

## Projekt nr C.8.1

# Komputerowa symulacja doświadczenia Rutherforda (rozpraszanie cząstki klasycznej na potencjale centralnym)

(na podstawie - S. E. Koonin "Introduction to Computational Physics")

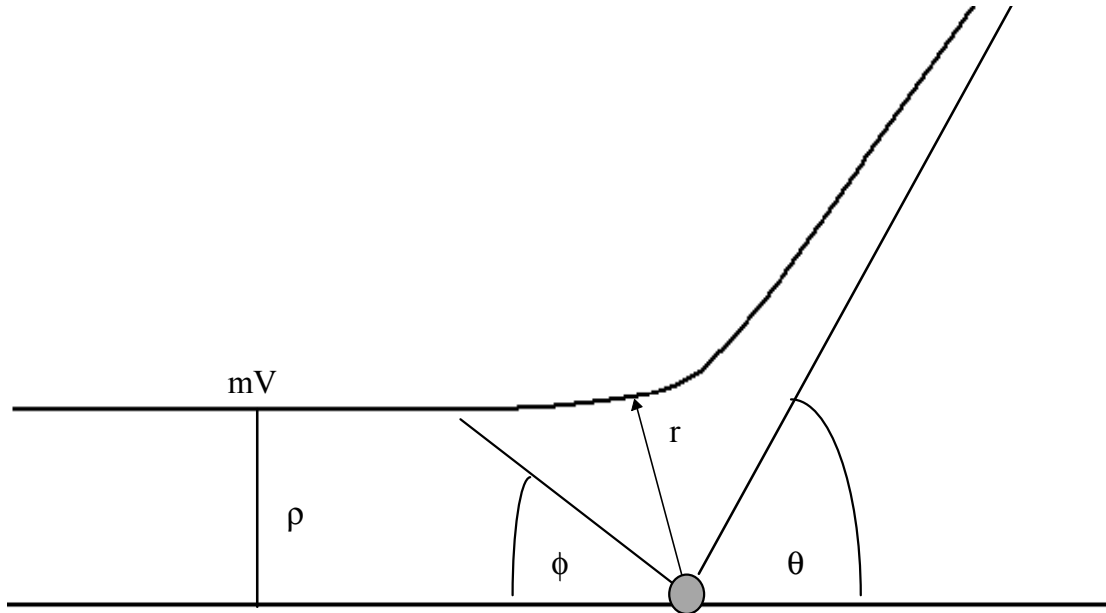
## Wprowadzenie

Cząstka o masie  $m$  i pewnej prędkości początkowej  $U_0$ , poruszająca się w trójwymiarowej przestrzeni napotyka na swojej drodze nieskończenie ciężkie centrum oddziaływujące z nią potencjałem o symetrii sferycznej  $V(r)$ . Tor cząstki ulega odchyleniu od pierwotnego kierunku o kąt  $\Theta$  (mierzony w dużej odległości od centrum), patrz rys. 1. Kąt  $\Theta$ , nazywany kątem rozproszenia, zależy od potencjału  $V(r)$ , energii początkowej cząstki i tzw. parametru rozpraszania  $\rho$ .

Doświadczalnie wyznacza się tzw. różniczkowy przekrój czynny na rozpraszanie, definiowany wzorem:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\rho}{\sin\theta} \left| \frac{d\rho}{d\theta} \right| \quad (1)$$

gdzie  $\sigma$  jest przekrojem czynnym, a  $d\Omega$  elementarnym kątem bryłowym o rozwartości  $\Theta$  [1]. Występująca w tym wyrażeniu zależność kąta rozproszenia od parametru rozpraszania  $\Theta(\rho)$  dla danego potencjału  $V(r)$  stanowić będzie przedmiot naszych rachunków.



Rys. 1.

### Rachunki analityczne

Korzystamy z prawa zachowania energii, dla nieskończenie dużych  $r$  zakładamy  $V(r)=0$ , oraz prędkość  $U=U_0$ .

$$E = \frac{m\vec{U}_0^2}{2} = \frac{m\vec{U}^2}{2} + V(r) = \frac{m}{2} \left( \frac{d\vec{r}}{dt} \right)^2 + V(r) \quad (2)$$

zapisujemy je we współrzędnych biegunowych:

$$E = \frac{m}{2} [\dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2] + V(r) \quad (3)$$

Z prawa zachowania krętu mamy:

$$L = m U_0 \rho = m \rho \sqrt{\frac{2E}{m}} = \rho \sqrt{2mE} \quad (4)$$

Ponieważ we współrzędnych biegunowych:

$$L = mr^2 \dot{\phi} \quad (5)$$

możemy wyliczyć:

$$\dot{\phi} = \frac{\rho}{r^2} \sqrt{2 \frac{E}{m}} \quad (6)$$

i wstawić do (3). Otrzymujemy:

$$E = \frac{m}{2} \left[ \dot{r}^2 + \frac{2\rho^2 E}{mr^2} \right] + V(r) \quad (7)$$

z (7) wyliczamy:

$$\dot{r} = \sqrt{\frac{2}{m} \left( E \left( 1 - \frac{\rho^2}{r^2} \right) - V(r) \right)} \quad (8)$$

z drugiej strony pochodną po czasie w (8) można zamienić na pochodną po  $\phi$ :

$$\dot{r} = \frac{dr}{dt} = \frac{dr}{d\phi} \frac{d\phi}{dt} = \frac{dr}{d\phi} \dot{\phi} = \frac{\rho}{r^2} \sqrt{2 \frac{E}{m}} \frac{dr}{d\phi} \quad (9)$$

z (8) i (9) otrzymujemy:

$$\frac{dr}{d\phi} = \frac{1}{\sqrt{E}} \frac{r^2}{\rho} \left[ E \left( 1 - \frac{\rho^2}{r^2} \right) - V(r) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (10)$$

lub

$$d\phi = \sqrt{E} \frac{\rho}{r^2} \left[ E \left( 1 - \frac{\rho^2}{r^2} \right) - V(r) \right]^{\frac{1}{2}} dr \quad (11)$$

dzięki (11) wyliczamy  $\Theta$ :

$$\theta = \pi - 2 \int_{r_0}^{\infty} dr \frac{\rho}{r^2} \left[ 1 - \frac{\rho^2}{r^2} - \frac{V(r)}{E} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (12)$$

gdzie  $r_0$  wyliczamy z warunku  $dr/d\phi=0$  dla  $r_0$ , co dzięki (10) daje warunek:

$$E \left( 1 - \frac{\rho^2}{r_0^2} \right) - V(r_0) = 0 \quad (13)$$

$\Theta$  wyliczona z (12) jest naturalnie funkcją parametru rozpraszania  $\rho$ , ale również zależy od  $E$  i potencjału  $V(r)$ .

Całkę (12) i warunek (11) udaje się wyliczyć analitycznie tylko dla szczególnych przebiegów potencjału  $V(r)$ . Na ogół rozwiązujemy je numerycznie. Problem ten stanowi istotę tego ćwiczenia.

### Procedura numeryczna

Naszym zadaniem jest wykonanie całki (12). Ponieważ górna granica całkowania jest  $\infty$ , należałoby całkę obciąć przy pewnym  $r_{\max}$ , dla którego funkcja podcałkowa jest odpowiednio mała. Jednakże, ponieważ funkcja podcałkowa dla dużych  $r$  jest stosunkowo słabo malejąca ( $1/r^2$ ), bezpośrednio całkowanie numeryczne z obcięciem jest mało efektywne. Dla usprawnienia procedury posłużymy się następującym trikiem:

Założmy, że potencjał  $V(r)$  zmierza szybko do zera dla dużych  $r$  i dla pewnego  $r_{\max}$  można go zaniedbać. Przybliżamy go zatem nowym potencjałem  $U(r) = V(r)$  dla  $r < r_{\max}$  i  $U(r)=0$  dla  $r > r_{\max}$ . Wtedy:

$$\theta = \pi - 2\rho \int_{r_0}^{r_{\max}} dr \frac{1}{r^2} \left( 1 - \frac{\rho^2}{r^2} - \frac{V(r)}{E} \right)^{\frac{1}{2}} - 2\rho \int_{r_{\max}}^{\infty} dr \frac{1}{r^2} \left( 1 - \frac{\rho^2}{r^2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (14)$$

z drugiej strony, jeżeli potencjał  $V(r)$  byłby równy 0 dla dowolnego  $r$ ,  $r_0$  wyliczone z (13) jest równe  $\rho$ , a  $\Theta$  z (12) powinno być równe 0 (brak rozpraszania).

Zatem:

$$\pi = -2\rho \int_{\rho}^{\infty} \frac{dr}{r^2} \left( 1 - \frac{\rho^2}{r^2} \right)^{\frac{1}{2}} = -2\rho \left( \int_{\rho}^{r_{\max}} \frac{dr}{r^2} \left( 1 - \frac{\rho^2}{r^2} \right)^{\frac{1}{2}} + \int_{r_{\max}}^{\infty} \frac{dr}{r^2} \left( 1 - \frac{\rho^2}{r^2} \right)^{\frac{1}{2}} \right) \quad (15)$$

kombinując (14) i (15) uzyskujemy:

$$\theta = 2\rho \left[ \int_{\rho}^{r_{\max}} \frac{dr}{r^2} \left(1 - \frac{\rho^2}{r^2}\right)^{-\frac{1}{2}} - \int_{r_0}^{r_{\max}} \frac{dr}{r^2} \left(1 - \frac{\rho^2}{r^2} - \frac{V(r)}{E}\right)^{-\frac{1}{2}} \right] \quad (16)$$

### Rachunek porównawczy - testowanie poprawności procedury.

W każdym problemie rachunkowym korzystne jest przetestowanie opracowanej metody w przypadku uproszczonym, granicznym lub możliwym do policzenia inną metodą. W naszym problemie numerycznym (wyliczenie całki (12) lub (16)) do testowania metody może posłużyć nam potencjał  $V(r)$ , dla którego całkę (12) potrafimy wyliczyć analitycznie. Takim potencjałem jest:

$$V(r) = \frac{\alpha}{r^2} \quad (17)$$

I. Potencjał (17) wstawiamy do (13) w celu wyliczenia  $r_0$ .

$$E \left(1 - \frac{\rho^2}{r_0^2}\right) - \frac{\alpha}{r_0^2} = 0 \quad (18)$$

jeżeli podstawimy  $e\rho^2 + a = b$ , otrzymujemy:

$$E - \frac{\beta}{r_0^2} = 0 \Rightarrow r_0 = \sqrt{\frac{\beta}{E}} \quad (19)$$

II. Wstawiając to do (12) otrzymujemy:

$$\theta = 2\rho \left[ \int_{\rho}^{r_{\max}} \frac{dr}{r^2} \left(1 - \frac{\rho^2}{r^2}\right)^{-\frac{1}{2}} - \int_{r_0}^{r_{\max}} \frac{dr}{r^2} \left(1 - \frac{\rho^2}{r^2} - \frac{V(r)}{E}\right)^{-\frac{1}{2}} \right] \quad (20)$$

zmieniamy zmienną całkowania:

$$\frac{\beta}{E} \frac{1}{r^2} = z^2, \quad r = \sqrt{\frac{E}{\beta}} \frac{1}{z}, \quad dr = -\sqrt{\frac{E}{\beta}} \frac{dz}{z^2} \quad (21)$$

Otrzymujemy:

$$\theta = \pi + 2\rho \sqrt{\frac{E}{\beta}} \int_1^0 dz \sqrt{1-z^2} = \pi - 2\rho \sqrt{\frac{E}{\beta}} \arcsin(z) \Big|_1^0 = \pi - 2\rho \sqrt{\frac{E}{\beta}} \frac{\pi}{2} = \pi \left(1 - \rho \sqrt{\frac{E}{\beta}}\right) \quad (22)$$

Po rozszyfrowaniu podstawienia (19) otrzymujemy:

$$\theta = \pi \left(1 - \rho \sqrt{\frac{E}{\alpha + E\rho^2}}\right) = \pi \left(1 - \frac{1}{\sqrt{\frac{\alpha}{E\rho^2} + 1}}\right) \quad (23)$$

(Łatwo zauważyć, że dla  $\alpha$  zmierzającego do 0,  $\Theta$  również dąży do zera, czego oczekujemy.)

## Zadania do wykonania

Przygotować projekt umożliwiający dyskusję rozpraszania cząstek oddziaływujących ze sobą poprzez potencjał Lennarda-Jonesa opisujący w przybliżeniu oddziaływanie międzyatomowe w molekułach dwuatomowych (np. O<sub>2</sub>).

$$V(r) = 4V_0 \left[ \left(\frac{\alpha}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\alpha}{r}\right)^6 \right] \quad (24)$$

Projekt powinien zawierać program liczący zależność kąta rozproszenia od parametru rozproszenia  $\Theta(\rho)$  dla wczytywanej z klawiatury energii cząstki  $E$ , parametrów potencjału  $V_0$  i  $\alpha$ , oraz wyboru punktów  $\rho$ .

Na wyjściu znaleźć się powinna zależność  $\Theta(\rho)$

- w postaci tabelki
- w postaci wykresu.

## Wskazówki metodyczne

- Projekt wymaga wykorzystania dwóch procedur numerycznych, które powinny być osobno przygotowane i wstępnie przetestowane.
  1. Rozwiązanie równania (13) w celu wyliczenia  $r_0$  (program na szukanie zer funkcji jednej zmiennej  $f(x) = 0$ )
  2. Wykonanie całki (14)
- Uwaga: Dla potencjału Lennarda - Jonesa, występującą w (14) górną granicę całkowania wystarczy przyjąć  $r_{\max} = 3\alpha$ .
- Po przygotowaniu i połączeniu obu procedur w jeden program testujemy projekt przy pomocy potencjału  $V(r) = \alpha/r^2$ . ( W tym przypadku  $r_{\max}$  należy dobrać inaczej!)
- Wynik testu porównujemy z wynikiem (22).
- Język programowania dowolny, można korzystać z dowolnych programów bibliotecznych.

## **Literatura**

- [1] L. Landau, „Mechanika Teoretyczna”
- [2] S. E. Koonin "Introduction to Computational Physics"