

## Ne 原子与 HF 分子碰撞振转激发分波截面的研究\*

徐梅<sup>1)</sup> 王晓璐<sup>1)</sup> 令狐荣锋<sup>2)†</sup> 杨向东<sup>3)</sup>

1) (贵州师范大学物理与电子科学学院, 贵阳 550001)

2) (贵州师范学院物理与电子科学学院, 贵阳 550018)

3) (四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065)

(2012 年 3 月 18 日收到; 2012 年 11 月 8 日收到修改稿)

采用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, 以及 aug-cc-pVTZ 基组对 Ne-HF 分子间相互作用势进行了计算, 并考虑了 Boys 和 Bernardi 提出的均衡法, 在计算的基础上消除基组重叠误差. 计算得到了 11 个方向的 Ne-HF 碰撞系统的相互作用势能点数据, 使用 Huxley 势函数对数据点进行非线性最小二乘法拟合, 计算了各向异性势的径向系数  $V_0, V_1, V_2, V_3$  等, 其函数形式能够很好地描述 Ne 原子与 HF 分子碰撞系统的势能面; 采用密耦近似计算得到了 Ne 原子与 HF 分子碰撞系统不同能量下的总截面、弹性分波截面和非弹性分波截面.

关键词: He-HF, 碰撞, 相互作用势, 密耦近似

PACS: 31.15.ac, 34.20.-b, 34.80.Bm, 34.50.-s

DOI: 10.7498/aps.62.063102

## 1 引言

原子与分子的碰撞过程和相互作用, 是原子与分子物理学中非常重要的研究内容. 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的作用, 在开拓高新技术产业、推动科技发展等方面有着不可忽视的重要地位. 原子与分子相互作用势在理论计算中非常重要, 因为一旦确定了精确势能面, 原则上所有可观测的物理量均可计算. 因此许多实验和理论工作者都致力于原子与分子系统相互作用势能面的研究, 这方面的工作一直在不断地创新和发展<sup>[1-10]</sup>. 例如, HF 分子泛频激光具有较好的大气传输性能和高亮度特征<sup>[11,12]</sup>, 因而成为强激光体系的重要候选对象; 而稀有气体对 HF 分子具有弛豫作用<sup>[13-15]</sup>, 在改善 HF 激光的大气传输性能方面有着广泛用途; 另外用 HF 的水溶液氢氟酸生产的氟化盐被广泛地应用于食品保护、特种金属冶炼、皮革和纺织品处理、标本保存以

及核工业等行业. 但是 HF 是一种不好打交道的化学试剂, 它的强腐蚀性对实验设备损害非常严重, 因此从理论上研究稀有气体 Ne-HF 的振转非弹性碰撞激发过程有着重要的意义.

本文采用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, 在 aug-cc-pVTZ 基组水平上对 Ne 与 HF 分子间的相互作用势进行了计算. 并考虑了 Boys 和 Bernardi 提出的均衡法 (counterpoise method, CM) 在计算的基础上消除基组重叠误差 (BSSE). 计算得到了 Ne 原子与 HF 分子碰撞系统的相互作用势在  $0^\circ, 20^\circ, 40^\circ, 60^\circ, 80^\circ, 90^\circ, 100^\circ, 120^\circ, 140^\circ, 160^\circ, 180^\circ$  共 11 个方向上, 步长取  $0.01 \text{ \AA}$ , 在  $2.0-10.0 \text{ \AA}$  范围内的 891 个势能点数据. 接着在 Legendre 多项式里展开势能表面, 进行矩阵变换, 使用 Huxley 势函数对数据点进行非线性最小二乘法拟合, 计算了各向异性势的径向系数  $V_0, V_1, V_2, V_3$  等, 其函数形式能够很好地描述 Ne 原子与 HF 分子碰撞系统的势能面. 在此基础上, 采用密耦近似计算得到了 Ne 原子与 HF 分子碰撞系统不同能量下的总截面、弹性分波截面、非弹性

\* 国家自然科学基金 (批准号: 10964002)、贵州省科学技术基金 (批准号: 黔科合 J 字 [2009]2066 号和黔科合 J 字 LKS[2009]07) 和贵州省高层次人才科研条件特助项目 (批准号: TZJF-2008 年 -42 号) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: linghu@gznu.edu.cn

分波截面.

## 2 研究的主要理论和方法

原子和双原子分子碰撞的转动激发问题可以建立这样的物理模型: 一个质点与一个转动振子的散射根据波恩近似, 假定电子运动分离出来, 忽略电子角动量对总角动量的贡献, 则原子 Ne 和双原子分子 HF 碰撞系统的总波函数  $\psi_\alpha^{(+)}(\mathbf{R}, \mathbf{r})$  由薛定谔方程给出:

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

式中,  $E$  表示碰撞系统的总能量,  $\mathbf{R}$  表示入射原子 Ne 与靶分子 HF 质心的相对距离,  $\mathbf{r}$  表示分子的核间距离, (+) 表示外向边界条件,  $\alpha$  表示一组完整的入射通道量子数. 系统的总哈密顿为

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

如图 1 所示, 式中,  $\cos\theta = \mathbf{R} \cdot \mathbf{r}$ ,  $\mu_{\text{Ne,HF}}$  表示系统的总约化质量,  $\mu_{\text{HF}}$  表示 HF 分子的约化质量,  $V(\mathbf{R}, \mathbf{r}, \cos\theta)$  是碰撞系统的相互作用势.

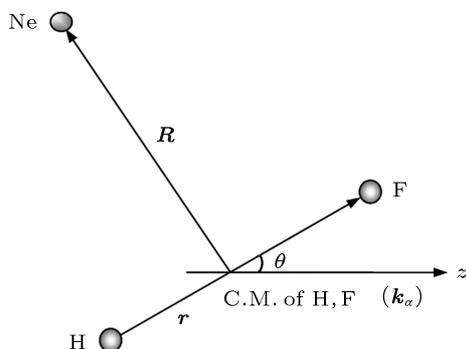


图 1 Ne 原子与 HF 分子碰撞的几何图形

总波函数可以写成

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

式中  $\alpha$  为入射通道,  $\gamma$  为  $\gamma$  通道相应的量子数,  $k_{n_\alpha J_\alpha}$  可以简写为  $k_\alpha$ ,  $\phi(r)$  为双原子分子振转波函数的径向部分,  $g(\mathbf{R})$  为原子相对分子质心运动的径向波函数,  $Y(\mathbf{R}, \mathbf{r})$  为原子围绕分子转动和靶分子中原子转动的总角函数,  $n$  为振动量子数,  $J$  为系统的总角动量,  $l_\gamma$  表示  $\gamma$  通道中原子绕分子转动的量子数,  $J_\gamma$  为  $\gamma$  通道中靶分子转动的量子数.

## 3 Ne 与 HF 分子间的相互作用势研究

### 3.1 HF 分子的振转能级

根据波恩近似, 可将分子的几种主要运动状态同一定的能量相互联系起来, 分子的总能量则由对应的质心平动能  $E$ , 电子能  $E_e$ , 振动能  $E_v$  和转动能  $E_r$  共同求和得到, 即

$$E_{\text{total}} = E + E_e + E_v + E_r, \quad (4)$$

式中, 质心平动能  $E$  的改变不会引起分子内部状态的变化, 而另外三项  $E_e$ ,  $E_v$ ,  $E_r$  的能量大小有:  $E_e \sim 10^2 E_v$ ,  $E_v \sim 10^2 E_r$ , 所以在考虑的碰撞能量下, 通常不会涉及到电子状态的变化情况, 仅可能产生振转激发. 根据经过微扰理论验证的 Herzberg 的振转能级规律表达式<sup>[16]</sup>, 双原子分子的振动光谱项为

$$G(v) = \omega_e \left( v + \frac{1}{2} \right) - \omega_e x_e \left( v + \frac{1}{2} \right)^2 + \omega_e y_e \left( v + \frac{1}{2} \right)^3 + \dots, \quad (5)$$

双原子分子的转动光谱项为

$$F(J) = B_e J(J+1) - D_e J^2(J+1)^2 + H_v J^3(J+1)^3 + \dots, \quad (6)$$

考虑振动和转动的相互作用, 则分子的振转能级函数为

$$E(v, J) = G(v) + F(J). \quad (7)$$

在忽略高阶项的情况下, 双原子分子的振转能级可近似表示为

$$E(v, J) = \omega_e \left( v + \frac{1}{2} \right) - \omega_e x_e \left( v + \frac{1}{2} \right)^2 + B_e J(J+1) - D_e J^2(J+1)^2 - \alpha_e J(J+1)(v+1) + \dots, \quad (8)$$

式中,  $\omega_e$  表示谐振频率,  $\omega_e x_e$  表示非谐振频率,  $B_e$  表示刚性转动常数,  $D_e$  表示转动离心常数,  $\alpha_e$  表示非刚性转动常数,  $v$  表示振动量子数,  $J$  表示转动量子数.

双原子分子 HF 的光谱常数如表 1 所示<sup>[17]</sup>.

表 1 HF 分子的光谱常数 (单位:  $\text{cm}^{-1}$ )

$\omega_e$	$\omega_e x_e$	$B_e$	$\alpha_e$	$D_e/10^{-4}$	$r_e/\text{\AA}$	$D_0^0/\text{eV}$
4138.32	89.88	20.9557	0.798	21.51	0.916808	5.869

当  $v = 0, J = 0$  时, 双原子分子处于振转基态 ( $X^1\Sigma^+$ ) 的能量为

$$E(0,0) = \frac{1}{2}\omega_e - \frac{1}{4}\omega_e\chi_e. \quad (9)$$

从  $(v, J) \rightarrow (0, 0)$  的激发能为

$$\begin{aligned} \Delta E = E(v, J) - E(0, 0) \\ = \omega_e v - \omega_e\chi_e(v^2 + v) + B_e J(J+1) - D_e J^2(J+1)^2 \\ - \alpha_e J(J+1)\left(v + \frac{1}{2}\right). \end{aligned} \quad (10)$$

根据表 1 和方程 (10) 式, 即可计算得到 HF 分子的振转能级的差值, 如表 2 所示.

表 2 HF 分子振转能级值 (单位: eV)

$v$	$J$	$E(v, J) - E(0, 0)$	$v$	$J$	$E(v, J) - E(0, 0)$
0	0	0	1	8	0.665804921617
0	1	0.005096386213	1	9	0.709123400759
0	2	0.015282758028	1	10	0.757052358210
0	3	0.030546314221	1	11	0.809527787852
0	4	0.050867852957	1	12	0.866479282956
0	5	0.076221771788	1	13	0.927830036180
0	6	0.106576067656	1	14	0.993496839570
0	7	0.141892336890	2	0	0.959318100791
0	8	0.182125775207	2	1	0.964018726257
0	9	0.227225177713	2	2	0.973413576577
0	10	0.277132938901	2	3	0.987489850527
0	11	0.331785052655	2	4	1.006228346273
0	12	0.391111112244	2	5	1.029603461366
0	13	0.455034310327	2	6	1.057583192749
0	14	0.523471438951	2	7	1.090129136750
1	0	0.490802839866	2	8	1.127196489086
1	1	0.495701345706	2	9	1.168734044864
1	2	0.505491956773	2	10	1.214684198577
1	3	0.520161871845	2	11	1.264982944108
1	4	0.539691889086	2	12	1.319559874726
1	5	0.564056406048	2	13	1.378338183091
1	6	0.593223419673	2	14	1.441234661248
1	7	0.627154526290	3	0	1.405545782775

### 3.2 HF 的势能函数

采用 Murrell-Sorbie<sup>[18]</sup> 函数, 对 Rydberg<sup>[19]</sup> 提出的势能函数

$$V(R) = -D'_e(1 + a\rho)\exp(-a\rho) \quad (11)$$

经过修正, 得到函数:

$$V = -D'_e(1 + a_1\rho + a_2\rho^2 + a_3\rho^3)\exp(-a_1\rho), \quad (12)$$

其中参量  $a_1, a_2$  和  $a_3$  可由下列公式确定:

$$f_2 = 4\pi^2\mu\omega_e^2c^2, \quad (13)$$

$$f_3 = -\frac{3f_2}{R_e}\left(1 + \frac{\alpha_e\omega_e}{6B_e^2}\right), \quad (14)$$

$$f_4 = \frac{f_2}{R_e^2}\left[15\left(1 + \frac{\alpha_e\omega_e}{6B_e^2}\right)^2 - \frac{8\omega_e\chi_e}{B_e}\right], \quad (15)$$

$$D'_e a_1^4 - 6f_2 a_1^2 - 4f_3 a_1 - f_4 = 0, \quad (16)$$

$$a_2 = \frac{1}{2}\left(a_1^2 - \frac{f_2}{D'_e}\right), \quad (17)$$

$$a_3 = a_1 a_2 - \frac{1}{3}a_1^3 - \frac{f_3}{6D'_e}, \quad (18)$$

式中  $\mu$  为双原子分子的约化质量,  $c$  是光速,  $\omega_e, \omega_e\chi_e, B_e, \alpha_e, D_e$  为光谱常数.

因此, 根据表 1 和 (13) 到 (18) 式, 可以计算得到基态 HF 分子的 Murrell-Sorbie 势能函数的参量和力常数, 如表 3 所示.

表 3 HF 分子势能函数参量及力常数

$D'_e/\text{eV}$	6.12276
$r_e/\text{\AA}$	0.91681
$a_1/\text{\AA}^{-1}$	4.21592
$a_2/\text{\AA}^{-2}$	3.96489
$a_3/\text{\AA}^{-3}$	3.83538
$(f_2/aJ)/\text{\AA}^{-2}$	9.65700
$(f_3/aJ)/\text{\AA}^{-3}$	-71.20546
$(f_4/aJ)/\text{\AA}^{-4}$	480.83228

表 3 的计算结果与文献 [20] 完全一致.

### 3.3 Ne 原子与 HF 分子碰撞系统的相互作用势

采用 QCISD(T) 方法, 在 aug-cc-pVTZ 基组水平上, 分别对 Ne 与 HF 分子间相互作用势进行系统研究,  $r$  取优化值 0.916808  $\text{\AA}$ .

运用 Boys 和 Bernardi 提出的 CM 法<sup>[21]</sup>, 为了提高计算的精确性, 在计算的基础上消除基组重叠误差 (BSSE).

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 个方向上的势能曲线如图 2 所示.

研究原子与双原子分子的碰撞, 我们需要得出体系的球对称势和各项异性势的表达式, 一般情况下, 碰撞体系的相互作用势  $V(R, r, \theta)$  可写成:

$$V(R, r, \theta) = \sum_{\lambda=0} V_{\lambda}(R, r) P_{\lambda}(\cos \theta) \quad (\lambda = 0, 1, 2, \dots), \quad (19)$$

其中  $V_{\lambda}(R, r)$  为径向势函数,  $P_{\lambda}(\cos \theta)$  为 Legendre 函数,  $\theta$  为原子相对于双原子分子的方向角.

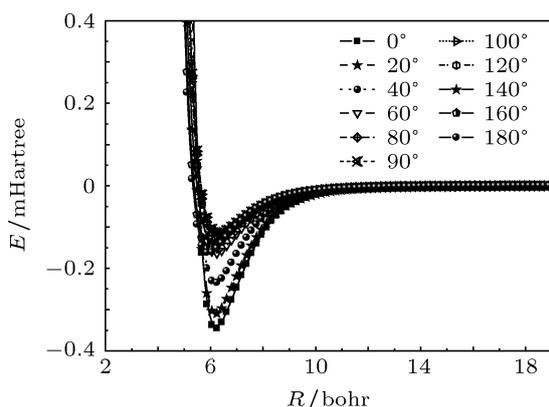


图2 Ne-HF 的势能曲线

$V_0(R, r)$  称为球对称势,  $V_1(R, r), V_2(R, r), V_3(R, r), V_4(R, r)$  等也称为各向异性势径向系数, 表征各向异性势的特征.  $V(R, r, \theta)$  用矩阵可表示为

$$= \begin{pmatrix} V(R, r, \theta_1) \\ V(R, r, \theta_2) \\ V(R, r, \theta_3) \\ \vdots \\ V(R, r, \theta_i) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_0(\theta_1) & P_1(\theta_1) & P_2(\theta_1) & \cdots & P_{\lambda}(\theta_1) \\ P_0(\theta_2) & P_1(\theta_2) & P_2(\theta_2) & \cdots & P_{\lambda}(\theta_2) \\ P_0(\theta_3) & P_1(\theta_3) & P_2(\theta_3) & \cdots & P_{\lambda}(\theta_3) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ P_0(\theta_i) & P_1(\theta_i) & P_2(\theta_i) & \cdots & P_{\lambda}(\theta_i) \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} V_0(R, r) \\ V_1(R, r) \\ V_2(R, r) \\ \vdots \\ V_{\lambda}(R, r) \end{pmatrix}, \quad (20)$$

将上式左乘  $P^{-1}$ , 即得:  $V_{\lambda}(R, r) = P^{-1}V(R, r, \theta_i)$ .

使用 Huxley 势函数对 Ne 原子与 HF 分子碰撞系统的径向系数点进行非线性最小二乘法拟合, 拟合公式为

$$V(R) = A(1 + a_1R + a_2R^2 + a_3R^3) \exp(-a_4R) - \tanh(R - R_c/2) \times (C_6R^{-6} + C_8R^{-8} + C_{10}R^{-10}), \quad (21)$$

式中, 拟合参数为:  $A, R_c, a_1, a_2, a_3, a_4, C_6, C_8, C_{10}$ . 前七个径向系数  $V_n(R, r)$  ( $n = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6$ ) 随  $R$  的变化关系如图 3 所示.

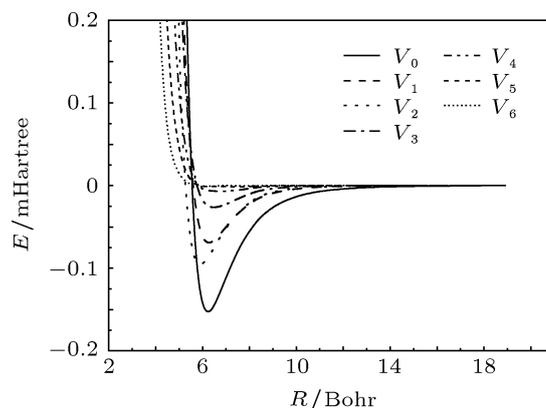


图3 Ne-HF 拟合势的径向系数

### 3.4 Ne 原子与 HF 分子碰撞截面的计算

由于 HF 的高腐蚀性和实验的难度, Ne 原子与 HF 分子碰撞的分波截面实验数据一直未见报道, 也未见其他理论数据报道. 因此, 本文旨在为这方面的工作做一点探索, 提供一定的参考.

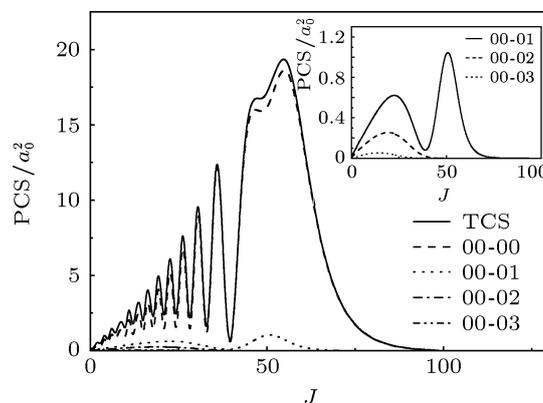


图4 Ne-HF 碰撞系统分波截面 ( $E = 50 \text{ meV}$ )

图 4 和图 5 分别是入射能量为 50 meV 和 100 meV 时, Ne 原子与 HF 分子碰撞系统的分波截面随量子数  $J$  的变化曲线. 其中包括碰撞系统

的 TCS 总截面, 弹性 00-00 分波截面, 以及 00-01, 00-02, 00-03 等相应系统的非弹性碰撞激发分波截面.

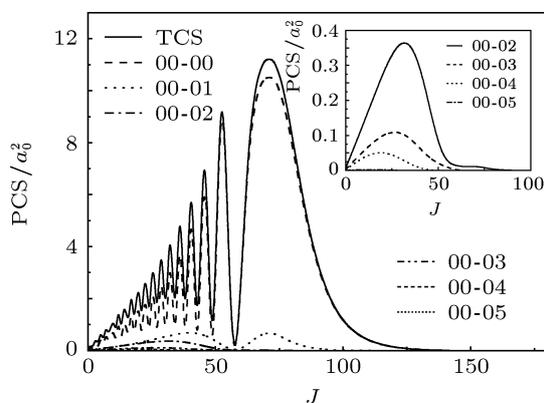


图 5 Ne-HF 碰撞系统分波截面 ( $E = 100 \text{ meV}$ )

图 4 和图 5 右上角的小图为非弹性分波截面 00-02, 00-03 等的坐标缩放图. 从图中可以看出 Ne-HF 碰撞系统在  $50 \text{ meV}$  与  $100 \text{ meV}$  时, 总截面和弹性 00-00 截面出现一个极大值后, 尾部出现很强的尾部效应, 然后迅速收敛. 这是由于在最靠近  $R$  的远距离处, 势的尾部有很强的吸引支产生的, 弹性 00-00 截面对总截面的贡献是最大的.  $50 \text{ meV}$  的低转动跃迁  $00 \rightarrow 01$  和  $100 \text{ meV}$  的  $00 \rightarrow 01$ ,  $00 \rightarrow 02$  有两个峰值, 说明低激发态产生尾部效应, 高激发态不产生尾部效应. 由于非弹性截面也有比较强的尾部效应, 所以总截面的尾部效应较高. 另外, 随着能量的升高, 分波截面的振荡次数增多, 极大值变小, 振荡极大值的位置也向  $J$  增大的方向发生移动. 尾部效应相对变弱. 产生非弹性激发跃迁的几率将增大, 因此, 弹性分波截面极大值变小, 并且极大值

位置向  $J$  增加的方向移动, 分波截面的振荡次数增加, 收敛速度变慢.

## 4 结论

本文采用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, 以及 aug-cc-pVTZ 基组对 He-HF 分子间相互作用势进行了计算, 为了提高计算得到的相互作用势离散点数据的精确性, 我们考虑 Boys 和 Bernardi 提出的均衡法在计算的基础上消除基组重叠误差. 计算得到了 Ne 与 HF 分子碰撞系统的相互作用势在  $0^\circ, 20^\circ, 40^\circ, 60^\circ, 80^\circ, 90^\circ, 100^\circ, 120^\circ, 140^\circ, 160^\circ, 180^\circ$  共 11 个方向上, 步长取  $0.01 \text{ \AA}$ , 在  $2.0\text{--}10.0 \text{ \AA}$  范围内, 每个系统的 891 个势能点数据. 接着在 Legendre 多项式里展开势能表面, 进行矩阵变换, 得到各向异性势的径向系数  $V_0, V_1, V_2, \dots$ . 最终确定使用拟合效果较好, 物理意义也比较明确的 Huxley 势函数, 对 11 个方向的径向系数点进行非线性最小二乘法拟合, 其函数形式能够很好地描述 Ne 原子与 HF 分子碰撞系统的势能面.

经过与可查询的散射截面的实验值进行了细致的对比, 检验了拟合势的可靠性和散射截面密偶计算结果的可靠性. 结果显示: 我们构造的势模型不仅表达形式较为简洁, 而且能够很好地描述 Ne-HF 分子碰撞系统的散射截面. 曾计算的微分散射截面的衍射振荡位置和振荡幅度与实验光谱测量值具有相同的变化规律, 而且符合得很好. 因此, 我们的拟合势能够很好地反映 Ne-HF 分子碰撞系统的相互作用特征, 计算的碰撞激发分波截面的结果是可靠的.

- [1] Scole G 1988 *Atomic and Molecular Beam Methods* (Oxford: Oxford University)
- [2] Yu C R, Zhang J, Jiang G S 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 2376 (in Chinese) [余春日, 张杰, 江贵生 2009 物理学报 **58** 2376]
- [3] Huang D H, Wang F H 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 6091 (in Chinese) [黄多辉, 王藩侯 2009 物理学报 **58** 6091]
- [4] Linghu R F, Li J, Lü B, Xu M, Yang X D, 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 185 (in Chinese) [令狐荣锋, 李劲, 吕兵, 徐梅, 杨向东 2009 物理学报 **58** 185]
- [5] Linghu R F, Xu M, Lü B, Wang X L, Yang X D 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 2416 (in Chinese) [令狐荣锋, 徐梅, 吕兵, 王晓璐, 杨向东 2010 物理学报 **58** 2416]
- [6] Shen G X, Linghu R F, Wang R K, Yang X D 2007 *Chin. Phys.* **16** 3352
- [7] Wang R K, Shen G X, Song X S, Linghu R F, Yang X D 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 4138 (in Chinese) [汪荣凯, 沈光先, 宋晓书, 令狐荣锋, 杨向东 2008 物理学报 **57** 4138]
- [8] Wang X L, Linghu R F, Yang J H, Lü B, Gao T, Yang X D 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 093101 (in Chinese) [王晓璐, 令狐荣锋, 杨建会, 吕兵, 高涛, 杨向东 2012 物理学报 **61** 093101]
- [9] 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]
- [10] Shen G X, Linghu R F, Wang R K, Yang X D 2007 *Chin. Phys.* **16** 3352
- [11] Miller J 1987 *AIP Con. Proc.* **160** 10
- [12] Smith J H, Robinson D W 1981 *J. Chem. Phys.* **74** 5111
- [13] Taatjes C A, Leone S R 1988 *J. Chem. Phys.* **89** 302

- [14] Cuellar E, Parker J H, Primatel G C 1974 *J. Chem. Phys.* **61** 422423
- [15] Jiang G, Xie H P, Zhu Z H, Cheng H D, Yang W D, Liu D Y 1998 *Chin. J. Lasers* **25** 817 (in Chinese) [蒋刚, 谢洪平, 朱正和, 陈涵德, 杨卫东, 刘冬燕 1998 中国激光 **25** 817821]
- [16] Herzberg G (Translated by Wang D C) 1983 *Molecular Spectrum and Molecular Structure* (Beijing: Science Press) (in Chinese) [Herzberg G 著, 王鼎昌译 1983 分子光谱与分子结构 (北京: 科学出版社)]
- [17] Huber K P, Herzberg G 1979 *Molecular Spectrum and Molecular Structure (IV) Constants of Diatomic Molecules* (New York: Van Nostrand Reinhold Company)
- [18] Huxley P, Murrell J N, Sorbie K S 1983 *Chem. Soc. Faraday Trans. II* **79** 323
- [19] Rydberg Z R 1931 *Physica* **73** 376
- [20] Zhu Z H, Yu H G 1997 *Molecular Structure and Potential Energy Function* (Beijing: Science Press) (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)]
- [21] Boys S F, Bernardi F 1970 *Mol. Phys.* **19** 533

## Study on ro-vibrational excitation cross sections of Ne-HF\*

Xu Mei<sup>1)</sup> Wang Xiao-Lu<sup>1)</sup> Linghu Rong-Feng<sup>2)†</sup> Yang Xiang-Dong<sup>3)</sup>

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

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

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

(Received 18 March 2012; revised manuscript received 8 November 2012)

### Abstract

In this paper, the QCISD(T) method and aug-cc-pVTZ basic set are used to calculate the interactional potential of Ne atom and halogen hydride molecule HF, in which Boys and Bernardi's full counterpoise method is employed to eliminate the basis set superposition error. After obtaining the interactional potential energy data in eleven directions for He-HF, the symmetric potential  $V_0$  and the anisotropic potentials  $V_1$ ,  $V_2$ ,  $V_3$ , etc. of the system are derived, by using Huxley function fitting, so as to describe well the He-HF potential energy surface. Finally, the close-coupling method is used to calculate the total collision excitation cross section, elastic partial wave cross section and inelastic elastic partial wave cross section.

**Keywords:** He-HF, collision, interactional potential, close-coupling method

**PACS:** 31.15.ac, 34.20.-b, 34.80.Bm, 34.50.-s

**DOI:** 10.7498/aps.62.063102

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10974002), the Science-Technology Foundation of Guizhou Province, China (Grant Nos. [2009]2066, LKS [2009]07), and the Special Project for Research Conditions of High-Level Talents of Guizhou Province, China (Grant No. TZJF-2008-42).

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