

中高能正电子被 CO, HCl, NH₃ 及 SiH₄ 散射的总截面*

施德恒[†] 孙金锋 朱遵略 刘玉芳

(河南师范大学物理与信息工程学院, 新乡 453007)

(2005 年 7 月 12 日收到, 2005 年 11 月 12 日收到修改稿)

利用可加性规则, 使用 Hartree-Fock 波函数, 采用由束缚原子概念修正过的复光学势(由静电势、极化势及吸收势三部分组成), 在 30—3000eV 内对正电子被 CO, HCl, NH₃ 和 SiH₄ 散射的总截面进行了计算, 且将计算结果与实验结果及其他理论计算结果进行了比较. 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, 所得结果与实验结果的符合程度要比利用未被束缚原子概念修正的复光学势及可加性规则进行计算得到的结果好很多. 因此, 在复光学势中采用束缚原子概念可提高正电子被分子散射的总截面的计算准确度.

关键词: 正电子散射, 可加性规则, 束缚原子, 总截面

PACC: 3485B

1. 引 言

中、高能(几十至数千电子伏)正电子被分子散射的总截面在许多学科领域都有重要应用. 和电子相比, 正电子被分子的散射有两个显著特点: 一是由于存在着正电子与电子的复合过程, 使得正电子的寿命极短; 另一是由于正电子和电子的可区分性, 使得在电子被分子散射的过程中存在的交换作用, 在正电子被分子散射的过程中不存在. 也正因为如此, 正电子被分子散射的过程吸引了许多实验及理论工作者的浓厚兴趣.

在理论方面, 过去的几十年里提出了多种计算正电子被分子散射的总截面的方法, 如密耦(Close-Coupling)法^[1]、极化轨道法^[2]、扭曲波近似^[3]、格劳勃(Glauber)近似^[4]、*R*-矩阵^[5]、以及一级波恩(Born)近似^[6]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, 一些新方法相继提出, 如定域复球型光学势法^[7]、可加性规则^[8], 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, 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方法, 已被广泛应用于电子被分子散射的总截面的计算中^[9-12]. 1993 年, Raj^[8]选择了 5 个能量点, 在 100—500eV 内第一次利用可加性规则计算了正电子被 6 个分子(O₂, CO, CO₂, SO₂, OCS 以及 SF₆)散射的总截面(但 Raj^[8]在计算正电子被单个原子散射的总截面时, 所用的极化势和吸收势仍为电子被单个原子散射时的极化势和吸收势, 这是不合理的). 随之, 该方法被用于正电子被多个分子散射的总截面的计算中. 但由于多种多样的原因, 与“电子-分子”散射总截面的计算结果相似; 正电子-分子”散射总截面的计算结果, 在中、低能区与实验结果间总是存在较大的误差.

近来, 作者等对计算方法进行了改进. 在复光学势中引入束缚原子概念, 也就是说, 在考虑分子内两相邻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—3000eV、甚至更高、或更低的入射能量下对正电子被分子散射的总截面进行计算. 大量的计算结果表明, 利用被束缚原子概念修正过的复光学势进行计算, 可大大提高正电子被分子、尤其是被复杂分子散射时的总截面的

* 国家自然科学基金(批准号: 10574039)资助的课题.

[†] E-mail: scattering@sina.com.cn

计算准确度.

2. 计算方法

可加性规则认为,在中、高能区,当正电子被分子散射时,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

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

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

为求得 $q_T^j(E)$, 须求解正电子散射的分波方程

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

其中

$$\begin{aligned} u_l(kr) &\sim kr [j_l(kr) - in_l(kr)] \\ &\quad + S_l kr [j_l(kr) + in_l(kr)] \end{aligned} \quad (3)$$

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_{opt} 为复光学势,用如下形式的复函数描述:

$$V_{\text{opt}}(r) = V_{\text{rel}}^+(r) + iV_{\text{abs}}^+(r), \quad (4)$$

其中

$$V_{\text{rel}}^+(r) = V_s^+(r) + V_p^+(r),$$

式中, $V_s^+(r)$ 为静电势,由文献[13]给出的 Hartree-Fock 波函数确定; $V_p^+(r)$ 为极化势,采用文献[14]给出的公式,并推广到正电子的情形

$$V_p^+(r) = -\frac{\alpha}{\chi(r^2 + r_+^2)}, \quad (5)$$

式中, α 为原子的极化率; r_+ 根据 $r=0$ 处正电子的关联势^[15]确定; $V_{\text{abs}}^+(r)$ 为吸收势^[16],采用如下表达式:

$$V_{\text{abs}}^+ = -\frac{1}{2} \rho(r) \bar{\sigma}_b(k_F, k) v, \quad (6)$$

其中, $\rho(r)$ 为原子的电荷密度; v 为入射正电子的定域速度; $\bar{\sigma}_b(k_F, k)$ 为双碰撞截面(binary-collision cross section),其表达式为

$$\begin{aligned} &\bar{\sigma}_b(k_F, k) \\ &= \frac{32\pi^2}{15k^2} N_k H(k^2 - w) \\ &\quad \times \left\{ \frac{5k_F^3}{w} - \frac{5k_F^3}{k^2} - \frac{2k_F^5}{k^4} \right. \\ &\quad \left. + H(k_F^2 + w - k^2) \left(\frac{2k_F^2 + w - k^2}{k^4} \right)^{2.5} \right\}, \end{aligned}$$

$$N_k = \frac{3}{4k_F^2 \pi},$$

$$k_F = [3\pi^2 \rho(r)]^{1/3},$$

$$w = 2\Delta,$$

上式中, Δ 为激发阈值; k 为入射正电子的动量; $H(x)$ 为 Heaviside 函数:当 $x \geq 0$ 时, $H(x) = 1$, 当 $x < 0$ 时, $H(x) = 0$.

利用四阶 Runge-Kutta 方法编制 Fortran 程序,在满足边界条件(3)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 ,即

$$S_l^j = \frac{(1 - \rho_m J_l) h_l^{(2)} + \rho_m h_l^{(2)}}{(1 - \rho_m J_l) h_l^{(1)} + \rho_m h_l^{(1)}}, \quad (7)$$

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

求出(7)式后,即可按照下式求出(1)式所需的 $q_T^j(E)$:

$$\begin{aligned} q_T^j(E) &= q_e^j(E) + q_a^j(E) = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{l_{\text{max}}} (2l+1) \\ &\quad \times [|1 - S_l^j|^2 + (1 - |S_l^j|^2)], \end{aligned} \quad (8)$$

这里, 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)式所描述的光学势的适用性,在 30—3000eV 内计算了正电子被 Ne 及 Ar 原子散射的总截面,其结果分别如图 1, 2 所示.由图 1, 2 显见,计算结果与实验结果^[17-21]间除低能下的个别点外,都符合得很好,这表明(4)式是适合于“正电子-原子”散射总截面的计算的.

更进一步地,在 30—3000eV 内也利用(4)式计算了正电子被 C, O, N, H, Cl 和 Si 原子散射的总截面,并利用(1)式所描述的可加性规则算出了正电子被 CO, HCl, NH₃ 和 SiH₄ 散射的总截面,其结果分别如图 3 至图 6 中的虚线所示.显见,在中、低能区,计算结果与实验值间存在较大的误差.因此(4)式所描述的光学势虽适合正电子与自由原子的散射,但

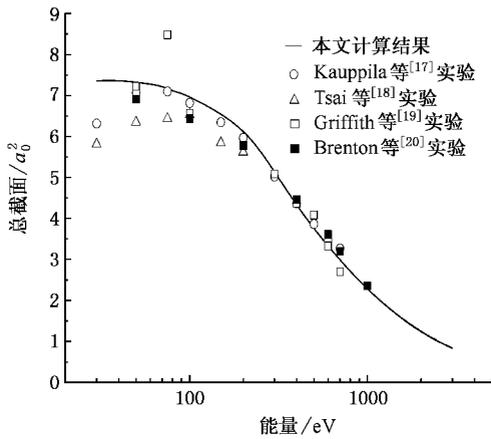


图 1 正电子被 Ne 原子散射的总截面

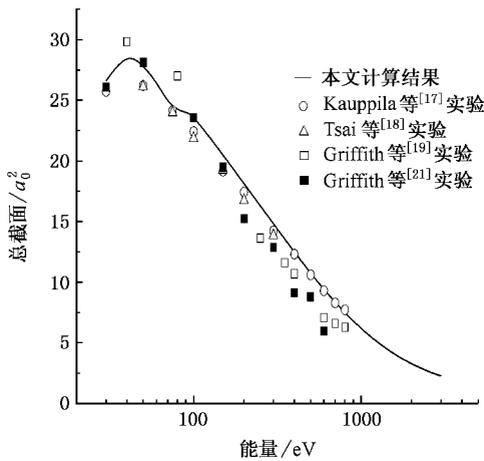


图 2 正电子被 Ar 原子散射的总截面

不完全适合正电子与分子中的原子的散射.

与自由原子相比,分子内的原子间存在着复杂的相互作用.例如,分子内两个相邻原子间的电子云重叠,等等.显然,不同分子内的原子(即使是同一原子),其电子云的重叠情况是互不相同的.因此,当正电子被不同分子内的同一原子散射时,其散射总截面理应不同.通过大量地计算与分析,作者等认为,在考虑分子内不同原子间的电子云的重叠效应后,分子内某一原子的有效电荷密度可写成

$$\rho'(r) = f \cdot \rho(r), \quad (9)$$

式中 f 为修正因子,由下式确定:

$$f = 1 - \frac{r}{R} \cdot \frac{Z}{N}, \quad (10)$$

式中, r 为分子内两原子核间的距离,即键长; R 为两原子的半径之和,本文是利用 Hartree-Fock 波函数求得的; Z 为原子最外壳层的电子数; N 为原子中的

总电子数.于是(4)式可改写成

$$V_{\text{opt}}(r) = V_{\text{rel}}^+(r) + if \cdot V_{\text{abs}}^+(r), \quad (11)$$

其中

$$V_{\text{rel}}^+(r) = if \cdot V_{\text{s}}^+(r) + V_{\text{p}}^+.$$

如未特别声明,文中的计算一律采用原子单位.

3. 结果与讨论

利用(1)式(4)式及(11)式,在 30—3000eV 内计算了正电子被 CO, HCl, NH₃ 和 SiH₄ 分子散射的总截面,其结果分别如图 3 至图 6 所示及表 1 所列.

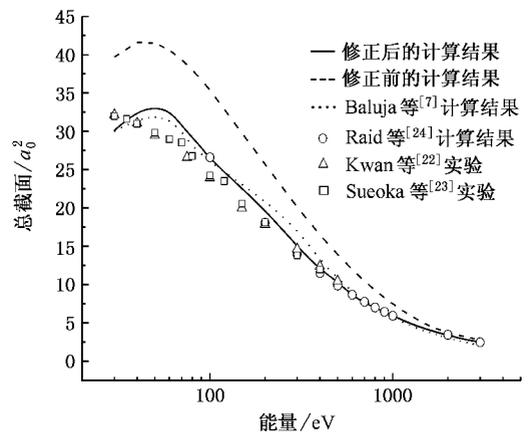


图 3 正电子被 CO 分子散射的总截面

3.1. 双原子分子:CO 及 HCl

图 3 给出了正电子被 CO 分子散射的总截面的计算结果,同时也给出了 Kwan 等^[22]在 30—500eV 内、Sueoka 等^[23]在 30—400eV 内的实验结果以及 Baluja 等^[7]在 30—3000eV 内、Raid 等^[24]在 100—3000eV 内的计算结果.由图 3 不难看出,利用修正后的复光学势计算出的总截面,与已有的实验结果都符合得很好,说明修正后的复光学势完全适合于计算正电子被 CO 分子散射的总截面,尽管在 $E = 50—100\text{eV}$ 内修正后的计算结果与 Kwan 等^[22]的实验结果间的最大偏差仍有约 10.0%.

由图 3 不难看出,作者等使用修正后的复光学势计算得到的总截面,在约 100—500eV 内的计算精度优于 Baluja 等^[7]的计算结果,在低能区则与其接近.不过, Baluja 等^[7]的计算方法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被修正的复光学势计算出的总截面,明显高于实验值.如,在 $E = 200\text{eV}$

时, 该数据偏离 Kwan 等^[22]的实验值约 44.06%, 偏离 Sueoka 等^[23]的实验值约 41.81%。在 $E = 400\text{eV}$ 时也分别达到 33.17% 和 37.38%, 是相当大的。因此, 本文的修正是成功的。

正电子被 HCl 分子散射总截面的实验结果很少。唯一的一组是由 Hamada 等^[25]于 30—400eV 内给出的。图 4 给出了本文的计算结果及其比较。显见, 利用修正后的复光学势计算出的总截面, 除了在 30eV 和 35eV 这两个能量点处偏小外, 其余数据与该组实验值符合很好。但使用未被修正的复光学势算出的结果, 在中、低能端的一个很大范围内, 都大大高于实验值。

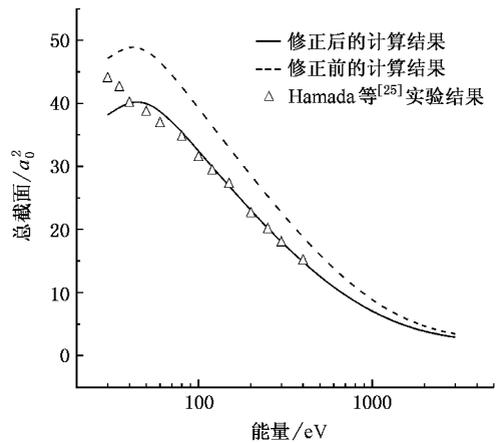


图 4 正电子被 HCl 分子散射的总截面

表 1 正电子被 CO, HCl, NH₃ 和 SiH₄ 分子散射的总截面(单位: a_0^2)

能量/eV	CO	HCl	NH ₃	SiH ₄	能量/eV	CO	HCl	NH ₃	SiH ₄
30.0	30.12	38.15	33.74	90.12	600.0	8.58	10.82	7.13	15.64
40.0	32.61	40.39	32.99	81.41	700.0	7.65	9.58	6.23	12.92
50.0	33.12	40.13	32.01	78.03	800.0	6.97	8.54	5.53	11.65
60.0	32.69	38.87	31.34	74.80	900.0	6.41	7.71	4.97	10.32
70.0	30.81	37.25	29.97	69.46	1000.0	5.96	7.02	4.53	9.30
80.0	29.19	35.54	28.30	63.44	1200.0	5.10	5.96	3.84	7.82
90.0	27.91	33.90	26.21	59.55	1400.0	4.49	5.20	3.38	6.80
100.0	26.35	32.38	24.82	54.56	1600.0	4.03	4.62	3.04	6.07
200.0	19.82	22.91	16.87	39.64	1800.0	3.68	4.18	2.79	5.53
300.0	14.96	17.96	13.55	29.97	2000.0	3.41	3.84	2.62	5.12
400.0	12.00	14.78	9.81	23.15	2500.0	2.84	3.25	2.34	4.44
500.0	10.36	12.53	8.32	18.72	3000.0	2.48	2.90	2.23	4.06

3.2. 四原子分子: NH₃

图 5 给出了正电子被 NH₃ 分子散射的总截面的计算结果、Sueoka 等^[26]在 30—400eV 内的实验结果、以及 Baluja 等^[7]在 30—3000eV 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, 当正电子的入射能量不低于 80eV 时与 Sueoka 等^[26]的实验结果非常一致。需要说明的是, 即使正电子的入射能量低于 80eV, 修正后的计算结果与实验值间的最大偏差也只有 14.0% 左右。同时从图 5 也容易看出, 在低能端, 修正后的计算结果明显优于 Baluja 等^[7]使用“定域复球光学势法”这一复杂的计算方法得到的结果。

由图 3 至图 5 以及图 6 显见, 在中、低能端一个较宽的能区内, 使用修正后的复光学势计算出的总

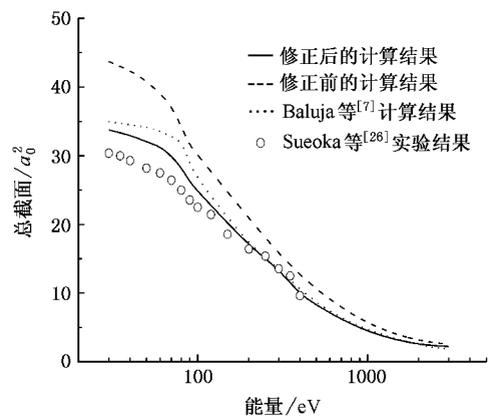


图 5 正电子被 NH₃ 分子散射的总截面

截面值, 总是明显优于使用未被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

考虑了分子内两相邻原子间的电子云的重叠与屏蔽效应,而未修正的复光学势则未考虑.由于可加性规则是将正电子被分子散射的总截面转换成了正电子被组成原子的散射总截面的和,因此当使用未被修正的复光学势进行计算时,分子内两相邻原子间被重叠或屏蔽掉的那部分电子云亦被用于计算正电子被组成原子散射的总截面,而实际上,它们对正电子被分子散射的总截面是毫无贡献的,从而造成计算结果偏大.

3.3. 五原子分子 SiH_4

图 6 给出了正电子被 SiH_4 分子散射的总截面计算结果、Sueoka 等^[27]在 30—400eV 内的实验结果、以及 Baluja 等^[7]在 30—3000eV 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值,当入射能量不低于 100eV 时与 Sueoka 等^[27]的实验值很好地一致,而未修正的复光学势则给出较大的偏差.尽管 Baluja 等^[7]的计算结果在低能端更接近实验值,但在 200—1000eV 的中、高能区,却大大偏离实验值.

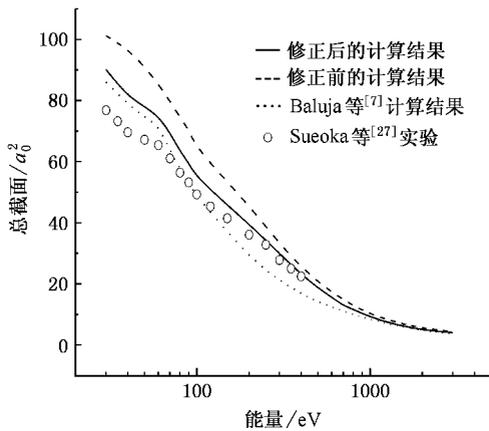


图 6 正电子被 SiH_4 分子散射的总截面

可加性规则忽略了分子内的多重散射效应 (multiple scattering effect) 和价键扭曲效应 (valence

bond distortion effect), 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值,也高于实验结果.而且,靶分子中含有的原子个数越多,这种差别就越显著,这从图 3 至图 6 可明显看出.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^[28];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^[29,30].与双原子分子 CO 及 HCl 分子相比,四原子分子 NH_3 和五原子分子 SiH_4 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^[28].这就是低能下正电子被四原子分子 NH_3 散射的总截面计算值较之正电子被双原子分子 CO 及 HCl 散射的总截面计算值更偏离实验值、正电子被五原子分子 SiH_4 散射的总截面计算值较之正电子被双原子分子 CO 及 HCl、四原子分子 NH_3 散射的总截面计算值更偏离实验值的原因之一.

4. 结 论

本文利用可加性规则及修正后的复光学势计算出的正电子被 4 个分子 (CO, HCl, NH_3 及 SiH_4) 散射的总截面,给出了在 30—3000eV 这一较大能量范围内的计算结果,并与利用可加性规则及未被修正的复光学势计算出的结果、实验结果以及他人的理论结果进行了比较.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,能够达到甚至超过使用复杂方法^[24]达到的结果的精度,同时也大大优于利用未被束缚原子概念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束缚原子概念,可提高正电子被分子散射的总截面的计算准确度.

进一步的计算工作正在进行之中.

[1] Kadyrov A S, Bray I 2002 *Phys. Rev. A* **66** 012710
 [2] McEachran R P, Ryman A G, Stauffer A D, Morgan D L 1977 *J. Phys. B* **10** 663
 [3] Gillespie E S, Thompson D G 1977 *J. Phys. B* **10** 3543
 [4] Gien T T 1989 *J. Phys. B* **22** 1555
 [5] Bell K L, Scott N S, Lennon N A 1984 *J. Phys. B* **17** 4757

[6] McEachran R P, Ryman A G, Stauffer A D 1978 *J. Phys. B* **11** 551
 [7] Baluja K L, Jain A 1992 *Phys. Rev. A* **45** 7838
 [8] Raj D 1993 *Phys. Lett. A* **174** 304
 [9] Raj D 1991 *Phys. Lett.* **160** 571
 [10] Sun J F, Xu B, Liu Y F, Shi D H 2005 *Chin. Phys.* **14** 1125

- [11] Joshipura K N , Patel P M 1996 *J. Phys.* B **29** 3925
- [12] Sun J F , Du C L , Shi D H , Liu Y F 2004 *Chin. Phys.* **13** 1418
- [13] Clementi E , Roetti C 1974 *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **14** 177
- [14] Zhang X , Sun J , Liu Y 1992 *J. Phys.* B **25** 1893
- [15] Jain A 1990 *Phys. Rev. A* **41** 2437
- [16] Staszewska G , Schwenke D W , Thirumalai D , Truhlar D G 1983 *Phys. Rev. A* **28** 2740
- [17] Kauppila W E , Stain T S , Smart J H , Dababneh M S , Ho Y K , Downing J P , Pol V 1981 *Phys. Rev. A* **24** 725
- [18] Tsai J S , Lebow L , Paul D A L 1976 *Can. J. Phys.* **54** 1741
- [19] Griffith T C , Heyland G R , Lines K S , Twomey T R 1979 *Appl. Phys.* **19** 431
- [20] Brenton A G , Dutton J , Harris F M 1978 *J. Phys.* B **11** L15
- [21] Griffith T C , Heyland G R 1978 *Phys. Rep.* **39** 169
- [22] Kwan Ch K , Hsieh Y F , Kauppila W E , Smith S J , Stein T S , Uddin M N 1983 *Phys. Rev. A* **27** 1328
- [23] Sueoka O , Mori S 1984 *J. Phys. Soc. Jpn.* **53** 2491
- [24] Raid D D , Wadehra J M 1999 *Chem. Phys. Lett.* **311** 385
- [25] Hamada A , Sueoka O 1994 *J. Phys.* B **27** 5055
- [26] Sueoka O , Mori S , Hamada A 1994 *J. Phys.* B **27** 1453
- [27] Sueoka O , Mori S , Katayama Y 1987 *J. Phys.* B **20** 3237
- [28] Hayashi S , Kuchitsu K 1976 *Chem. Phys. Lett.* **41** 575
- [29] Raj D , Tomar S 1997 *J. Phys.* B **30** 1989
- [30] Khare S P , Raj D , Sinha P 1994 *J. Phys.* B **27** 2569

Total cross sections for scattering of positron from CO , HCl , NH₃ and CH₄ at intermediate and high energies *

Shi De-Heng[†] Sun Jin-Feng Zhu Zun-Lue Liu Yu-Fang

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

(Received 12 July 2005 ; revised manuscript received 12 November 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 firstly employed to calculate the total cross sections for positron scattering from CO , HCl , NH₃ , SiH₄ in the incident energy range 30—3000eV by using additivity rule model at Hartree-Fock level. In the study , the complex optical model potential composed of static , correlation polarization plus absorption contributions firstly uses the bonded-atom concept. The results of 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 complex optical potential model modified by incorporating the concept of bonded atom can give much better calculation results than the unmodified one.

Keywords : positron scattering , additivity rule , bonded atom , total cross section

PACC : 3485B

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China(Grant No. 10574039).

[†] E-mail : scattering@sina.com.cn