

中高能电子被 O_2 及 CF_4 分子散射的微分截面、 弹性积分截面及动量转移截面^{*}

施德恒^{1 2 3} 孙金锋¹ 朱遵略¹ 刘玉芳¹ 杨向东²

¹(河南师范大学物理系, 新乡 453007)

²(四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065)

³(空军第一航空学院基础部, 信阳 464000)

(2004 年 12 月 3 日收到 2005 年 1 月 8 日收到修改稿)

利用可加性规则, 使用 Roothaan-Hartree-Fock 波函数, 采用由束缚原子概念修正过的复光学势, 在 300—1000 eV 内若干个能量点处计算了电子被 O_2 及 CF_4 分子散射的微分截面、弹性积分截面及动量转移截面, 并将计算结果与实验结果及其他理论计算结果进行了比较。比较的结果表明, 利用被束缚原子概念修正过的复光学势及可加性规则进行计算, 所得微分散射截面的精度要比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准确得多; 同时, 计算得到的弹性积分截面及动量转移截面也比较接近实验值。因此, 在复光学势中采用束缚原子概念可提高电子被分子散射的微分截面、弹性积分截面及动量转移截面的计算准确度。

关键词: 电子散射, 可加性规则, 微分截面, 弹性积分截面

PACC: 3440

1. 引言

电子与分子碰撞的微分截面、弹性积分截面和动量转移截面的理论研究, 已成为原子与分子物理学科中备受关注的前沿领域^[1]。虽已有多种理论方法如复 Kohn 变分法^[2]、Schwinger 变分法^[3]、R 矩阵^[4]、扭曲波近似^[5]以及平面波近似^[6]等, 但大多只适用于低能领域, 在中、高能区计算出的微分散射截面、弹性积分截面及动量转移截面往往偏离实验值较大。原因可能是在中、高能区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。尽管 Jain 等^[7]利用复球型光学势法(SCOP)曾成功地在中、高能区对一些双原子分子和比较简单的多原子分子的散射总截面进行了研究, 但未用于计算电子被分子散射的微分截面、弹性积分截面及动量转移截面。由于 SCOP 方法要涉及分子的单中心波函数, 而获得一个分子, 尤其是较复杂分子的单中心波函数往往是一件十分困难的事, 因此这大大限制了

SCOP 方法的应用。

可加性规则变分子问题为原子问题, 是一个很好的、适用于中、高能电子与分子碰撞的理论方法。这个方法最初被用于电子与分子的碰撞电离研究, 后来被文献[8, 9]推广应用到电子与分子碰撞的总截面的计算, 获得了一定程度的成功。由于这个方法在总截面的计算中, 于中间能区明显地高估了实际值^[9], 因此, 我们最近对其进行了修正: 在考虑分子内原子间电子云重叠的基础上, 在复光学势中引入束缚原子概念, 获得了好的散射总截面计算结果^[10]。本文中, 我们将其推广应用到电子被 O_2 及 CF_4 分子散射的微分截面、弹性积分截面及动量转移截面的计算。研究表明, 在中、高能区, 该方法同样可获得满意的计算结果。

2. 计算方法

根据可加性规则, 在中、高能区, 当电子被分子散射时, 可忽略原子间的相互作用对散射截面的贡献。据此, 电子被分子散射的微分截面、弹性积分截

* 国家自然科学基金(批准号: 10174019)资助的课题。

† E-mail: scattering@sina.com.cn

面和动量转移截面可写成

$$I(\theta) = \sum_{m=1}^N |f_m(\theta)|^2, \quad (1)$$

$$Q(E) = 2\pi \int_0^\pi I(\theta) \sin\theta d\theta, \quad (2)$$

$$Q_M(E) = 2\pi \int_0^\pi I(\theta) (1 - \cos\theta) \sin\theta d\theta, \quad (3)$$

式中 $f_m(\theta)$ 为组成分子的第 m 个原子在散射角为 θ 时的散射振幅, N 为分子中的原子个数, $I(\theta)$, $Q(E)$ 及 $Q_M(E)$ 分别为电子被分子散射的微分截面、弹性积分截面和动量转移截面。

(1) 式中的散射振幅 $f_m(\theta)$ 可利用如下公式求出:

$$f_m(\theta) = \frac{1}{2ik} \cdot \sum_l (2l + 1) S_l (1 - \cos\theta) P_l(\cos\theta), \quad (4)$$

式中 S_l 为组成分子的第 m 个原子第 l 个分波的复散射矩阵元,

$$S_l = \frac{(1 - \rho J_l) h_l^{(2)} + \rho h_l^{(1)}}{(1 - \rho J_l) h_l^{(1)} + \rho h_l^{(2)}}. \quad (5)$$

这里 $h_l^{(1)}$, $h_l^{(2)}$ 分别为第一类和第二类 Hankel 函数, $h_l^{(1)}$, $h_l^{(2)}$ 为其导数; J_l 为 $\rho = kr$ 处的波函数 u_l 的导数 u'_l 与波函数 u_l 的比值,

$$J_l = \frac{u'_l(\rho)}{u_l(\rho)}. \quad (6)$$

要获得波函数 u_l 及其导数 u'_l , 必须求解如下电子散射的分波方程:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - V_{opt} - \frac{I(l+1)}{r^2} \right) u_l(r) = 0, \quad (7)$$

式中

$$u_l(kr) \rightarrow kr[j_l(kr) - i n_l(kr)] + S_l kr[j_l(kr) + i n_l(kr)] \quad (8)$$

为当 $r \rightarrow \infty$ 时方程(7)的边界条件。这里 j_l 及 n_l 分别为 Bessel 和 Neumann 函数, k^2 为入射电子的能量, V_{opt} 为复光学势, 可用如下形式的复函数描述:

$$V_{opt}(r) = f \cdot V_s(r) + V_p(r) + V_e(r) + i f \cdot V_a(r), \quad (9)$$

其中

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

(9)(10) 式中, ρ 为原子的电荷密度, $V_s(r)$ 为静电势, 均由文献[11]给出的 Hartree-Fock 波函数确定;

$V_e(r)$ 为交换势, 本文是在 Riley 和 Truhlar^[12] 给出的表达式基础上进行修正的; $V_p(r)$ 为极化势, 由 Zhang 等^[13] 给出; $V_a(r)$ 为吸收势, 由 Staszewska 等^[14] 给出; f 为结构因子, 由文献[10]确定,

$$f = 1 - \frac{r}{R} \cdot \frac{Z}{N_1}, \quad (11)$$

式中, r 为分子中两原子的核间距, 即键长; R 为两原子的半径之和, 本文是利用 Roothaan-Hartree-Fock 波函数求得的; Z 为原子最外壳层的电子数; N_1 为原子中的总电子数。

(11) 式反映了分子内原子间的电子云重叠情况, 文献[10] 对此作出了较为详细的解释。利用这一结构因子修正过的复光学势, 文献[10] 计算了 30—5000 eV 的电子被甲烷及氯代甲烷散射的总截面, 获得了与实验结果相符的计算结果, 说明对于总截面的计算而言, 这一修正是成功的。

利用四阶 Runge-Kutta 方法编制 Fortran 程序, 在满足边界条件(8)的情况下对方程(7)求数值解, 以得到关键性的复散射矩阵元 S_l 。如未特别声明, 文中的计算一律采用原子单位。

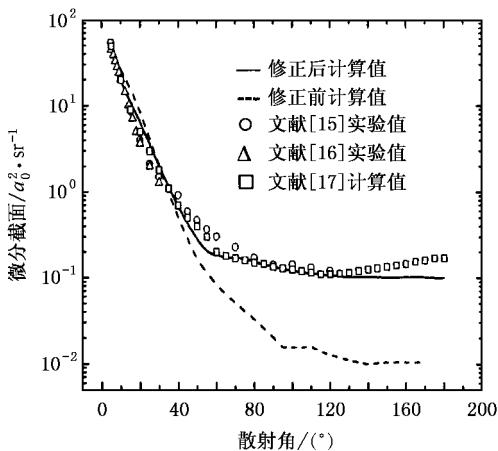
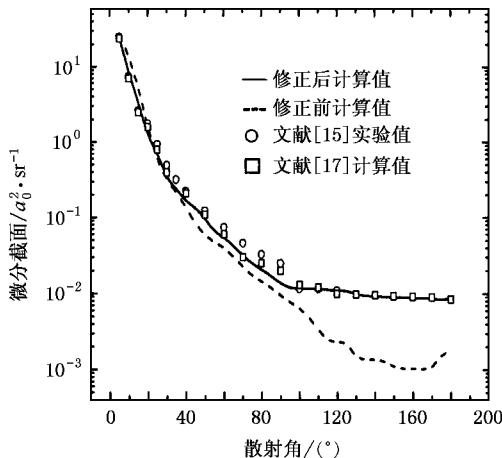
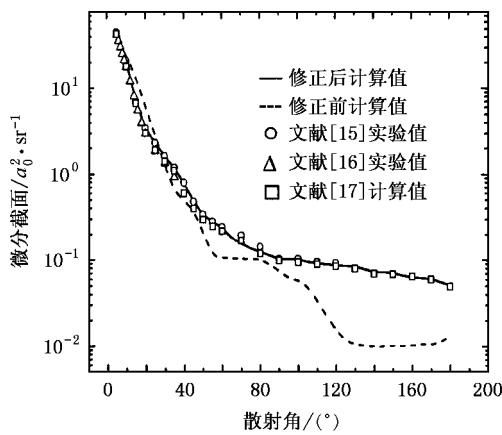
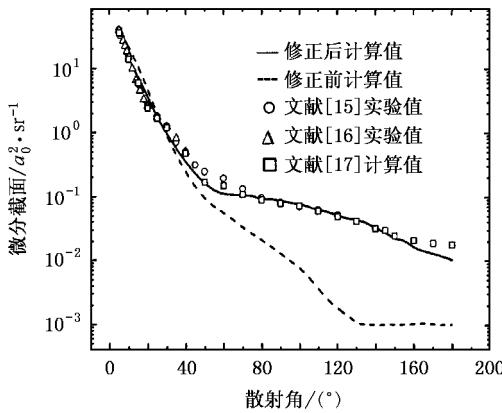
3. 计算结果及讨论

利用(1)(2)及(3)式, 我们在 30—1000 eV 内若干个能量点处计算了电子被 O₂ 及 CF₄ 分子散射的微分截面、弹性积分截面及动量转移截面, 其结果分别如图 1—图 6(图中 a_0 为玻尔半径)及表 1、表 2 所示。

图 1—图 4 给出了 300, 400, 500 及 1000 eV 的电子被 O₂ 分子散射的微分截面计算结果, 同时也给出了 Iga 等^[15]、Bromberg 等^[16] 的实验结果以及 Raj 等^[17] 的计算结果。从图中不难看出, 采用(10)式所表达的结构因子修正过的复光学势进行计算得到的结果与 Iga 等^[15]、Bromberg 等^[16] 的实验结果都符合得非常好。数值分析也表明, 对复光学势进行修正后的计算结果与实验结果间的最大误差不超过 15%, 这是令人满意的。

从图 1—图 4 中也可以看出, 本文利用修正后的复光学势计算出的结果与 Raj 等^[17] 采用不同的计算方法和不同的复光学势时得到的计算结果也能较好地符合, 这从另一个侧面也说明了本文的修正计算是成功的。

图 1—图 4 还给出了利用可加性规则及采用未

图 1 300 eV 的电子被 O_2 散射的微分截面图 4 1000 eV 的电子被 O_2 散射的微分截面图 2 400 eV 的电子被 O_2 散射的微分截面图 3 500 eV 的电子被 O_2 散射的微分截面

修正的复光学势(即在(9)式中取 $f = 1.0$)计算所得的微分散射截面.不难看出,尽管在小散射角时得到的计算结果与实验结果间的误差不大,但在稍大的

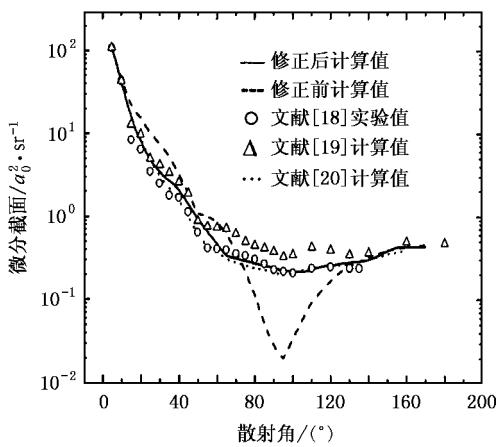
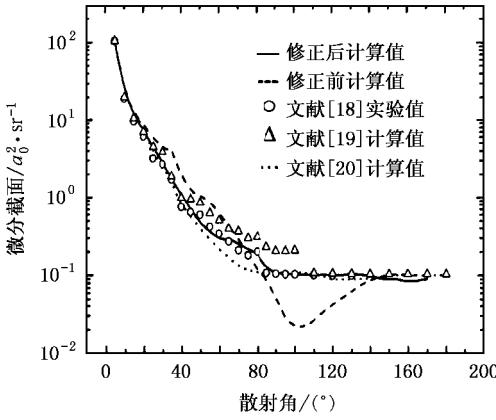
散射角下存在着较大的误差.

图 5 和图 6 分别给出了 300 和 500 eV 的电子被 CF_4 分子散射的微分散射截面计算结果,同时也给出了 Sakae 等^[18]的实验结果以及 Raj^[19]和 Khare 等^[20]的计算结果.由图 5、图 6 可清楚地看出,采用修正后的复光学势计算得到的结果与 Sakae 等^[18]的实验结果以及 Khare 等^[20]的计算结果符合较好.如在 $E = 300$ eV 时,采用修正后的复光学势计算得到的结果与 Sakae 等^[18]的实验结果及与 Khare 等^[20]的计算结果间的最大误差不超过 20.0%,在 $E = 500$ eV 时,本文的结果与 Sakae 等^[18]的实验结果间的最大误差不超过 18.0%,但与 Khare 等^[20]的计算结果间在某些散射角处的误差稍大.不过从图 5 可看出,这一误差也在合理的范围内.

图 5、图 6 还给出了利用可加性规则及使用未被修正的复光学势计算得到的微分散射截面.尽管这一微分散射截面在散射角较小时与 Sakae 等^[18]的实验结果以及 Khare 等^[20]的计算结果能较好相符,但当散射角较大(80° — 120°)时,存在着较大的误差.

显然,使用修正后的复光学势计算得到的微分散射截面,在某些散射角处明显优于使用未被修正的复光学势计算得到的结果.唯一的原因就是修正后的复光学势考虑了分子内两相邻原子间的电子云重叠情况,而未被修正的复光学势则未加考虑.因而,本文的修正对于电子被分子散射的微分散射面的计算是成功的.

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.因此即使采用了修正后的复光学势,在某些散射角处计算得到的微分散射截面依然存在着

图 5 300 eV 的电子被 CF₄ 散射的微分截面图 6 500 eV 的电子被 CF₄ 散射的微分截面

误差,尤其是当入射电子的能量较低或分子内含有较多的原子时.这是在 $E = 300$ eV 时,e-CF₄ 散射体系在某些散射角处的微分散射截面与实验结果间的误差较之 e-O₂ 散射体系大的可能原因之一.

表 1 列出了利用可加性规则并使用被束缚原子概念修正过的复光学势计算得到的 300—1000 eV 内

表 1 不同能量的电子被 O₂ 分子散射时的弹性积分截面及动量转移截面

	能量/eV					
	300	400	500	700	800	1000
弹性积分截面						
本文	12.44	10.46	7.73	5.52	4.72	3.75
文献 [15]	10.3	9.08	7.15	—	—	3.74
文献 [17]	10.69	8.30	6.89	—	—	3.98
动量转移截面						
本文	1.83	1.48	1.01	0.691	0.492	0.354
文献 [15]	1.60	1.31	0.921	—	—	0.353
文献 [17]	2.45	1.59	1.14	—	—	0.39

若干个能量点处的电子被 O₂ 分子散射的弹性积分截面及动量转移截面.显然,随着入射电子能量的增加,本文的计算结果与 Iga 等^[15]的实验结果间的误差渐小.例如:当 $E = 300$ eV 时,弹性积分截面的计算结果与实验结果^[15]间的误差为 20.8%,动量转移截面的计算结果与实验结果^[15]间的误差为 14.4%;而当 $E = 400$ eV 时,这一误差则分别降为 15.2% 和 12.9%.尽管在 700 和 800 eV 处,暂无其他计算结果或实验结果可供比较,但我们依据 300,400,500 及 1000 eV 处的计算结果与实验结果^[15]的相符情况可以推断,700 和 800 eV 处的计算结果应该是可靠的.

表 2 列出了用同样的计算方法得到的 300—800 eV 内若干能量点处的电子被 CF₄ 分子散射的弹性积分截面及动量转移截面.对表 2 进行定量分析后所得出的结论与表 1 相同.

表 2 不同能量的电子被 CF₄ 分子散射时的弹性积分截面及动量转移截面

	能量/eV					
	300	400	500	600	700	800
弹性积分截面						
本文	29.44	24.16	20.13	17.69	15.52	13.75
文献 [18]	23.07	—	16.71	—	13.93	—
文献 [19]	31.80	—	21.4	—	16.29	—
文献 [20]	27.32	—	15.12	—	12.01	—
动量转移截面						
本文	5.73	4.18	3.01	2.28	1.69	1.15
文献 [18]	4.04	—	2.26	—	1.49	—
文献 [19]	6.78	—	3.25	—	1.97	—
文献 [20]	4.43	—	1.79	—	1.03	—

使用与上述相同的方法,我们还计算了 300—1000 eV 的电子被 CO, CO₂, OCS 及 CS₂ 等分子散射的微分截面、弹性积分截面和动量转移截面,所得结果与实验结果的符合程度与上述情况相类似.这进一步说明了本文的修正对于微分散射截面、弹性积分截面和动量转移截面的计算是成功的.进一步的工作正在进行之中.

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电子被 O₂ 及 CF₄ 分子散射的微分截面、弹性积分截面和动量转移截面,并将计算结果与实验结果和其他计算结果进行了比较.结果表明,利用可加性规则及修正后的复光学势计算出的微分散射

截面、弹性积分截面和动量转移截面,能够与实验结果较好相符.这说明本文给出的这一修正对电子被 O₂ 及 CF₄ 分子散射的微分截面、弹性积分截面和动量转移截面的计算是成功的.作者正在对更多、更复

杂的“电子-分子”散射体系的微分截面、弹性积分截面和动量转移截面进行计算,以进一步检验这一修正方法的适用性.

-
- [1] Trajmar S , Shyn T W 1989 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **22** 2911
 - [2] Talor J R 1972 *Scattering Theory : The Quantum Theory on Nonrelativistic Collisions* (Washington : John Wiley & Sons , Inc.)
 - [3] Lee M T , Michelin S E , Kroin T et al 1999 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **32** 3043
 - [4] Huo W M , Gianturco F A 1995 *Computational Methods for Electron-Molecule Collisions* (New York , London : Plenum Press)
 - [5] Lee M T , Iga I 1999 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **32** 453
 - [6] Jhanwar B L , Khare S P 1976 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **9** L527
 - [7] Jain A , Baluja K L 1992 *Phys. Rev. A* **45** 202
 - [8] Sun J F , Du C L , Shi D H et al 2004 *Chin. Phys.* **13** 1418
 - [9] Jiang Y H , Sun J F , Wan L D 1995 *Phys. Rev. A* **52** 398
 - [10] Shi D H , Sun J F , Yang X D et al 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 2019
(in Chinese)[施德恒、孙金锋、杨向东等 2005 物理学报 **54**
2019]
 - [11] Clementi E , Roetti C 1974 *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **14** 177
 - [12] Riley M E , Truhlar D G 1983 *J. Chem. Phys.* **63** 2182
 - [13] Zhang X , Sun J , Liu Y 1992 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **25** 1893
 - [14] Staszewska G , Schwenke D W , Thirumalai D et al 1983 *Phys. Rev. A* **28** 2740
 - [15] Iga I , Tao L M , Nogueira J C et al 1987 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **20** 1095
 - [16] Bromberg J P 1974 *J. Chem. Phys.* **60** 1717
 - [17] Raj D , Kumar A 2001 *Phys. Lett. A* **282** 284
 - [18] Sakae T , Sumiyoshi S , Murakami E et al 1989 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **22** 1385
 - [19] Raj D 1991 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **24** L431
 - [20] Khare S P , Raj D , Sinha P 1994 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **27** 2569

Absolute differential , elastic integral and moment transfer cross sections for electron scattering from O₂ and CF₄ at intermediate- and high-energies *

Shi De-Heng^{1)2)3)†} Sun Jin-Feng¹⁾ Zhu Zun-Lue¹⁾ Liu Yu-Fang¹⁾ Yang Xiang-Dong²⁾

¹⁾ Department of Physics , Henan Normal University , Xinxiang 453007 , China)

²⁾ Institute of Atomic and Molecular Physics , Sichuan University , Chengdu 610065 , China)

³⁾ Department of Foundation , The First Aeronautical College of Air Force , Xinyang 464000 ,China)

(Received 3 December 2004 ; revised manuscript received 8 January 2005)

Abstract

A complex optical model potential modified by incorporating the concept of bonded atom , which takes into consideration the overlapping effect of electron clouds between two atoms in a molecule , is employed to calculate the absolute differential cross sections , the elastic integral cross sections , and the moment transfer cross sections for electron scattering from O₂ and CF₄ in the energy range 300—1000 eV by using additivity rule model at Roothaan-Hartree-Fock level . The quantitative absolute differential cross section , elastic integral cross section , and moment transfer cross section results are compared with those obtained by experiments and other calculations wherever available , and good agreement is obtained . It is shown that the additivity rule model together with the complex optical model potential modified by incorporating the concept of bonded atom can give better results than the one unmodified by it . So , the introduction of the bonded-atom concept in complex optical model potential betters the accuracy of the absolute differential cross sections , the elastic integral cross sections , and the moment transfer cross sections .

Keywords : electron scattering , additivity rule , absolute differential cross section , elastic integral cross section

PACC : 3440

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China(Grant No. 10174019).

† E-mail : scattering@sina.com.cn