

# 运用球高斯分布极化势研究低能电子与 H<sub>2</sub> 分子碰撞的振动激发动量迁移散射截面\*

王小炼<sup>1)2)</sup> 冯灏<sup>3)†</sup> 孙卫国<sup>1)3)</sup> 樊群超<sup>3)</sup> 王斌<sup>2)</sup> 曾阳阳<sup>1)</sup>

1) (四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065)

2) (四川大学材料科学与工程学院, 成都 610065)

3) (西华大学物理与化学学院, 先进计算研究中心, 成都 610039)

(2009年12月21日收到; 2010年5月10日收到修改稿)

用最近改进的球高斯分布(distributed spherical Gaussian, DSG)极化势模型, 在振动密耦合框架下和基于量子力学从头计算的静电势、交换势的基础上, 研究了低能电子与 H<sub>2</sub> 分子碰撞振动激发的动量迁移散射截面(momentum transfer cross section, MTCS). 通过包含 18 个振动波函数、5 个分波和 16 个分子对称性, 得到了  $0 < E \leq 10$  eV 时收敛性很好的  $\nu = 0 \rightarrow \nu' = 0, 1, 2, 3$  等几个振动跃迁通道和总的 MTCS, 并与其他实验和理论得到的值进行了比较和分析.

**关键词:** H<sub>2</sub> 分子碰撞, 动量迁移散射截面, 振动激发, 球高斯分布极化势

**PACS:** 34. 80. Bm, 34. 80. Dp

## 1. 引言

近年来, 电子与 H<sub>2</sub> 分子碰撞动量迁移散射截面(momentum transfer cross section, MTCS)的研究在实验上已经取得了很大的进展<sup>[1]</sup>, 它们主要可以分为 Swarm<sup>[2-7]</sup> 和 Crossed-beam<sup>[8-12]</sup> 两类, 但这两类实验得到的低能电子与 H<sub>2</sub> 分子碰撞的 MTCS 通常是包含了弹性和非弹性振动的总的 MTCS 值<sup>[13]</sup>, 而缺少对各个振动跃迁通道的 MTCS 值的研究, 且两种不同方法所得到的结果相差比较大. 由图 1 可知, 在  $E < 3$  eV 时, 同一类实验方法得到的结果符合得较好(值得一提的是, 在  $3 \leq E \leq 4$  eV 时, Schmidt 等<sup>[7]</sup> 1994 年的 Swarm 实验结果已经偏向于支持 Crossed-beam 实验结果了, 但他只计算了  $0.01 < E < 4$  eV 的值, 数据也不是很充分);  $5 < E < 10$  eV 时, 即使是同类实验方法得出的结果也相差较大. 基于这一情况, Elford 等<sup>[14]</sup> 通过对 Swarm 实验和 Crossed-beam 实验进行研究和分析后, 根据已经获得的数据, 于 2003 年确定了一组总的 MTCS 的推荐

值. 根据他们的分析,  $0.001 < E < 4$  eV 时的截面误差  $< \pm 5\%$ ,  $4 < E < 100$  eV 的误差  $< \pm 15\%$ . 与实验相比, 目前理论上的研究尚显不足, 研究较好的是 Morrison 等<sup>[15-17]</sup> 在体心坐标系下基于振动密耦合方法(Body Frame Vibrational Close Coupling, BFVCC), 通过建立一系列的势能模型, 采用相关的各种近似, 得到的结果与实验符合得比较好, 但在低能和共振部分的误差仍然比较大.

在电子与分子散射的理论研究中, 寻找合理的相互作用势是非常重要的. 相互作用势是传递能量以及引起分子体系激发的本质原因, 在密耦合理论中, 可分为静电势、交换势和极化势三个部分

$$\hat{V}_{\text{int}}(r, R) = \hat{V}_{\text{st}}(r, R) + \hat{V}_{\text{ex}}(r, R) + \hat{V}_{\text{cp}}(r, R), \quad (1)$$

其中静电势  $\hat{V}_{\text{st}}(r, R)$  是入射电子与分子中的电子和核的库仑相互作用, 交换势  $\hat{V}_{\text{ex}}(r, R)$  是由反对称化算符引起的入射电子与分子中束缚态电子的交换作用, 相关极化势  $\hat{V}_{\text{cp}}(r, R)$  描述了短程范围内非束缚电子之间的多体关联效应以及主要在目标电

\* 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

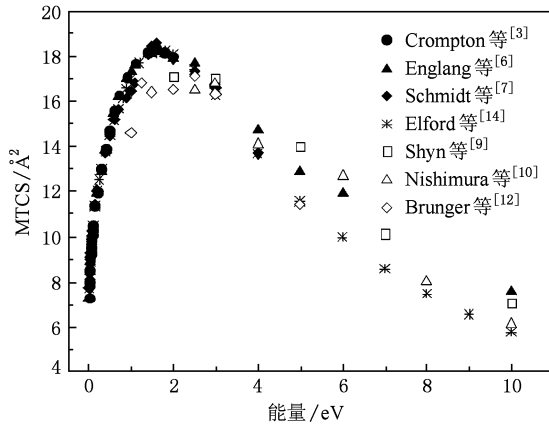


图1 低能电子与H<sub>2</sub>分子碰撞的MTCS实验数据的比较

子云外起作用的中程、长程范围内的诱导极化效应. 在低能电子与分子散射中, 它们对散射截面都有着巨大的影响. 目前, 三种势能的处理都有了广泛的研究基础. 例如, 通过 Hartree-Fock 密度函数计算静电势的方法已经非常成熟; 利用基函数展开法将交换势分离展开也已获得巨大成功, 已经可以得到比较严格的交换势能项<sup>[18,19]</sup>; 最困难的部分仍然是如何正确处理极化势, 尽管已经有一些极化势模型, 但它们大多需要借助实验数据调整部分参数, 不具有一般性. Weatherford 等<sup>[20]</sup>曾提出了一种新的考虑非绝热效应的方法, 即建议将入射电子视为一个球高斯分布的电荷, 随着入射电子趋近目标分子中心, 分子对于入射电子的作用力随之增大, 导致其电荷密度逐步发生弥散, 从而取得非绝热的效果<sup>[20]</sup>. 但是, 他们的势能模型包含一个优于绝热偶极 (Better Than Adiabatic Dipole, BTAD) 极化势确定的可调参数, 没有具体给出球高斯函数的指数表达式. 冯灏等<sup>[21]</sup>在 Weatherford 等的工作基础上, 进一步推导了球高斯电荷分布极化势的计算公式, 给出了一个不包含任何可调参数的具体表达形式, 并已将其成功地应用于低能电子与 N<sub>2</sub> 分子的低振动激发散射研究中.

在前面的工作基础上, 我们尝试着把球高斯电荷分布极化势也引入到了低能电子与 H<sub>2</sub> 分子散射的研究, 计算了 0 → 0, 1, 2, 3 等几个振动跃迁通道的 MTCS, 并把计算得的总的 MTCS 同实验和 Morrison 等<sup>[15]</sup>报道的理论值进行了比较与分析.

## 2. 散射方程

体心坐标系下电子与分子碰撞的径向振动密

耦合运动方程为<sup>[22]</sup>

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} - 2V_{vl,vl}^A(r) + \kappa_v^2 \right] u_{vl,vl}^A(r) = 2 \sum_{v',l' \neq v,l} [V_{vl,v'l'}^A(r) u_{v'l',v'l_0}^A(r)]. \quad (2)$$

其中势能项

$$V_{vl,v'l'}^A(r) = \langle \varphi_v(R) Y_l^A(\hat{r}) | \hat{V}_{\text{int}}(r, R) | \varphi_{v'}(R) Y_{l'}^A(\hat{r}) \rangle, \quad (3)$$

径向散射矩阵波函数渐进表达式为

$$u_{vl,v'l_0}^A(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \hat{j}_{l_0}(\kappa_0 r) \delta_{l,l_0} \delta_{v,v_0} + \left[ \frac{\kappa_0}{\kappa_v} \right]^{1/2} \hat{n}_l(\kappa_v r) K_{vl,v'l_0}^A. \quad (4)$$

$\varphi_v(R)$  是分子振动波函数;  $Y_l^A(\mathbf{r})$  是球谐函数, 它表示入射电子的角度部分;  $\nu$  是分子的振动量子数,  $l$  是散射电子角动量量子数,  $\Lambda$  是  $l$  在分子中核的连线上的投影;  $\hat{j}_{l_0}(\kappa_0 r)$  是入射通道的 Ricatti-Bessel 函数,  $\hat{n}_l(\kappa_v r)$  是出射通道的 Ricatti-Neumann 函数.

微分截面按 Legendre 多项式展开为<sup>[22]</sup>

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \Big|_{\nu_0 \rightarrow \nu} \equiv \frac{1}{4\kappa_0^2} \sum_{L=0}^{L_{\max}} B_L(\nu_0 \rightarrow \nu) P_L(\cos\theta'). \quad (5)$$

其中  $\theta'$  是实验室坐标系下的散射角;  $\kappa_0$  是入射通道的波矢; 展开系数  $B_L(\nu_0 \rightarrow \nu)$  与角度无关, 具体表达式为

$$B_L(\nu_0 \rightarrow \nu) = \sum_{\Lambda\bar{\Lambda}} \sum_{\bar{l}\bar{l}_0} \sum_{l_0\bar{l}_0} d_L(l_0, \bar{l}_0; \Lambda\bar{\Lambda}) T_{vl,\nu_0}^{\Lambda} T_{v'l_0,\nu_0}^{\bar{\Lambda}*}. \quad (6)$$

(6) 式中, 角动量耦合系数

$$\begin{aligned} & d_L(l_0, \bar{l}_0; \Lambda\bar{\Lambda}) \\ &= i^{l_0-l-\bar{l}_0+l} \frac{1}{2L+1} [(2l+1)(2\bar{l}+1) \\ & \times (2l_0+1)(2\bar{l}_0+1)]^{1/2} \\ & \times C(\bar{l}L; 0, 0) C(\bar{l}L; \bar{\Lambda}, -\bar{\Lambda}) \\ & \times C(l_0\bar{l}_0L; 0, 0) C(l_0\bar{l}_0L; -\bar{\Lambda}, \bar{\Lambda}), \end{aligned} \quad (7)$$

$C$  为 Clebsch-Gordan 系数.

对方程(5)进行角度  $\hat{r}$  积分可以得到 MTCS<sup>[22]</sup>,

$$\sigma_{\nu_0 \rightarrow \nu}^m = \frac{\pi}{k_0^2} \left[ B_0(\nu_0 \rightarrow \nu) - \frac{1}{3} B_1(\nu_0 \rightarrow \nu) \right]. \quad (8)$$

## 3. 球高斯分布极化势

绝热近似下, 极化势可视为入射电子与畸变前后分子电子云的势能差, 即绝热极化势

$$V_{\text{pol}}^{\text{AD}}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = E_0^{\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) - E_0(\mathbf{r}, \mathbf{R}). \quad (9)$$

其中  $E_0^p(\mathbf{r}, \mathbf{R})$  为整个体系平衡时的能量,  $E_0(\mathbf{r}, \mathbf{R})$  为未受扰动时体系的总能量. 其表达式分别为

$$E_0^p(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \langle \varphi_0^p(\mathbf{r}, \mathbf{R}, \mathbf{r}_i) | \hat{H}^{AD} | \varphi_0^p(\mathbf{r}, \mathbf{R}, \mathbf{r}_i) \rangle, \quad (10)$$

$$E_0(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \langle \varphi_0(\mathbf{R}, \mathbf{r}_i) | \hat{H}^{AD} | \varphi_0(\mathbf{R}, \mathbf{r}_i) \rangle. \quad (11)$$

绝热极化势的定义可以改写为

$$V_{\text{pol}}^{AD}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = E_0^p(\mathbf{r}, \mathbf{R}) - E_0^{(e)}(\mathbf{R}) - \langle \varphi_0(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}) | V_{em} | \varphi_0(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}) \rangle. \quad (12)$$

以往研究电子散射问题广为使用的传统模型是将入射电子视为一个无分布且无结构的点电荷, 因而没用任何函数合理地表示入射电子的波动性. 球高斯分布 (DSG) 的基本思想是将入射电子用 DSG 函数代替<sup>[20]</sup>

$$q_{ie} \rightarrow \rho(\xi_s, | \mathbf{r}_s - \mathbf{s} |^2) = - \left( \frac{2\xi_s}{\pi} \right)^{3/2} \exp[-2\xi_s \cdot | \mathbf{r}_s - \mathbf{s} |^2]. \quad (13)$$

其中  $\mathbf{s}$  为 DSG 的中心矢量,  $\mathbf{r}_s$  为入射电子的空间坐标,  $\xi_s$  是用来表征电荷弥散程度的高斯函数的幂指数. 将 DSG 函数代入到(12)式中, 可得<sup>[20]</sup>

$$V_{em} = - \sqrt{8\xi_s/\pi} \cdot \sum_n Z_n \cdot F_0(2\xi_s r_{sn}^2) + \sqrt{8\xi_s/\pi} \cdot \sum_i F_0(2\xi_s r_{si}^2). \quad (14)$$

其中  $F_0(x)$  为不完全伽玛函数,  $r_{sn}$  和  $r_{si}$  分别为球高斯函数的中心  $\mathbf{s}$  到第  $n$  个核和第  $i$  个束缚态电子之间的距离.

如果定义误差函数为

$$\text{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt, \quad (15)$$

则不完全伽玛函数可以简写为

$$F_0(x) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{x}} \cdot \text{erf}(\sqrt{x}). \quad (16)$$

(14)式可以改写为

$$V_{em} = - \sum_n \frac{Z_n}{| \mathbf{s} - \mathbf{R}_n |} \cdot \text{erf}(\sqrt{2\xi_s} \cdot r_{sn}) + \sum_i \frac{1}{| \mathbf{s} - \mathbf{r}_i |} \cdot \text{erf}(\sqrt{2\xi_s} \cdot r_{si}). \quad (17)$$

由于误差函数  $\text{erf}(x) \leq 1$ , 因此, 从(17)式可以得出如下结论, 采用球高斯电荷分布函数来代替入射电子, 相当于在原来的相互作用势上乘以一个小于1的数值, 有效地降低了势能的数值. 通过此种形式, DSG 极化势模型降低了绝热极化势过大的影响. 如果选取合适的幂指数  $\xi_s$ , DSG 极化势就可以比较好地反映出非绝热效应.

幂指数  $\xi_s$  的重要性是显而易见的. 它可以使 DSG 极化势在短程区域内比较好地模拟非绝热效应, 并且在中长程区域, 绝热近似成立的时候, DSG 极化势可以还原为绝热极化势. Weatherford<sup>[20]</sup> 将其视作一个可调参数, 并在对  $\text{H}_2$  分子的应用中取了非常简单的形式

$$\xi_s = \beta \cdot s, \quad (18)$$

其中  $s$  为球高斯函数中心到分子中心的距离,  $\beta$  为可调参数, 通过调整  $\beta$  使得计算出的理论截面与实验值相符合. 但是, 实际的计算表明, 幂指数  $\xi_s$  取(18)式的形式较为粗糙, 即使对于  $\text{H}_2$  分子这种最简单的中性分子体系, Weatherford 等<sup>[20]</sup> 采用几组不同的  $\beta$  值, 所得到的积分截面都与实验值有明显的差异<sup>[23]</sup>. 并且, 如果要将 DSG 极化势推广到更复杂的分子体系, 就必须改进幂指数  $\xi_s$  的形式.

冯灏等<sup>[21]</sup> 提出了一种新的幂指数公式, 它不包含可调参数, 并且具有正确的量纲, 即

$$\xi_s = \frac{s}{R \cdot R_e} (1 + \sin\theta). \quad (19)$$

其中  $R_e$  为双原子分子的平衡核间距,  $s$  为球高斯函数中心到分子中心的距离,  $R$  为对应的分子核间距,  $\theta$  是入射电子与  $z$  轴方向的夹角. 将(19)式代入到(17)式中, 即可得到本文所采用的 DSG 极化势.

#### 4. 收敛性分析

势能是引起分子体系激发的本质原因, 它是否能准确反映入射电子与分子真实体系的相互作用对散射截面计算的精度有着决定性的影响. 因此, 要得到精确的 MTCS, 我们就必须寻求一种物理图像清晰、物理意义明确的势能模型. 本文中, 对于交换势和极化势分别采用了可调自由电子气交换势 (Tuned Free Electron Gas Exchange, TFEGE) 和 DSG 极化势模型<sup>[24]</sup>. 实际计算中, 静电势、TFEGE、DSG 极化势都是利用分子基态的电子波函数和电荷密度求得的. 首先, 我们在 Born-Oppenheimer 近似下计算了  $0.50a_0$  到  $2.60a_0$  的 11 个不同的分子核间距  $R$  的 Hartree-Fock 波函数; 然后计算了这些不同核间距的相互作用势能项; 最后通过数值积分, 利用体系的 Morse 振动波函数, 得到振动耦合势能项. 所以, 核的振动波函数集合是否正确地包含了分子的振动信息, 角动量的展开程度即分波的数目是否正确地描述了入射电子的角动量状态等都极大地影

响着截面的精度. 然而, 随着振动波函数的数目  $n_v$  和分波数目  $n_l$  的增大, 计算量也会迅速地增加. 考虑到计算机的运算能力和所需截面的实际精度要求, 我们必须确定一组合适的振动波函数的数目  $n_v$  和分波数  $n_l$ . 随着振动跃迁通道中振动末态的增大, 收敛性要求就越高, 也就需要更多的振动波函数和分波才能保证截面收敛. 因此, 在我们考虑的  $\nu = 0 \rightarrow \nu' = 0, 1, 2, 3$  等振动跃迁通道 MTCS 的计算中, 只要能够保证  $\nu = 0 \rightarrow \nu' = 3$  振动跃迁通道散射截面的收敛性,  $\nu = 0 \rightarrow \nu' = 0, 1, 2$  振动跃迁通道散射截面的收敛性也就能得到保证. 如图 2(a), 为了研究分波数  $n_l$  对散射截面的影响, 首先固定振动波函数的数目  $n_v = 18$ , 然后改变分波数  $n_l$ , 即分别取  $n_l = 2, 4, 5$  得到一系列不同的散射截面. 当分波数  $n_l = 2$  时, 所得到的截面与  $n_l = 5$  的截面相差很大,

这时截面收敛得很不好; 随着分波数  $n_l$  的增大, 所得到的截面与  $n_l = 5$  的截面相差越来越小, 到  $n_l = 4$  时, 截面已基本上和  $n_l = 5$  的截面重合, 说明  $n_l = 5$  足以保证截面的收敛性. 同理, 为了研究振动波函数对截面收敛性的影响, 如图 2(b), 我们固定分波数  $n_l = 5$ , 然后分别取振动波函数的数目  $n_v = 12, 14, 18$  发现, 使用三个不同振动波函数数目所得到的结果差不多都重合到一起. 实际上, 取 14 个振动波函数(即  $n_v = 14$ ) 就已经能够很好地保证截面的收敛性, 在计算能力允许的范围内, 为了使计算结果更准确, 我们还是采用了 18 个振动波函数. 通过对  $\nu = 0 \rightarrow \nu' = 3$  振动跃迁通道激发散射动量迁移散射截面的收敛性进行研究和分析表明, 当使用  $n_l = 5$  和  $n_v = 18$  时, 已经能够很好地保证结果的收敛性.

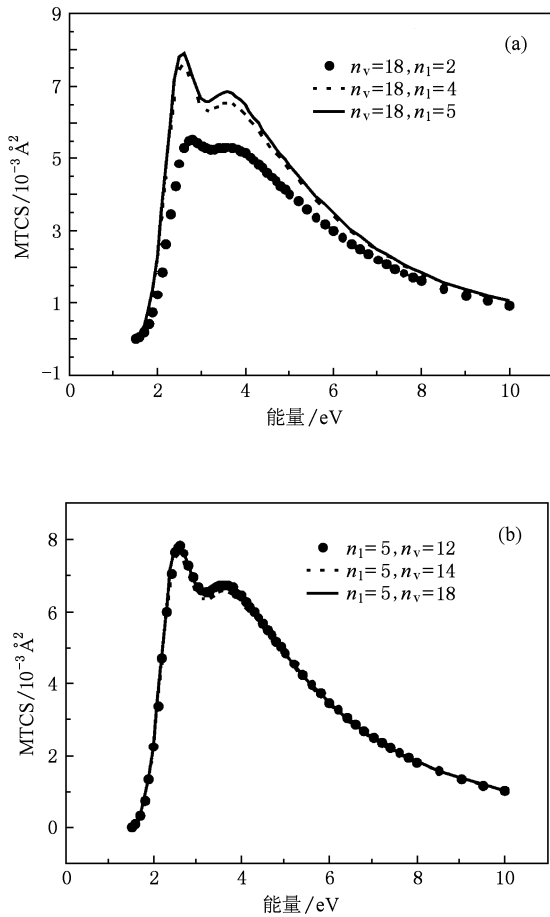


图2 低能电子与  $\text{H}_2$  碰撞  $\nu = 0 \rightarrow \nu' = 3$  振动跃迁通道的动量迁移散射截面及收敛性分析 (a) 固定振动波函数的数目  $n_v = 18$ , 分别取分波数  $n_l = 2, 4, 5$  的动量迁移散射截面, (b) 固定分波数  $n_l = 5$ , 分别取振动波函数数目  $n_v = 12, 14, 18$  的动量迁移散射截面

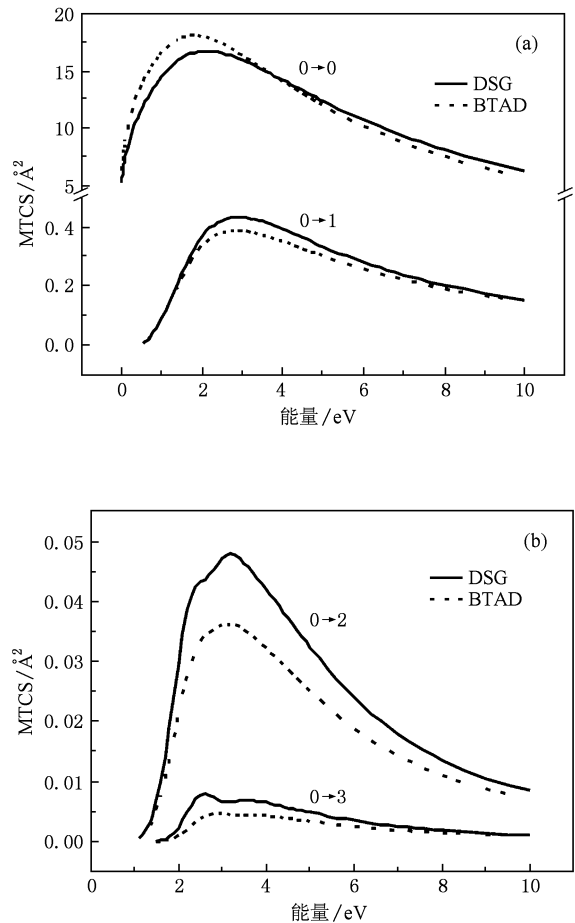


图3 分别用 DSG 和 BTAD 极化势计算得的低能电子与  $\text{H}_2$  碰撞  $\nu = 0 \rightarrow \nu' = 0, 1, 2, 3$  振动跃迁通道的动量迁移散射截面值 (a)  $\nu' = 0, 1$ , (b)  $\nu' = 2, 3$

## 5. 计算结果与分析

到目前为止,还没有发现过低能电子与  $H_2$  分子碰撞各个振动跃迁通道 MTCS 相关的实验报道,但它们对于很多研究是很重要的<sup>[25]</sup>. 如图 3,我们分别给出了  $n_v = 18, n_1 = 5$  时用 DSG 极化势计算的  $\nu = 0 \rightarrow \nu' = 0, 1, 2, 3$  等振动跃迁通道的动量迁移散射截面,并与前面用 BTAD 极化势得到的结果进行了比较. 由图可知,弹性散射 ( $0 \rightarrow 0$  振动跃迁通道) 的 MTCS 远大于其他振动跃迁通道的值,并且随着振动跃迁通道中末振动态数的增大, MTCS 迅速减小——末振动态每增大 1 个单位, MTCS 的值差不多就减少一个数量级. 两种不同极化势模型计算得到的各个振动跃迁通道的 MTCS 除了在共振区域相差比较大以外,在其他部分符合得都比较好. 对于低能电子与  $H_2$  分子的碰撞,总的 MTCS 值是弹性散射和其他所有能量允许激发跃迁的 MTCS 的总和,并且主要由弹性散射的值决定<sup>[22,26]</sup>. 因此,采用  $\nu = 0 \rightarrow \nu' = 0, 1, 2, 3$  这几个振动跃迁通道已经完全可以保证我们要计算的总的 MTCS 的收敛性. 在图 4(a) 中,我们把用 DSG 和 BTAD 极化势模型计算得的总的 MTCS 与 Morrison 等<sup>[13]</sup> 的理论结果和 Swarm 实验进行比较发现,用 BTAD 极化势模型计算的结果和 Morrison 等的计算结果与 Swarm 实验符合得都比较好,而用 DSG 计算得的结果在  $E < 2.5$  eV 时明显偏小. 在图 4(b) 中,把我们计算得的结果与 Morrison 等的理论计算和 Crossed-beam 实验数据进行比较却发现,用 BTAD 极化势模型计算的结果和 Morrison 等的计算结果在  $E < 2.5$  eV 时都明显偏大,而用 DSG 计算得的结果却与实验符合得比较好. 显然,这种结果在某种程度上是令人沮丧的,它反而让当前存在的问题变得更复杂了. 由于目前可获得的两种实验类型的总的 MTCS 数据的差异以及关于各个振动跃迁通道的 MTCS 值的报道的缺乏,并不能确定用 DSG 和 BTAD 极化势模型算出的总的 MTCS 数据孰优孰劣. 不过,从物理图像和物理意义上来讲,DSG 应该是更优越于 BTAD 模型势的. 而且,目前实验上关于电子与  $H_2$  分子碰撞 MTCS 在低能部分的报道中, Schmidt 等<sup>[7]</sup> 1994 年的 Swarm 类型实验结果已经偏向于支持具有先进技术水平的 Crossed-beam 实验了. 因此,我们还是相信 DSG 模型势更深入地反映了低能电子与双原子分子之间

的短程极化相关效应.

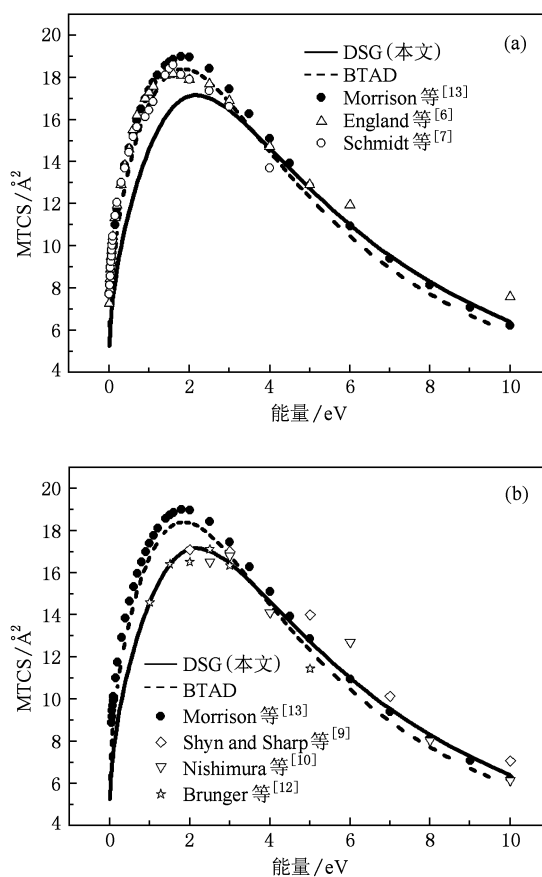


图 4 DSG, BTAD, Morrison 的值与 Swarm 和 Crossed-beam 类型的实验结果的比较 (a) Swarm 类型, (b) Crossed-beam 类型

## 6. 结 论

采用体心坐标系下的振动密耦合方法及基于量子力学从头计算的静电势、交换势和相关极化势,研究了低能电子与  $H_2$  分子碰撞振动激发的 MTCS. 势能是引起分子体系激发的本质原因,它反应了真实分子体系的相互作用,对 MTCS 的正确性有着重要的影响. 通过包含 18 个振动波函数、5 个分波数和 16 个分子对称性,得到了  $0 < E \leq 10$  eV 时收敛性很好的  $\nu = 0 \rightarrow \nu' = 0, 1, 2, 3$  等几个振动跃迁通道和总的 MTCS 值,对总的 MTCS 与其他实验和理论得到的值进行比较和分析发现,我们的结果比以前的理论计算更合理了. 但是,目前对于势能的处理还不是很完善,将其分为静电势、交换势和极化势三部分来处理的方法本身带有太多经典物理的思想,对于低能电子散射来说并不是那么严格<sup>[27,28]</sup>. 因此,我们希望在以后的研究中能够得到

更基于量子力学原理计算的相互作用势,从而得到 更为精确的截面数据.

- 
- [1] Buckman S J, Brunger M J 1997 *Aust. J. Phys.* **50** 483
- [2] Frost L S, Phelps A V 1962 *Phys. Rev.* **127** 1621
- [3] Crompton R W, Gibson D K, McIntosh A I 1969 *Aust. J. Phys.* **22** 715
- [4] Gibson D K 1970 *Aust. J. Phys.* **23** 683
- [5] Hayashi M 1987 *Swarm Studies and Inelastic Electron-Molecule Collisions* (New York: Springer) p167
- [6] England J P, Elford M T, Crompton R W 1988 *Aust. J. Phys.* **41** 573
- [7] Schmidt B, Berkhan K, Gätz B, Möller M 1994 *Phys. Scr.* **53** 30
- [8] Srivastava S K, Chutjian A, Trajmar S 1975 *J. Chem. Phys.* **63** 2659
- [9] Shyn T W, Sharp W E 1981 *Phys. Rev. A* **24** 1734
- [10] Nishimura H, Danjo A, Sugahara H 1985 *J. Phys. Soc. Jpn* **54** 1757
- [11] Khakoo M A, Trajmar S 1986 *Phys. Rev. A* **34** 138
- [12] Brunger J, Buckman S J, Newman D S, Alle D T 1991 *J. Phys. B* **24** 1435
- [13] Morrison M A, Crompton R W, Saha B C, Petrović Z L 1987 *Aust. J. Phys.* **40** 239
- [14] Elford M T, Buckman S J, Brunger M J 2003 *Photon and Electron Interactions with Atoms, Molecules and Ions* (Group I, Vol. 17) (New York: Springer)
- [15] Morrison M A, Trail W K 1993 *Rhys. Rev. A* **48** 2874
- [16] Morrison M A, Saha B C 1986 *Phys. Rev. A* **34** 2786
- [17] Morrison M A, Feldt A N, Saha B C 1984 *Phys. Rev. A* **30** 2811
- [18] Shah M B, Gilbody H B 1990 *J. Phys. B* **23** 491
- [19] Feng H, Sun W G, Morrison M A, Feldt A N 2009 *J. Phys. B* **105** 2289
- [20] Bouferguene A, Ema I, Weatherford C A 1999 *Phys. Rev. A* **59** 2712
- [21] Feng H, Sun W G, Morrison M A 2003 *Phys. Rev. A* **68** 062709
- [22] Morrison M A, Sun W G 1995 *How to Calculate Rotational and Vibrational Cross Sections for Low-Energy Electron Scattering from Diatomic Molecules Using Close-Coupling Techniques*, in *Computational Methods of Electron-Molecule Collisions* (New York: Plenum) Chap. 6
- [23] Burke P G, Chandra N 1972 *J. Phys. B* **5** 1696
- [24] 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
- [25] Brunger M J, Buckman S J 2002 *Phys. Rep.* **357** 215
- [26] Morrison M A 1983 *Aust. J. Phys.* **36** 239
- [27] 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]
- [28] 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]

# Momentum transfer cross sections of low-energy electron scattering from H<sub>2</sub> molecule with the polarization potential using the distributed spherical Gaussian model\*

Wang Xiao-Lian<sup>1)2)</sup> Feng Hao<sup>3)†</sup> Sun Wei-Guo<sup>1)3)</sup> Fan Qun-Chao<sup>3)</sup> Wang Bin<sup>2)</sup> Zeng Yang-Yang<sup>1)</sup>

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

2) (College of Materials Science and Engineering, Sichuan University, Chengdu 610065, China)

3) (Research Center for Advanced Computation, School of Physics and Chemistry, Xihua University, Chengdu 610039, China)

(Received 21 December 2009; revised manuscript received 10 May 2010)

## Abstract

Based on the distributed spherical Gaussian (DSG) polarization potential model, the momentum transfer cross sections (MTCSs) of low-energy electron scattering from H<sub>2</sub> molecule are studied with the body frame vibrational close coupling (BFVCC) method and vibrational scattering potentials. The vibrational scattering potentials include the static, exchange, and correlation-polarization contributions calculated based on *ab initio* method. By including the contributions of 18 Morse vibrational wave functions, 5 partial waves, and 16 molecular symmetries, We obtained well converging MTCSs of  $\nu = 0 \rightarrow \nu' = 0, 1, 2, 3$  transition excitations. The comparisons show that DSG polarization potential is a good approximation in the study of low energy electron scattering.

**Keywords:** H<sub>2</sub> molecular scattering, momentum transfer cross section, vibrational excitation, distributed spherical Gaussian polarization potential

**PACS:** 34. 80. Bm, 34. 80. Dp

---

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

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