

Elektronenrückstreuraten leichter Elemente in Molièrescher Näherung

H. Lehmann

Optisches Institut der Technischen Universität Berlin

Z. Naturforsch. **33a**, 995–997 (1978);
eingegangen am 19. Juni 1978

Electron Backscattering Rates of Light Elements in Molière Approximation

Electron backscattering rates of light elements (atomic number $Z = 6, 13, 29$) are evaluated for electron energies of $E = 20 \dots 60$ keV. The scattering amplitude in Molière approximation is expanded as a series. The series elements are calculated in closed form with the aid of substitute functions. By comparison with the first Born approximation this yields correction factors of $1 \dots 1.25$.

Die Streuamplitude f_M hochenergetischer Teilchen in Molièrescher Näherung [1] lautet in Abhängigkeit vom Streuwinkel ϑ :

$$f_M(\vartheta) = \frac{k}{i} \int_0^\infty q J_0(q \varrho) [e^{i\Phi(\varrho)} - 1] d\varrho, \quad (1)$$

$$q = 2k \sin(\vartheta/2),$$

$$\Phi(\varrho) = -\frac{1}{\hbar v} \int_{-\infty}^{+\infty} V(\sqrt{\varrho^2 + z^2}) dz, \quad (2)$$

V = Potential, v, k = Elektronengeschwindigkeit, bzw. -wellenzahl, q = Betrag des Stoßvektors. Wie gezeigt worden ist [2, 3], gilt diese Näherung ohne Einschränkung des Streuwinkels; sie wird daher zur Berechnung von Elektronenrückstreuraten (Energie der Elektronen: $E = 20 \dots 60$ keV, Kernladungszahl der Streuer: $Z = 6, 13, 29$) herangezogen.

Als Potential wird das abgeschirmte Coulomb-Potential gewählt:

$$V(r) = -\beta Z \frac{\exp[-\alpha r]}{r}, \quad \beta = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}.$$

Da der Zahlenwert des Abschirmparameters α für große Streuwinkel ohne große Bedeutung ist, wird $\alpha = \text{const} = 0,5a_0^{-1}$ gesetzt. Die Phasenkorrektur (2) ist dann die Integraldarstellung der modifizierten Besselschen Funktion K_0 [4], d. h.

$$\Phi(\varrho) = \frac{2\beta Z}{\hbar v} K_0(\alpha \varrho). \quad (3)$$

Einsetzen in (1) und Entwickeln der Exponentialfunktion ergibt die Darstellung:

$$f_M(\vartheta) = k \sum_{n=1}^{\infty} \frac{i^{n-1}}{n!} \left(\frac{2\beta Z}{\hbar v} \right)^n \cdot \int_0^\infty \varrho J_0(q \varrho) [K_0(\alpha \varrho)]^n d\varrho \equiv \sum_{n=1}^{\infty} f_n(\vartheta). \quad (4)$$

Die unendliche Reihe kann unter der Bedingung

$$2\beta Z/\hbar v = 0,23 Z/\sqrt{E} < 2$$

durch eine konvergente geometrische Reihe majorisiert werden, wobei E die Elektronenenergie in keV ist. Die Integrale

$$I_n = \int_0^\infty \varrho J_0(q \varrho) [K_0(\alpha \varrho)]^n d\varrho \quad (5)$$

sind für $n = 1, 2$ bekannte Bessel-Transformationen [5, 6]:

$$n = 1: \int_0^\infty \varrho J_0(q \varrho) K_0(\alpha \varrho) d\varrho = 1/(\alpha^2 + q^2)$$

— der erste Summand der unendlichen Reihe (4) ist damit mit der 1. Bornschen Näherung identisch —

$$n = 2: \int_0^\infty \varrho J_0(q \varrho) K_0^2(\alpha \varrho) d\varrho = \frac{1}{q \sqrt{q^2 + 4\alpha^2}} \log \frac{\sqrt{q^2 + 4\alpha^2} + q}{\sqrt{q^2 + 4\alpha^2} - q}.$$

Für $n \geq 3$ sind geschlossene Lösungen der Integrale (5) nicht bekannt. Bei den vorliegenden Parametern ($\vartheta \geq 90^\circ$, $E = 20 \dots 60$ keV) oszillieren die Integranden in (5) sehr schnell, so daß eine numerische Integration auf Schwierigkeiten stößt. Es wurde daher versucht, geschlossene Lösungen durch geringe Änderungen der Integranden zu erhalten.

Eine genaue Untersuchung des asymptotischen Verhaltens der Bessel-Funktion K_0 führt zu den Ersatzfunktionen

$$g(\alpha, \gamma) = \frac{\exp[\gamma \cdot 0,115 - 1]}{\gamma} \cdot \frac{\exp[-\alpha \varrho]}{(\alpha \varrho)^\gamma}, \quad (6)$$

wobei γ zunächst noch unbestimmt ist, aber durch Anpassen an die bekannten Lösungen für $n = 1, 2$ festgelegt werden kann. Einsetzen von (6) in (5) führt auf spezielle Lipschitz-Hankel-Integrale, welche als hypergeometrische Funktionen angegeben werden können [7]:

$$I_n(\vartheta) \cong \left(\frac{\exp[\gamma \cdot 0,115 - 1]}{\gamma \cdot \alpha'} \right)^n \frac{\Gamma(\mu + 1)}{[(\alpha n)^2 + q^2]^{(\mu+1)/2}} \cdot {}_2F_1\left(\mu + 1, -\mu; 1; \sin^2 \frac{\gamma}{2}\right) \quad (7)$$

$$\gamma = \arctan q/n\alpha, \quad \mu = 1 - 2n\gamma.$$

In (7) ist die von Watson [7] angegebene hypergeometrische Funktion einer quadratischen Transformation unterworfen worden. Das hat den Vorteil, daß das Argument in (7) stets kleiner als 0,5 ist; die Reihendarstellung der hypergeometrischen Funktion ist damit rasch konvergent.

Die für $n=1, 2$ angepaßten γ -Werte ändern sich in dem untersuchten Parameterbereich schwach mit dem Stoßvektor q ; dagegen ist der Index $n=1, 2$ ohne Bedeutung. Da die Auswertung des Lipschitz-Hankel-Integrals an die Bedingung $\mu = 1 - 2n\gamma > -1$ gebunden ist, kann γ für $n \geq 3$ jedoch nicht konstant gehalten werden. Die γ -Werte werden daher wie folgt festgelegt: Zu vorgegebenem Stoßvektor q wird durch Anpassen an das Integral I_2 ein γ -Ausgangswert $\gamma_0(q)$ bestimmt und gesetzt:

$$\gamma(n) = \gamma_0(q) - \frac{(n-3)(\gamma_0(q) - 0,1)}{16} \quad \text{für } n = 3 \dots 20,$$

$$\gamma(n) = \frac{2}{n+1} \quad \text{für } n > 20.$$

Mit den so festgelegten γ -Werten lassen sich die Partialsummen der Reihe (4) über die Näherungslösungen (7) berechnen. Für einen speziellen Satz von Parametern zeigt Abb. 1 die Partialsummen in der komplexen Ebene.

Abbildung 2 zeigt den Verlauf der so berechneten differentiellen Wirkungsquerschnitte (DWQ)

$$(d\sigma/d\Omega)_M = |f_M(\vartheta)|^2$$

in Relation zu den DWQ in 1. Bornscher Näherung

$$dQ = \frac{(d\sigma/d\Omega)_M}{(d\sigma/d\Omega)_B} \equiv \frac{|f_M(\vartheta)|^2}{|f_1(\vartheta)|^2} \quad (8)$$

für Aluminium und verschiedene Elektronenenergien.

Die Elektronenrückstreuraten ergeben sich aus den berechneten DWQs gemäß

$$\eta = 2\pi \int_{\pi/2}^{\pi} |f_M(\vartheta)|^2 \sin \vartheta d\vartheta,$$

sie werden mittels numerischer Integration bestimmt und wie die DWQs in Relation zur Rück-

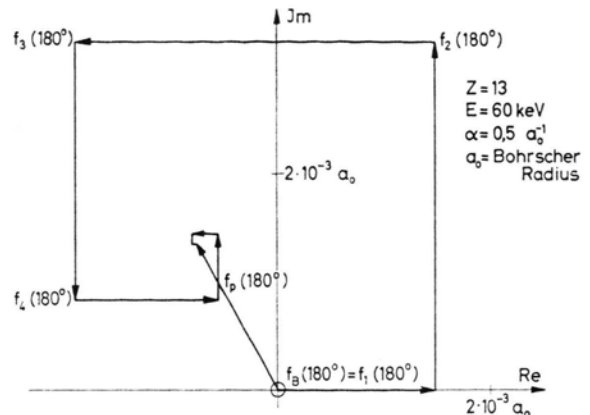


Abb. 1. Die Summenglieder der Streuamplitude (4) in der komplexen Ebene; f_1 ist identisch mit der Streuamplitude in 1. Bornscher Näherung.

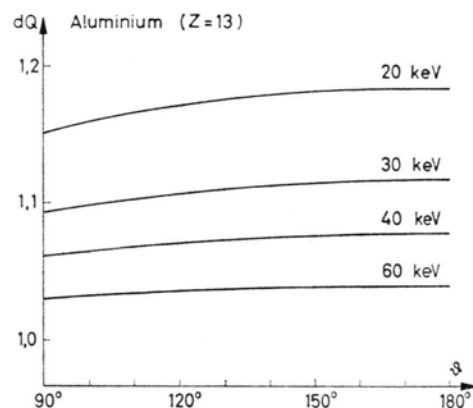


Abb. 2. Der differentielle Korrekturfaktor (8) für Aluminium im Bereich $\vartheta \geq 90^\circ$ und für Elektronenenergien von $E = 20 \dots 60$ keV.

streurate in 1. Bornscher Näherung gesetzt:

$$Q = \eta/\eta_B.$$

Eine Zusammenstellung der Quotienten Q gibt die folgende Tabelle. Für Kohlenstoff ($Z=6$) ist Q nahezu identisch gleich 1. Die genaueren Werte in

	$Z = 6$	$Z = 13$	$Z = 29$
E [keV]	Q	Q	Q
60	0,997	1,03	1,26
50	0,997	1,05	1,22
40	0,998	1,07	1,13
30	0,999	1,10	1,23
20	1,003	1,17	— *

* Wegen schlechter Konvergenz ist der Wert für $Z = 29$, $E = 20$ keV nicht in die Tabelle aufgenommen worden.

der Tabelle sollen lediglich die Veränderung des Faktors Q mit der Elektronenenergie E aufzeigen, der wie erwartet, mit sinkender Elektronenenergie schwach steigt. Die gleiche Abhängigkeit liegt bei Aluminium ($Z=13$) vor, mit dem Unterschied, daß Q insgesamt leicht größer als 1 ist. Für Kupfer

($Z=29$) ist Q größenordnungsmäßig gleich 1,2; ein monotonen Verhalten liegt hier nicht vor. Als Folge des hier vorgestellten besseren Auswertungsverfahrens sind die Korrekturfaktoren Q im Vergleich zu Lehmann und Schoenebeck [8] durchgängig kleiner.

- [1] G. Molière, Z. Naturforsch. **2a**, 133 (1947).
- [2] H. Lehmann u. H. Schoenebeck, Z. Naturforsch. **31**, 501 (1976).
- [3] S. J. Wallace, Phys. Rev. **8**, D 1846 (1973).
- [4] W. Magnus u. F. Oberhettinger, Formeln und Sätze für die spez. Funktionen d. Math. Physik, Berlin 1948, 2. Auflage, S. 39.
- [5] G. N. Watson, A Treatise on the Theory of Bessel Functions, Cambridge 1952, 2. Auflage, S. 410.
- [6] A. Erdélyi et al., Bateman Manuscript Projection. Tables of Integral Transforms, Vol. II, New York 1954, Table 8.3 (32).
- [7] G. N. Watson, A Treatise on the Theory of Bessel Functions, Cambridge 1952, 2. Auflage, S. 385.
- [8] H. Lehmann u. H. Schoenebeck, Optica Acta **24**, 693 (1977).