

METODE KOREKSI BORN UNTUK HAMBURAN ELASTIK ELEKTRON OLEH GAS He DAN GAS Ar PADA 100 eV - 500 eV

Setyo Purwanto, Budi Santoso
Pusat Pengkajian Teknologi Nuklir - Badan Tenaga Atom Nasional

ABSTRAK

METODE KOREKSI BORN UNTUK HAMBURAN ELASTIK ELEKTRON OLEH GAS He DAN GAS Ar PADA 100 eV - 500 eV. Metode pendekatan Born pertama telah diketahui menghasilkan banyak kesalahan dalam perhitungan amplitudo hamburan pada daerah energi rendah. Oleh karena itu dicoba mengembangkan suatu metode koreksi terhadap deret Born sampai Komponen Utama Born Dua melalui bentuk gelombang parsialnya. Berbeda dengan La Bahn [6], pendekatan koreksi Born yang dilakukan adalah pada potensial Superposisi-Yukawa. Dalam hal ini parameter fungsi tabir dari Salvat [7] dimanfaatkan untuk mempelajari kelakuan model potensial Coulomb tertabir secara teoritis yang kemudian membandingkannya dengan hasil percobaan. Uji kasus dilakukan untuk hamburan elastik elektron oleh atom-atom gas helium (He) dan argon (Ar) pada daerah energi 100-500 eV. Hasilnya memperlihatkan bahwa Born Pertama lebih inferior terhadap CBA (Corrected Born Approximation) yang hampir tepat dengan metode numerik Runge Kutta. Kecuali pada hamburan sudut kecil dan energi tinggi, model potensial Superposisi-Yukawa pada contoh ini dapat menjelaskan pengamatan percobaan dengan baik.

ABSTRACT

The First Born Approximation is known to give inaccurate result in calculating the scattering amplitude at low energy regions. It is therefore necessary to develop a method of correction to the Born Leading term in terms of its partial wave components. Different to La Bahn [6], we try to use the corrected Born for calculating the scattering amplitudes of scattering by a superposition of Yukawa potentials, where the screening parameters are taken from those given by Salvat [7]. This allows one to study the model of screened Coulomb potentials as compared to the experimental observation. A test case has been made for electron scattering by Helium and Argon atom at the energy range of 100-500 eV. The result show that the Born Approximation are inferior to CBA which are almost as exact as the Runge-Kutta numerical method. Except at low angle and high energy scattering the Yukawa-Superposition model in this example can well explain the experimental observation.

PENDAHULUAN

Kelemahan dari metode pendekatan Born pertama adalah kegagalannya pada daerah energi rendah. Oleh karena itu dicoba suatu metode koreksi pada deret Born sampai Komponen Utama Born Dua, melalui bentuk gelombang parsialnya. Hal ini dilakukan untuk menghitung amplitudo, tampang lintang diferensial dan tampang lintang total dari proses hamburan elastik elektron oleh gas He dan Ar pada daerah energi 100-500 eV.

Berbeda dengan La Bahn [6], metode koreksi Born yang dilakukan lebih sederhana, yaitu pada potensial hamburan Yukawa-Superposisi yang memanfaatkan parameter fungsi tabir dari Salvat [7].

TEORI DERET BORN

Persamaan integral fungsi gelombang $\psi(r)$ yang menjelaskan peristiwa hamburan adalah:

$$\psi(r) = \exp(ik_i r) + \int G_o(r, r') U(r, r') \psi_n(r') dr' \quad (1)$$

$$\text{dengan : } G_o(r, r') = \frac{-\exp(ik_i |r - r'|)}{|r - r'|} \quad (2)$$

Deret Born untuk amplitudo hamburan:

$$\psi(r) = \psi_0(r) + \lambda \psi_1(r) + \dots + \lambda^n \psi_n(r) + \dots \quad (3)$$

Sesudah iterasi ke-n diperoleh:

$$\psi^{(n)}(r) = \sum_{i=0}^n \lambda^i \psi_i(r) \quad (4)$$

Berkaitan dengan persamaan (3), deret Born untuk amplitudo hamburan $f(\theta)$, adalah:

$$f(\theta) = \lambda f_1 + \lambda^2 f_2 + \dots \quad (5)$$

$$f(\theta) = \sum_{i=1}^n \lambda^i f_i \quad (6)$$

Penulisan amplitudo hamburan dalam bentuk gelombang Parsial, adalah:

$$f(\theta) = (1/2 ik) \sum_l (2l+1) P_l(\cos\theta) [\exp(2i\delta_l) - 1] P_l(\cos\theta) \quad (7)$$

Sedangkan geseran fasa:

$$\delta = \lambda\delta_{l1} + \lambda\delta_{l2} + \dots \quad (8)$$

Jika kita menggantikan persamaan (8) ke dalam persamaan (7) dan diekspansi dalam bentuk persamaan (5), kemudian dipecah, maka akan diperoleh:

$$f_1 = (1/k_0) \sum_l (2l+1) P_l(\cos\theta) \delta_{l1} \quad (9)$$

$$f_2 = (1/k_0) \sum_l (2l+1) P_l(\cos\theta) [\delta_{l1} + i\delta_{l1}^2] \quad (10)$$

Sehingga dapat diperoleh δ_{l1} dalam bentuk f_1 :

$$\delta_{l1} = (1/2 k_0) \int_{-1}^{+1} f_1(\theta) P_l(\cos\theta) d(\cos\theta) \quad (11)$$

$$\delta_{l1} = (1/2 k_0) \int_{-1}^{+1} \text{Re}[f_2(\theta)] P_l(\cos\theta) d(\cos\theta) \quad (12)$$

Untuk menghindari penghitungan yang rumit dari $f_2(\theta)$ secara analitik, deret Born dipotong hanya sampai Komponen Utama Born Dua dan yang dihitung hanya δ_{l1} . Kemudian dengan mengambil:

$$U(r) = z \sum_{i=1}^3 A_i e^{-\alpha_i r/r} \quad (13)$$

dengan A_i , α adalah parameter fungsi tabir dari Salvat. Kita dapat memperoleh amplitudo Born I analitik:

$$f_1 = 2Z \sum \frac{A_i}{(\alpha_i^2 + q^2)} \quad (14)$$

dengan: $q = 2k \sin(\theta/2)$, dan Z = nomor atom inti target. Sehingga dapat dihitung δ_{l1} (geser fasa Born Pertama) secara analitik numerik (kode delta Born).

Bentuk lengkap perumusan Deret Born Dua:

$$f^{(2)} = (1/k_0) \sum_l (2l+1) P_l(\cos\theta) (\lambda\delta_{l1} + \lambda^2\delta_{l2} + i\lambda^2\delta_{l1}^2) \quad (15)$$

dalam hal ini δ_{l2} diabaikan karena dianggap cukup kecil (secara teori δ_{l1} mendekati δ_{l1} dalam

percobaan Gibson dan Rees [3]) dan bentuk pendekatan Born Dua Komponen Utama dapat dituliskan sebagai berikut:

$$f_{LT}^{(2)} = (1/k_0) \sum_l (2l+1) P_l(\cos\theta) (\lambda\delta_{l1} + i\lambda^2\delta_{l1}^2) \quad (16)$$

Kemudian bentuk ini dapat dikoreksi dengan bentuk yang konsisten sampai harga bilangan momentum sudut l memadai (diambil $l = 6$). Dalam hal ini geser fasa eksak δ_l^e dihitung secara numerik dari persamaan radial [8], sehingga bentuk koreksi terhadap Pendekatan Born Dua Komponen Utama adalah:

$$f_{CLT}^{(2)} = f_{LT}^{(2)} + \sum_{l=0}^N h_l(\delta_l^e) \quad (17)$$

dengan:

$$h_l(\delta_l^e) = 1/k_0 (2l+1) P_l(\cos\theta)$$

$$[1/2i [\exp(2i\delta_l^e) - 1] - (\lambda\delta_{l1} + i\lambda^2\delta_{l1}^2)] \quad (18)$$

Pemantauan konvergensi dari $f_{CLT}^{(2)}$ terhadap harga berjalan dapat dilakukan. Kemudian untuk praktisnya δ_l^e eksak dapat diganti dengan δ_{l1} untuk $l > 3$, sehingga persamaan (17) dapat diubah menjadi:

$$f_{CLT}^{(2)} = f_{LT}^{(2)} + \sum_{l=0}^M h_l(\delta_l^e) + \sum_{l=M+1}^N h_l(\delta_{l1}) \quad (19)$$

dengan $M = 3$ dan $N = 6$

$$\text{Kemudian diharapkan: } \lim_{(2)} f_{CLT} = f_{eksak} \quad (20)$$

HASIL PERHITUNGAN DAN DISKUSI

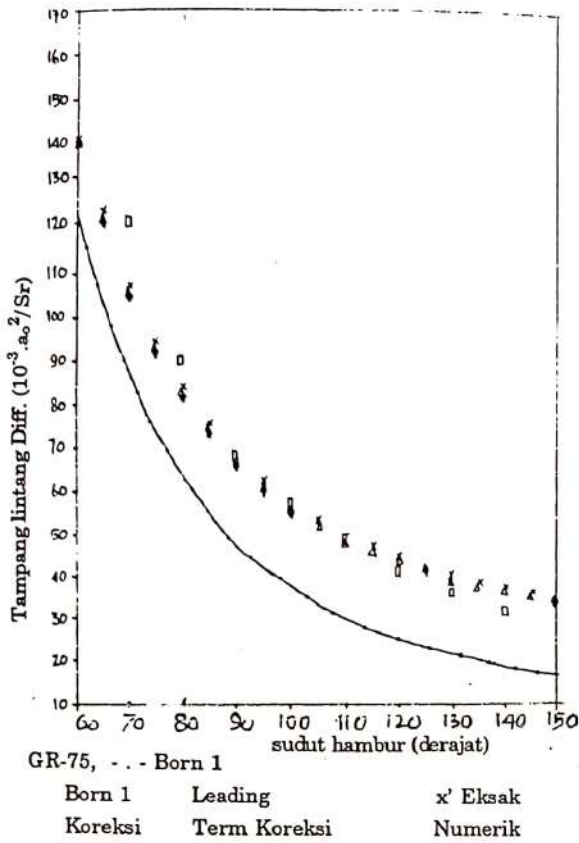
Hamburan Elastik Elektron Oleh Gas Helium

Hasil perhitungan metode pendekatan Born Dua Komponen Utama Koreksi untuk daerah energi 100-200 eV sangat cocok dengan data dari percobaan Gupta dan Rees [4] dan Kurepa-Vuskovic [5], lihat gambar 1 dan 2.

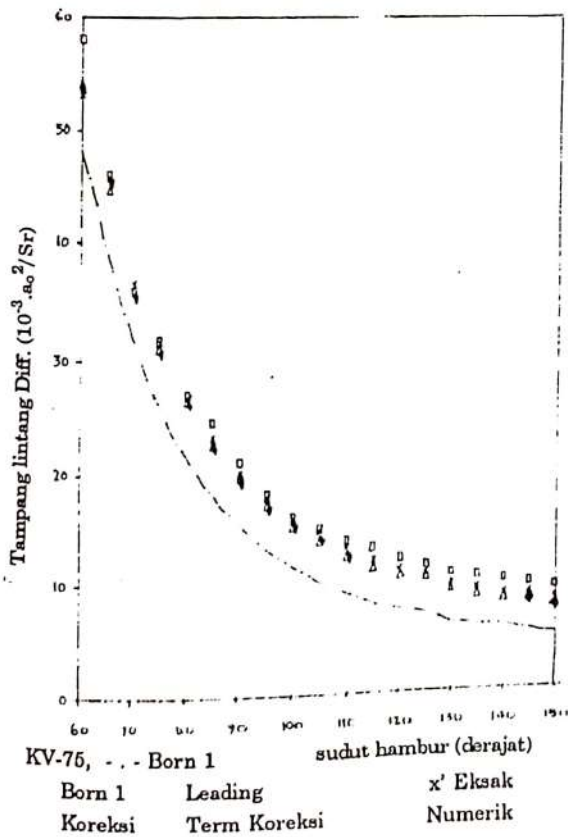
Pola grafik sudut hambur rendah yang muncul adalah akibat faktor efek pertukaran, dengan akurasi lebih baik dibanding hasil gelombang parsial (Ex). Sedangkan untuk sudut hambur kecil $< 15^\circ$, gejala in-elastik cukup berarti dan berakibat berkurangnya interaksi gelombang (gambar 3).

Efek ini berkurang dengan bertambahnya energi elektron datang. Sementara itu terlihat ada perbaikan pada tampang lintang total elastik untuk daerah energi 100-500 eV (tabel 1).

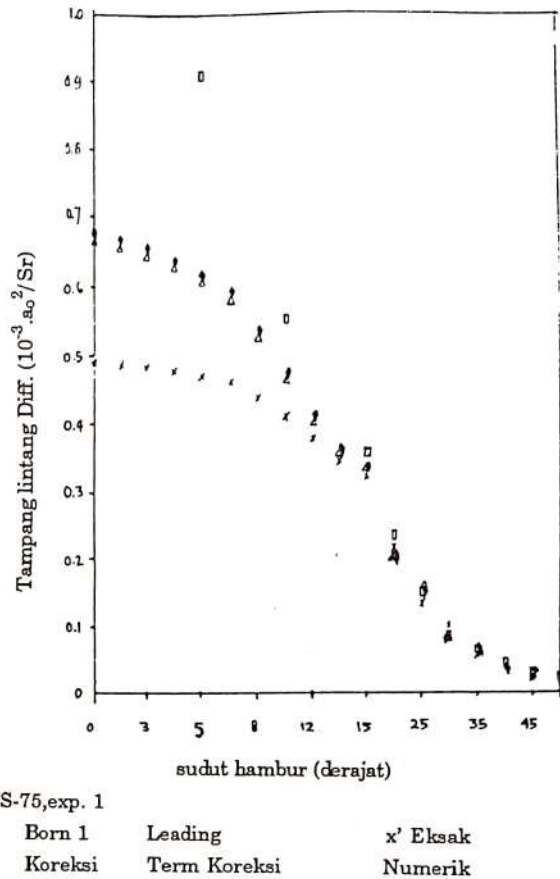
Gejala lain, konvergensi amplitudo Komponen Utama Born Dua Koreksi lebih cepat diban-



Gambar 1. Tampang lintang Diferensial Hamburan Elastik Elektron oleh Gas He ; E= 100 eV



Gambar 2. Tampang lintang Diferensial Hamburan Elastik Elektron oleh Gas He ; E= 200 eV



Gambar 3. Tampang lintang Diferensial Hamburan Elastik Elektron oleh Gas He ; E= 500 eV

ding dengan Born Pertama. Hal ini menguntungkan pada waktu perhitungan.

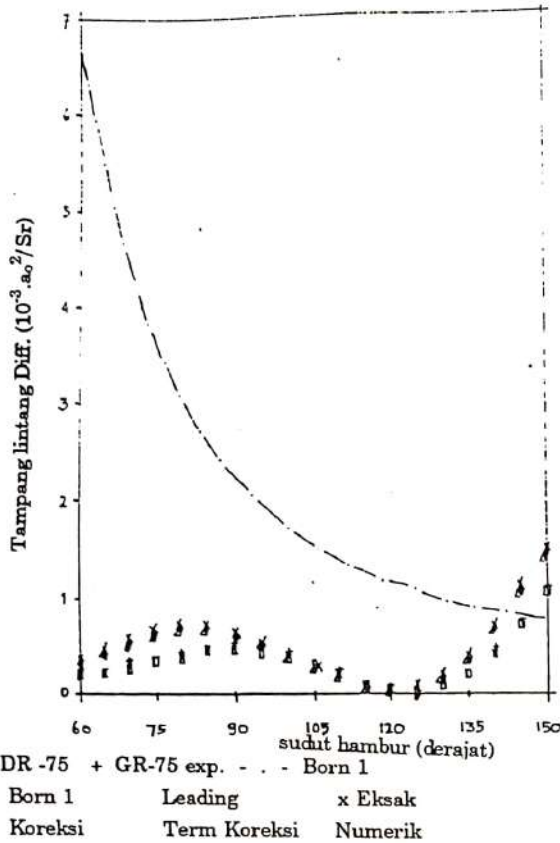
Hamburan Elastik Elektron Oleh Gas Argon.

Hasil perhitungan metode pendekatan Born Pertama Koreksi (B1K) dan pendekatan Komponen Utama Born Dua Koreksi (LTK) untuk daerah energi 100-200 eV dan sudut hambur besar (50°) ternyata cocok dengan data percobaan Gupta dan Rees [4] (GR-75), Dubois dan Ruud [2] (DR-75), gambar 4 dan 5.

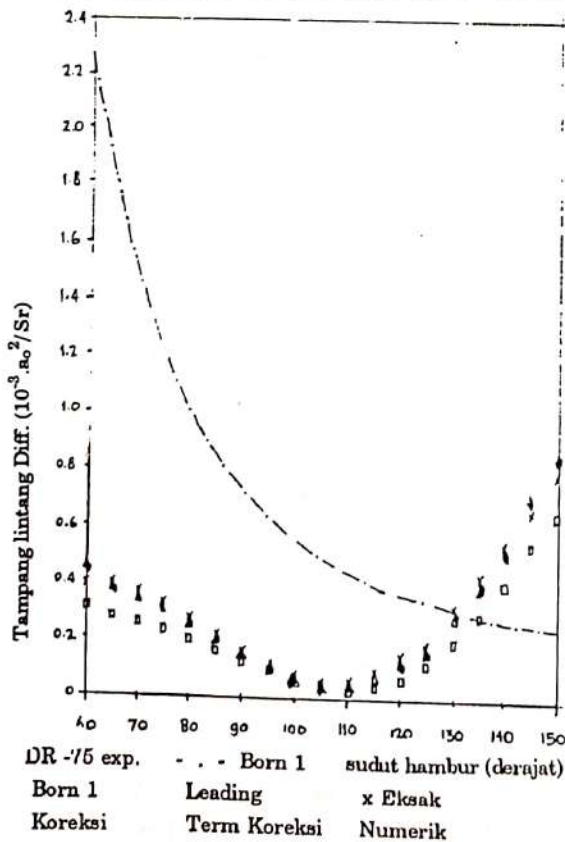
Pola grafik demikian muncul karena adanya efek pertukaran. Sedang untuk sudut hambur rendah ($\theta < 15^\circ$) praktis hasil metode koreksinya *under-estimate* dan makin mendekati data percobaan yang energi elektron datangnya bertambah. Di sini efek polarisasi semakin berkurang dengan bertambahnya energi elektron datang, lihat gambar 6

Untuk daerah sudut hambur sedang $15^\circ < \theta < 50^\circ$, metode Born Koreksi praktis mampu meramalkan gejala percobaan (gambar 6).

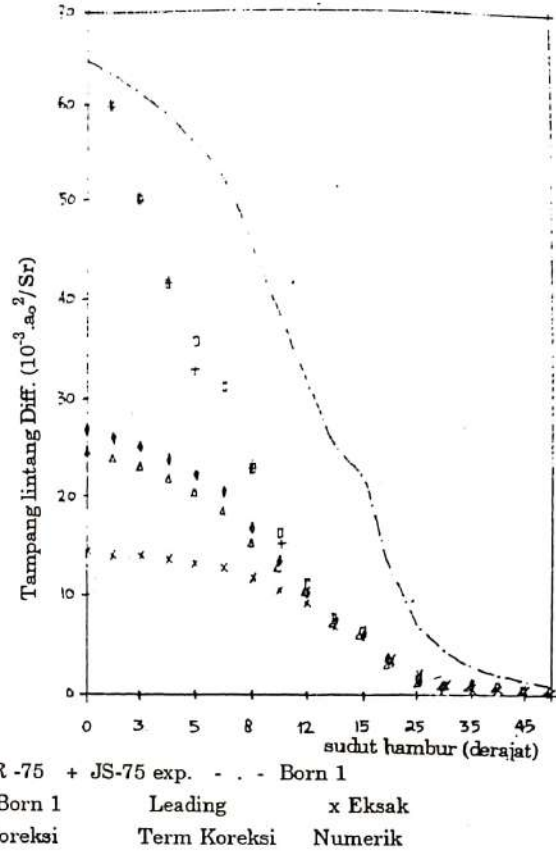
Keabsahan perhitungan geser fasa Born Pertama untuk hamburan elektron oleh Argon cukup baik (tabel 2) dibandingkan dengan hasil percobaan Gupta dan Rees [4]. Hal ini memungkinkan metode penggantian δ_f dengan δ_{l_1} sah untuk $1 > 3$.



Gambar 4. Tampang lintang diferensial hamburan elastik elektron oleh gas Ar; E = 100 eV



Gambar 5. Tampang lintang diferensial hamburan elastik elektron oleh gas Ar; E = 200 eV



Gambar 6. Tampang lintang diferensial hamburan elastik elektron oleh gas Ar; E = 500 eV

Tampang lintang total pendekatan Born Dua Koreksi dan Born Pertama terlihat sangat dekat jika dibandingkan dengan hasil perobaan (tabel 3)

KESIMPULAN

Dari hasil perhitungan, terlihat bahwa usaha untuk memperbaiki pendekatan Born dengan koreksi sampai pada pendekatan Born Dua Komponen Utama cukup memadai, terutama untuk hamburan elastik elektron oleh gas He, yang tergolong *light-atom*.

Terlihat bahwa pengambilan model Potensial Superposisi Yukawa lebih sesuai untuk atom-atom rendah.

Sedangkan untuk tampang lintang total hasil hamburan elektron dengan gas He sangat sesuai dengan eksperimen, sedang hamburan elektron oleh gas Argon cukup sesuai.

Pola konvergensi Komponen Utama Born Dua lebih cepat dibandingkan dengan Born Pertama Koreksi, dan hal ini menguntungkan dari segi waktu perhitungan.

Secara keseluruhan metode Born Koreksi cukup realistis untuk melukiskan hamburan elastik elektron oleh gas dari atom-atom rendah kecuali untuk atom-atom berat pada sudut hambur $0 > 15^\circ$, yang melukiskan bahwa model potensial yang dipakai perlu diperbaiki.

Tabel 1. Tampang lintang total hamburan elastik elektron oleh gas He. (a_0^2)

Energi (eV)	Born I	Born I koreksi	Leading koreksi	Exp. Jansen	Ratio Exp/BK	Ratio Exp/LK
100	1.3253	1.5278	1.5277	2.1880	1.4321	1.4322
200	0.7140	0.7676	0.7672	0.9771	1.2729	1.2736
300	0.4878	0.5116	0.5093	0.6046	1.1818	1.1871
400	0.3697	0.3827	0.3822	0.4550	1.1889	1.1905
500	0.2971	0.3048	0.3029	0.3481	1.1421	1.1454

Tabel 2. Perbandingan geser fasa eksak, born I dengan hasil eksak, hamburan elektron oleh gas argon, E=100 eV dan 200 eV (dalam radian).

Bilangan momentum sudut (l)	100 eV			200 eV		
	Eksak	Born	Exp.	Eksak	Born	Exp.
0	5.794	5.777	5.723	5.222	5.276	5.313
1	3.623	2.032	3.765	3.314	2.222	3.374
2	1.608	0.852	1.400	1.714	1.146	1.398
3	0.508	0.369	0.494	0.823	0.620	0.702
4	0.187	0.162	0.272	0.407	0.340	0.314
5	0.077	0.072	-	0.209	0.188	-
6	0.033	0.035	-	0.112	0.104	-

*) Exp. (GR) : data hasil percobaan Gibson dan Rees (1977)

Tabel 3. Tampang lintang total hamburan elastik elektron oleh gas Argon (a_0^2).

Energi (eV)	Born I	Born I koreksi	Leading koreksi	Exp. Jansen	Ratio Exp/BK	Ratio Exp/LK
100	86.5837	13.5231	13.3749	16.5100	1.2209	1.2344
200	45.7232	9.8768	9.4360	11.0900	1.1228	1.1753
300	31.0219	8.1941	7.6804	8.8100	1.0752	1.1471
400	23.3906	7.0247	6.5485	7.5550	1.0755	1.1537
500	18.6978	6.1549	5.7290	6.7270	1.0930	1.1742

*) Exp. Jansen = data percobaan dari Jansen et. al (1977)

*) Exp./BK dan Exp./LK = perbandingan percobaan dengan Born I koreksi dan dengan komponen Born dua koreksi.

*) a_0 = jejari atom Born.

DAFTAR PUSTAKA

1. AR Holt and Budi Santoso, *On the Born Series for Scattering amplitudes*, Journal Phys. B: atom. Molec. Phys., 1974, 7, 1018.
2. Dubois R.D. and M.E. Ruud, *Differential cross section for elastic scattering of electrons from Argon, Neon, Nitrogen*, Journal Phys. B: Atom. Molec. Phys., 1976, 9, 2857.
3. Gibson J.R. and J.A. Rees, *A phase shift analysis of electron-argon elastic scattering data*, Journal Phys. B: Atom. Molec. Phys., 1976, 9, L 105.

4. Gupta S.C. and J.A. Rees, *Absolute differential cross-section for 100 eV electrons elastically scattered by helium, neon, and argon*, Journal Phys. B: Atom. Molec. Phys. 1974, 7, L381.
5. Kurepa M.W. and L. Vuskovic, *Differential cross-section of 100,150 and 200 eV electrons elastically scattered in helium*, Journal Phys. B: Atom. Molec. Phys. 1975, 8, 2067.
6. La Bahn R.W and Joseph Callaway, *Distorsion Effect in the Elastic Scattering of 100 to 400 eV Electron from Helium*, Phys. Rev. 1969, 180, 91.
7. Salvat ,F., et al., *Analytical Dirac-Hartree-FockSlater screening function for atoms (Z=1-92)*, Phys. Rev. A. 1987, 36, 467.
8. Setyo, P., *Metoda Pendekatan Koreksi Born Pada Hamburan Kuantum Potensial Sentral*, Skripsi Universitas Indonesia, Jakarta, 1989.

DISKUSI

Lasijo:

Dalam perhitungan peristiwa hamburan dalam penelitian anda telah dipergunakan fungsi gelombang tanpa spin, padahal elektron mempunyai spin $1/2$. Apakah ini tidak merupakan salah satu kekurangan dalam perhitungan tersebut?

Setyo Purwanto:

Pada metode koreksi Born ini, lebih ditekankan pada kesederhanaan bentuk pendekatan Born, yang ternyata cukup baik untuk meramalkan secara teoritik besarnya amplitudo hamburan, diff. cross section pada peristiwa hamburan atom.

Dan lagi memang kita tidak mencoba meramalkan struktur atomik target, melainkan hanya mencoba memberi gambaran model potensial yang berkaitan dengan situasi fisik pada peristiwa hamburan elektron-atomik tersebut.