

NO与C₂H₂的康普顿轮廓研究*

马永朋¹⁾ 赵小利²⁾ 刘亚伟²⁾ 徐龙泉²⁾ 康旭²⁾ 倪冬冬²⁾ 闫帅¹⁾
朱林繁²⁾† 杨科¹⁾‡

1) (中国科学院上海应用物理研究所, 上海 201800)

2) (合肥微尺度物质科学国家实验室, 中国科学技术大学近代物理系, 合肥 230026)

(2015年1月4日收到; 2015年3月22日收到修改稿)

基于第三代同步辐射光源, 在20 keV的入射X射线能量下测量了NO与C₂H₂分子的康普顿轮廓. 考虑到本次实验结果在 $p_z \approx 0$ 附近的统计精度达到了0.2%, 本文报道的NO和C₂H₂的康普顿轮廓可以作为严格检验理论的实验基准. 除此之外, 还分别采用HF方法及密度泛函方法选用不同的基组计算了NO与C₂H₂康普顿轮廓. 通过对比实验结果与理论计算, 发现对于NO分子, 加入弥散函数基组理论计算结果与实验符合更好, 说明NO分子基态的电子分布较为弥散. 对于C₂H₂分子, HF方法理论计算的结果与实验符合较好.

关键词: 一氧化氮, 乙炔, 康普顿散射

PACS: 33.20.Rm, 34.50.Gb, 33.70.Ca

DOI: 10.7498/aps.64.153302

1 引言

原子分子的电子结构一直是原子分子物理的核心内容之一, 而康普顿轮廓可以反映原子分子基态的电子结构, 一直以来备受人们的重视. 康普顿轮廓的测量是基于康普顿散射^[1,2], 而最早认识到康普顿散射可用于测量靶样品中的电子结构, 则归功于Dumond^[3]. 但是受限于当时的X射线的亮度, 直到20世纪70年代人们才开始测量气相原子分子的康普顿轮廓, 此时所用的X射线为转靶X射线机或放射源产生的X射线^[4-7], 但是受限于它们的低亮度, 实验数据的精度不高. 随着第三代同步辐射光源的出现, X射线的亮度和单色性有了极大提高, 这为原子分子高精度的康普顿轮廓测量创造了条件^[7-13]. 本文就是利用第三代同步辐射——上海光源测量了NO与C₂H₂分子的康普顿轮廓, 并结合理论研究了这两个分子基态的电子结构.

由于康普顿散射的截面非常小, 到目前为止气

相原子分子的康普顿轮廓测量还是十分稀少的. 基于转靶X射线机和放射源产生的X射线, 人们测量了He, Ne, H₂, O₂, N₂及碳氢化合物等原子分子的康普顿轮廓^[4-7], 精度仅仅为3%到5%. 最近, 基于高亮度的第三代同步辐射光源, 人们测量了He, Ar, Xe, N₂和H₂的康普顿轮廓^[14,15], 且实验精度有了大幅度的提高, 在 $p_z = 0$ 处的实验精度达到了1%. 至于NO和C₂H₂, 据我们所知并没有关于这两种气体康普顿轮廓的实验研究报道, 也没有见到相关的理论研究.

NO是大气污染的重要成分, 并在破坏臭氧层以及酸雨的形成中起着重要的作用^[16]. 另外, 作为一个开壳层系统, 从基础研究的视角看, NO也是非常有价值的. C₂H₂是含有一个非饱和 π 键的最简单碳氢化合物, 理论学家和实验学家都对它有兴趣^[17].

基于以上调研, 开展NO和C₂H₂的高精度康普顿轮廓研究是非常有意义的, 而这正是本文的工作.

* 国家自然科学基金(批准号: U1332204, 11274291, 11104309, 1320101003)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: lfzhu@ustc.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: yangke@sinap.ac.cn

2 理论背景与计算

当碰撞过程中光子传递给靶原子分子的能量远大于原子分子的轨道束缚能时冲量近似成立^[18], 此时康普顿散射的微分截面可以表示为(原子单位):

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega d\Omega} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{Th}} \frac{\omega_2}{\omega_1} \frac{1}{k} J(p_z), \quad (1)$$

这里 $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{Th}}$ 是汤姆逊散射截面, 在我们选择散射平面垂直于入射平面的情况下, $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{Th}}$ 等于 r_0^2 , 这里的 r_0 代表电子的经典半径. ω_1 代表入射光子的能量, ω_2 代表出射光子的能量. \mathbf{k} 是碰撞过程中的动量转移, 等于 $(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)$, 其中 \mathbf{k}_1 和 \mathbf{k}_2 分别代表入射光子与散射光子的动量, $J(p_z)$ 是样品靶的康普顿轮廓. (1) 式中的 p_z 指的是样品靶中电子在 z 方向的分量, 即 $p_z = \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}}{k}$. p_z 可以根据能量守恒得到

$$p_z = \frac{k}{2} - \frac{\omega_1 - \omega_2}{k}. \quad (2)$$

(1) 式中的康普顿轮廓 $J(p_z)$ 可写为

$$J(p_z) = 2\pi \int_{|p_z|}^{\infty} n(p) p dp, \quad (3)$$

$$n(p) = \sum_j \int d\Omega |\psi_j(\mathbf{p})|^2, \quad (4)$$

这里 $n(p)$ 是靶基态在动量为 p 时的电子密度, $\psi_j(\mathbf{p})$ 是指靶原子中第 j 个电子在动量空间的电子波函数. (4) 式中的求和遍及所有的电子占据轨道, 由它可建立实验测量的康普顿轮廓与电子在动量空间的密度分布或者说电子在动量空间的波函数之间的联系.

由 (3) 式和 (4) 式, 只要准确知道原子分子基态的波函数, 就可以计算相应的原子分子的康普顿轮廓. 因此, 理论计算就归结为准备原子分子基态的电子波函数. 具体到 NO 和 C_2H_2 这两种样品, 我们首先利用 Gaussian 03^[19] 优化 NO 和 C_2H_2 的分子结构. 基于优化后的结构, 分别选择以 aug-cc-pVTZ 为基组的 HF 方法以及采用 6-311 G, 6-311++G, 6-311 G**, 6-311++G**, aug-cc-pVTZ 为基组的密度泛函方法^[20,21], 计算了 NO 和 C_2H_2 的康普顿轮廓. 此外我们还利用密度泛函方法基于 aug-cc-pVTZ 基组计算了 He 原子的康普顿轮廓,

其主要目的是为了确定谱仪的能量分辨, 这将在第 3 部分进行详细论述.

3 实验方法和实验过程

本实验是在上海光源 BL15 U1 硬 X 射线微聚焦光束线站完成的, 实验仪器的工作原理如图 1 所示. BL15 U1 采用 Si(111) 布拉格双晶单色器, 产生能量展宽为 3 eV 的 20 keV 的 X 射线. X 射线与密封于气室的 NO 和 C_2H_2 气体作用, 气体的压强为 20 atm (1 atm = 1.01325×10^5 Pa). 两种气体纯度为 99.5%, 从南京上元工业气体公司购买, 没有进一步的纯化. 气室的窗口是 150 μm 厚的 Kapton 薄膜. 实验采用一个 Vortex-90EX 硅漂移 X 射线探测器 (SDD), 在垂直于水平面 90° 的方向探测散射光子. 光阑孔 1 和光阑孔 2 的直径都为 1 mm, 两者间的距离为 33 mm, 这样就限定了探测器的张角为 3.5° , 相应的动量展宽为 0.1 a.u.. 实验过程中, 为了屏蔽杂散光的影响, 我们对整个系统包括 SDD、气室以及整个散射光路都用一层厚度为 0.5 mm 的铅皮包裹. 另外整个实验过程是在常温的环境下进行的.

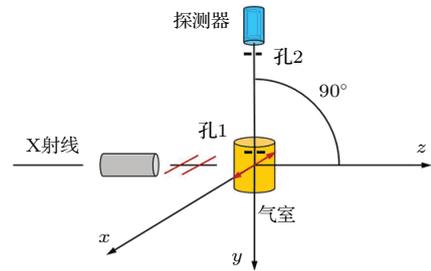


图 1 (网刊彩色) 康普顿散射谱仪示意图, 其中入射 X 射线沿着 z 轴方向, 偏振方向是 x 轴

Fig. 1. (color online) Schematic diagram of the Compton scattering spectrometer. The direction of the incident photon is along the z axis and its polarization direction is along the x axis.

图 2 给出了 NO 与 C_2H_2 的 X 射线康普顿散射谱, 可以看到弹性散射峰和康普顿散射峰. 为了去除来自窗口 Kapton 薄膜和腔体杂散光的影响, 我们也测量了真空状态下的散射谱, 并作为本底予以扣除. 为了得到纯粹的康普顿散射谱, 对弹性散射峰用高斯函数进行拟合并加以扣除. 考虑到弹性峰对康普顿峰在高端的影响要比在低能端的影响大, 所以我们选择了康普顿峰的低能区以获得 NO 与 C_2H_2 的康普顿轮廓. 通过以上处理就获得

了NO与C₂H₂纯粹的康普顿散射谱,进而可通过(1)式获得NO与C₂H₂的相对康普顿轮廓.

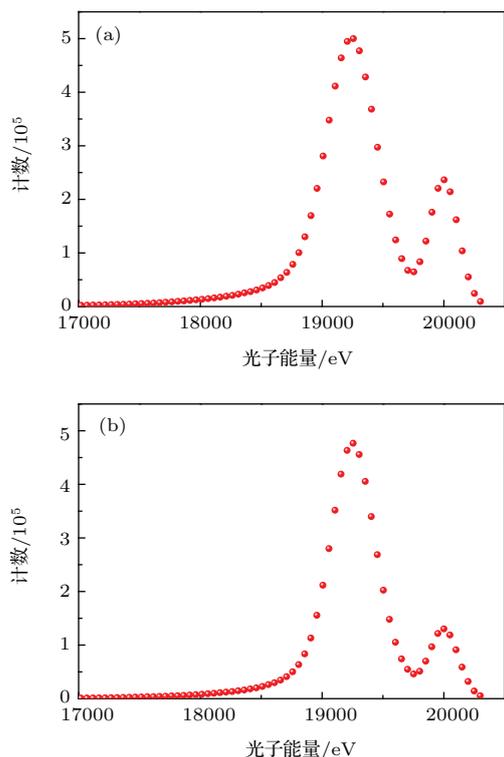


图2 (网刊彩色) (a) NO分子的x射线散射谱; (b) C₂H₂的X射线散射谱(入射光子能量为20 keV,散射角度为90°)
Fig. 2. (color online) (a) the X-ray scattering spectrum of nitric oxide; (b) the X-ray scattering spectrum of acetylene. The incident photon energy is 20 keV with scattering angle of 90°.

实验测量不可避免地受到实验谱仪动量分辨的影响,它主要来自于光谱仪的能量分辨和探测器的接收角导致的动量展宽,其中后者的影响小于前者.也就是说,我们得到的实验数据是卷积了一个动量分辨函数之后的康普顿轮廓.所以当我们对比实验结果与理论数据时,需要把理论计算的康普顿轮廓卷积上实验的动量分辨函数.在数据处理过程中我们首先卷积由于探测器的有限张角引起的动量分辨0.1 a.u.,然后再卷积由探测器的能量分辨引起的动量展宽.由于光的直线传播特性,探测器的张角导致的动量分辨可以直接由谱仪的机械结构通过光路的仿真获得,而由探测器的能量分辨引入的动量分辨,我们通过比较氦原子的实验测量谱与精确理论计算谱获得.这一做法是基于氦原子是简单的双电子体系,其理论计算的康普顿散射谱非常精确.实验上我们利用aug-CC-pVTZ基组的密度泛函方法B3LYP计算了氦的康普顿轮廓,获得探测器的能量响应函数,这可以用一个Gauss函数

表示,进而得到由能量分辨引起的动量展宽大小为1.5 a.u..最后把NO与C₂H₂的康普顿轮廓归一到 $p_z = 0$ 理论值.

4 结果与讨论

NO分子基态的电子组态为 $(1\sigma)^2(2\sigma)^2(3\sigma)^2(4\sigma)^2(1\pi)^4(5\sigma)^2(2\pi)^1$,是一个 2π 没有填满的开壳层系统.图3给出了NO分子实验的康普顿轮廓及理论计算的结果,其中实验结果的统计精度在 $p_z = 0$ 附近达到了0.2%,远比早期的同类实验的精度(3%—5%)要高.从图3也可看出,本次的实验结果与不同理论计算结果符合.为了更加清晰地看出不同的基组与实验的差别,我们利用下式计算理论与实验的偏差曲线:

$$\Delta J(p_z) = \frac{J_{\text{exp}}(p_z) - J_{\text{cal}}(p_z)}{J_{\text{cal}}(p_z = 0)}, \quad (5)$$

其中 $J_{\text{exp}}(p_z)$ 是实验测量的康普顿轮廓, $J_{\text{cal}}(p_z)$ 是理论计算的康普顿轮廓, $J_{\text{cal}}(p_z = 0)$ 是理论计算在 $p_z = 0$ 处的康普顿轮廓值.

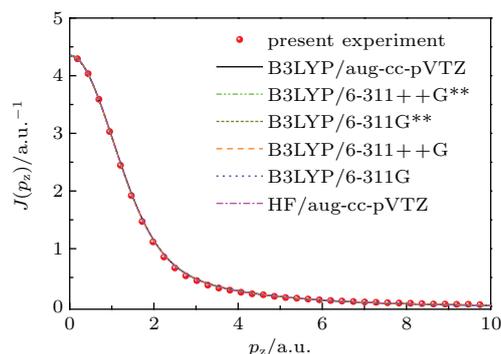


图3 (网刊彩色) NO分子的康普顿轮廓(其中理论计算的结果卷积上了实验的动量分辨)

Fig. 3. (color online) Compton profiles for nitric oxide. The present calculation is convolved with the experimental momentum resolution.

NO分子康普顿轮廓的理论实验的偏差曲线示于图4中.从图4可知,总体上讲B3LYP用不同的基组计算的结果以及HF理论计算的结果与实验差别不大.为了定量比较实验与理论的差异,我们进一步计算了理论与实验偏差曲线平方和

$$\chi^2 = \sum_{p_z} [\Delta J(p_z)]^2, \quad (6)$$

并示于表1中.考虑到实验的误差,基于不同基组B3LYP的计算结果中aug-cc-pVTZ, 6-311++G**, 6-311++G计算结果相近,明显优于不考虑弥散的

表1 NO分子康普顿轮廓的理论实验的偏差曲线的平方和

Table 1. summation of residual square of NO between our experimental Compton profile and the calculations.

	B3LYP				HF	
	aug-cc-pVTZ	6-311++G**	6-311 G**	6-311++G	6-311 G	aug-cc-pVTZ
残差平方和	1.77×10^{-2}	1.73×10^{-2}	2.01×10^{-2}	1.69×10^{-2}	1.95×10^{-2}	1.80×10^{-2}

6-311G** 和 6-311G 的计算结果. 这说明对于开壳层的NO分子, 加入了弥散可以更好地描述NO分子基态的电子结构. 因此, 我们利用B3LYP的aug-cc-pVTZ计算结果进行进一步的分析.

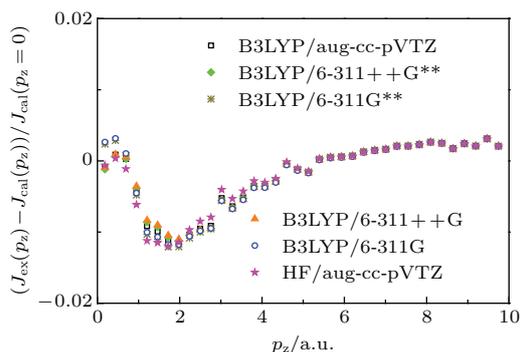


图4 (网刊彩色), NO分子康普顿轮廓的理论实验的偏差曲线

Fig. 4. (color online) The differences between the experimental Compton profiles and the present calculated Compton profile for nitric oxide.

图5和图6分别给出了B3LYP的aug-cc-pVTZ计算的各个轨道的康普顿轮廓及其位置空间的电子密度分布. 在这里我们把 $(1\pi)^4$ 拆分成两个轨道, 共计8个分子轨道, 其中图5中的 2π 轨道只填充了1个电子. 从图6不难看出, 最内层的 1σ 和 2σ 分别对应O和N原子的 $1s$ 轨道, 它们很好保留了原子轨道的性质, 其电子云在位置空间分别局域在两个原子核周围, 基本不参与成键. 根据不确定关系, 位置空间的局域对应动量空间的弥散, 而这正是 1σ 和 2σ 轨道的康普顿轮廓在动量空间弥散的原因, 如图5所示. 剩余的6个轨道在位置空间要比 1σ 和 2σ 轨道弥散, 对应的它们在大动量区间的值远大于其在大动量区间的值的原因, 如图5所示. 另外, 图5显示 1π 和 2π 轨道的康普顿轮廓随 p_z 增加而单调下降. 再者, 我们还可以注意到, 在小 p_z 区域, 成键的 3σ 和 5σ 的康普顿轮廓都比反键的 4σ 要大, 这说明成键轨道电子离原子核较远的概率更大, 与成键电子在两个原子核之间概率密度较大的预期相符. 还有, 成键的 5σ 轨道在位置空间沿分子轴方

向有两个节面, 对应的其康普顿轮廓具有结构, 例如其在 $1 \text{ a.u.} < p_z < 2.2 \text{ a.u.}$ 区间有一个肩膀, 这可能是具有多个节面轨道的共性, 我们将在下面 C_2H_2 分子中还可以看到类似的情形.

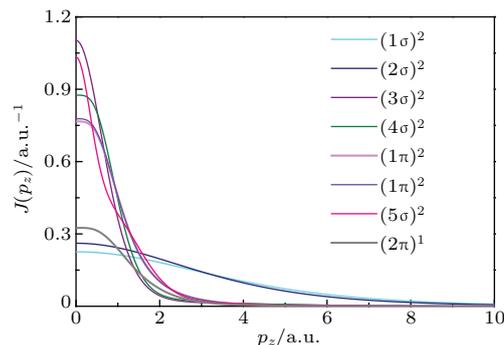


图5 (网刊彩色) NO分子的各个轨道的康普顿轮廓
Fig. 5. (color online) All orbital Compton profiles for nitric oxide.

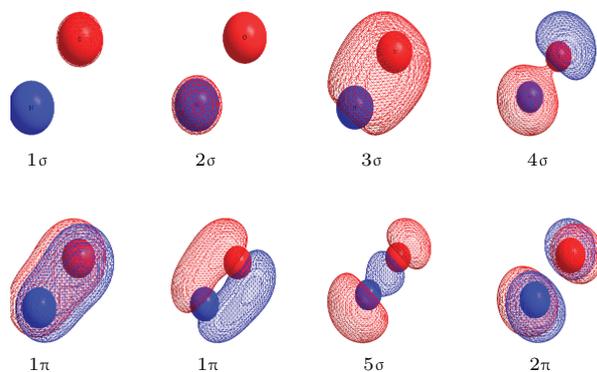


图6 (网刊彩色) NO分子的各个轨道的位置空间电子密度分布
Fig. 6. (color online) The electron density distribution of each orbit in the position space for nitric oxide.

C_2H_2 分子基态的电子组态为 $(1\sigma_g)^2(1\sigma_u)^2(2\sigma_g)^2(2\sigma_u)^2(3\sigma_g)^2(1\pi_u)^4$, 是一个满壳层系统. 本次实验 C_2H_2 康普顿轮廓的实验与理论的结果示于图7中, 相应的理论与实验的偏差曲线示于图8. 与NO分子类似, 本次实验结果的统计精度在 $p_z = 0$ 附近达到了0.2%, 远比早期的同类实验的精度(3%—5%)要高. 从图7可知, 理论与实验总体上符合得很好, 但是仔细对比可以看出理论与实验存在细微的差别.

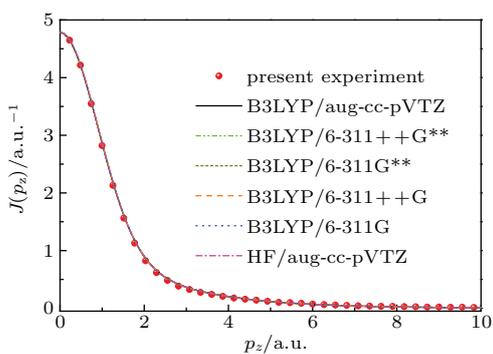


图7 (网刊彩色) C₂H₂ 分子康普顿散射轮廓 (其中理论计算的结果卷积上了实验的动量分辨)

Fig. 7. (color online) Compton profiles for acetylene. The present calculation is convolved with the experimental momentum resolution.

同样, 对 C₂H₂ 分子不同方法的理论计算与实验数据的残差平方和列于表 2 中. 对于 C₂H₂, 我们可以看到不同方法得到的残差彼此之间差别很小, 所有理论结果都很接近实验数据, 这可能是由于 C 与 H 的价电子的结合方式决定. 但是我们可以看到, 总体来说, HF 方法计算的误差要稍微优于其

表 2 C₂H₂ 理论计算的不同方法与实验数据的残差平方和

Table 2. Summation of residual square of C₂H₂ between our experimental Compton profile and the calculations.

	B3LYP					HF
	aug-cc-pVTZ	6-311++G**	6-311 G**	6-311++G	6-311 G	aug-cc-pVTZ
残差平方和	1.90×10^{-2}	1.87×10^{-2}	2.02×10^{-2}	1.83×10^{-2}	1.98×10^{-2}	1.71×10^{-2}

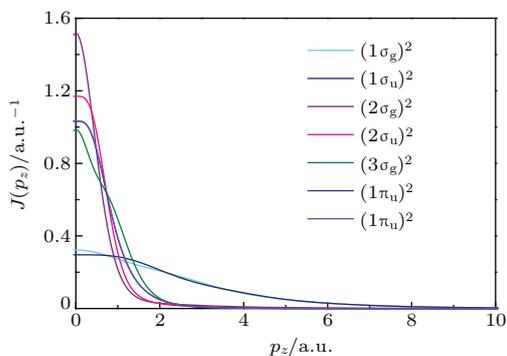


图9 (网刊彩色) C₂H₂ 分子各个轨道的康普顿轮廓
Fig. 9. (color online) All orbital Compton profiles for acetylene.

与 NO 类似, 我们计算了 C₂H₂ 分子各个轨道的康普顿轮廓及其在位置空间的电子密度分布, 并将它们表示于图 9 和图 10 中. 其中, 最内层的 1σ_g 和 1σ_u 轨道分别对应两个 C 原子的 1s 轨道, 是非成键轨道且局域在原子核周围, 因此其在动量空间最为弥散. 其他分子轨道子在动量空间更局域在小 p_z 区间, 这与它们在位置空间更弥散相对应. 由

他的计算结果. 一般而言, 密度泛函方法对电子关联考虑更全面, 所以对于 C₂H₂, HF 计算结果优于密度泛函计算的结果, 是有些奇怪的. 对于这一情形的解释, 需要更多的理论与实验工作, 例如考虑分子振动导致分子构型变化的影响.

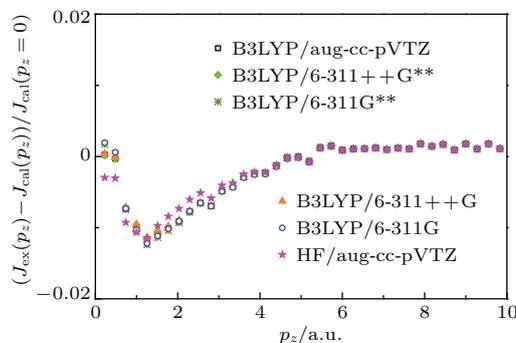


图8 (网刊彩色) C₂H₂ 分子康普顿轮廓的理论计算的偏差曲线

Fig. 8. (color online) The differences between the experimental Compton profiles and the presently calculated Compton profile for acetylene.

图 9 和图 10 可知, 在分子轴方向没有节面的 3σ_g 和 1π_u 轨道及一个节面的 2σ_u 轨道, 其康普顿轮廓都是单调下降的. 但是, 在分子轴方面具有两个节面的 3σ_g 轨道, 其康普顿轮廓具有结构, 例如其在 p_z ≈ 1a.u. 的附近有一个肩膀, 这可能是具有多个节面轨道的共性, 且在前面 NO 的 5σ 轨道也看到了相同的现象.

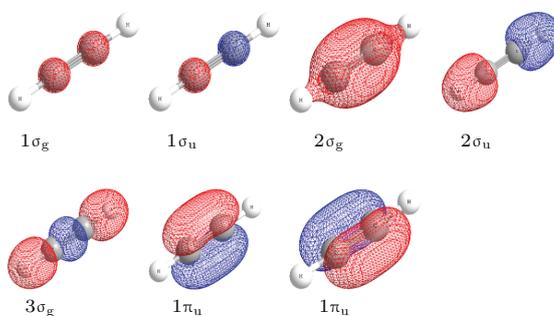


图10 (网刊彩色) C₂H₂ 分子各个轨道的位置空间电子密度分布

Fig. 10. (color online) The electron density distribution of each orbit in the position space for acetylene.

5 结 论

本文在入射光子能量 20 keV 的条件下测量了 NO 与 C₂H₂ 的康普顿轮廓, 获得了其基态的电子结构信息. 同时基于 Gaussian03 软件并选用不同的基组, 分别用 HF 方法和密度泛函方法计算了 NO 与 C₂H₂ 的康普顿轮廓. 通过对比 NO 的实验与理论计算结果, 发现增加了弥散函数的计算与实验符合更好. 这可能是由于 NO 是开壳层系统, 其电子的空间分布更弥散. 对于 C₂H₂ 分子, HF 方法计算结果与实验符合更好, 这需要更多的工作去阐明这一现象. 我们分子轨道的计算结果也显示, 不同轨道的康普顿轮廓具有不同的特性, 而这对揭示分子的特性是十分有帮助的, 但是相应实验的开展还有待于实验技术的进步.

参考文献

- [1] Compton A H 1923 *Phys. Rev.* **21** 483
- [2] Ge Y C 2009 *Acta Phys. Soc.* **58** 5 (in Chinese)[葛榆成 2009 物理学报 **58** 5]
- [3] Dumond J W M 1929 *Phys. Rev.* **33** 643
- [4] Eisenberger P 1970 *Phys. Rev. A* **2** 1678
- [5] Eisenberger P, Marra W C 1971 *Phys. Rev. L.* **27** 1413
- [6] Eisenberger P 1972 *Phys. Rev. A* **5** 628
- [7] Eisenberger P 1972 *J. Chem. Phys.* **56** 1207
- [8] Meng X Z, Wang M H, Ren Z M 2010 *Acta Phys. Soc.* **59**3(in Chinese)[孟现柱, 王明红, 任忠民 2010 物理学报 **59** 3]
- [9] Xie B P, Zhu L F, Yang K, Zhou B, Hiraoka N, Cai Y Q, Yao Y, Wu C Q, Wang E L, Feng D L 2010 *Phys. Rev. A* **82** 032501
- [10] Zhu L F, Wang L S, Xie B P, Yang K, Hiraoka N, Cai Y Q, Feng D L 2011 *J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys.* **44** 025203
- [11] Kang X, Yang K, Liu Y W, Xu W Q, Hiraoka N, Tsuei K D, Zhang P F, Zhu L F 2012 *Phys. Rev. A* **86** 022509
- [12] Liu Y W, Mei X X, Kang X, Yang K, Xu W Q, Peng Y G, Hiraoka N, Tsuei K D, Zhang P F, Zhu L F 2014 *Phys. Rev. A* **89** 014502
- [13] Peng Y G, Kang X, Yang K, Zhao X L, Liu Y W, Mei X X, Xu W Q, Hiraoka N, Tsuei K D, Zhu L F 2014 *Phys. Rev. A* **89** 032512
- [14] Sakurai H, Ota H, Tsuji N, Sakurai Y 2011 *J. Phys. B* **44** 065001
- [15] Kobayashi K, Itou M, Hosoya T, Tsuji N, Sakurai Y, Sakurai H 2011 *J. Phys. B* **44** 115102
- [16] Milo Gibaldi 1993 *J. Clin. Pharmacol.* **33** 6
- [17] Lundberg K, Field W, David C, Seidl T 1993 *J. Chem. Phys.* **98** 8384
- [18] Eisenberger P, Platzman P M 1970 *Phys. Rev. A* **2** 415
- [19] Frisch M J, Trucks G W, Schlegel H B, Scuseria G E 2003 *GAUSSIAN 03 Revision B 04* (Gaussian Inc. 2003)
- [20] Becke A D 1993 *J. Chem. Phys.* **98** 5648
- [21] Lee C, Yang W, Parr R G 1988 *Phys. Rev. B* **37** 785

Investigation of Compton profiles of NO and C₂H₂*

Ma Yong-Peng¹⁾ Zhao Xiao-Li²⁾ Liu Ya-Wei²⁾ Xu Long-Quan²⁾ Kang Xu²⁾
Ni Dong-Dong²⁾ Yan Shuai¹⁾ Zhu Lin-Fan²⁾† Yang Ke¹⁾‡

1) (Shanghai Institute of Applied Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201204, China)

2) (Hefei National Laboratory for Physical Sciences at Microscale and Department of Modern Physics, University of Science and Technology of China, Hefei, Anhui 230026, China)

(Received 4 January 2015; revised manuscript received 22 March 2015)

Abstract

The Compton profiles of nitric oxide and acetylene molecules have been determined at an incident photon energy of 20 keV. Compton profile measurements are carried out with the beamline BL15U1 at the Shanghai Synchrotron Radiation Facility (SSRF). A dedicated gas cell is used, in which diffuse scattering is effectively suppressed. By considering that the statistical accuracy of 0.2% at $p_z \approx 0$ is achieved, the Compton profiles of NO and C₂H₂ determined in this paper can serve as the experimental benchmark data. Furthermore, the density functional theory (DFT) and HF calculation for different basis sets are used to calculate the Compton profiles of nitric oxide and acetylene. It is found that the DFT calculations with the diffuse basis sets are closer to the experimental results, indicating that the electronic density distribution of nitric oxide is more diffuse. For acetylene, the HF calculation is of better agreement with the experimental result. To better understand Compton profiles, we have compared them with distributions of electron density by theoretical calculation. There are clear correspondences between them: diffuse distribution is related to the localized profile and complex structure in electron density distribution, which also shows a subtle structure in profile. The present Compton profiles of nitric oxide and acetylene molecules achieved by synchrotron radiation are the most accurate up to now, as far as we know.

Keywords: NO, C₂H₂, Compton profiles

PACS: 33.20.Rm, 34.50.Gb, 33.70.Ca

DOI: 10.7498/aps.64.153302

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. U1332204, 11274291, 11104309, 11320101003).

† Corresponding author. E-mail: lfzhu@ustc.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: yangke@sinap.ac.cn