

基于严格交换势的低能电子与 H_2 分子碰撞 振动激发散射截面的研究*

李勇军¹⁾ 冯 灏^{2)†} 孙卫国¹⁾²⁾ 曾阳阳¹⁾ 王小炼¹⁾ 李会东¹⁾ 樊群超²⁾

1) (四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065)

2) (西华大学物理与化学学院, 先进计算研究中心, 成都 610039)

(2010年3月9日收到; 2010年5月31日收到修改稿)

严格交换势用于研究低能电子与 H_2 分子的弹性和非弹性散射截面, 线性代数方法和 R -矩阵传播子相结合求解基于振动密耦合方法的积分-微分耦合方程组, 由此得到收敛的 ($0 \rightarrow 0$, $0 \rightarrow 1$, $0 \rightarrow 2$) 散射微分截面和积分截面. 理论计算结果与目前优秀的实验值和其他理论计算值进行了比较, 表明基于振动密耦合方程的严格交换势在低能电子与 H_2 分子振动激发散射中有重要作用.

关键词: 严格交换势, H_2 分子振动激发, 微分截面, 积分截面

PACS: 34.50.Ez

1. 引言

低能电子与双原子分子碰撞振动激发散射是原子分子散射领域的一个重要的组成部分, 在大气物理, 固体物理, 微晶片处理技术, 气体放电装置, 激光动力学模拟, 等离子体科学, 材料科学等许多领域有着非常重要的应用价值^[1-6]. H_2 分子在自然界中广泛存在, 是最简单的非球对称性分子, 它不仅能够检验理论正确与否, 还可以为研究低能电子与其他双原子分子振动激发散射提供借鉴的思路. 在实验方面, Brunger 等^[7] 采用高分辨电子单色仪对散射截面进行了测量; Shyn 等^[8] 采用交叉光束实验获得了较好的实验结果; Jones^[9], Ferch 等^[10] 采用时间飞行试验获得了 0.02—50 eV 的积分散射截面; Subramanian 等^[11] 采用光电子光谱仪测量了 0.2—10 eV 的积分散射截面; Nickel 等^[12] 采用线性透射实验获得了较好的实验结果. 在理论方面, Schneider 等^[13] 通过构造有效光学势获得了很好的结果; Horáček 等^[14] 通过改进非局域的共振模型取得了不错的结果; 王斌等^[15] 采用体心坐标系下的振

动密耦合方法 (body frame vibrational close-coupling, BFVCC)^[16-20], 改进“可调的自由电子气交换势” (tuned free electron gas exchange, TFEGE) 模型也获得了较好的结果; Mazon 等^[21] 同样采用的是 BFVCC 方法, 利用一维的 particle-in-box 波函数的封闭性质得到了一个新的交换核的表达式, 从而实现了在非局域性交换势能的严格计算. 势能是分子体系散射特征的本质原因, 它是否能准确反映分子碰撞体系的相互作用, 对散射计算结果有至关重要的影响. 完全包含三种相互作用势^[4] 的严格振动激发散射计算, 即使到目前为止也是非常困难的, 对低能电子与 H_2 分子的振动激发密耦合散射计算, 过去常常采用局域化的近似交换势能和近似极化势能^[15, 22-24]. 本文在 BFVCC 框架下将基于 Hartree-Fock 的严格交换势应用于低能电子与 H_2 分子高振动激发散射, 并与其他交换势以及模型的交换势进行了比较, 对进一步研究和探索低能电子与双原子分子碰撞的振动激发散射提供了有益的基础.

2. 理论方法

从非相对论性量子力学出发, 采用体心坐标系

* 四川省科技厅应用基础基金 (批准号: 2009JY0140) 资助的课题.

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

下的振动密耦合方法和固定核方向近似得到电子散射的径向运动耦合的积分-微分方程^[18,25,26]

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k_v^2 \right] u_{vl,v_0}^A(r) = 2 \sum_{v'l'} \left[V_{vl,v'l'}^A(r) u_{v'l',v_0l_0}^A(r) - \int \kappa_{v,v'}^A(l,l'|r,r') u_{v'l',v_0l_0}^A(r') dr' \right], \quad (1)$$

其中 $V_{vl,v'l'}^A(r)$ 为除交换势外的势能耦合矩阵元, $\kappa_{v,v'}^A(l,l'|r,r')$ 为非局域的交流势的耦合矩阵元, $u_{vl,v_0}^A(r)$ 是径向散射函数, r 是散射电子的空间坐标, v_0, v 和 v' 分别是初始振动量子数、末振动量子数和耦合振动态量子数, l_0, l 和 l' 分别是初始角动量量子数、末角动量量子数和耦合态角动量量子数, $\frac{1}{2}k_v^2$ 是散射电子的动能

$$\frac{1}{2}k_v^2 = \frac{1}{2}k_0^2 - (\varepsilon_v - \varepsilon_0), \quad (2)$$

$\frac{1}{2}k_0^2$ 是入射电子能量, ε_v 是靶分子在第 v 个振动态的能量, ε_0 是基态振动能量. 振动耦合势能为

$$V_{vl,v'l'}^A(r) = \langle \phi_v(R) Y_l^A(\hat{r}) | V^{\text{scp}} | \phi_{v'}(R) Y_{l'}^A(\hat{r}) \rangle_{R,\hat{r}}, \quad (3)$$

势能 $V^{\text{scp}}(r, R)$ 表示如下:

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

(4)式包含了静电势能 V_{st} 和相关-极化势能 V_{cp} . 静电势能 V_{st} 来自入射电子与靶分子的静电相互作用; 相关-极化势能 V_{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极化势采用了局域化近似, 用优于绝热极化势模型^[25,26] (better-than-adiabatic-dipole, BTAD) 来表示.

非局域的交流耦合势能为

$$\kappa_{v,v'}^A(l,l'|r,r') = \langle \phi_v(R) Y_l^A(\hat{r}) | \kappa^A(l,l'|r,r';R) \times | \phi_{v'}(R) Y_{l'}^A(\hat{r}) \rangle_R, \quad (5)$$

上式中 $\kappa^A(l,l'|r,r';R)$ 为交换核心. 对于闭壳层分子交换核心的表示为

$$\kappa(r, r'; R) = - \sum_{i=1}^{N_{\text{occ}}} \xi_i^{A_i}(r; R) \times \frac{1}{|r-r'|} \xi_i^{A_i^*}(r'; R), \quad (6)$$

上式中 $\xi_i^{A_i}(r; R)$ 为束缚态电子的占据轨道, 用球谐

函数将其展开

$$\xi_i^{A_i}(r; R) = \frac{1}{r} \sum_{l'=0}^{l'_{\text{max}}} \xi_{i,l'}^{A_i}(r; R) Y_{l'}^{A_i}(\hat{r}), \quad (7)$$

将(7)式代入(6)式, 得到交换核心的表达式为

$$\kappa^A(l,l'|r,r';R) = \sum_{i=1}^{N_{\text{occ}}} \sum_{l''} \sum_{\lambda=0}^{\infty} \xi_{i,l''}^{A_i}(r; R) \times G_{\lambda}(l,l',l'',l''';A,A_i) \times \left(\frac{r_{<}}{r_{>}} \right)^{\lambda} \xi_{i,l''}^{A_i}(r'; R). \quad (8)$$

严格交换势能的计算不仅需要知道空间每一点的波函数, 而且交换核心的计算需要做大量的展开, 这都极大地增加了计算交换势能的复杂性和计算量.

为了将理论值与实验值作比较, 还要把微分截面对所有分子的取向作平均, 即

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \Big|_{v_0 \rightarrow v} \equiv \frac{1}{4\pi} \frac{k_v}{k_0} \int |f_{v,v_0}(r)|^2 d\hat{R}, \quad (9)$$

上式即为振动激发微分截面. 在实验坐标系下, 微分截面表示为

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \Big|_{v_0 \rightarrow v} \equiv \frac{1}{4k_0^2} \sum_{l=0}^{l_{\text{max}}} B_L(v_0 \rightarrow v) P_L(\cos\theta'), \quad (10)$$

其中, θ' 是实验室坐标系下的角度, 系数 $B_L(v_0 \rightarrow v)$ 与角度无关, 其具体表达式为

$$B_L(v_0 \rightarrow v) = \sum_{\Lambda\bar{\Lambda}} \sum_{l\bar{l}} \sum_{l_0\bar{l}_0} d_L(l\bar{l}, l_0\bar{l}_0; \Lambda\bar{\Lambda}) T_{vl,v_0l_0}^{\Lambda} T_{v\bar{l},v_0\bar{l}_0}^{\Lambda*}, \quad (11)$$

其中 $T_{vl,v_0l_0}^{\Lambda}$ 为散射跃迁矩阵. 所有的角动量耦合都隐含在系数 d_L 中

$$d_L(l\bar{l}, l_0\bar{l}_0; \Lambda\bar{\Lambda}) = i^{l_0-l-l_0+l} \frac{1}{2L+1} [(2l+1) \times (2\bar{l}+1)(2l_0+1)(2\bar{l}_0+1)]^{1/2} \times C(l\bar{l}; 0, 0) C(l\bar{l}; \Lambda - \Lambda) \times C(l_0\bar{l}_0; 0, 0) C(l_0\bar{l}_0; \bar{\Lambda} - \bar{\Lambda}), \quad (12)$$

其中, C 为 Clebsh-Gordan 系数^[27-29]. 由微分截面(10)式对散射立体角 $d\Omega$ 求积分后, 可得积分散射截面的公式

$$\sigma_{v_0 \rightarrow v} = \frac{\pi}{k_0^2} \sum_{l=0}^{l_{\text{max}}} \sum_{l_0=0}^{l_{\text{max}}} \sum_{\Lambda=-l}^{+l} |T_{vl,v_0l_0}^{\Lambda}|^2 = \sum_{\Lambda=-l}^{+l} \sigma_{v_0 \rightarrow v}^{\Lambda}, \quad (13)$$

其中每个分子对称性的截面为

$$\sigma_{v_0 \rightarrow v}^A = \frac{\pi}{k_0^2} \sum_{l=0}^{l_{\max}} \sum_{l_0=0}^{l_{\max}} |T_{vl, v_0 l_0}^A|^2. \quad (14)$$

3. 计算方法

方程(1)是整个振动激发散射计算的基础. 由于非局域性交换势能的存在, 将耦合的微分方程变成了积分-微分方程, 极大地增加了求解径向耦合方程的难度. 本文基于计算速度和数值稳定性方面的考虑, 在不同的空间区域我们采用不同的计算方法. 在靶核附近区域, 非局域的交换势作用非常强, 首先我们用格林函数将耦合的积分-微分方程(1)式变为耦合的积分方程, 然后用线性代数方法^[30-33]求解积分方程, 在这个过程中利用 Bloch 算符^[24,34]在 $r_{\text{mach}} = 10.0 a_0$ 处抽取 \mathbf{R} 矩阵; 在远离靶核的渐近区域, 再用 R-matrix-propagator 方法^[34, 35]将抽取出来的 \mathbf{R} 矩阵从 $r_{\text{mach}} = 10.0 a_0$ 处传播到渐近区域, 实际计算中在 $r_{\text{max}} = 200.0 a_0$ 处抽取出散射矩阵 \mathbf{K} . 矩阵的大小由振动状态的数目 N_v 和分波数目 N_l 确定, 实际计算中, 首先计算 11 个不同核间距 R ($0.500 a_0, 0.800 a_0, 1.000 a_0, 1.200 a_0, 1.400 a_0, 1.600 a_0, 1.800 a_0, 2.000 a_0, 2.200 a_0, 2.500 a_0, 2.600 a_0$) 的波函数, 然后分别计算不同核间距时的相互作用势能项, 最后通过数值积分, 利用体系的振动波函数, 得到振动耦合势能项. 由(3)和(5)式可知采用不同的振动波函数将会得到不同的耦合势能, 从而也就会得到不同的散射截面. 本文采用 simons-parr-finlan-dunham (SPFD)^[36,37] 势求解核的薛定谔方程而得到 SPFD 振动波函数. 用 10 个 SPFD 振动波函数和 5 个分波计算了振动激发散射的微分截面与积分截面, 并与实验结果和别人的理论计算进行了比较.

4. 结果与分析

基于密耦合方法计算的散射截面, 部分参数对最终截面有很大影响, 其中主要包括相互作用势、振动波函数数目以及分波数目. 对于相互作用势的影响, 我们对非局域的交换势能进行了严格的从头计算. 对于振动波函数数目和分波数目的影响, 本文采用固定部分参数调节法^[23,38], 用 10 个 SPFD 波函数和 5 个分波, 得到了收敛的 $(0 \rightarrow 0)$, $(0 \rightarrow 1)$, $(0 \rightarrow 2)$ 振动激发散射截面.

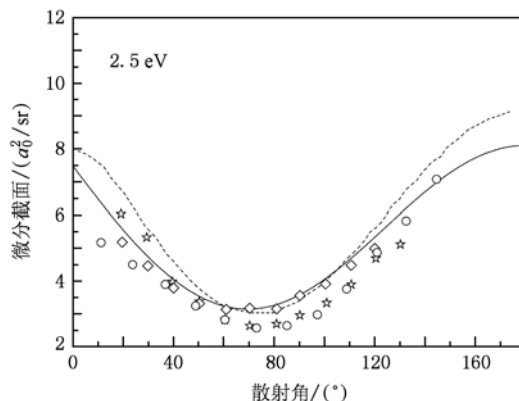


图1 入射能量为 2.5 eV 的电子与氢分子弹性碰撞 $(0 \rightarrow 0)$ 振动激发微分散射截面. 实线是本文理论计算结果, 虚线是 Mazon 等^[21]的理论结果, 五角星是 Brunger 等^[7]的实验结果, 空心圆是 Shyn 等^[8]的实验结果, 菱形是 Linder 等^[39]的实验结果

4.1. 微分散射截面

图1将本文计算的入射能量为 2.5 eV 时弹性碰撞 $(0 \rightarrow 0)$ 振动激发微分散射截面与 Brunger^[7], Shyn 等^[8], Linder 等^[39]的实验结果和 Mazon^[21]等的理论结果进行了比较. Mazon 等^[21]的计算结果在小角度和大角度时逐渐偏离实验值, 而我们的计算结果在整个范围内与实验值都符合得较好.

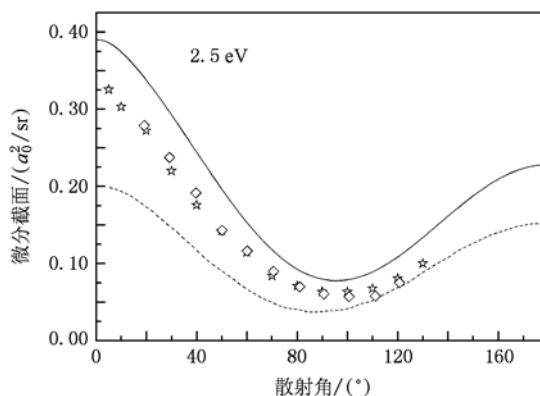


图2 入射能量为 2.5 eV 的电子与氢分子非弹性碰撞 $(0 \rightarrow 1)$ 振动激发微分散射截面. 实线是本文理论计算结果, 虚线是 Mazon 等^[21]的理论结果, 五角星是 Brunger 等^[7]的实验结果, 菱形是 Linder 等^[39]的实验结果

图2将入射能量为 2.5 eV 时非弹性碰撞 $(0 \rightarrow 1)$ 振动激发微分散射截面与 Brunger 等^[7], Linder 等^[39]实验结果和 Mazon 等^[21]的理论结果进行了比较. Mazon 等^[21]理论结果在小角度时有偏离实验值的趋势, 而我们的计算结果在整体比较和趋势上都

更接近实验结果.

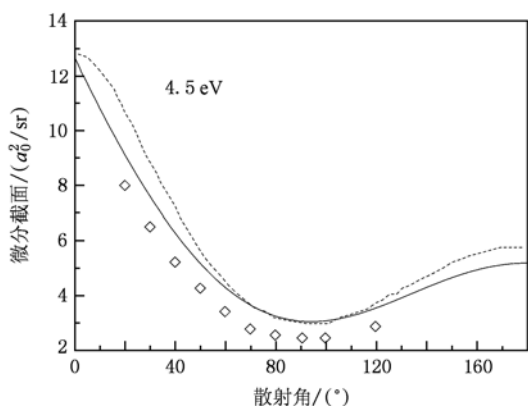


图3 入射能量为4.5 eV的电子与氢分子弹性碰撞(0→0)振动激发微分散射截面. 实线是本文理论计算结果,虚线是Mazon等^[21]的理论结果,菱形是Linder等^[39]的实验结果

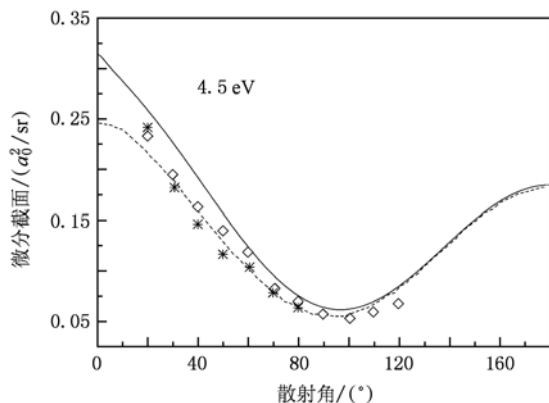


图4 入射能量为4.5 eV的电子与氢分子非弹性碰撞(0→1)振动激发微分散射截面. 实线是本文理论计算结果,虚线是Mazon等^[21]的理论结果,菱形是Linder等^[39]的实验结果,米字形是Wong等^[40]的实验结果

图3—5将本文计算的入射能量为4.5 eV时的弹性碰撞(0→0)和非弹性碰撞(0→1),(0→2)的振动激发微分散射截面与已有的实验值^[7,39,40]和Mazon等^[21]的理论值进行了比较. 这些比较说明, 本文的弹性碰撞(0→0)微分散射截面与实验的符合程度总体上比Mazon等^[21]的理论值的符合程度好, 而对于非弹性振动激发散射, 两种理论结果与实验的符合度均比较好.

表1给出了本文关于振动激发微分散射截面的理论计算结果.

4.2. 积分散射截面

图6将本文的弹性碰撞(0→0)振动积分散射

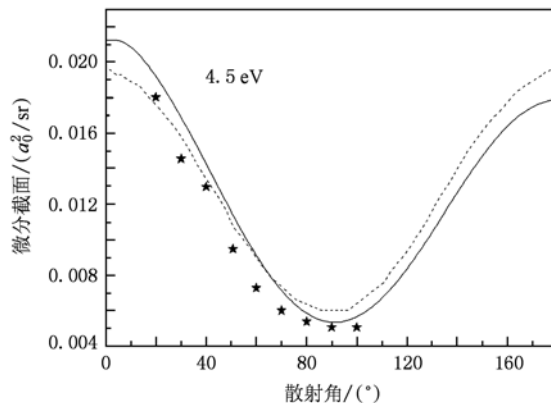


图5 入射能量为4.5 eV的电子与氢分子非弹性碰撞(0→2)振动激发微分散射截面. 实线是本文理论计算结果,虚线是Mazon等^[21]的理论结果,星字形是Wong等^[40]的实验结果

截面与Brunger等^[7], Jones^[9], Ferch等^[10], Subramanian等^[11], Nickel等^[12]的实验结果和Wang等^[15]的理论结果进行了比较. 在入射电子能量小于3.0 eV时, Wang等^[15]的计算结果与本文的计算结果非常接近; 在入射电子能量大于3.0 eV时, Wang等^[15]计算结果逐渐偏离实验值, 而本文的计算结果与实验值符合得更好.

长期以来, 由于电子与氢分子非弹性碰撞(0→1)散射截面在Beam和Swarm两类实验上存在着较大的差异^[44,45], 图7将本文的非弹性碰撞(0→1)振动激发积分散射截面与Wang等^[15]的理论结果和推荐实验值^[41]以及具有代表性的Ehrhardt等^[42]的Beam实验结果和England等^[43]的Swarm实验结果进行了比较. 本文的计算结果与Wang等^[15]的理论结果非常接近. 两种理论研究都没有解决Beam和Swarm实验长期存在的差异, 但它们与Ehrhardt等^[42]的Beam实验结果更为接近.

图8将本文的非弹性碰撞(0→2)的振动激发积分散射截面与实验值^[42]和Wang等^[15]的理论结果进行了比较. 在非共振区间我们的计算结果与Wang等^[15]理论结果很接近; 在2—4 eV的共振区间, 我们的计算结果有微小的振荡结构, 这证实了Allan^[46]在实验上观察到的振荡现象和Horacek等^[14]的理论计算结果. 但无论是我们的计算结果还是Wang等^[15]理论结果都与Ehrhardt等^[42]的实验值存在一定的差距, 我们期待更多实验数据结果和理论研究.

表2给出了本文关于振动激发积分散射截面的理论计算结果.

表1 微分散射截面(a_0^2/sr)

角度 $\theta/(\circ)$	2.5 eV(0—0)	2.5 eV(0—1)	4.5 eV(0—0)	4.5 eV(0—1)	4.5 eV(0—2)
0	7.47728	0.39000	12.6583	0.31391	0.02125
5	6.96880	0.38614	11.7075	0.30125	0.02122
10	6.47392	0.37431	10.7972	0.28735	0.02085
15	5.99701	0.35749	9.92840	0.27334	0.02014
20	5.54260	0.33770	9.10242	0.25853	0.01921
25	5.11531	0.31592	8.32108	0.24284	0.01811
30	4.71972	0.29275	7.58645	0.22633	0.01690
35	4.36025	0.26874	6.90079	0.20916	0.01560
40	4.04105	0.24437	6.26643	0.19158	0.01425
45	3.76587	0.22016	5.68565	0.17388	0.01290
50	3.53797	0.19659	5.16055	0.15638	0.01157
55	3.35996	0.17415	4.69289	0.13944	0.01030
60	3.23377	0.15327	4.28400	0.12341	0.00912
65	3.16054	0.13437	3.93468	0.10866	0.00806
70	3.14059	0.11781	3.64509	0.09550	0.00715
75	3.17332	0.10388	3.41469	0.08423	0.00641
80	3.25729	0.09281	3.24218	0.07507	0.00585
85	3.39014	0.08475	3.12553	0.06822	0.00549
90	3.56866	0.07977	3.06193	0.06378	0.00534
95	3.78884	0.07785	3.04784	0.06179	0.00539
100	4.04591	0.07892	3.07905	0.06223	0.00565
105	4.33446	0.08279	3.15072	0.06499	0.00609
110	4.64853	0.08924	3.25753	0.06991	0.00671
120	5.32722	0.10854	3.55322	0.08526	0.00837
125	5.67818	0.12063	3.72979	0.09507	0.00937
130	6.02759	0.13378	3.91712	0.10583	0.01043
135	6.36855	0.14751	4.10899	0.11716	0.01153
140	6.69433	0.16138	4.29932	0.12866	0.01263
145	6.99857	0.17490	4.48236	0.13994	0.01370
150	7.27531	0.18765	4.65277	0.15060	0.01470
155	7.51920	0.19921	4.80569	0.16030	0.01560
160	7.72550	0.20921	4.93689	0.16871	0.01638
165	7.89023	0.21733	5.04276	0.17556	0.01701
170	8.01021	0.22332	5.12047	0.18062	0.01748
175	8.08314	0.22699	5.16793	0.18372	0.01777
180	8.10760	0.22823	5.18389	0.18476	0.01786

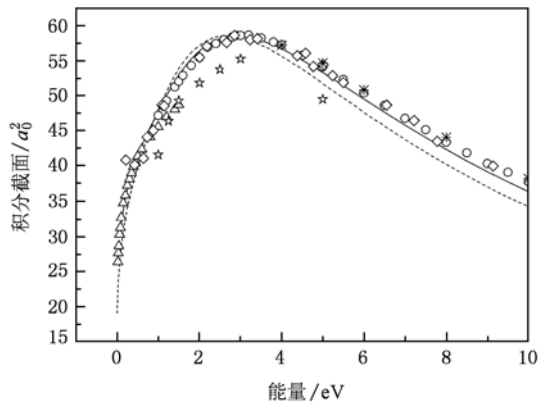


图6 电子与氢分子弹性碰撞(0→0)振动激发积分散射截面. 实线是本文理论计算结果,虚线是Wang等^[15]的理论结果,五角星是Brunger等^[7]的实验结果,空心圆是Jones^[9]的实验结果,三角形是Ferch等^[10]的实验结果,菱形是Subramanian等^[11]的实验结果,米字形是Nickel等^[12]的实验结果

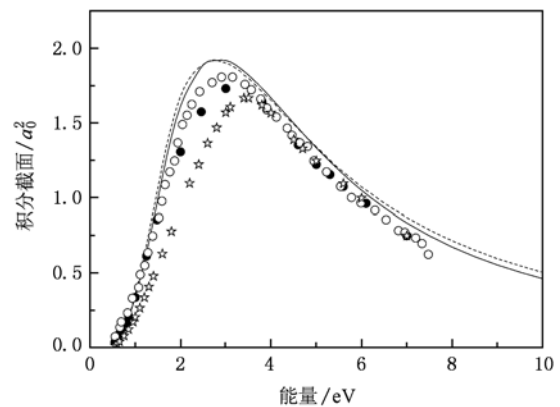


图7 电子与氢分子非弹性碰撞(0→1)振动激发积分散射截面. 实线是本文理论计算结果,虚线是Wang等^[15]的理论结果,实心圆是推荐实验值^[41],空心圆是Ehrhardt等^[42]的实验结果,五角星是England等^[43]的实验结果

表2 积分散射截面(a_0^2)

能量/eV	0—0	0—1	0—2	能量/eV	0—0	0—1	0—2
0.1	31.97715			3.0	58.47491	1.91833	0.16238
0.2	35.49645			3.1	58.41796	1.90869	0.16240
0.3	37.89588			3.2	58.32733	1.89153	0.16344
0.4	39.78701			3.3	58.20662	1.86962	0.16361
0.5	41.39355			3.4	58.05766	1.84530	0.16219
0.6	42.87652	0.03414		3.5	57.88201	1.81940	0.15952
0.7	44.21879	0.08751		3.6	57.68160	1.79196	0.15622
0.8	45.48407	0.15646		3.7	57.45879	1.76278	0.15280
0.9	46.69176	0.24020		3.8	57.21594	1.73193	0.14946
1.0	47.85202	0.33844	0.00022	3.9	56.95516	1.69974	0.14617
1.1	48.96941	0.44935	0.00123	4.0	56.67830	1.66661	0.14284
1.2	50.04209	0.57360	0.00379	4.2	56.08240	1.59892	0.13593
1.3	51.06652	0.70828	0.00817	4.5	55.10372	1.49682	0.12519
1.4	52.03687	0.85061	0.01485	4.8	54.05147	1.39685	0.11471
1.5	52.94640	0.99666	0.02410	5.0	53.32191	1.33250	0.10806
1.6	53.78806	1.14215	0.03652	5.2	52.57712	1.27048	0.10173
1.7	54.55616	1.28159	0.05197	5.5	51.44228	1.18238	0.09287
1.8	55.24714	1.40962	0.07000	5.8	50.29832	1.10050	0.08478
1.9	55.86050	1.52175	0.08938	6.0	49.53597	1.04939	0.07982
2.0	56.39843	1.61453	0.10840	6.2	48.77683	1.00103	0.07518
2.1	56.86670	1.68824	0.12415	6.5	47.64853	0.93344	0.06880
2.2	57.27173	1.74732	0.13398	6.8	46.53748	0.87150	0.06308
2.3	57.61677	1.79916	0.13795	7.0	45.80842	0.83314	0.05959
2.4	57.90075	1.84907	0.13897	7.5	44.03276	0.74667	0.05188
2.5	58.11857	1.89062	0.14614	8.0	42.33114	0.67214	0.04544
2.6	58.27762	1.91107	0.15953	8.5	40.70819	0.60782	0.04003
2.7	58.39220	1.91632	0.16795	9.0	39.16528	0.55218	0.03548
2.8	58.46506	1.91789	0.16828	9.5	37.70166	0.50389	0.03162
2.9	58.49239	1.92045	0.16453	10.0	36.31521	0.46184	0.02833

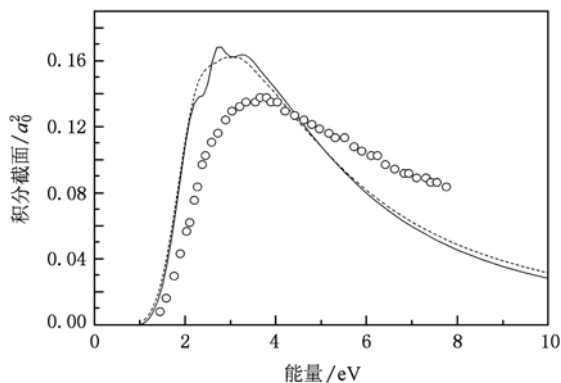


图8 电子与氢分子非弹性碰撞(0 → 2) 振动激发积分散射截面. 实线是本文理论计算结果, 虚线是 Wang 等^[15]的理论结果, 空心圆是 Ehrhardt 等^[42]的实验结果

5. 结 论

本文基于散射碰撞的严格交换势, 利用体心坐

标系下的振动密耦合方法得到了低能电子与氢分子弹性与非弹性碰撞振动激发散射的微分截面和积分截面. 研究表明, 对非局域的交换势做严格计算是必要的, 而选择不同的振动势能和振动基矢对振动激发散射的计算结果也有显著的影响. 由于目前计算中的静电势和严格交换势基于单 Slater 行列式, 对散射分子体系束缚态电子的相关效应较为粗糙, 因此对高振动散射截面, 尤其是随入射能量的增大理论与实验差别较大, 今后的工作将把严格交换核心推广到更准确的束缚态电子密度上. 同时我们期待更多的实验结果用于对照理论研究, 也期待对非局域的极化势进行严格处理, 实现真正意义上的低能电子与双原子分子振动激发散射的全量子力学计算.

- [1] Massey H S 1969 *Electronic and Inoic Impact Phenomena, Vol. II; Electron Collision with Molecules and Photoionization* (Oxford University, London)
- [2] Capitelli M, Celiberto R, Esposito F, Laricchiuta A, Hassouni K, Longo S 2002 *Plasma Sources Sci. Technol.* **11** A7-A25
- [3] Lieberman M A, Lichtenberg A J 1994 *Principles of Plasma Discharges, Materials Processing* ed Wiley (New York)
- [4] Lane N F 1980 *Rev. Mod. Phys.* **52** 29
- [5] White R D, Robson R E, Morrison M A, Li B, Ness K F 2007 *J. Phys. Conf.* **71** 012004
- [6] Crompton R W, Morrison M A 1993 *Aust. J. Phys.* **46** 203
- [7] Brunger M J, Buckman S J, Newman D S, Alle D T 1991 *J. Phys. B* **24** 1435
- [8] Shyn T W, Sharp W E 1981 *Phys. Rev. A* **24** 1734
- [9] Jones R K 1985 *Phys. Rev. A* **31** 2898
- [10] Ferch J, Raith W, Schröder K 1980 *J. Phys. B* **13** 1481
- [11] Subramanian, Kumar V 1989 *J. Phys. B* **22** 2387
- [12] Nickel J C, Kanik I, Trajmar S, Imre K 1992 *J. Phys. B* **25** 2427
- [13] Schneider B I, Collins L A 1983 *Phys. Rev. A* **27** 2847
- [14] Horáček J, Āížek M, Houfek K, Kolorenč P 2006 *Phys. Rev. A* **73** 022701
- [15] Wang B, Feng H, Sun W G, Zeng Y Y, Dai W 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 6932 (in Chinese) [王 斌、冯 灏、孙卫国、曾阳阳、戴维 2009 物理学报 **58** 6932]
- [16] Morrison M A, Saha B C 1986 *Phys. Rev. A* **34** 2796
- [17] 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
- [18] Morrison M A, Sun W 1995 *Computational Methods for Electron - Molecule Collisions* ed Huo W, Gianturco F A (New York: Plenum) chapter 6, pp 131—90
- [19] Chandra N, Temkin A 1976 *Phys. Rev. A* **13** 188
- [20] Morrison M A, Feldt A N, Austin D 1984 *Phys. Rev. A* **30** 2811
- [21] Mazon K T, Fujiwara R, Lee M T 2001 *Phys. Rev. A* **64** 042705
- [22] Morrison M A, Crompton R W, Saha B C, Petrovic Z L 1987 *Aust. J. Phys.* **40** 239
- [23] Zeng Y Y, Feng H, Sun W G, Wang B 2009 *Chin. Phys. Lett.* **26** 023402
- [24] Wang X L, Feng H, Sun W G, Fan Q C, Zeng Y Y, Wang B 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 0937 (in Chinese) [王小炼、冯 灏、孙卫国、樊群超、曾阳阳、王 斌 2010 物理学报 **59** 0937]
- [25] Morrison M A, Trail W K 1993 *Phys. Rev. A* **48** 2874
- [26] Feng H, Sun W, Morrison M A, Feldt A N 2009 *J. Phys. B* **42** 175201
- [27] Zare R N 1988 *Angular Momentum: Understanding Spatial Aspects in Chemistry and Physics* (Wiley, New York)
- [28] Rose M E 1957 *Elementary Theory of Angular Momentum* (Wiley, New York)
- [29] Edmonds A R 1968 *Angular Momentum in Quantum Mechanics* (Princeton Univer. Press, Jersey N)

- [30] Collins L A, Schneider B I 1981 *Phys. Rev. A* **24** 2387
- [31] Schneider B I, Collins L A 1982 *J. Phys. B* **15** L335
- [32] Schneider B I, Collins L A 1983 *Phys. Rev. A* **27** 2847
- [33] Schneider B I, Collins L A 1984 *Phys. Rev. A* **30** 95
- [34] Schneider B I, Walker R B 1978 *J. Chem. Phys.* **70** 2466
- [35] Schneider B I, Taylor H S 1982 *J. Chem. Phys.* **77** 379
- [36] Simons G, Parr R G, Finlan M J 1973 *J. Chem. Phys.* **59** 3229
- [37] Trail W K, Morrison M A, Isaacs W A, Saha B 1990 *Phys. Rev. A* **41** 4868
- [38] Dai W, Feng H, Sun W G, Tang Y J, Shen L, Yu J Z 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 144 (in Chinese) [戴伟、冯灏、孙卫国、唐永健、申立、于江周 2008 物理学报 **57** 144]
- [39] Linder F, Schmidt H 1971 *Z. Naturforsch.* **26A** 1603
- [40] Wong S F, Schulz G J 1974 *Phys. Rev. Lett.* **32** 1089
- [41] Yoon J S, Song M Y, Han M J, Hwang S H, Chang W S, Lee B J, Itikawa Y 2008 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **37** 913
- [42] Ehrhardt H, Langhans L, Linder F, Taylor H S 1968 *Phys. Rev.* **173** 222
- [43] England J P, Elford M T, Crompton R W 1988 *Aust. J. Phys.* **41** 573
- [44] Buckman S J, Brunger M J 1997 *Aust. J. Phys.* **50** 483
- [45] Crompton R W, Morrison M A 1993 *Aust. J. Phys.* **46** 203
- [46] Allan M 1985 *J. Phys. B* **18** L451

Study on vibrational excitation cross sections of low-energy electrons scattering from H₂ molecule including exact exchange*

Li Yong-Jun¹⁾ Feng Hao^{2)†} Sun Wei-Guo¹⁾²⁾ Zeng Yang-Yang¹⁾ Wang Xiao-Lian¹⁾
Li Hui-Dong¹⁾ Fan Qun-Cao²⁾

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

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

(Received 9 March 2010; revised manuscript received 31 May 2010)

Abstract

Elastic and inelastic differential and integral cross sections for low-energy vibrational excitation of H₂ by electron impact are studied with exact exchange. The resulting coupled integrodifferential equations are solved using a combination of linear-algebraic and *R*-matrix-propagator techniques. The converged ($0 \rightarrow 0$, $0 \rightarrow 1$, $0 \rightarrow 2$) differential and integral cross sections are obtained. The calculated results are in good agreement with experimental results and other calculations, showing that the exact exchange based on equations of vibrational close coupling plays an important role in low-energy electron scattering from H₂ molecule.

Keywords: exact exchange, H₂ molecular vibrational excitation, differential cross section, integral cross sections

PACS: 34.50.Ez

* Project supported by the Application Foundation of Science and Technology of Sichun Province, China (Grant No. 2009JY0104)

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