	$a_4/10 \text{ nm}^{-1}$	$C_6/10^{-6} \text{ eV} \cdot \text{nm}^6$	$C_8/10^{-6} \text{ eV} \cdot \text{nm}^8$	$C_{10}/10^{-7} \text{ eV} \cdot \text{nm}^{10}$
V_0	0.325	-11.6646	-8.4250	9.0282	-9.4799	3.0157	0.4982	3.4161	-2.7348
V_1	0.332	-12.2876	-7.0392	-9.8415	-7.2467	2.9293	0.4402	1.6712	-1.1303
V_2	0.302	-11.9401	9.8105	-7.8417	0.4637	1.8573	16.2751	1.0745	-1.2620
V_3	0.325	-10.3178	-8.8969	9.3935	-3.7095	2.3154	0.1838	1.6637	-1.2214
V_4	0.351	-7.7593	9.6604	-4.4980	9.6109	2.8875	5.6480	-1.1176	0.3170

个径向系数的势阱深度 ϵ 分别为 -4.878 , -1.470 , -2.703 , -0.747 和 -0.541 meV. 表 2 是本文的拟合势与 CEPA 势^[15]前 5 个径向系数 $V_l(R)$ 在 $R = 0.3174$ nm 时的比较. 从表 2 可以看出, 拟合势最大的两项 V_0 和 V_2 的相对误差分别为 0.95% 和 1.98%, 而其他较小的各项(在 5 cm^{-1} 左右)的相对误差均在 10% 以下, 说明本文的拟合势是可靠的.

表 2 Ne-HF 体系拟合势与 CEPA 势前 5 个径向系数在 $R = 0.3174$ nm 时的比较

系数 ($R = 0.3174$ nm)	V_0/cm^{-1}	V_1/cm^{-1}	V_2/cm^{-1}	V_3/cm^{-1}	V_4/cm^{-1}
文献 [15]	-31.418	-5.823	-15.485	-3.429	-1.934
本文计算值	-31.118	-5.614	-15.179	-3.710	-1.879
相对误差/%	0.95	3.59	1.98	8.19	2.84

3. 散射截面的密耦计算

根据密耦方法^[23], 碰撞过程 $A + BC(\nu_\alpha, j_\alpha) \rightarrow A + BC(\nu_\beta, j_\beta)$ 的微分散射截面可表示为

$$\frac{d\sigma_{\nu_\alpha j_\alpha \rightarrow \nu_\beta j_\beta}}{d\Omega} = \frac{1}{(2j_\alpha + 1)} \frac{k_\beta}{k_\alpha} \sum_{M_\alpha M_\beta} \left| f_{\nu_\beta j_\beta M_\beta, \nu_\alpha j_\alpha M_\alpha}(\theta, \phi) \right|^2, \quad (5)$$

其中 ν, j 和 M 分别表示分子的振动量子数、转动量子数和转动量子数在空间固定坐标轴上的投影, k 表示波矢. 从初态 $(\nu_\alpha j_\alpha M_\alpha)$ 到终态 $(\nu_\beta j_\beta M_\beta)$ 的散射振幅为

$$f_{\nu_\beta j_\beta M_\beta, \nu_\alpha j_\alpha M_\alpha}(\theta, \phi) = \left(\frac{4\pi}{k_\alpha k_\beta} \right)^{1/2} \times \sum_{l_\beta} [2l_\beta + 1]^{1/2} \times A_{l_\beta}(\nu_\alpha j_\alpha M_\alpha \rightarrow \nu_\beta j_\beta M_\beta) Y_{l_\beta M_\alpha \rightarrow M_\beta}(\theta, \phi), \quad (6)$$

其中

$$A_{l_\beta}(\nu_\alpha j_\alpha M_\alpha \rightarrow \nu_\beta j_\beta M_\beta) = \sum_J l_\beta M_\alpha - M_\beta j_\beta M_\beta |JM_\alpha \mathbf{T}_{\nu_\alpha j_\alpha l_\alpha, \nu_\beta j_\beta M_\beta}^J. \quad (7)$$

这里 l 表示轨道角量子数, J 表示总角动量量子数, $Y_{l_\beta M_\alpha \rightarrow M_\beta}(\theta, \phi)$ 是球谐函数, $\mathbf{T}_{\nu_\alpha j_\alpha l_\alpha, \nu_\beta j_\beta M_\beta}^J$ 是跃迁矩阵元.

碰撞过程 $A + BC(\nu_\alpha, j_\alpha) \rightarrow A + BC(\nu_\beta, j_\beta)$ 的分波截面可表示为

$$\sigma_{\nu_\alpha j_\alpha \rightarrow \nu_\beta j_\beta}^J = \frac{1}{2j_\alpha + 1} \frac{4\pi}{k_\alpha^2} \sum_{l_\beta M_\alpha} (2l_\beta + 1) \left| \mathbf{T}_{\nu_\alpha j_\alpha l_\alpha, \nu_\beta j_\beta M_\beta}^J \right|^2, \quad (8)$$

碰撞过程 $A + BC(\nu_\alpha, j_\alpha) \rightarrow A + BC(\nu_\beta, j_\beta)$ 的积分截面可表示为

$$\sigma_{\nu_\alpha j_\alpha \rightarrow \nu_\beta j_\beta} = \frac{1}{2j_\alpha + 1} \frac{4\pi}{k_\alpha^2} \sum_{l_\beta M_\alpha} (2l_\beta + 1) \times \left| A_{l_\beta}(\nu_\alpha j_\alpha M_\alpha \rightarrow \nu_\beta j_\beta M_\beta) \right|^2 = \frac{1}{2j_\alpha + 1} \frac{4\pi}{k_\alpha^2} \sum_{l_\beta M_\alpha} (2l_\beta + 1) \left| \mathbf{T}_{\nu_\beta j_\beta l_\beta, \nu_\alpha j_\alpha M_\alpha}^J \right|^2. \quad (9)$$

3.1. 微分截面

我们用拟合势计算了 Ne-HF 体系碰撞能量为 48.35 meV 时的积分截面和微分截面, 并与相同碰撞能量时 CEPA 势的积分截面和微分截面进行比较. 根据(9)式计算得到拟合势在碰撞能量为 48.35 meV 时的总非弹性积分截面为 $30.55 a_0^2$ (a_0 为玻尔半径), 与相同碰撞能量时 CEPA 势的积分截面^[20]值 $32.32 a_0^2$ 比较, 相对误差为 5.5%. 图 3 是两种势碰撞能量为 48.35 meV 时微分截面的比较. 从图 3 可以看出, 拟合势与 CEPA 势^[18]微分截面振荡的极值位置和振荡幅度均吻合得很好, 说明我们的拟合势和低能散射截面的密耦计算结果是可靠的.

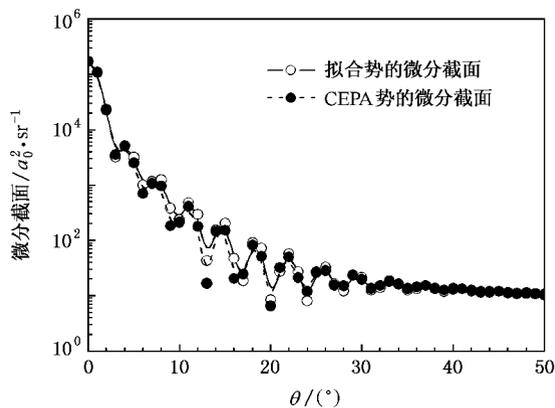


图 3 Ne-HF 体系拟合势和 CEPA 势在碰撞能量为 48.35 meV 时总微分截面的比较

图 4 和图 5 是用拟合势计算的入射 Ne 原子能量为 100 meV 时与 HF 分子碰撞的总微分截面、弹性微分截面、总非弹性微分截面和从初态 $\nu_\alpha j_\alpha = 00$ 跃迁到终态 $\nu_\beta j_\beta > (\nu_\beta j_\beta = 01, 02, 03, \dots)$ 的态-态微分截面. 从图 4 可以看出, 弹性微分截面和总微分截面在总体形状及幅度方面显示出相同的变化趋势, 都是角分布在 0° 时最大, 从 0° 到 20° 范围内迅速振荡减小, 在 9° 时振荡幅度达到最大, 此后振荡逐渐减弱, 微分截面缓慢减小直到最后收敛. 从图 4 还可以看

出,小角部分($\theta < 74^\circ$)主要是弹性散射,大角部分主要是非弹性散射.但由于散射主要发生在小角部分,总截面仍以弹性截面为主.

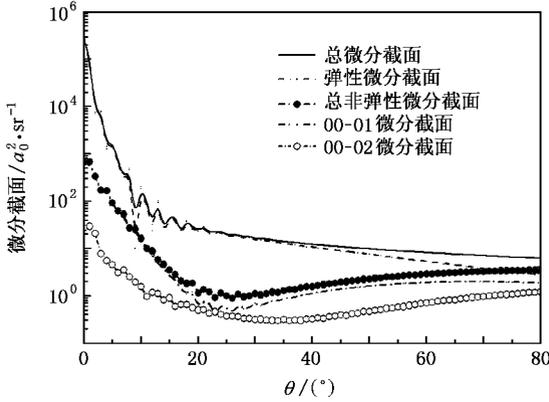


图 4 Ne-HF 体系碰撞能量 $E = 100$ meV 时的微分截面

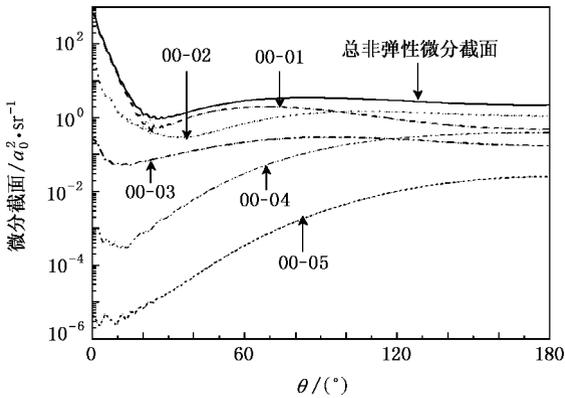


图 5 Ne-HF 体系碰撞能量 $E = 100$ meV 时的微分截面

从图 4 和图 5 的态-态微分截面可以看出,首先,小角散射时,总非弹性微分截面主要来自 $00 \rightarrow 01, 02$ 跃迁的贡献,其中以 $00 \rightarrow 01$ 跃迁的贡献最大.这说明小角散射时,低激发态远比高激发态更容易被激发.其次,高激发跃迁的态-态微分截面在大角部分明显大于小角部分,并随散射角的增大迅速增大,突出反映在图 5 中 $00-04, 00-05$ 两条曲线上.因此,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,才能使二者之间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,从而诱导靶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散射.因此,转动激发总是和大角散射相伴随.

图 6 是不同入射能量时的总微分截面随散射角的变化曲线.从图 6 可看出,不同能量总微分截面的

变化趋势相同,随着能量的升高,各衍射振荡极小值位置逐渐向左移动,并符合以下规律^[24]: $\sin\theta \propto n/\sqrt{E}$,这是势场对入射物质波的衍射现象.

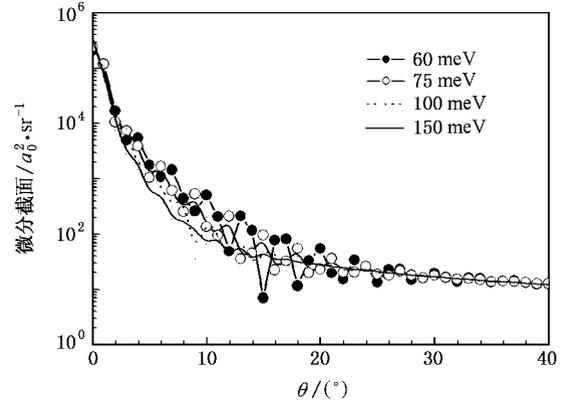


图 6 Ne-HF 体系不同入射能量时的总微分截面

3.2. 分波截面

图 7 是 Ne-HF 体系碰撞能量在 100 meV 时的总分波截面、弹性分波截面和总非弹性分波截面随总角动量量子数 J 的变化曲线.从图 7 可以看出:总分波截面随 J 的增加而不断振荡,振荡幅度越来越大;同时,由于量子效应,出现了非常明显的尾部效应,尾部的极大值比我们预先研究的 He-HX ($X = F, Cl, Br$) 体系大得多^[9,11,12];此后迅速收敛.从图 7 中还可以看出:总分波截面以弹性分波的贡献为主,而非弹性分波截面只占其中的一小部分.

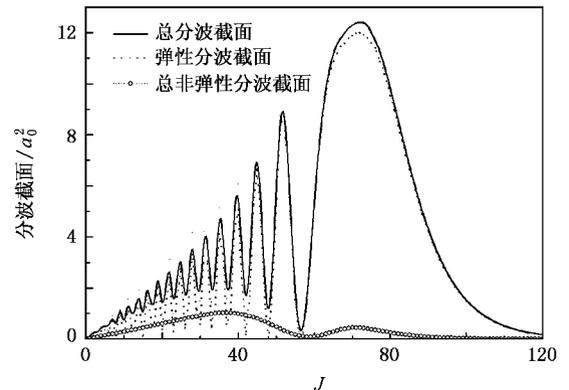


图 7 Ne-HF 体系在碰撞能量为 100 meV 时的分波截面

为了更好地理解碰撞能量跃迁过程,我们考察了态-态转动激发分波对总非弹性分波截面的贡献.图 8 是碰撞能量为 100 meV 时,总非弹性分波截面和态-态激发分波截面随总角动量量子数 J 增加的变化趋势.这些曲线的典型特征是总非弹性分波截

面和低转动跃迁 $00 \rightarrow 01, 02$ 有两个峰值,而对于较高的转动跃迁 $00 \rightarrow 03, 04$ 只有一个峰值,这表明尾部效应仅在低激发态中产生,高激发态不产生尾部效应.从图 8 还可以看出,总非弹性分波截面主要来自 $00 \rightarrow 01, 02$ 的跃迁,特别是前者对高 J 端分波截面尾部极大的贡献远大于后者.另外,图 8 中还表现出低激发态收敛较慢,如 $00 \rightarrow 01$ 跃迁,当 $J = 137$ 时才收敛;高激发态收敛较快,如 $00 \rightarrow 04$ 跃迁, $J = 48$ 就已收敛.

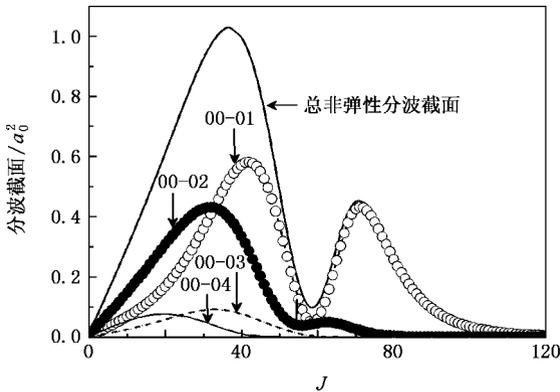


图 8 Ne-HF 体系在碰撞能量为 100 meV 时的非弹性分波截面

图 9 是不同碰撞能量时,总分波截面随着总角

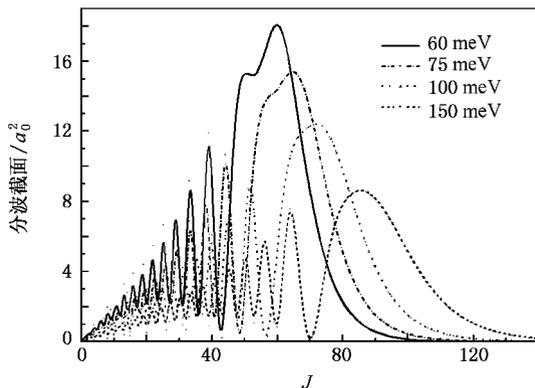


图 9 Ne-HF 体系在不同碰撞能量时的总分波截面

动量子数 J 的变化曲线.从图 9 我们看到,随着碰撞能量的增加,总分波截面的尾部极大值减小,分波截面收敛变慢,收敛需要的分波数增加.例如,当 $E = 60$ meV 时,尾部极大值为 $18.1 a_0^2$,出现在 $J = 60$ 处,收敛的分波数为 112;当 $E = 150$ meV 时,尾部极大值为 $8.63 a_0^2$,出现在 $J = 85$ 处,收敛的分波数为 175.

4. 结 论

基于在 CCSD(T)/aug-cc-pVQZ 理论水平下计算的相互作用能,获得了基态 Ne-HF 复合物相互作用势的解析表达,并采用密耦方法计算得到了不同入射能量时,Ne-HF 散射的微分截面和分波截面,计算结果的可靠性通过与 CEPA 势相同碰撞能量的积分截面和微分截面的比较得到证实.研究表明:

1) 总微分截面和弹性微分截面均显示出明显的振荡结构,随着碰撞能量的升高,各衍射振荡极小值位置逐渐向左移动;总截面以弹性截面为主,弹性散射主要发生在小角部分,非弹性散射主要发生在大角部分;在小角部分低激发跃迁远比高激发跃迁更容易,高激发跃迁主要发生在大角部分.

2) 总分波截面和弹性分波截面均显示出明显的振荡结构,且出现了非常明显的尾部效应.随着碰撞能量的增加,尾部效应减弱,分波截面收敛变慢,收敛需要的分波数增加;总分波截面以弹性截面为主,非弹性分波截面未见明显的振荡现象,但低激发态有明显的尾部效应.

3) 总非弹性截面主要来自 $00 \rightarrow 01, 02$ 跃迁的贡献,其中以 $00 \rightarrow 01$ 跃迁的贡献最大.

本文的工作对该体系的散射实验和进一步的理论研究具有一定的借鉴作用,对全面探索原子与分子相互作用机理有一定的参考价值^[25].

[1] Sitlani A, Barton J K 1994 *Biochemistry* **33** 12100
 [2] Gilijamse J J, Hoekstra S, Sebastiaan Y T, Meerakker V D, Groenenboom G C, Meijer G 2006 *Science* **313** 1617
 [3] Feng E Y, Huang W Y, Dong S B, Cui Z F 2005 *Acta Phys. - Chim. Sin.* **21** 250 (in Chinese) [凤尔银, 黄武英, 董书宝, 崔执凤 2005 物理化学学报 **21** 250]
 [4] Chu T S, Xie T X, Han K L 2004 *J. Chem. Phys.* **121** 9352
 [5] Feng E Y, Huang W Y, Cui Z F, Zhang W J 2004 *Chem. Phys.* **303** 309

[6] Boughton C V, Miller R E, Vohralik P F, Watts R O 1986 *Mol. Phys.* **58** 827
 [7] Wang R K, Linghu R F, Yang X D 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 2067 (in Chinese) [汪荣凯, 令狐荣锋, 杨向东 2007 物理学报 **56** 2067]
 [8] 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]

- [9] Yu C R , Cheng X L , Yang X D 2007 *Chin. Phys. Lett.* **24** 123
- [10] 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]
- [11] 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]
- [12] Yu C R , Feng E Y , Wang R K , Yang X D 2006 *Chin. Phys.* **15** 2571
- [13] Xu M , Linghu R F , Wang R K , Yang X D 2006 *J. Sichuan University (Natural Science Edition)* **43** 855 (in Chinese) [徐梅、令狐荣锋、汪荣凯、杨向东 2006 四川大学学报 (自然科学版) **43** 855]
- [14] Prosmi R , Sergio L L , Alberto G V 2004 *J. Chem. Phys.* **120** 6471
- [15] Nesbitt D J , Lovejoy C M , Lindeman T G , O'Neil S V , Clary D C 1989 *J. Chem. Phys.* **91** 722
- [16] Fraser G T , Suenram R D 1990 *J. Mol. Spectrosc.* **140** 141
- [17] Lovejoy C M , Nesbitt D J 1991 *J. Chem. Phys.* **94** 208
- [18] O'Neil S V , Nesbitt D J , Rosmus P , Werner H J , Clary D C 1989 *J. Chem. Phys.* **91** 711
- [19] Zhang Y 2003 *Guizhou Science* **21** 9 (in Chinese) [张愚 2003 贵州科学 **21** 9]
- [20] Chapman W B , Weida M J , Nesbitt D J 1997 *J. Chem. Phys.* **106** 2248
- [21] Boys S F , Bernardi F 1970 *Mol. Phys.* **19** 553
- [22] Huxley P , Knowles P B , Murrell J N , Watts J D 1984 *J. Chem. Soc. Faraday Trans. II* **80** 1349
- [23] Choi B H , Tang K T 1975 *J. Chem. Phys.* **63** 1775
- [24] Muckerman J T , Truhlar D G 1979 *Atom-Molecule Collision Theory: A Guide for the Experimentalist* (New York : Plenum) p33
- [25] 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]

The interaction potential of Ne-HF system and close coupling calculations of the scattering cross sections *

Yu Chun-Ri^{1)†} Song Xiao-Shu²⁾ Cheng Xin-Lu³⁾ Yang Xiang-Dong³⁾ Shen Chuan-Sheng¹⁾

1) *School of Physics and Electric Engineering , Anqing Teachers College , Anqing 246133 , China*

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

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

(Received 14 September 2007 ; revised manuscript received 20 November 2007)

Abstract

An analytic expression of the intermolecular interaction potential of the ground state of the Ne-HF system is obtained by nonlinear least square method to fit the intermolecular interaction energies , which have been calculated for the coupled cluster singles and doubles including connected triple excitations level and with the augmented correlation consistent polarized quadruple zeta basis set CCSD (T) aug-cc-pVQZ. Differential and partial cross sections for the Ne-HF scattering are obtained by means of converging close coupling calculations from the fitted *ab initio* CCSD (T) potential. The calculation is performed separately at the incident energies 60 , 75 , 100 and 150 meV. The tendency of the scattering cross sections varying with incident energy and the influence of the state-to-state excitation cross sections on the total inelastic scattering cross section are discussed in detail.

Keywords : interaction potential , scattering cross section , close-coupling calculation , Ne-HF system

PACC : 3440 , 3430 , 3450E

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10676025) and the Doctoral Program Foundation of Institute of Higher Education of China (Grant No. 20050610010).

† E-mail : cryu2@126.com