Proyecto Computacional: Dispersión clásica por potencial central

Aplicación de Derivadas, Búsqueda de Raíces e Integrales Numéricas

Basado en el libro “Computational Physics”, de Steven E. Koonin

Teoría General

La **sección eficaz diferencial** de dispersión $\sigma(\theta)$ se define como la probabilidad de detectar una partícula incidente en un determinado ángulo θ.

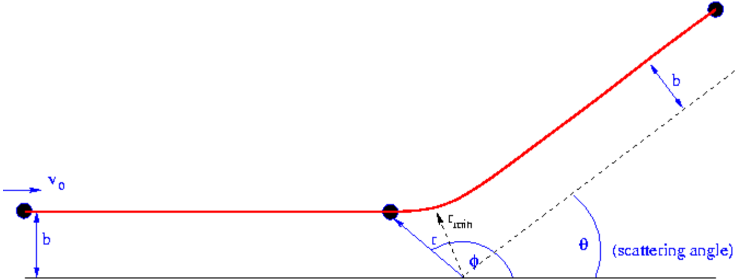
Si el flujo de partículas I incide con un parámetro de impacto b, entonces la cantidad de partículas que se detectarán en un ángulo sólido $\Omega = 2\pi \sin(\theta)\, d\theta$ con probabilidad $\sigma(\theta)$ es

$$2\pi I b\, db = I \sigma(\theta)\, d\Omega \ , \tag{1}$$

y de aquí se deriva la sección eficaz diferencial como

$$\sigma(\theta) = \frac{b}{\sin(\theta)} \left| \frac{db}{d\theta} \right| \ . \tag{2}$$

Teoría General



Cantidades relevantes en los cálculos de dispersión de una partícula por un potencial central.

Evaluación numérica de la sección eficaz

Si la interacción entre la partícula incidente y el blanco se describe por un potencial con simetría esférica $U(r)$, el momento angular y la energía total se conservan. Formalmente

$$l = m\,b\,v_0 = m\,r^2\,\frac{d\phi}{dt} \tag{3}$$

y

$$E = \frac{1}{2}mv_0^2 = \frac{1}{2}m\left(\frac{dr}{dt}\right)^2 + \frac{l^2}{2mr^2} + U(r)\,. \tag{4}$$

Evaluación numérica de la sección eficaz

Utilizando a r como variable independiente (en lugar de t) en Eq. (3) tenemos

$$\frac{d\phi}{dr} = \frac{d\phi}{dt}\left(\frac{dr}{dt}\right)^{-1} = \frac{b\,v_0}{r^2}\left(\frac{dr}{dt}\right)^{-1}. \qquad (5)$$

Resolviendo $\frac{dr}{dt}$ de Eq. (4) tenemos

$$\frac{d\phi}{dr} = \pm\frac{b}{r^2}\frac{1}{\sqrt{1 - \frac{b}{r^2} - \frac{U(r)}{E}}} \qquad (6)$$

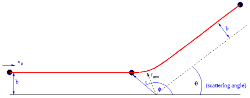
que da una relación entre ϕ y r para un dado b, E y $U(r)$.

(la relación (6) no es trivial, tratar de demostrarla!)

Evaluación numérica de la sección eficaz

En lugar de hacer la integral entre $-\infty$ e $+\infty$, reduciremos los errores numéricos haciendo los siguientes pasos:

1. sabemos que si $r = -\infty$ entonces $\phi = \pi$
2. calculamos la distancia de máxima aproximación r_{min} tal que $\frac{dr}{dt}|_{r_{min}} = 0$
3. sabemos que ϕ es siempre decreciente y tiende a θ
4. resolvemos $\theta = \pi - 2\int_{r_{min}}^{\infty} \frac{d\phi}{dr}\, dr$
5. si el potencial es nulo $U(r) = 0$ entonces la trayectoria es una recta. Reemplazamos $\pi = 2\int_b^{\infty} \frac{b}{r^2} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{b}{r^2}}}\, dr$



Evaluación numérica de la sección eficaz

Teniendo en cuenta todas las suposiciones anteriores

$$\begin{aligned}
\theta &= \pi - 2\int_{r_{min}}^{\infty} \frac{b}{r^2}\frac{1}{\sqrt{1-\frac{b}{r^2}-\frac{U(r)}{E}}}\,dr = \\
&= 2b\left[\int_{b}^{\infty} \frac{1}{r^2\sqrt{1-\frac{b}{r^2}}}\,dr - \int_{r_{min}}^{\infty} \frac{1}{r^2\sqrt{1-\frac{b}{r^2}-\frac{U(r)}{E}}}\,dr\right]
\end{aligned}$$

Evaluación numérica de la sección eficaz

Como última aproximación, hacemos la integral hasta r_{max}, donde el potencial se hace tan chico, que se puede suponer que ambos términos se anulan

$$\theta = 2b\left[\int_b^{r_{max}} \frac{1}{r^2\sqrt{1-\frac{b}{r^2}}}\,dr - \int_{r_{min}}^{r_{max}} \frac{1}{r^2\sqrt{1-\frac{b}{r^2}-\frac{U(r)}{E}}}\,dr\right] \tag{7}$$

Práctica Computacional

El objetivo de esta práctica es realizar un gráfico (semilogarítmico) de $\sigma(\theta)$. En primer lugar vamos a calcular la sección eficaz para un **potencial de Yukawa**

$$U(r) = \frac{Z}{r} e^{-\frac{r}{\alpha}} \tag{8}$$

1. Antes de hacer algún cálculo, bosquejear la solución para bajas y altas energías, y diferentes parámetros de impacto b
2. Graficaremos para $\alpha = 0.1$, $\alpha = 1$ y $\alpha = 10$.
3. En el mismo gráfico mostraremos el resultado para dispersión Coulombiana (fórmula de Rutherford)

$$\sigma(\theta) = \left(\frac{Z}{4\,E}\right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} \tag{9}$$

Práctica Computacional: Ejercicios adicionales

1. Chequear el programa con un potencial cuadrado (repulsivo y atractivo)
2. Calcular la sección eficaz de dispersión para un potencial de Lennard–Jones

$$U(r) = 4U_0 \left[\left(\frac{a}{r} \right)^{12} - \left(\frac{a}{r} \right)^{6} \right] \tag{10}$$

3. Si tu programa funciona correctamente, se debe encontrar para energías $E \leq U_0$ una singularidad en la función de deflexión, $\theta \to -\infty$ para un cierto b_{crit}. Plotear $b_{crit}(E)$.