

Xe-NH($X^3\Sigma^-$)体系的势能面和冷碰撞动力学研究

乔政 王雅丽 吴明伟 凤尔银 黄武英

Potential energy surface and cold collision dynamics of Xe-NH($X^3\Sigma^-$) system

Qiao Zheng Wang Ya-Li Wu Ming-Wei Feng Er-Yin Huang Wu-Ying

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 67, 213401 (2018) DOI: 10.7498/aps.67.20181321

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.67.20181321>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2018/V67/I21>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

[30 keV H⁺ 在聚碳酸酯微孔膜中动态输运过程的实验和理论研究](#)

Experimental and theoretical research on the dynamical transmission of 30 keV H⁺ ions through polycarbonate nanocapillaries

物理学报.2018, 67(20): 203401 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.67.20181062>

[100 keV 质子与低高能质子在绝缘微孔中输运特性的对比分析](#)

Simulation analyses of 100-keV as well as low and high energy protons through insulating nanocapillary

物理学报.2018, 67(1): 013401 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.67.20171701>

[20 keV 质子在聚碳酸酯微孔膜中传输的动态演化过程](#)

Dynamic evolution of 20-keV H⁺ transmitted through polycarbonate nanocapillaries

物理学报.2017, 66(9): 093401 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.093401>

[100-keV 质子在聚碳酸酯微孔膜中传输的动态演化过程](#)

Dynamic evolution of 100-keV H⁺ through polycarbonate nanocapillaries

物理学报.2016, 65(10): 103401 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.103401>

[Mg-CO\(\$X^1\Sigma^+\$ \)体系的冷碰撞动力学](#)

Collision dynamic behaviors of CO($X^1\Sigma^+$) molecule with Mg atom in cold and ultracold temperatures

物理学报.2015, 64(10): 103402 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.103402>

Xe-NH($X^3\Sigma^-$)体系的势能面和冷碰撞动力学研究*

乔政¹⁾²⁾ 王雅丽¹⁾ 吴明伟¹⁾ 凤尔银^{1)†} 黄武英¹⁾

1)(安徽师范大学物理与电子信息学院, 芜湖 241000)

2)(皖南医学院公共基础学院, 芜湖 241002)

(2018年7月9日收到; 2018年9月3日收到修改稿)

以超冷Xe原子感应冷却NH($X^3\Sigma^-$)分子实验为背景, 理论研究磁场中Xe和NH的冷碰撞动力学性质. 通过从头算方法得到了解析表达的Xe-NH体系势能面, 并在此基础上采用量子动力学计算方法, 研究了磁场条件下NH低场追索态($n=0, m_j=1$)的冷碰撞塞曼弛豫截面. 结果表明超冷Xe原子感应冷却NH分子可能在实验上难以实施.

关键词: Xe-NH体系, 感应冷却, 原子分子冷碰撞

PACS: 34.50.-s, 34.50.Cx, 34.80.Bm, 31.15.xv

DOI: 10.7498/aps.67.20181321

1 引言

原子和分子的冷却与囚禁是原子分子物理学领域持续的研究热点. 冷却分子的方法大致可分为间接冷却和直接冷却两大类. 间接冷却方法是先用激光把原子冷却成超冷原子(温度低于1 mK), 然后再由这些原子光缔合或磁Feshbach共振形成超冷分子. 间接冷却方法目前只适用于产生碱金属双原子分子, 如Li₂分子、Cs₂分子、RbCs分子、KRb分子和NaK分子等^[1-5]. 直接冷却方法则是把处于室温下的分子直接冷却到冷或超冷温度. 代表性的有He缓冲气载带冷却^[6]和Stark/Zee-man减速方法^[7]等. 直接冷却方法适用的分子种类较多^[8,9], 但是得到的分子最低温度大都只能达到几十mK, 要想得到温度更低的超冷分子, 还要进行进一步的冷却. 目前, 蒸发冷却和感应冷却是进一步冷却分子的主要方法^[10-12]. 最近人们利用激光直接冷却具有特定能级结构的双原子分子到超冷温度也获得了成功^[13].

感应冷却, 是将已经被预冷到几十至几百mK温度的分子与激光冷却的超冷原子囚禁于同一个势阱中, 分子通过与超冷原子发生弹性碰撞, 降低自身温度, 达到超冷温度. 感应冷却要求被冷却的分子可以被势阱囚禁, 这就要求这些分子处于低场追索态(low-field-seeking state), 而低场追索态并不是分子能量最低的态. 因此在感应冷却过程中, 低场追索态的分子向能量更低的态跃迁所造成的非弹性散射, 将会影响感应冷却的有效实施. 通常认为, 只有弹性散射截面与非弹性散射截面的比值超过两个量级, 感应冷却才有可能成功^[14]. 所以, 从理论上对感应冷却体系的冷碰撞动力学进行研究, 对感应冷却的可行性做出理论预期, 是非常有必要的.

虽然碱金属原子是目前实验上可得的最冷原子, 但由于碱金属原子与分子的相互作用势普遍具有较深的势阱和强的各向异性, 且存在电子态的交叉, 导致大的非弹性弛豫速率, 因此超冷碱金属原子感应冷却分子被认为是不可行的^[15]. 稀有

* 国家自然科学基金(批准号: 10874001, 11374014)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: fengbf@mail.ahnu.edu.cn

气体原子, 可以被激光冷却到超冷温度, 化学性质稳定, 是另一类可能的感应冷却剂. Zuchowski 和 Hutson^[15], Barker 等^[16] 和 Barletta 等^[17] 分别研究了超冷稀有气体原子感应冷却 H₂, C₆H₆ 和 NH₃ 分子的可能性. NH 分子在实验上可以被缓冲气载体冷却并被磁场囚禁^[18], 本文将研究 Xe 原子与 NH(X³Σ⁻) 分子在磁场条件下的冷碰撞动力学性质, 从理论上分析 Xe 感应冷却 NH 分子的前景.

2 理论计算

2.1 势能面计算

采用 Jacobi 坐标 (R, r, θ) 描述体系的几何构型, R 为 Xe 原子到 NH 分子质心的距离, r 为 NH 分子键长, θ 为 R 和 r 间的夹角, $\theta = 0^\circ$ 对应于 NH-Xe 线性构型. 由于 Xe-NH 体系的振动频率比 NH 内部振动频率小两个数量级, 在低的碰撞能下, NH 分子难以被激发到激发振动态. 因此对 NH 分子采用刚性转子近似, 固定 r 为 NH 的平衡键长, $r = 1.95879a_0$. 体系相互作用势的计算, 采用单双迭代并包括非迭代三重激发修正的耦合簇理论 (coupling cluster method with noniterative triple excitation correction, CCSD(T)) 方法, 对 N, H 原子选用扩张的相关一致极化价键基组 aug-cc-pVXZ ($X = D, T, Q$), 对 Xe 原子采用考虑了相对论修正和价电子-原子实相关的 aug-cc-pCVXZ-PP ($X = D, T, Q$) 基组, 并引入中心键函数 (3s3p2d2f1g), 键函数位于 Xe 和 NH 质心连线的中点处. 计算中采用超分子近似和平衡校正方法扣除基底叠加误差, 即在同一分子基组下计算聚合物和单体的能量, 体系的相互作用能 $V(R, \theta)$ 则为聚合物能量与两个单体能量的差:

$$V(R, \theta) = E_{\text{Xe-NH}} - E_{\text{Xe}} - E_{\text{NH}}. \quad (1)$$

为了提高计算精度, 进一步采用相互作用能三项外推完备基组的方案^[19], 得到完备基组下的相互作用能:

$$E(X) = E_\infty + Ae^{-(X-1)} + Be^{-(X-1)^2}, \quad (2)$$

其中, $E(X)$ 是使用不同基底所得的体系的相互作用能 ($X = 2, 3, 4$), E_∞ 是基底限下的相互作用能. 共计算了 299 个不同 (R_i, θ_j) 构型的相互作用能, 计算在 MOLPRO2006 程序包中进行.

为便于碰撞动力学计算, 用 Bukowski 提出的模型势函数形式, 拟合计算得到的离散势能值. 模型势函数 $V(R, \theta)$ 分成长程和短程两部分^[20]:

$$V(R, \theta) = V_{\text{sh}}(R, \theta) + V_{\text{as}}(R, \theta), \quad (3)$$

$$V_{\text{sh}}(R, \theta) = G(R, \theta)e^{B(\theta)-D(\theta)R}, \quad (4)$$

$$V_{\text{as}}(R, \theta) = \sum_{n=6}^{10} \sum_{l=1,3,\dots}^{n-4} f_n(D(\theta)R) \times \frac{C_{nl}}{R^n} P_l^0(\cos \theta), \quad (5)$$

$$B(\theta) = \sum_{l=0}^5 b_l P_l^0(\cos \theta), \quad (6)$$

$$D(\theta) = \sum_{l=0}^5 d_l P_l^0(\cos \theta), \quad (7)$$

$$G(R, \theta) = \sum_{l=0}^5 (g_{0l} + g_{1l}R + g_{2l}R^2 + g_{3l}R^3) \times P_l^0(\cos \theta), \quad (8)$$

$$f_n(x) = 1 - e^{-x} \sum_{k=0}^n \frac{x^k}{k!}, \quad (9)$$

其中, V_{sh} 是短程项; V_{as} 代表长程项; $f_n(x)$ 是 Tang-Toennies 衰减函数; $P_l^0(\cos \theta)$ 是勒让德多项式; b_l , d_l , g_{il} 和 C_{nl} 为待定参数. 为了提高拟合精度, 特别是长程参数的精度, 分两步做最小二乘法拟合. 第一步, 取 $R \geq 14a_0$ 的势能值拟合长程参数 C_{nl} , 此时令 Tang-Toennies 衰减因子等于 1. 第二步, 固定长程中 $n = 6$ 的参数, 拟合其他参数.

2.2 散射理论

Xe-NH(³Σ⁻) 碰撞体系在磁场下的 Hamiltonian 为

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} R^{-1} \frac{\partial^2}{\partial R^2} R + \frac{\hat{L}^2}{2\mu R^2} + \hat{H}_{\text{mon}} + \hat{H}_{\text{Zeeman}} + V(R, \theta), \quad (10)$$

其中, μ 表示 Xe-NH 体系的约化质量; \hat{L} 为体系的轨道角动量; \hat{H}_{mon} 表示 NH(³Σ⁻) 单体的哈密顿量, $\hat{H}_{\text{mon}} = b_{\text{rot}} \hat{n}^2 + \hat{H}_{\text{sn}} + \hat{H}_{\text{ss}}$, b_{rot} 为 NH 分子在基振动态的转动常数, \hat{n} 是 NH 分子的转动算符, \hat{H}_{sn} 是 NH 分子的自旋-转动相互作用项, \hat{H}_{ss} 是 NH 分子的自旋-自旋相互作用项; \hat{H}_{Zeeman} 表示 NH 分子的磁矩与外加磁场的相互作用, 它造成分子能级的 Zeeman 分裂, 这里设定外加磁场的方向为空间固定坐标 Z 轴的方向.

在磁场情形, 总角动量表象并不适用, 采用非耦合角动量表象 $|nm_n\rangle|sm_s\rangle|LM_L\rangle$, n, s 分别是 NH 分子的转动和电子自旋角动量; m_n, m_s, M_L 是 $\hat{n}, \hat{s}, \hat{L}$ 在空间 Z 轴上的投影. 由于外场的存在, 体系的渐近哈密顿量 \hat{H}_{asy} 在非耦合角动量基底 $|nm_n\rangle|sm_s\rangle|LM_L\rangle$ 下并不是对角的. 所以, 第一步是对角化渐近哈密顿量 \hat{H}_{asy} :

$$\hat{H}_{\text{asy}} = \hat{H}_{\text{mon}} + \hat{H}_{\text{Zeeman}}, \quad (11)$$

$$|\alpha\rangle = \sum_{i=(nm_n sm_s)} C_i^\alpha |nm_n sm_s\rangle, \quad (12)$$

$$[CH_{\text{asy}}C^{-1}]_{\alpha\beta} = \zeta_\alpha \delta_{\alpha\beta}. \quad (13)$$

这里 $|\alpha\rangle|LM_L\rangle$ 就是满足渐近哈密顿量对角化的基底 [21]. 以此基底进行散射波函数的展开,

$$\Psi = \frac{1}{R} \sum_\alpha \sum_L \sum_{M_L} F_{\alpha LM_L}(R) |LM_L\rangle |\alpha\rangle, \quad (14)$$

得到密耦 (close coupling) 方程:

$$\left(\frac{d^2}{dR^2} - \frac{L(L+1)}{R^2} + 2\mu[E - \zeta_\alpha] \right) F_{\alpha, M_L, L}(R) = 2\mu \sum_{\alpha', M'_L, L'} [C^T V C]_{\alpha, M_L, L}^{\alpha', M'_L, L'} F_{\alpha', M'_L, L'}(R), \quad (15)$$

其中 E 为体系的碰撞能. 采用对数-导数传播子方法 [22], 匹配 $F_{\alpha LM_L}(R)$ 和径向波函数的渐近解, 得到跃迁矩阵元 $S_{\alpha LM_L; \alpha' L' M'_L}$ 以及弹性和非弹性截面:

$$\sigma_{\alpha \rightarrow \alpha'} = \frac{\pi}{k_\alpha^2} \sum_{LM_L} \sum_{L'M'_L} \left| \delta_{LL'} \delta_{M_L M'_L} \delta_{\alpha\alpha'} - S_{\alpha LM_L; \alpha' L' M'_L} \right|^2. \quad (16)$$

3 结果与讨论

3.1 Xe-NH 体系二维势能面

图 1 给出了 Xe-NH 体系的二维势能面等值图. 拟合的均方根误差为 0.0234 cm^{-1} . 由图 1 可以看到, 在 $R = 7.14a_0, \theta = 102.76^\circ$ 处存在一个全域极小势阱, 阱深为 -153.54 cm^{-1} . 势能面呈现较弱的各向异性, Xe 原子从 N 原子端接近分子时, 相互作用能大于从 H 原子端接近.

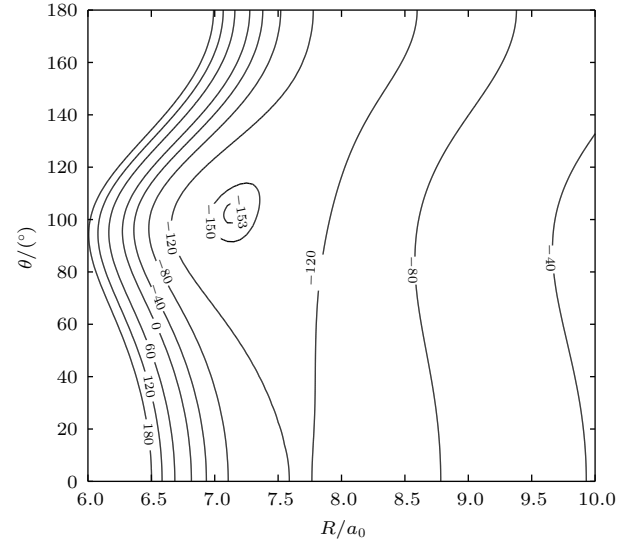


图 1 Xe-NH 体系势能面的等势图 (单位: cm^{-1})

Fig. 1. Contour plot of the potential energy surface for Xe-NH complex (unit: cm^{-1}).

图 2 为 θ 分别取 $0^\circ, 30^\circ, 60^\circ, 90^\circ, 120^\circ, 150^\circ, 180^\circ$ 时, 势能值 V 随 R 变化的曲线. 从图 2 可以发现, 当距离 R 相同时, 对于不同的 θ , 相互作用能 V 相差很小, Xe-NH 体系势能面呈现弱的各向异性. 表 1 列出了拟合得到的 Xe-NH 体系势能面参数.

表 1 Xe-NH 体系势能面参数 (单位 a.u.)

Table 1. Coefficients of the analytical potential energy surface fitted to the Xe-NH interaction energies (unit: a.u.).

	d	b	g_0	g_1	g_2	g_3
$l = 0$	-1.8385205	16.93437	1.130022	-0.97360069	0.46016453	-0.034526157
$l = 1$	-0.021789996	-0.34768087	3.2636825	-1.8553302	0.37045221	-0.020794565
$l = 2$	-0.030858469	0.55375963	4.0884162	-2.2125726	0.44414605	-0.024797144
$l = 3$	0.014704463	-0.14636125	-0.88634176	0.77338021	-0.1827139	0.010493307
$l = 4$	-0.010110235	0.067764542	5.0920545	-2.2941267	0.33453091	-0.016187902
$l = 5$	0.000203371	-0.007798537	-1.3188333	0.50120194	-0.05747956	0.002093391
$C_{60} = -2.3756 \times 10^7, C_{62} = -3.1589 \times 10^6, C_{71} = 2.0097 \times 10^7, C_{73} = 1.4414 \times 10^7, C_{80} = -1.3447 \times 10^9,$						
$C_{82} = -6.4900 \times 10^8, C_{84} = -9.1539 \times 10^7, C_{91} = 2.9212 \times 10^9, C_{93} = 2.1336 \times 10^9, C_{95} = 2.6888 \times 10^8,$						
$C_{100} = -6.7759 \times 10^6, C_{102} = -3.4159 \times 10^6, C_{104} = -1.9272 \times 10^7, C_{106} = -1.0856 \times 10^8$						

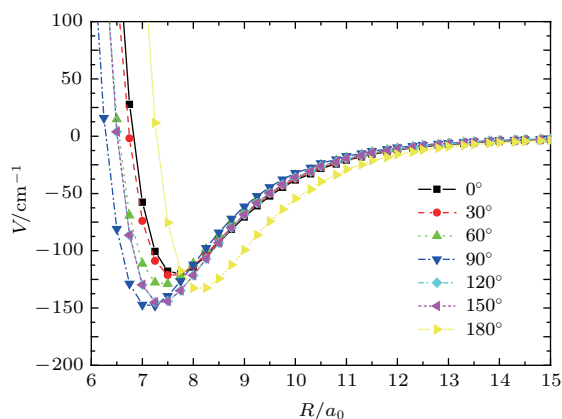


图2 θ 取不同角度时, Xe-NH相互作用势关于 R 的函数图像 ($r = 1.95879a_0$)

Fig. 2. Potential energy curves for different θ of Xe-NH complex ($r = 1.95879a_0$).

3.2 Xe-NH体系散射截面

图3所示为NH($X^3\Sigma^-$)双原子分子的能级随磁场的变化. 可以看到NH分子 $n = 0, j = 1$ 的转动能级在磁场中分裂为3个支能级, 其中能量随着磁场强度的增大而减小的态被称为高场追索态, 能量随着磁场强度的增大而增大的态被称为低场追索态. 按照作用力与势能的关系: $\mathbf{F} = -\nabla E_p$, 处于低场追索态的分子所受的磁场力总是指向势阱的中心, 因此是可能被囚禁的, 也是实验上感兴趣的态, 图3中 $n = 0, m_j = 1$ 的态即是能量最低的低场追索态.

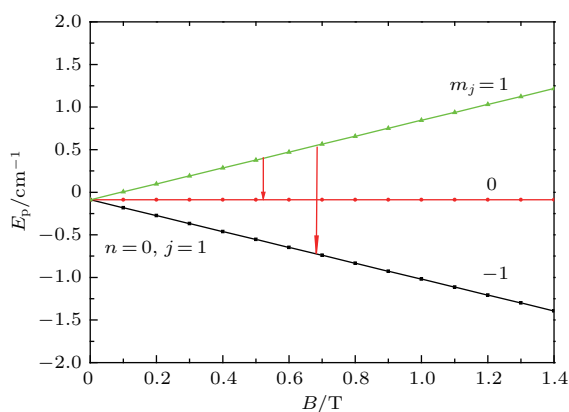


图3 NH分子 $n = 0, j = 1$ 的转动能级在磁场中的塞曼分裂

Fig. 3. Zeeman splitting of rotational level of $n = 0, j = 1$ of NH molecule in magnetic field.

图4给出了磁场 $B = 0$ 时, NH分子与Xe原子在不同碰撞能下的弹性散射截面和非弹性散射截面. 碰撞前, NH分子处于 $n = 0, m_j = 1$ 的

低场追索态, 它可以通过非弹性散射跃迁到 $n = 0, m_j = 0$ 和 $n = 0, m_j = -1$ 的态. 从图4可以看出, 在温度较低或者说碰撞能较小时, 弹性散射截面远大于非弹性散射截面. 在碰撞能低于 0.01 cm^{-1} 的低温区域, 弹性散射截面的大小几乎不受碰撞能的影响, 非弹性散射截面随碰撞能的增大而增大. 当碰撞能较大时, 非弹性散射截面受碰撞能影响较小. 这可以用 Volpi 和 Bohn [23] 的工作来解释, 他们使用一阶扭曲波近似方法得到了如下关系:

$$\sigma_{\alpha L \rightarrow \alpha' L'}(E, B) \propto E^{L-\frac{1}{2}}(E + \Delta m_j g \mu_0 B)^{L'+\frac{1}{2}}, \quad (17)$$

其中, αL 代表碰撞前体系所处的状态, $\alpha' L'$ 代表碰撞后体系所处的状态. 体系的离心势垒可以近似表示为 [24]

$$E_{\text{cf}}^L = [\hbar L(L+1)/\mu]^{3/2} (54C_6)^{-1/2}, \quad (18)$$

其中 C_6 为长程色散系数. 在碰撞能较低时, $L > 0$ 的入射通道受离心势垒抑制, 入射波以 $L = 0$ 的s波为主. 对于弹性散射情形, $L = L' = 0$, 根据(17)式, 弹性散射截面的大小不随碰撞能的改变而改变. 而对于 $m_j = 0$ 和 $m_j = -1$ 的非弹性散射情形, 考虑到碰撞体系 $M_J = m_j + M_L$ 守恒和宇称 $P = (-1)^{n+L+1}$ 守恒, 出射通道以 $L = 2$ 的d波为主, 根据(17)式, 非弹性散射截面的大小与 E^2 成正比. 当碰撞能较大时, 碰撞能高于离心势垒, 散射截面受碰撞能的影响变小.

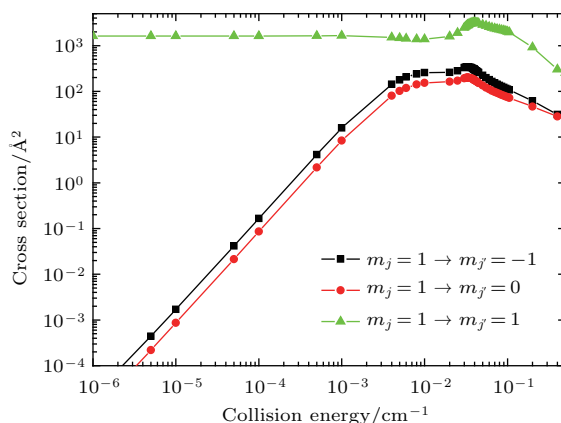


图4 磁场为零时散射截面随碰撞能的变化

Fig. 4. Cross sections for spin-flipping and elastic scattering transitions of NH ($n = 0, m_j = 1$) in collisions with Xe in the absence of magnetic field.

磁场的引入将会影响体系的冷碰撞动力学的性质. 考虑到Xe与NH之间的感应冷却将在磁场

中进行, 分别计算了在不同磁场和不同碰撞能下 NH 与 Xe 的散射截面, 如图 5 和图 6 所示. 由于弹性散射截面的大小与磁场的大小呈弱相关性, 故没有给出弹性散射的曲线. 这也可以由 (17) 式来解释, 由于弹性碰撞 $L = L'$, $\Delta m_j = 0$, 所以弹性碰撞截面几乎不受磁场影响. 图中所示的非弹性散射截面是 $m_j = 1 \rightarrow m_{j'} = 0$ 与 $m_j = 1 \rightarrow m_{j'} = -1$ 两部分的和. 从图 5 可以看出, 磁场对非弹性散射截面大小产生明显的影响. 在碰撞能很小 ($E < 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$) 的低温区域, 非弹性散射截面随碰撞能的增大而减小, 在碰撞能较大的区域, 磁场对非弹性散射截面的影响较小. 从图 6 可以看出, 当磁场增加 ($< 0.1 \text{ T}$) 时, 碰撞能较小的非弹性散射截面增加明显. 同样, 磁场对碰撞能较大的散射截面影响较小. 这一现象可做如下定性解释: NH 分子的塞曼能级间隔随磁场的增大而增大, 当磁场和碰撞能都较小时, 非弹性散射的能量较低, 非弹性散射会被体系的离心势垒所抑制; 当碰撞能较小时, 增大磁场, $m_j = 1$ 的初始能级与 $m_j = 0$ 和 $m_j = -1$ 的能级之间的能量差变大, 非弹性散射能量增加, 离心势垒对非弹性散射的抑制减小, 非弹性散射截面增大; 当碰撞能较大时, 非弹性散射能量大于离心势垒, 磁场对非弹性散射截面影响较小 [25].

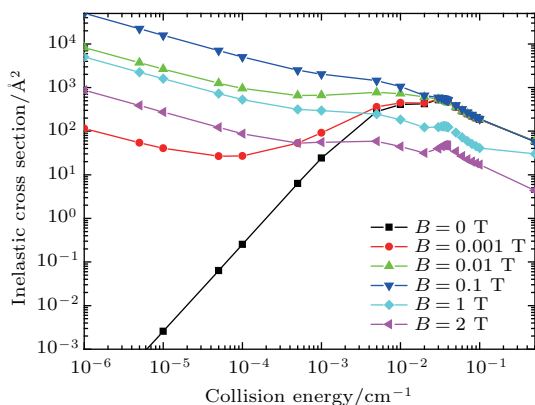


图 5 不同磁场下非弹性散射截面大小随碰撞能的变化
Fig. 5. Function of inelastic scattering cross section with collision energy for different magnetic fields.

弹性截面与非弹性截面的比值是感应冷却能否成功进行的重要参数, 一般要求该比值应超过 100. 为此计算了不同磁场下 Xe-NH 体系弹性-非弹性散射截面大小比值关于碰撞能的变化函数 (图 7). 假设 NH 分子被 He 缓冲气载带预冷却, 则

可预冷至约 0.5 K, 即碰撞能约为 0.35 cm^{-1} . 从图 7 可以看出, 在不同的磁场情形下, 这一碰撞能对应的比值均难以超过 100. 不过, 在较大的磁场 (约为 2 T) 情形, 比值则接近 100.

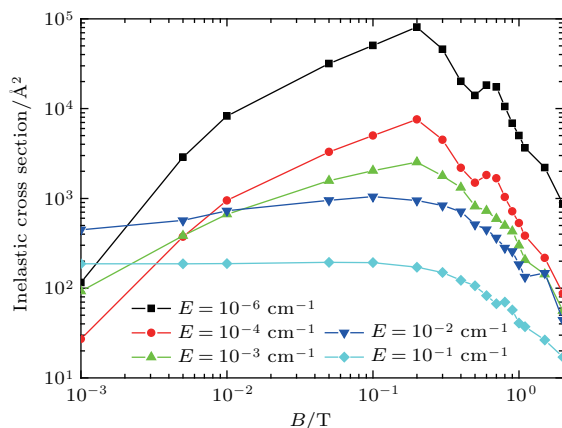


图 6 不同的碰撞能下非弹性散射截面大小随磁场的变化
Fig. 6. Function of inelastic scattering cross section with magnetic field for different collision energies.

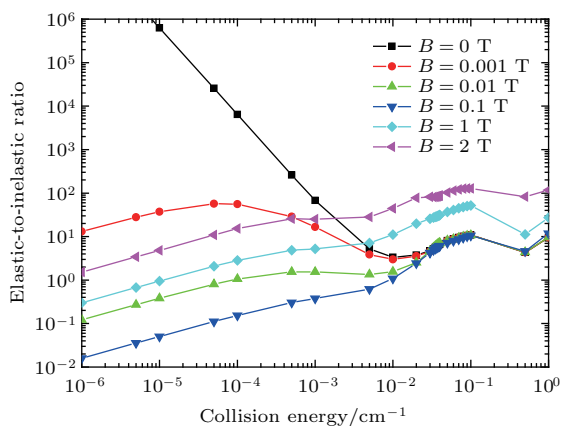


图 7 不同磁场下 Xe-NH 体系弹性-非弹性散射截面比值对碰撞能的变化
Fig. 7. Ratio of the cross sections for elastic scattering and Zeeman relaxation in collisions of NH with Xe atoms with different applied magnetic field.

4 结 论

本文采用 CCSD(T) 方法, 分别在 3 个大小不同的基组下从头计算了 Xe-NH 体系的相互作用势. 通过相互作用能三项外推基底限的方法和 Bukowski 模型势函数, 拟合得到了解析表达的 Xe-NH 体系势能面. 拟合结果表明, 在 $R = 7.14a_0$, $\theta = 102.76^\circ$ 处存在一个全域极小势阱, 阱深为 -153.54 cm^{-1} . 整个势能面呈现弱的各向异性. 基于此从头算势能面, 采用量子动力学计算方法, 研究了磁场条件下 Xe-NH 的冷碰撞塞曼弛豫截面.

计算了不同磁场下NH分子处于最低的低场追随态 ($n = 0, m_j = 1$) 时的弹性与非弹性跃迁截面及其比值随碰撞能和磁场的变化关系. 结果表明: 弹性截面几乎不受磁场的影响; 磁场对碰撞能较大的散射截面影响较小; 在碰撞能很小 ($E < 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$) 的低温区域, 非弹性散射截面呈现随碰撞能的增大而减小的趋势. 在所研究的磁场和碰撞能下, 低场追随态 ($n = 0, m_j = 1$) 的弹性与非弹性截面比值难以超过两个量级, 表明利用超冷Xe感应冷却NH分子可能在实验上具有挑战.

参考文献

- [1] Zwierlein M W, Stan C A, Schunck C H, Raupach S M F, Gupta S, Hadzibabic Z, Ketterle W 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 250401
- [2] Sage J M, Sainis S, Bergeman T, Demille D 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 203001
- [3] Ni K K, Ospelkaus S, de Miranda M H G, Péér A, Neyenhuis B, Zirbel J J, Kotochigova S, Julienne P S, Jin D S, Ye J 2008 *Science* **322** 231
- [4] Ospelkaus S, Ni K K, Wang D, de Miranda M H G, Neyenhuis B, Qüeméner G, Julienne P S, Bohn J L, Jin D S, Ye J 2010 *Science* **327** 853
- [5] Park J W, Will S A, Zwierlein M W 2015 *Phys. Rev. Lett.* **114** 205302
- [6] Weinstein J D, de Carvalho R, Guillet T, Friedrich B, Doyle J M 1998 *Nature* **395** 148
- [7] Bethlem H L, Meijer G 2003 *Int. Rev. Phys. Chem.* **22** 73
- [8] Fu M K, Ma H T, Cao J W, Bian W S 2016 *J. Chem. Phys.* **144** 184302
- [9] Xia W S, Fu M K, Ma H T, Bian W S 2017 *Chem. Phys.* **485** 29
- [10] Krems R V, Stwalley W C, Friedrich B 2009 *Cold Molecules: Theory, Experiment, Applications* (London: Taylor & Francis) p651
- [11] Modugno G, Ferrari G, Roati G, Brecha R J, Simoni A, Inguscio M 2001 *Science* **294** 1320
- [12] Soldán P, Hutson J M 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 163202
- [13] Hummon M T, Yeo M, Stuhl B K, Collopy A L, Xia Y, Ye J 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 143001
- [14] de Carvalho R, Doyle J M, Friedrich B, Guillet T, Kim J, Patterson D, Weinstein J D 1999 *Eur. Phys. J. D* **7** 289
- [15] Żuchowski P S, Hutson J M 2008 *Phys. Rev. A* **78** 022701
- [16] Barker P F, Purcell S M, Douglas P, Barletta P, Coppendale N, Maher-McWilliams C, Tennyson J 2009 *Faraday Discuss.* **142** 175
- [17] Barletta P, Tennyson J, Barker P F 2009 *New J. Phys.* **11** 055029
- [18] González-Martínez M L, Huston J M 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 203004
- [19] Bytautas L, Ruedenberg K 2008 *J. Chem. Phys.* **128** 214308
- [20] Bukowski R, Sadlej J, Jeziorski B, Jankowski P, Szalewicz K, Kucharski S A, Williams H L, Rice B M 1999 *J. Chem. Phys.* **110** 3785
- [21] Guillon G, Stoecklin T, Voronin A 2008 *Phys. Rev. A.* **77** 042718
- [22] Manolopoulos D E 1986 *J. Chem. Phys.* **85** 6425
- [23] Volpi A, Bohn J L 2002 *Phys. Rev. A* **65** 052712
- [24] Wallis A O G, Huston J M 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 183201
- [25] Tiesinga E, Verhaar B J, Stoof H T C 1993 *Phys. Rev. A* **47** 4114

Potential energy surface and cold collision dynamics of Xe-NH($X^3\Sigma^-$) system*

Qiao Zheng¹⁾²⁾ Wang Ya-Li¹⁾ Wu Ming-Wei¹⁾ Feng Er-Yin^{1)†} Huang Wu-Ying¹⁾

1) (College of Physics and Electronic Information, Anhui Normal University, Wuhu 241000, China)

2) (School of Common Courses, Wannan Medical College, Wuhu 241002, China)

(Received 9 July 2018; revised manuscript received 3 September 2018)

Abstract

Sympathetic cooling is one of the most promising techniques for producing ultracold molecules from precooled molecules. Previous researches have shown that it is inadequate to use the ultracold alkali-metal atoms as coolant for sympathetic cooling. To explore the possibility of ultracold alkali-earth-metal atoms as coolant, in this paper a theoretical investigation is performed of the cold collision dynamics for Xe-NH($X^3\Sigma^-$) system in magnetic fields. The interaction potential energies of Xe-NH complex are calculated respectively by using the single and double excitation coupled-cluster theory with the noniterative treatment of triple excitations [CCSD(T)] method and complete basis set limit extrapolated method. An analytic express of potential energy surface (PES) is given for the first time. A single global minimum value occurs at $R = 7.14a_0$, $\theta = 102.76^\circ$ with an energy of -153.54 cm^{-1} , and the PES has a weak anisotropy. Combine the *ab initio* PES with quantum scattering theory, then the cold collisional dynamics of Xe-NH system in a magnetic field will be studied. The elastic and inelastic transition cross sections and their ratios of NH molecules in the lowest low-field following state ($n = 0$, $m_j = 1$) under different magnetic fields and collisional energies are calculated. The results show that the elastic cross section is independent of magnetic field, and the inelastic cross section changes with magnetic field, especially at an ultracold temperature. A common rule of thumb is that to successfully implement cooling, the ratio of elastic cross section to inelastic cross section needs to reach 100 at least. The results suggest that it is likely to be a challenging work to perform sympathetic cooling of NH molecule by ultracold Xe atom.

Keywords: Xe-NH complex, sympathetic cooling, cold atom-molecule collision

PACS: 34.50.-s, 34.50.Cx, 34.80.Bm, 31.15.xv

DOI: 10.7498/aps.67.20181321

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10874001, 11374014).

† Corresponding author. E-mail: fengbf@mail.ahnu.edu.cn