



HAL
open science

Excitation ro-vibrationnelle du fluorure de césium (CsF) induite par collision avec He

Cheikh T Bop, Kamel Hammami, Ndeye Arame Diago, Nejmeddine Jaidane

► To cite this version:

Cheikh T Bop, Kamel Hammami, Ndeye Arame Diago, Nejmeddine Jaidane. Excitation ro-vibrationnelle du fluorure de césium (CsF) induite par collision avec He. Journées sur la dynamique moléculaire, Nov 2014, Sousse, Tunisia. hal-04072204

HAL Id: hal-04072204

<https://hal.science/hal-04072204>

Submitted on 17 Apr 2023

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Cheikh T. Bop,^{*} K. Hammami, Ndeye A. B. Faye and N. Jaïdane
cheikh@titidiane.bop@ucad.edu.sn

Introduction

L'étude du transfert d'énergie ro–vibrationnelle induit par collision a attiré une attention particulière ces quatre dernières décennies. Cela a été motivé par ses applications innombrables dans divers domaines tels que l'astrophysique, la physique du plasma et la chimie des molécules froides. Dans ce travail, pour une meilleure interprétation de l'expérience de [Borkenhagen et al.](#), nous avons étudié l'excitation ro–vibrationnelle du système collisionnel CsF-He.

Méthodes

Ce travail est effectué au moyen des calculs *ab initio* en deux étapes:

★ La 3D-SEP du système CsF-He a été calculée avec la méthode de clusters couplés standard incluant un traitement perturbatif de la triple excitation (CCSD(T)) implémentée dans le logiciel MOLPRO 2010 ([Werner et al.](#)). Les atomes F et He ont été décrits avec la base aVQZ et le césium avec le pseudo potentiel relativiste à 9 électrons de valence ECP46MDF. A ces bases, ont été ajoutées des fonctions de liaison placées à mi-distance entre le centre de masse de CsF et He. L'erreur de superposition des bases a été corrigée avec la procédure du contre poids.

★ En utilisant cette 3D-SEP, nous avons calculé les sections efficaces ro–vibrationnelles de CsF induites par collision avec He avec la méthode close–coupling implémentée dans le programme MOLSCAT ([Hutson & Green](#)) pour des énergies thermiques allant jusqu'à 500 cm^{-1} . Des tests de convergence ont été effectués pour fixer les paramètres de MOLSCAT à savoir R_{max} , R_{min} , STEP et j_{max} .

Résultats et Discussions

La [Fig. 1](#) présente une coupe bidimensionnelle de la SEP, on note une forte anisotropie de l'interaction entre 0° (approche de He du côté de F) et 180° (approche de He du côté de Cs). Cette SEP présente deux puits de potentiel, le plus profond est localisé à $\theta \approx 75^\circ$ et $R = 6.5 a_0$ avec une profondeur de $\sim 60 \text{ cm}^{-1}$. Les coefficients radiaux de la 3D-SEP (qui seront utilisés dans les calculs dynamiques) sont représentés à la [Fig. 2](#). Pour $\lambda > 0$ le terme V_{001} est dominant. La [Fig. 3](#) montre des courbes de sections efficaces rotationnelles pour des transitions $0 \rightarrow j$ (panneau gauche) et $\Delta j = 1$ (panneau droit). Des résonances apparaissent aux faibles énergies cinétiques. Ce comportement provient du fait que l'hélium soit temporairement piégé autour du puits de potentiel où le complexe CsF-He forme des états quasi-liés. A partir du panneau gauche, on observe une règle de sélection en faveur des transitions vers des valeurs de j impaires ce qui provient de la dominance du terme V_{001} .

Les sections efficaces ro–vibrationnelles obtenues dans ce travail ont été comparées avec les résultats expérimentaux de [Borkenhagen et al.](#) aux [Tab. 1](#) et [2](#), un bon accord est observé.

Remerciements

Nous remercions l'ICTP qui a financé ce travail à travers le programme NET 45.

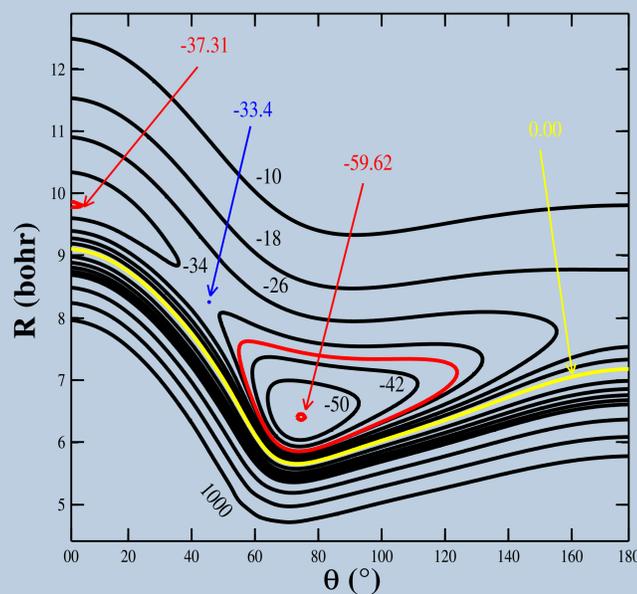


Fig. 1: Contours de la surface d'énergie potentielle bidimensionnelle du système $CsF - He$ en fonction de R et θ .

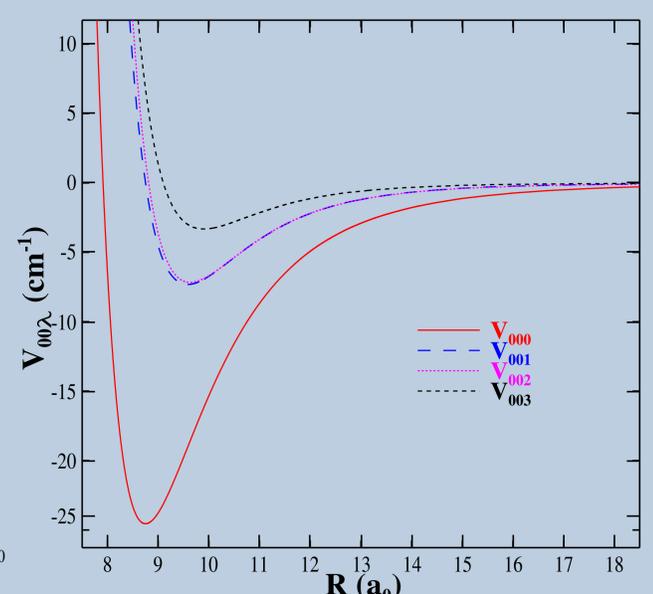


Fig. 2: Expansion des coefficients radiaux $V_{00\lambda}$ (pour $\lambda = 0, 1, 2, 3$) du système $CsF - He$ en fonction de R .

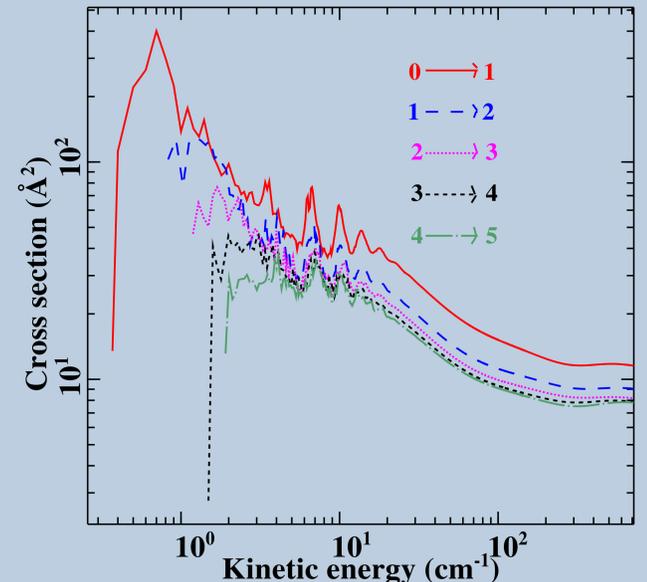
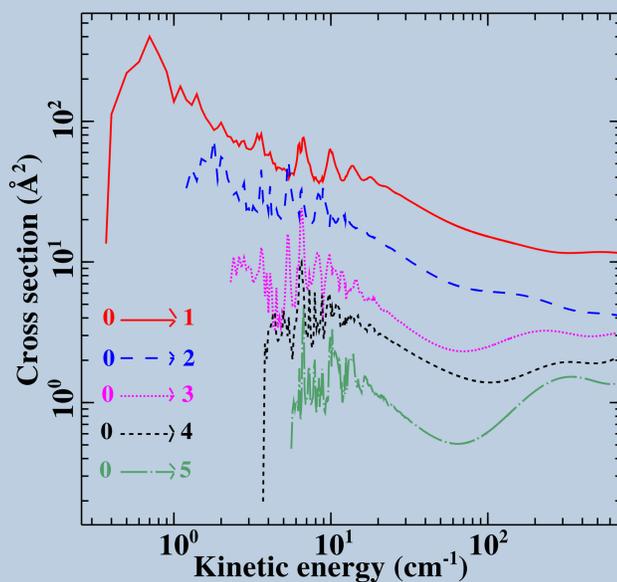


Fig. 3: Sections efficaces d'excitations rotationnelles $0 \rightarrow j$ (panel gauche) et $\Delta j = 1$ (panel droit) de CsF induites par collision avec He en fonction de l'énergie cinétique.

Tab. 1: Sections efficaces intégrales (Å^2) de transitions entre sous-niveaux rotationnels de CsF en collision avec He déterminées à 544 et 556 cm^{-1} .

Transitions $(j, m) \rightarrow (j', m')$	Expérience Borkenhagen et al. (1979)	Théorie		
		Meyer and Toennies (1982)	Ce travail	
$(1, 0) \rightarrow (2, 0)$	17 ± 4^B	—	—	$3,970^B$
$(2, 0) \rightarrow (1, 0)$	3 ± 1^A	—	—	$3,684^A$
	$3,9 \pm 0,5^B$	—	—	$3,676^B$
$(2, 0) \rightarrow (3, 0)$	$7,2 \pm 2,5^A$	$5,7^C$	$2,9^D$	$1,1^E$
$(3, 0) \rightarrow (2, 0)$	3 ± 1^A	—	—	$3,475^A$
$(3, 0) \rightarrow (1, 0)$	$0,9 \pm 0,3^A$	$1,5^C$	$0,8^D$	$1,6^E$
$(1, 1) \rightarrow (2, 0)$	$2,9 \pm 2^B$	—	—	$1,265^B$
$(2, 0) \rightarrow (3, 1)$	7 ± 2^B	—	—	$2,444^B$
$(1, 1) \rightarrow (1, 0)$	—	—	—	$0,543^B$
$(3, 0) \rightarrow (3, 1)$	—	—	—	$0,151^B$

^A Faible résolution de l'appareil (configuration A), où la vitesse du faisceau moléculaire V_{CsF} est de 480 m.s^{-1} , ce qui donne une énergie de collision de 544 cm^{-1} .
^B Haute résolution de l'appareil (configuration B), où la vitesse du faisceau moléculaire V_{CsF} est de 550 m.s^{-1} , ce qui correspond à une énergie de collision de 556 cm^{-1} .
^C SLS appliquée au potentiel analytique de [Meyer and Toennies \(1982\)](#) tronqué à D_{21} .
^D IOS appliquée au potentiel analytique de [Meyer and Toennies \(1982\)](#) tronqué à D_{21} .
^E IOS appliquée au potentiel analytique de [Meyer and Toennies \(1982\)](#) tronqué à D_{95} .

Tab. 2: Sections efficaces intégrales (Å^2) de transitions entre sous-niveaux ro–vibrationnels de CsF en collision avec He déterminées à 550 cm^{-1} .

Transitions $(\nu, j, m) \rightarrow (\nu', j', m')$	σ	σ_{tot}
$(0, 1, 0) \rightarrow (0, 2, 0)$	4,357	—
$(0, 1, 0) \rightarrow (1, 2, 0)$	$5,728 \cdot 10^{-3}$	—
$(1, 1, 0) \rightarrow (0, 2, 0)$	$1,602 \cdot 10^{-2}$	10,186
$(1, 1, 0) \rightarrow (1, 2, 0)$	5,807	—
$(j, m) \rightarrow (j', m')$	$(1, 0) \rightarrow (2, 0)$	$17 \pm 4^*$
$(\nu, j, m) \rightarrow (\nu', j', m')$	$(0, 2, 0) \rightarrow (0, 3, 0)$	4,097
	$(0, 2, 0) \rightarrow (1, 3, 0)$	$5,140 \cdot 10^{-3}$
	$(1, 2, 0) \rightarrow (0, 3, 0)$	$1,443 \cdot 10^{-2}$
	$(1, 2, 0) \rightarrow (1, 3, 0)$	5,442
$(j, m) \rightarrow (j', m')$	$(2, 0) \rightarrow (3, 0)$	$7,2 \pm 2,5^*$
$(\nu, j, m) \rightarrow (\nu', j', m')$	$(0, 2, 0) \rightarrow (0, 3, 1)$	2,742
	$(0, 2, 0) \rightarrow (1, 3, 1)$	$3,439 \cdot 10^{-3}$
	$(1, 2, 0) \rightarrow (0, 3, 1)$	$9,654 \cdot 10^{-3}$
	$(1, 2, 0) \rightarrow (1, 3, 1)$	3,633
$(j, m) \rightarrow (j', m')$	$(2, 0) \rightarrow (3, 1)$	$7,0 \pm 2,0^*$

* renvoie à l'étude expérimentale de [Borkenhagen et al. \(1979\)](#)

Conclusion

Dans ce travail, nous avons calculé une surface d'énergie potentielle tridimensionnelle de haute précision du système CsF-He à partir de laquelle des sections efficaces ro–vibrationnelles ont été déterminées. Nos résultats, comparés à ceux de [Meyer & Toennies](#), ont offert une meilleure interprétation de l'expérience de [Borkenhagen et al.](#) Les règles de sélection observées peuvent servir de modèle pour les halogénures d'alcalin d'intérêt astrophysique tels que NaCl et KCl.

Références

- Borkenhagen, U., Malthan, H., and Toennies, J. P. (1979), *J. Chem. Phys.*, 71(4), 1722–1739.
Hutson, J. and Green, S. (1994). Molscat computer code, version 14.
Meyer, G. and Toennies, J. P. (1981), *J. Chem. Phys.*, 77(2) :798–816.
Werner, H.-J., Knowles, P., Knizia, G., et al. (2010). Molpro, version 2010.1 ://www.molpro.net.