

# ALAT BANTU STUDI KUALITATIF HAMBURAN ELEKTRON-ATOM

Lucky E. Santoso

## ABSTRACT

A graphical user interface application is developed as a tool for qualitative study on electron-atom elastic scattering. The application is based on a verified and validated computer code that numerically calculates the scattering cross sections using partial wave analysis. A demonstration on how this tool could be used to analyze a resonance phenomenon in the scattering of electrons by a noble gas is given.

**Keywords:** educational software, scattering

## PENDAHULUAN

Hamburan elektron oleh atom, atau hamburan elektron-atom, terjadi pada proses-proses penting, baik buatan manusia (seperti lampu pendar, laser gas, dan reaktor fusi) maupun gejala alam (seperti dinamika atmosfer dan plasma astrofisik). Gejala-gejala di atas tidak dipelajari secara langsung, namun melalui percobaan hamburan elektron-atom di laboratorium, di mana berkas elektron dengan energi datang tertentu ditembakkan ke atom sasaran. Dalam interaksinya dengan atom, elektron memiliki kemungkinan untuk dibelokkan dari arah semula, atau dikatakan terhambur. Besaran paling penting yang diukur dalam percobaan adalah tampang lintang diferensial (*differential cross section*) yang menunjukkan kebolehjadian terjadinya hamburan ke sudut tertentu. Tampang lintang total (*total cross section*) mewakili kebolehjadian untuk segala sudut hamburan.

Sayangnya percobaan tidak dapat dilakukan dengan mudah untuk semua atom. Sebagai contoh, mempersiapkan atom sasaran berupa gas mulia adalah jauh lebih mudah daripada spesies yang reaktif atau berbahaya. Oleh karena itu, suatu alat bantu studi berbasis perhitungan komputer yang dapat memberikan simulasi hasil percobaan akan bermanfaat. Telah dikembangkan perangkat lunak komputer sebagai alat bantu studi tersebut.

Perangkat lunak ini berbasis *graphical user interface* (GUI) untuk memudahkan pemakaian, dan dijalankan pada PC (*personal computer*) dengan sistem operasi Microsoft Windows yang populer, sehingga dapat digunakan di berbagai tempat di mana tidak tersedia komputer berkemampuan tinggi. Dengan digunakannya PC, efisiensi perhitungan menjadi pertimbangan yang penting.

Oleh karena itu perangkat lunak ini didasarkan pada suatu modul program komputer yang telah dikembangkan sebelumnya [6] dengan memperhatikan faktor efisiensi perhitungan. Modul ini merupakan implementasi dari perhitungan tampang lintang hamburan elektron-atom yang menggunakan analisis gelombang parsial dengan model potensial berupa pendekatan analitik demi efisiensi. Integrasi numerik terhadap

persamaan Schrödinger radial yang muncul akibat penggunaan analisis gelombang parsial dilakukan dengan langkah bervariasi untuk meningkatkan efisiensi perhitungan. Uji verifikasi menunjukkan bahwa hasil perhitungan ini cocok dengan harga eksak untuk model potensial yang sederhana. Uji validitas dengan menggunakan data percobaan gas mulia menunjukkan bahwa perhitungan ini mampu menjelaskan secara kualitatif hamburan elektron-atom pada energi 200 eV ke atas.

## PERHITUNGAN NUMERIK

Berikut diberikan penjelasan singkat mengenai perhitungan numerik beserta implementasinya yang menjadi dasar bagi alat bantu studi yang dikembangkan. Keterangan lebih lanjut mengenai analisis gelombang parsial diberikan oleh antara lain Schmid *et al.* [7].

Partikel yang datang dengan energi  $E = \frac{\hbar^2}{2m_e} k^2$  dan dihamburkan secara kuantum oleh potensial sentral  $V(r)$  akan mengikuti persamaan Schrödinger yang berdasarkan analisis gelombang parsial dapat dipisahkan persamaannya radialnya:

$$\frac{d^2}{dr^2} u_l(r) + w_l(r) u_l(r) = 0 \quad (1)$$

di mana

$$w_l(r) = \frac{2m_e}{\hbar^2} \left[ E - V(r) - \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \quad (2)$$

dengan syarat batas  $u_l(0) = 0$ . Di sini  $l$  lebih dikenal sebagai momentum sudut, dan sering digunakan notasi spektroskopik  $s, p, d, f, g, h$ , dan seterusnya untuk menyatakan  $l = 0, 1, 2, 3, 4, 5$ , dan seterusnya.

Sebagai potensial  $V(r)$  dipakai potensial Salvat yang dapat digunakan pada masalah hamburan elektron-atom. Potensial Salvat adalah potensial Coulomb yang tertabir oleh fungsi tabir

$$\phi(r) = \sum_{i=1}^3 A_i \exp(-\alpha_i r) \quad (3)$$

yang merupakan pendekatan analitik terhadap penyelesaian persamaan Dirac-Hartree-Fock-Slater. Nilai parameter  $A_i$  dan  $\alpha_i$  telah dihitung dan ditabulasikan untuk masing-masing nomor atom dari  $Z=1$  sampai dengan  $Z=92$  [5].

Karena potensial Salvat merosot cukup cepat secara radial, maka jika dipilih radius  $r_{\max}$  yang cukup besar, dianggap  $V(r)$  dapat diabaikan untuk  $r > r_{\max}$ , dan berlaku hubungan

$$u_l(r) = r \left[ \cos \delta_l j_l(kr) + \sin \delta_l n_l(kr) \right], \quad r > r_{\max}. \quad (4)$$

Dengan memilih dua titik radial berbeda  $r_A$  dan  $r_B$  yang berada di sekitar  $r_{\max}$ , dapat diperoleh geser fase:

$$\delta_l = \arctan \left[ \frac{G j_l(kr_A) - j_l(kr_B)}{G n_l(kr_A) - n_l(kr_B)} \right]; \quad G = \frac{u_l(r_B) r_A}{u_l(r_A) r_B}. \quad (5)$$

Suku  $\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{l(l+1)}{r^2}$  dalam (2) biasa disebut rintangan sentrifugal (*centrifugal barrier*) yang dapat dianggap sebagai suatu potensial yang repulsif. Jika dipilih momentum

sudut  $l_{\max}$  yang cukup besar maka untuk  $l > l_{\max}$  dianggap  $V(r)$  dapat diabaikan relatif terhadap rintangan sentrifugal, sehingga nilai geser fase  $\delta_l$  juga dapat diabaikan. Oleh karenanya semua perhitungan untuk momentum sudut dari  $l = 0$  sampai  $l = \infty$  dapat dipotong menjadi sampai  $l = l_{\max}$  saja.

Geser fase dapat ditentukan jika nilai  $u_l(r_A)$  dan  $u_l(r_B)$  diperoleh. Untuk itu, setelah mendefinisikan  $K_l(r) \equiv \frac{1}{12} h^2 w_l(r)$ , dilakukan integrasi numerik terhadap persamaan diferensial (1) dengan menggunakan metode Numerov (juga disebut metode Fox-Goodwin) yang ralatnya berorde  $h^6$  [7]:

$$u_{l,i+1} = \frac{(2 - 10K_{l,i})u_{l,i} - (1 + K_{l,i-1})u_{l,i-1}}{(1 + K_{l,i+1})} \quad (6)$$

Dari sifat  $u_l(r) : Cr^{l+1}$  yang berlaku untuk  $r$  sekitar nol, diambil nilai  $u_{l,1} = h^{l+1}$  [2].

Variasi besarnya langkah  $h$  selama integrasi penting demi perhitungan yang efisien [1, 3]. Agar variasi ini dapat dikendalikan secara otomatis, untuk tiap langkah integrasi perlu dilakukan penaksiran terhadap ralat integrasi. Di sini digunakan taksiran ralat yang diusulkan oleh Blatt khusus untuk metode Numerov [1]. Dengan memperhatikan bahwa  $u_0$  bersifat osilatoris dengan bentuk menyerupai  $\sin(\sqrt{w_0(r)} r)$ , Blatt mengusulkan taksiran

$$u_0^{(6)}(r) \approx [w_0(r)]^3 u_0(r). \quad (7)$$

Dengan substitusi suku ralat (absolut) pada metode Numerov ke (7), untuk tiap langkah integrasi diperoleh taksiran

$$\text{Ralat relatif} \equiv \frac{\text{Ralat absolut}}{u_{0,i}} \approx \frac{72}{10} \left[ \frac{1}{12} h^2 w_{0,i} \right]^3. \quad (8)$$

Walau taksiran di atas tidak berlaku untuk  $l \neq 0$ , demi kemudahan taksiran tersebut akan digunakan untuk semua  $l$  karena tidak mengorbankan ketelitian perhitungan.

Dengan memilih toleransi ralat  $TOL$ , besar langkah  $h$  sepanjang integrasi  $u_{l,i}$  dari  $r_0$  hingga  $r_{i_{\max}}$  dapat ditentukan dengan memastikan bahwa taksiran ralat relatif untuk tiap langkah (8) tidaklah lebih besar dari  $TOL$ . Karena sifat potensial Salvat,  $w_0$  merupakan fungsi yang merosot secara monoton sepanjang integrasi, sehingga besar langkah  $h$  akan secara terus-menerus meningkat. Demi kemudahan, peningkatan  $h$  dilakukan berupa penggandaan nilai.

Untuk energi yang cukup rendah,  $h$  di sekitar  $r_{\max}$  menjadi terlalu besar dan berakibat perhitungan tidak sestabil perhitungan untuk energi yang lebih tinggi. Untuk mengatasi kelemahan taksiran Blatt ini diperlukan *cut-off* di mana nilai  $h$  dijaga agar tidak melampaui suatu nilai  $h_{\max}$ .

Geser fase kemudian dapat digunakan untuk memperoleh tampang lintang diferensial

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \{ \text{Re}[f(\theta)] \}^2 + \{ \text{Im}[f(\theta)] \}^2 \quad (9)$$

di mana

$$\begin{aligned}\operatorname{Re}[f(\theta)] &= \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin \delta_l \cos \delta_l P_l(\cos \theta) \\ \operatorname{Im}[f(\theta)] &= \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l P_l(\cos \theta).\end{aligned}\quad (10)$$

Danampang lintang total dapat diperoleh dengan mengintegrasikan tampang lintang diferensial:

$$\sigma = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l, \quad (11)$$

di mana  $\sigma_l$  adalah tampang lintang parsial.

Implementasi dari perhitungan numerik ini adalah kelas (*class*) GP, suatu modul program komputer berupa kelas C++ yang menggunakan aritmatika *double precision* untuk mengurangi peluang terjadinya ralat pembulatan (*round-off error*). Antarmuka dari kelas ini diberikan pada Gambar 1. Kelas GP meliputi variabel (*member variables*) yang mewakili masukan perhitungan seperti nomor atom  $Z$  dan energi  $E$  (eV), serta keluaran perhitungan seperti fungsi gelombang radial  $u_{l,i}$ , geser fase  $\delta_l$  (rad), tampang lintang diferensial  $\frac{d\sigma}{d\Omega_\theta}$  (bohr<sup>2</sup>/sr), tampang lintang parsial  $\sigma_l$  (bohr<sup>2</sup>), dan tampang lintang total  $\sigma$  (bohr<sup>2</sup>). Kelas GP juga meliputi variabel yang mewakili parameter perhitungan seperti jangkauan integrasi  $r_{\max}$  (Å), jangkauan momentum sudut  $l_{\max}$ , toleransi ralat relatif per langkah  $TOL$ , dan besar langkah maksimal  $h_{\max}$  (Å). Nama variabel dalam GP telah diusahakan cukup intuitif dan antarmuka telah diberi sejumlah komentar agar mudah diketahui notasi manakah yang diwakili oleh suatu variabel C++. Kelas GP meliputi beberapa fungsi (*member functions*). Fungsi `Inisialisasi()` membentuk tabel polinomial Legendre  $P_{l,\theta}$  yang akan digunakan dalam perhitungan tampang lintang diferensial. Fungsi ini cukup dipanggil sekali di awal program. Fungsi `HitungFungsiGelombang()` mula-mula akan menghitung potensial Salvat  $V_l$ . Integrasi numerik untuk  $u_{l,i}$  kemudian dilakukan sesuai dengan metode Numerov (6). Integrasi dihentikan segera setelah jangkauan integrasi tercapai,  $r_{i_{\max}} \geq r_{\max}$ . Akhirnya dari dua titik integrasi terakhir ditetapkan  $r_A = r_{i_{\max}-1}$ ,  $r_B = r_{i_{\max}}$  dan  $u_l(r_A) = u_{l,i_{\max}-1}$ ,  $u_l(r_B) = u_{l,i_{\max}}$ . Fungsi `HitungGeserFase()`, yang dapat dipanggil setelah pemanggilan fungsi `HitungFungsiGelombang()`, menghitung geser fase berdasarkan hubungan (5). Fungsi `HitungTampangLintangTotal()` menghitung tampang lintang total menurut persamaan (11) dan fungsi `HitungTampangLintangDiferensial()` menghitung tampang lintang diferensial menurut persamaan (9). Keduanya dapat dipanggil setelah pemanggilan fungsi `HitungGeserFase()`.

Mengenai pemilihan nilai parameter perhitungan yang sesuai, dari pengalaman,  $r_{\max}$  yang ditetapkan sebesar suatu harga tertentu yang cukup tinggi tampak sudah mencukupi untuk memperoleh hasil kualitatif yang memadai. Secara umum, geser fase akan bernilai kecil untuk semua  $l > kr_{\max}$  [4], yang berarti bahwa nilai  $l_{\max}$  di sekitar  $kr_{\max}$  merupakan pilihan yang wajar. Jika hanya diinginkan hasil kualitatif, pengalaman menunjukkan bahwa  $TOL$  yang tetap dan bernilai cukup rendah dapat diambil untuk semua kondisi  $Z$  dan  $E$ .

```

// GP.h: antarmuka kelas GP
// Copyright (c) Lucky E. Santoso 2001-2004. All rights reserved.

// Panjang variabel2 vektor, dapat diubah sesuai kebutuhan
const int NANG=180;
const int NL=100;
const int NI=10000;
const int NIF=100;
const int NZ=92;

// Konstanta fisis dan matematis
const double PI = 3.141592653589793;
const double HBARM = 7.61996336;           // (eV A^2)
const double E2 = 14.3996439;           // (eV A)
const double BOHRINV = E2/HBARM;        // (1/A)
const double RYDBERG = 0.5*E2*BOHRINV;  // (eV)

class GP {
public:
    // Prosedur dan fungsi
    void Inisialisasi();
    int HitungFungsiGelombang();
    void HitungFungsiGelombangBebas();
    void HitungGeserFase();
    void HitungTampangLintangTotal();
    void HitungTampangLintangDiferensial();

    // Parameter perhitungan
    double TOL; // toleransi ralat relatif per langkah
    double hMax; // besar langkah maksimal u/ langkah variabel (A)
    double rMax; // jangkauan integrasi (A)
    int lMax; // jangkauan momentum sudut
    int iMax; // jumlah langkah, sebagai keluaran

    // Masukan
    double E; // energi (eV)
    int Z; // nomor atom

    // Hasil
    double r[NI+1]; // radius (A)
    double u[NL+1][NI+1]; // fungsi gelombang radial
    double uF[NL+1][NIF+1]; // fungsi gelombang radial bebas
    double Delta[NL+1]; // geser fase (rad)
    double Sig[NL+1]; // t.l. parsial (bohr^2)
    double SigTot; // t.l. total (bohr^2)
    double dSigma[NANG+1]; // t.l. diferensial (bohr^2/sr)

private:
    // Fungsi dan variabel pembantu
    double HitungPotensial(double rr);

    int IsDbl[NI+1];
    double P[NL+1][NANG+1];
    double V[NI+1];
    double jA[NL+1], nA[NL+1], jB[NL+1], nB[NL+1];
    double RealFactor[NL+1], ImagFactor[NL+1];
};

```

**Gambar 1.** Antarmuka kelas GP

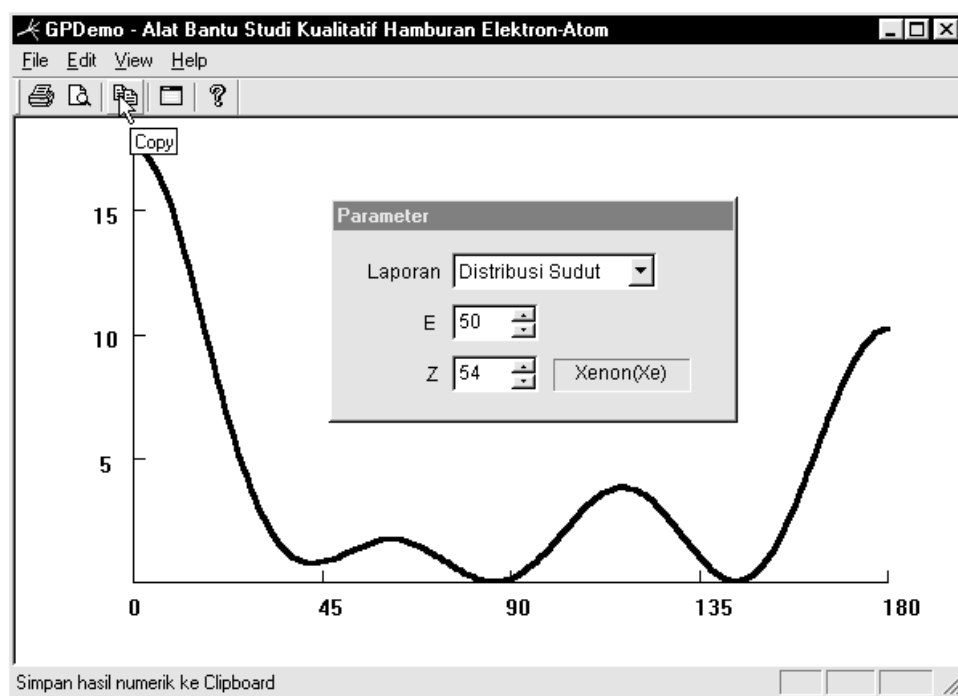
## ALAT BANTU STUDI

Berdasarkan perhitungan numerik yang diimplementasikan oleh kelas GP di atas dikembangkanlah GPDemo, perangkat lunak komputer sebagai alat bantu studi kualitatif hamburan elektron-atom. Sebagai parameter perhitungan digunakan  $TOL$  senilai  $10^{-6}$ ,  $h_{Max}$  senilai  $0.1 \text{ \AA}$ ,  $r_{Max}$  senilai  $3 \text{ \AA}$ , dan  $l_{Max}$  senilai  $\lceil (3 \text{ \AA})k + 1 \rceil$ .

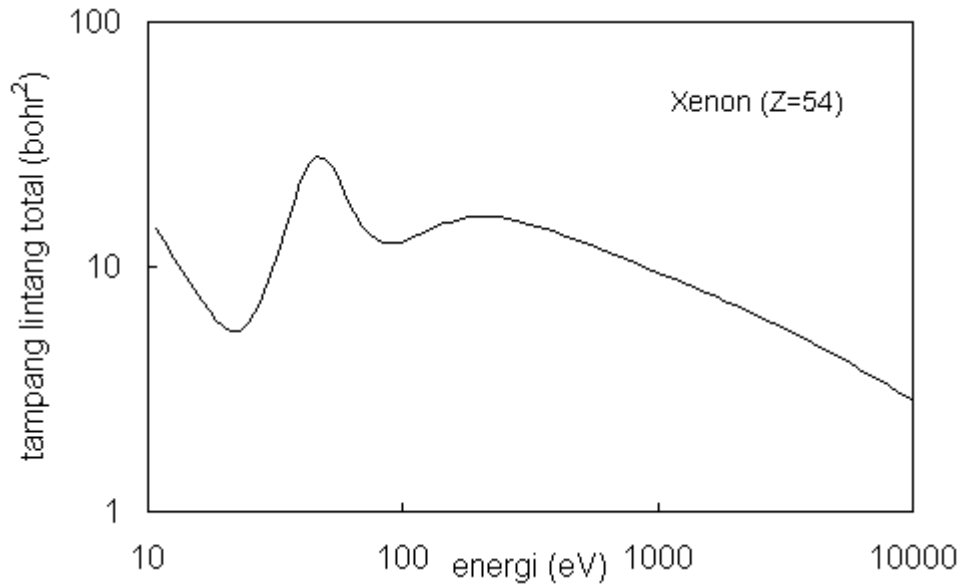
GPDemo yang berbasis GUI dan dijalankan pada Microsoft Windows ini menerima masukan dari pengguna untuk menentukan nilai  $E$  dan  $Z$ , dan memberikan pilihan laporan berupa grafik tampang lintang total sebagai fungsi energi dan nomor atom, tabel geser fase dan tampang lintang parsial, serta grafik distribusi sudut. GPDemo juga memberikan fasilitas penyimpanan hasil perhitungan ke Clipboard untuk pengolahan dan penyajian lebih lanjut.

GPDemo dikembangkan dalam C++ (untuk memudahkan integrasi dengan kelas GP) dengan menggunakan Microsoft Foundation Class Library (untuk memudahkan pembuatan GUI). *Compiler* yang digunakan adalah Microsoft Visual C++ v6.0 tanpa pengaturan optimisasi tertentu.

Berikut GPDemo dijalankan pada PC dengan *platform* perangkat keras Intel Pentium III, 450 MHz, 64 MB RAM dan sistem operasi Microsoft Windows 98. Gambar 2 menunjukkan salah satu tampilan GPDemo. Gambar 3, Gambar 4, dan Tabel 1 adalah berdasarkan laporan-laporan yang diberikan oleh GPDemo untuk atom gas mulia Xenon.



**Gambar 2.** Suatu tampilan GPDemo



**Gambar 3.** Tampang lintang total untuk Xenon

Pada Gambar 3 terlihat adanya puncak di sekitar 50 eV padaampang lintang total untuk Xenon. Puncak ini dikenal sebagai resonans bentuk (*shape resonance*). Karena berada pada wilayah energi di mana perhitungan tidak valid, maka spesifikasi (seperti lokasi dan lebar) resonans ini tentunya berbeda dengan hasil percobaan. Secara kualitatif akan diamati pada momentum sudut yang manakah resonans ini terjadi.

Pada Tabel 1 diberikan hasil perhitungan geser fase dan tampang lintang parsial untuk energi datang 50 eV. Terlihat bahwa puncak pada tampang lintang total tersebut adalah akibat sumbangan dari tampang lintang parsial  $\sigma_3$  yang nilainya jauh lebih tinggi dibanding nilai tampang lintang parsial yang lain. Terlihat juga bahwa nilai  $\delta_3$  berada di sekitar  $-\pi/2$ . Memang variasi nilai geser fase yang melewati  $\pm\pi/2$  akan menimbulkan puncak pada tampang lintang parsial yang bersangkutan.

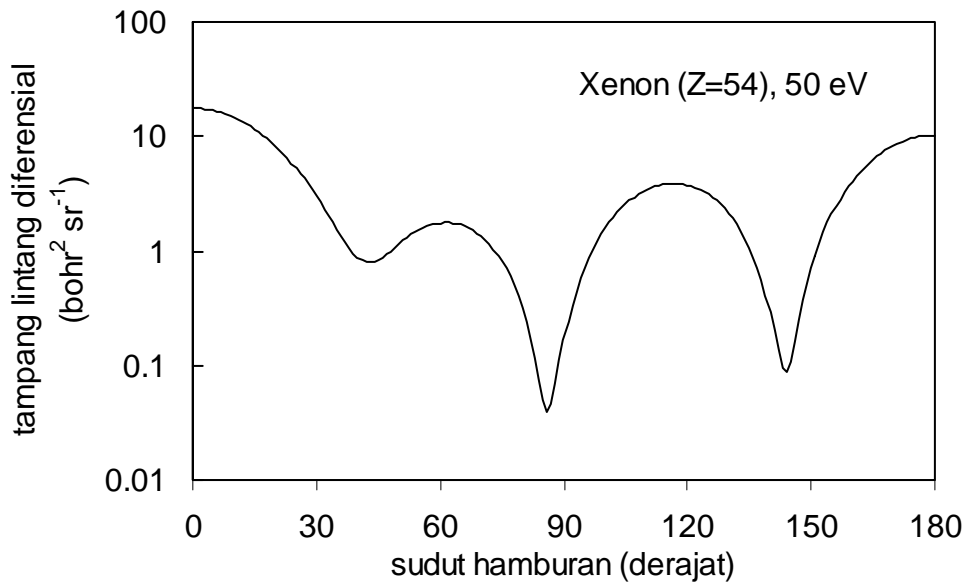
**Tabel 1.** Tampang lintang parsial untuk Xenon pada 50 eV

$l$	$\delta_l$ (rad)	$\sigma_l$ (bohr <sup>2</sup> )
0	-0.925	2.179
1	-0.105	0.113
2	-0.089	0.135
3	-1.471	23.700
4	0.188	1.072
5	0.059	0.132
6	0.021	0.020

Dari sini dapat disimpulkan bahwa resonans tersebut terjadi pada momentum sudut  $l=3$ . Informasi serupa dapat diperoleh dari grafik distribusi sudut [7]. Pada Gambar 4 tampak bahwa kurva hasil perhitungan tampang lintang diferensial memiliki tiga minima, yang berarti bahwa sumbangan terpenting berasal dari polinomial Legendre

yang memiliki tiga akar, yaitu  $P_3(\cos\theta)$ . Dari sini juga dapat disimpulkan bahwa resonans tersebut terjadi pada momentum sudut  $l=3$  (resonans  $f$ ).

Terlihat bahwa alat bantu studi yang telah dibuat ini dapat digunakan untuk menganalisis resonans hamburan elektron oleh atom suatu gas mulia.



**Gambar 4.** Distribusi sudut untuk Xenon pada 50 eV

## KESIMPULAN

Suatu perangkat lunak komputer berbasis GUI telah dikembangkan sebagai alat studi kualitatif hamburan elektron-atom. Perangkat lunak ini didasarkan pada modul program komputer untuk perhitungan numerik tampang lintang hamburan gelombang parsial yang telah diverifikasi dan divalidasi. Demonstrasi diberikan di mana alat bantu studi ini dapat digunakan untuk menganalisis resonans hamburan elektron oleh atom suatu gas mulia.

## DAFTAR PUSTAKA

- [1] Blatt, J. M. Practical points concerning the solution of the Schrödinger equation. *J. Comput. Phys.*, 1, 382-396. 1967.
- [2] Cash, J. R. & Raptis, A. D. A high order method for the numerical integration of the one-dimensional Schrödinger equation. *Comput. Phys. Commun.*, 33, 299-304. 1984.
- [3] Raptis, A. D. & Cash, J. R. A variable step method for the numerical integration of the one-dimensional Schrödinger equation. *Comput. Phys. Commun.*, 36, 113-119. 1985.
- [4] Roman, P. *Advanced quantum theory*. Reading, Massachusetts: Addison-Wesley Publishing Company, Inc. 1965.

- [5] Salvat, F., Martínez, J. D., Mayol, R., & Parellada, J. Analytical Dirac-Hartree-Fock-Slater screening function for atoms ( $Z=1-92$ ). *Phys. Rev. A*, 36, 467-474. 1987.
- [6] Santoso, L. E. Perhitungan numerik tampang lintang hamburan elektron-atom dengan menggunakan analisis gelombang parsial. Working paper. 2004.
- [7] Schmid, E. W., Spitz, G., & Lösch, W. *Theoretical physics on the personal computer* (2<sup>nd</sup> ed.). Berlin: Springer-Verlag. 1990.