

PERHITUNGAN NUMERIK TAMPANG LINTANG HAMBURAN ELEKTRON-ATOM DENGAN MENGGUNAKAN ANALISIS GELOMBANG PARSIAL

Lucky E. Santoso

ABSTRAK

Analisis gelombang parsial digunakan untuk menghitung tampang lintang hamburan elastik elektron-atom. Perhitungan numerik fungsi gelombang radial dilakukan dengan menggunakan metode Numerov langkah bervariasi yang ternyata lebih efisien dan memberikan kendali ketelitian lebih baik dibandingkan metode langkah tetap yang biasa digunakan. Dua pendekatan analitik untuk fungsi tirai atomik, yaitu menurut Lenz-Jensen dan Salvat, digunakan di sini. Pada energi 200 eV ke atas hasil untuk kedua pendekatan tersebut cukup cocok dengan data percobaan, namun hasil untuk pendekatan Salvat lebih cocok.

ABSTRACT

Partial wave analysis is applied to calculate the cross sections of electron-atom elastic scattering. Radial wave functions are integrated numerically using a variable step Numerov method, which is shown to be more efficient than the usual fixed step method and providing better accuracy control. Two analytical approximations for the atomic screening function, that of Lenz-Jensen and Salvat, are used here. For energies of 200 eV and higher the results of both approximations are in good agreement with the experimental data, with the results of Salvat being closer.

PENDAHULUAN

Perhitungan tampang lintang hamburan dengan menggunakan analisis gelombang parsial akan melibatkan penyelesaian persamaan Schrödinger, dan untuk itu terdapat banyak metode numerik yang dapat dipakai (Thomas *et al.*, 1981). Metode Numerov merupakan salah satu yang populer, dan pernah dikatakan bahwa superioritas metode ini sudah sangat jelas sehingga tidak ada metode lain yang perlu dipertimbangkan secara serius dalam praktek (Blatt, 1967). Beberapa yang menggunakan metode Numerov dalam studinya adalah Koonin (1986) untuk masalah hamburan elektron oleh atom, Schmid *et al.* (1990) untuk masalah hamburan neutron oleh inti atom, dan Santoso (1997) untuk masalah hamburan nuklir oleh proton. Pada perkembangan selanjutnya Cash dan Raptis (1984) mengembangkan metode yang lebih teliti daripada metode Numerov, namun metode Cash dan Raptis ini merupakan metode yang implisit, jadi lebih sulit diimplementasikan dan beban perhitungannya lebih tinggi.

Studi-studi di atas menggunakan integrasi langkah tetap. Pentingnya integrasi langkah bervariasi demi perhitungan yang efisien dinyatakan oleh Blatt (1967), Thomas *et al.* (1981), dan Raptis dan Cash (1985). Untuk itu metode Numerov langkah bervariasi diusulkan oleh Blatt (1967) berdasarkan suatu taksiran ralat yang sederhana dan oleh Raptis dan Cash (1985) berdasarkan *embedding* memanfaatkan metode Cash dan Raptis (1984).

Dalam studi hamburan elektron-atom, Koonin (1986) menggunakan potensial analitik Lenz-Jensen yang didasarkan pada model atom Thomas-Fermi, sedangkan Santoso (1998) menggunakan potensial analitik Salvat (Salvat *et al.*, 1987) yang didasarkan pada model atom Hartree-Fock. Santoso menggunakan pendekatan Born terkoreksi, yang merupakan hibrida analisis gelombang parsial dan pendekatan Born (Santoso, 1973 dan Holt dan Santoso, 1974), dan menyimpulkan bahwa hasil yang diberikan potensial analitik Salvat cukup cocok dengan data percobaan untuk jangkauan energi 200 eV ke atas.

Dalam penelitian ini perhitungan tampang lintang hamburan elastik elektron-atom dilakukan dengan menggunakan analisis gelombang parsial. Sebagai implementasi perhitungan telah dirancang dan dibangun suatu program komputer yang dijalankan pada PC (*personal computer*), sehingga dapat digunakan di berbagai tempat di mana tidak tersedia superkomputer. Dengan digunakannya PC, efisiensi perhitungan menjadi pertimbangan yang penting.

Mengingat popularitas, kemudahan implementasi, dan beban perhitungan yang relatif ringan, metode Numerov dipakai dalam integrasi numerik persamaan Schrödinger radial yang muncul. Selain integrasi langkah tetap, integrasi langkah bervariasi digunakan, mengingat pentingnya demi efisiensi, dan didasarkan pada usulan Blatt (1967) karena kesederhanaannya. Sedangkan sebagai model potensial, demi efisiensi digunakan pendekatan-pendekatan analitik. Pendekatan analitik Lenz-Jensen dan Salvat digunakan di sini karena dapat dianggap mewakili dua model atom yang populer, dan sekaligus untuk mencoba melengkapi validasi yang dilakukan oleh Santoso (1998), kali ini dengan menggunakan analisis gelombang parsial.

Telah dilakukan verifikasi terhadap perhitungan, antara lain melalui analisis konvergensi dan perbandingan dengan hasil perhitungan analitik yang eksak untuk potensial-potensial yang sederhana, dan pengujian terhadap sejauh mana validitas model-model potensial yang digunakan dalam perhitungan, dengan cara membandingkan hasil perhitungan dengan data percobaan.

Diharapkan implementasi perhitungan ini dapat menjadi dasar bagi dibangunnya suatu alat pengajaran bagi mahasiswa dan pemula dalam melakukan studi kualitatif mengenai hamburan elektron-atom.

PERHITUNGAN

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 $u_l(0)=0$.

Sebagai potensial $V(r)$ dipakai potensial Lenz-Jensen dan Salvat yang dapat digunakan pada masalah hamburan elektron-atom. Potensial Lenz-Jensen adalah potensial Coulomb yang tertabir oleh fungsi tabir versi Lenz dan Jensen, yang merupakan pendekatan analitik terhadap penyelesaian persamaan Thomas-Fermi (Koonin, 1986 dan Schümann *et al.*, 1998):

$$\phi(r) = e^{-x} (1 + x + b_2 x^2 + b_3 x^3 + b_4 x^4) \quad (3)$$

di mana $b_2 = 0,3344$; $b_3 = 0,0485$; $b_4 = 2,647 \cdot 10^{-3}$ dan $x = (4,5397 \text{Å}^{-1/2}) Z^{1/6} r^{1/2}$.

Sedangkan potensial Salvat adalah potensial Coulomb yang tertabir oleh fungsi tabir yang diusulkan oleh Salvat *et al.* (1987) sebagai pendekatan analitik terhadap penyelesaian persamaan Dirac-Hartree-Fock-Slater:

$$\phi(r) = \sum_{i=1}^3 A_i \exp(-\alpha_i r) \quad (4)$$

di mana nilai parameter A_i dan α_i telah dihitung dan ditabulasikan untuk masing-masing nomor atom dari $Z=1$ sampai dengan $Z=92$.

Untuk energi datang yang rendah konfigurasi elektron pada atom memiliki cukup waktu untuk terpolarisasi oleh medan yang dihasilkan oleh elektron datang tersebut. Juga untuk energi datang yang rendah terdapat kemungkinan bahwa elektron datang terperangkap dalam atom dan sebagai gantinya sebuah elektron atomik terpancarkan, yang disebut pertukaran elektron (*electron exchange*). Efek polarisasi atom maupun pertukaran elektron masing-masing dapat diwakili oleh potensial yang dapat digunakan sebagai koreksi terhadap potensial $V(r)$ (Bethe dan Jackiw, 1986). Namun demi kemudahan di sini tidak diusahakan adanya koreksi untuk efek pertukaran elektron maupun polarisasi tersebut.

Karena baik potensial Lenz-Jensen maupun 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

$$u_l(r) = r [\cos \delta_l j_l(kr) + \sin \delta_l n_l(kr)], \quad r > r_{\max}. \quad (5)$$

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

$$\delta_l = \arctan \left[\frac{G j_l(kr_A) - j_l(kr_B)}{G n_l(kr_A) - n_l(kr_B)} \right]; \quad G = \frac{u_l(r_B) r_A}{u_l(r_A) r_B}. \quad (6)$$

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 δ_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 yang ralatnya berorde h^6 :

$$u_{l,i+1} = \frac{(2 - 10K_{l,i})u_{l,i} - (1 + K_{l,i-1})u_{l,i-1}}{(1 + K_{l,i+1})} \quad (7)$$

Dari sifat $u_l(r) : Cr^{l+1}$ yang berlaku untuk r dekat dengan nol (Cash dan Raptis, 1984) diambil nilai $u_{l,1} = h^{l+1}$.

Geser fase dapat digunakan untuk memperoleh tampang lintang diferensial

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \{\text{Re}[f(\theta)]\}^2 + \{\text{Im}[f(\theta)]\}^2 \quad (8)$$

di mana

$$\begin{aligned} \text{Re}[f(\theta)] &= \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin \delta_l \cos \delta_l P_l(\cos \theta) \\ \text{Im}[f(\theta)] &= \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l P_l(\cos \theta). \end{aligned} \quad (9)$$

Kemudian tampang lintang total dapat diperoleh dengan mengintegrasikan tampang lintang diferensial:

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l. \quad (10)$$

Sebagai implementasi dari perhitungan numerik ini dikembangkan suatu modul program komputer (dinamakan GP) berupa kelas C++ yang menggunakan aritmatika *double precision* (dengan 15 atau 16 digit signifikan) untuk mengurangi peluang terjadinya ralat pembulatan (*round-off error*). Bahasa pemrograman C++ dipilih karena cukup populer untuk PC dan untuk C++ tersedia *compiler* yang mampu menghasilkan *executable* yang relatif efisien dalam hal ukuran dan kecepatan. Program komputer yang menggunakan kelas ini di-*compile* dengan menggunakan Microsoft Visual C++ v4.2 tanpa pengaturan optimisasi tertentu, dan dijalankan pada PC dengan *platform* perangkat keras Intel Pentium III, 450 MHz, 64 MB RAM dan sistem operasi Microsoft Windows 95.

Hasil integrasi numerik $u_l(r)$ yang khas bagi potensial Lenz-Jensen dan Salvat menunjukkan bahwa $u_0(r)$ bervariasi secara cepat pada r yang kecil dan bervariasi secara lambat pada r yang besar. Dengan besar h yang dibuat tetap sepanjang integrasi, menggunakan h yang kecil akan menyebabkan terbuang percumanya waktu komputasi saat integrasi pada r yang besar, sedangkan menggunakan h yang besar tentunya akan menyebabkan diragukannya ketelitian perhitungan. Karenanya integrasi pada r yang kecil memerlukan langkah kecil sedangkan langkah yang lebih besar dapat dipakai untuk integrasi pada r yang besar. Pola perbedaan laju variasi (yang paling menonjol pada Z besar) ini terlihat melemah dengan makin besarnya l . Namun karena besarnya sumbangan dari perhitungan untuk l kecil dalam perhitungan tampang lintang, maka keperluan akan integrasi dengan besar langkah bervariasi ini layak dipenuhi.

Agar variasi besar langkah h dapat dikendalikan secara otomatis, untuk tiap langkah integrasi perlu dilakukan penaksiran terhadap ralat integrasi. Adanya taksiran ralat ini sekaligus dapat memudahkan penaksiran dan pengendalian ketelitian perhitungan secara keseluruhan, dan ini merupakan manfaat tambahan (selain efisiensi) yang ditawarkan oleh integrasi langkah bervariasi. Di sini digunakan taksiran ralat yang diusulkan oleh Blatt (1967) khusus untuk metode Numerov. Dengan memperhatikan bahwa u_0 bersifat osilatoris dengan bentuk menyerupai $\sin(\sqrt{w_0(r)} r)$, diperoleh taksiran

$$u_0^{(6)}(r) \approx [w_0(r)]^3 u_0(r). \quad (11)$$

Dengan substitusi suku ralat (absolut) pada metode Numerov ke (11), untuk tiap langkah integrasi diperoleh taksiran

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

Untuk $l \neq 0$, di mana w_l memiliki kemungkinan bernilai nol atau negatif, secara umum taksiran Blatt di atas tidak berlaku. Penyelidikan juga menunjukkan bahwa taksiran ralat relatif (12) terlalu pesimis jika digunakan untuk $l \neq 0$. Namun demi kemudahan taksiran ralat tersebut akan digunakan untuk semua l karena tidak mengorbankan ketelitian perhitungan.

Dengan memilih toleransi ralat TOL , besar langkah h sepanjang integrasi $u_{l,i}$ kini dapat ditentukan dengan memastikan bahwa taksiran ralat relatif untuk tiap langkah (12) tidaklah lebih besar dari TOL . Karena sifat potensial Lenz-Jensen maupun 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.

VERIFIKASI

Hasil perhitungan geser fase untuk potensial *square well*

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & r < a \\ 0, & r > a \end{cases} \quad (13)$$

diberikan pada Tabel 1. Untuk besar langkah integrasi yang setara, $h=0.005 \text{ \AA}$, perhitungan dalam penelitian ini (GP) menunjukkan ketelitian yang secara signifikan lebih tinggi daripada program oleh Koonin (1986). Tabel 1 juga menunjukkan konvergensi pada GP di mana penerapan h yang lebih kecil memberikan hasil perhitungan yang lebih dekat kepada nilai eksak, meskipun laju konvergensi ini berbeda untuk tiap energi. Manfaat aritmatika *double precision* digambarkan oleh kasus $E=300 \text{ eV}$ di mana penerapan h sekecil 0.00001 \AA belum tampak mengakibatkan munculnya ralat pembulatan pada hasil perhitungan yang dituliskan 6 digit di belakang koma.

Tabel 1. Geser Fase untuk Potensial *Square Well*

Energi (eV)	Geser Fase (rad)				
	Eksak	Koonin ^a $h=0.005 \text{ \AA}$	GP ^b		
			$h=0.005 \text{ \AA}$	$h=0.001 \text{ \AA}$	$h=0.00001 \text{ \AA}$
30	-0.032476	-0.438	-0.082611	-0.042781	-0.032580
300	-0.762280	-0.944	-0.762293	-0.762282	-0.762280
3000	-1.094645	1.482	-1.094711	-1.094677	-1.094646

Catatan: Geser fase pada $l=0$ untuk potensial *square well* dengan $V_0=300 \text{ eV}$ dan $a=1.5 \text{ \AA}$.

^a PROJ4.BAS oleh Koonin (1986) dengan jangkau integrasi 2 \AA .

^b Perhitungan langkah tetap dengan jangkau integrasi $r_{\max}=2 \text{ \AA}$.

Tabel 2 menunjukkan hasil perhitungan geser fase untuk potensial Lennard-Jones

$$V(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\rho}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\rho}{r} \right)^6 \right] \quad (14)$$

Terdapat konvergensi seiring dengan penerapan r_{\max} yang semakin besar. Juga ditunjukkan pola khas analisis gelombang parsial, yaitu konvergensi geser fase ke arah nol seiring meningkatnya l .

Tabel 2. Geser Fase untuk Potensial Lennard-Jones

l	Geser Fase (rad)					
	"Eksak" ^a		GP ^b , $r_{\max}=2 \text{ \AA}$		GP ^b , $r_{\max}=10 \text{ \AA}$	
	$E=1 \text{ Ry}$	$E=25 \text{ Ry}$	$E=1 \text{ Ry}$	$E=25 \text{ Ry}$	$E=1 \text{ Ry}$	$E=25 \text{ Ry}$
0	0.154	-0.484	0.066	-0.495	0.154	-0.483
1	1.233	0.928	1.153	0.917	1.233	0.928
2	-1.430	-0.964	-1.473	-0.975	-1.430	-0.964
3	0.783	0.120	0.629	0.109	0.783	0.121
4	0.126	1.032	0.043	1.019	0.126	1.033
5	0.036	-1.379	0.003	-1.394	0.037	-1.378
6	0.015	-0.845	0.000	-0.858	0.015	-0.844
7	0.007	-0.526	0.000	-0.537	0.007	-0.525
8	0.003	-0.458	0.000	-0.472	0.004	-0.457
9	0.002	-0.758	0.000	-0.772	0.002	-0.757
10	0.001	1.414	0.000	1.398	0.001	1.415

Catatan: Geser fase untuk potensial Lennard-Jones dengan $\varepsilon=125 \text{ Ry}$ dan $\rho=1 \text{ bohr}$.

^a Raptis, A.D. & Cash, J.R. (1985). *Comput. Phys. Commun.*, 36, 113-119.

^b Perhitungan langkah tetap dengan $h=0.005 \text{ \AA}$.

Perbandingan beban antara perhitungan langkah tetap dan perhitungan langkah bervariasi digambarkan oleh Tabel 3, yang menunjukkan jumlah langkah integrasi i_{\max} yang diperlukan keduanya dalam menentukan nilai tampang lintang total untuk beberapa kondisi E dan Z dengan ketelitian setara, yaitu tiga digit.

Perhitungan langkah bervariasi terlihat membutuhkan lebih sedikit jumlah langkah integrasi, kecuali untuk kasus Z kecil, E besar. Ini dapat dipahami karena keunggulan perhitungan langkah bervariasi adalah terutama di saat menghadapi pola perbedaan laju variasi u_l , yang paling menonjol pada kasus Z besar, l kecil. Sebagai gambaran waktu perhitungan, untuk kasus $Z=36$, $E=30$ eV perhitungan langkah tetap membutuhkan sekitar 12 ms dalam menentukan nilai tampang lintang total, sedangkan perhitungan langkah bervariasi membutuhkan sekitar 0.6 ms.

Algoritma yang lebih kompleks menyebabkan perhitungan langkah bervariasi hanya memperbaiki waktu perhitungan dengan faktor sekitar 20 walaupun dia mampu memperbaiki jumlah langkah integrasi dengan faktor sekitar 28.

Diperhatikan juga bahwa besarnya i_{\max} untuk perhitungan langkah tetap sangatlah bervariasi tanpa menunjukkan pola kebergantungan tertentu terhadap kondisi Z dan E , yang tentunya akan menyulitkan penaksiran dan pengendalian ketelitian perhitungan. Diperlukan pengalaman mencoba-coba yang cukup banyak dalam menentukan h yang sesuai untuk suatu kondisi agar tercapai ketelitian yang diinginkan. Alternatif lain adalah pengendalian secara pesimis dengan menetapkan nilai h sangat rendah, yang berakibat sangat tingginya inefisiensi.

Dalam perhitungan langkah bervariasi ketelitian dapat ditaksir lewat besarnya ralat relatif global, yaitu akumulasi ralat relatif yang merambat dari tiap langkah integrasi. Taksiran kasar untuk ralat relatif global ini dilakukan dengan mengalikan toleransi ralat relatif per langkah, TOL , dengan jumlah langkah integrasi, i_{\max} .

Tabel 3. Perbandingan Perhitungan Langkah Tetap dan Langkah Bervariasi

Z	Energi (eV)	σ^a (bohr ²)	Jumlah Langkah ^b		TOL
			Tetap	Variabel	
2	30	13.5	48	25	6.8(-6)
	300	1.76	1341	74	2.4(-5)
	2990	0.181	489	510	1.3(-7)
36	30	18.1	2306	82	2.4(-6)
	300	10.5	1166	58	4.2(-4)
	3000	3.46	320	332	3.2(-6)
86	30	43.2	1144	57	6.1(-5)
	300	14.3	1745	101	4.3(-5)
	3000	4.58	2345	505	3.6(-7)

Catatan: Perhitungan menggunakan potensial Lenz-Jensen dengan $r_{\max}=3 \text{ \AA}$ dan $l_{\max}=\lceil(2\text{\AA})k+1\rceil$.

^a Tampang lintang total dengan ketelitian tiga digit berdasarkan perhitungan langkah tetap dengan $h=0.0003 \text{ \AA}$ dipakai sebagai acuan.

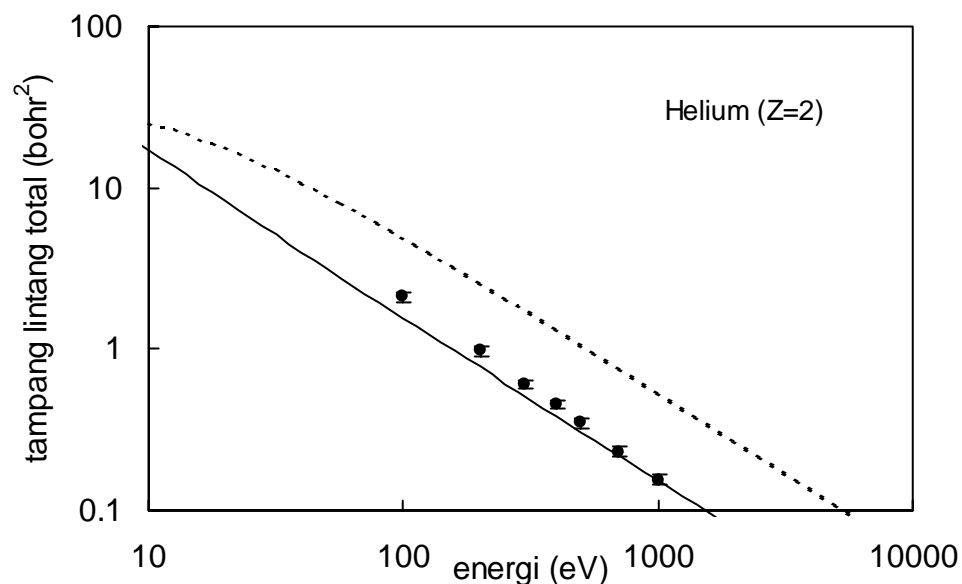
^b Jumlah langkah integrasi untuk tiap momentum sudut l .

Taksiran ini secara konsisten lebih pesimis daripada ketelitian sesungguhnya (tiga digit), dan ini tidak mengherankan mengingat taksiran ralat relatif per langkah yang digunakan memang terlalu pesimis untuk $l \neq 0$.

Dengan adanya taksiran ketelitian yang ditawarkan oleh perhitungan langkah bervariasi ini, kendali ketelitian yang cermat dapat dilakukan.

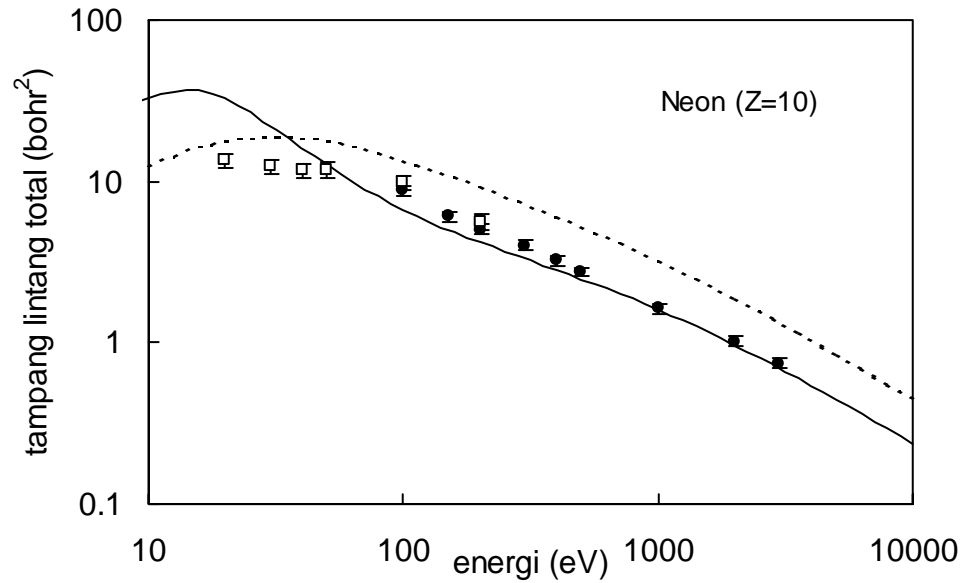
VALIDASI

Dari hasil perhitungan untuk berbagai kasus E dan Z diperhatikan bahwa pada energi rendahampang lintang total cenderung bervariasi secara cepat terhadap energi, yang menunjukkan adanya resonans, dan kemudian merosot secara monoton seiring meningkatnya energi. Distribusi sudut (yaitu grafikampang lintang diferensial sebagai fungsi sudut hamburan) cenderung kompleks pada energi rendah, yaitu terdiri dari sejumlah maksima dan minima. Pada energi tinggi distribusi sudut cenderung sederhana, yaitu terdapat maksimum pada sudut rendah dan penurunan secara cepat untuk sudut hamburan yang tinggi, atau dengan kata lain hamburan maju (*forward scattering*) lebih dominan dibanding hamburan mundur (*backward scattering*). Uraian kualitatif hasil perhitungan di atas sesuai dengan uraian kualitatif beberapa hasil percobaan (Bethe dan Jackiw, 1986). Perbandingan yang lebih cermat antaraampang lintang total hasil perhitungan dengan hasil percobaan untuk hamburan elektron oleh gas-gas mulia ditampilkan pada grafikampang lintang total sebagai fungsi energi (Gambar 1 sampai 5).



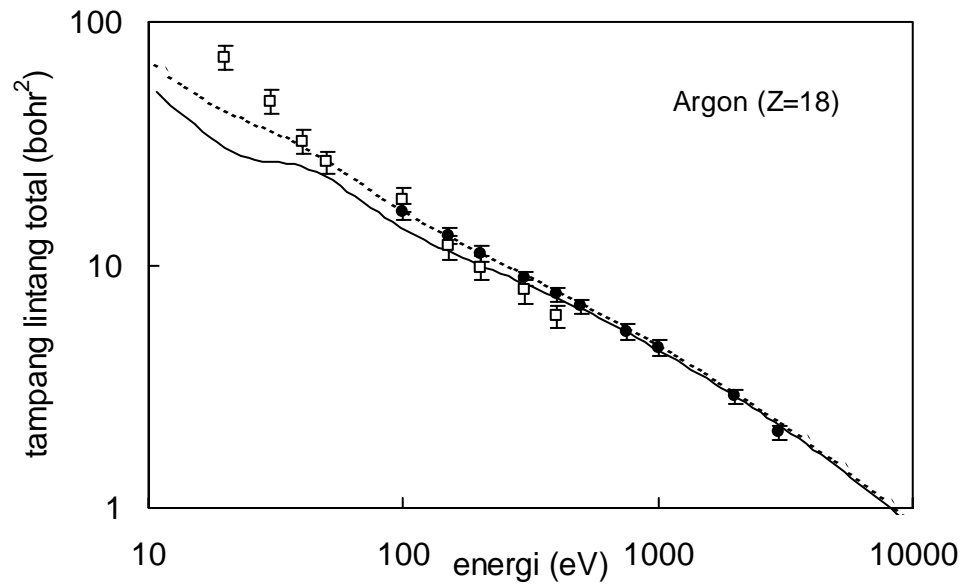
Gambar 1. Tampang Lintang Total untuk Helium

Catatan: Percobaan: ●, Jansen *et al.* (1976). Perhitungan: -----, potensial Lenz-Jensen; —, potensial Salvat.



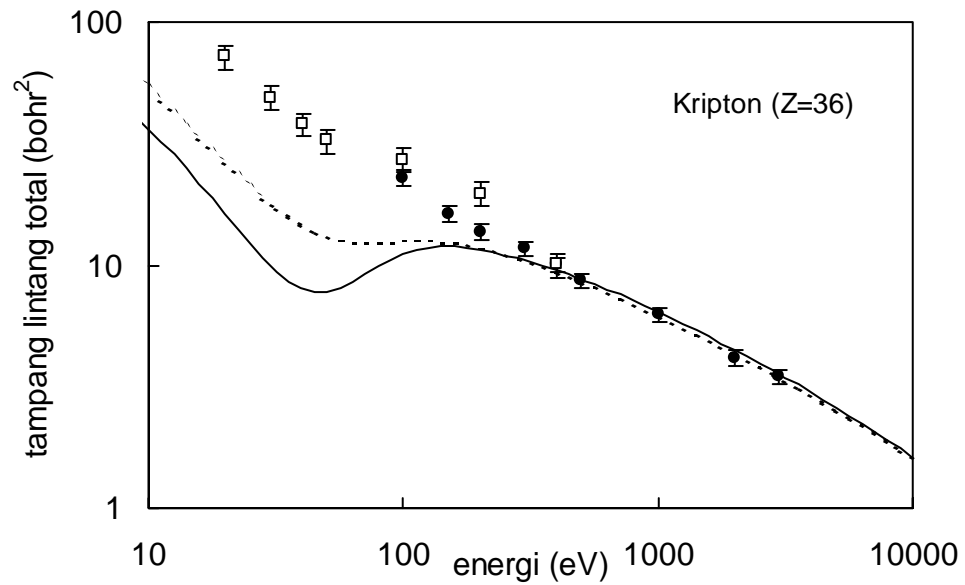
Gambar 2. Tampang Lintang Total untuk Neon

Catatan: Percobaan: ●, Jansen *et al.* (1976); □, Williams dan Crowe (1975). Perhitungan: -----, potensial Lenz-Jensen; —, potensial Salvat.



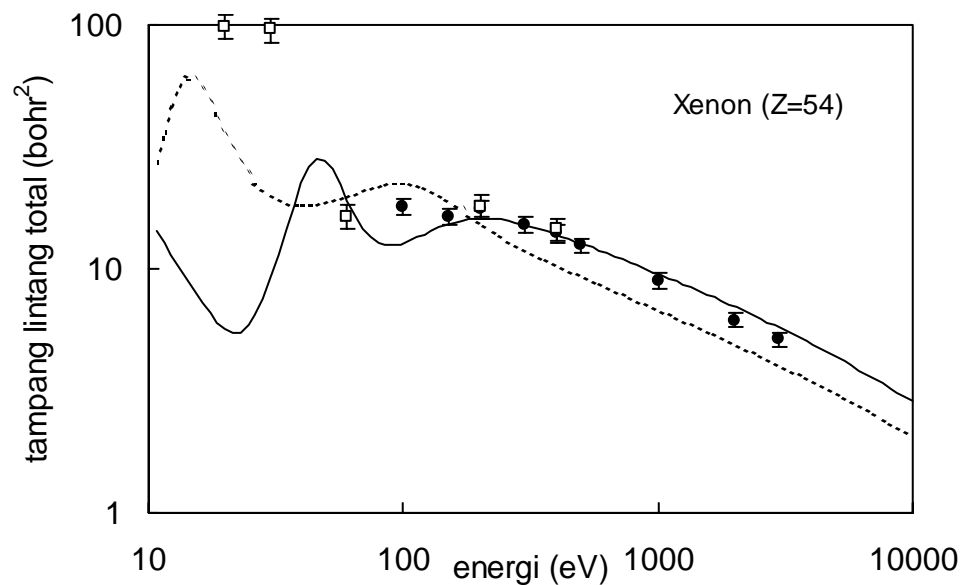
Gambar 3. Tampang Lintang Total untuk Argon

Catatan: Percobaan: ●, Jansen *et al.* (1976); □, Williams dan Willis (1975). Perhitungan: -----, potensial Lenz-Jensen; —, potensial Salvat.



Gambar 4. Tampang Lintang Total untuk Krypton

Catatan: Percobaan: ●, Jansen dan de Heer (1976); □, Williams dan Crowe (1975). Perhitungan: -----, potensial Lenz-Jensen; —, potensial Salvat.



Gambar 5. Tampang Lintang Total untuk Xenon

Catatan: Percobaan: ●, Jansen dan de Heer (1976); □, Williams dan Crowe (1975). Perhitungan: -----, potensial Lenz-Jensen; —, potensial Salvat.

Ketidakkocokan hasil perhitungan dan hasil percobaan pada energi rendah diduga terutama disebabkan oleh diabaikannya efek polarisasi dan pertukaran elektron yang penting pada energi rendah dalam perhitungan ini. Dilaporkannya polarisasi atom sasaran dalam percobaan Jansen *et al.* (1976) dan Jansen dan de Heer (1976) memperkuat dugaan ini. Akibat ketidakcocokan ini perhitungan tidak dapat mereproduksi secara valid fenomena-fenomena resonans khas, misalnya minimum Ramsauer-Townsend pada gas mulia tertentu.

Dengan membatasi diri pada energi 200 eV ke atas, tampak bahwa secara kualitatif model-model potensial cukup valid, dengan model potensial Salvat secara umum lebih valid daripada model potensial Lenz-Jensen. Ini tidak mengherankan mengingat potensial Salvat didasarkan pada model atom Hartree-Fock yang lebih akurat daripada model atom Thomas-Fermi (yang menjadi dasar bagi potensial Lenz-Jensen). Pengamatan yang lebih cermat memperlihatkan bahwa penyimpangan maksimal hasil perhitungan potensial Salvat dengan hasil percobaan Jansen *et al.* dan Jansen dan de Heer untuk energi 200 eV ke atas ini adalah sekitar 14.5% (rata-rata untuk semua atom). Ini mungkin tidak buruk mengingat dalam percobaan mereka terdapat ralat sebesar 7% dan terdapat inkonsistensi (yang mencapai 30% pada kasus tertentu) dengan hasil percobaan lain. Penyimpangan terbesar adalah untuk Helium, yang tampaknya disumbang oleh proses tak elastik yang dinamakan hamburan bayangan (*shadow scattering*). Dengan demikian pengamatan ini dapat menjadi konfirmasi bagi salah satu hasil yang diperoleh Santoso (1998), yaitu bahwa potensial Salvat cukup cocok pada energi 200 eV ke atas.

KESIMPULAN

Perbandingan hasil perhitungan dengan hasil eksak untuk model-model potensial sederhana dan pengamatan terhadap kelakuan konvergensinya menunjukkan bahwa perhitungan mampu memberikan hasil dengan ketelitian yang memadai. Selain itu diamati bahwa penggunaan integrasi langkah bervariasi dapat meningkatkan efisiensi perhitungan secara signifikan (memperbaiki waktu perhitungan dengan faktor sekitar 20 untuk kasus tertentu) kecuali pada kasus nomor atom rendah dan energi tinggi, serta secara umum menawarkan taksiran dan kendali ketelitian yang lebih baik.

Uji validitas dengan menggunakan kasus hamburan elektron dengan energi datang 200 eV ke atas oleh atom-atom gas mulia menunjukkan bahwa model potensial Salvat selain lebih cocok relatif terhadap model potensial Lenz-Jensen, juga cukup cocok secara absolut (simpangan maksimum dengan hasil percobaan 14.5%).

Dapat disimpulkan bahwa perhitungan ini (dengan menggunakan potensial Salvat) mampu menjelaskan secara kualitatif hamburan elektron-atom pada energi 200 eV ke atas.

Mengingat keunggulan efisiensi perhitungan langkah bervariasi adalah terutama pada energi rendah (gelombang parsial rendah), diduga penerapannya dalam metode hibrida seperti pendekatan Born terkoreksi (Santoso, 1973 dan Holt dan Santoso, 1974) akan menghasilkan perhitungan yang lebih efisien. Dugaan ini perlu diuji. Selain itu perlu diterapkan koreksi untuk polarisasi dan pertukaran elektron terhadap model-model potensial yang digunakan dalam perhitungan dan dilihat sejauh mana, jika ada, perbaikan validitas yang diberikan oleh koreksi ini.

DAFTAR PUSTAKA

- Bethe, H.A. & Jackiw, R.W. (1986). *Intermediate quantum mechanics* (3rd ed.). Reading, Massachusetts: Addison-Wesley Publishing Company, Inc.
- Blatt, J.M. (1967). Practical points concerning the solution of the Schrödinger equation. *J. Comput. Phys.*, 1, 382-396.
- Cash, J.R. & Raptis, A.D. (1984). A high order method for the numerical integration of the one-dimensional Schrödinger equation. *Comput. Phys. Commun.*, 33, 299-304.
- Holt, A.R. & Santoso, B. (1974). On the Born series for scattering amplitudes. *J. Phys. B*, 7, 1018-1026.
- Jansen, R.H.J. & de Heer, F.J. (1976). Absolute differential cross sections for elastic scattering of electrons by krypton and xenon. *J. Phys. B*, 9, 213-226.
- Jansen, R.H.J., de Heer, F.J., Luyken, H.J., van Wingerden, B., & Blaauw, H.J. (1976). Absolute differential cross sections for elastic scattering of electrons by helium, neon, argon and molecular nitrogen. *J. Phys. B*, 9, 185-212.
- Koonin, S.E. (1986). *Computational physics*. Redwood City, California: Addison-Wesley Publishing Company, Inc.
- Raptis, A.D. & Cash, J.R. (1985). A variable step method for the numerical integration of the one-dimensional Schrödinger equation. *Comput. Phys. Commun.*, 36, 113-119.
- Salvat, F., Martínez, J.D., Mayol, R., & Parellada, J. (1987). Analytical Dirac-Hartree-Fock-Slater screening function for atoms ($Z=1-92$). *Phys. Rev. A*, 36, 467-474.
- Santoso, B. (1973). *Investigations of some approximate methods in atomic scattering theory*. Ph.D. thesis. University of Essex.
- Santoso, B. (1997). Potential model for nuclear scattering of proton below 30 MeV by target nuclei with mass number below 70. *Atom Indonesia*, 23 (2).
- Santoso, B. (1998). Pengujian model potensial menggunakan koreksi Born pada hamburan elektron oleh atom-atom gas mulia. *Majalah BATAN*, 31 (3-4), 1-7.
- Schmid, E.W., Spitz, G., & Lösch, W. (1990). *Theoretical physics on the personal computer* (2nd ed.). Berlin: Springer-Verlag.
- Schümann, F., Zavatarelli, S., Gialanella, L., Greife, U., Junker, M., Rogalla, D., Rolfs, C., Strieder, F., & Trautvetter, H.P. (1998). Electron screening in backward elastic scattering. *Eur. Phys. J. A*, 2, 337-342.
- Thomas, L.D., Alexander, M.H., Johnson, B.R., Lester, Jr., W.A., Light, J.C., McLenithan, K.D., Parker, G.A., Redmon, M.J., Schmalz, T.G., Secrest, D. & Walker, R.B. (1981). Comparison of numerical methods for solving the second-order differential equations of molecular scattering theory. *J. Comput. Phys.*, 41, 407-426.
- Williams, J.F. & Crowe, A. (1975). The scattering of electrons from inert gases. II. Absolute differential elastic cross sections for neon, krypton and xenon atoms. *J. Phys. B*, 8, 2233-2248.

Williams, J.F. & Willis, B.A. (1975). The scattering of electrons from inert gases. I. Absolute differential elastic cross sections for argon atoms. *J. Phys. B*, 8, 1670-1682.