

中高能电子被分子的散射总截面与能量关系的研究^y

刘玉芳, 朱遵略, 孟慧燕, 孙金锋

(河南师范大学物理与信息工程学院, 河南 新乡 453002)

摘要: 讨论了 CO 和 CO₂ 分子被电子散射的总截面与能量及其分子结构常数之间的关系, 证明了在不同的能量区间总截面与能量之间的关系不同, 但是在能量低于 1 500 eV 时可以利用键长、键角计算电子被分子散射总截面, 计算简便, 结果可靠, 并将 CO₂ 的结果与已有的拟合公式、实验数据进行了比较.

关键词: 总截面; Born 近似; Born-Bethe 理论

中图分类号: O561.5 文献标识码: A

电子被分子散射过程是一个多粒子、多中心的复杂的量子力学问题, 特别是在中高能区. 因此探索各种直接、有效的近似方法一直是许多学者努力的方向, 这方面已经取得了一定的成效. 近年来人们也十分关注散射总截面与能量以及靶分子的空间结构、物理化学常数之间的关系, 以便利用这些已知的常数来估算散射总截面, 以满足应用学科急需的、目前尚无理论和实验数据的分子. 中高能区, 特别是在 500 eV 以上实验数据还比较少. 而理论计算主要采用的方法有两种, 一是可加性规则及其各种修正^[1], 二是 SCOP^[2]方法. 其中中高能电子与分子散射总截面之间关系的研究倍受实验和理论研究学者的关注.

Vogt 和 Wannier 利用带电粒子与原子或较小的分子在相距较远时的相互作用势的关系式($V = -\frac{1}{2} \frac{e^2 a}{r^4}$)建立的散射总截面与能量以及原子或分子的分子极化率之间的关系

$$\sigma_T = \text{const} \left| \frac{e^2 a}{m v^2} \right|^{1/2} = \text{const} \left| \frac{e^2 a}{2E} \right|^{1/2}. \quad (1)$$

Nishimura 和 Tawara 利用(2)式提出了计算简单的碳氢分子总截面的拟合公式, 拟合公式中保留了总截面与能量的平方根的倒数成反比的关系, 结果表明数在十 eV 到数百 eV 的能量范围内, 总截面与简单的碳氢分子的几何尺寸大小、分子的电子数、极化

率等有关. García 和 Manero^[3]拟合了 Joshipura 和 Vinodkumar 计算发现的经验公式, 得到了如下形式的经验公式:

$$\frac{\sigma_T(Z, a)}{a_0^2} = \left| 0.4Z + 0.1 \frac{a}{a_0^3} + 0.7 \right| \left| \frac{E_0}{E'} \right|^{-0.78}, \quad (2)$$

式中 E_0 是入射电子能量, 单位为 keV, $E' = 1 \text{ keV}$, A, B 是依赖靶分子的常数, a_0 是 Bohr 半径. (2) 式中 B 取 0.78, 是作者对自己实验小组测量的 CH₄, NH₃, N₂, CO 和 CO₂ 的总截面的拟合得到的. 如我们把电子与分子之间的相互作用势用 Yukawa 势 ($U(r) = -U_0 e^{-\alpha r}/r$) 来表示, 那么根据一级 Born 可得总截面的计算公式为:

$$\sigma_T^{\text{B1}} = \frac{4\pi U_0^2}{\alpha^2 (\alpha^2 + (2mE)/\hbar^2)}. \quad (3)$$

Bethe 利用一级 Born 近似以及电子与分子之间的库仑相互作用势 $V = -\sum_{j=1}^Z z e^2 / |r - r_j| + z Z_N e^2 / r$ 得到了在高能量区域电子被分子散射总截面与能量之间的关系:

$$\sigma_T^{\text{BB}} = A_T E^{-1} + B_T E^{-1} \ln E + C_T E^{-2} + \dots, \quad (4)$$

(4) 式中 A_T, B_T, C_T 是与分子结构常数及散射动力学相关的常数. (3) 式和(4)式中的第一项与我们提

^y 收稿日期: 2002 - 03 - 11; 修改日期: 2002 - 03 - 11

* 基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10174019); 河南省自然科学基金资助项目(0111050800); 教委基金资助项目(2000140005)

作者简介: 刘玉芳(1963-), 男(汉族), 河南灵宝人, 副教授, 从事电子-原子、电子-分子碰撞研究.

出的中高能区的经验公式 $\sigma_T(E) = d\sigma_0 / (d + CE\sigma_0)$ 实质上都是相同的, 即当 $E \rightarrow \infty$ 时, $\sigma_T \rightarrow E^{-1}$, 近似地反映了电子与分子在散射过程中的相互作用. 式中 C 为考虑量纲以后的常数, 取定值为 10^{-3} , σ_0 为零能散射截面, 我们用单中心模型来研究电子与分子的散射过程, 并把电子分子之间的相互作用视为刚球势(半径为 r_0), 则 $\sigma_0 = 4\pi r_0^2$, d 为分子几何半径的大小的 2 倍, 而分子几何半径大小可由分子的键长、键角以及分子的空间几何结构来计算.

在中高能区, 特别是在 500 eV 以上电子被分子散射的实验数据还十分的少, 不能满足各方面研究及应用的需要, 因此研究这方面的经验公式与简洁的计算便显得十分的必要. 现我们取实验研究较多、能量范围较大的 CO 和 CO₂ 作为研究对象, 以测量的总截面的倒数作为纵坐标, 电子的入射能量为横坐标(eV) 作图. CO^[4-6] 和 CO₂^[7-9] 的分子散射总截面的实验结果, 如图 1 所示.

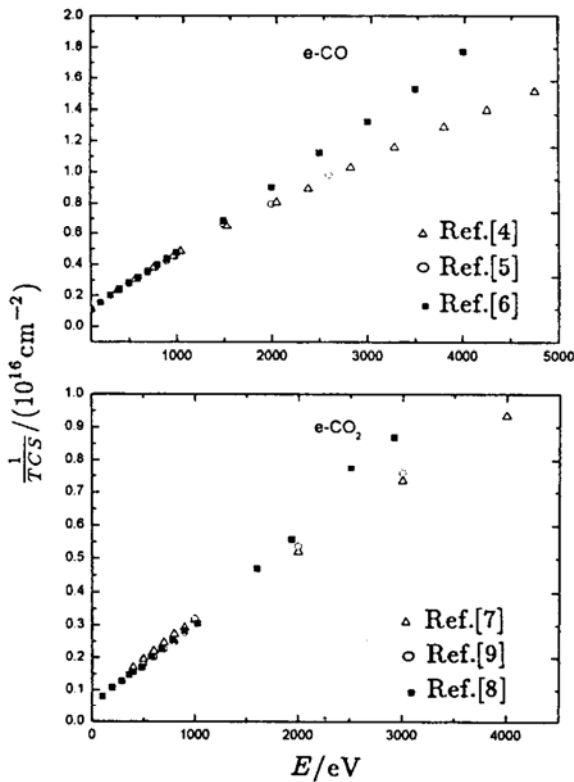


图 1 e-CO, e-CO₂ 散射总截面倒数与电子入射能量的关系

从图 1(a) 可以看出, 文献[6]中的 CO 分子散射总截面在一条直线上, 在能量小于 1 500 eV 时 3 个实验的结果全部近似全部在一条直线上, 在能量高于 1 500 eV 时文献[4, 5]的结果符合得很好, 为一条曲线, 偏离了上述直线方向. 从图 1(b) 可以发现文献[7, 9]的两组实验数据, 除个别能量点外, 也近

似分布在两条平行直线上, 而当能量小于 1 500 eV 时 3 组实验数据近似在一条直线上, 当能量高于 1 500 eV 时, 文献[8]中的数据偏离了原直线方向. 文献[6, 8]和文献[4, 5, 7, 9]分别是采用 Ramsauer-type 和 Transimission-beam 方法进行测量的, 而后者的角分辨率、能量分辨率都比前者高, 同时后者在高能区电子的反射率很低, 测量的误差也就小, 测量的结果将更加可靠, 在中低能区两者之间的差别几乎没有. 比较图 1(a) 和(b) 可以发现, CO 和 CO₂ 分子散射总截面与能量之间的关系随着能量的高低不同而不同, 但是在能量低于 1 500 eV 时是相同的, 分子总截面的倒数与入射能量之间近似成线性关系, 直线的斜率和截距应与分子本身固有的性质(本身结构性质)有关. 如令与每个分子相关的直线的斜率为 k , 截距为 b , 则有:

$$\frac{1}{\sigma_T(E)} = kE + b, \tag{5}$$

此式与我们近来提出^[10, 11]的经验公式相似:

$$\sigma_T(E) = \frac{d\sigma_0}{d + CE\sigma_0}, \tag{6}$$

(6) 式中的参数应与我们提出的经验公式相一致, 说明了在电子被简单分子的散射过程中, 在能量低于 1 500 eV(左右) 时分子的几何大小起着重要的作用, 文献[10, 11]的结果已经证明了这种计算结果的可靠性.

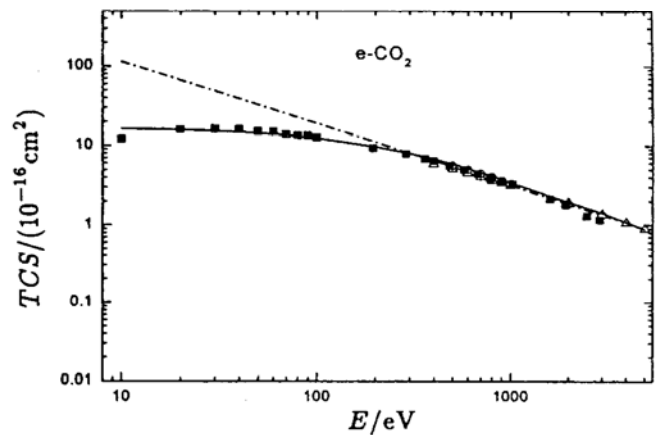


图 2 e-CO₂ 散射总截面与电子入射能的关系

利用文献[12]中的分子结构常数和公式(6), 我们计算了 10—5 000 eV 能量范围内电子被 CO₂ 散射的总截面, 如图 2 所示. 从图 2 中可以发现, 在整个能量范围内经验公式的计算结果与已有实验符

合很好, 在低能区域, 经验公式的计算结果与实验数据有一定的偏差, 小于实验数值, 所以对于不同的分子经验公式在不同的能区基本反映了电子与分

子散射过程中的主要作用, 即就是对于不同的分子在 1 500(或者低于 1 500) eV, 散射总截面与能量之间为(6)式所示.

参 考 文 献:

- [1] Jiang Yuhai, Sun Jinfeng, Wan Lingde. Additivity Rule for Calculation of Electron Scattering from Polyatomic Molecules[J]. Phys Rev, 2000, **A62**: 062712- 1.
- [2] Winifred M Hou, Gianturco Franco A. Computational Methods for Electron-molecules Collisions[C]. New York and London: Plenum Presss, 1995.
- [3] Garc la G, Manero F. Correlation of the Total Cross Section for Electron Scattering by Molecules with 10-20 Electrons, and Some Molecular Parameters at Intermediate Energies[J]. Chem Phys Lett, 1997, **280**: 419.
- [4] Garc la G, Aragon G, Campós J. Total Cross Sections for Electron Scattering from CO in the Energy Range 380-5 200 eV[J]. Phys Rev, 1990, **A42**: 4 400.
- [5] Xing S L, Shi Q C, *et al.* Absolute Total cross-section Measurements for Intermediate-energy Electron Scattering on C₂H₂ and CO[J]. Phys Rev, 1995, **A51**: 414.
- [6] Karwasz G, Brusa R S, Gasparoli A, *et al.* Total Cross-section Measurements for σ -CO Scattering 80-4 000 eV[J]. Chem Phys Lett, 1993, **211**: 529.
- [7] Garc la G, Manero F. Total Cross Sections for Electron Scattering from CO₂ Molecules in the Energy Range 400-5 000 eV[J]. Phys Rev, 1996, **A53**: 250.
- [8] Szytkowski C, Zecca A, *et al.* Absolute Total cross-section for Electron-CO₂ Scattering at 0.5 to 300 eV II. I Phys. 1987. **B20**: 5 817.
- [9] 邢士林, 施启存, 徐克尊. 中能电子对 CO₂ 散射全截面的测量[J]. 原子与分子物理学报, 1997, **14**(2): 294.
- [10] Liu Yufang, Sun Jinfeng. A Semi-empirical Formula for Total Cross Sections of Electron Scattering from Diatomic Molecules[J]. Phys Lett, 1996, **A222**: 233.
- [11] Liu Yufang, Sun Jinfeng, *et al.* Total Cross Section for Electron Scattering from Molecules: NH₃ and H₂O[J]. Z Phys, 1997, **D42**: 45.
- [12] Lide D R. CRC Handbook of Chemistry and Physics[C]. CRC Boca Raton, 2001, 81sted.

Energy Dependence of the Total Cross Section of electron Scattering from CO and CO₂ at Intermediate and High Energy Range^{*}

LIU Yufang, ZHU Zuir-lue, MENG Huir-yan, SUN Jinfeng

(Department of physics, Henan Normal University, Xixiang 453002, China)

Abstract: By analyzing accurate experimental values of the total cross sections of electrons scattering by CO and CO₂ molecules, a formula has deduced, which reflects a correlation of the total cross section for electrons scattering from molecules with energy and molecular parameters, in the energy region below 1 500 eV.

Key words: total cross section; Born approximation; Born Bethe theory

* **Foundation item:** National Natural Science Foundation of China(1074019); Natural Science Foundation of Henan province(0111050800); Henan Education Commission(2000140005)