

# 一种计算中、高能电子被分子散射 总截面的修正势方法\*

施德恒<sup>†</sup> 孙金锋 刘玉芳 马 恒 朱遵略

(河南师范大学物理与信息工程学院, 新乡 453007)

(2005 年 11 月 21 收到; 2006 年 3 月 16 日收到修改稿)

在考虑分子内成键原子间的电子云重叠效应的基础上, 提出了一种能够在中、高能区准确计算“电子-分子”散射总截面的修正势方法. 利用可加性规则及 Hartree-Fock 波函数, 使用这一修正过的复光学势, 在 30—5000 eV 内对电子被 4 个等电子 ( $Z = 18$ ) 分子 (HCl, H<sub>2</sub>S, PH<sub>3</sub> 和 SiH<sub>4</sub>) 散射的总截面进行了计算, 并将理论计算值与实验结果及其他理论值进行了比较. 结果表明, 利用这一修正过的复光学势及可加性规则进行计算, 所得理论值与实验结果更为接近. 因此在复光学势中采用本文提出的这一修正方法, 可提高中、高能电子被分子散射的总截面的计算准确性.

关键词: 电子散射, 总截面, 可加性规则, 束缚原子

PACC: 3410

## 1. 引 言

中、高能(数十电子伏至数千电子伏)电子被分子散射的总截面在气体激光、大气物理、等离子体物理、材料物理与化学、化学物理以及天体物理等领域都有重要应用. 与“电子-原子”散射相比, “电子-分子”散射是一个更为复杂的多体问题, 用量子力学方法难以进行准确的计算. 为了对这类复杂散射体系的总截面进行研究, 在过去的几十年里提出了多种近似方法, 如密耦(close-coupling)法<sup>[1]</sup>、Schwinger 多通道法<sup>[2]</sup>、扭曲波近似<sup>[3]</sup>、极化轨道法<sup>[4]</sup>、R 矩阵<sup>[5]</sup>、Glauber 近似<sup>[6]</sup>、一级 Born 近似<sup>[7]</sup>以及 Schwinger 变分迭代法与扭曲波近似相结合<sup>[8]</sup>等. 但在中、高能区, 由于几乎所有的非弹性通道(如转动、振动、电子激发、电离与离解等)都被打开, 给这些方法的准确计算带来了极大的困难. 为解决这一问题, 近年来一些新方法相继被提出, 如定域复球型光学势法<sup>[9]</sup>、可加性规则<sup>[10]</sup>等等. 由于定域复球型光学势法需要知道相应的单中心分子波函数, 而准确获得一个分子(特别是比较复杂的分子)的单中心波函数是一件很

困难的事<sup>[11]</sup>, 因此这种方法存在计算不简便、适用的分子有限等问题.

可加性规则是一种较简单的计算方法, 已被广泛应用于电子被分子散射的总截面计算<sup>[10, 12-15]</sup>. 1991 年, Raj<sup>[10]</sup>选择 5 个能量点, 在 100—500 eV 内第一次利用可加性规则计算了电子被 O<sub>2</sub>, CO, CO<sub>2</sub> 和 CF<sub>4</sub> 分子散射的总截面、微分截面及积分截面. 后来, Joshipura 等<sup>[12]</sup>也用可加性规则在 100—1000 eV 内计算了电子被 O<sub>2</sub>, CO, N<sub>2</sub> 和 CO<sub>2</sub> 分子散射的总截面. 该方法随之被多人用于多个“电子-分子”散射体系的多种截面的计算<sup>[13-15]</sup>. 但由于多种原因, 在中、低能区该方法计算出的总截面与实验结果间总是存在较大的误差.

有两种方法可以提高电子被分子散射的总截面的计算准确性. 一是建立更加准确的理论模型, 但这需要获取准确的单中心分子波函数. 目前的计算方法给出的分子波函数多是多中心的, 而在将多中心的分子波函数约化成单中心的分子波函数的过程中, 往往会引入较大的误差. 另一是继续使用可加性规则或目前的某些理论方法, 但这要求我们必须对复光学势进行适当的修正. 相对而言, 后者要比前者

\* 国家自然科学基金(批准号: 10574039, 10174019)资助的课题.

<sup>†</sup> E-mail: scattering@sina.com.cn

容易得多.

研究工作者对复光学势已进行了多种修正<sup>[16-20]</sup>.在计算电子被 O<sub>2</sub> 分子散射的微分截面时, Raj 等<sup>[16]</sup>在吸收势前引入了一个衰减因子  $m = 1/k$  (其中  $k$  为入射电子的动量),获得了满意的计算结果.当电子接近靶分子时,靶分子中的电子将因入射电子的接近而被极化.考虑这一因素后, Jain<sup>[17]</sup>在计算电子被 NH<sub>3</sub> 及 H<sub>2</sub>O 分子散射的总截面时,在复光学势中引入了“极化电荷密度”概念.同时,文献<sup>[17-19]</sup>还将吸收势<sup>[21]</sup>中原子的“能隙阈值  $\Delta$ ”(即基态与第一激发态的能量差)用原子的电离势代替.在计算“正电子-分子”的散射总截面时, Baluja 等<sup>[20]</sup>还将  $\Delta$  值取成“正电子偶素的形成能”(positronium formation energy),等等.这些修正都是针对个别分子的总截面或微分截面的计算而言的,而仅针对个别分子的计算结果却难以得出普遍的结论.

针对当前复光学势的修正中存在的问题,本文对修正方法进行了改进:在复光学势中引入束缚原子概念.即在考虑分子内两成键原子间的电子云重叠的基础上对复光学势进行修正,使得可加性规则能够在 30—5000 eV 内对“电子-分子”的散射总截面进行计算.大量的计算结果表明,利用这一修正过的复光学势进行计算,可大大提高中、高能电子被分子(尤其是被复杂分子)散射时的总截面的计算准确度.

## 2. 计算方法

可加性规则认为,在中、高能区,当电子被分子散射时,分子内的各个原子是独立散射的,各原子间的相互作用可忽略.于是,总截面的计算公式可写成

$$Q_T(E) = \frac{4\pi}{k} \text{Im} F_m(\theta) \\ \approx \frac{4\pi}{k} \text{Im} \sum_{j=1}^M f_j(\theta = 0) = \sum_{j=1}^M q_T^j(E), \quad (1)$$

式中,  $q_T^j(E)$  和  $f_j$  分别为电子被分子的第  $j$  个组成原子散射时的总截面和散射振幅,  $E$  为电子的入射动能,  $M$  为分子中的原子个数.由(1)式显见,“电子-分子”散射问题被转化成了易于处理的“电子-原子”散射问题.

为求得  $q_T^j(E)$ , 须求解如下电子散射的分波方程:

$$\left( \frac{d^2}{dr^2} + k^2 - V_{\text{opt}} - \frac{K(l+1)}{r^2} \right) u_l(r) = 0, \quad (2)$$

式中

$$u_l(kr) \approx kr [J_l(kr) - iN_l(kr)] \\ + S_l k [J_l(kr) + iN_l(kr)] \quad (3)$$

为当  $r \rightarrow \infty$  时方程(2)的边界条件.这里  $J_l$  及  $N_l$  分别为 Bessel 和 Neumann 函数,  $S_l$  为复散射矩阵元,  $V_{\text{opt}}$  为复光学势,用如下形式的复函数描述:

$$V_{\text{opt}}(r) = V_s(r) + V_p(r) + V_e(r) + iV_a(r). \quad (4)$$

这里,  $V_s(r)$  为静电势,由文献<sup>[22]</sup>给出的 Hartree-Fock 波函数确定;  $V_p(r)$  为极化势,由 Zhang 等<sup>[23]</sup>给出;  $V_e(r)$  为交换势,由 Riley 等<sup>[24]</sup>给出;  $V_a(r)$  为吸收势,由 Staszewska 等<sup>[21]</sup>给出.

利用四阶 Runge-Kutta 方法编制 Fortran 程序,在满足边界条件(3)式的情况下对方程(2)求数值解,得到任一点  $\rho_m = kr_m$  处径向函数的对数导数并根据连续性原理,即可求得分子的第  $j$  个组成原子的复散射矩阵元  $S_l^j$

$$S_l^j = \frac{(1 - \rho_m J_l) H_l^{(2)'} + \rho_m H_l^{(2)'}}{(1 - \rho_m J_l) H_l^{(1)'} + \rho_m H_l^{(1)'}} \quad (5)$$

式中,  $H_l^{(1)}$  和  $H_l^{(2)}$  分别为第一类和第二类 Hankel 函数,  $H_l^{(1)'}$ ,  $H_l^{(2)'}$  为其导数.

求出(5)式后,即可按照下式求出(1)式所需的  $q_T^j(E)$ :

$$q_T^j(E) = q_e^j(E) + q_a^j(E) \\ = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{l_{\text{MAX}}} (2l+1) \times [ |1 - S_l^j|^2 \\ + (1 - |S_l^j|^2) ], \quad (6)$$

式中  $q_e^j$  和  $q_a^j$  分别是第  $j$  个组成原子的弹性截面和吸收截面.

为检验(4)式的适用性,作者在 30—5000 eV 内计算了电子被 Ar 及 Ne 原子散射的总截面,其结果分别如图 1、图 2 所示.图 1、图 2 中总截面的单位为  $a_0^2$  ( $a_0$  为玻尔半径).由图 1、图 2 显见,我们的计算值与实验结果<sup>[25-28]</sup>在整个能区内都很符合,在某些能区内甚至还优于其他理论值<sup>[29,30]</sup>,这说明(4)式是适合于“电子-原子”散射总截面的计算的.

更进一步,本文在 30—5000 eV 内也利用(4)式计算了电子被 Cl, S, P, Si 和 H 原子散射的总截面,并利用(1)式描述的可加性规则算出了电子被 4 个等电子分子 HCl, H<sub>2</sub>S, PH<sub>3</sub> 和 SiH<sub>4</sub> 散射的总截面,结

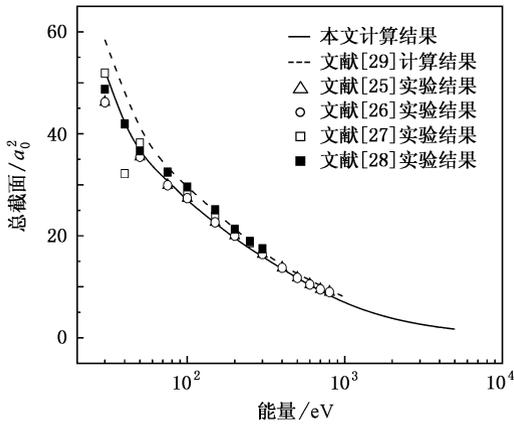


图 1 电子被 Ar 原子散射的总截面

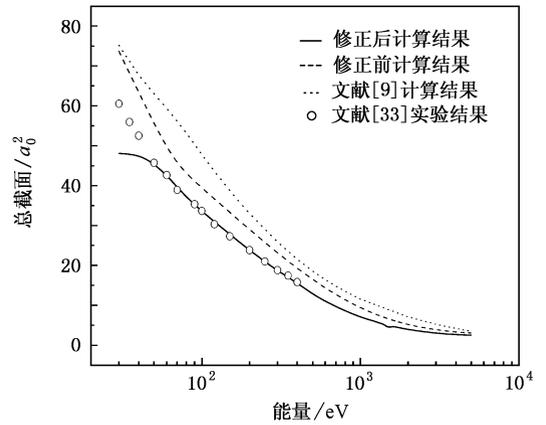


图 3 电子被 HCl 分子散射的总截面

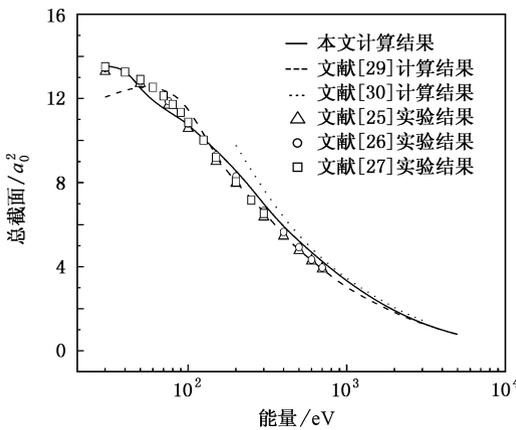
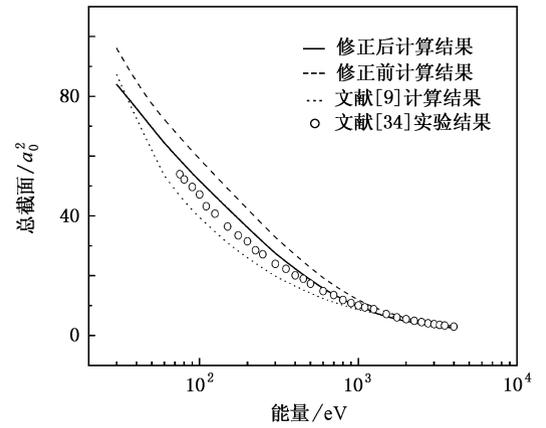
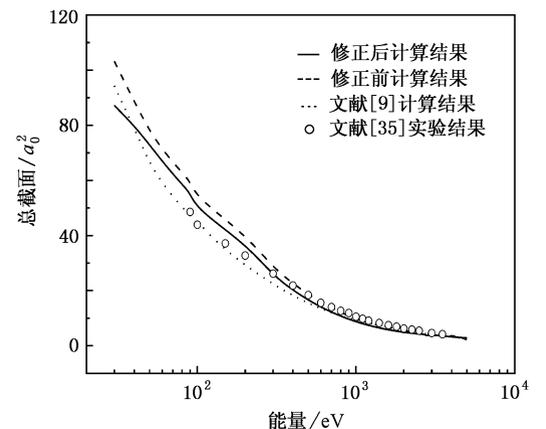


图 2 电子被 Ne 原子散射的总截面

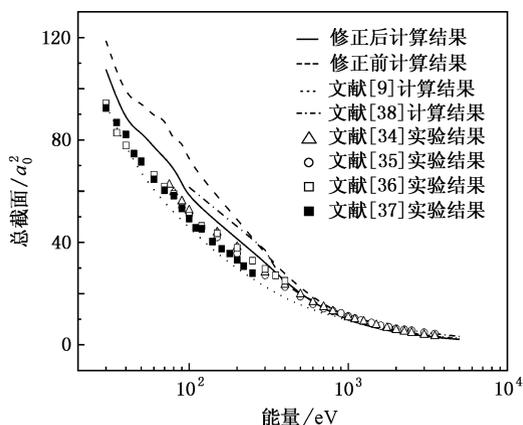
图 4 电子被 H<sub>2</sub>S 分子散射的总截面

果分别如图 3—图 6 中的虚线所示. 显然, 在中、低能区计算值与实验结果间存在较大的差异. 因此, (4) 式所描述的复光学势虽适合于电子与自由原子的散射, 但不适合于电子与分子中原子的散射.

当原子形成分子时, 分子中两个成键原子(即“束缚原子”)的电子云有重叠. 重叠的结果造成了束缚原子的电子云扭曲变形, 因而其对称性遭到了破坏. 分子中含有的原子个数越多原子间的相互作用就越复杂, 因而其情况也就越是如此. 所以, 对束缚原子的描述应该不同于不受其他任何原子影响的自由原子. 显然, 不同分子内的原子(即使是同一原子), 由于受其他原子的影响可能不同, 因而其电子云的重叠情况有可能也不同: 即使电子被不同分子内的同一原子散射, 其“电子-原子”散射的总截面也有可能不同. 因此在研究“电子-分子”散射时, 已不能使用自由原子的复光学势((4)式)来对束缚原子进行准确的描述(这意味着, 若用自由原子的复光学

图 5 电子被 PH<sub>3</sub> 分子散射的总截面

势去计算“电子-分子”散射的总截面, 则必然带来较大的误差(如图 3—图 6 中的虚线所示). 我们认为, 在考虑束缚原子间的电子云重叠效应后, 分子内某一原子对“电子-分子”散射总截面有贡献的电荷密

图6 电子被 SiH<sub>4</sub> 分子散射的总截面

度  $\rho'(r)$  应比自由原子的实际电荷密度  $\rho(r)$  小. 据此, 本文将这一对“电子-分子”散射总截面有贡献的“束缚原子”有效电荷密度”写成

$$\rho'(r) = f\rho(r), \quad (7)$$

式中  $f$  为结构因子. (1) 电子云的重叠程度应与原子含有的电子总数  $N$  和其最外壳层的电子数  $Z$  有关. 计算表明, 最外壳层的电子数越多且原子的电子总数越少, 则按 (1) 式计算出的总截面的误差就越大; 反之就越小. 因此,  $f$  因子应与  $Z/N$  有关. (2) 电子云的重叠程度应与两个成键原子的核间距 (键长  $r$ ) 及其原子半径 ( $r_1, r_2$ ) 有关. 对电子被分子散射的总截面及微分截面所进行的大量计算表明, 若  $f$  因子取如下形式的经验表达式:

$$f = 1 - \frac{r}{r_1 + r_2} \frac{Z}{N}, \quad (8)$$

则总能获得满意的计算结果. 于是 (4) 式可改写成

$$V_{\text{opt}}(r) = fV_s(r) + V_p(r) + V_c(r) + i fV_a(r), \quad (9)$$

式中

$$V_c = -\frac{1}{4} \{ \sqrt{[k^2 - \chi(fV_s + V_p)]^2 + 16\pi f\rho} - [k^2 - \chi(fV_s + V_p)] \}. \quad (10)$$

这里,  $r$  值由文献 [31] 给出,  $r_1, r_2$  则利用 Hartree-Fock 波函数<sup>[22]</sup>求得. 利用修正后的复光学势 (9) 式, 我们已计算了数个“电子-分子”散射的总截面及微分截面<sup>[32]</sup>, 并与实验结果进行了仔细比较. 结果表明, 当入射电子的能量高于 100—300 eV 时均能得到满意的计算结果, 说明  $f$  因子的经验表达式是合理的, 也是普适的.

本文选择 4 个等电子 ( $Z = 18$ ) 分子 (HCl, H<sub>2</sub>S,

PH<sub>3</sub> 和 SiH<sub>4</sub>) 作为研究对象. 之所以选择这 4 个分子作为研究对象, 主要原因有三个: 一是除 SiH<sub>4</sub> 外, 中、高能电子与其余 3 个分子散射的总截面的实验及理论结果都很少, 尽管如此, 有些理论值与实验结果间还存在较大的偏差, 因此需要补充新的理论数据; 二是这 4 个分子都有使用复杂方法给出的计算值<sup>[9]</sup>, 便于与本文的计算方法进行精度比较; 三是这 4 个分子虽总电子数都相等, 但含有的原子个数却依次增加, 因此便于分析和讨论. 如未特别说明, 本文的计算一律采用原子单位.

### 3. 结果及讨论

表 1 列出了利用 (1) (4) 及 (9) 式在 30—5000 eV 内计算得到电子被 4 个等电子分子散射的总截面.

中、高能电子被 HCl 分子散射的总截面的实验及理论结果都很少. 唯一的一组实验结果是由 Hamada 等<sup>[33]</sup> (30—400 eV) 报道的, 唯一的一组理论结果是由 Jain 等<sup>[9]</sup> (30—5000 eV) 给出的. 图 3 给出了本文的计算值及其与实验<sup>[33]</sup>和其他理论结果<sup>[9]</sup> 的比较. 在实验方面, 利用修正后的复光学势计算出的总截面, 除了在 30 和 40 eV 这两个能量点处偏小外, 其余数据与该组实验结果都非常符合. 在理论方面, 本文利用修正后的复光学势计算出的总截面, 在中、低能区的一个很大范围内都明显优于 Jain 等<sup>[9]</sup> 利用复杂的“定域复球型光学势法”获得的结果, 但使用未修正的复光学势计算出的总截面, 在中、低能区的一个很大范围内都大大高于实验值.

图 4 给出了电子被 H<sub>2</sub>S 分子散射的总截面的计算值, 同时也给出了 Zecca 等<sup>[34]</sup> 在 75—4000 eV 内的实验结果以及 Jain 等<sup>[9]</sup> 在 30—5000 eV 内的计算结果. 由图 4 不难看出, 利用修正后的复光学势计算出的总截面与已有的实验结果很符合, 说明修正后的复光学势完全适合于电子被 H<sub>2</sub>S 分子散射总截面的计算.

从图 4 还可以看出, 本文使用修正后的复光学势计算出的总截面, 在中、低能区的一个很大范围内, 其精度都优于 Jain 等<sup>[9]</sup> 的计算结果 (作者的计算值偏大, Jain 等<sup>[9]</sup> 的计算值偏小). 不同的是 Jain 等<sup>[9]</sup> 的计算中需要使用准确的单中心波函数, 因而要比本文复杂得多.

显然, 使用可加性规则及未修正的复光学势计

算出的总截面,明显高于 Zecca 等<sup>[34]</sup>的实验结果.如在  $E = 200$  eV 时,误差约为 33.4%,在  $E = 400$  eV 时约为 33.5%.

表 1 不同能量的电子被 HCl, H<sub>2</sub>S, PH<sub>3</sub> 和 SiH<sub>4</sub> 散射的总截面(单位:  $a_0^2$ )

能量/eV	HCl	H <sub>2</sub> S	PH <sub>3</sub>	SiH <sub>4</sub>
30.0	48.08	84.03	87.16	107.50
40.0	47.76	76.13	79.76	86.81
50.0	45.51	69.41	72.84	83.07
60.0	42.56	64.41	67.01	77.20
70.0	39.64	60.45	62.39	73.07
80.0	37.22	57.12	58.61	68.84
90.0	35.24	54.25	55.36	63.21
100.0	33.58	51.71	49.44	57.23
200.0	23.71	35.84	37.09	41.37
300.0	18.66	27.52	25.57	32.21
400.0	15.62	22.20	20.19	24.84
500.0	12.78	18.49	16.61	20.09
600.0	11.05	15.75	14.10	16.78
700.0	9.71	13.65	12.23	14.35
800.0	8.65	12.01	10.79	12.51
900.0	7.79	10.69	9.66	11.08
1000.0	7.10	9.62	8.76	9.95
1200.0	6.14	7.99	7.43	8.27
1400.0	5.29	6.82	6.50	7.09
1600.0	4.73	5.95	5.83	6.22
1800.0	4.30	5.28	5.33	5.55
2000.0	3.96	4.75	4.85	5.02
2500.0	3.39	3.82	4.32	4.07
3000.0	3.03	3.22	3.97	3.44
3500.0	2.81	2.79	3.58	2.99
4000.0	2.67	2.48	3.27	2.64
4500.0	2.58	2.23	3.03	2.36
5000.0	2.52	2.03	2.84	2.13

由图 3、图 4 以及图 5、图 6 显见,在中、低能区,使用修正后的复光学势计算出的总截面,总是明显优于使用未修正的复光学势获得的结果.唯一的原因就是在修正后的复光学势中考虑了分子内两成键原子间的电子云重叠效应,而未修正的复光学势则未考虑.由于可加性规则是将电子被分子散射的总截面转换成了电子被组成原子的散射总截面之和,因此当使用未修正的复光学势进行计算时,分子内

两成键原子间被重叠或屏蔽掉的那部分电子云亦被用于计算电子被组成原子散射的总截面,而实际上,它们对电子被分子散射的总截面贡献较小,从而造成计算结果偏大.

图 5 给出了电子被 PH<sub>3</sub> 分子散射的总截面的计算值, Ariyasinghe 等<sup>[35]</sup>在 90—3500 eV 内的实验结果以及 Jain 等<sup>[9]</sup>在 30—5000 eV 内的计算结果.由图 5 显见,利用修正后的复光学势计算出的总截面,与 Ariyasinghe 等<sup>[35]</sup>的实验结果也比较一致.只是在低能端,修正后的计算结果稍劣于 Jain 等<sup>[9]</sup>使用‘定域复球光学势法’这一复杂方法得到的结果.

图 6 给出了电子被 SiH<sub>4</sub> 分子散射的总截面的计算值和 Zecca 等<sup>[34]</sup>在 75—3500 eV 内、Ariyasinghe 等<sup>[35]</sup>在 90—3500 eV 内、Sueoka 等<sup>[36]</sup>在 30—400 eV 内、Szmytkowski 等<sup>[37]</sup>在 30—250 eV 内的实验结果以及 Jain 等<sup>[9]</sup>在 30—5000 eV 内、Garcia 等<sup>[38]</sup>在 100—5000 eV 内的计算结果.不难看出,利用修正后的复光学势计算出的总截面,与所有的实验结果<sup>[34—37]</sup>在相应的能区内都能很好符合,而未修正的复光学势则给出较大的偏差.尽管 Jain 等<sup>[9]</sup>的计算结果在低能端更接近实验结果,但在 200—800 eV 的中、高能区,与本文计算结果相比,却偏离实验值较大.

可加性规则忽略了分子内的多重散射效应和价键扭曲效应<sup>[39]</sup>,因此在低能区,即使使用修正后的复光学势计算出的总截面,也高于实验结果.而且,靶分子中含有的原子数越多,则这种差别就越显著.例如,对于本文的这 4 个等电子分子,当  $E = 100$  eV 时,采用修正后的复光学势计算得到的总截面, HCl 分子与唯一的一组实验数据<sup>[33]</sup>间的偏差为 0.3%, H<sub>2</sub>S 分子与唯一的一组实验数据<sup>[34]</sup>间的偏差为 9.6%, PH<sub>3</sub> 分子与唯一的一组实验数据<sup>[35]</sup>间的偏差为 11.8%, SiH<sub>4</sub> 分子与实验数据<sup>[35]</sup>间的偏差为 12.9%(为便于与 PH<sub>3</sub> 分子比较, SiH<sub>4</sub> 分子与 PH<sub>3</sub> 分子的实验数据取自同一实验组).对于其他能量点,偏差随原子个数的增加而增大的情况,从图 3—图 6 中也都不难看出.这是因为在低能下,一方面入射粒子的德布罗意波长与分子内各原子核间的距离相当,甚至大于核间距,使得发生多重散射效应的可能性增大<sup>[28]</sup>;另一方面,价键扭曲效应对总截面的总贡献为负,考虑价键扭曲效应后亦可缩小计算值与实验值间的差距<sup>[40,41]</sup>.与 HCl 分子相比, PH<sub>3</sub> 和 SiH<sub>4</sub> 分子是属含有较多原子的“大”分子,多重散射效应和价键扭曲效应对总截面的贡献大于双原子分

子<sup>[42]</sup>。这就是低能下电子被三原子分子  $H_2S$ 、四原子分子  $PH_3$  及五原子分子  $SiH_4$  散射的总截面计算值，较之电子被双原子分子  $HCl$  散射的总截面值逐渐偏离实验值的原因之一。

## 4. 结 论

本文报道了利用可加性规则及修正后的复光学势计算出的中、高能电子被  $HCl$ 、 $H_2S$ 、 $PH_3$  和  $SiH_4$  散

射的总截面，给出了在 30—5000 eV 内的计算结果，并与利用可加性规则及未修正的复光学势计算出的结果、实验结果以及他人的理论值进行了比较。比较的结果表明，利用这一修正的复光学势及可加性规则进行计算，能够达到甚至超过使用复杂方法得到结果的精度，同时也大大优于利用未修正的复光学势及可加性规则进行计算得到的结果。因此，在复光学势中采用本文提出的修正，可提高中、高能电子被分子散射的总截面的计算准确性。

- [ 1 ] Kadyrov A S , Bray I 2002 *Phys. Rev. A* **66** 012710
- [ 2 ] Bettega M H F , Ferreira L G , Lima M A P 1993 *Phys. Rev. A* **47** 1111
- [ 3 ] Gillespie E S , Thompson D G 1977 *J. Phys. B* **10** 3543
- [ 4 ] McEachran R P , Ryman A G , Stauffer A D *et al* 1977 *J. Phys. B* **10** 663
- [ 5 ] Bell K L , Scott N S , Lennon M A 1984 *J. Phys. B* **17** 4757
- [ 6 ] Gien T T 1989 *J. Phys. B* **22** L463
- [ 7 ] McEachran R P , Ryman A G , Stauffer A D 1978 *J. Phys. B* **11** 551
- [ 8 ] Lee M T , Michelin S E , Kroin T *et al* 1999 *J. Phys. B* **32** 3043
- [ 9 ] Jain A , Baluja K L 1992 *Phys. Rev. A* **45** 202
- [ 10 ] Raj D 1991 *Phys. Lett.* **160** 571
- [ 11 ] Shi D H , Sun J F , Yang X D *et al* 2005 *Chin. Phys.* **14** 1566
- [ 12 ] Joshipura K N , Patel P M 1994 *Z. Physik. D* **29** 269
- [ 13 ] Sun J F , Xu B , Liu Y F *et al* 2005 *Chin. Phys.* **14** 1125
- [ 14 ] Bobeldijk M , van de Zande W J , Kistemaker 1994 *Chem. Phys.* **179** 125
- [ 15 ] Sun J F , Tang X M , Liu Y F *et al* 2004 *Commun. Theor. Phys.* **42** 267
- [ 16 ] Raj D , Kumar A 2001 *Phys. Lett. A* **282** 284
- [ 17 ] Jain A 1988 *J. Phys. B* **21** 905
- [ 18 ] Baluja K L , Jain A , Martino V D *et al* 1992 *Europhys. Lett.* **17** 139
- [ 19 ] Raizada R , Baluja K L 1997 *Phys. Rev. A* **55** 1533
- [ 20 ] Baluja K L , Jain A 1992 *Phys. Rev. A* **45** 7838
- [ 21 ] Staszewska G , Schwenke D W , Thirumalai D *et al* 1983 *Phys. Rev. A* **28** 2740
- [ 22 ] Clementi E , Roetti C 1974 *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **14** 177
- [ 23 ] Zhang X , Sun J , Liu Y 1992 *J. Phys. B* **25** 1893
- [ 24 ] Riley M E , Truhlar D G 1975 *J. Chem. Phys.* **63** 2182
- [ 25 ] Kauppila W E , Stain T S , Smart J H *et al* 1981 *Phys. Rev. A* **24** 725
- [ 26 ] Wagenaar R W , de Heer F J 1980 *J. Phys. B* **13** 3855
- [ 27 ] Nickel J C , Imre K , Register D F *et al* 1985 *J. Phys. B* **18** 125
- [ 28 ] Wagenaar R W , de Heer F J 1985 *J. Phys. B* **18** 2021
- [ 29 ] de Heer F J , Jansen R H J , van der Kaay W 1979 *J. Phys. B* **12** 979
- [ 30 ] Dewangen D P , Walters H R J 1977 *J. Phys. B* **10** 637
- [ 31 ] Lide D R 2001 *CRC Handbook of Chemistry and Physics* ( 81st ed ) ( Boca Raton : Chemical Rubber Company )
- [ 32 ] Shi D H , Liu Y F , Sun J F *et al* 2005 *Chin. Phys.* **14** 331
- [ 33 ] Hamada A , Sueoka O 1994 *J. Phys. B* **27** 5055
- [ 34 ] Zecca A , Karwasz G P , Brusa R S 1992 *Phys. Rev. A* **45** 2777
- [ 35 ] Ariyasinghe W M , Wijerathna T , Power D 2003 *Phys. Rev. A* **68** 032708
- [ 36 ] Sueoka O , Mori S , Hamada A 1994 *J. Phys. B* **27** 1453
- [ 37 ] Szmytkowski C , Mozejko P , Kasperski G 1997 *J. Phys. B* **30** 4363
- [ 38 ] Garcia N G , Blanco F 2000 *Phys. Rev. A* **62** 044702
- [ 39 ] Shi D H , Liu Y F , Sun J F *et al* 2005 *Chin. Phys.* **14** 2208
- [ 40 ] Khare S P , Raj D , Sinha P 1994 *J. Phys. B* **27** 2569
- [ 41 ] Raj D , Tomar S 1997 *J. Phys. B* **30** 1989
- [ 42 ] Hayashi S , Kuchitsu K 1976 *Chem. Phys. Lett.* **41** 575

# A modification potential method for total cross section calculation of electron scattering by molecules at medium and high energies<sup>\*</sup>

Shi De-Heng<sup>†</sup> Sun Jin-Feng Liu Yu-Fang Ma Heng Zhu Zun-Lue

( College of Physics and Information Engineering , Henan Normal University , Xinxiang 453007 , China )

( Received 21 November 2005 ; revised manuscript received 16 March 2006 )

## Abstract

Taking into consideration the overlapping effect of electron clouds between two atoms in a molecule , a modification method is presented which can be used to calculate the total cross sections for electron scattering from numerous molecules at medium and high energies. The modified complex optical potential composed of static , exchange , polarization plus absorption is directly employed to calculate the total cross sections for electron scattering from isoelectronic molecules( HCl , H<sub>2</sub>S , PH<sub>3</sub> and SiH<sub>4</sub> ) over the energy range 30—5000 eV using the additivity rule model at Hartree-Fock level. The obtained quantitative molecular total cross sections are compared with those obtained by experiments and other theories wherever available , and good agreement is obtained. It is shown that the additivity rule model together with the modified complex optical potential can give much better results than the unmodified one. So , the modification potential method presented here can improve the accuracy of the total cross section calculations of electron scattering from molecules .

**Keywords** : electron scattering , total cross section , additivity rule , bonded atom

**PACC** : 3410

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant Nos. 10574039 , 10174019 ).

<sup>†</sup> E-mail : scattering@sina.com.cn