

运用  $R$  矩阵方法研究低能电子与  $\text{NO}_2$  分子的散射

朱冰 冯灏

Electron scattering studies of  $\text{NO}_2$  radical using  $R$ -matrix method

Zhu Bing Feng Hao

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 66, 243401 (2017) DOI: 10.7498/aps.66.243401

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.243401>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2017/V66/I24>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

10-25 keV 电子致厚 W,Au 靶韧致辐射谱的测量

Bremsstrahlung spectra produced by 10-25 keV electron impact on thick W, Au targets

物理学报.2016, 65(11): 113401 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.113401>

在动量空间讨论二氯乙烯的同分异构性

Investigation of the isomerism of dichloroethylene in momentum space

物理学报.2015, 64(6): 063401 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.063401>

运用球高斯分布极化势研究低能电子与  $\text{H}_2$  分子碰撞的振动激发动量迁移散射截面

Momentum transfer cross sections of low-energy electron scattering from  $\text{H}_2$  molecule with the polarization potential using the distributed spherical Gaussian model

物理学报.2011, 60(2): 023401 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.60.023401>

运用  $R$  矩阵方法研究低能电子与  $\text{NO}_2$  分子的散射\*

朱冰 冯灏†

(西华大学理学院, 成都 610039)

(2017年5月21日收到; 2017年9月9日收到修改稿)

基于静电-交换和密耦合两种模型, 采用  $R$  矩阵方法, 研究了低能电子与二氧化氮自由基分子的积分散射截面和动量迁移散射截面, 包括弹性散射和从电子基态到电子激发态的非弹性散射. 采用 aug-cc-pVTZ 基组进行靶分子结构优化和散射研究. 在密耦合模型中, 包含 6 个电子的最低三个占据轨道  $1b_2$ ,  $1a_1$ ,  $2a_1$  被冻结, 其余 17 个电子自由运动在活化空间中, 并给活化空间增加了  $2b_1$  和  $7a_1$  两个虚轨道. 包含了所有垂直激发能小于 20 eV 的靶分子电子组态, 得到了收敛的散射截面, 并与最新理论和实验值进行了比较. 当入射能量小于 4 eV 时, 本文结果与实验值符合得更好, 校正了以往部分理论结果在极低能量处过高的现象, 表明关联效应对极能量散射是非常重要的.

**关键词:** 二氧化氮,  $R$  矩阵, 电子散射, 密耦合

**PACS:** 34.80.-i, 34.80.Gs, 34.80.Bm

**DOI:** 10.7498/aps.66.243401

## 1 引言

电子与分子散射在大气物理、天体物理、生物物理、等离子体物理等领域具有非常重要的应用价值, 一直受到理论研究和实验工作者的关注<sup>[1-3]</sup>. 低能散射电子由于与束缚电子的能量相当, 与靶分子之间存在复杂的相关/极化和交换作用, 因此理论上精确研究低能电子和分子散射仍然存在较大的挑战.

二氧化氮( $\text{NO}_2$ )分子是一种具有刺激性气味的有毒气体, 在空气中很容易转化为硝酸化合物, 会对人体的呼吸系统造成极大的伤害. 由于它可以与地表的臭氧发生反应, 因此也被认为是大气污染的元凶之一<sup>[4,5]</sup>. 对中高能电子与  $\text{NO}_2$  分子的散射已经有了广泛的研究, 但是在低能领域的报道还较少. 理论上, Munjal等<sup>[6]</sup>运用  $R$  矩阵方法研究了入射能量在 12 eV 以下的弹性散射截面. Curik等<sup>[7]</sup>在单中心展开法的基础上, 采用可分离的交换势和模型相关/极化势, 计算了 20 eV 以下的积分弹性散射截面. Gupta等<sup>[8]</sup>运用  $R$  矩阵方法结

合球复式光学势计算了 0.5—2000 eV 的总截面. 实验上, Szymtkowski等采用线性衰减方法测量了电子与  $\text{NO}_2$  分子在 0.6—220 eV 的散射截面<sup>[9]</sup>, 并且用电子能谱仪测量了在 3—370 eV 范围内的积分截面<sup>[10]</sup>.

在入射能量小于 10 eV 以下时, 不同方法得到的散射截面存在较大差别. 因此理论上采用严格的从头计算方法研究低能电子和  $\text{NO}_2$  分子的弹性与非弹性散射截面, 仍然具有重要的意义. 本研究采用广泛使用的 UK 多原子  $R$  矩阵软件包<sup>[11]</sup>, 考虑静电-交换(static-exchange, SE)和密耦合(close-coupling, CC)两种模型, 细致研究了入射能量小于 10 eV 时的弹性和非弹性散射截面, 并对共振区域进行了分析.

## 2 理论方法

2.1  $R$  矩阵

UK  $R$  矩阵方法是一种严格的从头计算散射方法, 已广泛应用于低能电子与多原子分子的散射

\* 四川省科技厅青年基金(批准号: 2015JQ0042)和国家自然科学基金(批准号: 11174236)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: fenghao@mail.xhu.edu.cn

研究, 其理论思想已有充分的论述<sup>[1,11-13]</sup>. 核心思想是将整个空间分成内层和外层两个区域. 在内层区, 由于散射电子和靶体系电子不可区分, 关联效应和交换效应非常强. 在外层区, 散射电子距离靶体系较远, 和束缚电子之间的交换和关联效应很小, 可忽略不计, 相当于运动在电子与靶体系形成的长程局域势场中.

在内层空间, 整个散射体系的波函数由靶分子和散射电子共同组成, 可以用组态相互作用表示为

$$\Psi_k^{N+1} = \hat{A} \sum_i \phi_i^N(x_1, \dots, x_N) \sum_j u_{ij}(x_{N+1}) a_{ijk} + \sum_m \chi_m(x_1, \dots, x_N, x_{N+1}) b_{mk}, \quad (1)$$

其中,  $\hat{A}$  表示反对称化算符,  $x_N$  代表第  $N$  个电子的空间和自旋坐标,  $\phi_i^N$  表示  $N$  电子体系的第  $i$  个电子态,  $u_{ij}$  是散射电子的自旋耦合连续轨道, 系数  $a_{ijk}$  和  $b_{mk}$  是变分参数, 用于矩阵的对角化. 求和的第二项是平方可积函数, 将散射体系视为一个  $N + 1$  电子体系, 充分考虑散射电子和束缚电子之间的短程关联/极化效应, 同时也可以强制束缚电子轨道和散射电子连续轨道正交.

在本研究中, 靶分子轨道分为冻结轨道、价键轨道和虚轨道, 加上一组连续轨道来描述  $N$  电子体系和  $N + 1$  电子体系. 所有的轨道都采用高斯型基组, 中心都取在分子质心. 为充分考虑内层区域的关联和极化效应, 本研究中  $R$  矩阵半径大小设为  $13 a_0$ .

## 2.2 散射模型

研究中采用两种散射模型进行计算: SE 模型和 CC 模型. 对于 SE 模型, 靶体系只有一种组态, 因此束缚态电子不允许被散射电子极化, 且未考虑关联效应. SE 模型可以给出形状共振, 但得到的共振能常常高于实验值. 对于 CC 模型, 可以包含更多的组态. 在本研究中, 将垂直激发能小于 20 eV 以内的所有电子组态 (aug-cc-pVTZ 基组下, 共 107 个电子组态) 都包含进来. 这样, 束缚电子在散射电子的作用下, 能够激发到更高的活化空间, 电子与电子之间的关联效应可以充分考虑. 散射电子采用 Faure 等<sup>[14]</sup> 的连续轨道, 包含了直到  $g$  分波 ( $l \leq 4$ ) 的贡献. 为保证整个体系波函数的一致性, 散射轨道在 Schmidt 和 Löwdin 对称正交化的作用下, 与

束缚态轨道正交<sup>[15]</sup>.

## 2.3 靶分子

$\text{NO}_2$  分子是开壳层体系, 属于  $C_{2v}$  点群. 其基态电子组态为:

$$1b_2^2 1a_1^2 2a_1^2 3a_1^2 2b_2^2 4a_1^2 5a_1^2 3b_2^2 1b_1^2 4b_2^2 1a_2^2 6a_1^1.$$

当只考虑 SE 模型时, 采用限制性开壳层的 Hartree-Fock (ROHF) 波函数. 当采用 CC 模型时, 包含 6 个电子的最低三个占据轨道  $1b_2$ ,  $1a_1$ ,  $2a_1$  被冻结, 其余 17 个电子自由运动在活化空间中. 为充分考虑关联效应, 除了 9 个价键轨道外, 给活化空间增加了  $2b_1$  和  $7a_1$  两个虚轨道. 它们是能量最低的两个空轨道, 其轨道能量分别为 2.11 和 2.22 eV. UK  $R$  矩阵软件包在进行 CAS-CI (complete-active-space configuration interaction) 计算时, 可以自动对电子组态的对称性进行分类.

为得到  $\text{NO}_2$  分子的平衡结构, 基于 CFOUR 程序<sup>[16]</sup>, 采用耦合簇单双激发加上微扰的方法 (CCSD[T]) 进行优化. 不同基组的优化结果列于表 1 中.

表 1  $\text{NO}_2$  分子不同基组的优化结构

Table 1. Optimized structures of  $\text{NO}_2$  on different basis sets.

基组	N—O 键长/Å	O—N—O 键角/(°)
cc-pVDZ	1.2073	134.07
aug-cc-pVDZ	1.2105	133.94
cc-pVTZ	1.1994	134.18
aug-cc-pVTZ	1.1994	134.21
cc-pVQZ	1.1957	134.15
aug-cc-pVQZ	1.1958	134.15
实验值 <sup>[17]</sup>	1.19	134.2

由于弥散函数影响散射电子与靶体系束缚电子的极化/关联作用, 对于散射有比较重要的影响<sup>[18]</sup>. 且在不同基组的优化结果中, 发现采用 aug-cc-pVTZ 基组的优化结果与实验值符合得很好. 考虑计算量的大小和与实验值的比较, 本研究采用 aug-cc-pVTZ 基组进行结构优化和散射计算.

$\text{NO}_2$  分子电子基态的 SCF 能量为  $-204.10$  a.u., CAS-CI 能量为  $-204.16$  a.u., 与 Gupta 等<sup>[8]</sup> 的理论计算值  $-204.15$  a.u. 符合得很好. 但我们得到的 CAS-CI 偶极距为 0.41 Debye, 比 Gupta 等<sup>[8]</sup> 的计算值 0.50 Debye 低, 更接近于 Leonardi 等<sup>[19]</sup> 的

验值 0.316 Debye. 所有的NO<sub>2</sub>分子参数列于表2, 并与其他实验或理论结果进行了比较.

表2 e-NO<sub>2</sub>分子散射的靶体系性质  
 Table 2. Target properties of e-NO<sub>2</sub>.

NO <sub>2</sub> 的性质	本文结果 (ROHF)	本文结果 (CAS-CI)	实验值	理论值
基态能量/a.u.	-204.10419	-204.15928		-204.15 [8] -204.07 [6]
第一激发能/eV		3.445	3.02 [20]	3.08 [6], 3.01 [8]
第二激发能/eV		4.002	3.43 [20]	4.03 [6], 4.07 [8]
转动常数/cm <sup>-1</sup>	A-7.992	7.992	8.00 [17]	7.990 [8]
	B-0.436	0.436	0.433 [17]	0.436 [8]
	C-0.414	0.414	0.410 [17]	0.413 [8]
偶极距/Debye	0.7436	0.4109	0.316 [19]	0.50 [8]

### 3 结果与讨论

基于SE模型和CC模型, 计算了电子与NO<sub>2</sub>分子的总散射截面, 图1给出了两种模型的截面比较. SE模型预测了两个共振峰: <sup>3</sup>B<sub>1</sub>对称性在1.85 eV (宽度为0.13 eV)附近的共振以及<sup>1</sup>B<sub>1</sub>对称性在3.27 eV (宽度为0.36 eV)附近的共振. CC模型不仅将这两个共振峰都向低能方向移动了, 而且共振宽度也大大缩小. <sup>3</sup>B<sub>1</sub>对称性的共振峰移到了0.76 eV, 宽度为0.054 eV; 而<sup>1</sup>B<sub>1</sub>对称性的共振峰位置变成了1.82 eV, 宽度为0.19 eV. 这样, 在2.0 eV附近的共振峰, 应该来自于<sup>1</sup>B<sub>1</sub>对称性, 而不是<sup>3</sup>B<sub>1</sub>对称性, 这与Munjaj等[6]的结论一致. Gupta等[8]预测这一共振峰的位置在大约3 eV附近, 明显高于本文和Munjaj等[6]的结果.

实际上, 不同的基组也会影响共振峰的位置. 在SE模型计算中, 如果采用pVTZ基组, 则<sup>3</sup>B<sub>1</sub>和<sup>1</sup>B<sub>1</sub>两个对称性的共振峰位置分别是1.93 eV和3.34 eV. 可见, 包含更多的极化和弥散函数, 会降低共振峰的位置.

由于在SE模型中, 靶分子只用一个组态描述, 电子不能跃迁到更高的轨道, 分子只能处于电子基态, 因此该模型预测到的共振为形状共振. CC模型不仅能够预测形状共振, 还可以预测到散射引起的靶分子激发到不同电子态而造成的Feshbach共振. 结果显示<sup>1</sup>A<sub>1</sub>对称性在5.32 eV附近有一个共振峰, 略低于Munjaj等[6]的5.57 eV, 而

Gupta等[8]的6.7 eV共振峰位置高于本文和Munjaj等[6]的结果. 该对称性在8.50 eV还有一个小的共振峰, 与Sotckdale等[21]的实验值符合得很好, Gupta等[8]也预测到了这个共振峰, 但他们的预测位置为8.41 eV, 略低于实验值. 表3列出了本文计算的最低的几个共振峰位置和宽度.

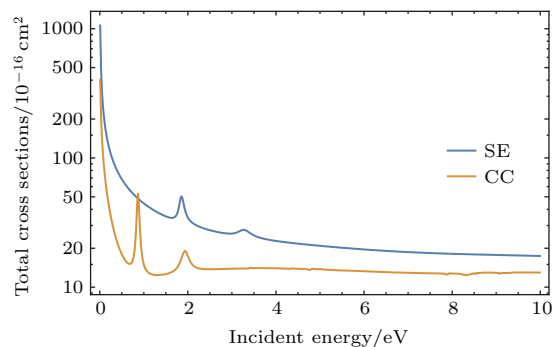


图1 (网刊彩色) SE模型和CC模型下电子与NO<sub>2</sub>分子散射的总截面

Fig. 1. (color online) Total cross sections of electron impact on the NO<sub>2</sub> molecule based on SE and CC models.

表3 e-NO<sub>2</sub>分子散射的共振峰位置和宽度

Table 3. The positions and widths of resonances of e-NO<sub>2</sub>.

	对称性	共振峰位置/eV	共振峰宽度/eV
1	<sup>3</sup> B <sub>1</sub>	0.765	0.054
2	<sup>1</sup> B <sub>1</sub>	1.822	0.199
3	<sup>3</sup> B <sub>2</sub>	4.507	0.022
4	<sup>3</sup> A <sub>2</sub>	4.734	0.036
5	<sup>1</sup> A <sub>2</sub>	5.031	0.093
6	<sup>1</sup> A <sub>1</sub>	5.317	0.399
7	<sup>3</sup> B <sub>2</sub>	7.958	0.540
8	<sup>1</sup> A <sub>1</sub>	8.498	0.061
9	<sup>3</sup> B <sub>1</sub>	9.076	0.181
10	<sup>1</sup> B <sub>1</sub>	9.570	0.314

图2比较了本文计算的总截面与以前的理论和实验的结果. 其中, Gupta等[8]同样采用R矩阵方法, 但基于扩展的DZP基组和包含25个电子组态考虑关联效应. Curik等[7]对靶体系分别采用Hartree-Fock和密度泛函理论(DFT)两种轨道描述, 运用单中心展开法结合模型极化势计算得到了低能的散射截面. 由于NO<sub>2</sub>分子是极性分子, 在极低能量(< 1 eV)时, 截面会是发散的, 本研究 and 以往的结果都显示了这一性质.

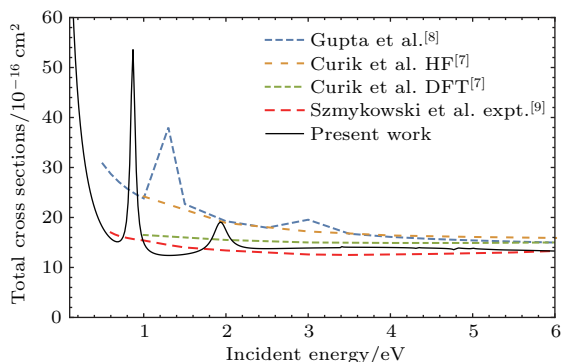


图2 (网刊彩色) 电子与NO<sub>2</sub>分子散射的总截面  
Fig. 2. (color online) Total cross section for e-NO<sub>2</sub>.

从图2可以看出,除了两个形状共振峰外,Gupta等[8]的理论计算结果和Curik等[7]采用Hartree-Fock轨道描述靶体系的结果非常接近.但是,当入射能量低于4 eV时,他们的计算结果都偏高于Szmykowski等[9]的实验测量值和本文的研究.并且,能量越低,偏差越大. Curik等[7]基于DFT轨道描述靶体系,可以较好地反映电子关联效应,与本文的研究一致,而且均与Szmykowski等[9]的实验结果符合得较好.但不论是Curik等[7]的理论研究还是Szmykowski等[9]的实验测量,都没有发现入射能量小于4 eV时的两个共振峰.本文的研究发现在0.76 eV位置,有一个非常强的形状共振,低于Gupta等[8]的1.33 eV共振能.另外,在1.82 eV时,还存在一个较宽的形状共振,其位置仍然低于Gupta等[8]的3 eV共振能.这两个共振峰对应于O<sup>-</sup>的离解通道,已经被Rangwala等[22]的实验所证实.

为进一步探讨关联效应对极低能量散射的影响,我们分别采用不同的基组和包含不同数目的靶体系电子态,进行CC散射计算,在图3中进行了比较.图3(a)是分别采用pVTZ和aug-cc-pVTZ基组,包含107个靶分子电子组态的积分散射截面.图3(b)是基于aug-cc-pVTZ基组,但分别包含21, 82和107个靶分子电子组态的积分散射截面,包含82个电子组态和107个电子组态的截面已很接近,表明包含垂直激发能小于20 eV所有电子组态的CC计算,已经收敛.

上述两种方式都影响入射电子与靶体系束缚电子的极化/关联效应.可以看出,包含了弥散函数的基组,降低了入射能量小于4 eV时的散射截面;而包含更多的靶分子电子组态,不仅降低了极低能量时的散射截面,还降低了共振峰的位置.在这两

种因素中,包含更多分子电子组态,能够更充分地考虑电子关联效应,这与束缚态的情形类似.

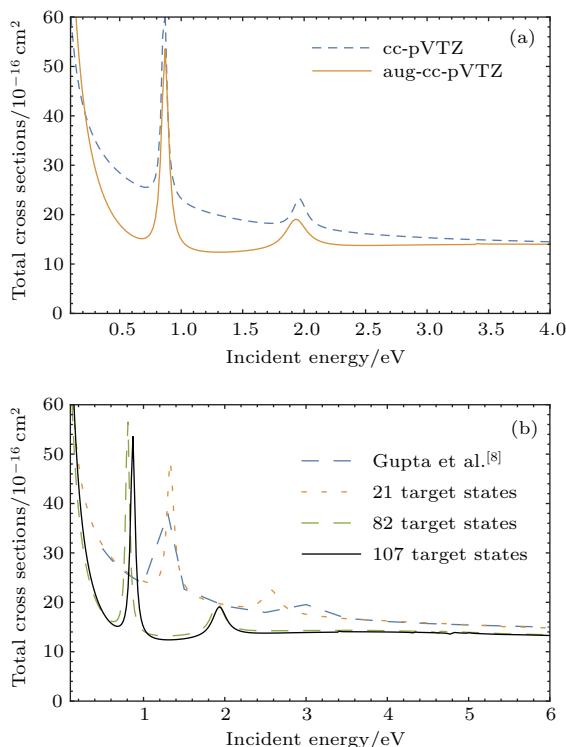


图3 (网刊彩色) 关联效应对散射截面的影响 (a) 不同基组; (b) 不同靶分子电子组态数目  
Fig. 3. (color online) Influences of correlations on total cross sections: (a) Basis sets; (b) target electronic states.

在图2中我们指出, Gupta等[8]的散射截面在极低能量处(< 4 eV)低于本文的理论值和Szmykowski等[9]的实验结果.从图3可见, Gupta等的结果和本文包含21个电子态的结果非常接近.实际上, Gupta等[8]和Munjal等[6]是分别采用25个和21个电子态,基于DZP基组进行CC研究的.因此,包含更多的靶体系电子组态进行CC计算得到收敛的截面,对于极低能量处的散射十分重要.

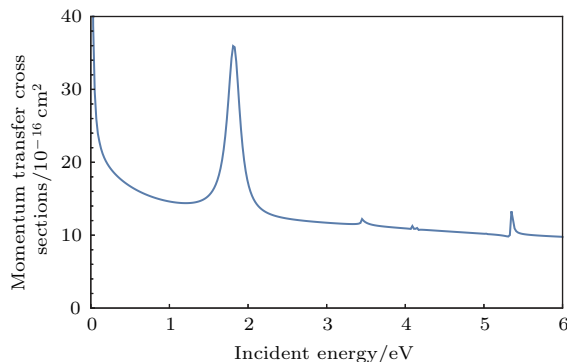


图4 电子与NO<sub>2</sub>分子散射的MTCS  
Fig. 4. MTCS for e-NO<sub>2</sub>.

最后, 计算了低能电子与NO<sub>2</sub>分子散射的动量迁移截面(momentum transfer cross sections, MTCS). 图4显示出MTCS具有明显的反向散射特性. 由于共振的影响, MTCS在低能处也表现出波动性质.

## 4 结 论

NO<sub>2</sub>分子是大气中非常重要的一种自由基分子, 能够加速臭氧层的破坏. 低能电子与NO<sub>2</sub>分子的散射研究在理论和实验上仍然存在不一致性. 本文采用**R**矩阵方法, 基于aug-cc-pVTZ弥散基组, 包含垂直激发能小于20 eV的所有靶体系电子组态, 使用SE和CC两种模型, 详细研究了入射能量小于10 eV时电子与NO<sub>2</sub>分子散射的积分截面和MTCS. 结果表明, 采用CC模型的**R**矩阵计算与实验符合得很好, 而且可以预测低能散射的共振位置.

散射电子与束缚电子之间的关联效应对于低能散射是十分重要的. 当采用弥散基组, 包含更多的电子组态进行CC计算时, 关联效应能够被充分考虑, 散射截面在入射能量小于5 eV时有明显改善.

本研究得到的0.76 eV和1.82 eV两个形状共振峰位置偏低于以往的理论计算值, 但本研究的积分截面值在低能处与实验结果符合得更好. 建议今后理论和实验更关注电子和NO<sub>2</sub>分子在入射能量小于3 eV时的散射, 尤其是共振区位置.

## 参考文献

- [1] Tennyson J 2010 *Phys. Rep.* **491** 29
- [2] Brunger M J, Buckman S J 2002 *Phys. Rep.* **357** 215
- [3] Winstead C, McKoy V 2000 *Adv. At. Mol. Phys.* **43** 111

- [4] Fuglestvedt J S, Isaksen I S A, Wang W C 1996 *Clim. Change* **34** 405
- [5] Abedi A, Cieman P, Coupier B, Gulejova B, Buchanan G A, Marston G, Mason G, Scheier P, Mark T D 2004 *J. Mass Spectrom.* **232** 147
- [6] Munjal H, Baluja K L, Tennyson J 2009 *Phys. Rev. A* **79** 032712
- [7] Curik R, Gianturco F A, Lucchese R R, Sanna N 2001 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **34** 59
- [8] Gupta D, Naghma R, Vinodkumar M, Antony B 2013 *J. Ele. Spectrosc. Rel. Phen.* **191** 71
- [9] Szmytkowski C, Maciag K, Krzysztofowich A M 1992 *Chem. Phys. Lett.* **190** 141
- [10] Szmytkowski C, Mozejko P 2006 *Opt. Appl.* **36** 543
- [11] Carr J M, Galiatsatos P G, Gorfinkiel J D, Harvey A G, Lysaght M A, Madden D, Masin Z, Plummer M, Tennyson J, Varambhia H N 2012 *Eur. Phys. J. D* **66** 58
- [12] Burke P G 2011 *R-Matrix Theory of Atomic Collisions: Application to Atomic, Molecular and Optical Processes* (Berlin: Springer Press)
- [13] Gillan C J, Tennyson J, Burke P G 1995 *Computational Methods for Electron-Molecule Collisions* (New York: Plenum)
- [14] Faure A, Gorfinkiel J D, Morgan L A, Tennyson J 2002 *Comput. Phys. Commun.* **144** 224
- [15] Morgan L A, Tennyson J, Gillan C J 1998 *Comput. Phys. Commun.* **114** 120
- [16] CFOUR, version 2.0b, a Quantum Chemical Program Package, Stanton J F, Gauss J, et al. <http://slater.chemie.uni-mainz.de/cfour/> [2016-10-11]
- [17] NIST Computational Chemistry Comparison and Benchmark Database, NIST Standard Reference Database Number 101, Johnson III R D <http://cccbdb.nist.gov/> [2016-10-18]
- [18] Fu J, Zhu B, Zhang Y, Feng H, Sun W 2014 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **47** 195203
- [19] Leonardi E, Petrongolo C, Hirsch G, Buenker R J 1996 *J. Chem. Phys.* **105** 9051
- [20] Lievin J, Delon A, Jost R 1998 *J. Chem. Phys.* **108** 8931
- [21] Stockdale J A D, Compton R N, Hurst G S, Reinhardt P W 1969 *J. Chem. Phys.* **50** 2176
- [22] Rangwala S A, Krishnakumar E, Kumar S V K 2003 *Phys. Rev. A* **68** 052710

# Electron scattering studies of NO<sub>2</sub> radical using *R*-matrix method\*

Zhu Bing Feng Hao<sup>†</sup>

(School of Science, Xihua University, Chengdu 610039, China)

(Received 21 May 2017; revised manuscript received 9 September 2017)

## Abstract

Nitrogen dioxide molecule plays an important role in modeling atmospheric process. It is a toxic gas and considered as an atmospheric pollutant due to its involvement in reactions that produce ground-level ozone. The electron scattering of NO<sub>2</sub> molecule has been extensively studied, specifically at intermediate and high energies. The discrepancies between previous theoretical studies and experimental data at low impact energies (below 4 eV) suggest that the in-depth research should be carried out. The target optimized equilibrium geometry is computed at the highly accurate coupled cluster singles, doubles and perturbative triples [CCSD(T)] level in this study. The ab initio *R*-matrix method is employed to study the integral and momentum transfer cross sections of low-energy electron scattering from NO<sub>2</sub> radical up to 10 eV. Two models including static-exchange and close-coupling approximation are used to reveal the dynamic interaction. The electronic excitation cross sections are computed from ground state to seven electronically allowed excited states. All target states whose vertical excitation energies are below 20 eV are included in the close-coupling expansions of the scattering system. In our CC model, six electrons are in the core orbitals 1a<sub>1</sub>, 2a<sub>1</sub> and 1b<sub>2</sub>, and the remaining 17 electrons are free to occupy the 4a<sub>1</sub>, 5a<sub>1</sub>, 6a<sub>1</sub>, 7a<sub>1</sub>, 1b<sub>1</sub>, 2b<sub>1</sub>, 3b<sub>2</sub>, 4b<sub>2</sub>, and 1a<sub>2</sub> orbitals. The aug-cc-pVTZ dunning basis sets are used to optimize the target structure and electron scattering. A Born closure procedure is used to account for the contribution of partial waves higher than  $l = 4$  to obtain cross sections. Two shape resonances found at 0.76 eV and 1.82 eV in this study are lower than previous theoretical calculations, but the comparisons with other theoretical calculations and experimental data show that the present *R*-matrix study not only agrees well with the experiments but also corrects the overestimations of total cross sections of some other theoretical data in the very low energy regions. To study the influence of electron correlations, 21, 82 and 107 target electronic configurations are used in the close coupling model calculations, respectively. The comparisons of integrated cross sections indicate that it is very important to include more target electronic configurations to obtain the converged scattering cross sections, which reveals the importance of electron correlations.

**Keywords:** nitrogen dioxide, *R*-matrix method, electron scattering, close-coupling

**PACS:** 34.80.-i, 34.80.Gs, 34.80.Bm

**DOI:** [10.7498/aps.66.243401](https://doi.org/10.7498/aps.66.243401)

\* Project supported by the Funds for Sichuan Distinguished Scientists, China (Grant No. 2015JQ0042) and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11174236).

† Corresponding author. E-mail: [fenghao@mail.xhu.edu.cn](mailto:fenghao@mail.xhu.edu.cn)