

利用Roothaan Hartree-Fock原子波函数计算的 低能电子被He和Ar原子弹性散射截面

袁建民

(应用物理系)

摘要 利用原子的 Roothaan-Hartree-Fock 波函数计算了低能 e^- -He 和 e^- -Ar 弹性散射截面。计算采用模型势方法,其中包括静电势、交换势和极化势。计算结果和实验吻合较好。通过把我们的计算结果和其他作者利用不同原子波函数的计算结果进行比较,讨论了不同原子波函数之间的差别对计算结果的影响。

关键词 原子分子物理, 低能电子, 散射计算

1. 引言

电子被原子、分子散射,在原子分子物理的理论和实验研究,以及实际工程技术的应用中都具有重要意义。低能电子和原子的散射过程中,电子和原子的作用时间长,入射电子和靶中电子的交换作用显著,原子波函数受入射电子扰动也大,严格求解散射问题很困难。这样就有许多作者^[1, 2]寻求各种近似方法和模型势来近似入射电子和靶原子的相互作用。利用模型势方法研究低能电子和原子及分子的散射过程,其优点是计算方便,物理意义明确,易于推广到大的原子体系。如果所选模型势合理,计算结果一般也比较好。但一种模型势的可行性要经过大量的计算才能得到验证。有时为了得到比较好的结果,模型势中往往要包含可调参数,通过调节可调参数来更好地近似物理效应。这些参数的确定,以及它们对不同的靶原子或分子所表现出的规律性的研究,也要经过大量的计算并同实验和其他理论比较才能完成。

靶原子或分子的波函数一般是用各种方法求出的近似解。虽然这些波函数可以给出很相近的总能量,但由于它们一般是对能量变分求出的,在对总能量影响不大的区域(如在距原子核比较远的外区),会有比较大的差别。这种差别在计算原子间相互作用势时,会给计算结果带来明显影响^[3];对计算低能电子与原子的散射也会有影响。所以在寻求各种合适的模型势,以及在确定势中包含的经验参数时,必需计及这种不同波函数之间的差别。

苟清泉等人^[1]曾提出过一种入射电子和靶原子相互作用的模型势,计算了低能电子被部分原子弹性散射的截面,取得了比较好的结果并推广到了分子体系^[1, 4-7]。

他们的模型势中包含有静电势、交换势和极化势，其中交换势中含一个表示入射电子和靶中电子交换强弱的交换因子，是一可调参数。在苟清泉等的计算中给出了由经验确定的交换参数值，但他们的计算都是用解析波函数完成的，所以给出的计算结果和交换参数值都是对解析波函数而言的。为了考查不同波函数之间的差别对计算结果和交换参数的选取带来的影响，我们^[8]曾根据苟清泉等的方法，利用原子的 χ_0 波函数^[9]计算了部分原子对低能电子弹性散射的截面。计算结果表明：波函数的差别对计算结果和交换参数的选取有明显影响。本文中根据[1]中的方法，利用 Roothaan-Hartree-Fock 原子波函数^[10]，计算了低能电子被 He 和 Ar 弹性散射的截面，并根据实验数据选取了交换参数值，对波函数的影响作了进一步的讨论。

2. 理论模型

根据[1]中提出的模型，被散射电子受原子的作用可分为：静电势 $V_c(r)$ ，交换势 $V_e(r)$ 和极化势 $V_p(r)$ ，总的势为：

$$V(r) = V_c(r) + V_e(r) + V_p(r) \quad (2.1)$$

其中：

$$V_c(r) = -\frac{Z}{r} + \sum_{i=1}^N \int \frac{|\Psi_i(\vec{r}_i)|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_i|} d\vec{r}_i \quad (2.2)$$

这里 Z 是核电荷数， N 是靶原子中的电子个数， $\Psi_i(\vec{r}_i)$ 是在单电子近似下原子的单电子波函数， \vec{r} 是入射电子坐标， \vec{r}_i 是原子中第 i 个电子坐标。

$$V_e(r) = -\gamma \left\{ 3 \left[\frac{3}{8\pi} \sum_{i=1}^N |\Psi_i(\vec{r})|^2 \right]^{\frac{1}{3}} \right\} \quad (2.3)$$

这里的交换势是根据 Slater^[11] 的统计模型得到的， γ 即表示交换作用强弱的交换参数。Slater 的统计交换势在原子、分子和固体结构的计算中得到了广泛的应用。根据 Slater 的 χ_0 理论^[11]，其交换势中也有一个和这里的 γ 地位相当的交换参数 α 。但由于结构计算和散射的情况不同—— χ_0 理论中，交换势包含有自相互作用成分，而在散射问题中交换势中不再包含任何自相互作用成分，因此散射问题的交换参数 γ 的值比 χ_0 理论的 α 要小的多。目前 γ 值的确定主要靠经验以及和实验数据的比较，也可以根据自相互作用修正理论从理论上加以估算^[12]。

在极化势

$$V_p(r) = -\frac{1}{2} \sum_{nl} \frac{\alpha_{nl}}{(\bar{r}_{nl}^2 + r^2)^2} \quad [13] \quad (2.4)$$

中， α_{nl} 是原子第 nl 支壳层的极化率， \bar{r}_{nl} 是 nl 支壳层电子轨道的平均半径。

利用分波法求解入射电子在原子场中运动的单电子 Schrödinger 方程：

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + V_c(r) + V_e(r) + V_p(r) - \frac{1}{2} k^2 \right] \Psi(\vec{r}) = 0, \quad (2.5)$$

我们有：

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l R_l(r) P_l(\cos\theta) \quad (2.6)$$

这里 $\Psi(\vec{r})$ 是入射电子的波函数， A_l 是分波展开系数，令 $u_l(r) = r \cdot R_l(r)$ ，则有

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - 2V(r) \right] U_l(r) = 0 \quad (2.7)$$

(2.7)中的 k 是入射电子的动量。对于原子场, 在 $r \rightarrow \infty$ 时 $V(r)$ 足够快地趋于零, 有

$$\begin{aligned} u_l(r) &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} r \cdot [C_l^j j_l(k \cdot r) + C_l^n n_l(k \cdot r)] \\ &\longrightarrow C_l \sin\left(k \cdot r - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l\right) \end{aligned} \quad (2.8)$$

δ_l 是相移, 由下式确定:

$$\tan \delta_l = \frac{C_l^n}{C_l^j} = \frac{j_l(k \cdot \rho)}{n_l(k \cdot \rho)} \quad (2.9)$$

ρ 是在 r 足够大, $V(r) \rightarrow 0$ 时 $u_l(r)$ 的零点。

总的弹性散射截面则为

$$\sigma = \frac{4}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2 \delta_l \quad (2.10)$$

上式中的 σ 以 $\pi \cdot a_0^2$ 为单位, a_0 是 Bohr 半径。

3. 计算结果和讨论

本文计算采用自洽场方法得到的 Roothaan-Hartree-Fock 原子波函数^[10], 原子极化率对 He 和 Ar 分别取 $1.39a.u.$ 和 $11.08a.u.$, 原子外壳层平均半径则是根据所采用的原子波函数算出的, 对 He 和 Ar 分别为 $0.9273a_0$ 和 $1.5426a_0$ 。图 1 给出了对 e^- -He 计算的弹性总截面随入射电子能量的变化曲线, 同时绘出了交换参数 γ 分别取 0.08, 0.10 和 0.115 三种情况下的结果, 从图可以看出, γ 值取 0.08 计算的截面在入射电子能量大于 8eV 处比其他两条线和实验吻合的稍好, 但在小于 8eV 时和实验的偏差则比其他两条大的

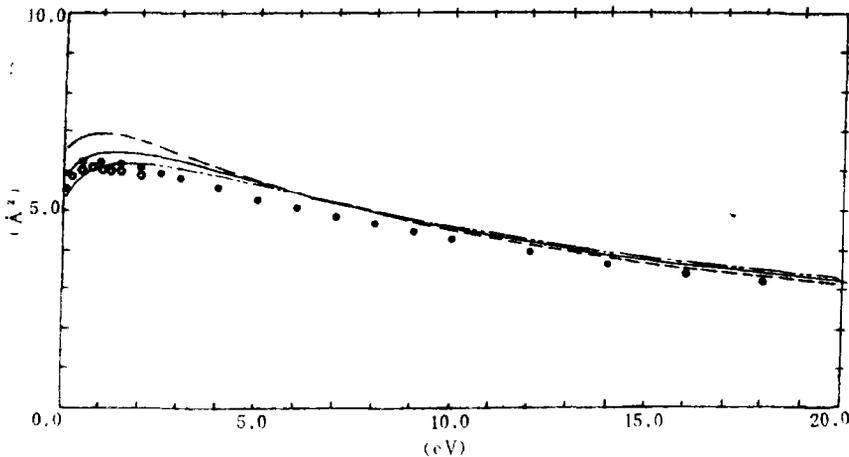
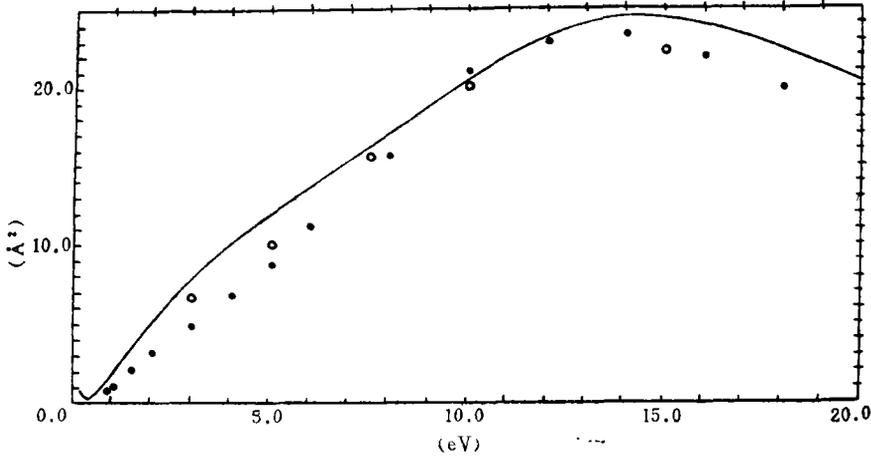


图 1 e^- -He 弹性散射总截面

—— 本文计算 γ 取 0.10; - - - 本文计算 γ 取 0.08;
 - · - · - 本文计算 γ 取 0.115; ······ 实验, 引自 [14];
 ○····· 实验, 引自 [15].

图 2 e^- -Ar 弹性散射总截面

— 本文计算; 实验, 引自[15]; ○○○ 实验, 引自[16]

多。从整个曲线来讲, γ 值取 0.10 的计算结果和实验符合较好, 所以我们认为本文的 γ 值应取 0.10。文[4]中利用解析原子波函数则取 γ 值为 0.07。图 2 给出了对 e^- -Ar 的计算结果, 计算中 γ 值取 0.13。计算表明: 在入射能量为 0.38eV 处给出 Ramsauer-Townsend 极小, 其截面为 0.28 \AA^2 ; 在 5eV 附近和 14eV 以上计算截面比实验数据偏高; 整个曲线和实验符合的还是比较好的。文[5]中利用解析原子波函数计算的 e^- -Ar 弹性散射截面, 取 γ 值为 0.25, 得到和本文相近的结果。表 1 和表 2 中分别给出了本文计算的 e^- -He 和 e^- -Ar 弹性散射的各分波相移, 分波截面和总截面。

通过本文的计算可知, 对于 e^- -He 和 e^- -Ar 的低能弹性散射过程, 用简单的模型势得到了较好的结果。这说明 Slater 的统计交换势, 除去自相互作用成份, 和 (2.4) 式的极化势一起, 可以较好地近似入射电子和靶中电子的交换作用以及入射电子对靶原子的极化。通过和文[4, 5]中的计算进行比较可以看出, 用不同方法得到的原子波函数, 虽然它们可以给出很接近的总能量, 但它们之间的差别对计算低能电子与原子的散射会带来明显的影响。在我们的计算中这种影响表现在用不同波函数进行计算所选的 γ 值有较大的不同。在本文所用的模型势中, γ 的作用不仅仅表现在表示交换作用的强弱, 还可以通过调节 γ 来部分地补偿静电势和极化势的误差。用不同波函数来进行计算, 它们的静电势, 极化势和交换势都会有差别, 所以 γ 值的变化不仅仅是为了使两种波函数算出的交换势相近, 而是为了使总的势更相近。作为模型势中所包含的参数, γ 应该反映散射的动力学效应, 它应该随入射电子的能量而变。所以, 固定 γ 的值而使整个截面曲线各处都和实验吻合的很好是很困难的。对不同的靶原子, γ 值一般是不同的, 主要和体系的电子数目、电离能和电子密度的分布有关^[2, 12]。一般地, 随着电子数增加, 交换作用中自相互作用的成分减小^[12], γ 值增大。这在我们的计算和苟清泉等的计算中都体现了出来。但对 Roothaan-Hartree-Fock 波函数来讲, γ 值随靶原子的变化及取值应作进一步的探讨。

表 1

Table 1: The phase shifts, partial and total elastic cross sections of e^- -He collision.

E(e.v.)	k(a.u.)	l	phase shifts	partial cross	total cross
				sections	sections
				(\AA^2)	(\AA^2)
0.10	0.08575	0	-0.1106	5.83	5.84
		1	0.0028	0.01	
		2	0.0003	0.00	
0.50	0.19174	0	-0.2581	6.23	6.32
		1	0.0168	0.08	
		2	0.0018	0.00	
		3	0.0005	0.00	
1.00	0.27116	0	-0.3706	6.27	6.46
		1	0.0356	0.18	
		2	0.0042	0.00	
		3	0.0011	0.00	
1.50	0.3821	0	-0.4559	6.18	6.47
		1	0.0538	0.28	
		2	0.0071	0.01	
		3	0.0018	0.00	
2.00	0.38348	0	-0.5263	6.03	6.41
		1	0.0708	0.36	
		2	0.0102	0.01	
		3	0.0026	0.00	
5.00	0.60634	0	-0.8059	4.88	5.68
		1	0.1510	0.85	
		2	0.0299	0.04	
		3	0.0090	0.01	
		4	0.0033	0.00	
10.0	0.85749	0	-1.0630	3.65	4.54
		1	0.2373	0.79	
		2	0.0570	0.08	
		3	0.0206	0.01	
		4	0.0087	0.00	
		5	0.0041	0.00	
15.0	1.05021	0	-1.2228	2.82	3.76
		1	0.2958	0.81	
		2	0.0779	0.10	
		3	0.0308	0.02	
		4	0.0142	0.01	
		5	0.0071	0.00	
		6	0.0039	0.00	
20.0	1.21268	0	-1.3369	2.26	3.20
		1	0.3388	0.79	
		2	0.0953	0.11	
		3	0.0396	0.03	
		4	0.0194	0.01	
		5	0.0103	0.00	
		6	0.0059	0.00	
		7	0.0035	0.00	

表 2

Table 2: The phase shifts, partial and total elastic cross sections of e^- -Ar collision.

E(e.v.)	k(a.u.)	l	phase shifts	partial cross sections (\AA^2)	total cross sections (\AA^2)
0.25	0.13558	0	0.0372	0.26	0.56
		1	0.0203	0.24	
		2	0.0071	0.05	
		3	0.0021	0.01	
		4	0.0009	0.00	
0.30	0.14852	0	0.0228	0.08	0.37
		1	0.0214	0.22	
		2	0.0089	0.06	
		3	0.0025	0.01	
		4	0.0011	0.00	
0.38	0.16716	0	-0.0011	0.00	0.28
		1	0.0218	0.18	
		2	0.0118	0.09	
		3	0.0033	0.01	
		4	0.0014	0.00	
0.50	0.19174	0	-0.0369	0.13	0.39
		1	0.0196	0.11	
		2	0.0165	0.13	
		3	0.0045	0.01	
		4	0.0019	0.00	
1.00	0.27116	0	-0.1733	1.42	1.85
		1	-0.0098	0.01	
		2	0.0392	0.38	
		3	0.0104	0.04	
		4	0.0041	0.01	
		5	0.0020	0.00	
2.00	0.38348	0	-0.3860	3.39	5.18
		1	-0.0994	0.71	
		2	0.0896	0.96	
		3	0.0247	0.10	
		4	0.0097	0.02	
		5	0.0046	0.01	
		6	0.0025	0.00	
5.00	0.60834	0	-0.8005	4.93	11.96
		1	-0.3416	3.22	
		2	0.2691	3.38	
		3	0.0690	0.32	
		4	0.0297	0.08	
		5	0.0149	0.02	
		6	0.0081	0.01	
		7	0.0048	0.00	
		8	0.0030	0.00	
9	0.0020	0.00			

10.0	0.85749	0	-1.2186	4.21	20.43
		1	-0.6167	4.80	
		2	0.7253	10.52	
		3	0.1384	0.64	
		4	0.0618	0.16	
		5	0.0326	0.06	
		6	0.0189	0.02	
		7	0.0117	0.01	
		8	0.0075	0.00	
		9	0.0050	0.00	
		10	0.0035	0.00	
		11	0.0025	0.00	
15.0	1.05021	0	-1.5017	3.17	24.43
		1	-0.8093	5.01	
		2	1.3170	14.94	
		3	0.2038	0.91	
		4	0.0918	0.21	
		5	0.0495	0.09	
		6	0.0294	0.04	
		7	0.0186	0.02	
		8	0.0123	0.01	
		9	0.0084	0.00	
		10	0.0059	0.00	
		11	0.0043	0.00	
12	0.0031	0.00			
20.0	1.21268	0	1.4237	2.34	20.47
		1	-0.9584	4.80	
		2	-1.4065	11.64	
		3	0.2676	1.17	
		4	0.1197	0.31	
		5	0.0656	0.11	
		6	0.0395	0.05	
		7	0.0253	0.02	
		8	0.0170	0.01	
		9	0.0118	0.01	
		10	0.0085	0.00	
		11	0.0062	0.00	
		12	0.0046	0.00	
13	0.0035	0.00			

参 考 文 献

- [1] 苟清泉, 潘守甫, 赵永芳, 徐洪山和丁培柱. *Scientia Sinica*, 24(1981), 1075
- [2] J.K. O'Connell and N.F.Lane. *Phys. Rev.*, 27(1983), 1893
- [3] 袁建民. 碱卤晶体相互作用势和晶体弹性常数的计算. 国防科大硕士学位论文, 1984
- [4] 杨向东和苟清泉. *原子与分子物理学报*, 2(1985), 2, 11
- [5] 王治文. *吉林大学学报*, (1983), 2, 65
- [6] 苟清泉和杨向东. *原子与分子物理学报*, 2(1985), 3, 1
- [7] 杨向东和苟清泉. *原子与分子物理学报*, 4(1987), 2, 395
- [8] 张志杰和赵伊君. 原子的 X_α 波函数. 原子能出版社, 1983
- [9] E.Clementi and C.Roetti. *At Data Nucl Data Tables*, 14(1974), 177
- [10] J.C.Slater. *Quantum Theory of Molecules and Solids*. McGraw-Hill, 1974
- [11] G.Böbel and P. Cortona. *J. phys. B*, 16(1983), 349
- [12] D.R.Bates and H.S.W.Massey. *Trans. Roy. Soc.*, A239(1933), 269
- [13] R.E.Kennerly and R.A.Bonham. *Phys. Rev.*, A17(1978), 1844
- [14] S.J.Buckman and B.Lohmann. *J.Phys. B*, 19(1986), 2547
- [15] S.K.Srivastava et al. *Phys. Rev.*, A23(1981), 2156

Elastic Cross Sections of e^- -He and e^- -Ar Collisions Calculated Using Roothaan- Hartree-Fock Atomic Wavefunctions

Yuan Jianmin

Abstract

The elastic cross sections of e^- -He and e^- -Ar collisions are calculated using Roothaan-Hartree-Fock wavefunctions in a model potential scheme, including static, Slater's type exchange and polarization potentials. The calculations agree with the experimental data. By comparing our calculations and the empirical exchange parameter used in the calculations with those of other authors' by using different atomic wavefunctions, the effect of the difference of different approximate atomic wavefunctions on the calculations is investigated.

Key words: Atomic and Molecular physics, Low energy electron, Calculation of cross sections

The Critical line for the Spin Model

Sen Huengge

Abstract

In this paper, using Δ - Y transformation, we obtained an expression of the critical line for the model with n dimensional classical spin vector s and Ising spin σ arrayed alternately on the honeycomb lattice.

Key words: Δ - Y transformation, critical line, n dimensional classical spin vector, Ising spin, Model

The Application of the Automatic Correction Technique of Aberrations

Wang Yongzhong

Abstract

The paper discusses mainly how to define a rational original construction