

# He-HF(DF,TF)碰撞体系分波截面的理论计算\*

汪荣凯<sup>1)†</sup> 余春日<sup>2)</sup> 沈光先<sup>3)‡</sup> 龚伦训<sup>3)‡</sup> 杨向东<sup>5)</sup>

1) 贵州师范大学化学与材料科学学院, 贵阳 550001)

2) 安庆师范学院物理与电气工程学院, 安庆 246133)

3) 贵州师范大学物理与电子科学学院, 贵阳 550001)

4) 贵州师范大学原子与分子物理研究所, 贵阳 550001)

5) 四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065)

(2008 年 7 月 26 日收到, 2008 年 10 月 23 日收到修改稿)

运用质心变换-拟合方法, 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. 完成了入射 He 原子能量从 30 meV 至 120 meV 时, He-HF(DF,TF)碰撞体系分波截面的密耦计算, 获得了分波截面等信息, 进一步讨论了分波截面的变化趋势及特征, 并确定了 He-HF(DF,TF)碰撞体系开始产生弹性和非弹性散射的有效相互作用范围.

关键词: He-HF(DF,TF)复合物, 密耦近似, 分波截面, 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<sup>[1,2]</sup>, 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量是至关重要的. 惰性气体原子与卤化氢分子的相互作用一直是众多实验和理论研究的课题. 由于 HF 是卤化物中最简单的分子, 而且 He-HF 是最具代表性的一个碰撞体系, 所以, 尽管能够获得散射实验数据很少<sup>[3,4]</sup>, 但是理论研究仍然引起了人们的持久兴趣<sup>[5-17]</sup>. 长期以来, 人们注重了 He 原子与 HF 分子相互作用势及散射的理论研究, 而对同位素分子 DF,TF 等的理论研究<sup>[6,7]</sup>却较少.

我们用质心变换-拟合的方法<sup>[18]</sup>构造了 He 原子与同位素分子 HF(DF,TF)在质心坐标系的相互作用各向异性势, 然后采用公认精确度高的密耦近似方法<sup>[19,20]</sup>计算了 He-HF(DF,TF)碰撞体系的积分截面, 计算 He-HF(DF)体系的结果与实验<sup>[4]</sup>和理论研究<sup>[4,6]</sup>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

验和分波截面理论研究的文献报道. 本文对 He-HF(DF,TF)碰撞体系进行了分波截面的理论计算, 描述其变化的规律和特征, 确定了该碰撞体系开始产生弹性和非弹性散射的有效相互作用范围, 为进一步研究 He-HF(DF,TF)同位素体系在碰撞过程中的传能作用等性质<sup>[21]</sup>提供理论依据和参考.

## 2. 计算方法

在 Born-Oppenheimer 近似下, 对原子 A 与双原子分子 BC 的碰撞过程  $A + BC(n_\alpha, j_\alpha) \rightarrow A + BC(n_\beta, j_\beta)$ , 碰撞体系的总波函数  $\psi_\alpha^+(\mathbf{R}, \mathbf{r})$  满足 Schrödinger 方程

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

式中,  $\mathbf{r}$  是双原子分子中两核之间的相对位置矢量,  $\mathbf{R}$  是入射原子 A 相对靶分子 BC 质心的相对位置矢量. 体系的 Hamilton 算符为

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

式中,  $\mu_{A,BC}$  和  $\mu_{BC}$  分别为总体系和双原子分子的约化质量,  $V(\mathbf{R}, \mathbf{r}, \cos\theta)$  是碰撞体系的相互作用势,

\* 国家自然科学基金(批准号: 30574096), 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

$$\cos\theta = \mathbf{R} \cdot \mathbf{r}.$$

根据密耦近似,得到从 $(n_\alpha j_\alpha)$ 态跃迁到 $(n_\beta j_\beta)$ 态的分波截面计算公式为

$$\sigma_{n_\alpha j_\alpha \rightarrow n_\beta j_\beta}^J = \frac{1}{2j_\alpha + 1} \frac{4\pi}{k_\alpha^2} \sum_{l_\beta M_\alpha} (2l_\beta + 1) |T_{n_\beta j_\beta l_\beta, n_\alpha j_\alpha M_\alpha}^J|^2, \quad (3)$$

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, $l$ 表示轨道角动量量子数, $k$ 表示动量, $J$ 表示总角动量量子数, $T_{n_\beta j_\beta l_\beta, n_\alpha j_\alpha M_\alpha}^J$ 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, $\theta'$ 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 $r = 0.09168 \text{ nm}^{[22]}$ 。

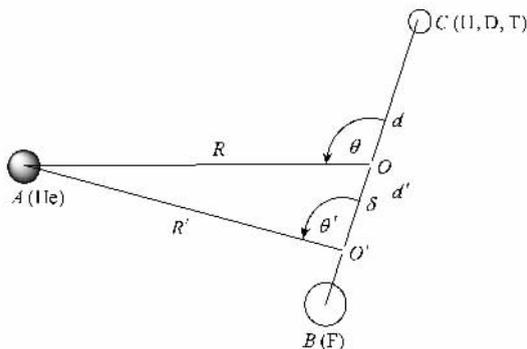


图 1 原子与双原子分子碰撞的质心偏移几何图形

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

$$V(R, r, \theta) = V(R', r', \theta'), \quad (4)$$

在图 1 中,以 C 分别代表 H, T 原子表示质心偏移的几何关系。 $O'$ 点是双原子分子 HF 原质心位置, $d'$ 是 $(\text{H})$ 原子到原质心 $O'$ 点的距离, $O$ 点是双原子分子 TF 新质心位置, $d$ 是 $(\text{T})$ 原子到新质心 $O$ 点的

距离, $\delta = d' - d$ 是质心偏移量.经简单计算得到,DF 和 TF 分子对 HF 分子的质心偏移量 $\delta$ 分别为 0.00417 nm 和 0.00794 nm,质心偏移率 $\frac{\delta}{r}$ 分别为 4.55% 和 8.66%;TF 分子对 DF 分子的质心偏移量 $\delta$ 和质心偏移率 $\frac{\delta}{r}$ 分别为 0.00377 nm 和 4.11%。

我们使用在对称性匹配微扰理论 SAPT (symmetry-adapted perturbation theory)方法下精确计算 He-HF 体系的相互作用能数据<sup>[8]</sup>,运用质心变换-拟合方法构造了 He-HF(DF,TF)体系相互作用的各向异性势解析表达式<sup>[18]</sup>为

$$V(R, r, \theta) = \sum_{\lambda=0}^{10} V_\lambda(R, r) P_\lambda(\cos\theta), \quad (5)$$

式中 $r$ 为常数,径向系数 $V_\lambda(R, r) = V_\lambda(R)$ 是与 $R$ 有关的函数, $P_\lambda(\cos\theta)$ 为 Legendre 函数.径向系数 $V_\lambda(R)$ 用五参数的 Murrell-Sorbie 势能函数<sup>[23]</sup>进行非线性最小二乘法拟合,拟合公式为

$$V(R) = -D_e(1 + a_1\rho + a_2\rho^2 + a_3\rho^3)\exp(-a_1\rho), \quad (6)$$

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。

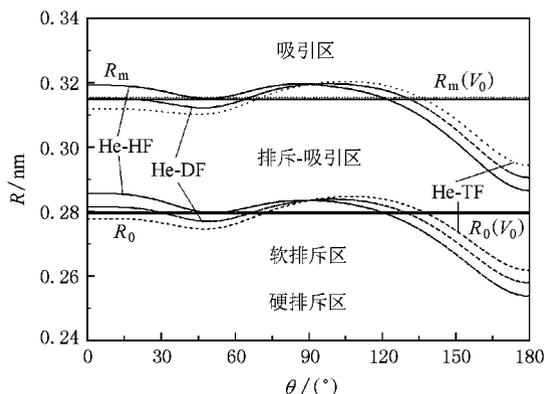


图 2 He-HF(DF,TF)碰撞体系相互作用势特征参数随方位角的变化

在图 2 中,描绘了 He-HF(DF,TF)碰撞体系相互作用各向异性势 $V(R, r, \theta)$ 的势阱位置 $R_m$ 、势能零点位置 $R_0$ 和球平均势 $V_0(R)$ 的势阱位置 $R_m(V_0)$ 、势能零点位置 $R_0(V_0)$ 等特征参数随方位角 $\theta$ 的变化曲线.以各向异性势 $V(R, r, \theta)$ 和球平均势 $V_0(R)$ 的特征参数为参考,可以将 He-HF(DF,TF)碰撞体系的相互作用势大致分为四个区域:吸引区、排斥-吸引区、软排斥区和硬排斥区.当 $R \geq R_m(V_0)$ 时

的区域为吸引区,在吸引区中  $R \geq R_m(V_0)$  的附近,有少部分的排斥-吸引作用区域,仍然为吸引势能作用.当  $R_0(V_0) \leq R < R_m(V_0)$  时的区域为排斥-吸引区,在排斥-吸引区中  $R < R_m(V_0)$  的附近,有少部分的吸引区域,在  $R \geq R_0(V_0)$  的附近,有少部分的排斥作用区域.当  $R_0(\theta = 180^\circ) \leq R < R_0(V_0)$  时的区

域为软排斥区,在软排斥区中  $R < R_0(V_0)$  的附近有少部分的吸引-排斥作用区域.当  $R < R_0(\theta = 180^\circ)$  时的区域为硬排斥区,在该区域中,He-HF(DF,TF)碰撞体系的方位角  $\theta$  从  $0^\circ-180^\circ$  的相互作用势能值均大于零,为排斥势能作用.将 He-HF(DF,TF)碰撞体系相互作用的四个区域的特征参数列于表 1 中.

表 1 He-HF(DF,TF)碰撞体系相互作用区域的特征参数

碰撞体系	吸引区/nm	排斥-吸引区/nm	软排斥区/nm	硬排斥区/nm
He-HF	$R \geq 0.3154$	0.2799—0.3154	0.2538—0.2799	$R < 0.2538$
He-DF	$R \geq 0.3149$	0.2795—0.3149	0.2580—0.2795	$R < 0.2580$
He-TF	$R \geq 0.3147$	0.2794—0.3147	0.2619—0.2794	$R < 0.2619$

### 3.2. 分波截面的计算

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 原子能量从 30 meV 至 120 meV 时分别与基态同位素分子 HF,DF 和 TF 碰撞的弹性分波截面  $\sigma_{n_\alpha=0, j_\alpha=0 \rightarrow n_\beta=0, j_\beta=0}^J$  转动激发态-态分波截面 (rotational-excitation state-to-state partial cross section)  $\sigma_{n_\alpha=0, j_\alpha=0 \rightarrow n_\beta=0, j_\beta \geq 1}^J$ , 非弹性分波截面  $\sigma(\text{IPCS}) = \sum_{j_\beta=1}^{j_\beta \max} \sigma_{n_\alpha=0, j_\alpha=0 \rightarrow n_\beta=0, j_\beta}^J$  和总分波截面  $\sigma(\text{TPCS}) = \sigma(\text{EPCS}) + \sigma(\text{IPCS})$ . 在计算结果中仅列出了当入射 He 原子能量分别为 50 meV, 90 meV 和 120 meV 时,He-HF(DF,TF)碰撞体系分波截面的信息.根据计算结果和分析,进一步讨论了分波截面随量子数  $J$  变化的规律,并结合经典碰撞理论讨论了分波截面等与碰撞参数的对应关系及散射特征.

#### 3.2.1. 分波截面随量子数 $J$ 的变化特征

图 3 是 He-HF(DF,TF)碰撞体系总分波截面随量子数  $J$  的变化曲线.图中曲线  $a, b$  和  $c$  分别表示 He 原子入射能量分别为 50 meV, 90 meV 和 120 meV 时,对应的尾部效应极大值,  $a', b'$  和  $c'$  分别表示在振荡最大值与尾部效应极大值间的极小值.从图 3 中可以看出,在同一入射能量时,He 原子与同位素分子 HF(DF,TF)碰撞的总分波截面随量子数  $J$  的变化曲线基本重合,即在振荡区的各级振荡幅度和尾部效应的分波截面值基本相同,最大偏差仅为  $\pm 0.28 a_0^2$ . 振荡区的极大值和极小值的位置,尾部效应极大值位置和在振荡区的最大值与尾部效应极大

值位置间的极小值位置及收敛分波(取分波截面小于  $10^{-4} a_0^2$  为收敛值)与对应的量子数  $J$  值基本相同.随着入射能量的增加,He-HF(DF,TF)碰撞体系总分波截面的各级振荡极大值和尾部效应极大值逐渐减小,同时,在振荡区的极大值和极小值的位置、尾部效应极大值位置、极小值位置和收敛分波与对应的量子数  $J$  随入射能量的增加而增加.从以上得出,He-HF(DF,TF)碰撞体系的总分波截面随量子数  $J$  的变化具有相同的规律,其中,He-HF 碰撞体系与文献 [16, 17] 的结果是一致的.

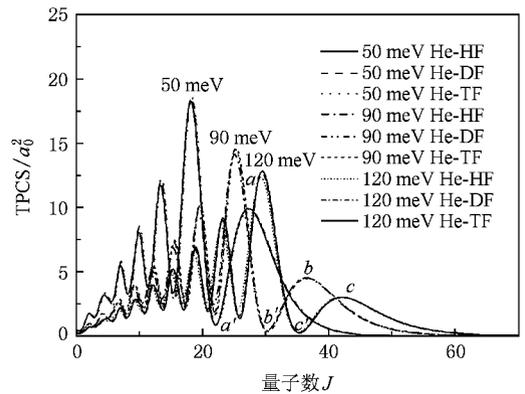


图 3 He-HF(DF,TF)碰撞体系总分波截面随量子数  $J$  的变化

图 4 是 He-HF(DF,TF)碰撞体系非弹性分波截面随量子数  $J$  的变化曲线.从图中可以看出,在同一入射能量时,He 原子与同位素分子 HF(DF,TF)碰撞的非弹性分波截面在振荡区均没有振荡现象,仅有一个分波截面最大值峰和较小的尾部效应.其中,He-HF 碰撞体系有明显较小的尾部效应,而 He-DF 和 He-TF 碰撞体系的尾部效应特征不明显.当入射 He 原子能量分别为 50 meV, 90 meV 和 120 meV 时,He-HF 碰撞体系非弹性分波截面的最大值分别为

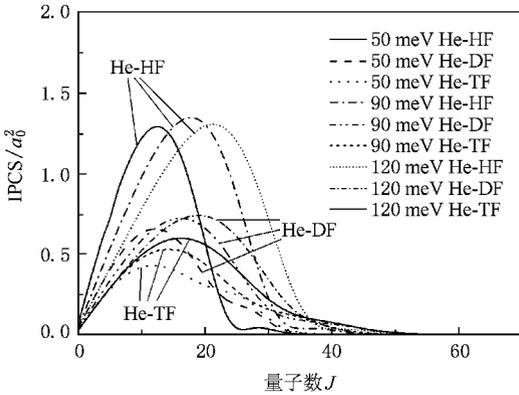


图 4 He-HF(DF,TF)碰撞体系非弹性分波截面随量子数  $J$  的变化

1.290  $a_0^2$ , 1.347  $a_0^2$  和 1.304  $a_0^2$ , He-DF 和 He-TF 碰撞体系非弹性分波截面的最大值分别为 0.656  $a_0^2$ , 0.722  $a_0^2$ , 0.740  $a_0^2$  和 0.429  $a_0^2$ , 0.530  $a_0^2$ , 0.598  $a_0^2$ . 在同一入射能量时, He-HF(DF,TF)碰撞体系非弹性分波截面最大值从大到小的次序是: He-HF > He-DF > He-TF. 计算结果表明, 在入射 He 原子能量较低时, He-HF 碰撞体系的非弹性分波截面最大值随入射能量的增加而增大, 当达到最大时, 随着入射能量的增加, He-HF 碰撞体系的非弹性分波截面最大值有逐渐减小的趋势; 而 He-DF 和 He-TF 碰撞体系的非弹性分波截面最大值随着入射能量的增加而增大.

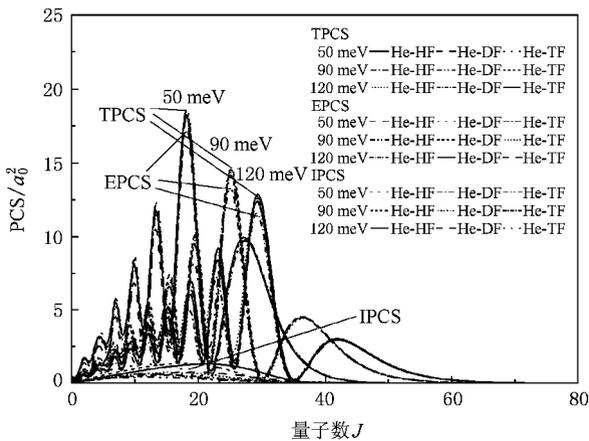


图 5 He-HF(DF,TF)碰撞体系弹性、非弹性和总分波截面随量子数  $J$  的变化

图 5 是 He-HF(DF,TF)碰撞体系弹性、非弹性和总分波截面随量子数  $J$  的变化曲线. 从图中可以看出, 在同一入射能量时, He-HF(DF,TF)碰撞体系非

弹性分波截面对总分波截面的贡献较小, 弹性分波截面对总分波截面的贡献较大, 并与总分波截面随量子数  $J$  的变化具有相同的规律和特征. 碰撞体系主要表现为弹性散射.

### 3.2.2. 分波截面随碰撞参数 $b_l$ 的变化特征

由于 HF(DF,TF)分子散射前处于  $j_a = 0$  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<sup>[24]</sup>:

$$b_l \approx \frac{lh}{P} = \frac{lh}{\sqrt{2\mu E}}, \quad (7)$$

其中,  $\mu$  是 He-HF(DF,TF)体系的约化质量,  $E$  是碰撞能量. 由此可以得到总角动量子数  $J$ , 分波截面的位置及相互作用势与碰撞参数  $b_l$  的对应关系.

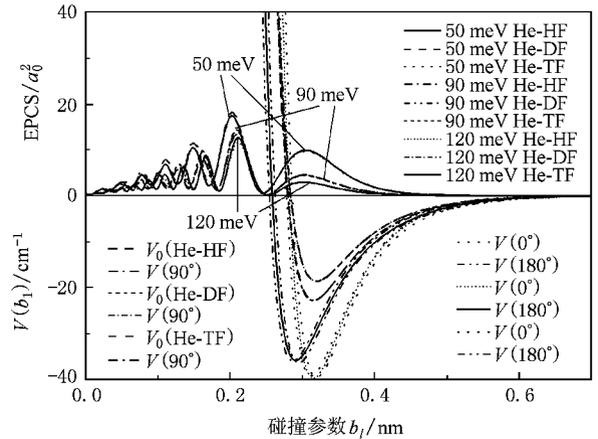


图 6 He-HF(DF,TF)碰撞体系弹性分波截面和相互作用势随碰撞参数  $b_l$  的变化

图 6 是 He-HF(DF,TF)碰撞体系的弹性分波截面和相互作用势随碰撞参数  $b_l$  的变化曲线, 并将弹性分波截面的最大值、极小值、尾部效应极大值和收敛分波与对应的量子数  $J$  值及碰撞参数  $b_l$  的比较列于表 2 中.

从图 6 和表 2 中可以看出, He-HF(DF,TF)碰撞体系的弹性分波截面在振荡部分的各级极大值和极小值位置都对应于较小的碰撞参数, 均在硬排斥区, 这是由硬排斥势产生有规律性的振荡散射. 弹性分波截面的尾部效应极大值对应的碰撞参数均处于排斥-吸引区, 其尾部效应的范围是从分波截面极小值至收敛分波, 对应的碰撞参数平均值的范围分别是 He-HF 碰撞体系为 0.2498—0.6195 nm, He-DF 碰撞体系为 0.2488—0.6171 nm, He-TF 碰撞体系为

表 2 He-HF(DF,TF)碰撞体系弹性分波截面的最大值、极小值、尾部效应极大值和收敛分波与对应的量子数  $J$  及碰撞参数  $b_l$  的比较

碰撞体系	50 meV			90 meV			120 meV		
	$J$	$b_l/\text{nm}$	$\text{EPCS}/a_0^2$	$J$	$b_l/\text{nm}$	$\text{EPCS}/a_0^2$	$J$	$b_l/\text{nm}$	$\text{EPCS}/a_0^2$
最大值									
He-HF	18	0.2015	18.840	25	0.2086	14.000	29	0.2096	11.990
He-DF	18	0.2007	19.540	25	0.2078	14.860	29	0.2087	12.770
He-TF	18	0.2000	19.600	25	0.2070	15.020	29	0.2080	12.880
极小值									
He-HF	22	0.2463	0.024	30	0.2503	0.003	35	0.2529	0.003
He-DF	22	0.2453	0.004	30	0.2493	0.014	35	0.2519	0.003
He-TF	22	0.2444	0.009	30	0.2484	0.044	35	0.2510	0.016
尾部极大									
He-HF	27	0.3023	10.000	36	0.3004	4.498	42	0.3035	3.008
He-DF	27	0.3011	9.889	36	0.2992	4.447	42	0.3023	2.986
He-TF	27	0.3000	9.745	36	0.2981	4.392	42	0.3012	2.961
收敛分波									
He-HF	56	0.6269		74	0.6175		85	0.6142	
He-DF	56	0.6244		74	0.6150		85	0.6118	
He-TF	56	0.6221		74	0.6128		85	0.6096	

0.2479—0.6148 nm. 为研究相互作用势区域对产生尾部效应的作用机理,定义相互作用势区域对产生尾部效应贡献的相对强度  $I$  为

$$I = \frac{\int_a^b \sigma_{b_l} db_l}{\int_A^B \sigma_{b_l} db_l}, \quad (8)$$

(8) 式中  $\sigma_{b_l}$  为对应碰撞参数  $b_l$  的分波截面值;  $A, B$  分别为分波截面极小值和收敛分波对应的碰撞参数  $b_l$ ;  $a, b$  分别为产生尾部效应的相互作用势区域对应的碰撞参数  $b_l$ . 经数值积分得出相互作用势的吸引区、排斥-吸引区、软排斥区和硬排斥区对产生弹性分波截面尾部效应贡献的相对强度  $I$  平均值分别为 53.4%, 35.9%, 10.5% 和 0.2%. 计算结果表明相互作用势产生弹性分波截面的尾部效应主要在吸引区和排斥-吸引区,可以说明,弹性分波截面的尾部效应主要是由相互作用势的吸引作用产生的散射现象.

当入射 He 原子能量分别为 50 meV, 90 meV 和 120 meV 时, He-HF(DF,TF)碰撞体系的弹性收敛分波对应的碰撞参数平均值分别为 0.6195 nm, 0.6171 nm 和 0.6148 nm, 此时 He-HF(DF,TF)碰撞体系相互作用的各向异性势  $V(R, r, \theta)$  和球平均势  $V_0(R)$  的势能值平均分别约为  $-0.33 \text{ cm}^{-1} (\theta = 0^\circ)$ ,  $-0.31$

$\text{cm}^{-1} (\theta = 90^\circ)$ ,  $-0.42 \text{ cm}^{-1} (\theta = 180^\circ)$  和  $-0.33 \text{ cm}^{-1}$ , 仅是各向异性势  $V(R, r, \theta)$  和球平均势  $V_0(R)$  势阱深度的百分比分别约为 0.88% ( $\theta = 0^\circ$ ), 1.66% ( $\theta = 90^\circ$ ), 1.16% ( $\theta = 180^\circ$ ) 和 1.43%. 因此, 可以认为弹性收敛分波对应的碰撞参数  $b_l$ , 即为  $R$  值, 分别是 He-HF(DF,TF)碰撞体系开始产生弹性散射时有效的相互作用范围, 其大小的顺序是 He-HF > He-DF > He-TF. 从表 2 中还可以看出, 在同一入射能量时随着氢同位素原子质量增加, HF(DF,TF)分子质心向分子的键中心方向移动, He-HF(DF,TF)碰撞体系弹性分波截面的最大值、极小值、尾部效应极大值和收敛分波所对应的碰撞参数逐渐减小. 因此, 由于质心偏移, He 原子与 HF(DF,TF)分子碰撞发生弹性散射的有效相互作用范围依次逐渐减小.

当入射 He 原子能量为 120 meV 时, He-HF, He-DF 和 He-TF 碰撞体系可产生从基态跃迁的转动激发态-态分波截面数分别为 6, 8 和 10. 以下我们仅讨论前三个分波截面值较大的转动激发态-态分波截面, 即分别为  $j_\alpha = 0 \rightarrow j_\beta = 1$ ,  $j_\alpha = 0 \rightarrow j_\beta = 2$  和  $j_\alpha = 0 \rightarrow j_\beta = 3$  跃迁的转动激发态-态分波截面随碰撞参数  $b_l$  的变化.

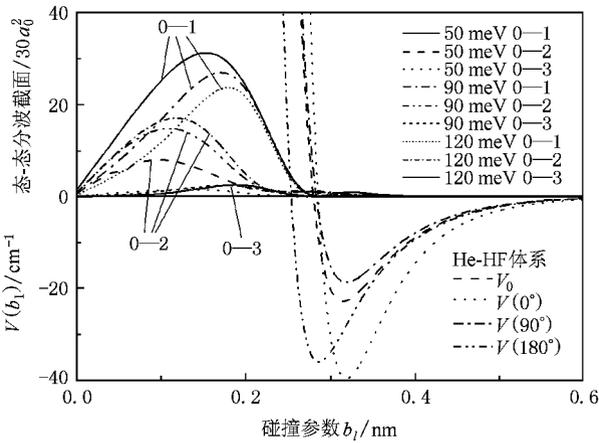


图7 He-HF碰撞体系的转动激发态-态分波截面和相互作用势随碰撞参数  $b_l$  的变化

图7是He-HF碰撞体系的转动激发态-态分波截面和相互作用势随碰撞参数  $b_l$  的变化曲线.从图7中可以看出,He-HF碰撞体系的转动激发态-态分波截面最大值对应的碰撞参数均处在硬排斥区,是由硬排斥势产生的散射,而在排斥-吸引区和吸引区有相对较小的尾部效应.在同一入射能量时,He-HF碰撞体系的转动激发态-态分波截面最大值  $\sigma_{\max}$  从大到小的次序是  $\sigma_{\max}(j_a=0 \rightarrow j_\beta=1) > \sigma_{\max}(j_a=0 \rightarrow j_\beta=2) > \sigma_{\max}(j_a=0 \rightarrow j_\beta=3)$ .随着入射能量的增加,He-HF碰撞体系  $j_a=0 \rightarrow j_\beta=1$  跃迁的转动激发态-态分波截面最大值逐渐减小,对应的碰撞参数向增大的方向移动,而  $j_a=0 \rightarrow j_\beta=2$  和  $j_a=0 \rightarrow j_\beta=3$  跃迁的转动激发态-态分波截面最大值逐渐增加,对应的碰撞参数也向增大的方向移动.在He-HF碰撞体系的转动激发态-态分波截面中  $j_a=0 \rightarrow j_\beta=1$  跃迁的转动激发态-态分波截面为主要的贡献.

图8是He-DF碰撞体系的转动激发态-态分波截面和相互作用势随碰撞参数  $b_l$  的变化曲线.从图8中可以看出,He-DF碰撞体系  $j_a=0 \rightarrow j_\beta=1$  和  $j_a=0 \rightarrow j_\beta=3$  跃迁的转动激发态-态分波截面最大值对应的碰撞参数均在硬排斥区,是由硬排斥势产生的散射,而在相互作用势的排斥-吸引区和吸引区有较小的尾部效应.但是  $j_a=0 \rightarrow j_\beta=2$  跃迁的转动激发态-态分波截面在硬排斥区有一个极大值峰,还在软排斥区( $b_l \approx 0.2743$  nm)有一个明显的尾部效应极大值.随着入射能量的增加,He-DF碰撞体系的  $j_a=0 \rightarrow j_\beta=1$  跃迁的转动激发态-态分波截面的最大值逐渐减小,  $j_a=0 \rightarrow j_\beta=3$  跃迁的转动激发态-态分波

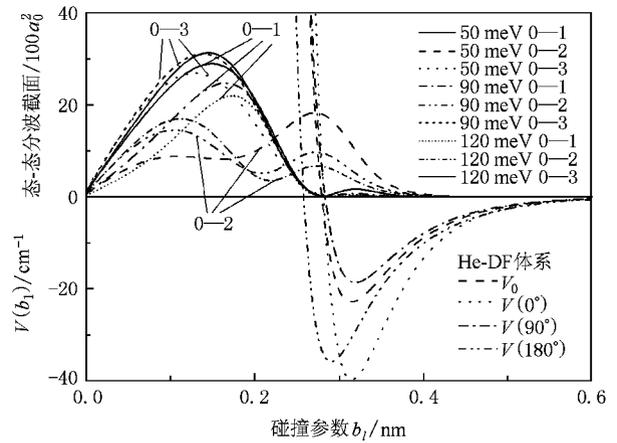


图8 He-DF碰撞体系的转动激发态-态分波截面和相互作用势随碰撞参数  $b_l$  的变化

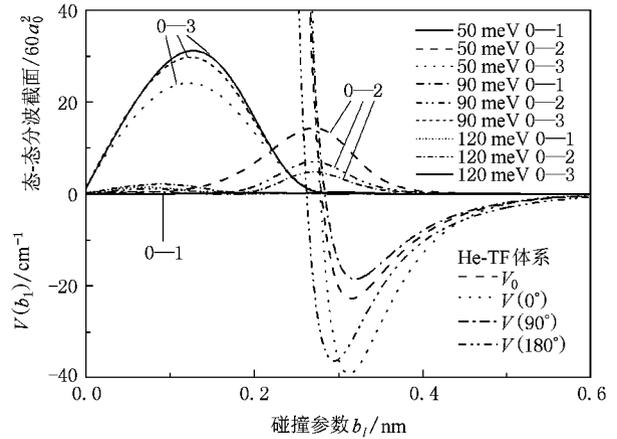


图9 He-TF碰撞体系的转动激发态-态分波截面和相互作用势随碰撞参数  $b_l$  的变化

截面的最大值逐渐增大,对应的碰撞参数均向增大的方向移动,而  $j_a=0 \rightarrow j_\beta=2$  跃迁的转动激发态-态分波截面,在硬排斥区的极大值随着入射能量的增加而增加,在软排斥区的尾部效应极大值随着入射能量的增加而减小.

图9是He-TF碰撞体系的转动激发态-态分波截面和相互作用势随碰撞参数  $b_l$  的变化曲线.从图9中可以看出,He-TF碰撞体系  $j_a=0 \rightarrow j_\beta=1$  和  $j_a=0 \rightarrow j_\beta=3$  跃迁的转动激发态-态分波截面最大值对应的碰撞参数均在硬排斥区,并且  $j_a=0 \rightarrow j_\beta=1$  跃迁的转动激发态-态分波截面最大值较小,其尾部效应均不明显.而  $j_a=0 \rightarrow j_\beta=2$  跃迁的转动激发态-态分波截面在硬排斥区的极大值不明显,但在软排斥区( $b_l \approx 0.2733$  nm)有一个较大的尾部效应极大值.

随着入射能量的增加, He-TF 碰撞体系  $j_\alpha = 0 \rightarrow j_\beta = 3$  跃迁的转动激发态-态分波截面的最大值逐渐增加, 对应的碰撞参数向增大的方向移动;  $j_\alpha = 0 \rightarrow j_\beta = 1$  跃迁的转动激发态-态分波截面的最大值随入射能量的增加变化不明显. 而  $j_\alpha = 0 \rightarrow j_\beta = 2$  转动激发态-态分波截面在软排斥区的尾部效应极大值随着入射能量的增加而减小. 在 He-TF 碰撞体系的转动激发态-态分波截面中  $j_\alpha = 0 \rightarrow j_\beta = 3$  跃迁的转动激发态-态分波截面为主要的贡献.

图 10 是 He-HK(DF,TF)碰撞体系的总分波截面和相互作用势随碰撞参数  $b_l$  的变化曲线, 并将总分波截面的最大值、极小值、尾部效应极大值和收敛分波与对应的量子数  $J$  值及碰撞参数  $b_l$  的比较列于表 3 中.

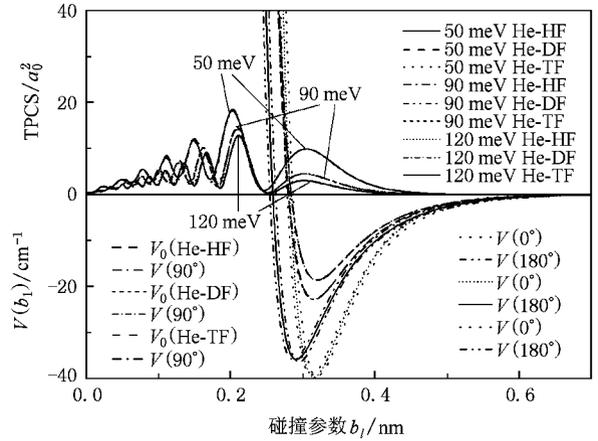


图 10 He-HK(DF,TF)碰撞体系总分波截面和相互作用势随碰撞参数  $b_l$  的变化

表 3 He-HK(DF,TF)碰撞体系总分波截面的最大值、极小值、尾部效应极大值和收敛分波与对应的量子数  $J$  及碰撞参数  $b_l$  的比较

碰撞体系	50 meV			90 meV			120 meV		
	$J$	$b_l/nm$	$TPCS/a_0^2$	$J$	$b_l/nm$	$TPCS/a_0^2$	$J$	$b_l/nm$	$TPCS/a_0^2$
<b>最大值</b>									
He-HF	18	0.2015	19.728	25	0.2086	14.865	29	0.2096	12.832
He-DF	18	0.2007	20.015	25	0.2078	15.279	29	0.2087	13.171
He-TF	18	0.2000	19.942	25	0.2070	15.292	29	0.2080	13.133
<b>极小值</b>									
He-HF	22	0.2463	0.292	30	0.2503	0.229	35	0.2529	0.183
He-DF	22	0.2453	0.266	30	0.2493	0.180	35	0.2519	0.125
He-TF	22	0.2444	0.287	30	0.2484	0.201	35	0.2510	0.130
<b>尾部极大</b>									
He-HF	27	0.3023	10.036	36	0.3004	4.537	42	0.3035	3.042
He-DF	27	0.3011	10.050	36	0.2992	4.531	42	0.3023	3.042
He-TF	27	0.3000	9.950	36	0.2981	4.488	42	0.3012	3.022
<b>收敛分波</b>									
He-HF	56	0.6269		74	0.6175		85	0.6142	
He-DF	56	0.6244		74	0.6150		85	0.6118	
He-TF	56	0.6221		74	0.6128		85	0.6096	

将表 2 和表 3 进行比较, 可以看出, 弹性分波截面和总分波截面的最大值、极小值、尾部效应极大值和收敛分波与对应的量子数  $J$  值及碰撞参数  $b_l$  相比, 均有相同的数值, 只是在表中相对应的分波截面值不同. 将图 6 和图 10 进行对比, 弹性分波截面和

总分波截面及相互作用势随碰撞参数  $b_l$  的变化曲线具有相同的变化规律和特征.

图 11 是 He-HK(DF,TF)碰撞体系的非弹性分波截面和相互作用势随碰撞参数  $b_l$  的变化曲线, 并将非弹性分波截面的最大值、收敛分波与量子数  $J$  及

对应碰撞参数  $b_l$  的比较列于表 4 中。

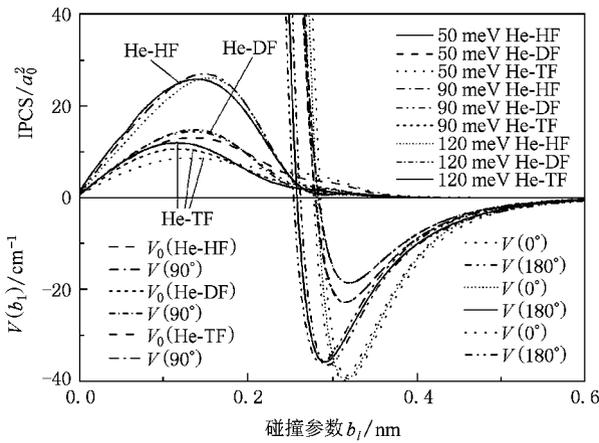


图 11 He-HF(DF,TF)碰撞体系非弹性分波截面和相互作用势随碰撞参数  $b_l$  的变化

表 4 He-HF(DF,TF)碰撞体系非弹性分波截面的最大值、收敛分波与量子数  $J$  及对应碰撞参数  $b_l$  的比较

碰撞体系	50 meV			90 meV			120 meV		
	$J$	$b_l/nm$	$IPCS/a_0^2$	$J$	$b_l/nm$	$IPCS/a_0^2$	$J$	$b_l/nm$	$IPCS/a_0^2$
最大值									
He-HF	12	0.1343	1.290	18	0.1502	1.347	21	0.1518	1.304
He-DF	12	0.1338	0.656	16	0.1330	0.722	19	0.1368	0.740
He-TF	12	0.1333	0.429	14	0.1159	0.530	16	0.1147	0.598
收敛分波									
He-HF	43	0.4814		59	0.4923		69	0.4986	
He-DF	49	0.5464		64	0.5319		73	0.5254	
He-TF	53	0.5888		74	0.5796		80	0.5737	

## 4. 结 论

运用质心变换-拟合方法构造的 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,计算了 He-HF(DF,TF)碰撞体系的分波截面,并进行分析后得到如下结果:

1. 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,同时,DF和TF分子相对于HF分子的质心偏移量较小,在总体上基本不改变碰撞体系的总分波截面。He-HF(DF,TF)碰撞体系的总分波截面随总角动量子数  $J$  的变化具有相同的规律。随着入射能量的增加,总分波截面的各级振荡极大值和尾部效应极大值均逐渐减小,并所需收敛的分波数逐渐增多。

从图 11 和表 4 中可以看出,He-HF(DF,TF)碰撞体系的非弹性分波截面最大值均处于硬排斥区,在软排斥区至吸引区有较小的尾部效应。在同一入射能量时,He-HF,He-DF,He-TF 碰撞体系的非弹性分波截面最大值对应的碰撞参数依次减小;随着入射能量的增加,He-HF 碰撞体系非弹性分波截面最大值对应的碰撞参数逐渐增大,He-DF 碰撞体系非弹性分波截面最大值对应的碰撞参数  $b_l$  变化不大,而 He-TF 碰撞体系非弹性分波截面最大值对应的碰撞参数逐渐减小。同时,He-HF,He-DF,He-TF 碰撞体系的非弹性收敛分波对应的碰撞参数平均值分别为 0.4908 nm,0.5346 nm 和 0.5807 nm,可以认为非弹性收敛分波对应的碰撞参数  $b_l$ ,即为  $R$  值,分别是 He-HF(DF,TF)碰撞体系开始产生非弹性散射时有效的相互作用范围,其大小的顺序是 He-TF > He-DF > He-HF。

2. 弹性和总分波截面的各级振荡极大值所对应的碰撞参数,均处于 He-HF(DF,TF)碰撞体系相互作用势的硬排斥区,是硬排斥势作用产生有规律性的振荡散射,尾部效应极大值对应的碰撞参数均处于排斥-吸引区,尾部效应主要是由相互作用势的吸引作用区域产生的散射现象。

3. 非弹性分波截面最大值所对应的碰撞参数,同样均处于 He-HF(DF,TF)碰撞体系相互作用势的硬排斥区,也是硬排斥势作用产生的散射,其中 He-HF(DF,TF)碰撞体系的  $j_\alpha = 0 \rightarrow j_\beta = 2$  转动激发态-态分波截面对非弹性分波截面的尾部效应具有重要的贡献。

4. He-HF(DF,TF)碰撞体系开始产生弹性散射时有效的相互作用范围,其大小的顺序是 He-HF > He-DF > He-TF,开始产生非弹性散射时有效的相互

作用范围,其大小的顺序是 He-TF > He-DF > He-HF.

- [ 1 ] Ovchinnikova M Y 1985 *Chem. Phys.* **93** 101
- [ 2 ] Smith M J , Rabitz H 1991 *Chem. Phys.* **150** 361
- [ 3 ] Boughton C V , Miller R E , Vohralik P F , Watts R O 1986 *Mol. Phys.* **58** 827
- [ 4 ] Chapman W B , Nesbitt D J , Weida M J 1997 *J. Chem. Phys.* **106** 2248
- [ 5 ] Collins L A , Lane N F 1975 *Phys. Rev. A* **12** 811
- [ 6 ] Collins L A , Lane N F 1976 *Phys. Rev. A* **14** 1358
- [ 7 ] Battaglia F , Gianturco F A , Palma A 1984 *J. Chem. Phys.* **80** 4997
- [ 8 ] Moszynski R , Wormer P E S , Jeziorski B , van der Avoird A 1994 *J. Chem. Phys.* **101** 2811
- [ 9 ] Moszynski R , de Weerd F , Groenenboom G C , van der Avoird A 1996 *Chem. Phys. Lett.* **263** 107
- [ 10 ] 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 ]
- [ 11 ] 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 ]
- [ 12 ] Sun G H , Yang X D , Zhu J , Wang C X 2002 *Chin. Phys.* **11** 910
- [ 13 ] Stoecklin T , Voronin A , Rayez J C 2003 *Chem. Phys.* **294** 117
- [ 14 ] Fajin J L C , Fernandez B , Mikoszz A , Farrelly D 2006 *Mol. Phys.* **104** 1413
- [ 15 ] 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 ]
- [ 16 ] 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 ]
- [ 17 ] 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 ]
- [ 18 ] 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 ]
- [ 19 ] Choi B H , Tang K T 1975 *J. Chem. Phys.* **63** 1775
- [ 20 ] 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) ]
- [ 21 ] Beneventi L , Casavecchia P , Volpi G G , Wong C C K , McCourt F R W , Corey G C , Lemoine D 1991 *J. Chem. Phys.* **95** 5827
- [ 22 ] Huber K P , Herzberg G 1979 *Molecular Spectra and Molecular Structure IV. Constant of Diatomic Molecules.* ( New York : Van Nostrand Reinhold Company ) p304
- [ 23 ] 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)第 109 页 ]
- [ 24 ] Bransden B H 1983 *Atomic Collision Theory* ( Benjamin : Cummings Publishing Company ) p12

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

Wang Rong-Kai<sup>1)4)</sup> Yu Chun-Ri<sup>2)</sup> Shen Guang-Xian<sup>3)4)5)</sup> Gong Lun-Xun<sup>3)4)</sup> Yang Xiang-Dong<sup>5)†</sup>

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

2) *School of Physics & Electric Engineering , Anqing Teachers College , Anqing 246133 ,China )*

3) *School of Physics and Electronic Science , Guizhou Normal University , Guiyang 550001 , China )*

4) *Institute of Atomic and Molecular Physics , Guizhou Normal University , Guiyang 550001 , China )*

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

( Received 26 July 2008 ; revised manuscript received 23 October 2008 )

## Abstract

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. The close coupling calculation of the partial cross sections for collision of He with HF( DF ,TF ) is performed by employing the fitted interaction potential. This calculation is performed for incident energies from 30 meV to 120 meV , and the information of the elastic , inelastic and total partial cross sections has been obtained. Further , the change tendency and character of the partial cross sections are discussed , and the ranges of effective interaction of the beginning of elastic and inelastic scattering have been determined for He-HF( DF ,TF ) collision system.

**Keywords :** He-HF( DF ,TF ) complexes , close coupling approximation , partial 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