

He-BH 碰撞体系微分截面的理论计算*

汪荣凯^{1)†} 沈光先^{2)‡} 杨向东^{3)†}

1) 贵州师范大学化学与材料科学学院, 贵阳 550001)

2) 贵州师范大学物理与电子科学学院, 贵阳 550001)

3) 四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065)

4) 贵州师范大学原子与分子物理研究所, 贵阳 550001)

(2008 年 8 月 18 日收到, 2008 年 11 月 19 日收到修改稿)

用公认精确的密耦近似方法计算了入射能量从 25 至 150 meV 时, He 原子与基态 BH 分子碰撞的弹性微分截面、非弹性微分截面和总微分截面, 进一步讨论了微分截面的变化趋势及特征. 计算结果表明, He-BH 碰撞体系的总微分截面具有原子与双原子分子散射的一般规律和特征, 随着入射能量的增加, 低转动激发态-态微分截面在大角区的散射振荡现象会更加明显.

关键词: He-BH 复合物, 相互作用势, 密耦近似, 微分截面

PACC: 3440, 3450

1. 引言

惰性气体原子与双原子分子的相互作用一直是众多实验和理论研究的课题^[1-10]. 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^[11, 12], 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^[13-15].

Wang 等^[16]使用单、双取代包括非迭代三激发的耦合簇 CCSD(T) 方法, 采用 aug-cc-PV5Z 基组加 3s3p2d1f1g 键函数, 进行了基组重叠误差校正, 高水平地计算了 He-BH 体系的相互作用势, 并拟合出相互作用势的解析式, 描述了 He-BH 体系的相互作用势的各向异性特征. 由于 He-BH 体系散射实验的难度较大, 作者未见该体系的散射实验和理论研究的文献报道. 我们将 He-BH 体系的相互作用势重新构造为便于散射计算的解析形式, 通过理论计算预言散射实验的可观测数据, 这对更深入地了解 He-BH 体系的相互作用机制具有重要的意义.

本文运用公认精确度高的密耦方法^[17, 18]对 He-BH 碰撞体系进行了微分截面的理论计算, 描述其变化的规律和特征, 为进一步研究 He-BH 体系在碰撞

过程中的传能作用等性质^[19]提供理论依据和参考.

2. 计算方法

在 Born-Oppenheimer 近似下, 对于原子 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

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

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

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

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

根据密耦近似, 从 (n_α, j_α) 态跃迁到 (n_β, j_β) 态的微分截面计算公式为

$$\frac{d\sigma_{n_\alpha j_\alpha \rightarrow n_\beta j_\beta}}{d\Omega} = \frac{1}{2j_\alpha + 1} \frac{k_\beta}{k_\alpha} \times \sum_{M_\alpha M_\beta} \left| f_{n_\beta j_\beta M_\beta, n_\alpha j_\alpha M_\alpha}(\theta, \varphi) \right|^2, \quad (3)$$

* 国家自然科学基金(批准号: 10574096)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.

† 通讯联系人. E-mail: xdyang@scu.edu.cn

式中 n_j 和 M 分别为分子的振动量子数、转动量子数及其空间固定轴上的投影量子数, l 表示轨道角量子数, k 表示动量.

从初态 $(n_{\alpha}j_{\alpha})$ 到终态 $(n_{\beta}j_{\beta})$ 的散射振幅为

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

式中

$$A_{l_{\beta}}(n_{\alpha}j_{\alpha}M_{\alpha} \rightarrow n_{\beta}j_{\beta}M_{\beta}) = \sum_J l_{\beta}M_{\alpha} - M_{\beta} j_{\beta}M_{\beta} |JM_{\alpha} T_{n_{\beta}j_{\beta}l_{\beta} \leftarrow n_{\alpha}j_{\alpha}M_{\alpha}}^J. \quad (5)$$

这里, $Y_{l_{\beta}M_{\alpha} \rightarrow M_{\beta}}(\theta, \varphi)$ 是球谐函数, $T_{n_{\beta}j_{\beta}l_{\beta} \leftarrow n_{\alpha}j_{\alpha}M_{\alpha}}^J$ 是跃迁矩阵元, J 表示总角动量量子数.

3. 计算结果及讨论

3.1. He-BH 体系的相互作用势

在 He-BH 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 BH 分子质心的距离, ψ 为 R 向量与 BH 分子键轴间的夹角. $\psi = 0^\circ$ 表示 He-H-B 的线型结构, $\psi = 180^\circ$ 表示 He-B-H 的线型结构, 其中 BH 分子键长取值 $r = 2.32909a_0$ (a_0 为 Bohr 半径). 我们使用 Wang 等^[16] 计算 He-BH 体系的

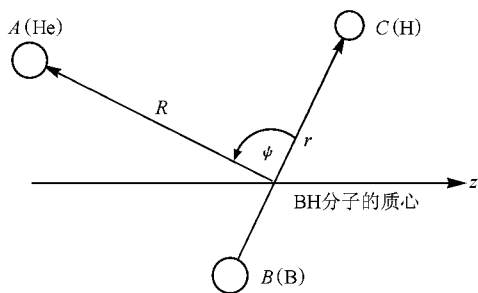


图 1 原子与双原子分子碰撞的几何图形

相互作用能数据, 重新构造了便于散射计算的 He-BH 体系相互作用各向异性势解析表达式为

$$V(R, r, \psi) = \sum_{\lambda=0}^{11} V_{\lambda}(R, r) P_{\lambda}(\cos \psi), \quad (6)$$

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, $P_{\lambda}(\cos \psi)$ 为 Legendre 函数. (6) 式可

用矩阵表示为

$$V(R, r, \psi) = PV_{\lambda}(R, r). \quad (7)$$

将 (7) 式左乘 P^{-1} , 即得

$$V_{\lambda}(R, r) = P^{-1}V(R, r, \psi). \quad (8)$$

径向系数 $V_{\lambda}(R)$ 用五参数的 Murrell-Sorbie 势能函数^[20] 进行非线性最小二乘法拟合, 拟合公式为

$$V(R) = -D_e(1 + a_1\rho + a_2\rho^2 + a_3\rho^3)\exp(-a_1\rho), \quad (9)$$

式中, $\rho = R - R_e$, R 是 He 原子与 BH 分子质心之间的距离, D_e, R_e, a_1, a_2, a_3 是拟合参数. 拟合相互作用势径向系数的拟合参数列于表 1 中, 图 2 是 He-BH 体系相互作用势径向系数 $V_0 \sim V_4$ 随 R 的变化曲线, 图 3 是 He-BH 体系相互作用势能面等势图, 表 2 列出了 He-BH 体系相互作用势的特征参数及与文献 16 的比较.

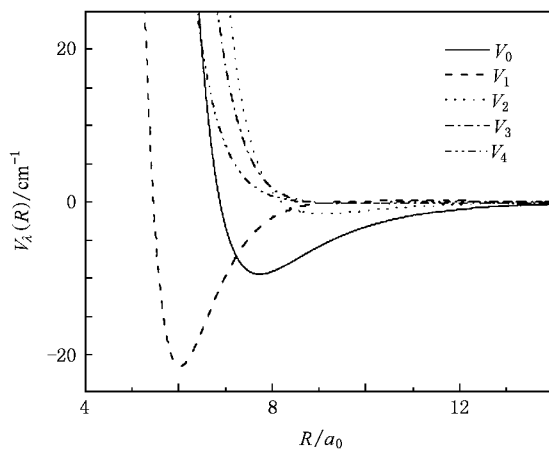


图 2 He-BH 体系相互作用势径向系数 $V_0 \sim V_4$ 随 R 的变化

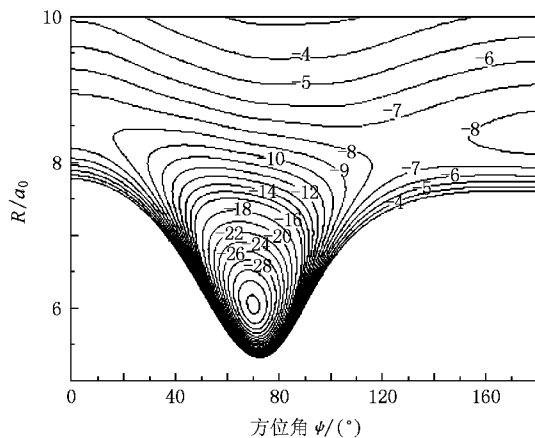


图 3 He-BH 体系相互作用势能面等势图 图中数值的单位为 cm^{-1}

表 1 He-BH 体系相互作用势径向系数的拟合参数

	D_e/cm^{-1}	R_e/a_0	a_1/a_0^{-1}	a_2/a_0^{-2}	a_3/a_0^{-3}
V_0	9.61490	7.71955	1.10153	-0.02529	0.06647
V_1	22.18364	6.00038	1.23565	-0.86125	0.12119
V_2	1.50470	9.04062	1.17184	0.06096	0.07485
V_3	0.24798	9.46720	1.18824	-0.09575	0.08270
V_4	0.15375	9.72273	1.22238	0.31447	0.08415
V_5	0.08186	9.87398	1.25881	0.35835	0.06808
V_6	0.01855	9.98619	1.36065	0.37185	0.06442
V_7	0.00920	10.20137	1.32391	0.42950	0.06513
V_8	0.03862	9.26136	1.31010	0.48841	0.07365
V_9	0.00226	10.20108	1.38055	0.48940	0.06281
V_{10}	0.00033	14.47680	0.94988	0.19411	0.01159
V_{11}	1.97950×10^{-7}	17.26589	1.43532	0.23341	0.01015

表 2 He-BH 拟合势的特征参数及比较

	$\psi = 0^\circ$		$\psi = 70^\circ$		$\psi = 180^\circ$		鞍点		
	R_m/a_0	V_m/cm^{-1}	R_m/a_0	V_m/cm^{-1}	R_m/a_0	V_m/cm^{-1}	$\psi/(\circ)$	R_m/a_0	V_m/cm^{-1}
本文	8.50	-8.7090	6.04	-34.5225	8.37	-8.4009	130	8.19	-7.67
文献 [6]			6.04	-34.4389	8.35	-8.5511	132	8.20	-7.80
误差			0	-0.0836	0.02	0.1502	-2	-0.01	0.13
相对误差/%			0.00	0.24	0.24	-1.76	-1.52	-0.12	-1.67

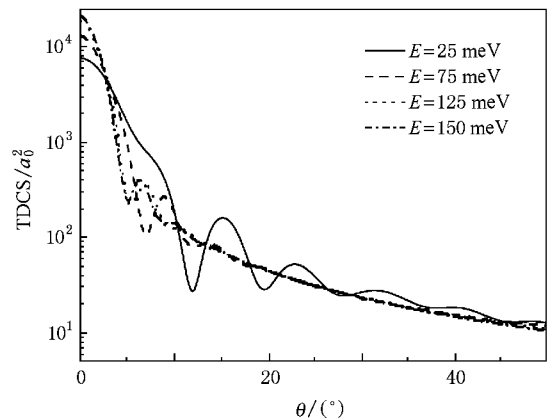
3.2. 散射截面的计算

我们用密耦方法计算了在 He-BH 拟合势下, 入射 He 原子能量从 25 至 150 meV 时分别与基态 BH 分子碰撞的弹性微分截面 (EDCS)、转动激发态-态微分截面 (rotational excitation state-to-state differential cross section)、非弹性微分截面 (IDCS) 和总微分截面 (TDCS). 在计算结果中仅列出了当入射 He 原子能量分别为 25、75、125 和 150 meV 时, He-BH 碰撞体系微分截面的信息, 根据计算结果和分析, 进一步讨论了微分截面随散射角 θ 的变化规律和特征.

图 4 是入射 He 原子能量分别为 25、75、125 和 150 meV 时, He-BH 碰撞体系 TDCS 随散射角 θ 的变化曲线. 从图 4 可以看到, TDCS 在散射角 $\theta = 0^\circ$ 时最大, 并随着入射能量的增加而增大. 在一定的入射 He 原子能量下, 散射角 θ 从 0° 开始逐渐增大, TDCS 迅速减小, 并伴有衍射振荡现象, 而且角度越大, 振幅越小, 此后振荡逐渐消失, 并且 TDCS 也逐渐减小.

当入射 He 原子能量分别为 25、75、125 和 150 meV 时, TDCS 在散射振荡区的第一极小值和第二极小值的位置对应的散射角 θ 分别约为 12° 、 7° 、 5° 、 5°

从图 2 可以看出, 在径向系数随 R 的变化曲线中, 径向系数 V_0 (即球平均势) 的势阱深度明显小于各向异性的径向系数 V_1 , 说明 He-BH 体系的相互作用表现出很强的各向异性特征. 从表 2 可以看出, 我们拟合 He-BH 体系相互作用势的特征参数在方位角 ψ 为 0° 、 70° 和 180° 的势能极小值位置 R_m 分别为 $8.50a_0$ 、 $6.04a_0$ 和 $8.37a_0$, 势能极小值 V_m 分别为 -8.7090 、 -34.5225 和 -8.4009 cm^{-1} , 鞍点位置为 $\psi = 130^\circ$, $R_m = 8.19a_0$, 势能值为 -7.67 cm^{-1} , 与文献 [16] 的结果符合很好, 势能极小值位置相对误差绝对值最大为 0.24%, 势能极小值相对误差绝对值最大为 1.76%.

图 4 在不同入射原子能量时, TDCS 随散射角 θ 的变化

和 20° 、 12° 、 9° 、 8.5° , 第一极小值和第二极小值位置差即散射振荡间隔 $\Delta\theta$ 分别为 8° 、 5° 、 4° 和 3.5° . 计算结果表明, 随着入射能量的增加, TDCS 在振荡区的极小值和极大值位置逐渐减小, 同时散射振荡间隔 $\Delta\theta$ 也逐渐减小. 散射振荡间隔 $\Delta\theta$ 与碰撞体系折合质量 μ 、相对碰撞速度 v_R 和球平均势能零点位置 σ 的关系如下^[21]:

$$\Delta\theta \approx \frac{\pi\hbar}{\mu v_R \sigma}. \quad (10)$$

此时, μ, σ 为常数分别为 $3.002534, 6.866a_0$, 经简单计算得到散射振荡间隔 $\Delta\theta$ 分别为 $8.3^\circ, 4.8^\circ, 3.7^\circ$ 和 3.4° , 两者比较的结果符合很好. 从图 4 还可以看到, 当入射能量不同时, 计算得到 He-BH 碰撞体系 TDCS 随散射角 θ 的变化规律及特征均与 He-HF, He-O₂, He-NO, He-N₂ 等碰撞体系散射实验和理论研究^[1, 22]的结果一致. 以上计算结果说明该拟合势正确反映了 He-BH 体系相互作用势的各向异性特征, 用于 He-BH 碰撞体系的散射计算是可靠的.

图 5—图 8 是入射 He 原子能量分别为 25, 75, 125 和 150 meV 时, He-BH 碰撞体系 EDCS, IDCS 和 TDCS 随散射角 θ 的变化曲线. 从图 5 可以看出, 当入射能量 25 meV 时, 从 EDCS 和 IDCS 随散射角 θ 的变化曲线中可以看到, 当散射角 $\theta \leq 42^\circ$ 和 $\theta \geq 67^\circ$ 的

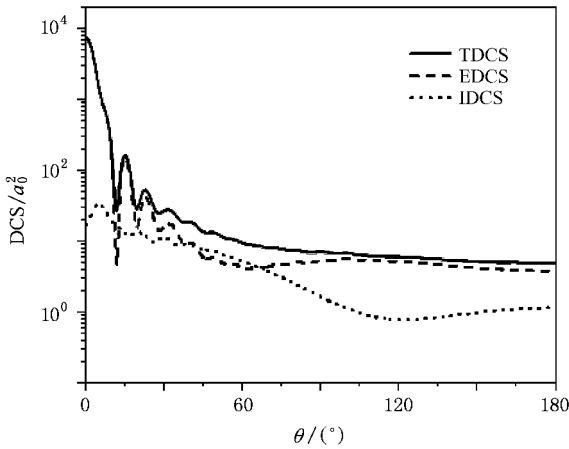


图 5 入射原子能量为 25 meV 时, EDCS, IDCS 和 TDCS 随散射角 θ 的变化

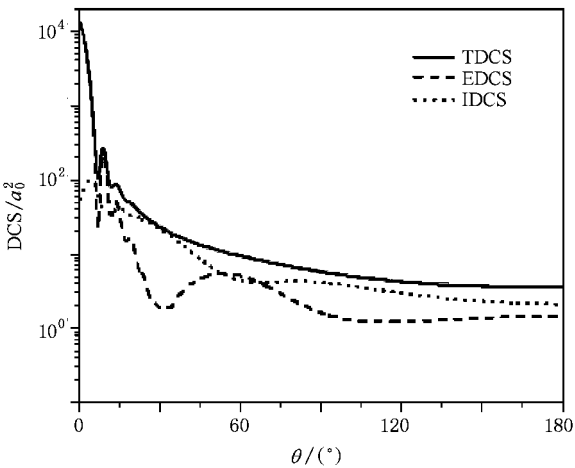


图 6 入射原子能量为 75 meV 时, EDCS, IDCS 和 TDCS 随散射角 θ 的变化

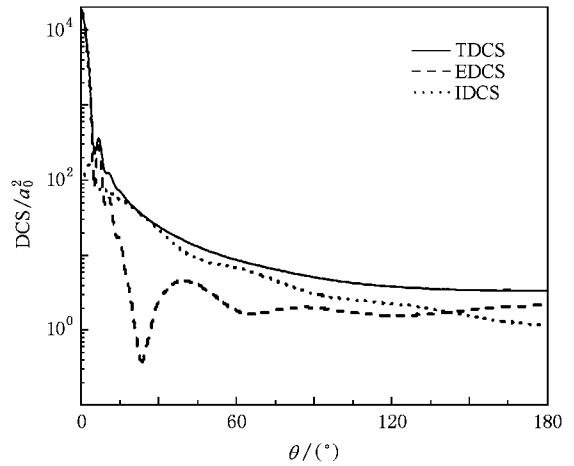


图 7 入射原子能量为 125 meV 时, EDCS, IDCS 和 TDCS 随散射角 θ 的变化

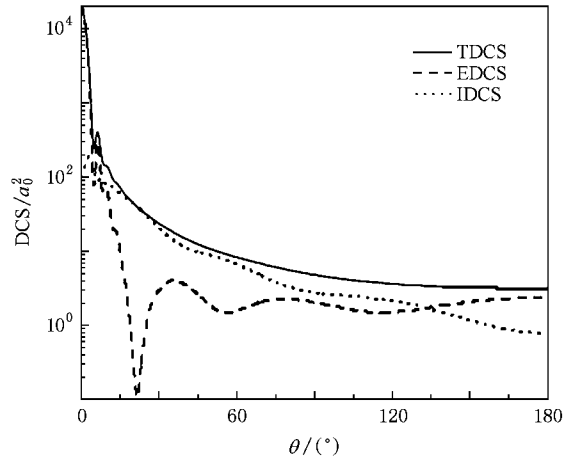


图 8 入射原子能量为 150 meV 时, EDCS, IDCS 和 TDCS 随散射角 θ 的变化

散射区, 除 EDCS 第一振荡极小值处 ($\theta = 12^\circ$) 与 IDCS 有交叉外, EDCS 大于 IDCS 值, 仅有较小的散射角区域 $\theta = 42^\circ - 67^\circ$, EDCS 值小于 IDCS 值. 从图 5 还可以看出, 在低入射能量时, 散射角 θ 从 0° 至 180° , EDCS 的角分布为主要成分. 随着入射能量的增加, IDCS 大于 EDCS 的角分布区域有显著增加, 并且在散射角 θ 约从 6° 至 140° 的范围, EDCS 值明显地小于 IDCS 值. 在较高入射能量 (150 meV) 时 (图 8), EDCS 的角分布在散射角 $\theta = 22^\circ$ 有一个最小值 ($0.0857a_0^2$), 形成一个 EDCS 的相对“暗角”; 计算结果表明, 随着入射能量的增加, “暗角”的微分截面值逐渐减小, “暗角”对应的散射角也逐渐减小.

当入射 He 原子能量分别为 25, 75, 125 和 150 meV 时, 在 He-BH 碰撞体系中, BH 分子可产生从基

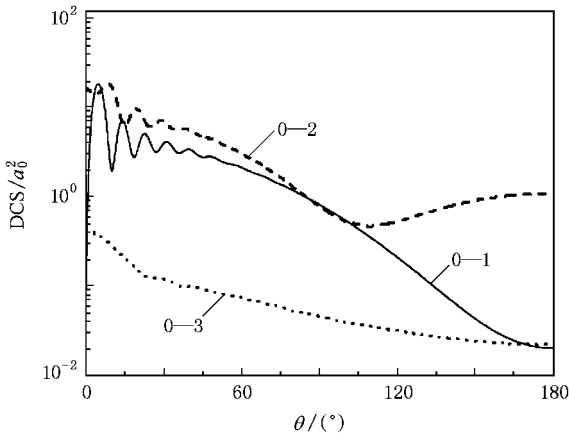


图 9 入射原子能量为 25 meV 时,转动激发态-态微分截面随散射角 θ 的变化

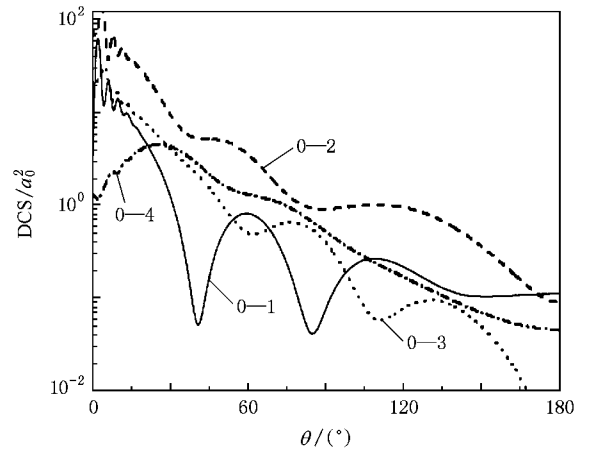


图 12 入射原子能量为 150 meV 时,转动激发态-态微分截面随散射角 θ 的变化

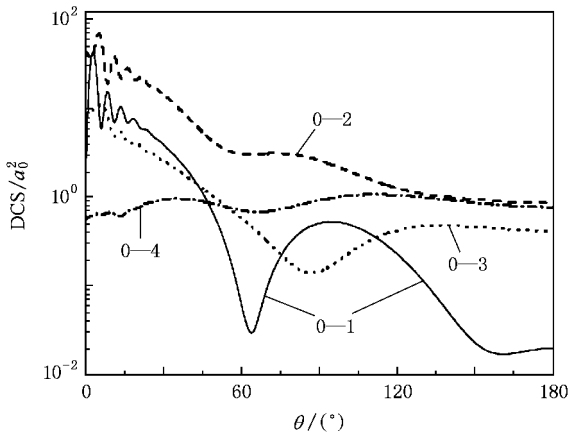


图 10 入射原子能量为 75 meV 时,转动激发态-态微分截面随散射角 θ 的变化

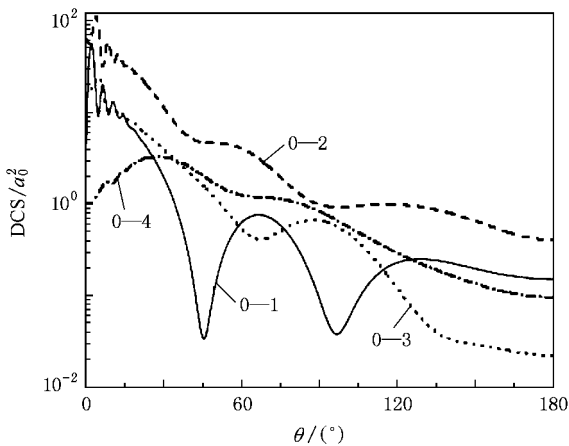


图 11 入射原子能量为 125 meV 时,转动激发态-态微分截面随散射角 θ 的变化

态跃迁的转动激发态-态微分截面数分别为 3, 6, 8 和 9. 以下我们仅讨论前四个微分截面值较大的转动激发态-态微分截面, 即 $j_\alpha = 0 \rightarrow j_\beta = 1, 2, 3, 4$ 跃迁的转动激发态-态微分截面随散射角 θ 的变化, 并将计算结果示于图 9—图 12 中.

从图 9—图 12 可以看出: 在转动激发态-态微分截面随散射角 θ 的变化曲线中, 低转动激发态-态微分截面所具有的共同特征是 $j_\alpha = 0 \rightarrow j_\beta = 1$ 和 $j_\alpha = 0 \rightarrow j_\beta = 2$ 跃迁的低转动激发态-态微分截面在散射角约 $\theta < 45^\circ$ 的小角区具有明显规律的散射振荡. $j_\alpha = 0 \rightarrow j_\beta \geq 3$ 跃迁的转动激发态-态微分截面在小角区的散射振荡不明显. 随着入射能量的增加, 转动激发态-态微分截面在小角区的微分截面值逐渐增大, 散射振荡区域逐渐减小, 散射振幅也逐渐减弱.

在低入射能量(25 meV)时(图 9), $j_\alpha = 0 \rightarrow j_\beta = 1$ 和 $j_\alpha = 0 \rightarrow j_\beta = 2$ 跃迁的低转动激发态-态微分截面除在小角区的散射振荡现象外, $j_\alpha = 0 \rightarrow j_\beta = 1$ 跃迁的转动激发态-态微分截面在振荡区域后, 微分截面值随散射角的增加而减小, 至散射角 $\theta = 180^\circ$ 时, 微分截面值最小为 $2.017 \times 10^{-2} a_0^2$. 而 $j_\alpha = 0 \rightarrow j_\beta = 2$ 跃迁的转动激发态-态微分截面在振荡区域后, 微分截面值随散射角的增加而减小, 在散射角 $\theta = 105^\circ$ 时, 微分截面最小值为 $4.656 \times 10^{-1} a_0^2$. 此后, 微分截面值随散射角的增加而逐渐增大. $j_\alpha = 0 \rightarrow j_\beta = 3$ 跃迁的转动激发态-态微分截面值则随散射角的增加而减小.

随着入射原子能量的增加, 低转动激发态-态微

分截面将形成大角的散射振荡. 对于 $j_\alpha = 0 \rightarrow j_\beta = 1$ 跃迁的转动激发态-态微分截面, 当入射原子能量为 25 meV 时, 没有大角散射振荡. 当入射原子能量为 75 meV 时(图 10), 已形成一次大角散射振荡, 极小值的位置为 $\theta = 64^\circ$, 在 $\theta = 161^\circ$ 处又有另一极小值显现. 当入射原子能量为 125 meV 时(图 11), 形成二次大角散射振荡, 大角散射振荡极小值的位置 θ 分别为 46° 和 97° , 振荡间隔为 51° . 当入射原子能量为 150 meV 时(图 12), 大角散射振荡极小值的位置又分别为 41° 和 85° , 振荡间隔为 44° . $j_\alpha = 0 \rightarrow j_\beta = 2$ 和 $j_\alpha = 0 \rightarrow j_\beta = 3$ 跃迁的转动激发态-态微分截面, 在较高入射能量时, 也具有大角散射振荡的特征. 计算结果表明, 随着入射能量的增加, 低转动激发态-态微分截面大角散射振荡特征会更加明显, 大角散射振荡极小值的位置逐渐减小, 同时, 大角散射振荡间隔也逐渐减小.

从图 9—图 12 还可以看出, 在 He-BH 碰撞体系的转动激发态-态微分截面中, $j_\alpha = 0 \rightarrow j_\beta = 2$ 跃迁

的转动激发态-态微分截面的角分布从散射角 $\theta = 0^\circ$ — 180° 都有较大的微分截面值. 因此, 该转动激发对 IDCS 有重要的贡献.

4. 结 论

本文重新构造了 He-BH 体系的相互作用势模型, 用密耦方法计算了 He-BH 碰撞体系的微分截面并进行了分析. He-BH 碰撞体系在一定的入射原子能量下, TDCS 在散射角 $\theta = 0^\circ$ 时最大. 随着散射角的逐渐增大, TDCS 迅速减小, 并伴有衍射振荡现象, 而且角度越大, 振幅越小, 此后振荡逐渐消失, 并且 TDCS 也逐渐减小. 这符合原子与双原子分子散射的一般规律和特征. He-BH 碰撞体系的低转动激发态-态微分截面, 不仅有小角区的散射振荡, 随着入射能量的增加大角区的散射振荡现象会更加明显. He-BH 碰撞体系 $j_\alpha = 0 \rightarrow j_\beta = 2$ 跃迁的转动激发态-态微分截面对 IDCS 具有重要的贡献.

- [1] Boughton C V, Miller R E, Vohralik P F, Watts R O 1986 *Mol. Phys.* **58** 827
- [2] Vohralik P F, Miller R E, Watts R O 1989 *J. Chem. Phys.* **90** 2182
- [3] Patel K, Butler P R, Ellis A M, Wheeler M D 2003 *J. Chem. Phys.* **119** 909
- [4] Belov S P, McElmurry B A, Lucchese R R, Bevan J W, Leonov I 2003 *Chem. Phys. Lett.* **370** 528
- [5] Lucchese R R, Bevan J W, Lovas F J 2004 *Chem. Phys. Lett.* **398** 544
- [6] Newton D P, Bichoutskaia E, Wheatley R J 2004 *Chem. Phys. Lett.* **393** 70
- [7] Kim Y, Meyer H, Alexander M H 2004 *J. Chem. Phys.* **121** 1339
- [8] Fajín J L C, Cacheiro J L, Fernández B 2004 *J. Chem. Phys.* **121** 4599
- [9] Taylor B K, Hinde R J 2005 *J. Chem. Phys.* **122** 074308
- [10] Rivera-Rivera L A, McElmurry B A, Belov S P, Lucchese R R, Bevan J W 2007 *Chem. Phys. Lett.* **444** 9
- [11] Ovchinnikova M Y 1985 *Chem. Phys.* **93** 101
- [12] Smith M J, Rabitz H 1991 *Chem. Phys.* **150** 361
- [13] Wang R K, Linghu R F, Yang X D 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 2067 (in Chinese) [汪荣凯、令狐荣峰、杨向东 2007 物理学报 **56** 2067]
- [14] 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]
- [15] 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、令狐荣峰、杨向东 2008 物理学报 **57** 4138]
- [16] Wang Z Q, Gong M Y, Feng E Y, Cui Z F 2007 *Chem. Phys. Lett.* **443** 237
- [17] Choi B H, Tang K T 1975 *J. Chem. Phys.* **63** 1775
- [18] 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)]
- [19] 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
- [20] 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]
- [21] Bernstein R B 1979 *Atom-Molecule Collision Theory: A Guide for the Experimentalist* (New York: A Division of Plenum Publishing Corporation) p33
- [22] Beneventi L, Casavecchia P, Volpi G G 1986 *J. Chem. Phys.* **85** 7011

Theoretical calculation of the differential cross section for He-BH collision system *

Wang Rong-Kai^{1)✉} Shen Guang-Xian^{2)✉} Yang Xiang-Dong^{3)†}

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

²⁾ School of Physics and Electronic Science , Guizhou Normal University , Guiyang 550001 , China)

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

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

(Received 18 August 2008 ; revised manuscript received 19 November 2008)

Abstract

For the first time , the elastic , inelastic and total differential cross sections for collision between He atom and the ground state of BH molecule have been calculated by using accepted exact close-coupling approximation method. The calculation is performed at the incident energies from 25 to 150 meV. Further , the change tendency and characteristics of the differential cross sections have been discussed. The calculated results show that the total differential cross section is the general rule and characteristics of collision between an atom and a diatomic molecule , the phenomenon of the scattering oscillation at large angles is more evident along with increase of the incident energy for low-lying rotational excitation state-to-state differential cross sections in He-BH collision system.

Keywords : He-BH complex , interaction potential , close coupling approximation , differential cross section

PACC : 3440 , 3450

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China(Grant No. 10574096) and the Doctoral Program Foundation of Institution of Higher Education of China(Grant No. 20050610010).

† Corresponding author. E-mail : xdyang@scu.edu.cn