

He-LiH体系转动非弹性碰撞的理论研究

凤尔银; 黄武英; 董书宝; 崔执凤

安徽师范大学物理系, 芜湖 241000; 中国科学院安徽光学精密机械研究所, 合肥 230031

摘要:

在单双迭代耦合簇CCSD(T)势能面的基础上,运用密耦方法讨论了He-LiH体系的转动非弹性碰撞.计算结果表明,对LiH分子 $j=0 \rightarrow j'$ 跃迁,跃迁截面主要由各向异性的短程相互作用和长程的“软”排斥共同作用的结果,未见明显的长程吸引势贡献.态-态跃迁总截面表现出振荡结构,长程“软”排斥分波只对 $j=0$ 向 $j'=1, 2, 3$ 的跃迁总截面有较大贡献,而 $j' \geq 4$ 跃迁的积分截面则几乎由各向异性的短程部分贡献.

关键词: He-LiH体系 转动非弹性碰撞 密耦方法 势能面

收稿日期 2004-07-13 修回日期 2004-09-29 网络版发布日期 2005-03-15

通讯作者: 凤尔银 Email: fengbf@mail.ahnu.edu.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(1710KB)

服务与反馈

把本文推荐给朋友

加入我的书架

加入引用管理器

引用本文

Email Alert

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ He-LiH体系

▶ 转动非弹性碰撞

▶ 密耦方法

▶ 势能面

本文作者相关文章

▶ 凤尔银

▶ 黄武英

▶ 董书宝

▶ 崔执凤