

一种考虑几何屏蔽效应的计算“电子-分子”散射总截面的可加性规则修正方法^{*}

施德恒^{1)†} 孙金锋²⁾ 朱遵略²⁾ 刘玉芳²⁾

1) 信阳师范学院物理电子工程学院, 信阳 464000)

2) 河南师范大学物理与信息工程学院, 新乡 453007)

(2007 年 6 月 13 日收到, 2008 年 1 月 3 日收到修改稿)

在考虑分子内原子间的几何屏蔽效应随电子入射能量变化的基础上, 提出了一种能够在中、高能区准确计算“电子-分子”散射总截面的可加性规则修正方法. 利用这一修正后的可加性规则并使用“电子-C, H, O, N 原子”散射总截面的实验数据, 在 50—5000 eV 内计算了电子被 NO, N₂O, NO₂ 和 C₂H₆ 分子散射的总截面, 且将计算结果与实验结果及其他理论结果进行了比较. 结果表明, 利用这一方法修正过的可加性规则进行计算, 所得结果要比利用未修正的可加性规则及其他理论进行计算所得结果更接近实验值. 同时分析也表明, 为使未修正的可加性规则能够在较大的能区内直接用于“电子-分子”散射总截面的计算, 必须改造适用于“电子-自由原子”散射总截面计算的复光学势, 以解决它用于“电子-分子中的原子”散射总截面的计算时, 在中低能区过强、且随电子入射能量的增加而衰减太快的问題.

关键词: 电子散射, 可加性规则, 总截面, 几何屏蔽效应

PACC: 3480, 3410

1. 引 言

近年来, 随着计算技术的发展, “电子-分子”散射总截面的计算方法获得了快速发展. 多种近似方法, 如施温格(Schwinger)迭代变分法^[1]、施温格多通道法^[2]、复科恩(Kohn)变分法^[3]、扭曲波近似^[4]、R-矩阵^[5]、格劳勃(Glauber)近似^[6]、一级波恩(Born)近似^[7]、密耦(Close-Coupling)法^[8]、施温格变分迭代法与扭曲波近似相结合的方法^[9]以及极化轨道法^[10]等, 被相继提出. 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. 因此关于“电子-分子”散射总截面的计算, 很多都只是在中、低能区进行的.

为能在较高能量下计算“电子-分子”散射总截面, 在过去的十几年中研究者们提出了不少新方法. 在这些方法中, 可加性规则(AR)^[11]方法是较

简单、且较实用的一种, 但对于那些较大^[12]或较复杂^[13]的靶分子而言, 即使是在几百 eV 的能量下, 其计算结果与实验结果间依然存在着较大的偏差.

为使 AR 方法的适用范围向低能端延伸, 近年来研究者们对 AR 方法进行了各种各样的修正^[14-20]. Bobeldijk 等^[14]在计算电子碰撞电离截面时, 提出了两种几何 AR 方法, 在几十 eV 的能量下就能获得与实验值相当一致的结果. 遗憾的是, Bobeldijk 等未计算“电子-分子”散射的总截面. Deutsch 等^[15]使用一种利用原子权重修正过的 AR 方法计算分子的电离截面, 但他们同样没有计算“电子-分子”散射的总截面. Joshipura 等^[16]将“电子-分子”相互作用势分成短程势和长程势两部分, 并利用这种划分对 AR 方法作了相应的修正. 使用这一修正后的 AR 方法, Joshipura 等计算了电子被 NO, CO, NO₂, N₂O, CO₂ 及 NH₃ 分子散射的总截面, 其精度有一定程度的提高. Karwasz 等^[17]提出了一种形成性可加性规则. 在这种可加性规则中,

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 10574039)、河南省高校科技创新人才支持计划(批准号: 2008KJCX009)及河南省教育厅自然科学研究计划项目(批准号: 2007140015)资助的课题.

[†] E-mail: scattering@sina.com.cn

靶分子的总截面可近似地表示为两参数公式. 尽管这一方法能够在一个较宽的范围内获得好的计算结果, 但由于这两个可调节参数的确定需要靶分子的总截面实验数据, 其应用受到了一定程度的限制. Zecca 等^[18]提出了一个新的 AR 模型, 这个模型考虑了分子组成原子的几何屏蔽效应. 使用这一模型, 他们计算了电子被 5 个分子 NO, N₂O, CO₂, NO₂ 和 CH₄ 散射的总截面, 在中、高能区获得了与实验值相符的计算结果, 只是这种方法的计算精度依赖于所用原始数据的精度. 为准确计算“电子-分子”散射总截面, 最近 Antony 等^[19]提出了一种分组 AR 方法. 在这种分组 AR 方法中, 分子被分成若干个原子组, 靶分子的总截面就等于各个原子组的总截面之和. 使用这种方法, Antony 等计算了电子被 CF₄, C₂F₄, C₂F₆, C₃F₈ 和 CF₃I 等分子散射的总截面, 在一个较宽的能量范围内也获得了与实验值相符的计算结果. Jiang 等^[20]提出了一种与能量相关的几何 AR 方法, 并利用这一几何 AR 方法计算了电子被若干个分子散射的总截面. 由于这种方法没有考虑分子的几何尺寸, 在中、低能区对较大或较复杂的分子而言依然存在着较大的误差. 本文考虑分子内原子间的几何屏蔽效应, 在计及靶分子的几何尺寸及电子入射能量的基础上提出一种新的 AR 修正方法.

2. 计算方法

AR 方法假定, 分子轨道可以用组成原子的价轨道的总和来描述, 因此分子中的每个原子都被看作是独立的散射体. 在这种情况下, 对于含有 N 个原子的分子, 其“电子-分子”散射总截面用下式表示:

$$Q_{\text{AR}}(E) = \sum_{j=1}^N q_j^i(E), \quad (1)$$

这里, $q_j^i(E)$ 是电子被分子中第 j 个组成原子独立散射时的总截面.

(1) 式中, 一种重要的效应没有被考虑: 多原子分子对低能电子不是完全透明的, 组成分子的内层原子对外层原子有部分屏蔽作用. 屏蔽的结果, 是导致内层原子对“电子-分子”散射总截面的贡献作用, 在低能下比在高能下要小. 对单个原子而言, 这种对“电子-分子”散射总截面产生负贡献的屏蔽效应, 与分子的几何构型是密切相关的. 计及

这种屏蔽效应, Bobeldijk 等^[14]提出了一种“几何可加性规则”(GAR), 以计算分子的电离截面. 应当注意到, 这一考虑了几何屏蔽效应的 GAR 方法也适用于“电子-分子”散射总截面的计算, 尤其是在较低的入射能量下计算“电子-多原子分子”的散射总截面^[20]. 当 GAR 方法用于计算“电子-分子”散射总截面时, 其计算公式表示如下:

$$Q_{\text{GAR}}(E) = \frac{1}{3} Q_{\parallel}(E) + \frac{2}{3} Q_{\perp}(E), \quad (2)$$

式中, $Q_{\parallel}(E)$ 和 $Q_{\perp}(E)$ 分别是电子沿着分子轴线方向 ($\theta = 0^\circ$) 和分子轴线的垂直方向 ($\theta = 90^\circ$) 散射时的总截面.

本文计算电子被 NO, NO₂, N₂O 和 C₂H₆ 这 4 个分子散射的总截面. 关于 $Q_{\parallel}(E)$ 和 $Q_{\perp}(E)$ 的计算方法, 文献 14-20 给出了详细地描述. 例如, 对于 NO₂ 分子, $Q_{\parallel}(E)$ 和 $Q_{\perp}(E)$ 分别等于 Q_0 和 Q_{NO_2} ; 对于 C₂H₆ 分子, $Q_{\parallel}(E)$ 和 $Q_{\perp}(E)$ 则分别等于 Q_{CH_3} 和 $Q_{\text{CH}_2} + Q_{\text{CH}_2}$. 这里, Q_{NO_2} , Q_{CH_3} 和 Q_{CH_2} 等, 依然是用 (1) 式所描述的 AR 方法计算的.

计算表明, 低能下能够成功地使用 (2) 式所描述的 GAR 方法计算“电子-分子”散射总截面^[20], 但高能下 (2) 式却夸大了分子内原子间的几何屏蔽效应. 与此相对应的是 AR 方法虽然在高能端忽略了分子内原子间的几何屏蔽效应, 但计算出的散射总截面却基本上是准确的^[12, 13], 对多原子分子而言尤其如此. 这说明, 多原子分子对入射电子的透明度随着电子入射能量的增大而有所提高. 也就是说, 当入射电子的能量较低时, 内层原子被外层原子较好地部分屏蔽着, 因而 GAR 模型能够给出准确的计算结果, 而 AR 方法却不能; 当电子的入射能量足够高时, 分子对入射电子是完全透明的, 分子内的每一原子都是独立的散射体. 因此在足够高的能量下, 分子内各原子间的相互作用可以忽略. 此时, AR 方法能给出准确的计算结果, 而 GAR 方法却不能. 充分考虑这些因素后, 本文采用 AR 方法和 GAR 方法各自的优点, 给出如下的半经验公式:

$$Q_{\text{TCS}}(E) = Q_{\text{GAR}}(E) + A [Q_{\text{AR}}(E) - Q_{\text{GAR}}(E)], \quad (3)$$

这里, A 是一个待定的半经验系数, 反映地是在不同的入射能量下、不同分子中的屏蔽原子对散射总截面的贡献情况. 有两种方法能够确定系数 A : 一种是通过理论计算, 另一种是使用半经验方法. 由于需要考虑分子的几何结构并需要考虑几何屏蔽效

应随电子入射能量的变化情况,因此从理论角度出发去准确计算一个屏蔽原子对分子总截面的贡献情况是非常复杂的^[14],故本文采用半经验方法.为确定系数 A ,至少需要考虑两方面的因素:首先,当入射电子的能量足够低时,GAR 方法适用,所以系数 A 必须保证靶分子的散射总截面近似等于 GAR 方法计算出的结果: $Q_{\text{TCS}}(E) \approx Q_{\text{GAR}}(E)$;当入射电子的能量足够高时,AR 方法适用,此时系数 A 必须保证散射总截面近似等于 AR 方法计算出的结果: $Q_{\text{TCS}}(E) \approx Q_{\text{AR}}(E)$.这就是说,当 $E \rightarrow 0$ 时,应该有 $A \rightarrow 0$,而当 $E \rightarrow \infty$ 时则应该有 $A \rightarrow 1$.此即,电子的入射能量越高,几何屏蔽效应对分子总截面的影响就越小;其次,系数 A 还必须与电子的入射能量和分子中含有的电子总数有关,同时系数 A 还必须保证在一个较宽的能量范围内,“电子-分子”散射总截面随电子入射能量的变化有一个正确的形状.考虑这些因素后,Jiang 等^[20]指出系数 A 应取如下形式:

$$A = \frac{E}{mC + E}, \quad (4)$$

式中, E 为电子的入射能量(单位: eV); C 是一个单位调节常数,这里等于 1 eV; m 是分子含有的电子总数.由于(4)式没有考虑分子的几何尺寸及分子含有的原子总数等因素,因此对相对较大或较复杂的靶分子而言,由它给出的计算结果并不十分令人满意.为能得到更加满意的结果,本文认为,在(4)式中至少还应考虑两方面的因素.首先,给定能量下的计算结果已经证明,分子的几何尺寸越大,按照(3)式和(4)式计算出的“电子-分子”散射总截面与实验结果间的偏差就越大.这意味着,分子的几何尺寸越大,系数 A 就应该越小.同时,计算结果也已经证明,对于含有相同电子总数的分子,它所含有的原子个数越多,系数 A 也应该越小;其次,对较大或较复杂的分子而言,(4)式依然不能使总截面随能量的变化在一个较大的范围内都保持一个正确的形状,在 log-log 图中这一问题显得

尤为明显:由(4)式修正过的 AR 方法计算出的“电子-分子”散射总截面曲线依然陡于实验曲线.根据这些讨论,本文认为经验系数 A 应取如下形式:

$$A = \frac{E}{mndC + E}, \quad (5)$$

式中, n 是分子含有的原子总数, d 是以原子单位表示的分子尺寸, C 是一个常数,用于保证分母中的表达式有一个合适的单位(这里, C 取 $1\text{eV}/a_0$). d 的大小可以根据文献 21 给出的键长和键角数据估算得出.按照 Bobeldijk 等^[14]的建议,可以大致将分子分成两种类型:一种是圆盘形分子,它可以近似用一个圆盘来表示;另一种是圆筒形分子,它可以近似用一个棒来表示.本文涉及到的分子都具有圆筒形结构.应当说明的是,“棒”应与分子的“圆筒”对称轴重合,(5)式中的 d 值是分子的最大长度向这一 Z 轴方向的投影值.

有两种获得 $q_T^j(E)$ 的方法:一是采用文献 [22—24] 描述的分波法,另一是直接从实验数据中提取.本文采用从实验数据中提取 $q_T^j(E)$ 的方法.原因是:当在 log-log 图中表述“电子-分子”散射总截面与入射电子能量间的关系时,可以清楚地看出按文献 22—24 所述方法得到的分子总截面曲线比实验曲线陡,这样“陡”的曲线形状究竟是由“电子-原子”散射总截面的计算精度造成的,还是 AR 方法本身的反映?用实验 $q_T^j(E)$ 数据作初始数据,可以避开 $q_T^j(E)$ 的计算精度问题,进而能够说明这样“陡”的曲线形状是由 AR 方法本身造成的.

本文仅研究由 C, N, O, H 原子构成的某些分子.就电子被这些原子散射的总截面实验数据,可以采取(2)式,(3)式和(5)式所描述方法的逆过程,从有关“电子-分子”散射的实验数据中提取.由于收集来自同一实验组的实验数据十分困难,所以本文直接使用 Zecca 等从电子被 N_2 , H_2 , O_2 和 CO 分子散射总截面^[25—27]中提取出的结果^[18],这些结果如表 1 所列.如未特别声明,文中的计算一律采用原子单位.

表 1 “电子-C, N, O, H 原子”散射总截面的实验数据

E/eV	C	N	O	H	E/eV	C	N	O	H
50	23.607	26.821	22.429	7.857	1000	3.964	4.036	3.929	0.750
100	19.179	21.214	18.179	5.250	2000	2.143	2.143	2.107	0.393
200	13.714	14.679	13.000	3.071	5000	0.893	0.893	0.893	0.254
500	7.107	7.321	6.893	1.393					

3. 结果与讨论

利用表 1 列出的数据, 使用修正后的 AR 方法

表 2 使用修正后的 AR 方法计算出的“电子-NO, N₂O, NO₂ 和 C₂H₆”散射总截面

<i>E</i> /eV	NO	N ₂ O	NO ₂	C ₂ H ₆	<i>E</i> /eV	NO	N ₂ O	NO ₂	C ₂ H ₆
50	43.464	60.614	52.476	69.468	1000	7.823	11.163	10.993	10.934
100	35.820	49.419	43.965	52.994	2000	4.210	6.128	6.084	6.119
200	25.954	35.747	32.904	36.165	5000	1.779	2.629	2.629	2.603
500	13.757	19.239	18.535	18.893					

NO 分子散射的总截面、Zecca 等^[18]在 50—5000 eV 内、Joshi-pura 等^[28]在 100—1000 eV 内得到的计算结果以及 Dalba 等^[29]在 121—1444 eV 内和 Szmytkowski 等^[30]在 50—160 eV 内得到的实验结果间的比较. 为避免图中的数据拥挤, 还有一些理论计算结果, 如 Joshipura 等^[16]利用修正后的 AR 方法在 50—2000 eV 内、Liu 等^[31]利用经验公式在 10—4000 eV 内以及 Sun 等^[32]利用束缚原子概念在 100—1600 eV 内计算得到的总截面, 都未在图 1 中予以显示. 不难看出, 利用修正后的 AR 方法计算出的总截面, 当电子的入射能量高于 100 eV 时, 与现有的实验结果^[29,30]都能很好地相符. 而仅当电子的入射能量高于 300 eV 时, 利用未修正的 AR 方法计算出的总截面才与实验结果间有较小的偏差. 从图 1 也可看出, 本文利用修正后的 AR 方法计算出的总截面, 在某些能区内还优于 Zecca 等^[18]的计算结果. 这说明, 本文所述的这一修正对于“电子-NO”散射总截面的计算而言是成功的.

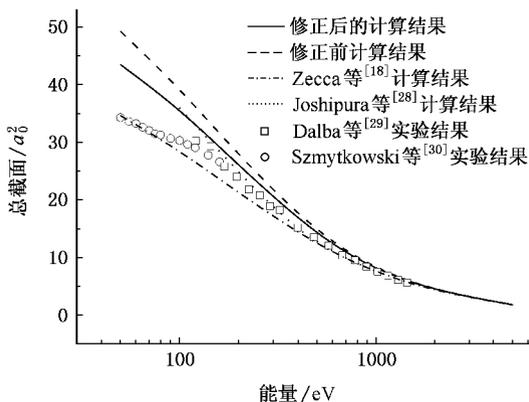


图 1 电子被 NO 分子散射的总截面

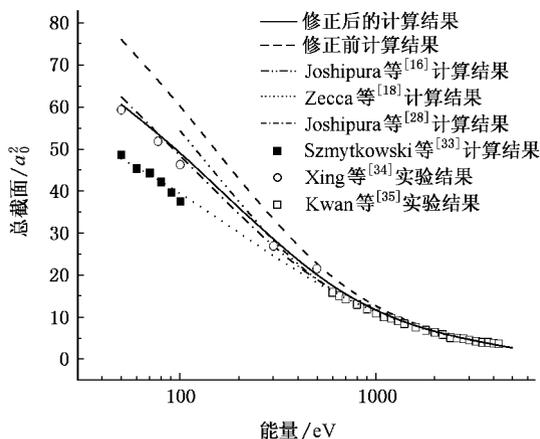
在 log-log 图中可以非常清楚地看出 Sun 等^[32]

((3) 和 (5) 式) 以及未修正的 AR 方法((1) 式) 计算出的电子被 NO, N₂O, NO₂ 以及 C₂H₆ 分子散射的总截面, 分别如表 2 所列及图 1—4 所示.

图 1 给出了修正后的 AR 方法计算出的电子被

计算出的“电子-NO”散射总截面随入射能量的变化曲线陡于实验曲线. 即 Sun 等^[32]的结果在低能端明显高于实验值, 但在高能端却明显低于实验值. 对本文未修正的 AR 方法计算出的总截面进行分析, 也可得到类似的结论. 不难看出, 本文利用修正后的 AR 方法计算出的总截面, 随着电子入射能量的增加越来越接近于实验结果. AR 方法在修正前后的唯一区别, 仅在于修正后的 AR 方法考虑了分子内原子间的几何屏蔽效应, 即考虑了分子对入射电子的透明度随入射能量的变化情况, 而未修正的 AR 方法以及文献 32 却都没有.

图 2 给出了修正后的 AR 方法计算出的“电子-N₂O”散射总截面、Joshi-pura 等^[16]在 50—700 eV 内、Zecca 等^[18]在 50—5000 eV 内、Joshi-pura 等^[28]在 100—1000 eV 内、Szmytkowski 等^[33]在 50—100 eV 内的计算结果以及 Xing 等^[34]在 600—4250 eV 内、Kwan 等^[35]在 50—550 eV 内的实验结果间的比较. 与图 1 相似, 为避免图中的数据拥挤, 某些理论计算结果^[32,36]未在图 2 中予以显示. 需要说明的是, 利用修正后的 AR 方法计算出的总截面, 在总体上优于这些未在图 2 中显示出的理论结果^[32,36], 而且本文利用修正后的 AR 方法计算出的总截面与已有的实验结果^[34,35]都相符极好. 例如, 在 50 和 500 eV 处, 该结果与 Kwan 等^[35]的实验结果间的偏差分别只有 2.2% 和 10.5%; 在 1000 和 2000 eV 处与 Xing 等^[34]的实验结果间的偏差也分别只有 2.6% 和 3.1%. 与“电子-NO”散射总截面的计算结果相似, 修正后的 AR 方法还消除了计算结果在低能端偏大、高能端偏小的现象, 但利用未修正的 AR 方法计算出的总截面, 在中、低能区的一个很大的范围内都高于实验结果. 另外, 从图 2 也容易看出, 在中、低能区的一个较大的范围内, 采用修正后的 AR 方法计算出的总截面几乎都优于其他理论计算结果.

图 2 电子被 N_2O 分子散射的总截面

由图 1, 2 以及图 3, 4 显见, 在中、低能区使用修正后的 AR 方法计算出的总截面, 总是明显优于使用未修正的 AR 方法所获得的结果. 唯一的原因就是在修正后的 AR 方法中考虑了分子内原子间的几何屏蔽效应, 而未修正的 AR 方法则未考虑. 由于 AR 方法是将电子被分子散射的总截面转换成了电子被组成原子散射的总截面之和, 因此当使用未修正的 AR 方法进行计算时, 分子内被屏蔽掉的那部分原子亦被用于计算分子的总截面. 而实际上, 它们只是部分地对总截面有贡献, 从而造成计算结果偏大.

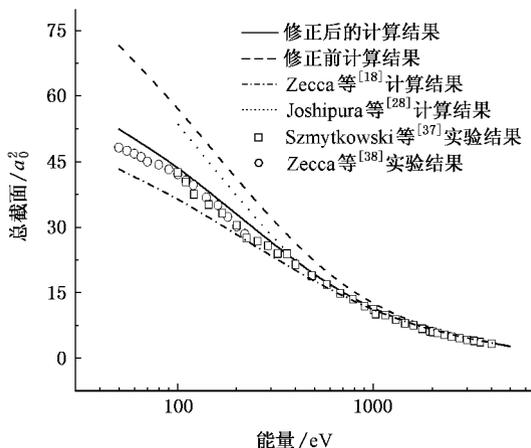
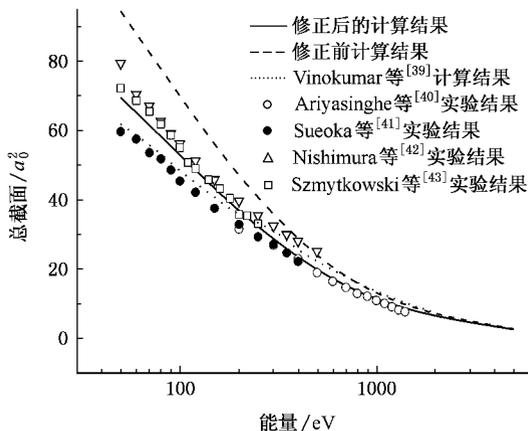
图 3 电子被 NO_2 分子散射的总截面

图 3 给出了电子被 NO_2 分子散射的总截面, 同时也给出了 Zecca 等^[18]在 50—5000 eV 内、Joshipura 等^[28]在 100—1000 eV 内的计算结果以及 Szmytkowski 等^[37]在 50—220 eV 内、Zecca 等^[38]在 100—4000 eV 内的实验结果. 从图 3 同样容易看

图 4 电子被 C_2H_6 分子散射的总截面

出, 利用修正后的 AR 方法计算出的总截面, 与已有的实验结果都符合得很好, 说明修正后的 AR 方法完全适合于电子被 NO_2 分子散射总截面的计算. 同时由图 3 也容易看出, 作者等使用修正后的 AR 方法计算出的总截面, 在中、低能区的一个很大范围内, 其精度都优于 Zecca 等^[18]和 Joshipura 等^[28]的计算结果.

显然, 使用未修正的 AR 方法计算出的总截面, 在中低能区的一个很大的范围内都明显高于 Szmytkowski 等^[37]及 Zecca 等^[38]的实验结果. 例如, 当电子入射能量为 50 和 100 eV 时, 使用未修正的 AR 方法计算得到的总截面与 Szmytkowski 等^[37]的实验结果间的偏差分别为 48.6% 和 36.5%; 而当在 $E = 200$ eV 时这种偏差依然高达 34.9%, 是相当大的.

关于电子- C_2H_6 分子散射的总截面, 无论是实验结果还是理论计算结果都是十分丰富的. 与图 1、图 2 的处理方法相似, 这里为保持图 4 的整洁, 我们只在图 4 中示出了本文修正前后的计算结果、Vinokumar 等^[39]在 50—2000 eV 内的计算结果以及 Ariyasinghe 等^[40]在 200—1400 eV 内、Sueoka 等^[41]在 50—400 eV 内、Nishimura 等^[42]在 50—500 eV 内和 Szmytkowski 等^[43]在 50—250 eV 内的实验结果. 其他许多结果, 例如 Joshipura 等^[44]在 50—5000 eV 内、Jiang 等^[45]在 50—1000 eV 内以及文献 [46] 在 100—5000 eV 内的计算结果, 就不在图 4 中显示了. 应当指出的是, 利用修正后的 AR 方法计算出的总截面, 与 Ariyasinghe 等^[40]及 Szmytkowski 等^[43]的实验结果在整个交叠能区内都能极好地相符, 与 Sueoka 等^[41]的实验结果在高于 200 eV 的能区内、与

Nishimura 等^[42]的实验结果在低于 300 eV 的能区内也能较好地符合(需要说明的是,在 Nishimura 等^[42]的实验结果与 Ariyasinghe 等^[40]及 Sueoka 等^[41]的实验结果间存在着较大的差异)。而未修正的 AR 方法在中、低能区的一个较大的范围内几乎与所有的实验结果都存在着较大的偏差。

比较图 1—4 容易发现,电子与 N_2O , NO_2 和 C_2H_6 分子散射的总截面在低能区与实验结果的符合情况明显好于电子与 NO 分子散射时的情况。这是因为在本文的模型中对于 NO 分子而言,在低能下仅有 1 个 N 原子的 1/6 贡献和 1 个 O 原子的 1/6 贡献被屏蔽掉,屏蔽作用相对较弱;而对于 N_2O , NO_2 和 C_2H_6 分子而言,在低能下分别有 1 个 N 原子的 1/2 贡献和 1 个 O 原子的 1/6 贡献(N_2O) 1 个 O 原子的贡献(NO_2) 1 个 C 原子的 1/3 和 1 个 H 原子的 7/3 贡献(C_2H_6)被屏蔽掉,屏蔽作用相对较强。因而图 2—4 中的修正后的结果与实验结果的相符情况在低能区优于图 1 中的结果。

综合图 1—4 可以得出,使用未修正的 AR 方法计算出的总截面存在着低能端偏大、且总截面随电子入射能量的增加而衰减太快的的问题,而修正后的 AR 方法几乎在整个能域内都能给出与实验值较好的相符计算结果。AR 方法在修正前后的唯一区别,就是修正后的 AR 方法考虑了分子内原子间的几何屏蔽效应。

文献 [13] 的研究结果表明,文献 [13 22—24 47] 所使用的未修正的复光学势非常适合于“电子-自由原子”散射总截面的计算,却不适合于“电子-分子内的原子”的情况,其主要问题是低能端复光学势过强、且总截面随着电子入射能量的增加而衰减太快。因此若使用未修正的可加性规

则去进行总截面的计算,必须将复光学势的修正与电子的入射能量及靶分子的结构联系起来,以解决复光学势在低能端过强、且总截面随电子入射能量的增加而衰减太快的的问题。

4. 结 论

本文在考虑分子内原子间的几何屏蔽效应随电子入射能量变化的基础上,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 AR 修正方法。利用修正后的 AR 方法并使用“电子-C, H, O, N 原子”散射总截面的实验数据,在 50—5000 eV 内计算了电子被 NO, N_2O , NO_2 和 C_2H_6 分子散射的总截面,并将计算结果与未修正的 AR 方法得到的结果、实验结果以及其他理论结果进行了比较。结果表明,利用本文修正后的 AR 方法计算得到的总截面几乎与所有的实验结果都能很好地相符。而使用未修正的 AR 方法计算出的总截面则在中、低能区偏离实验结果较大、且存在着随电子入射能量的增加而下降太快的的问题。由于使用了“电子-原子”散射总截面的实验数据作为初始数据,因而避开了“电子-原子”散射总截面的计算精度问题,进而说明了未修正的 AR 方法计算出的“总截面在中、低能区偏离实验结果较大、且随电子入射能量的增加而下降太快”是由 AR 方法本身引起的。因此,要使用未修正的 AR 方法在一个较大的能区内计算“电子-分子”散射总截面,就必须解决适用于“电子-自由原子”散射总截面计算的复光学势在用于“电子-分子中的原子”时存在的低能端过强、且随着电子入射能量的增加而衰减太快的的问题,以使之适合于“电子-分子”散射总截面的计算。

[1] Machado L E, Lee M T, Brescansin L M, Lima M A P, McKoy V 1995 *J. Phys.* B **28** 467
 [2] Bettega M H F, Ferreira L G, Lima M A P 1993 *Phys. Rev.* A **47** 1111
 [3] McCurdy C W, Rescigno T N 1989 *Phys. Rev.* A **39** 4487
 [4] Gillespie E S, Thompson D G 1977 *J. Phys.* B **10** 3543
 [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] Kadyrov A S, Bray I 2002 *Phys. Rev.* A **66** 012710

[9] Lee M T, Michelin S E, Kroin T, Veitenheimer E 1999 *J. Phys.* B **32** 3043
 [10] McEachran R P, Ryman A G, Stauffer A D, Morgan D L 1977 *J. Phys.* B **10** 663
 [11] Raj D 1991 *Phys. Lett.* A **160** 571
 [12] Ma H, Shi D H, Sun J F, Liu Y F, Zhu Z L 2006 *Commun. Thero. Phys.* (Beijing, China) **45** 699
 [13] Shi D H, Sun J F, Liu Y F, Ma H, Zhu Z L 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 4096 (in Chinese) [施德恒、孙金锋、刘玉芳、马 恒、朱遵略 2006 物理学报 **55** 4096]
 [14] Bobeldijk M, van der Zande W J, Kistemaker P G 1994 *Chem.*

- Phys.* **179** 125
- [15] Deutsch H , Becker K , Mark T D 1997 *Int. J. Mass Spectrom. Ion Processes* **167/168** 503
- [16] Joshipura K N , Patel P M 1996 *J. Phys.* **29** 3925
- [17] Karwasz G P , Brusa R S , Piazza A , Zecca A 1999 *Phys. Rev. A* **59** 1341
- [18] Zecca A , Melissa R , Brusa R S , Karwasz G P 1999 *Phys. Lett. A* **257** 75
- [19] Antony B K , Joshipura K N , Mason N J 2005 *J. Phys. B* **38** 189
- [20] Jiang Y H , Sun J F , Wan L D 2000 *Phys. Rev. A* **62** 062712
- [21] Lide D R 2001 *CRC Handbook of Chemistry and Physics* , 81st edn (Boca Raton FL : Chemical Rubber Company)
- [22] Shi D H , Liu Y F , Sun J F , Yang X D , Zhu Z L 2005 *Chin. Phys.* **14** 220
- [23] Shi D H , Liu Y F , Sun J F , Zhu Z L , Yang X D 2005 *Chin. Phys.* **14** 331
- [24] Shi D H , Sun J F , Zhu Z L , Liu Y F 2005 *Chin. Phys.* **14** 120
- [25] Karwasz G P , Brusa S A , Gasparoli A , Zecca A 1993 *Chem. Phys. Lett.* **211** 529
- [26] Zecca A , Karwasz G P , Brusa S A 1996 *Rivista del Nuovo Cimento* **19** 1
- [27] Zecca A , Karwasz G P , Brusa S A 1996 28th *European Group Atomic Spectr. Conf.* , Graz , Austria , Europhys. Conf. Abstr. **20D** 302
- [28] Joshipura K N , Patel P M 1994 *Z. Physik D* **29** 269
- [29] Dalba G , Fornasini P , Grisenti R , Ranieri G , Zecca A 1980 *J. Phys. B* **13** 4695
- [30] Szmytkowski C , Maciag K 1991 *J. Phys. B* **24** 4273
- [31] Liu Y F , Sun J F 1996 *Phys. Lett. A* **222** 233
- [32] Sun J F , Shi D H , Zhu Z L , Liu Y F 2003 *Chin. Opt. Lett.* **1** 624
- [33] Szmytkowski Cz , Maciag K , Kawasz G , Filipović D 1989 *J. Phys. B* **22** 525
- [34] Xing S L , Zhang F , Yao L Q , Yu C Q , Xu K Z 1997 *J. Phys. B* **30** 2867
- [35] Kwan C K , Hsieh Y -F , Kauppila W E , Smith S J , Stain T S , Uddin M N 1984 *Phys. Rev. Lett.* **52** 1417
- [36] Jiang Y H , Sun J F , Wan L D 1997 *Phys. Lett. A* **237** 53
- [37] Szmytkowski Cz , Maciag K , Krzysztofowicz A M 1992 *Chem. Phys. Lett.* **190** 141
- [38] Zecca A , Nogueira J C , Karwasz G P , Brusa R S 1995 *J. Phys. B* **28** 477
- [39] Vinodkumar M , Joshipura K N , Limbachiya C G , Antony B K 2006 *Eur. Phys. J. D* **37** 67
- [40] Ariyasinghe W M , Powers D 2002 *Phys. Rev. A* **66** 052716
- [41] Sueoka O , Mori S 1986 *J. Phys. B* **19** 4035
- [42] Nishimura H , Tawara H 1991 *J. Phys. B* **24** L363
- [43] Szmytkowski C , Kwitniewski S , Denga E P 2003 *Phys. Rev. A* **68** 032715
- [44] Joshipura K N , Vinodkumar M 1999 *Eur. Phys. J. D* **5** 229
- [45] Jiang Y H , Sun J F , Wan L D 1997 *J. Phys.* **30** 5025
- [46] Shi D H , Sun J F , Zhu Z L , Liu Y F , Yang X D 2006 *Chin. Phys.* **15** 1278
- [47] Shi D H , Sun J F , Zhu Z L , Ma H , Liu Y F , Yang X D 2007 *Chin. Phys.* **16** 1655

A modification method of additivity rule for total cross section calculations of electron scattering from molecules considering the geometric shielding effect^{*}

Shi De-Heng^{1,2)†} Sun Jin-Feng²⁾ Zhu Zun-Lüe²⁾ Liu Yu-Fang²⁾

1) *College of Physics and Electronic Engineering, Xinyang Normal University, Xinyang 464000, China*

2) *College of Physics and Information Engineering, Henan Normal University, Xixiang 453007, China*

(Received 13 June 2007 ; revised manuscript received 3 January 2008)

Abstract

Taking into consideration the changes of the geometric shielding effect in a molecule as the incident electron energy varies, a modification method of additivity rule model for total cross section calculations of electron scattering from molecules at intermediate and high energies, is presented. Employing the modified additivity rule model, the total cross sections for electron scattering from NO, N₂O, NO₂ and C₂H₆ are calculated over a wide energy range from 50 to 5000 eV by using the experimental results of electron scattering from atoms C, N, H and O. The calculated values of total cross sections are compared with those obtained by measurements and other theories wherever available, and good agreement is attained over a wide energy range. It is shown that the total cross sections obtained by the modified additivity rule model are much closer to the measurements than the unmodified one and other theories. And it is also shown that the modification of complex optical potential must be related with energy of incident electrons so that the potential for total cross section calculations of electron scattering from free atoms is made suitable for the total cross section calculations of electron scattering from the ones in the molecule.

Keywords : electron scattering, additivity rule, total cross section, geometric shielding effect

PACC : 3480, 3410

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10574039), the Program for Science & Technology Innovation Talents in Universities of Henan Province, China (Grant No. 2008KJ CX009) and Natural Science Foundation of Education Bureau of Henan Province, China (Grant No. 2007140015).

[†] E-mail : scattering@sina.com.cn