

# 低能电子与氢分子碰撞的振动激发 积分散射截面的研究\*

王 斌<sup>1)</sup> 冯 灏<sup>2)†</sup> 孙卫国<sup>1)‡</sup> 曾阳阳<sup>1)</sup> 戴 伟<sup>1)</sup>

1) 四川大学原子分子物理研究所, 成都 610065)

2) 四川大学物理科学与技术学院, 成都 610065)

(2008 年 11 月 20 日收到, 2008 年 12 月 14 日收到修改稿)

采用振动密耦合方法, 研究了低能电子与 H<sub>2</sub> 分子碰撞的振动激发积分散射截面. 研究表明, 使用 18 个 Morse 振动波函数、5 个分波和 4 个对称性可以得到收敛的 0→0, 0→1, 0→2 和 0→3 积分散射截面; 而且振动波函数的性质和振动能级的精确性会直接影响振动激发散射势能和振动激发积分散射截面. 计算结果与实验符合得很好.

关键词: 电子散射, 振动激发, H<sub>2</sub> 分子, 积分截面

PACC: 3480B, 3480D

## 1. 引 言

低能电子与 H<sub>2</sub> 碰撞积分散射截面的研究是了解碰撞过程中 H<sub>2</sub> 分子内部结构特征和电子运动的重要手段. 它在高分辨电子入射发射光谱<sup>[1]</sup>、天文物理<sup>[2]</sup>、等离子体膨胀过程<sup>[3]</sup>等研究中也有广泛运用. 描述电子与分子碰撞研究的代表性理论方法有 Schwinger 多通道方法<sup>[4]</sup>、一阶绝热近似理论<sup>[5]</sup>、Brown 等提出的 Z 矩阵<sup>[6,7]</sup>、R 矩阵<sup>[8,9]</sup>、Complex Kohn 理论<sup>[10,11]</sup>和密耦合方法<sup>[12,13]</sup>. 比较具有代表性的实验是飞行时间实验<sup>[14]</sup>、高分辨电子单色仪实验<sup>[15]</sup>、电子光学系统实验<sup>[16]</sup>、交叉光束实验<sup>[17]</sup>和 swarm device 实验<sup>[18]</sup>. 关于低能电子与氢分子碰撞的低振动激发态散射也有一些理论研究, 如 ab initio 非绝热极化势<sup>[19]</sup>、球高斯电荷分布极化势<sup>[20]</sup>、一阶绝热近似理论<sup>[21]</sup>、固定核近似绝热交换极化势<sup>[22]</sup>、高阶波恩解析方法<sup>[23]</sup>等等. 本文在 Morrison 等<sup>[5]</sup>工作的基础上采用孙卫国等<sup>[24]</sup>改进过的振动散射密耦合程序研究了低能电子与 H<sub>2</sub> 碰撞的振动激发散射.

振动激发散射研究中的一个重要内容是选择体

系的振动势能和振动波函数. 不同的振动波函数会导致计算出来的耦合散射势能和散射阈能不同. 以前关于电子与氢分子振动激发散射的理论研究中用的振动波函数主要来自解 Hartree-Fock 势的薛定谔方程(nuclear Schrödinger equation, 简称 NSE) (例如 Elza 的计算<sup>[25]</sup>)和简谐振子(simple harmonic oscillator, 简称 SHO)模型(例如 Trail 等的计算<sup>[26]</sup>). 本文采用 Morse 振动波函数<sup>[27,28]</sup>对低能电子与氢分子碰撞的振动激发积分散射截面进行了研究.

## 2. 散射理论

应用定核近似模型(fixed-nuclear), 微分-积分形式的振动密耦合散射方程可表示为<sup>[29]</sup>

$$\left[ \frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{\mathcal{K}(l+1)}{2r^2} - V_{vl, \nu'l'}^A(r) + \frac{1}{2} k_\nu^2 \right] u_{vl, \nu_0 l_0}^A(r) = \sum_{\nu', l' \neq \nu, l} [V_{vl, \nu'l'}^A(r) u_{\nu' l', \nu_0 l_0}^A(r)], \quad (1)$$

其中  $V_{vl, \nu'l'}^A(r)$  为总的相互作用势能矩阵元;  $u_{vl, \nu_0 l_0}^A(r)$  是径向散射函数;  $r$  是散射电子的空间坐标;  $\nu_0, \nu$  和  $\nu'$  分别是初始振动量子数、末振动量子数和耦合态振动量子数;  $l_0, l$  和  $l'$  分别是初始角动

\* 国家自然科学基金(批准号: 10504022, 10774105)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: fenghao@mail.xhu.edu.cn

‡ 通讯联系人. E-mail: weiguosun@x263.net

量子数、末角动量量子数和耦合态角动量量子数;  
 $k_v^2/2$  是散射电子的动能

$$k_v^2 = k_0^2 - 2(\epsilon_v - \epsilon_0), \quad (2)$$

其中  $k_0^2/2$  是入射电子能量,  $\epsilon_v$  是靶分子在第  $v$  个振动态的能量,  $\epsilon_0$  是基态振动能量. 总的耦合势能为

$$V_{st}^{\Lambda, \nu, l}(r) = \phi_\nu(R) Y_l^\Lambda(\hat{r}) |V_{\text{tot}}| \phi_\nu(R) Y_l^\Lambda(\hat{r}) \quad (3)$$

式中的  $R$  是绝热分子的核间距. 总的势能  $V_{\text{tot}}(r, R)$  表示如下<sup>[30, 31]</sup>:

$$V_{\text{tot}}(r, R) = V_{\text{st}} + V_{\text{ex}} + V_{\text{cp}} \\ = \sum_{\lambda=0}^{\infty} \nu_\lambda(r, R) P_\lambda(\cos\theta_e). \quad (4)$$

式中包含了静电势能  $V_{\text{st}}$ 、交换势能  $V_{\text{ex}}$  和关联-极化势能  $V_{\text{cp}}$ . 由于同核双原子分子的对称性, 所有奇数项  $\lambda$  的贡献为 0. 静电势能  $V_{\text{st}}$  来自入射电子与靶分子的静电相互作用; 交换势能  $V_{\text{ex}}$  是散射过程中 Pauli 不相容原理反对称性的结果; 关联-极化势能  $V_{\text{cp}}$  是入射电子引起的靶电子云密度的极化变形产生的. 我们对本质上是非局域性的交换势和极化势采用了局域化近似, 分别使用可调自由电子气 (the tuned free electron gas exchange, 简称 TFEGE)<sup>[32]</sup> 模型和优于绝热极化势 (the better than adiabatic dipole, 简称 BTAD)<sup>[32, 33]</sup> 模型来表示它们.

根据渐近区间的初始条件, 可以从 (1) 式得到  $K$  矩阵<sup>[29]</sup>

$$K_{\nu, \nu_0}^{\Lambda} = -\frac{2}{\sqrt{k_\nu k_0}} \sum_{\nu'} \int_0^\infty j_l(k_\nu, r) V_{\nu, \nu'}^{\Lambda}(r) u_{\nu, \nu'}^{\Lambda}(r) dr, \quad (5)$$

利用  $S, T$  和  $K$  矩阵的关系<sup>[29]</sup>

$$S^{\Lambda} = 1 + 2iT^{\Lambda} = (1 + iK^{\Lambda})(1 - iK^{\Lambda})^{-1}, \quad (6)$$

可以用  $T$  矩阵将积分截面表示为<sup>[32]</sup>

$$\sigma_{\nu_0 \rightarrow \nu} = \frac{\pi}{k_0^2} \sum_{l=0}^{l_{\text{max}}} \sum_{l_0=0}^{l_{\text{max}}} \sum_{\Lambda=-l}^{+l} |T_{\nu l, \nu_0 l_0}^{\Lambda}|^2$$

表 1  $\text{H}_2$  分子电子基态不同振动模型的振动能级和电子与  $\text{H}_2$  分子碰撞散射的阈值能

振动态	实验 <sup>[34]</sup>		Morse		NSE <sup>[25]</sup>		SHO <sup>[29]</sup>	
	振动能/eV	阈值/eV	振动能/eV	阈值/eV	振动能/eV	阈值/eV	振动能/eV	阈值/eV
0	0.270334	—	0.268966387	—	0.2830	—	0.2721	—
1	0.786543	0.516209	0.784354193	0.515387807	0.7986	0.5156	0.8191	0.5470
2	1.273903	1.003569	1.269682045	1.000715659	1.2841	1.0011	1.3633	1.0912
3	1.732336	1.462002	1.724949942	1.455983556	1.7395	1.4565	1.9102	1.6381
4	2.162535	1.892201	2.150157885	1.881191498	1.7766	1.4936	2.4545	2.1824
5	2.564657	2.294323	2.545305872	2.276339485	—	—	3.0014	2.7293
6	2.938551	2.668217	2.910393904	2.641427518	—	—	—	—
7	3.283700	3.013366	3.245421982	2.976455595	—	—	—	—
8	3.599235	3.328901	3.550390103	3.281423717	—	—	—	—

$$= \sum_{\Lambda=-l}^{+l} \sigma_{\nu_0 \rightarrow \nu}^{\Lambda}, \quad (7)$$

其中每个分子对称性的截面为

$$\sigma_{\nu_0 \rightarrow \nu}^{\Lambda} = \frac{\pi}{k_0^2} \sum_{l=0}^{l_{\text{max}}} \sum_{l_0=0}^{l_{\text{max}}} |T_{\nu l, \nu_0 l_0}^{\Lambda}|^2. \quad (8)$$

### 3. 计算方法

(1) 式是振动散射的基础方程. 要解这个方程, 首先将它转换为第二类 Volterra 方程, 然后利用格林函数方法从散射的原点开始计算, 并在渐近区间求解. 方程 (1) 的径向波函数的维数由  $N_l \times N_\nu$  确定, 其中  $N_\nu$  和  $N_l$  分别是振动状态的数目和分波数目. 由 (3) 式可知采用不同的振动波函数  $\phi_\nu(R)$  将会得到不同的耦合势能, 也就会得到不同的散射截面.

从表 1 可以看出 Morse 振动能级和散射阈值比 SHO 和 NSE 的能级和阈值更接近实验值, 因而 Morse 振动波函数是物理性能更好的波函数. 由于入射电子在靶核附近将会产生强离心势和非球型静电势, 那么就需要更多的分波来保证径向散射波函数  $u_{\nu l, \nu_0 l_0}^{\Lambda}(r)$  的收敛性. 但是在远离靶核的渐近区域, 采用较少的分波就足以保证散射波函数的收敛. 在  $r = 0a_0$  到  $r = 10.0a_0$  范围, 我们在 (1) 式中采用  $N_l = 5$  个分波和  $N_\nu = 18$  个 Morse 振动波函数. 而在  $r = 10.0a_0$  到最大散射距离  $r_{\text{max}} = 86.0a_0$  范围, 我们采用  $N_l = 3$  个分波. 在  $r_{\text{max}}$  以外我们采用波恩近似<sup>[35, 36]</sup>来计算高阶的  $K$  矩阵元以保证积分截面的收敛.

(8) 式对分波进行了双重求和. 随着分子对称性  $\Lambda$  的增高, 分截面将快速减小. 当对称性高于  $\Pi$  时, 其积分截面可以被忽略. 我们计算了  $\text{H}_2$  的  $\Sigma_g$ ,  $\Sigma_u$ ,  $\Pi_g$  和  $\Pi_u$  ( $\Lambda = 0, 1$ ) 对称性的振动激发散射的



密耦合  $K$  矩阵. 在这四个对称性中,  $\Sigma_u$  对称性起着主要作用. 最后我们将四个对称性的振动截面进行相加, 并和实验结果进行了比较.

## 4. 结果与分析

由上述计算方法, 我们得到了收敛的低能电子与  $H_2$  分子碰撞 ( $\nu_0 = 0 \rightarrow \nu = 0, 1, 2, 3$ ) 的振动激发积分散射截面. 图 1 例示了分别使用 16, 17, 18 个 Morse 振动波函数计算的 ( $0 \rightarrow 2$ ) 激发积分散射截面. 由图 1 可以看出, 这三组数据已基本完全重合, 这说明当采用 18 个 Morse 振动波函数时, 完全可以保证振动激发积分截面的收敛性.

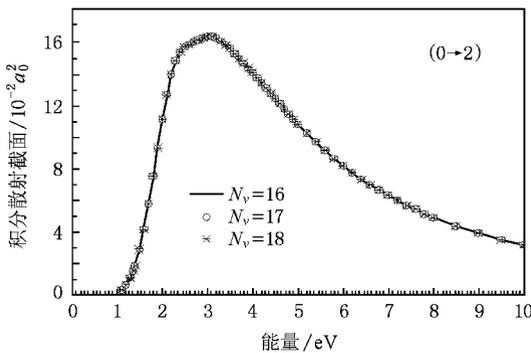


图 1 电子与氢分子非弹性碰撞 ( $0 \rightarrow 2$ ) 振动激发积分散射截面

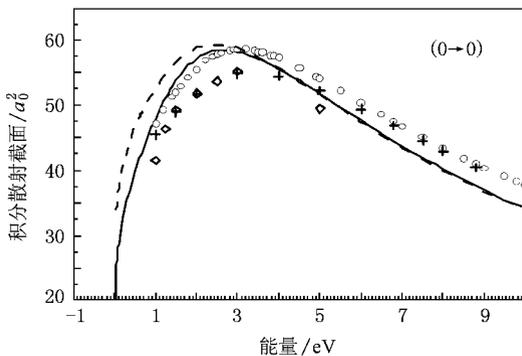


图 2 电子与氢分子弹性碰撞 ( $0 \rightarrow 0$ ) 振动积分散射截面 (ICSS) 实线是本文的理论结果, 虚线是 Elza<sup>[25]</sup> 的理论结果, 正号是 Muñoz<sup>[37]</sup> 的理论结果, 空心圆是 Jones<sup>[14]</sup> 的实验结果, 菱形是 Brunger<sup>[15]</sup> 的实验结果

图 2 将本文的弹性碰撞 ( $0 \rightarrow 0$ ) 振动积分散射截面的计算结果与 Elza<sup>[25]</sup>, Muñoz<sup>[37]</sup> 的理论结果和 Jones<sup>[14]</sup>, Brunger<sup>[15]</sup> 的实验结果进行了比较. Brunger<sup>[15]</sup> 采用高分辨电子单色仪对散射截面进

行了测量; Jones<sup>[14]</sup> 采用飞行时间电子透射谱仪得到了较好的实验结果; Muñoz<sup>[38-40]</sup> 改进了原有的  $R$  矩阵理论, 使其包含了离子体系通道的信息, 这些通道可以很好地计算离子阈能附近及高于阈能的离子散射截面, 其振动波函数由求解从头计算组态相互作用方法所得到的势能的薛定谔方程而获得; Elza 的计算方法与我们的完全类似, 区别在于, 他在计算中运用了 4 个分波和 5 个 NSE 振动波函数, 这些波函数来自解基电子态  $X^1\Sigma_g^+$  的 Hartree-Fock 势的薛定谔方程. 而本文与他的不同之处是在计算中采用了 18 个 Morse 振动波函数, 且当能量小于 3 eV 时本文计算的结果与 Jones 的实验值<sup>[14]</sup> 符合得很好. Brunger<sup>[15]</sup> 的结果整体比其他人的偏小. Muñoz<sup>[37]</sup> 的积分截面值在能量高于 6 eV 时和 Jones 的符合得较好, 而在小于 4 eV 时比 Jones 和本文的低. Elza 的理论值<sup>[25]</sup> 在入射电子能量小于 2.5 eV 时比我们的理论值和 Jones 的实验值大, 在大于 3 eV 时和我们的值一致, 但二者均比 Jones 的值小. 产生这种明显差异的原因主要在于本文使用了能更好地表征  $H_2$  分子电子基态真实振动物理性质的振动波函数. 这里的结果说明, 振动波函数的不同, 引起的振动激发散射势能的较小的差异可能会导致振动激发散射截面的明显不同.

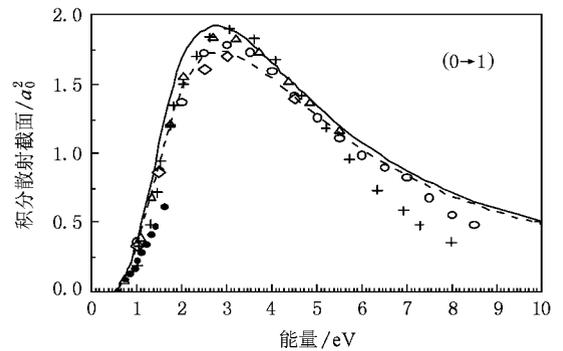


图 3 电子与氢分子非弹性碰撞 ( $0 \rightarrow 1$ ) 振动激发积分散射截面 (ICSS) 实线是本文的结果, 三角形是 Buckman<sup>[41]</sup> 的理论结果, 正号是 Horáček<sup>[42]</sup> 的理论结果, 虚线是 Elza<sup>[25]</sup> 的理论结果, 空心圆是 Ehrhardt<sup>[16]</sup> 的实验结果, 菱形是 Nishimura<sup>[17]</sup> 的实验结果, 实心圆是 England<sup>[18]</sup> 的实验结果

图 3 将我们的非弹性碰撞 ( $0 \rightarrow 1$ ) 振动激发积分散射截面的计算结果与 Buckman<sup>[41]</sup>, Elza<sup>[25]</sup>, Horáček<sup>[42]</sup> 的理论数据和 Ehrhardt<sup>[16]</sup>, Nishimura<sup>[17]</sup>, England<sup>[18]</sup> 的实验数据进行了比较. Buckman 等采用了 SHO 振动波函数进行计算;

Ehrhardt 等采用在碰撞前后独立于电子能量的电子光学系统对积分截面进行了测量;Nishimura 等采用交叉光束仪对积分截面进行了测量;Horáček 等采用非局域共振模型对积分截面进行了计算,而其所采用的振动波函数源自 *ab initio* 计算的势能.我们的计算结果与 Ehrhardt 等的实验结果和 Buckman 等的理论结果符合得较好.当入射电子能量低于 1.5 eV 时,我们的计算结果和 Ehrhardt 等、Horáček 等、Buckman 等和 Elza 的结果符合得很好.但在共振区间,即入射电子能量在 2—4.5 eV 时,Elza 的数据低于其他理论结果.

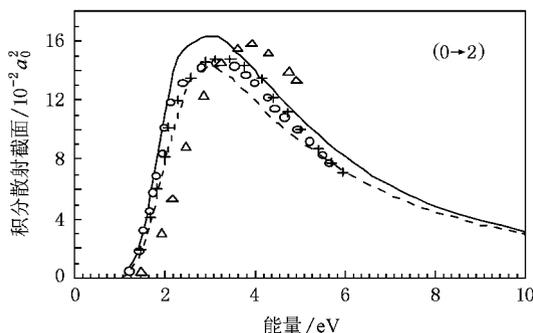


图 4 电子与氢分子非弹性碰撞(0→2)振动激发积分散射截面( $ICS_s$ ) 实线是本文的结果,三角形是 Gao<sup>[43]</sup>的理论结果,虚线是 Elza<sup>[25]</sup>的理论结果,正号是 Horáček 等<sup>[42]</sup>的理论结果,空心圆是 Ehrhardt 等<sup>[16]</sup>的实验结果

图 4 将本文的非弹性碰撞(0→2)振动激发积分散射截面与 Elza<sup>[25]</sup>,Gao<sup>[43]</sup>,Horáček 等<sup>[42]</sup>的理论数据和 Ehrhardt 等<sup>[16]</sup>的实验数据进行了比较. Gao 采用独立能量振转结构转换并结合多通道量子数亏损理论得到了积分截面,其振动波函数源自 *ab initio* 计算的势能.在低于 2 eV 和高于 4 eV 的位置,我们的数据与 Ehrhardt 等、Horáček 等和 Elza 的符合较好.但是在共振区间我们的数据较其他数据略大. Gao 的数据从阈能就已经向较高能量区产生了非物理位移.

图 5 将本文的非弹性碰撞(0→3)振动激发积分散射截面计算结果与 Elza<sup>[25]</sup>,Horáček 等<sup>[42]</sup>的理论数据和 Ehrhardt 等<sup>[16]</sup>的实验数据进行了比较.我们的数据在 Ehrhardt 等的实验数据和近期 Horáček 等发表的理论数据之间.所有的理论数据在共振区间与实验符合得都不够好.

图 6 对比了本文与 Elza<sup>[25]</sup>的电子与氢分子碰撞振动激发积分散射总截面(0→0,0→1,0→2 与 0→3 之和).没有发现与此对应的实验数据.当入射电子

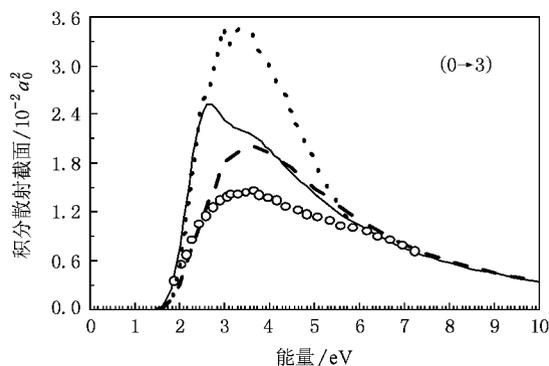


图 5 电子与氢分子非弹性碰撞(0→3)振动激发积分散射截面( $ICS_s$ ) 实线是本文的结果,虚线是 Elza<sup>[25]</sup>的理论结果,点线是 Horáček 等<sup>[42]</sup>的理论结果,空心圆是 Ehrhardt 等<sup>[16]</sup>的实验结果

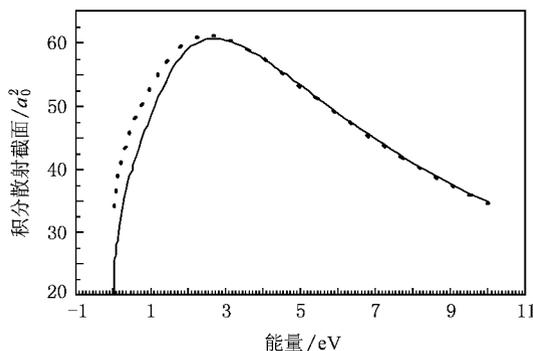


图 6 电子与氢分子碰撞振动激发积分散射总截面(0→0,0→1,0→2 和 0→3 之和) 实线是本文的数据,点线是 Elza 的理论数据

能量小于 2.5 eV 时,Elza 的结果较明显地大于本文的数值.而当入射电子能量大于 3 eV 时二者的数据基本一致.

## 5. 结 论

本文利用振动激发散射密耦合的方法得到了低能电子与氢分子碰撞的振动激发积分散射截面.当采用 18 个具有更真实物理性质的 Morse 振动波函数和 5 个分波时可以获得收敛的积分截面.本文使用的理论及计算方法与早期 Elza<sup>[25]</sup>的振动密耦合散射方法一样,二者间的差异是 Elza 的振动波函数来自解 Hartree-Fock 振动势的薛定谔方程,且在 Elza 的研究中只采用了 5 个振动波函数.与 Elza 的截面比较知,本文的振动密耦合截面与实验值和其他理论值符合得更好些.这说明振动波函数的正确与否直接影响密耦合散射势,进而影响到积分截面,所以在分子的振动激发散射中,使用足够多的正确振

动能级<sup>[44, 45]</sup>和振动波函数具有重要意义<sup>[46, 47]</sup>.

- [ 1 ] Jonin C , Liu X , Ajello J M , James G K , Abgrall H 2000 *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **129** 247
- [ 2 ] Lepp S , Stancil P C , Dalgarno A 2002 *J. Phys. B* **35** R57
- [ 3 ] Vankan P , Schram D C , Engeln R 2005 *Plasma Sources Sci. Technol.* **14** 744
- [ 4 ] da Silva A J R , Lima M A P , Brescansin L M 1990 *Phys. Rev. A* **41** 2903
- [ 5 ] Abdolsalami M , Morrison M A 1987 *Phys. Rev. A* **36** 5474
- [ 6 ] Brown D , Light J 1994 *J. Chem. Phys.* **101** 3723
- [ 7 ] Huo W M , Brown D 1999 *Phys. Rev. A* **60** 295
- [ 8 ] Schneider B I 1975 *Phys. Rev. A* **11** 1957
- [ 9 ] Yan B , Pan S F , Yu J H 2007 *Chin. Phys.* **16** 1956
- [ 10 ] McCurdy C W , Rescigno T N , Schneider B I 1987 *Phys. Rev. A* **36** 2601
- [ 11 ] McCurdy C W , Rescigno T N 1989 *Phys. Rev. A* **39** 4487
- [ 12 ] Morrison M A , Saha B C 1986 *Phys. Rev. A* **34** 2786
- [ 13 ] Liu J B , Wang Y , Zhou Y J 2007 *Chin. Phys.* **16** 72
- [ 14 ] Jones R K 1985 *Phys. Rev. A* **31** 2898
- [ 15 ] Brunger M J , Buckman S J , Newman D S , Alle D T 1991 *J. Phys. B* **24** 1435
- [ 16 ] Ehrhardt H , Langhans L , Linder F , Taylor H S 1968 *Phys. Rev.* **173** 222
- [ 17 ] Nishimura H , Danjo A , Sugahara H 1985 *J. Phys. Soc. Jpn.* **54** 1757
- [ 18 ] England J P , Elford M T , Crompton R W 1988 *Aust. J. Phys.* **41** 573
- [ 19 ] Gibson T L , Morrison M A 1984 *Phys. Rev. A* **29** 2497
- [ 20 ] Bouferguene A , Ema I , Weatherford C A 1999 *Phys. Rev. A* **59** 2712
- [ 21 ] Morrison M A , Abdolsalami M , Elza B K 1991 *Phys. Rev. A* **43** 3440
- [ 22 ] Hara S 1969 *J. Phys. Soc. Jpn.* **27** 1009
- [ 23 ] Feldt A N , Morrison M A 2008 *Phys. Rev. A* **77** 012726
- [ 24 ] Feng H , Sun W G 2003 *Phys. Rev. A* **68** 062709
- [ 25 ] Elza B K 1991 ( Ph. D. Dissertation ) ( Oklahoma : Oklahoma State University )
- [ 26 ] Trail W K , Morrison M A , Isaacs W A , Saha B C 1990 *Phys. Rev. A* **41** 4868
- [ 27 ] Morse P M 1929 *Phys. Rev.* **34** 57
- [ 28 ] Whitton W N , Kuntz P J 1976 *J. Chem. Phys.* **64** 3624
- [ 29 ] Morrison M A , Sun W G 1995 *Computational Methods for Electron-Molecule Collisions* ( New York : Plenum ) pp131—190
- [ 30 ] Lane N F 1980 *Rev. Mod. Phys.* **52** 29
- [ 31 ] Morrison M A 1983 *Aust. J. Phys.* **36** 239
- [ 32 ] Sun W G , Morrison M A , Isaacs W A , Trail W K , Alle D T , Gulley R J , Brennan M J , Buckman S J 1995 *Phys. Rev. A* **52** 1229
- [ 33 ] Feng H , Sun W G , Morrison M A 2003 *Phys. Rev. A* **68** 062709
- [ 34 ] Kolos W , Wolniewicz L 1968 *J. Chem. Phys.* **49** 404
- [ 35 ] Feldt A N , Morrison M A 2008 *Phys. Rev. A* **77** 012726
- [ 36 ] Isaacs W A , Morrison M A 1996 *Phys. Rev. A* **53** 4215
- [ 37 ] Muñoz A , Oller J C , Blanco F , Gorfinkiel J D , García G 2007 *Chem. Phys. Lett.* **433** 253
- [ 38 ] Gorfinkiel J D , Tennyson J 2005 *J. Phys. B* **38** 1607
- [ 39 ] Faure A , Gorfinkiel J D , Morgan L A , Tennyson J 2002 *Comput. Phys. Commun.* **144** 224
- [ 40 ] Morgan L A , Tennyson J , Gillan C J 1998 *Comput. Phys. Commun.* **114** 120
- [ 41 ] Buckman S J , Brunger M J , Newman D S 1990 *Phys. Rev. Lett.* **65** 3253
- [ 42 ] Horáček J , Čížek M , Houfek K , Kolorenč P 2006 *Phys. Rev. A* **73** 022701
- [ 43 ] Gao H 1991 *Phys. Rev. A* **45** 6895
- [ 44 ] Ren W Y , Sun W G 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 594 ( in Chinese ) [ 任维义、孙卫国 2005 物理学报 **54** 594 ]
- [ 45 ] Hu S D , Sun W G , Ren W Y , Feng H 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 2186 ( in Chinese ) [ 胡士德、孙卫国、任维义、冯 灏 2006 物理学报 **55** 2186 ]
- [ 46 ] Yu J Z , Feng H , Sun W G 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 4143 ( in Chinese ) [ 于江周、冯 灏、孙卫国 2008 物理学报 **57** 4143 ]
- [ 47 ] Dai W , Feng H , Sun W G , Tang Y J , Shen L , Yun J Z 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 144 ( in Chinese ) [ 戴 伟、冯 灏、孙卫国、唐 永建、申 立、于江舟 2008 物理学报 **57** 144 ]

# Vibrational excitation integrated cross sections of e-H<sub>2</sub> scattering \*

Wang Bin<sup>1)</sup> Feng Hao<sup>2)†</sup> Sun Wei-Guo<sup>1)‡</sup> Zeng Yang-Yang<sup>1)</sup> Dai Wei<sup>1)</sup>

<sup>1)</sup> *Institute of Atomic and Molecular Physics, Sichuan University, Chengdu 610065, China*

<sup>2)</sup> *College of Physical Science and Technology, Sichuan University, Chengdu 610065, China*

( Received 20 November 2008 ; revised manuscript received 14 December 2008 )

## Abstract

The vibrational excitation integrated cross sections ( ICSs ) of the low-energy electron-H<sub>2</sub> scattering are studied using the vibrational close-coupling ( VCC ) method. 18 Morse vibrational states, 5 partial waves and 4 molecular symmetries are used to converge the vibrational excitation ICSs. It is shown that the properties of the vibrational excitation scattering potentials and the accuracy of the vibrational excitation ICSs may be affected by the quality of the vibrational wavefunctions and the accuracy of the vibrational energies. The converged vibrational excitation (  $\nu_0 = 0 \rightarrow \nu = 0, 1, 2, 3$  ) ICSs agree well with the known experimental results.

**Keywords** : electron scattering, vibrational excitation, H<sub>2</sub> molecule, integrated cross sections

**PACC** : 3480B, 3480D

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant Nos. 10504022, 10774105 ).

† Corresponding author. E-mail : fenghao@mail.xhu.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail : weiguosun@x263.net