Janusz Szwabiński
Metody numeryczne II
Lista zadań nr 1

Wyznacz przekrój czynny na rozpraszanie cząstki (patrz opis poniżej) w potencjale Lennarda-Jonesa

$$U(r) = 4U_0 \left[\left(\frac{a}{r} \right)^{12} - \left(\frac{a}{r} \right)^{6} \right] \tag{1}$$

dla energii E z zakresu od $0,1U_0$ do $100U_0$ oraz dla parametrów zderzenia b z zakresu od 0 do $r_{max} = 3a$ (dla $r > r_{max}$ potencjał można traktować jako równy zeru).

Rozpraszanie centralne

Całkowity przekrój czynny na rozpraszanie cząstki w polu centralnym dany jest wzorem

$$\sigma = \int \sigma(\theta) \mathrm{d}\Omega, \tag{2}$$

gdzie $\sigma(\theta)$ to różniczkowy przekrój czynny, czyli prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w elemencie kąta bryłowego $\mathrm{d}\Omega = 2\pi \sin\theta \mathrm{d}\theta$ w otoczeniu kąta rozproszenia θ,

$$\sigma(\theta) = \frac{b}{\sin\theta} \left| \frac{\mathrm{d}b}{\mathrm{d}\theta} \right|. \tag{3}$$

Parametr b to tzw. parametr zderzenia, czyli najmniejsza odległość między cząstką a centrum potencjału, gdy $U(r) = 0$.

W polu centralnym zachowane są moment pędu oraz energia układu:

$$\begin{aligned} L &= mbv_0 = mr^2\dot{\phi}, \\ E &= \frac{m}{2}v_0^2 = \frac{m}{2}\left(\dot{r}^2 + r^2\dot{\phi}^2\right) + U(r), \end{aligned} \tag{4}$$

gdzie r jest współrzędną radialną cząstki, ϕ - kątem biegunowym, a v_0 - prędkością początkową cząstki (patrz rys. 1). Wykorzystując związek

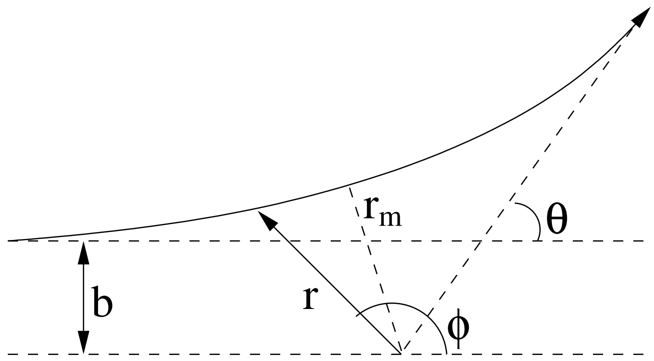
$$\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}r} = \frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}t}\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}r}, \tag{5}$$

z równań (4) otrzymujemy

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

Niech $\Delta\phi$ oznacza zmianę kąta biegunowego przy zmianie r od nieskończoności do jego wartości minimalnej:

$$\Delta\phi = \int_{r_m}^{\infty} \frac{b}{r^2} \frac{\mathrm{d}r}{\sqrt{1 - \frac{b^2}{r^2} - \frac{U(r)}{E}}}, \tag{7}$$



Rysunek 1: Rozpraszanie cząstki w polu centralnym.

gdzie r_m to najmniejsza odległość cząstki od centrum potencjału dla danego toru cząstki. Można pokazać, że r_m dane jest równaniem

$$1 - \frac{b^2}{r_m^2} - \frac{U(r_m)}{E} = 0. \tag{8}$$

Wówczas

$$\theta = \pi - 2\Delta\phi, \tag{9}$$

lub, na mocy równania (7),

$$\theta = 2b \left[\int_b^\infty \frac{b}{r^2} \frac{\mathrm{d}r}{\sqrt{1 - b^2/r^2}} - \int_{r_m}^\infty \frac{b}{r^2} \frac{\mathrm{d}r}{\sqrt{1 - b^2/r^2 - U(r)/E}} \right]. \tag{10}$$