

Simulación: Dispersión Clásica de Partículas

Jhon Jairo Chiliquinga Jácome
Escuela Politécnica Nacional, Facultad de Ciencias
Carrera de Física, Programación Científica
Séptimo Semestre
08 de Junio de 2022

1. Introducción

El presente reporte tiene como objetivo el estudio cuantitativo y cualitativo de los patrones de dispersión de partículas simulados para diferentes valores de energías y parámetros de impacto. Esta dispersión fue causada por un potencial central. El análisis se centró en la distribución angular de partículas resultante y su dependencia con el ángulo de dispersión.

El potencial a usado fue el de Yukawa (ecuación 1), en donde κ y a son constantes. El planteamiento gráfico del problema a resolver se encuentra en la figura 1.

$$V(r) = \frac{\kappa}{r} e^{-r/a}. \quad (1)$$

Inicialmente, la partícula dispersada se caracteriza por un parámetro de impacto b y una energía E . Otro parámetro de interés es la distancia mínima (r_m) que alcanza la partícula con respecto al centro dispersor, la cual puede calcularse recurriendo a la conservación del momento angular y la energía, resultando en la ecuación (2),

$$1 - \frac{b^2}{r_m^2} - \frac{V(r_m)}{E} = 0. \quad (2)$$

Una vez conocida esta distancia mínima, se puede encontrar el ángulo de dispersión mediante la expresión (3). El propósito de la resta de integrales en la ecuación proviene de la naturaleza numérica del cálculo de estas, pues de esta manera se reduce el error computacional,

$$\theta = 2b \left[\int_b^\infty \frac{dr}{r^2 \sqrt{1 - \frac{b^2}{r^2}}} - \int_{r_m}^\infty \frac{dr}{r^2 \sqrt{1 - \frac{b^2}{r^2} - \frac{V(r)}{E}}} \right]. \quad (3)$$

Al momento de realizar este tipo de experimentos no se los hace con una sola partícula, sino con un número considerable de estas. Por otro lado, no se tiene control sobre el parámetro de impacto con el que inciden, con lo cual el ángulo de dispersión no será el mismo para todas ellas. En lugar

de esto se tendrá una distribución de partículas dispersadas en un ángulo sólido ($dN/d\Omega$) caracterizada por el ángulo θ , pues, al ser un potencial central, se tiene una simetría con respecto al ángulo azimutal definido alrededor del eje x de la figura 1.

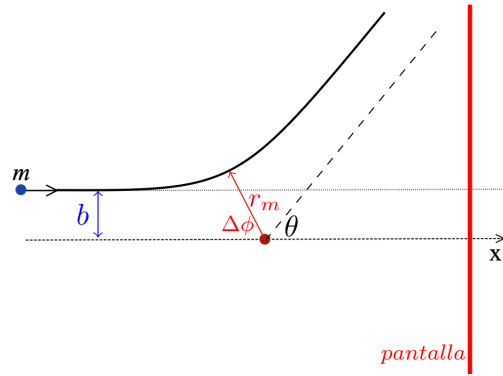


Figura 1: Dispersión de una partícula de masa m debido a un potencial central. b es el parámetro de impacto, r_m la distancia mínima de acercamiento y θ el ángulo de dispersión.

Luego de la dispersión, la posición de las partículas puede ser proyectada en una pantalla con el propósito de poder obtener valores de la distribución antes mencionada.

2. Metodología

El lenguaje de programación usado para simular lo descrito en la introducción fue C++. Con el fin de emplear cálculos numéricos se definió $\kappa = 1$ y $a = 1$ en (1). Con esto, la energía será medida en unidades de κ y la longitud en unidades de a .

Se llevaron a cabo 5 simulaciones con 10^5 partículas cada una. En cada simulación se tomó diferentes valores de la energía inicial E , los cuales fueron $10^{-3}\kappa$, $10^{-2}\kappa$, $10^{-1}\kappa$, 1κ y 10κ . El parámetro de impacto para cada partícula se generó aleatoriamente dentro del rango de $0 - 100a$.

El programa constó de 8 procedimientos y un algoritmo principal, detallados a continuación.

2.1. Procedimientos

Para todos los procedimientos fue necesario introducir un valor de b y de E .

1. *fx*: Evalúa el integrando de la segunda integral de la ecuación (3).
2. *gx*: Define una función para r cuyas raíces cumplen con la ecuación (2).
3. *dgx*: Calcula la derivada de la función anterior.
4. *root*: Encuentra la raíz de $gx(r)$, es decir, r_m , con el método de Newton-Raphson.
5. *integral*: Calcula una de las integrales de (3) (dependiendo de los parámetros introducidos) por medio de la regla de Simpson.
6. *theta*: Calcula θ de la ecuación (3) obteniendo el resultado de las integrales con *integral*.
7. *plotconf*: Envía comandos al programa Gnuplot para definir los parámetros del gráfico de las colisiones en la pantalla.
8. *distribution*: Cuenta el número de partículas que se dispersaron entre un ángulo θ y $\theta + 0,01$ con un rango desde 0 hasta 1. Dividiendo este resultado para $\sin(\theta)$ se pudo extraer la distribución de partículas por ángulo sólido.

2.2. Algoritmo

Se introdujo como único parámetro inicial para iniciar el programa el valor de energía. Dentro del algoritmo iterativo se generó el parámetro de impacto b de forma aleatoria en el rango mencionado y, junto con la energía, se lo utilizó para calcular r_m y el ángulo de dispersión θ con la ayuda de los procedimientos detallados en la subsección anterior.

Con cada ángulo calculado se encontró la posición de la partícula en la pantalla haciendo uso de un ángulo azimutal generado aleatoriamente y esta posición fue guardada en un archivo para su posterior uso. Se utilizó una generación aleatoria por la simetría del problema detallada en la introducción.

Este proceso se realizó para las 10^5 partículas. Cada 100 iteraciones se graficó la posición en la pantalla de la partícula dispersada con el programa Gnuplot.

Con todas las posiciones y ángulos encontrados se pudo calcular la distribución de partículas en función de θ usando el procedimiento “*distribution*” y estos datos se los guardó en un archivo para su correspondiente análisis. Además, se obtuvo una visualización del patrón de dispersión.

Este proceso se repitió para los 5 valores de energía mencionados obteniendo 5 distribuciones.

Con los gráficos de los patrones de dispersión se pudo hacer un análisis cualitativo de los mismos, el cual consistió en detectar las diferencias visuales entre estos. Para un mayor contraste se escogieron los correspondientes a $E = 10^{-3}\kappa$ y $E = 10\kappa$.

Finalmente, usando el programa Gnuplot, para cada simulación se realizó una regresión de la forma

$$\ln \left| \frac{dN}{d\Omega} \right|_i = a_i + b_i \ln \left(\sin \left(\frac{\theta}{2} \right) \right), \quad (4)$$

en donde a_i y b_i son los parámetros de regresión e i hace referencia a la i -ésima simulación.

3. Resultados

En las figuras 3 y 4 se presentan los patrones de dispersión correspondientes a colisiones de partículas con $E = 10^{-3}\kappa$ y $E = 10\kappa$, respectivamente. Se pudo observar una diferencia marcada entre estos dos casos en el centro de la figura, es decir, en el eje del centro dispersor.

Para el patrón correspondiente a la menor energía se pudo encontrar que las partículas no lograron impactar en el centro de la pantalla, en cambio, con la energía mayor se tuvo una gran concentración en esta zona. Este comportamiento puede ser explicado con la ayuda de la ecuación (3). El efecto del potencial en la dispersión está presente en el cociente $V(r)/E$, por lo cual, mientras más energía tengan las partículas el efecto del potencial en la dispersión será cada vez menor.

Entonces, cuando $E = 10\kappa$ las partículas tienen la suficiente energía como para tender a conservar su trayectoria, por lo tanto, para parámetros de impacto cercanos a cero, las partículas no se ven muy dispersadas. Por el contrario, para $E = 10^{-3}\kappa$, las partículas con b bajo no tienen suficiente energía comparada con la acción del potencial, en consecuencia, su trayectoria es afectada y no llegan al centro de la pantalla.

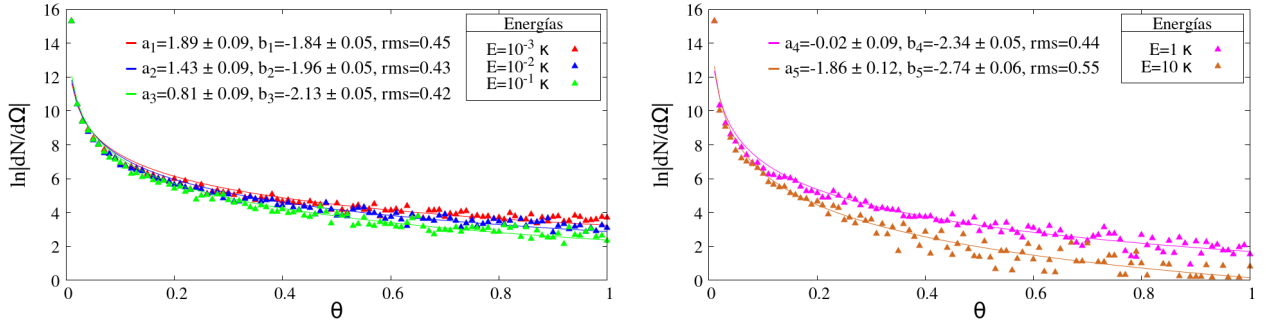


Figura 2: Logaritmo de la distribución angular del número de partículas versus el ángulo de dispersión. Cada conjunto de datos correspondió a diferentes valores de energía y para cada uno se presentaron los valores de los parámetros de regresión y el valor rms de la misma.

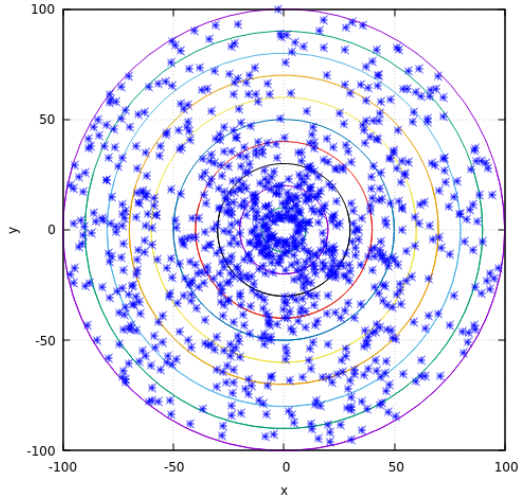


Figura 3: Patrón de dispersión de partículas con energía $E = 10^{-3}\kappa$. Se presentan 1000 colisiones de partículas para no saturar el gráfico.

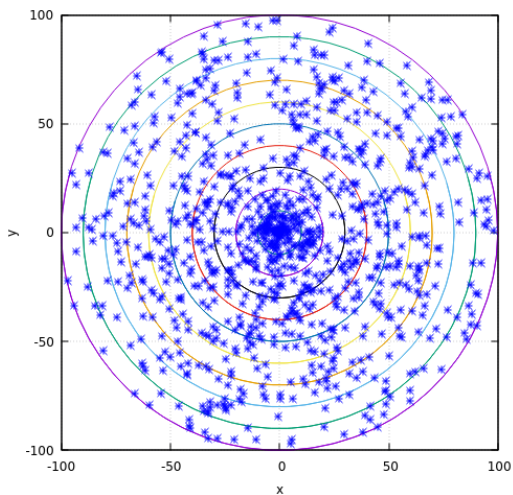


Figura 4: Patrón de dispersión de partículas con energía $E = 10\kappa$. Se presentan 1000 colisiones de partículas para no saturar el gráfico.

Posteriormente, se graficaron los datos de las distribuciones obtenidas para las diferentes ener-

gías y las regresiones realizadas de acuerdo con la ecuación (4) (figura 2). Los valores rms de las regresiones fueron pequeños, con lo cual se puede considerar que el modelo se ajustó satisfactoriamente a los datos analizados. Se observó que mientras mayor energía tenían las partículas, se tenía un menor número de estas que se dispersaban con ángulos grandes. Esto está en concordancia con el análisis cualitativo de los patrones de dispersión.

Además, se observó que el valor absoluto del parámetro de regresión b_i iba aumentando con forme se aumentaba la energía. Por la forma de la ecuación de ajuste, este parámetro está relacionado con el descenso de la gráfica debido a la energía, siendo más pronunciado con mayor $|b_i|$.

Finalmente, se observó que, mientras se elevaba el valor de la energía, los valores encontrados para la distribución eran más dispersos para ángulos cercanos a 1. En cambio para energías bajas, estos valores estaban más concentrados. Esto pudo deberse a que a energías altas, como ya se mencionó, no existen muchas partículas que sean dispersadas con θ grande. Esto pudo influenciar en los cálculos de $|dN/d\Omega|$, pues no se tuvieron suficientes datos para que los cálculos estadísticos tengan tanta validez como aquellos hechos a θ bajo. Esto está en concordancia con lo observado para energías bajas, pues al tener varias partículas que se podían dispersar con un ángulo menor, los cálculos estadísticos tuvieron mayor validez en ese rango.

4. Conclusiones

A través del análisis cualitativo y cuantitativo de los resultados de la simulación se pudo encontrar, con un buen grado de confiabilidad, que la dependencia de la distribución de partículas por ángulo sólido ($dN/d\Omega$) sigue la ley descrita por la ecuación (4). Esto se pudo corroborar con los va-

lores de *rms* para cada grupo de datos.

Además, se observó la influencia de la energía inicial de las partículas sobre su distribución. Mientras mayor la energía inicial, menor era el nú-

mero de partículas dispersadas con ángulos mayores, esto se vio reflejado en el aumento del parámetro $|b_i|$.