

50—5000 eV 电子被 C_4H_8O , $C_5H_{10}O_2$, $C_6H_5CH_3$ 和 $C_4H_8O_2$ 散射的总截面*

施德恒^{1)†} 孙金锋²⁾ 刘玉芳²⁾ 朱遵略²⁾ 马 恒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)

(2008 年 5 月 17 日收到; 2008 年 8 月 25 日收到修改稿)

使用电子被 C, H 和 O 原子散射总截面的实验数据, 利用修正后的可加性规则计算了能量为 50—5000 eV 的电子被 4 个复杂大分子 C_4H_8O , $C_5H_{10}O_2$, $C_6H_5CH_3$ 和 $C_4H_8O_2$ 散射的总截面, 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. 结果表明, 即使是在几十电子伏的入射能量下, 修正后的可加性规则计算出的总截面依然能与实验结果符合很好, 而使用未修正的可加性规则进行计算, 即使是在几百电子伏的入射能量下得到的总截面仍偏离实验值较远. 分析表明, 未修正的可加性规则计算得到的总截面在中低能区过大, 随电子入射能量的增加而衰减太快的的问题是由可加性规则本身引起的, 其实质是未考虑低能下分子内原子间的相互屏蔽对散射总截面的计算所带来的影响.

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

随着实验技术的不断改进, 科学工作者越来越关注中、高能电子被生物分子、苯的衍生物等复杂大分子^[1-5]散射的总截面. 这是因为这些分子是构成某些生命化合物(例如 RNA 和 DNA)及生化材料的重要基础, 电子被这些分子散射的总截面对研究辐射对这些生命化合物和生化材料的损伤很有意义.

可用于计算电子被分子散射总截面的方法很多, 但适用于计算中、高能电子被复杂大分子散射总截面的方法却很少, 原因主要有两方面. 一方面是在中、高能区几乎所有的非弹性通道都被打开, 这使常规的计算方法(如密耦法等)变得非常复杂; 另一方面是这些分子含有的原子数都很多, 获得它们准确的单中心波函数极其困难.

一种能够计算高能电子被分子散射总截面的理论方法是可加性规则(AR)^[6]模型. 当计算电子被较小分子散射的总截面时, 这一模型特别有效^[7,8]. 但当计算电子被复杂大分子散射的总截面时, 即便

是在几百电子伏的入射能量下, 其计算结果与实验值间依然存在着较大的偏差^[9,10].

为使 AR 模型的适用范围向低能端延伸, 人们一直在进行着不懈的努力^[11-17]. Bobeldijk 等^[11]在计算电子被分子碰撞电离的电离截面时, 提出了一种几何可加性规则(GAR)模型. 利用这一模型, 在几十电子伏的能量下就能获得与实验值相当一致的结果, 但文献[11]未用这一模型计算电子被分子散射的总截面. Josphipura 等^[12]将电子与分子的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 模型作了相应的修正. 使用修正后的方法, 文献[12]计算了电子被几个小分子散射的总截面, 其精度有一定程度的提高. Zecca 等^[13]提出了一个新的 GAR 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, 文献[13]计算了电子被若干个小分子散射的总截面, 在中、高能区获得了与实验值相符的结果. 但文献[14,15]指出, 文献[13]的方法太复杂, 难以在复杂大分子中获得应用. 为简单计算电子被分子散射的总截面, 文献[14,15]在考虑分子内原子间相互屏蔽的基础上提

* 国家自然科学基金(批准号:10574039)和河南省高校科技创新人才支持计划(批准号:2008HASTIT008)资助的课题.

† E-mail: scattering@sina.com.cn

出了一种屏蔽修正的可加性规则(SCAR)模型, 并计算了能量为 10—1000 eV 的电子被 N_2 , CO , CO_2 和 C_6H_6 散射的总截面. 只是在能量较低的区域, 文献[14, 15]的计算结果依然偏离实验值较大. 为准确计算电子被分子散射的总截面, 最近 Antony 等^[16]提出了一种分组 AR 模型. 在这一模型中, 分子被分成若干个原子组, 电子被靶分子散射的总截面就等于电子被各个原子组散射的总截面之和. 使用这一模型, 文献[16]计算了电子被 CF_4 , C_2F_4 , C_2F_6 , C_3F_8 和 CF_3I 等散射的总截面, 在一个较宽的能量范围内也得到了与实验值相符的结果. Jiang 等^[17]提出了一种与能量相关的几何可加性规则(EGAR)模型, 并利用这一模型计算了电子被若干个分子散射的总截面. 由于这一模型没有考虑靶分子的几何尺寸, 在中、低能区对较大的靶分子而言依然存在着明显的误差. 为提高电子被分子散射总截面的计算精度, 本文作者在考虑分子内原子间的相互屏蔽效应随入射电子能量、靶分子的尺寸及含有的总原子数和总电子数的基础上, 对 EGAR 模型^[17]进行了进一步的修正, 并在 Hartree-Fork 水平上计算了电子被 CH_4 , C_2H_6 , $C_2H_3F_3$, C_2H_4 , C_2F_4 , C_2Cl_4 , CF_4 , CCl_4 , CF_2Cl_2 , $CClF_3$, $CFCl_3$, H_2S 和 C_2F_6 等一系列小分子散射的总截面^[18—21]. 分析表明, 即使是在几十电子伏的入射能量下, 修正后的模型也能给出与实验值相符的结果.

近来, Mozejko 等^[1, 2]报道了能量为 1—370 eV 的电子被 C_4H_8O (tetrahydrofuran) 和 $C_5H_{10}O_2$ (a-tetrahydrofurfuryl alcohol) 分子散射总截面的实验结果, Kate 等^[3]发表了 1—1000 eV 的电子被甲苯散射总截面的实验数据. 为检验作者提出的修正模型^[18—21]对复杂大分子的适用性, 同时也为了进一步证明未修正的 AR 模型给出的总截面在中低能区过大, 且随电子入射能量的增加而衰减太快的问题是由 AR 模型本身引起的这一结论, 本文采用电子被 C, H, O 原子散射总截面的实验数据作初始数据来计算电子被本文所研究的大分子散射的总截面. 计算结果表明, 即使是对于 C_4H_8O , $C_5H_{10}O_2$ 和 $C_6H_5CH_3$ 这样的大分子, 作者的修正模型依然适用. 需要说明的是, 对本文所研究的大分子仅有 Blanco 等^[15]利用 SCAR 模型计算了能量为 10—1000 eV 的电子被 C_4H_8O 分子散射的总截面和 Milosavljević 等^[22]利用 SCAR 模型计算了能量为 5—5000 eV 的电子被 $C_5H_{10}O_2$ 分子散射的总截面. 但从文献 15, 22 的比

较可以看出, 文献[15]的计算结果在中、高能区偏离实验值较远, 而文献[22]的计算结果则在中、低能区偏离实验值较大.

2. 计算方法

在中、低能区使用 AR 模型计算电子被大分子散射总截面失败的原因, 在于大分子中原子间的相互屏蔽效应很明显, 而 AR 模型对此却没有任何考虑. 计及这种原子间的相互屏蔽效应, 文献[17]指出可用以下的 GAR 模型计算低能电子被分子散射的总截面:

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

式中 $Q_{//}(E)$ 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. 例如对 C_4H_8O 分子, $Q_{//}(E)$ 和 $Q_{\perp}(E)$ 分别等于 $(Q_{C_4H_8} + Q_O + Q_{C_2H_4})/2$ 和 $Q_{C_4H_4O}$, 其中 $Q_{C_4H_8}$, $Q_{C_2H_4}$ 和 $Q_{C_4H_4O}$ 分别为电子被 C_4H_8 , C_2H_4 和 C_4H_4O 散射的总截面, 其值由原始的 AR 模型计算得到,

$$Q_{AR}(E) = \sum_{j=1}^N q_j^i(E), \quad (2)$$

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

计算表明, (1) 式能够成功地计算低能电子被分子散射的总截面^[17], 但夸大了高能下分子内原子间的几何屏蔽效应. 与此相对应的是, (2) 式虽然忽略了高能下分子内原子间的几何屏蔽效应, 但计算出的结果却基本准确^[7—10]. 这表明分子对入射电子的透明度随着电子入射能量的增加而有所提高. 这说明, 当入射电子的能量较低时内层原子被外层原子部分屏蔽着, 因而 GAR 模型能给出准确的结果. 但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, 分子内的每一个原子都是独立的散射体, 此时 AR 模型能给出准确的结果. 充分考虑这些因素后, 文献[17]采用 AR 模型和 GAR 模型各自的优点, 给出了如下的半经验公式:

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

这里 A 是一个待定系数, 反映的是在不同能量下、不同分子中的屏蔽原子对散射总截面的贡献情况. 文献[17]认为, 确定系数 A 至少要考虑两方面的因

素. 首先, 当入射电子的能量足够低时, GAR 模型适用, 所以系数 A 必须保证靶分子的散射总截面近似等于 GAR 模型计算出的结果; 当入射电子的能量足够高时, AR 模型适用, 此时系数 A 必须保证散射总截面近似等于 AR 模型得到的结果. 其次, 系数 A 还必须与电子的入射能量和分子含有的电子总数有关, 同时系数 A 也还必须能保证在一个较宽的能量范围内, 电子被分子散射的总截面随电子入射能量的变化有一个正确的形状. 考虑这些因素后文献 [17] 指出, 系数 A 应取如下形式:

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

这里 E 是电子的入射能量(单位为 eV); C 是单位调节常数, 这里取 $C = 1 \text{ eV}$; 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等因素, 因此对较大的靶分子而言, 由它给出的结果并不令人满意^[23]. 为了能得到满意的结果, 作者认为(4)式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)(4)两式计算出的电子被分子散射的总截面偏离实验结果就越大. 这意味着分子的几何尺寸越大, 系数 A 就应越小. 同时, 计算结果也已证明, 对含有相同电子总数的分子, 它所含有的原子数越多, 系数 A 也应越小. 其次, 对较大的分子而言, (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正确的形状, 在双对数坐标图中这一问题显得尤为明显, 由(4)式修正过的 AR 模型计算出的电子被分子散射的总截面曲线依然比实验曲线更陡. 根据这些讨论, 作者认为经验系数 A 应取如下形式^[18—21, 23]:

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

式中 n 是分子含有的原子总数; C 依然是单位调节常数, 这里取 $C = 1 \text{ eV}/a_0$; d 是分子的最大尺寸, 其值可以根据文献 [24] 给出的键长和键角数据按文献 [19] 的方法估算得出.

有两种获得 $q_T^j(E)$ 的方法. 一种是采用文献 [18—21] 描述的分波法, 这是一种通过求解电子-原子散射的分波方程获得总截面的方法. 另一种是避开复杂的理论计算, 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, 原因如下: 当在双对数坐标图中表述电子被分子散射的总截面与入射电子能量的关系时, 可以清楚地看出按文献 [18—21] 所述方法得到的电子被分子散射的总

截面曲线比实验曲线更陡. 这样陡的曲线形状究竟是由电子被原子散射总截面的计算精度造成的, 还是 AR 模型本身的反映? 用实验 $q_T^j(E)$ 数据作初始数据, 可以避免因分波方程的求解精度所带来的问题, 进而能够说明这样陡的曲线形状是由 AR 模型本身所造成.

本文仅研究由 C, H 和 O 原子构成的 4 个复杂大分子. 就电子被 C, H 和 O 原子散射总截面的实验数据, 可以采取(2),(3)和(5)三式所描述方法的逆过程, 从有关电子被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 H_2 , O_2 和 CO 分子散射总截面^[25—27]中提取出的结果^[13], 这些结果如表 1 所列. 如未特别说明, 本文的计算一律采用原子单位.

表 1 电子被 C, H 及 O 原子散射总截面的实验数据

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

3. 结果及讨论

利用表 1 列出的数据, 使用修正后的 AR 模型((3)和(5)式)计算了电子被 $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}$, $\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}_2$, $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3$ 及 $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$ 分子散射的总截面, 所得结果如表 2 所列及图 1—图 4 所示.

表 2 电子被 $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}$, $\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}_2$, $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3$ 及 $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$ 分子散射的总截面

E/eV	$\text{C}_4\text{H}_8\text{O}$	$\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}_2$	$\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3$	$\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$
50	136.07	179.27	153.71	130.06
100	104.82	138.98	120.00	100.69
200	71.756	95.555	83.040	69.313
500	36.868	48.997	42.592	35.939
1000	20.987	27.667	24.034	20.658
2000	11.675	15.185	13.315	11.634
5000	5.102	6.589	5.855	5.269

C_4H_8O 是 DNA 分子的重要组成成分之一, 图 1 给出了利用未修正的 AR 模型及作者修正后的 AR 模型计算出的电子被 C_4H_8O 分子散射的总截面及其与 Mozejko 等^[1]的实验结果的比较. 从图 1 不难看出, 利用修正后的 AR 模型得到的总截面在整个重叠能区内都能与实验值^[1]很好相符, 但未修正的 AR 模型计算出的结果都偏离实验值^[1]较远. 例如在 50, 100 和 200 eV 处, 修正后的 AR 模型计算出的结果与实验值^[1]间的偏差虽分别只有 7.1%, 2.2% 和 2.0%, 但未修正的 AR 模型计算出的总截面在这些能量点处的偏离则分别高达 22.7%, 27.8% 和 26.3%. 这说明修正后的 AR 模型完全适用于电子被 C_4H_8O 分子散射总截面的计算.

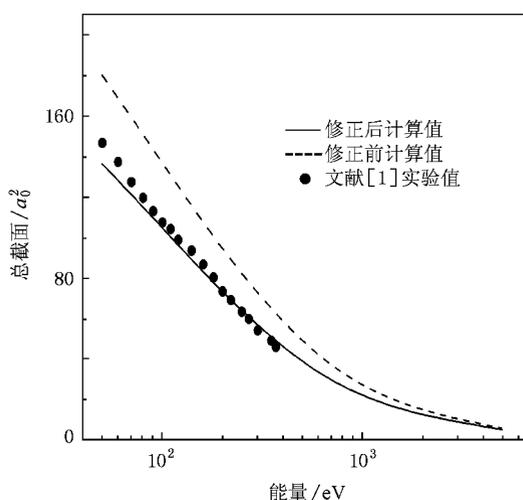


图 1 电子被 C_4H_8O 分子散射的总截面

迄今为止, 理论上只有文献 15]利用 SCAR 方法计算了能量为 10—1000 eV 的电子被 C_4H_8O 分子散射的总截面. 由于文献 15]仅给出电子被 C_4H_8O 分子散射总截面的图示结果而未列出具体数据, 因此未能在图 1 中予以具体展示. 但从文献 15]所进行的比较可以看出, 在能量高于 200 eV 的区域, 文献 15]的计算结果偏离实验值较大, 而且随着电子入射能量的增加, 这一偏离也在进一步加大. 因此在整个重叠能区内, 本文修正后的计算结果应比文献 15]更接近实验值^[1].

在双对数坐标图中可以非常清楚地看出, 利用未修正的 AR 模型获得的总截面随入射能量的变化曲线明显陡于实验曲线, 但利用修正后的 AR 模型计算出的结果却不存在这一问题. AR 模型在修正前后的唯一区别, 仅在于修正后的 AR 模型考虑了

分子内原子间的相互屏蔽效应, 亦即考虑了分子对入射电子的透明度随入射能量、分子的几何尺寸、含有的原子及电子总数等的变化情况, 而未修正的 AR 模型却没有. 对图 2 和图 3 进行分析后也得到了相同的结论.

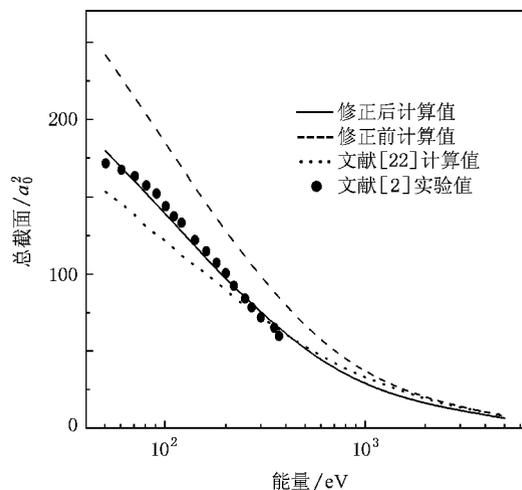


图 2 电子被 $C_5H_{10}O_2$ 分子散射的总截面

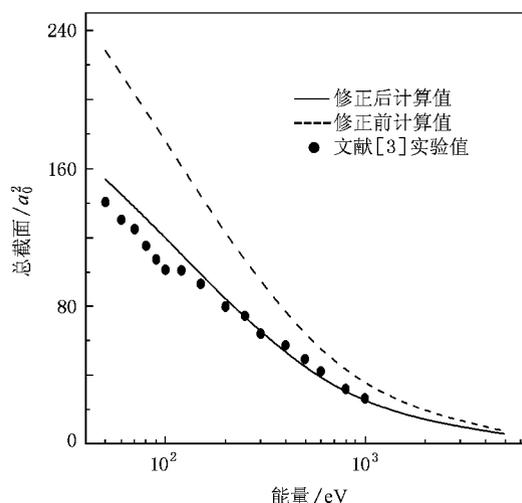


图 3 电子被 $C_6H_5CH_3$ 分子散射的总截面

$C_5H_{10}O_2$ 分子是 DNA 的另一重要组成成分, 图 2 给出了未修正的 AR 模型及作者修正后的 AR 模型计算出的电子被 $C_5H_{10}O_2$ 分子散射总截面及其与 Milosavljević 等^[22]的计算结果和 Mozejko 等^[2]的实验结果的比较. 显然, 利用修正后的 AR 模型计算出的总截面在中、低能区明显优于未修正的 AR 模型及文献 22]的计算结果. 例如, 在 50, 100 和 200 eV 处, 修正后的 AR 模型给出的结果与实验值^[2]间的

偏差分别只有 4.6%, 3.2% 和 4.8%。与此形成鲜明对比的是, 未修正的 AR 模型得到的结果在相应的能量点处分别高出实验值 40.9%, 28.7% 和 24.8%, 而文献 [22] 的计算结果则分别比相应的实验值小 12.0%, 15.0% 和 10.8%。因此, 修正后的计算方法给出的结果要比他们准确得多。

和电子被 C_4H_8O 分子散射总截面的计算结果相似, 修正后的 AR 模型也消除了电子被 $C_5H_{10}O_2$ 分子散射总截面在低能端过大、散射总截面随入射能量的变化曲线明显陡于实验曲线的现象。

图 3 给出了电子被 $C_6H_5CH_3$ 分子散射的总截面, 同时也给出了 Kate 等^[3]在 50—1000 eV 能区的实验结果。从图 3 可以看出, 利用修正后的 AR 模型得到的总截面与文献 [3] 的实验结果在整个重叠能区内都很相符, 说明修正后的 AR 模型同样适用于电子被 $C_6H_5CH_3$ 分子散射总截面的计算。同时由图 3 也容易看出, 使用未修正的 AR 模型计算出的总截面, 甚至在 1000 eV 以下的能区偏离实验结果都很大。

综合图 1—图 3 可以得出, 尽管 C_4H_8O , $C_5H_{10}O_2$ 和 $C_6H_5CH_3$ 都是很大、很复杂的分子, 但利用修正后的 AR 模型计算出的电子被这 3 个分子散射的总截面甚至在几十电子伏的入射能量下就能与实验结果相符很好, 说明这里所述的修正对复杂大分子而言是很成功的。

文献 [18—21] 在 Hartree-Fork 水平上利用非常适合于电子被自由原子散射总截面计算的复光学势计算了电子被多个小分子散射的总截面, 在能量为 100 eV 以上, 甚至在几十电子伏时就能得到与实验值相符很好的计算结果。本文采用电子被原子散射的实验总截面, 对一些复杂大分子进行计算时也得到了相似的结果。比较这些结果后可以得出以下两点: (1) 未修正的 AR 模型计算出的总截面在中低能区过大、随电子入射能量的增加而衰减太快的的问题主要是由 AR 模型本身引起的, 其实质是未考虑低能下分子内原子间的相互屏蔽对散射总截面的计算所带来的影响。(2) 可以肯定的是, 由电子被自由原子散射的复光学势计算出的总截面随能量的变化趋势是正确的。在计算中、低能电子被复杂大分子散射的总截面时, 原始的 AR 模型之所以失败, 主要是因为大分子中存在着复杂的原子相互屏蔽效应, 而原始的 AR 模型对此却没有作任何考虑。

$C_4H_8O_2$ 分子也是 DNA 的重要组成成分之一,

图 4 给出了未修正的 AR 模型及修正后的 AR 模型计算的电子被 $C_4H_8O_2$ 分子散射的总截面。遗憾的是, 迄今为止在所涉及到的能区内尚无任何关于电子被 $C_4H_8O_2$ 分子散射总截面的理论及实验结果可供比较。从以上的分析可以看出, 利用作者修正后的 AR 模型计算电子被 C_4H_8O , $C_5H_{10}O_2$ 及 $C_6H_5CH_3$ 分子散射的总截面时, 得到的结果甚至在几十电子伏时就能与实验值很相符。由于 $C_4H_8O_2$ 分子与 C_4H_8O , $C_5H_{10}O_2$ 及 $C_6H_5CH_3$ 分子的复杂程度相似, 据此推断, 利用修正后的 AR 模型计算得到的电子被 $C_4H_8O_2$ 分子散射总截面至少在 100 eV 以上时应该是准确可靠的。

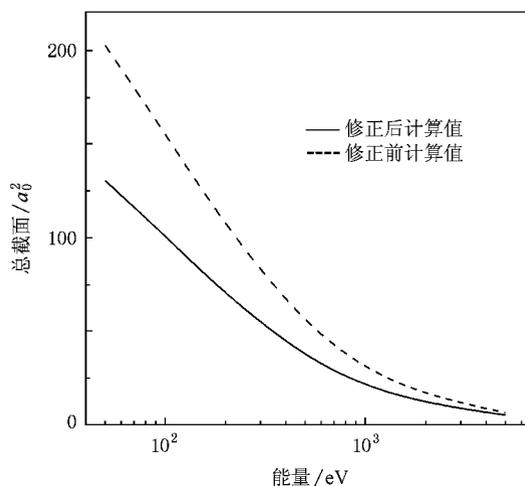


图 4 电子被 $C_4H_8O_2$ 分子散射的总截面

正如图 1—图 3 所示, 在能量较低的区域, 尤其是当入射电子的能量只有几十电子伏时, 利用修正后的 AR 模型得到的结果与实验值还有一定的偏差, 这主要是因为用于计算 Q_{\parallel} 和 Q_{\perp} 的各组成单元之间的干涉效应^[16]在修正后的 AR 模型中尚未加以考虑。当入射能量低于 100 eV 时, 由于与入射电子相关联的德布罗意波长(100 eV 时约为 0.123 nm)与分子的键长是可比拟的(例如对 C_4H_8O 分子, C—H 和 C—C 键的键长分别为 0.1083 和 0.1400 nm^[24]), 因此这种干涉效应就显得很重要。另外, 多重散射效应^[28]和价键扭曲效应^[29]在修改后的模型中也被忽略。可以期望, 在本文的修正模型中当考虑这些因素后可以得到更为准确的结果, 尤其是当电子的入射能量只有几十电子伏时。

随着入射能量的增加, 与键长相比入射电子的波长越来越小, 因此以上提到的干涉效应等因素的

影响也越来越不明显, 因而计算结果也就越来越接近实验值, 对复杂大分子而言尤其如此。

4. 结 论

利用修正后的 AR 模型并使用电子被 C, H, O 原子散射总截面的实验数据, 在 50—5000 eV 能区内计算了电子被复杂大分子 C_4H_8O , $C_5H_{10}O_2$, $C_6H_5CH_3$ 和 $C_4H_8O_2$ 散射的总截面, 并将计算结果与未修正的 AR 模型得到的结果、实验结果以及其他理论结果进行了比较。结果表明, 利用作者修正后的 AR 模型得到的总截面几乎与所有的实验结果在几十电子伏的能量下都能很好相符。而使用未修正的 AR 模型计算出的总截面则在中、低能区, 甚至在 1000 eV 时都与实验值偏离较大, 且存在着随电

子入射能量的增加而下降太快的问题。由于使用了电子被原子散射总截面的实验数据作为初始数据, 因而避开了电子被原子散射总截面的计算精度问题。将本文的计算结果连同过去的结果进行比较分析, 可以得到以下两点结论: (1) 未修正的 AR 模型计算出的总截面在中低能区过大、随电子入射能量的增加而衰减太快的问题主要是由 AR 模型本身引起的, 其实质是未考虑低能下分子内原子间的相互屏蔽对散射总截面的计算所带来的影响。(2) 可以肯定的是, 由电子被自由原子散射的复光学势计算出的总截面随能量的变化趋势是正确的。在计算电子被复杂大分子散射的截面时, 原始的 AR 模型之所以出现问题, 主要是因为大分子中存在着复杂的原子相互屏蔽效应, 而原始的 AR 模型对此却没有作任何考虑。

- [1] Mozejko P, Denga E P, Domaračka A, Szymkowski C 2006 *Phys. Rev. A* **74** 012708
- [2] Mozejko P, Domaračka A, Denga E P, Szymkowski C 2006 *Chem. Phys. Lett.* **429** 378
- [3] Kate H, Makochekanwa C, Shiroyama Y, Hoshino M, Sueoka O, Kimura M, Tanaka H 2007 *Phys. Rev. A* **75** 062705
- [4] Sueoka O, Makochekanwa C, Tanino H, Kimura M 2005 *Phys. Rev. A* **72** 042705
- [5] Sueoka O, Makochekanwa C, Kimura M 2006 *Eur. Phys. J. D* **37** 377
- [6] Raj D 1991 *Phys. Lett. A* **160** 571
- [7] Shi D H, Sun J F, Yang X D, Zhu Z L, Liu Y F 2004 *Chin. Phys.* **13** 1018
- [8] Joshipura K N, Patel P M 1994 *Z. Physik D* **29** 269
- [9] Shi D H, Sun J F, Zhu Z L, Liu Y F 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 1632 (in Chinese) [施德恒、孙金锋、朱遵略、刘玉芳 2008 物理学报 **57** 1632]
- [10] 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]
- [11] Bobeldijk M, van der Zande W J, Kistemaker P G 1994 *Chem. Phys.* **179** 125
- [12] Joshipura K N, Patel P M 1996 *J. Phys. B* **29** 3925
- [13] Zecca A, Melissa R, Brusa R S, Karwasz G P 1999 *Phys. Lett. A* **257** 75
- [14] Blanco F, García G 2003 *Phys. Lett. A* **317** 458
- [15] Blanco F, García G 2007 *Phys. Lett. A* **360** 707
- [16] Antony B K, Joshipura K N, Mason N J 2005 *J. Phys. B* **38** 189
- [17] Jiang Y H, Sun J F, Wan L D 2000 *Phys. Rev. A* **62** 062712
- [18] Shi D H, Sun J F, Liu Y F, Zhu Z L 2006 *Chem. Phys. Lett.* **429** 271
- [19] Shi D H, Sun J F, Zhu Z L, Ma H, Liu Y F 2007 *Eur. Phys. J. D* **45** 253
- [20] Shi D H, Sun J F, Zhu Z L, Liu Y F 2007 *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B* **254** 205
- [21] Shi D H, Liu Y F, Sun J F, Ma H, Zhu Z L 2008 *Radiat. Phys. Chem.* **77** 528
- [22] Milosavljević A R, Blanco F, Šević D, García G, Marinković B P 2006 *Eur. Phys. J. D* **40** 107
- [23] Shi D H, Sun J F, Liu Y F, Zhu Z L 2008 *J. Phys. B* **41** 025205
- [24] Lide D R 2001 *CRC Handbook of Chemistry and Physics* (81st ed) (Boca Raton : Chemical Rubber Company) pp9—33
- [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 *Europhys. Conf. Abstr. of 28th European Group for Atomic Spectr. Conf.* (20D X Graz : European Group for Atomic Spectr. Conf.) p302
- [28] Hayashi S, Kuchitsu K 1976 *Chem. Phys. Lett.* **41** 575
- [29] Bonham R A, Iijima T 1963 *J. Phys. Chem.* **67** 2266

Total cross sections of electron scattering by large molecules C_4H_8O , $C_5H_{10}O_2$, $C_6H_5CH_3$ and $C_4H_8O_2$ at 50—5000 eV*

Shi De-Heng¹ $\text{\textcircled{X}}$ † Sun Jin-Feng²) Liu Yu-Fang²) Zhu Zun-Lue²) Ma Heng²)

¹ $\text{\textcircled{X}}$ College of Physics and Electronic Engineering, Xinyang Normal University, Xinyang 464000, China)

² $\text{\textcircled{X}}$ College of Physics and Information Engineering, Henan Normal University, Xinxiang 453007, China)

(Received 17 May 2008 ; revised manuscript received 25 August 2008)

Abstract

Using the modified additivity rule (AR) approach, the total cross sections (TCSs) for electron scattering by large molecules C_4H_8O , $C_5H_{10}O_2$, $C_6H_5CH_3$ and $C_4H_8O_2$ are calculated over a wide energy range from 50 to 5000 eV by employing the experimental TCS results of electron scattering from atoms C, H and O. Here the atomic TCSs are derived from the experimental TCS results of simple molecules (H_2 , O_2 , CO). The quantitative TCSs are compared with those obtained by measurements and other theories wherever available. It is shown that there is excellent accordance between the theories obtained by the modified AR approach and the measurements even at energies of several tens of eV. And it is also shown that the problem that the log-log TCS curves obtained by the original AR approach are steeper than those obtained by the experiments, is introduced by the AR model itself. The intrinsic reason is that the mutual screening effects are not taken into consideration in the original AR approach at lower energies.

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) and the Program of Science and Technology Innovation Talents in Institution of Higher Education of Henan Province, China (Grant No. 2008HASTIT008).

† E-mail : scattering@sina.com.cn