

低能电子散射中的定域交换势(I)

电子被He, Ne和Ar原子的散射

袁建民 张志杰

(应用物理系)

摘要 文中利用自由电子气体近似(HFEGE)定域交换势和修正的半经典近似(MSCE)定域交换势,加上正交化方法(Orthogonalization technique),对能量在0.1~20eV的低能电子被He, Ne和Ar原子的弹性散射过程进行了计算。其中靶原子的电荷分布以及入射电子和靶原子的静电作用利用原子的 Roothaan-Hartree-Fock 波函数求出;相关和极化作用则用一个无参数的相关极化势近似表示。通过本文计算结果和严格计及交换作用的结果及实验数据相比较,对HFEGE和MSCE交换势的准确性以及正交化过程对计算结果的影响进行了分析。

关键词 原子物理, 弹性散射, 电子散射, Ne原子, He原子, Ar原子

分类号 O562.5

引言

在低能电子被原子或分子的散射中,入射电子和靶中电子的交换作用对散射过程有很重要的影响。根据量子理论严格计及交换作用其计算量是很大的,尤其对包含电子个数较多的大原子和分子。为了有效地从理论上对散射过程进行计算,有很多作者寻求利用定域交换势来近似表示散射过程中的交换作用^{[1]~[6]}。对于分子体系,尤其是大的双原子分子和绝大多数的多原子分子,目前的计算大都集中在各种定域交换势上^[7],这些交换势虽然带有很大的近似,但计算结果比仅包括静电势还是有显著的改进。另一个常用的方法是由Burke和Chandra^[8]提出的,它通过使入射电子的波函数正交于具有相同对称性的靶中被占据单电子轨道来近似入射电子和靶中电子的交换作用,单独使用正交化方法往往不能得到好的结果,所以通常把正交化方法和各种定域交换势结合起来使用^[9]。

极化作用在低能电子的散射过程中也具有重要的作用。必须同时考虑极化、交换和静电作用才能得到和实验吻合较好的结果,而极化作用同样往往利用各种模型势来近似,所以各种定域交换势一般是和各种近似极化作用的模型势一起使用的。因为各种极化势

也都具有不同程度的近似, 这样把带有近似的交换势和极化势放在一起使用, 就不能很清楚地把理论计算结果同实验数据之间的差别归结于交换势或者极化势, 把这样的理论结果同实验数据进行比较, 只能从整体上对表示交换作用的模型势和表示极化作用的模型势一起应用的总效果进行评价。这里面可能包含着二者误差的相互抵消, 而对所用的近似方法分别对交换作用和极化作用近似效果的好坏不能作很清楚的估计。

自由电子气体(HFEGE)近似交换势^[1]和半经典近似(SCE)^[3]以及修正的半经典近似(MSCE)交换势^[6]在计算中得到比较广泛的应用^{[9],[10]}, 并且往往和正交化方法结合起来使用。正交化过程对计算结果的影响, 对不同的交换势在不同的情况下是不一样的, 但对此缺乏直接的验证。我们曾经严格计及交换作用对e-He, e-Ne和e-Ar低能散射过程进行了计算^[11]。本文中我们将用HFEGE交换势加正交化过程(OHFEGE)和MSCE交换势加正交化过程(OMSCE)进行计算, 通过比较本文和前文^[11]的计算结果, 对HFEGE和MSCE交换势的准确性以及正交化过程对计算结果的影响进行了分析。

1 理论方法

在 Static-exchange 近似下, 对具有闭壳层结构的靶, 被散射电子的波函数所满足的方程为

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{1}{2}\nabla_{\vec{r}}^2 + V_s(\vec{r}) - \frac{1}{2}k^2 \right) F(\vec{r}) \\ &= \sum_i \left(\left(\epsilon_i - \frac{1}{2}k^2 \right) \langle \phi_i(\vec{r}') | F(\vec{r}') \rangle \right. \\ & \quad \left. + \langle \phi_i(\vec{r}') \left| \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right| F(\vec{r}') \rangle \right) \phi_i(\vec{r}) \end{aligned} \quad (1)$$

这里 \vec{r} 和 k 分别是入射电子的坐标和动量, ϕ_i 和 ϵ_i 分别是靶中单电子轨道及相应的单电子本征值, $F(\vec{r})$ 是散射波函数。

方程(1)中的 $V_s(\vec{r})$ 是静电势, (1)式右边的项则是交换作用项, 其中的第一项是正交性条件所要求的, 而第二项则是 Pauli 不相容原理引起的, 如果用一个交换势 $V_E(\vec{r})$ 来近似交换项中的第二项, 而第一项通过引进 Lagrange 乘子来近似, 则(1)式可以近似成

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla_{\vec{r}}^2 + V_s(\vec{r}) + V_E(\vec{r}) - \frac{1}{2}k^2 \right) F(\vec{r}) = \sum_i \lambda_i \phi_i(\vec{r}) \quad (2)$$

考虑到相关和极化效应, 应该对 (1)、(2) 式进行修正, 把没有包括进 Static-exchange 近似的作用考虑进来, 一般是在 (1)、(2) 式中, 引进一个极化势, 这样 (1)、(2) 式分别修正为

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{1}{2}\nabla_{\vec{r}}^2 + V_s(\vec{r}) + V_{cr}(\vec{r}) - \frac{1}{2}k^2 \right) F(\vec{r}) \\ &= \sum_i \left(\left(\epsilon_i - \frac{1}{2}k^2 \right) \langle \phi_i(\vec{r}') | F(\vec{r}') \rangle + \right. \\ & \quad \left. \langle \phi_i(\vec{r}') \left| \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right| F(\vec{r}') \rangle \right) \phi_i(\vec{r}) \end{aligned} \quad (3)$$

和

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{1}{2}\nabla_r^2 + V_S(\vec{r}) + V_E(\vec{r}) + V_{CP}(\vec{r}) - \frac{1}{2}k^2 \right) F(\vec{r}) \\ & = \sum_i \lambda_i \phi_i(\vec{r}) \end{aligned} \quad (4)$$

这里 $V_{CP}(\vec{r})$ 是相关极化势, 本文在计算中选用 Padial 和 Norcross^[12] 的无参数的相关极化势。交换势 $V_E(\vec{r})$ 选用 HFEGE 近似^[11]:

$$V_{HFEGE}(\vec{r}) = -\frac{2}{\pi} K_F(\vec{r}) \left(\frac{1}{2} + \frac{1-\eta^2}{4\eta} \ln \left| \frac{1+\eta}{1-\eta} \right| \right) \quad (5)$$

$$K_F(\vec{r}) = [3\pi^2 \rho(\vec{r})]^{1/3}$$

$$\eta(\vec{r}) = (k^2 + 2I + K_F^2)^{1/2} / K_F$$

这里 $\rho(\vec{r})$ 是电子分布密度, I 是靶的第一电离能, 和 MSCE 近似^[6]:

$$\begin{aligned} V_{MSCE}(\vec{r}) &= \frac{1}{2} \left[E - V_S(\vec{r}) + \frac{3}{10} (3\pi^2 \rho(\vec{r}))^{2/3} \right] \\ & - \frac{1}{2} \left\{ \left[E - V_S(\vec{r}) + \frac{3}{10} (3\pi^2 \rho(\vec{r}))^{2/3} \right]^2 + 4\pi \rho(\vec{r}) \right\}^{1/2} \end{aligned} \quad (6)$$

这里 E 是入射电子能量。

Padial 和 Norcross^[12] 的相关极化势采取把近程的密度泛函理论中的相关势和远程的极化势相连接的办法, 则

$$V_{CP}(r) = \begin{cases} V_C(r) & r < r_c \\ V_P(r) & r \geq r_c \end{cases} \quad (7)$$

$$V_C(r) = \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho(r) \epsilon_C(\rho))$$

$$= \begin{cases} 0.0311 \ln r_s - 0.0584 + 0.006 r_s \ln r_s - 0.015 r_s & r_s \leq 0.7 \\ -0.07356 + 0.02224 \ln r_s & 0.7 < r_s \leq 10 \\ -0.584 r_s^{-1} + 1.988 r_s^{-3/2} - 2.450 r_s^{-2} - 0.733 r_s^{-5/2} & r_s > 10 \end{cases} \quad (8)$$

$$V_P(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} -\alpha/2r^4 \quad (9)$$

这里 $V_C(r)$ 是密度泛函理论中的相关势^[13], 其中 $\epsilon_C(\rho)$ 是相关能密度^[14], α 是靶原子的极化率, r_c 是 V_C 和 V_P 的内交点, 对 He, Ne 和 Ar 分别是 1.99, 2.33 和 3.51 原子单位, $r_s = (3/4\pi\rho)^{1/3}$.

利用分波展开, 方程(4)的径向方程为

$$\begin{aligned} & \left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} - V_S(r) - V_E(r) - V_{CP}(r) + k^2 \right) u_l(r) \\ & = \sum_i \lambda_i P_i^l(r) \end{aligned} \quad (10)$$

其中 $u_l(r)$ 和 $P_i^l(r)$ 分别是分波展开式

$$F(\vec{r}) = \sum_{l,0} \frac{1}{r} u_l(r) Y_{l,0}(\vec{r}) \quad (11)$$

和

$$\phi_i(\vec{r}) = \frac{1}{r} P_l^i(r) Y_{l,mi}(\hat{r}) \quad (12)$$

中的径向部分，方程(10)右边的求和只对具有角量子数 l 的单电子轨道进行。

方程(10)运用 Numerov 方法求解，我们修正了 Herman—Skillman^[15]的分割点，积分步长从0.00018到0.05个原子单位。为了避免靶原子的波函数不准给计算结果带来影响，本文计算中采用严格的Roothaan—Hartree—Fock波函数^[16]。

2 结果和讨论

图1中给出的是e—He散射的总截面，我们分别利用 HFEGE 交换势和 MSCE 交换势，分别加正交化过程和不加正交化过程进行了计算。图1中一起给出的还有严格考虑交换作用(ESE)的计算结果和一组实验数据。e—He散射的总截面在1eV附近有一个极大值，其数值为 6\AA^2 多一点。从图中看出：不加正交化过程，HFEGE和MSCE近似分别在0.5eV和0.75eV附近给出弹性总截面的极大值，其数值分别为 8.3\AA^2 和 8.6\AA^2 ；加了正交化过程后，HFEGE和MSCE交换势分别在0.75eV和1.75eV附近给出数值分别为 6.9\AA^2 和 6.7\AA^2 的极大值。很明显，正交化过程对e—He散射的计算结果有显著影响，因为He原子只有一个s壳层并且又是最外壳层，所以正交化过程只会对s分波的相移和分波截面产生影响，而且影响比较明显。对e—He散射来讲，在所示的能量范围内对总截面的贡献主要来源于s分波，所以正交化过程对总截面也有显著影响。表1中列出了各分波的相移，从表中可以看出：正交化过程对s分波的相移有明显影响，对HFEGE和MSCE最大分别达9.5%和15.6%，和严格计及交换作用的结果相比较，HFEGE，

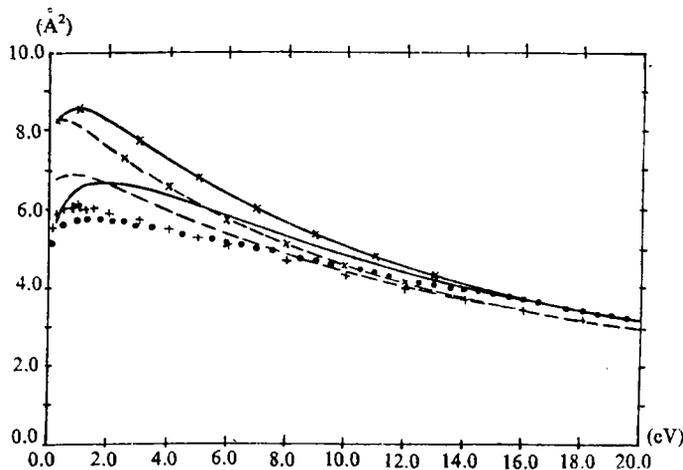


图1 e—He散射的总截面

— 本文OMSCE计算结果； — × — × 本文MSCE计算结果；
 - - - - 本文OHFEGE计算结果； - × - - × - 本文HFEGE计算结果；
 ESE计算结果，引自[14]； + + + + 实验数据，引自[17]

OHFEGE，MSCE和OMSCE近似的s分波相移都小于ESE分波相移，表明所用的近似方法，对s分波而言没有充分地计及交换作用的影响。对p分波来讲，HFEGE近似的

表1 e-He散射的分波相移

入射 电子 能量 (eV)	相 移						$\eta(\text{rad})$							
	s 分 波			p 分 波			d 分 波			f 分 波				
	OMSCE	MSCE	OHFEGE	HFEGE	ESE	OMSCE	MSCE	OHFEGE	HFEGE	ESE	OMSCE	MSCE	OHFEGE	HFEGE
0.5	-0.2431	-0.2540	-0.3010	-0.2699	-0.2981	0.0129	0.0175	0.0175	0.0112	0.0112	0.0015	0.0016	0.0015	0.0015
1.0	-0.3493	-0.3735	-0.4318	-0.3855	-0.4223	0.0273	0.0364	0.0364	0.0228	0.0228	0.0031	0.0033	0.0031	0.0031
1.5	-0.4301	-0.4633	-0.5295	-0.4730	-0.5118	0.0423	0.0549	0.0549	0.0343	0.0343	0.0047	0.0051	0.0047	0.0047
2.0	-0.4978	-0.5386	-0.6091	-0.5153	-0.5910	0.0576	0.0725	0.0725	0.0459	0.0459	0.0064	0.0070	0.0063	0.0063
3.0	-0.6082	-0.6612	-0.7359	-0.6627	-0.7106	0.0881	0.1050	0.1050	0.0682	0.0682	0.0095	0.0111	0.0096	0.0096
4.0	-0.6980	-0.7600	-0.8357	-0.7573	-0.8059	0.1176	0.1337	0.1337	0.0696	0.0696	0.0135	0.0152	0.0134	0.0134
5.0	-0.7743	-0.8431	-0.9180	-0.8368	-0.8849	0.1455	0.1590	0.1590	0.1096	0.1096	0.0172	0.0195	0.0166	0.0166
6.0	-0.8407	-0.9148	-0.9880	-0.9055	-0.9524	0.1713	0.1812	0.1812	0.1283	0.1283	0.0210	0.0238	0.0201	0.0201
7.0	-0.8997	-0.9778	-1.0488	-0.9661	-1.0113	0.1919	0.2008	0.2008	0.1456	0.1456	0.0250	0.0281	0.0238	0.0238
8.0	-0.9527	-1.0310	-1.1023	-1.0201	-1.0631	0.2165	0.2179	0.2179	0.1616	0.1616	0.0289	0.0324	0.0274	0.0274
9.0	-1.0008	-1.0846	-1.1502	-1.0687	-1.1101	0.2359	0.2330	0.2330	0.1761	0.1761	0.0329	0.0367	0.0311	0.0311
10.0	-1.0448	-1.1305	-1.1933	-1.1130	-1.1524	0.2534	0.2463	0.2463	0.1899	0.1899	0.0369	0.0408	0.0347	0.0347
12.0	-1.1229	-1.2110	-1.2662	-1.1909	-1.2264	0.2831	0.2684	0.2684	0.2136	0.2136	0.0448	0.0490	0.0419	0.0419
14.0	-1.1906	-1.2798	-1.3317	-1.2576	-1.2896	0.3068	0.2857	0.2857	0.2335	0.2335	0.0525	0.0568	0.0489	0.0489
16.0	-1.2501	-1.3395	-1.3865	-1.3157	-1.3444	0.3256	0.2993	0.2993	0.2502	0.2502	0.0599	0.0641	0.0557	0.0557
18.0	-1.3032	-1.3920	-1.4346	-1.3670	-1.3928	0.3406	0.3102	0.3102	0.2643	0.2643	0.0670	0.0710	0.0622	0.0622
20.0	-1.3509	-1.4367	-1.4773	-1.4129	-1.4361	0.3525	0.3190	0.3190	0.2761	0.2761	0.0737	0.0775	0.0684	0.0684

* ESE值引自[11]

相移小于ESE计算值, 而MSCE近似的相移在能量小于8eV时大于ESE值, 在能量大于9eV时小于ESE值, 表明HFEGE交换势总是偏弱, 而MSCE交换势在低能时偏强, 能量较高时偏弱, 从MSCE交换势的表达式(6)也可看出这一点。对于 d 分波, 从相移来看, HFEGE近似仍偏弱, 而MSCE近似在所列能量范围内都稍过强。

图2所示的是 e -Ne散射的总截面, 从图中看出正交化过程对MSCE交换势的计算结果有很大改进, 但MSCE近似对 e -Ne散射来讲其准确性在所示的能量范围内较差, MSCE的计算结果和ESE结果以及实验数据吻合的非常差, 加了正交化过程后的OMSCE结果和ESE及实验数据吻合的也不够好。对HFEGE交换势, 正交化过程的效果不是很明显, OHFEGE和HFEGE的弹性总截面之差最大为 0.24 \AA^2 , 而OMSCE和MSCE的弹性总截面之差最大达 2.27 \AA^2 。在所示的能量范围内, OHFEGE以及HFEGE的结果同ESE

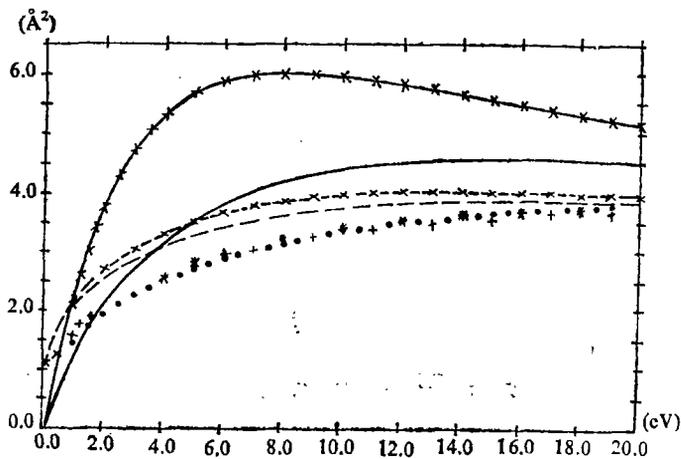


图2 e -Ne散射的总截面

— 本文OMSCE计算结果; -x-x- 本文MSCE计算结果;
 --- 本文OHFEGE计算结果; -x-x- 本文HFEGE计算结果;
 ESE计算结果, 引自[11]; +++ 实验数据, 引自[18];
 * * * 实验数据, 引自[19]

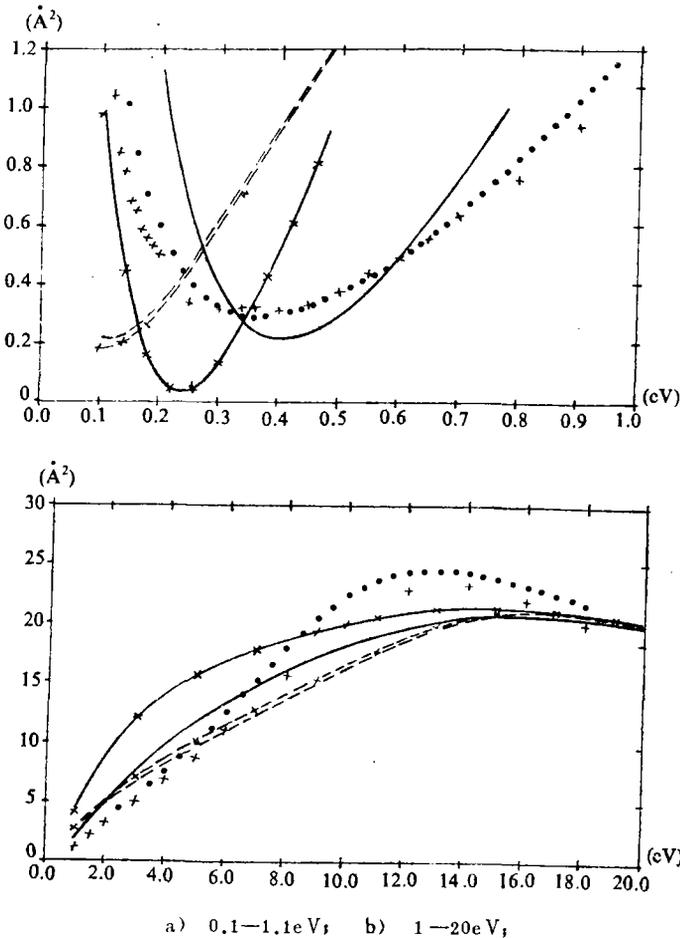
和实验数据的吻合相对较好。表2中列出的是 e -Ne散射的相移。对于 s 分波, OMSCE和MSCE近似分别在能量低于2eV和1eV时表现出过强的吸引, 相应的相移大于ESE值, 而在较高的能量处吸引则偏弱, 相应的相移偏小。OHFEGE和HFEGE近似在整个所示的能量范围都显得偏弱, 相应的相移偏小。对MSCE交换势来讲正交化过程对相移的影响相对较大, OMSCE和MSCE的相移之差最大为0.045, 正交化过程对HFEGE交换势的相移的影响则很小, 所引起的相移变化最大仅为0.006。对于 p 分波, 所有的交换势以及加正交化过程的相移相对ESE值都偏小, 正交化过程对 p 分波的相移有很明显的影响, 尤其是对MSCE交换势, 带来的相移之差最大达0.1552, 对HFEGE交换势, 正交化过程最大引起0.027的相移变化, 虽然比起MSCE势的0.1552, 0.027是很小的, 但和 s 分波的0.006相比表明: 正交化过程对于和靶的最外壳层的单电子轨道有相同对称性的分波的相移和分波截面有相对较显著的影响。对 d 分波, 正交化过程对结果无影响, MSCE交换势表现得偏强, 而HFEGE交换势仍偏弱。

表 2 c—Ne 散射的分波相移

入射 电子 能量 (eV)	相 移 (rad)													
	s 分 波			p 分 波			d 分 波			f 分 波				
	OMSCE	MSCE	OHFEGE	HFEGE	ESE	OMSCE	MSCE	OHFEGE	HFEGE	ESE	DMSCE	MSCE	OHFEGE	HFEGE
0.5	-0.1059	-0.0664	-0.1328	-0.1358	0.0072	0.0065	-0.0233	0.0052	0.0020	0.0030	0.0031	0.0031	0.0030	0.0030
1.0	-0.1753	-0.1403	-0.2103	-0.2140	0.0050	-0.0000	-0.0621	-0.0001	-0.0076	0.0061	0.0066	0.0066	0.0060	0.0060
1.5	-0.2338	-0.2132	-0.2540	-0.0018	-0.0128	-0.1014				0.0095	0.0101	0.0104		
2.0	-0.2856	-0.2778	-0.3202	-0.3289	-0.0113	-0.0290	-0.1376	-0.0226	-0.0377	0.0131	0.0144	0.0144	0.0126	0.0126
3.0	-0.3762	-0.3888	-0.4329	-0.4239	-0.0348	-0.0661	-0.2006	-0.0516	-0.0719	0.0209	0.0232	0.0232	0.0196	0.0196
4.0	-0.4548	-0.4830	-0.5277	-0.5050	-0.0611	-0.1051	-0.2530	-0.0825	-0.1061	0.0296	0.0327	0.0327	0.0271	0.0271
5.0	-0.5249	-0.5684	-0.6102	-0.5767	-0.0883	-0.1435	-0.2974	-0.1184	-0.1388	0.0390	0.0427	0.0427	0.0351	0.0351
6.0	-0.5886	-0.6389	-0.6835	-0.6414	-0.1154	-0.1805	-0.3357	-0.1434	-0.1698	0.0492	0.0531	0.0531	0.0435	0.0435
7.0	-0.6473	-0.7055	-0.7496	-0.7005	-0.1420	-0.2156	-0.3693	-0.1723	-0.1959	0.0599	0.0637	0.0637	0.0522	0.0522
8.0	-0.7017	-0.7661	-0.8099	-0.7551	-0.1679	-0.2487	-0.3991	-0.1999	-0.2262	0.0712	0.0744	0.0744	0.0611	0.0611
9.0	-0.7525	-0.8227	-0.8655	-0.8059	-0.1930	-0.2800	-0.4259	-0.2261	-0.2519	0.0828	0.0852	0.0852	0.0702	0.0702
10.0	-0.8003	-0.8751	-0.9171	-0.8535	-0.2172	-0.3095	-0.4502	-0.2512	-0.2762	0.0947	0.0961	0.0961	0.0795	0.0795
12.0	-0.8881	-0.9700	-1.0103	-0.9407	-0.2630	-0.3635	-0.4930	-0.2977	-0.3208	0.1190	0.1175	0.1175	0.0983	0.0983
14.0	-0.9675	-1.0545	-1.0931	-1.0192	-0.3056	-0.4117	-0.5299	-0.3100	-0.3610	0.1437	0.1385	0.1385	0.1173	0.1173
16.0	-1.0399	-1.1307	-1.1675	-1.0905	-0.3451	-0.4651	-0.5624	-0.3267	-0.3976	0.1663	0.1567	0.1567	0.1360	0.1360
18.0	-1.1066	-1.2000	-1.2351	-1.1561	-0.3820	-0.4944	-0.5916	-0.3444	-0.4312	0.1925	0.1781	0.1781	0.1544	0.1544
20.0	-1.1684	-1.2638	-1.2971	-1.2167	-0.4164	-0.5302	-0.6182	-0.3647	-0.4623	0.2160	0.1967	0.1967	0.1724	0.1724

* ESE值引自[11]

图3所示的是e—Ar散射的总截面，e—Ar散射总截面在低能的主要特征是位于0.35eV附近的 Ramsauer—Townsend(RT)极小点和位于14eV附近的d分波形状共振极大，实验给出的极小点附近和共振峰附近的总截面分别大约为0.3Å²和23Å²。从图中可以看出：正交化过程对MSCE交换势的结果仍有较大影响，MSCE近似的RT极小位于0.24eV，其大小为0.05Å²；而OMSCE近似给出的RT极小则位于0.42eV，其大小为0.24Å²；另外在1~12eV之间，MSCE和OMSCE的结果也有较明显的差别，但二者都在15eV附近给出共振极大，大小为20~21Å²，在12eV以上二者的结果相差较小。和Ne原子的情况类似，OHFEGE近似和HFEGE近似的结果之间的差别很小，图中所示的两条曲线几乎靠在了一起，它们的最大差别仅有15%，HFEGE和OHFEGE近似在0.12eV处给出大小为0.2Å²的RT极小值，在16.5eV附近给出数值为21Å²的极大峰。除去在RT极小点附近OMSCE的结果和ESE及实验数据吻合较好外，所有的MSCE及HFEGE的截面曲线，包括加正交化过程的，和ESE及实验数据吻合的不够好。表3中



a) 0.1—1.1eV; b) 1—20eV;

图3 e—Ar散射的总截面

— OMSCE计算结果; -x-x- MSCE计算结果; ···· OHFEGE计算结果;
 -x-x-x- HFEGE计算结果; ······ ESE计算结果, 引自[11];
 + 实验数据, 引自[17]

表 3 e—Ar 散射的分波相移

入射 电子 能量 (eV)	相 移 (rad)													
	s 分 波			p 分 波			d 分 波			f 分 波				
ESE*	OMSCE	MSCE	OHFEGE	HFEGE	ESE	OMSCE	MSCE	OHFEGE	HFEGE	ESE	OMSCE	MSCE	OHFEGE	HFEGE
0.1	0.0529	0.0832	0.0437	0.0082	0.0066	0.0114	0.0112	0.0055	0.0108	0.0101	0.0024	0.0024	0.0024	0.0024
0.2	0.0368	0.0609	0.0135	-0.0199	-0.0219	0.0182	0.0171	0.0025	0.0167	0.0148	0.0049	0.0050	0.0050	0.0049
0.3	0.0148	0.0305	-0.0210	-0.0491	-0.0514	0.0222	0.0197	-0.0047	0.0196	0.0162	0.0075	0.0076	0.0076	0.0074
0.4	-0.0088	-0.0013	-0.0554	-0.0776	-0.0800	0.0244	0.0197	-0.0146	0.0204	0.0156	0.0102	0.0105	0.0105	0.0100
0.5	-0.0323	-0.0328	-0.0836	-0.1049	-0.1075	0.0247	0.0177	-0.0261	0.0194	0.0131	0.0130	0.0134	0.0134	0.0126
1.0	-0.1442	-0.1763	-0.2355	-0.2261	-0.2292	0.0120	-0.0094	-0.0933	-0.0006	-0.0138	0.0285	0.0294	0.0294	0.0267
2.0	-0.3308	-0.4012	-0.4610	-0.4173	-0.4207	-0.0460	-0.0970	-0.2262	-0.0715	-0.0939	0.0690	0.0692	0.0692	0.0598
3.0	-0.4832	-0.5763	-0.6347	-0.5695	-0.5729	-0.1161	-0.1909	-0.3369	-0.1508	-0.1777	0.1239	0.1177	0.1177	0.0999
4.0	-0.6137	-0.7215	-0.7778	-0.6980	-0.7013	-0.1872	-0.2802	-0.4337	-0.2280	-0.2566	0.1944	0.1735	0.1735	0.1473
6.0	-0.8312	-0.9562	-1.0080	-0.9103	-0.9135	-0.3216	-0.4390	-0.5863	-0.3684	-0.3957	0.3616	0.3017	0.3017	0.2641
8.0	-1.0099	-1.1439	-1.1914	-1.0838	-1.0867	-0.4425	-0.57238	-0.7068	-0.4901	-0.5142	0.6169	0.4441	0.4441	0.4090
10.0	-1.1623	-1.3010	-1.3416	-1.2314	-1.2311	-0.5505	-0.6898	-0.8070	-0.5966	-0.6167	0.8654	0.5930	0.5930	0.5779
12.0	-1.2953	-1.4364	-1.4765	-1.3600	-1.3626	-0.6474	-0.7908	-0.8933	-0.6907	-0.7072	1.0897	0.7420	0.7420	0.7628
14.0	-1.4133	-1.5553	-1.5924	-1.4742	-1.4766	-0.7949	-0.8800	-0.9695	-0.7748	-0.7883	1.2721	0.8860	0.8860	0.9512
16.0	-1.5193	-1.6614	-1.6987	-1.5769	-1.5791	-0.8143	-0.9596	-1.0379	-0.8507	-0.8616	1.4132	1.0214	1.0214	1.1299
18.0	-1.6202	-1.7570	-1.8109	-1.6700	-1.6721	-0.8669	-1.0314	-1.1148	-0.9197	-0.9287	1.5214	1.1452	1.1452	1.2890

* ESE值引自[11]

列出了 e -Ar散射各分波的相移, 在能量小于0.5eV时, OMSCE的 s 分波相移大于相应的ESE值, 表现出过强的吸引。正交化过程对MSCE近似的相移有较大影响; s 分波的OMSCE和MSCE的相移之差可达0.0524; s 分波的OHFEGE和HFEGE的相移之差很小, 不超过0.0025。所有的MSCE, OHFEGE和HFEGE的 s 分波相移较相应的ESE相移都偏小。正交化过程对 p 分波的相移有较显著的影响, OMSCE和MSCE的相移之差达0.1535, 最大的OHFEGE和HFEGE相移之差为0.0286, 所有的OMSCE, MSCE, OHFEGE和HFEGE的 p 分波相移和ESE值相比都偏小。正交化过程对 d 分波相移无影响, 在能量大于3eV时, 所有的MSCE和HFEGE相移明显小于相应的ESE值, 从而引起所计算的 d 分波共振峰向高能方向移动, 并且峰值偏小。

3 结 论

MSCE和HFEGE交换势对能量低于20eV的低能电子的散射不够可靠, MSCE近似对 e -Ne和 e -Ar散射在能量很低时过强, 在其它情况下过弱, 而HFEGE交换势在所有计算中都偏弱。正交化过程对MSCE交换势的计算结果有较明显的改进, 但对HFEGE交换势, 除He原子外, 正交化过程对结果影响较小。正交化过程对具有和靶的最外壳层单电子轨道相同对称性的分波的相移和分波截面其影响相对较大。为了得到可靠的计算结果, 必须从理论上对交换势进行更进一步的研究, 正交化过程对更大的原子和分子的效果也应作进一步的分析。

致谢: 本工作得到我校原子分子物理与物理力学研究中心支持。对赵伊君教授和张正文付教授对本工作的指导表示感谢, 对蒋志平讲师在使用计算机方面所给予的帮助表示感谢。

参 考 文 献

- [1] Hara S. J Phys Soc Japan, 1967; 22:710
- [2] Slater J C. Quantum Theory of Atomic Structure Vol 2. New York: McGraw-Hill, 1960
- [3] Riley M E, Truhlar D G. J Chem Phys, 1975; 63: 2182
- [4] Gov Q, Pan S, Zhao Y, Xu H, Ding P. Scientia Sinica, 1981; 14: 1075
- [5] Berg H P. J Phys B: At Mol Phys, 1982; 15: 3769
- [6] Gianturco F A, Scialla S. J Phys B: At Mol Phys, 1987; 20: 3171
- [7] Christophorou L G. Electron-Molecule Interactions and Their Applications Vol 1. New York: Academic Press, Inc, 1984
- [8] Burke P G, Chandra N. J Phys B: At Mol Phys, 1972; 5: 1696
- [9] Gianturco F A, Thompson D G. J Phys B: At Mol Phys, 1976; 9: L383; Collins L A, Morrison M A. Phys Rev A, 1982; 25: 1764
- [10] Jain A. Phys Rev A, 1986; 34: 954; Gianturco F A, Jain A, Pantano L G. J Phys B: At Mol Phys, 1987; 20: 571; Jain A K, Tripathi A N, Jain A. J Phys B: At Mol Phys, 1987; 20: L389
- [11] Yuan Jianmin. J Phys B: At Mol Opt Phys, 1988; 21: 3753
- [12] Padial N T, Norcross D W. Phys Rev A, 1984; 29: 1742
- [13] Kohu W, Sham L H. Phys Rev, 1965; 140: A1133

- [14] Gordon R G, Kim Y S. *J Chem Phys*, 1972; 56: 3122
- [15] Herman F, Skillman S. *Atomic Structure Calculations*. Prentice-Hall, 1963
- [16] Clementi E, Roetti C. *At Data Nucl Data Tables*, 1974; 14: 177
- [17] Buckman S J, Lohmann B. *J Phys B: At Mol Phys*, 1986; 19: 2547
- [18] Salop A, Nakano H H. *Phys Rev A*, 1970; 2: 127
- [19] Nickel J C, Imre K, Register D F, Trajmar S. *J Phys B: At Mol Phys*, 1985; 18: 125

The Local Exchange Potential for Low-energy Electron Scattering (I) —Electron Scattering from He, Ne and Ar Atoms

Yuan Jianmin Zhang Zhijie

Abstract

The elastic scattering of electrons from He, Ne and Ar atoms is investigated in the energy range of 0.1—20 eV by using the free—electron—gas exchange (HFEGE) potential and the modified semiclassical exchange (MSCE) potential with orthogonalization technique. The target electron distribution and the static potentials are calculated based on the atomic Roothaan—Hartree—Fock wavefunctions. The correlation and polarization effects are approximately represented with a parameter—free correlation—polarization potential. The accuracy of the HFEGE and MSCE potentials and the effects of the orthogonalization procedure on the finally calculated results are analysed by comparing the present results with that of the exact—exchange calculations and experiments.

Key words: atomic physics, elastic scattering, electronic scattering,
He, Ne and Ar atoms