

KHẢO SÁT TIẾT DIỆN TÁN XẠ VI PHÂN CỦA O₂ BẰNG MÔ HÌNH CÁC NGUYÊN TỬ ĐỘC LẬP VÀ MÔ HÌNH ĐA TÁN XẠ

Nguyễn Thị Hiền¹

Ngày nhận bài: 13/11/2024; Ngày phản biện thông qua: 27/11/2024; Ngày duyệt đăng: 15/01/2025

TÓM TẮT

Tính toán tiết diện tán xạ vi phân của phân tử rất quan trọng trong việc xác định thông tin cấu trúc của phân tử. Trong công trình này, chúng tôi sử dụng mô hình nguyên tử độc lập và mô hình đa tán xạ để tính toán tiết diện tán xạ vi phân của phân tử O₂ khi các electron tới có năng lượng khác nhau là 100 eV, 300 eV và 1000 eV. Kết quả cho thấy, khi năng lượng electron tới đạt giá trị thấp là 100 eV, tiết diện tán xạ vi phân tính bằng mô hình đa tán xạ phù hợp với số liệu thực nghiệm hơn so với mô hình nguyên tử độc lập. Khi năng lượng electron tới tăng lên 300 eV và 1000 eV, tiết diện tán xạ vi phân tính bằng hai mô hình khá phù hợp nhau và phù hợp với số liệu thực nghiệm. Do đó, khi năng lượng electron tới đạt giá trị thấp là 100 eV, nên sử dụng mô hình đa tán xạ để thu được tiết diện tán xạ vi phân chính xác. Ở vùng năng lượng electron tới cao 300 eV và 1000 eV, nên sử dụng mô hình nguyên tử độc lập để tiết kiệm tài nguyên tính toán, bao gồm tài nguyên máy tính và thời gian tính toán.

Từ khóa: tiết diện tán xạ vi phân, với mô hình nguyên tử độc lập, mô hình đa tán xạ.

1. MỞ ĐẦU

Ngày nay, sự phát triển của khoa học kỹ thuật, đặc biệt là ngành vật lý tán xạ đã tạo điều kiện thuận lợi cho việc nghiên cứu cấu trúc của vật chất với độ phân giải không gian khác nhau (Taylor, 2006). Trong đó, quá trình tán xạ electron cho phép thu nhận thông tin của phân tử với độ chính xác cao (Yamanouchi, 2012). Về bản chất, quá trình tán xạ electron lên vật chất tạo ra hình ảnh giao thoa của các sóng tán xạ của các nguyên tử trong phân tử. Vì vậy, quá trình tán xạ electron còn được gọi là quá trình nhiễu xạ electron (Yamanouchi, 2012).

Trong đo đạc thực nghiệm, các nhà khoa học thường đặt máy đo để đếm số hạt tán xạ trên phân tử bia theo các hướng cụ thể. Mỗi hướng được xác định bởi hai góc là góc tán xạ θ và góc phương vị ϕ . Để định lượng hóa sự tán xạ của hạt trên nguyên tử, phân tử, các nhà khoa học thường sử dụng đại lượng tiết diện tán xạ vi phân (Differential Cross Section). Tiết diện tán xạ vi phân là tiết diện hiệu dụng của phân tử bia (ký hiệu là $d\sigma$) để hạt tán xạ bay vào trong góc khối nhất định $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$, nghĩa là

$$d\sigma = \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega, \quad (1.1)$$

trong đó, tiết diện tán xạ vi phân chính là $d\sigma/d\Omega$ và có thứ nguyên là (a_0^2/sr). Bên cạnh đó, tiết diện tán xạ vi phân thường được tính toán theo biên độ tán xạ theo biểu thức sau

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta, \phi)|^2, \quad (1.2)$$

với $f(\theta, \phi)$ là biên độ tán xạ của electron trên phân tử bia.

Từ dữ liệu tiết diện tán xạ vi phân đo đạc được trong quá trình tán xạ electron trên phân tử, chúng ta có thể trích xuất được cấu trúc phân tử bằng phương pháp so sánh phù hợp (fitting), nghĩa là so sánh tiết diện tán xạ vi phân mô phỏng được cho mỗi cấu trúc thử khác nhau của phân tử với số liệu thực nghiệm. Từ đó, chọn ra cấu trúc thử phù hợp nhất với số liệu thực nghiệm chính là cấu trúc cần tìm của phân tử (Lin, 2018; H. T. Nguyen & N.-L. Phan, 2020). Vì vậy, để áp dụng phương pháp so sánh phù hợp này, việc tính toán tiết diện tán xạ vi phân lý thuyết cho các cấu trúc thử của phân tử là rất cần thiết. Để tính toán tiết diện vi phân lý thuyết của phân tử, có thể sử dụng phương pháp nguyên lý ban đầu (ab initio) (Burke, 2011) hoặc phương pháp mô hình (Yamanouchi, 2012; D.-D. T. Vu, et al., 2017). Phương pháp nguyên lý ban đầu có lợi thế là thu được tiết diện tán xạ vi phân chính xác hơn trong khi việc sử dụng mô hình có ưu điểm là giảm tải nguyên tính toán, rất cần thiết khi mô phỏng hàng loạt các cấu trúc thử khác nhau của phân tử để so sánh phù hợp. Vì vậy, phương pháp mô hình thường được sử dụng hơn trong việc trích xuất gián tiếp thông tin cấu trúc phân tử. Mô hình được ưu tiên sử dụng là mô hình nguyên tử độc lập (Independent Atom Model) (Mott, 1949; Yamanouchi, 2012; Saleh, et al., 2012). Đây là mô hình tính tiết diện tán xạ vi phân đơn giản nhất vì mô hình này chỉ tính đến sự giao thoa của các sóng tán xạ của electron tán xạ một lần với các nguyên tử của phân tử. Năm 2016, Tikhonov và cộng sự đã kết hợp mô hình nguyên tử độc lập với phương pháp mô phỏng động lực học phân tử và phương pháp Monte-Carlo cổ điển để tính cường độ dao động của các

¹Khoa Khoa học Tự nhiên & Công nghệ, Trường Đại học Tây Nguyên;

Tác giả liên hệ: Nguyễn Thị Hiền; ĐT: 0977932991; Email: nhtien@ttn.edu.vn.

phân tử nhiều nguyên tử, và thu được kết quả phù hợp với các số liệu thực nghiệm về tác động của các hiệu ứng lượng tử hạt nhân khi mô tả dao động của phân tử (Tikhonov, et al., 2016). Năm 2020, X. Li và cộng sự đã chứng tỏ mô hình nguyên tử độc lập kết hợp với phương pháp sóng riêng phần và với lý thuyết ma trận R đều không phù hợp đối với electron năng lượng thấp tác động lên phân tử liên kết mạnh khi tính toán tiết diện tán xạ vi phân của polyetylen và ethylene (Li, 2020).

Trong trường hợp xét đến sự tán xạ nhiều lần của electron trên các nguyên tử trong phân tử rồi đi đến máy thu, mô hình đa tán xạ (Multiple Scattering Theory) thường được sử dụng (Hayashi, 1976; D.-D. T. Vu, 2017). Trong mô hình đa tán xạ, các tác giả đã mở rộng mô hình nguyên tử độc lập và đưa thêm vào các thành phần tán xạ bậc hai không kết hợp giữa các nguyên tử khi electron tán xạ trên nguyên tử trong phân tử (Hayashi, 1976). Sau đó, D.-D. T. Vu và cộng sự đã tiếp tục phát triển mô hình đa tán xạ bằng cách tính đến sự giao thoa của toàn bộ thành phần sóng tán xạ bậc hai không kết hợp và kết hợp, và thu được khoảng cách liên nguyên tử của các phân tử N_2 , O_2 , CO_2 từ dữ liệu tiết diện tán xạ vi phân của tán xạ electron năng lượng thấp từ 20 eV đến 50 eV (D.-D. T. Vu et al., 2017). Kết quả cho thấy sai số khi trích xuất bằng mô hình đa tán xạ thấp hơn nhiều so với mô hình nguyên tử độc lập. Công trình (H. T. Nguyen & N.-L. Phan, 2020) đã thể hiện kết quả tiết diện tán xạ vi phân của phân tử O_2 khi năng lượng electron tán xạ lần lượt là 50 eV, 200 eV và 500 eV khi sử dụng mô hình nguyên tử độc lập và mô hình đa tán xạ. Đồng thời, trong công trình này, các tác giả cũng đã phát triển mô hình đa tán xạ có tính đến dao động phân tử (H. T. Nguyen & N.-L. Phan, 2020). Việc tính toán tiết diện tán xạ vi phân sao cho chính xác, tiết kiệm tài nguyên máy tính và thời gian tính toán là mong muốn của các nhà khoa học. Đánh giá độ chính xác của mô hình nguyên tử độc lập và mô hình đa tán xạ trong tính toán tiết diện vi phân của phân tử so với số liệu thực nghiệm ở các mức năng lượng khác nhau là cần thiết.

Mục tiêu của bài báo này là tính toán tiết diện tán xạ vi phân của phân tử O_2 khi các electron tới có năng lượng khác nhau là 100 eV, 300 eV và 1000 eV. Từ đó, chúng tôi đánh giá nên sử dụng mô hình thích hợp với mức năng lượng tương ứng để đảm bảo tiết diện tán xạ vi phân tính toán được chính xác và tiết kiệm tài nguyên tính toán.

2. VẬT LIỆU VÀ PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

2.1. Vật liệu nghiên cứu

- Trong nghiên cứu này, chúng tôi sử dụng phân tử hai nguyên tử đơn giản là O_2 có khoảng cách liên nguyên tử ở vị trí cân bằng là 1.23 Å, thu được

từ phần mềm Gaussian (Frisch et al., 2009) và phù hợp với số liệu thực nghiệm (Gilmore, 1964).

- Bên cạnh đó, chúng tôi sử dụng ngôn ngữ lập trình Fortran (William et al., 1992) để mô phỏng mô hình nguyên tử độc lập và mô hình đa tán xạ.

- Số liệu tiết diện tán xạ vi phân của phân tử được thu thập và xử lý bằng phần mềm Origin 8.5.

2.2. Phương pháp nghiên cứu

Chúng tôi sử dụng phương pháp nghiên cứu lý thuyết và phương pháp mô phỏng. Cụ thể, chúng tôi sử dụng mô hình nguyên tử độc lập (Mott, 1949; Yamanouchi 2012) và mô hình đa tán xạ (Hayashi, 1976; D.-D. T. Vu, 2017) để tính toán tiết diện vi phân của phân tử khi các electron tán xạ có năng lượng tới khác nhau. Các mô hình này được lập trình bằng Ngôn ngữ Fortran (William et al., 1992). Đồng thời chúng tôi kết hợp so sánh với các số liệu thực nghiệm. Ngoài ra, chúng tôi tính toán biên độ tán xạ của electron trên các nguyên tử bằng phương pháp khai triển sóng riêng phần (Yamanouchi, 2012), trong đó độ dịch pha được lấy từ Cơ sở dữ liệu quốc gia (National Institute of Standards and Technology) (Powell, 2016).

Trong phần này, chúng tôi trình bày tóm tắt về ý tưởng và phương pháp của mô hình nguyên tử độc lập và mô hình đa tán xạ.

2.2.1. Mô hình nguyên tử độc lập

Trong mô hình nguyên tử độc lập, biên độ tán xạ của electron trên phân tử được xác định theo biểu thức

$$F = \sum_k f_k e^{-isR_k}, \quad (2.1)$$

với f_k là biên độ tán xạ của nguyên tử k có tọa độ R_k , và $s = p - p'$ là vector truyền động lượng. Tiết diện tán xạ vi phân của phân tử được định phương ngẫu nhiên trong không gian được xác định theo biểu thức sau

$$I_{NTDL} = \langle F^2 \rangle = I_a + I_{mol}, \quad (2.2)$$

với $I_a = \sum_k f_k^2$ là tổng tiết diện tán xạ vi phân của các sóng tán xạ bậc một của electron lên các nguyên tử trong phân tử, và số hạng

$$I_{mol} = \sum_{j \neq k} f_j f_k^* \frac{\sin(sR_{jk})}{sR_{jk}}, \quad (2.3)$$

là giao thoa của các sóng tán xạ của electron lên từng cặp nguyên tử trong phân tử. Trong đó, $R_{jk} = R_j - R_k$ thể hiện khoảng cách giữa nguyên tử j và k .

2.2.2. Mô hình đa tán xạ

Mô hình đa tán xạ được Hayashi và Kuchitsu (1976) đưa ra lần đầu tiên bằng cách mở rộng từ mô hình nguyên tử độc lập, và sau đó tiếp tục được cải tiến (D.-D. T. Vu, et al., 2017). Tiết diện tán xạ vi phân của

phân tử theo mô hình này được xác định theo biểu thức

$$I_{DTX} = I_a + I_{ss} + I_{sd1} + I_{sd2} + I_{dd} + I_{ddl} \quad (2.4)$$

trong đó, I_a là tổng không kết hợp của những sóng tán xạ bậc nhất khi các electron khác nhau tán xạ một lần trên cùng nguyên tử, đây cũng là thành phần I_a trong mô hình nguyên tử độc lập, có dạng

$$I_a = \sum_k |f_k|^2 \quad (2.5)$$

Thành phần I_{ss} thể hiện sự giao thoa của các sóng tán xạ bậc nhất trên các nguyên tử khác nhau, và có dạng

$$I_{ss} = \sum_{A \neq B} \langle f_A f_B^* e^{is.R_{AB}} \rangle \quad (2.6)$$

I_{ss} cũng chính là thành phần I_{mol} trong mô hình nguyên tử độc lập. Thành phần I_{sd1} mô tả giao thoa giữa sóng tán xạ một lần và sóng tán xạ hai lần trên cùng một nguyên tử

$$I_{sd1} = \sum_{M \neq N} \langle f_{MN} (f_M^* e^{is.R_M} + f_M^* e^{is.R_N}) \rangle + c.c \quad (2.7)$$

với f_{MN} là biên độ tán xạ bậc hai khi ban đầu electron tán xạ trên nguyên tử M, sau đó electron này tiếp tục tán xạ trên nguyên tử N và thoát khỏi phân tử. Thành phần I_{sd2} là giao thoa giữa sóng tán xạ bậc nhất và sóng tán xạ bậc hai, trong đó hai sóng này tán xạ trên hai nguyên tử khác nhau.

$$I_{sd2} = \sum_{M \neq N \neq P} \langle f_{MN} f_P^* e^{is.R_P} \rangle + c.c \quad (2.8)$$

Thành phần I_{dd} thể hiện tổng không kết hợp của các sóng tán xạ bậc hai, nghĩa là tổng của hai sóng đều đi đến tán xạ lên nguyên tử M, sau đó tiếp tục tán xạ lên nguyên tử N trước khi rời khỏi phân tử.

$$I_{dd} = \sum_{M \neq N} \langle |f_{MN}|^2 \rangle \quad (2.9)$$

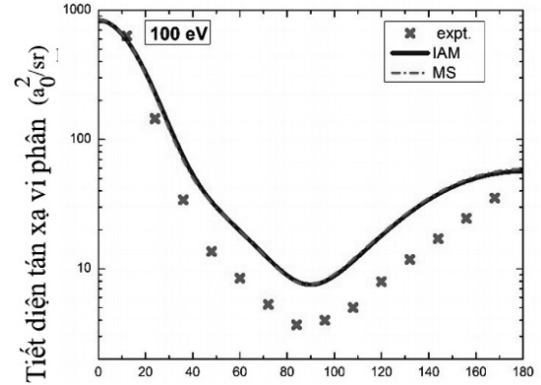
Như vậy, mô hình đa tán xạ đã mở rộng mô hình nguyên tử độc lập bằng cách xét đến các số hạng tán xạ bậc hai (Hayashi và Kuchitsu, 1976; D.-D. T. Vu, et al., 2017).

3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

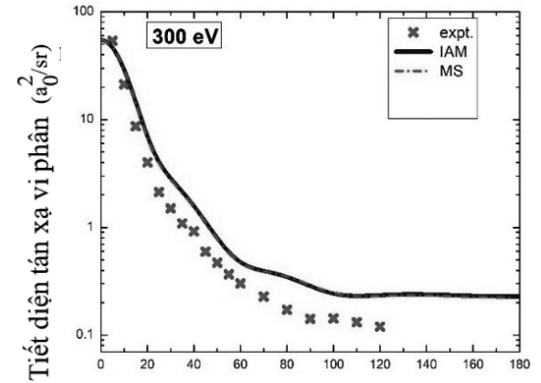
3.1. Tiết diện tán xạ vi phân theo mô hình nguyên tử độc lập và mô hình đa tán xạ

Trong phần này, chúng tôi tính toán tiết diện tán xạ vi phân của phân tử O_2 bằng mô hình nguyên tử độc lập và mô hình đa tán xạ khi phân tử này bị tán xạ bởi các electron đến có các mức năng lượng khác nhau. Đồng thời, chúng tôi tiến hành so sánh kết quả thu được với số liệu thực nghiệm (Shyn & Sharp, 1982; Iga et al., 1987; García, G., Blanco, F., Willart, A., 2001). Hình 3.1 thể hiện kết quả mô phỏng và DCS thực nghiệm đối với các electron tán xạ có năng lượng lần lượt là 100 eV, 300 eV và 1000 eV. Kết quả cho thấy, tiết diện tán xạ vi phân tính toán bằng hai mô hình nguyên tử độc lập và mô hình đa tán xạ khá phù hợp với số liệu thực nghiệm (Shyn & Sharp, 1982; Iga et al., 1987; García, G., Blanco, F., Willart, A., 2001), cả về độ lớn

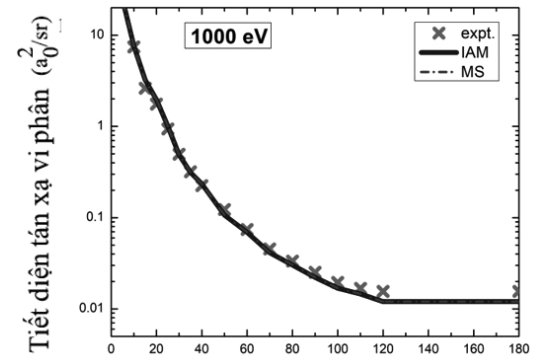
và dáng điệu biến thiên. Cụ thể, khi năng lượng càng tăng, tiết diện tán xạ vi phân được tính toán từ các mô hình càng phù hợp với số liệu thực nghiệm. Ở đây, để thể hiện được đầy đủ các giá trị của tiết diện tán xạ vi phân của phân tử ứng với các năng lượng electron tán xạ khác nhau, chúng tôi sử dụng thang đo tiết diện tán xạ vi phân thay đổi tương ứng. Tiếp theo, chúng tôi tiến hành đánh giá định lượng mức độ phù hợp của mỗi mô hình mô phỏng so với số liệu thực nghiệm.



(a) Góc tán xạ (độ)



(b) Góc tán xạ (độ)



(c) Góc tán xạ (độ)

Hình 3.1. Tiết diện tán xạ vi phân của phân tử O_2 được tính toán bằng mô hình nguyên tử độc lập và mô hình đa tán xạ, được so sánh với số liệu thực nghiệm (Shyn & Sharp, 1982; Iga et al., 1987; García, G., Blanco, F., Willart, A., 2001) khi năng lượng của các electron đến lần lượt là 100 eV, 300 eV và 1000 eV.

3.2. So sánh định lượng sự phù hợp của tiết diện tán xạ vi phân theo mô hình nguyên tử độc lập và mô hình đa tán xạ so với số liệu thực nghiệm

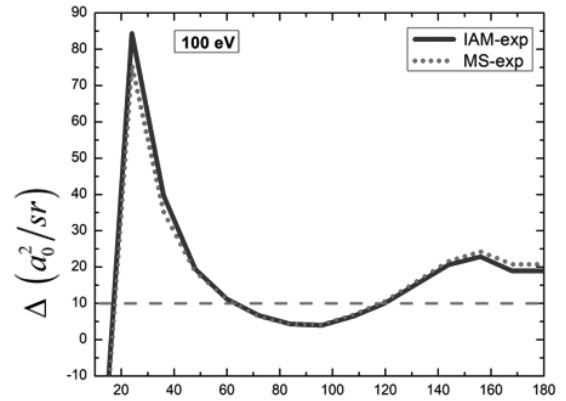
Để đánh giá định lượng mức độ phù hợp giữa tiết diện tán xạ vi phân được tính toán theo các mô hình (nguyên tử độc lập và đa tán xạ) so với số liệu thực nghiệm, chúng tôi xét độ chênh lệch giữa tiết diện tán xạ vi phân của từng mô hình và số liệu thực nghiệm theo biểu thức

$$\Delta_{IAM} = DCS_{IAM} - DCS_{exp} \quad (3.1)$$

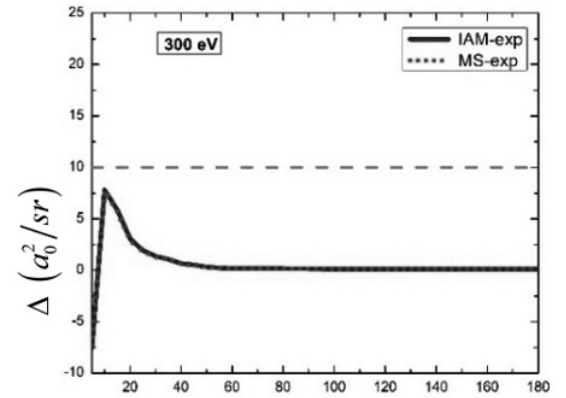
$$\Delta_{MS} = DCS_{MS} - DCS_{exp} \quad (3.2)$$

Các kết quả tính toán được biểu diễn ở Hình 3.2 (a,b,c) lần lượt đối với các electron tán xạ có năng lượng lần lượt là 100 eV, 300 eV và 1000 eV. Hình vẽ cho thấy, khi năng lượng của electron tới tăng, sự chênh lệch giữa tiết diện tán xạ vi phân tính toán bằng hai mô hình so với số liệu thực nghiệm càng giảm, có nghĩa là tiết diện tán xạ vi phân tính bởi các mô hình càng phù hợp với thực nghiệm khi năng lượng electron tới tăng. Cụ thể, sự sai khác cực đại giữa mô hình IAM và số liệu thực nghiệm lần lượt là $84.39(a_0^2/sr)$, khi năng lượng electron tới 100 eV (Hình 3.2 (a)), khoảng $7.82(a_0^2/sr)$ khi năng lượng electron tới 300 eV (Hình 3.2 (b)), và $0.60(a_0^2/sr)$ khi năng lượng electron tới 1000 eV (Hình 3.2 (c)). Bên cạnh đó, sự sai khác cực đại giữa mô hình MS và số liệu thực nghiệm lần lượt là $75.62(a_0^2/sr)$, khi năng lượng electron tới 100 eV (Hình 3.2 (a)), khoảng $7.76(a_0^2/sr)$ khi năng lượng electron tới 300 eV (Hình 3.2 (b)), và $0.57(a_0^2/sr)$ khi năng lượng electron tới 1000 eV (Hình 3.2 (c)).

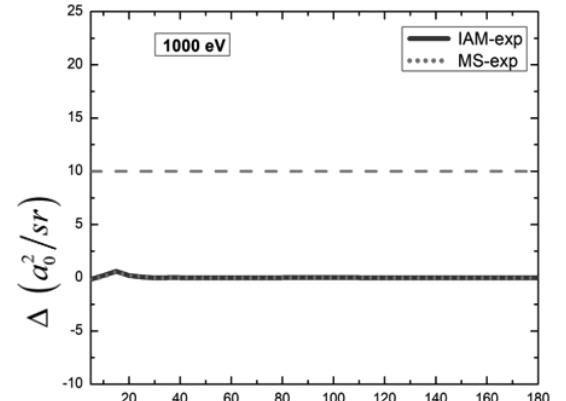
Đáng chú ý, Hình 3.2 (a) cho thấy ở năng lượng electron tới thấp (100 eV), mô hình đa tán xạ cho kết quả phù hợp với thực nghiệm hơn mô hình nguyên tử độc lập. Tại góc tán xạ 24° , sự khác biệt so với thực nghiệm của mô hình đa tán xạ là $75.62(a_0^2/sr)$, và của mô hình nguyên tử độc lập là $84.39(a_0^2/sr)$. Điều này có thể được giải thích là do khi năng lượng electron tán xạ thấp, các số hạng tán xạ bậc cao đóng vai trò quan trọng trong tiết diện tán xạ vi phân của phân tử. Vì vậy, mô hình đa tán xạ cho kết quả tính toán tiết diện tán xạ vi phân tốt hơn mô hình nguyên tử độc lập khi năng lượng electron tới thấp (100 eV). Khi năng lượng electron tới tăng lên 300 eV (Hình 3.2 (b)) và 1000 eV (Hình 3.2 (c)), mô hình nguyên tử độc lập và mô hình đa tán xạ đều cho kết quả phù hợp tốt với số liệu thực nghiệm.



(a) Góc tán xạ (độ)



(b) Góc tán xạ (độ)

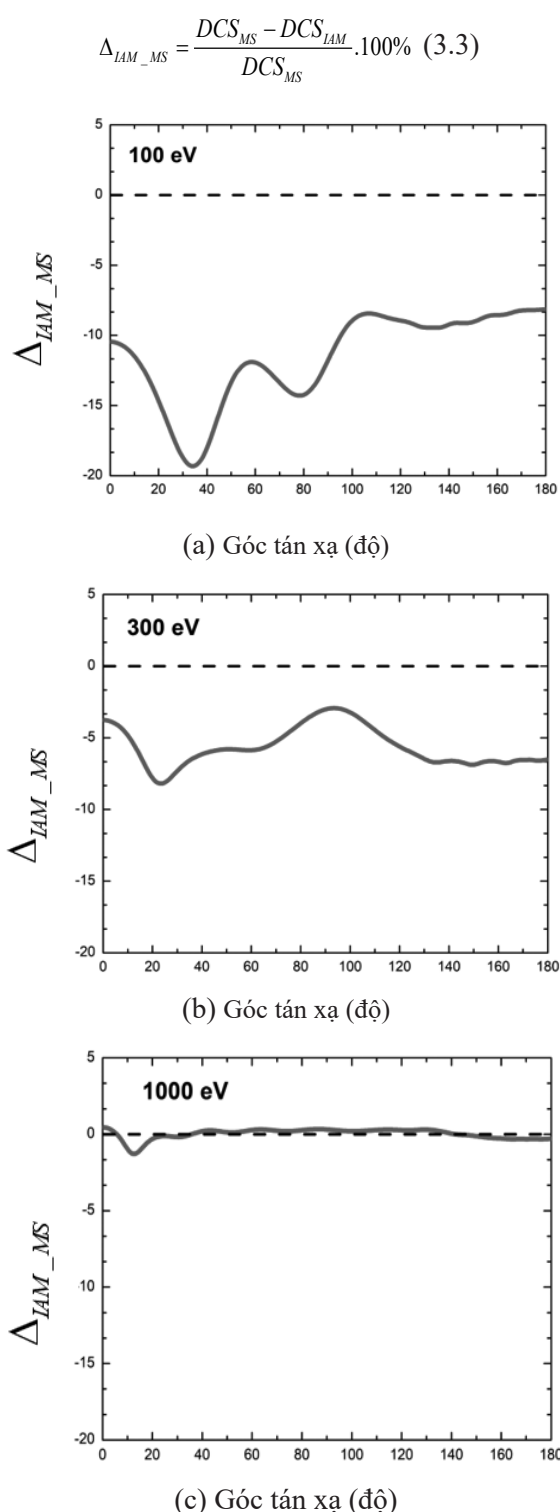


(c) Góc tán xạ (độ)

Hình 3.2. Độ chênh lệch giữa tiết diện tán xạ vi phân của mô hình nguyên tử độc lập và mô hình đa tán xạ so với số liệu thực nghiệm

3.3. Khảo sát sự khác biệt giữa mô hình nguyên tử độc lập và mô hình đa tán xạ

Trong phần này, chúng tôi đánh giá định lượng sự sai khác giữa tiết diện tán xạ vi phân được tính toán theo mô hình nguyên tử độc lập và mô hình đa tán xạ ở các mức năng lượng của electron tới khác nhau qua biểu thức và được thể hiện ở Hình 3.3.



Hình 3.3. Sự khác biệt giữa tiết diện tán xạ vi phân được tính bằng mô hình nguyên tử độc lập và mô hình đa tán xạ của phân tử O_2 ở các mức năng lượng của electron tới khác nhau (được thể hiện bởi đường cong nét liền màu xanh lá cây). Bên cạnh đó, đường nét đứt màu đen ứng với giá trị $\Delta_{IAM_MS} = 0$ biểu thị tiết diện tán xạ vi phân tính bởi hai mô hình tương đồng với nhau.

Kết quả cho thấy khi năng lượng electron tới

thấp (100 eV), sự chênh lệch của tiết diện tán xạ vi phân tính bằng hai mô hình khá rõ rệt, sai số cực đại giữa hai mô hình là 19.32% tại góc tán xạ 34° . Điều này có nghĩa, khi năng lượng electron tới càng thấp, nên sử dụng mô hình đa tán xạ để thu được kết quả chính xác. Khi năng lượng electron tới càng tăng (300 eV và 1000 eV), tiết diện tán xạ vi phân tính bằng mô hình đa tán xạ càng có giá trị gần với tiết diện tán xạ vi phân tính bằng mô hình nguyên tử độc lập. Sự sai khác cực đại giữa hai mô hình rất nhỏ, chỉ là 8% (đối với 300 eV) và 1.29% (đối với 1000 eV). Do đó, ở vùng năng lượng electron tới cao, có thể sử dụng mô hình nguyên tử độc lập để giảm tải nguyên tính toán mà vẫn thu được tiết diện tán xạ vi phân chính xác.

4. KẾT LUẬN

Trong bài báo này, bằng phương pháp nghiên cứu lý thuyết và mô phỏng với mô hình nguyên tử độc lập và mô hình đa tán xạ, chúng tôi đã tính toán tiết diện tán xạ vi phân của phân tử O_2 khi các electron tới có năng lượng thay đổi. Kết quả cho thấy, trong trường hợp năng lượng electron tới thấp (100 eV), tiết diện tán xạ vi phân tính bằng mô hình đa tán xạ phù hợp với số liệu thực nghiệm hơn so với mô hình nguyên tử độc lập, đồng thời, sự chênh lệch của tiết diện tán xạ vi phân tính bằng hai mô hình khá rõ rệt. Khi năng lượng electron tới tăng lên (300 eV và 1000 eV), tiết diện tán xạ vi phân tính bằng hai mô hình khá phù hợp nhau, đồng thời cũng phù hợp với số liệu thực nghiệm. Như vậy, chúng ta nên sử dụng mô hình đa tán xạ để thu được tiết diện tán xạ vi phân chính xác khi các electron tới có năng lượng thấp (100 eV), và nên sử dụng mô hình nguyên tử độc lập để tiết kiệm tài nguyên tính toán mà vẫn đảm bảo được độ chính xác trong trường hợp các electron tới có năng lượng cao (300 eV và 1000 eV). Các kết quả tính toán của chúng tôi được thực hiện trên phân tử O_2 , tuy nhiên có thể ứng dụng cho các phân tử nhiều nguyên tử phức tạp khác.

Lời cảm ơn: Nghiên cứu này được tài trợ bởi đề tài Khoa học và Công nghệ cấp Cơ sở năm 2024 của Trường Đại học Tây Nguyên, mã số T2024-10CB.

INVESTIGATION OF DIFFERENTIAL SCATTERING CROSS SECTION OF O₂ USING INDEPENDENT ATOM MODEL AND MULTIPLE SCATTERING MODEL

Nguyen Thi Hien¹

Received Date: 13/11/2024; Revised Date: 27/11/2024; Accepted for Publication: 15/01/2025

ABSTRACT

Calculating the differential scattering cross-section of a molecule is very important in determining its structural information. In this study, we use the independent atom model and the multiple scattering theory to calculate the differential cross-section of the O₂ molecule when the incident electrons have different energies of 100 eV, 300 eV, and 1000 eV. The results show that when the incident electron energy reaches a low value of 100 eV, the differential scattering cross-section calculated by the multiple scattering models is more consistent with the experimental data than the independent atom model. When the incident electron energy increases by 300 eV and 1000 eV, the differential scattering cross-section calculated by the two models is consistent with each other and the experimental data. Thus, the multiple scattering theory should be used in the low incident electron energy, 100 eV, to obtain an accurate differential scattering cross-section. In the high incident electron energy region by 300 eV and 1000 eV, it is advisable to use an independent atom model to save computational resources, including computer resources and computational time.

Keywords: differential cross-section, independent atom model, multiple scattering theory.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- Taylor, J. R. (2006). *Scattering Theory: The Quantum Theory of Nonrelativistic Collisions*. Courier Corporation, New York.
- Yamanouchi, K. (2012). *Quantum Mechanics of Molecular Structures*. Springer, New York.
- Lin, C. D., Le, A.-T., Jin, C., Wei, H. (2018). *Elements of the Quantitative Rescattering Theory*. Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics 51 (10), 104001.
- H. T. Nguyen, N.-L. Phan (2020). *Multiple Scattering Model Considering the Vibration Effect*. Journal of Physics: Conference Series 1506 (1) 012007.
- Powell, C. J., Jablonski, A., Salvat, F., Lee, A. Y. (2016). *Nist Electron Elastic- Scattering Cross-Section Database*. Version 4.0, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg MD.
- Frisch, M. J., Trucks, G. W., Schlegel, H. B., Scuseria, G. E., Robb, M. A., et al. (2009). *Gaussian 09 Revision E.01*, Gaussian Inc. Wallingford CT.
- Mott, N. F., Massey, H. S. W. (1949). *The Theory of Atomic Collisions*. Oxford, England.
- Saleh, G., Gatti, C., Presti, L. L. (2012). *Non-covalent interaction via the reduced density gradient: Independent atom model vs experimental multipolar electron densities*. Computational and Theoretical Chemistry 998, 148.
- Tikhonov, D. S., Sharapa, D. I., Schwabedissen, J., Rybkin, V. V. (2016). *Application of Classical Simulations for the Computation of Vibrational Properties of Free Molecules*. Physical Chemistry Chemical Physics 18, 28325.
- Li, X., Zhu, J., Zuo, Y., Li, Y. (2020). *Calculation of Electron Scattering Cross-Section using Different Theoretical Methods*. EPJ Web of Conferences 239, 08005.
- Hayashi, S., Kuchitsu, K. (1976). *Elastic Scattering of Electrons by Molecules at Intermediate Energies. I. General Theory*. Journal of the Physical Society of Japan 41 (5), 1724.
- D.-D. T. Vu, N.-L. T. Phan, V.-H. Hoang, V.-H. Le (2017) *Dynamic Molecular Structure Retrieval from Low-energy Laser-induced Electron Diffraction Spectra*. Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics 50 (24), 245101.
- William, H. P., Saul, A. T., William, T. V., Brian, P. F. (1992). *Numerical Recipes in Fortran: The Art of*

¹Faculty of Natural Science and Technology, Tay Nguyen University;

Corresponding author: Nguyen Thi Hien; Phone: 0977932991; Email: nthien@ttn.edu.vn.

- Scientific Computing*. Cambridge University Press 2 edition.
- Shyn, T. W., Sharp, W. E. (1982). *Angular Distribution of Electrons Elastically Scattered from O_2 : 2.0-200-eV Impact Energy*. Physical Review A 26, 1369.
- Iga, I., Mu-Tao, L., Nogueira, J. C., Barbieri, R. S. (1987). *Elastic Differential Cross Section Measurements for Electron Scattering from Ar and O_2 in the Intermediate-energy Range*. Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics 20, 1095.
- García, G., Blanco, F., Williard, A. (2001). *Cross-sections for electron scattering by O_2 at intermediate and high energies, 0.1-10keV*. Chemical Physics Letters 335, 227.
- Burke, P. G. (2011). *R-matrix Theory of Atomic Collisions: Application to Atomic, Molecular and Optical Processes*, Springer Science & Business Media, Germany.