

Näherungsformeln für den Ionisierungsquerschnitt der *K*-Schale durch Elektronenstoß

W. HINK, J. JESSENBERGER und A. ZIEGLER

Physikalisches Institut der Universität Würzburg, Experimentelle Physik II

Eingegangen am 27. Mai 1969

Approximation Formulae for the Ionization Cross Section of the K-Shell by Electron Impact

Burhop's non relativistic result for the ionization cross section of the *K*-shell was recalculated. The remaining integrations over the change of momentum and the momentum of the ejected electron were done numerically especially for elements of low atomic number. The ionization function of the various elements normalized to unity at the maximum shows very small variation with atomic number. This universal behaviour of the ionization function was used to construct simple approximation formulae.

1. Einleitung

Die Entwicklung der Mikroanalyse, der Astrophysik und der Plasma-physik hat das Interesse an Ionisierungsquerschnitten in den letzten zehn Jahren neu belebt. Während für die Ionisierung der äußeren Schale bereits ein umfangreiches Material zur Verfügung steht (vgl. z. B. LOTZ¹), sind die Kenntnisse über den Ionisierungsquerschnitt für innere Schalen äußerst spärlich. Für die genannten Gebiete sind dabei insbesondere die Ionisierungsquerschnitte der inneren Schalen für Elemente niedriger Ordnungszahl wichtig. Zu theoretischen Untersuchungen auf dem Gebiet der Plasma- und Astrophysik können aber die komplizierten Endformeln quantenmechanischer Rechnungen kaum herangezogen werden. Als Vorarbeit zur experimentellen Bestimmung des *K*-Ionisierungsquerschnitts wurde die nichtrelativistische Rechnung von BURHOP² für Elemente niedriger Ordnungszahl ausgewertet. Dabei zeigte sich, daß die Resultate der numerischen Rechnung recht gut durch einfache Formeln wiedergegeben werden können.

1. LOTZ, W.: Z. Physik **206**, 205 (1967).

2. BURHOP, E. H. S.: Proc. Cambridge Phil. Soc. **36**, 43 (1940).

2. Berechnung des K -Ionisierungsquerschnitts

Die Burhopsche Berechnung für den Ionisierungsquerschnitt der K -Schale gilt für ein wasserstoffartiges Atom mit Z -fach geladenem Kern und einem Elektron in der $1-s$ -Schale. Das ein- und auslaufende Elektron wird dabei durch nichtrelativistische ebene Wellen beschrieben, das herausgeschlagene Atomelektron durch die auslaufende Coulombwellenfunktion.

Der Übergang zum realen Atom erfolgt nun in zwei Schritten:

1. Die Wellenfunktion des $1-s$ -Elektrons wird nach SLATER³ bestimmt, d. h., man verwendet in den Schrödinger-Eigenfunktionen für das Atomelektron an Stelle der Ordnungszahl Z die effektive Kernladungszahl

$$Z_{\text{eff}} = Z - 0,3.$$

2. Für die Ionisierungsenergie der K -Schale wird der experimentelle Wert verwendet (der Wert für das wasserstoffartige Atom liegt wesentlich höher, bei Aluminium z. B. 2,3 gegen 1,5 keV).

Beim Vergleich der von verschiedenen Autoren^{2,4-6} angegebenen Endformel findet man mehrere, voneinander verschiedene Formeln, die nicht miteinander in Einklang zu bringen sind.

Beginnt man dabei mit den von Burhop angegebenen Ansätzen, so muß im Verlauf der Rechnung ein Integral ausgewertet werden, für das die in den Integrationstabellen (z. B. GRÖBNER-HOFREITER⁷) geforderten Voraussetzungen nicht im gesamten Integrationsgebiet erfüllt sind. Um diese Schwierigkeiten zu umgehen, wurde nach einem bei LANDAU-LIFSCHITZ⁶ angegebenen Weg die Rechnung durchgeführt. Als Resultat erhalten wir (Bezeichnungen und Einheiten nach MOTT und MASSEY⁴):

$$Q = \frac{2^{11} \cdot \pi \cdot \mu^6}{a_0^2 \cdot k^2} \cdot \int_0^{\kappa_{\text{max}}} \int_{k-\kappa}^{k+\kappa} \frac{\kappa}{K} \cdot \frac{K^2 + \frac{1}{3}(\kappa^2 + \mu^2)}{[\mu^2 + (K + \kappa)^2]^3 \cdot [\mu^2 + (K - \kappa)^2]^3} \cdot \exp \left[-\frac{2\mu}{\kappa} \cdot \arctg \frac{2\mu\kappa}{\mu^2 + K^2 - \kappa^2} \right] \cdot dK \cdot d\kappa \cdot \frac{1}{1 - \exp \left(-\frac{2\pi\mu}{\kappa} \right)} \quad (1)$$

3. SLATER, J. C.: Phys. Rev. **36**, 57 (1930).

4. MOTT, N. F., and H. S. W. MASSEY: Theory of atomic collisions. Oxford: Clarendon Press, 2. edit. 1949, 3. edit. 1965.

5. MASSEY, H. S. W.: Handbuch der Physik, Bd. XXXVI, S. 357. Berlin-Heidelberg-New York: Springer 1965.

6. LANDAU, E. D., u. E. M. LIFSCHITZ: Lehrbuch der theoretischen Physik. Berlin: Akademie-Verlag 1965.

7. GRÖBNER, W., u. N. HOFREITER: Integraltafel, Teil II. Wien: Springer 1961.

Die Integrationsgrenzen sind dabei

$$\begin{aligned} \kappa_{\max} &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E_0 - E_K)} \\ k &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E_0} \\ k_{\kappa} &= \sqrt{k^2 - \kappa^2 - E_K \frac{2m}{\hbar^2}}. \end{aligned}$$

Hierin bedeuten E_K die Ionisierungsenergie der K-Schale und E_0 die Einschußenergie des stoßenden Elektrons.

Dieses Ergebnis ist identisch mit dem bei Mott und Massey und bei LANDAU-LIFSCHITZ angegebenen Resultat*, wenn man dort die Beziehung zwischen Raumwinkel und Impulsübertrag berücksichtigt.

Nimmt man an, daß die für das in Frage stehende Integral geforderten Voraussetzungen nur als hinreichend, nicht aber als notwendig betrachtet werden müssen, so führt die Rechnung nach BURHOP zum gleichen Ergebnis.

Die Gl. (1) wurde für mehrere Elemente numerisch ausgewertet.

3. Empirische Näherungsformel

Die Ionisierungsfunktion der verschiedenen Elemente weist eine starke Ähnlichkeit bezüglich der Kurvenform auf. Um einen Vergleich durchführen zu können, wird der Wert des Ionisierungsquerschnitts im Maximum der Kurve (für $U = E_0/E_K = 3$) auf Eins normiert. Damit ergibt sich der in Fig. 1 gezeigte relative Verlauf des Wirkungsquerschnitts. Man sieht, daß für die Elemente Beryllium bis Nickel die Kurven nur wenig voneinander abweichen.

Die relative Ionisierungsfunktion ist also in guter Näherung unabhängig von der Ordnungszahl. Dies legt für eine Näherungsformel den Ansatz nahe:

$$Q = G(Z) \cdot Q_{\text{rel}}(U). \tag{2}$$

Die relative Ionisierungsfunktion beschreiben wir durch folgende Formel

$$Q_{\text{rel}}(U) = a \cdot \frac{1}{U} \cdot \ln \left(\frac{4 \cdot U}{1,65 + 2,35 \cdot \exp(-b \cdot (U - 1))} \right). \tag{3}$$

Diese Funktion ist eine modifizierte Form (Konstante b im Exponenten eingefügt) der von WORTHINGTON und TOMLIN⁸ angegebenen Funktion für den Ionisierungsquerschnitt der K-Schale.

* Bei BURHOP liegt ein Druckfehler vor. Dort findet man anstelle von $K^2 + \frac{1}{2} \cdot (\mu^2 + \kappa^2)$ den Ausdruck $K^2 + \frac{1}{2} \cdot (\mu^2 + \kappa^2)$.

8. WORTHINGTON, C. R., and S. G. TOMLIN: Proc. Phys. Soc. (London) A **69**, 401 (1956).

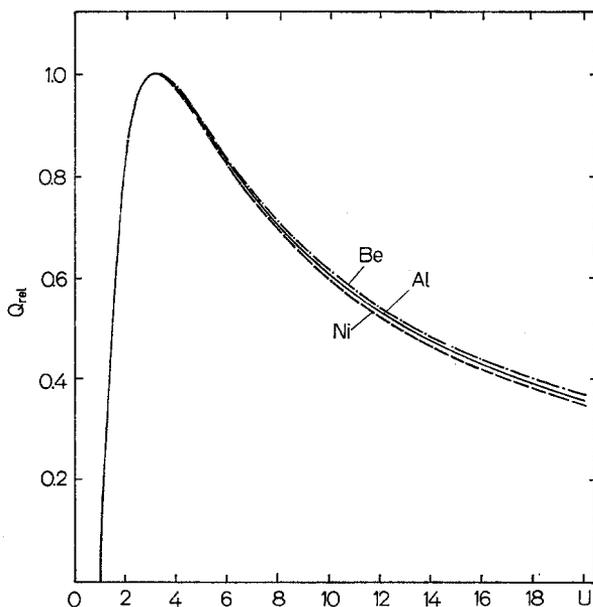


Fig. 1. Relative Ionisierungsquerschnitte Q_{rel} für die Elemente Beryllium, Aluminium und Nickel in Abhängigkeit von der relativen Einschußenergie U , berechnet nach BURHOP

Die Werte für Aluminium liegen zwischen denen für Nickel und Beryllium. Die freien Parameter in Gl. (3) werden deshalb so gewählt, daß die für Aluminium nach Gl. (1) berechneten relativen Wirkungsquerschnitte möglichst gut (Methode der kleinsten Quadrate) wiedergegeben werden. Dies führt auf die Werte

$$a = 1,931$$

$$b = 0,416.$$

Die maximale Abweichung beträgt dabei im Energiebereich $2 \leq U \leq 20$ weniger als 4,5% (vgl. Fig. 2).

Für kleine Einschußenergien ($1,04 \leq U \leq 12$) liefert eine von LOTZ¹ angegebene Funktion eine bessere Approximation der Ionisierungsfunktion von Aluminium als Gl. (3). In etwas geänderter Form (nur der relative Verlauf wird benutzt) lautet diese Funktion

$$Q_{rel}(U) = \alpha \frac{\ln(U)}{U} [1 - \beta e^{-\gamma(U-1)}]. \quad (4)$$

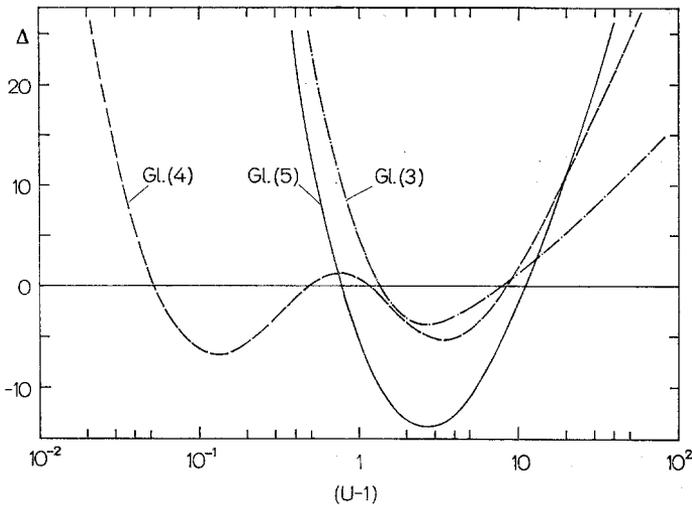


Fig. 2. Prozentuale Abweichung $\Delta (= 100 \cdot (Q_{\text{genähert}} - Q_{\text{Burhop}}) / Q_{\text{Burhop}})$ der mit den Näherungsformeln berechneten relativen K-Ionisierungsquerschnitte von den nach BURHOP für Aluminium berechneten Werten

Die Anpassung an die für Aluminium nach Gl. (1) berechneten relativen Werte liefert für die Konstanten:

$$\alpha = 2,649$$

$$\beta = 0,803$$

$$\gamma = 2,408.$$

Die Abweichung beträgt hier im Energiebereich $1,04 \leq U \leq 12$ maximal 6,3%.

Wesentlich schlechter beschreibt die folgende einfache Formel den relativen Ionisierungsquerschnitt:

$$Q_{\text{rel}} = A \cdot \frac{\ln(U)}{U^N}. \quad (5)$$

Die Anpassung an die Werte für Aluminium ergibt

$$A = 2,225$$

$$N = 0,943.$$

Die maximale Abweichung beträgt hier 14% im Energiebereich $1,5 \leq U \leq 20$.

Um den von der Ordnungszahl Z abhängigen Anteil der Näherungsfunktion (2) zu erhalten, werden die Wirkungsquerschnitte des Maximums (für $U=3$) durch eine analytische Funktion approximiert. Als

geeignet erweist sich dabei die Funktion

$$G(Z) = \frac{d}{(Z-f)^n} \quad (6)$$

Für den Bereich $4 \leq Z \leq 28$ beträgt die maximale Abweichung $6,2\%$, wenn man für die Konstanten die Werte

$$d = 4,279 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$$

$$f = 0,190$$

$$n = 4,152$$

verwendet.

Die nach BURHOP berechneten Wirkungsquerschnitte für die Ionisierung der *K*-Schale von Aluminium durch Elektronenstoß lassen sich also in recht guter Näherung durch die angegebenen Funktionen approximieren.

Wegen der geringen *Z*-Abhängigkeit der relativen Ionisierungsfunktion kann die für Aluminium gewonnene Näherungsfunktion für den Wirkungsquerschnitt auch für andere Elemente benutzt werden. Verwendet man z.B. die Gln. (4) und (6), so beträgt die maximale Abweichung zwischen Burhop-Werten und Näherungswerten nur $6,5\%$ für die Bereiche $4 \leq Z \leq 28$ und $1,04 \leq U \leq 12$.

Die von LOTZ angegebene Formel hat gegenüber der von WORTHINGTON und TOMLIN die Vorzüge: 1. Sie gibt in der Nähe der Schwelle die nach Burhop berechneten Werte recht gut wieder, 2. bei höheren Einschubenergien liefert sie näher am Experiment liegende Werte (GLUPE und MEHLHORN⁹, POCKMAN, WEBSTER, KIRKPATRICK und HARWORTH¹⁰, SMICK und KIRKPATRICK¹¹, ZIEGLER¹²), 3. für weiterführende Rechnungen in Anwendungen ist sie eventuell besser geeignet.

Der Deutschen Forschungsgemeinschaft gilt unser Dank für die zur Verfügung gestellte Rechenzeit auf der ELECTROLOGICA X8 des Rechenzentrums der Universität Würzburg.

9. GLUPE, G., and W. MEHLHORN: Phys. Letters A **25**, 274 (1967).
10. POCKMAN, L. R., D. L. WEBSTER, P. KIRKPATRICK, and K. HARWORTH: Phys. Rev. **71**, 330 (1947).
11. SMICK, A. E., and P. KIRKPATRICK: Phys. Rev. **67**, 153 (1945).
12. ZIEGLER, A.: Diss. Würzburg 1969.

Prof. Dr. W. HINK
 Dipl.-Phys. J. JESSENBERGER
 Dr. A. ZIEGLER
 Physikalisches Institut
 der Universität Würzburg
 Experimentelle Physik II
 8700 Würzburg, Röntgenring 8