

Dispersión de electrones y positrones por un átomo de hidrógeno

—Solución numérica—

Libardo Ruz Ruz*, Neil Torres López**, Pablo Viloría Molinares***

Resumen

Se supone que electrones o positrones son disparados con una energía determinada hacia un átomo de hidrógeno fijo en el sistema de laboratorio. Las partículas mencionadas serán dispersadas según su carga, parámetro de impacto y su energía. Se resuelven las ecuaciones de movimiento y se muestran sus gráficas por medio de un programa de computador.

Introducción

Los métodos computacionales tienen su propia identidad, lo cual permite que sean aplicables a un rango amplio de problemas de cualquier procedimiento analítico. En este caso utilizamos la modelación de un problema físico a nivel microscópico que ofrece la oportunidad de chequear directamente las hipótesis físicas.

El problema de la dispersión de electrones o positrones por un átomo de H. lo analizamos utilizando las leyes de la mecánica clásica para el movimiento en un plano, llegando a un sistema de ecuaciones diferenciales que se resuelven por el método numérico de Ruge-Kutta de orden cuatro. Luego, utilizando el lenguaje de programación Fortran 77, se presenta la solución numérica del problema. Así mismo, con el programa Gnuplot se grafican

las soluciones, que representan las trayectorias de las partículas cuando inciden y son dispersadas. Por último, se hace un análisis de las gráficas a la luz de la mecánica clásica.

1. Descripción del problema

El átomo de H consta de un núcleo con carga e , apantallado por un electrón; éste origina alrededor del núcleo una distribución de carga uniforme cuyo radio es R_0 (ver figura 1).

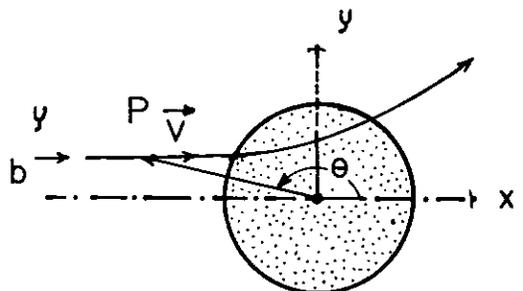


Figura 1. Dispersión de un positrón por un átomo de hidrógeno
Observe el parámetro de impacto

* Licenciado en Física y Matemáticas. Adelanta actualmente Especialización en Ciencias Físicas.

** Licenciado en Física y Matemáticas. Adelanta actualmente Especialización en Ciencias Físicas.

*** Licenciado en Física y Matemáticas. Adelanta actualmente Especialización en Ciencias Físicas.

Nota: R_0 es un radio de la primera órbita del electrón en el átomo de H, según la teoría de Bohr, y $e = 1.602 \times 10^{-19} \text{ c}$

2. Ecuaciones de movimiento y consideraciones de energía

2.1. Análisis dinámico

El campo eléctrico debido al átomo de H, en cualquier punto de vector de posición r , respecto al centro, es la suma vectorial del campo del protón más el campo de la distribución de carga creada por el electrón. El campo del protón en cualquier punto es $\vec{E}_p = (ke/r^3)\vec{r}$; mientras que el campo debido al electrón $\vec{E}_e = (-ke/r^3)\vec{r}$ si $r < R_0$. Con esto tenemos que el campo eléctrico del átomo es:

$$\vec{E} = \vec{0} \text{ si } r \geq R_0 \quad \text{Ec. 1}$$

$$\vec{E} = ke \left(\frac{\vec{r}}{r^3} - \frac{\vec{r}}{R_0^3} \right) \text{ si } r < R_0 \quad \text{Ec. 2}$$

Si una partícula con carga q y masa m entra en este campo, la fuerza eléctrica que actúa sobre ella está dada por:

$$\vec{F} = q\vec{E} = kqe \left(\frac{\vec{r}}{r^3} - \frac{\vec{r}}{R_0^3} \right), \text{ si } r < R_0 \quad \text{Ec. 3}$$

$$\vec{F} = 0, \text{ si } r \geq R_0 \quad \text{Ec. 4}$$

Si la partícula es un positrón, la ecuación anterior se puede normalizar en un sistema de unidades en donde la unidad de longitud es R_0 , la unidad de masa es igual a la masa en reposo del electrón, la unidad de carga es e , la unidad de energía es $ke^2/R_0 = 13.6 \text{ eV}$. En estas condiciones las ecuaciones 3 y 4 pueden ser reescritas como sigue:

$$\vec{F} = \left(\frac{\vec{r}}{r^3} - \vec{r} \right), \text{ si } r < 1 \quad \text{Ec. 5}$$

$$\vec{F} = 0, \text{ si } r \geq 1 \quad \text{Ec. 6}$$

2.2. Energía potencial eléctrica y potencial efectivo

La energía potencial eléctrica, o simplemente el potencial eléctrico, para r mayor o igual que 1 debe ser constante porque F es cero en esta región; esto es, $V(r) = C_1$, que si hacemos $V(1) = 0$, entonces $C_1 = 0$ y podemos escribir:

$$V(r) = 0 \quad r \geq 1 \quad \text{Ec. 7}$$

Para $r < 1$

$$V = - \int \vec{F} \cdot d\vec{r} + C_2 = - \int \left(\frac{\vec{r}}{r^3} - \vec{r} \right) \cdot d\vec{r} + C_2$$

Puesto que $V(1) = 0$, entonces $0 = 1 + 1/2 + C_2$ y $C_2 = -1.5$

Con esto obtenemos:

$$V(r) = \frac{1}{r} + \frac{r^2}{2} - 1.5 \quad \text{Ec. 8}$$

La segunda ley de Newton ($\vec{F} = m \ddot{\vec{r}}$, con $m = 1$) nos permite volver a escribir las ecuaciones 5 y 6 de la siguiente forma:

$$\vec{F} = \ddot{\vec{r}} = \left(\frac{\vec{r}}{r^3} - \vec{r} \right) \text{ si } r < 1 \quad \text{Ec. 9}$$

$$\vec{F} = \ddot{\vec{r}} = 0 \text{ si } r \geq 1 \quad \text{Ec. 10}$$

Si tenemos en cuenta que $F(r) = -dv/dr$, y además que la aceleración radial en coordenadas polares (r, θ) es $a_r = \ddot{r} - \dot{\theta}^2 r$, la

expresión de la segunda ley de Newton, $F(r) = ma_r$, nos conlleva a la siguiente ecuación:

$$F(r) = m(\ddot{r} - \theta^2 r) = -\frac{dV}{dr}$$

que puede también convertirse en la que sigue

$$m\ddot{r} = -\frac{dV}{dr} + m\theta^2 r, \quad r < 1 \quad \text{Ec. 11}$$

Escribiremos la ecuación 11 sólo en función de r . Con tal fin tenemos en cuenta que el momento angular, \bar{L} , es constante y lo podemos calcular en cualquier punto. Por ejemplo, en el punto P de la figura 1, donde:

$\bar{L} = \bar{r} \times \bar{p} = m\bar{r} \times \bar{v}$ en función de los vectores unitarios \hat{r} y $\hat{\theta}$, $v = r\dot{\theta}\hat{\theta}$ con lo que puede expresarse que,

$$L = mr^2\dot{\theta} \quad \text{Ec. 12}$$

Por otra parte $L = mvr \sin \theta$, o sea

$$L = mrv \quad \text{Ec. 13}$$

Si el positrón es disparado en un punto tal que $r > 1$, su energía inicial es puramente cinética y $v = \sqrt{2E/m}$. Al sustituir este valor en la ecuación 13, ésta adopta la siguiente forma:

$$L = b\sqrt{2mE} \quad \text{Ec. 14}$$

Si de la ecuación 12 despejamos θ y llevamos su valor a la ecuación 11, tenemos que:

$$m\ddot{r} = -\frac{dV}{dr} + \frac{L^2}{mr^3} \quad \text{ésta también puede ser escrita así:}$$

$$m\ddot{r} = -\frac{d}{dr} \left(V + \frac{L^2}{2mr^2} \right) \quad \text{Ec. 15}$$

La ecuación anterior muestra que el problema original se puede tratar como si fuera el movimiento unidimensional de una partícula, descrito por medio de una variable r , bajo la acción de una fuerza $F'(r)$ que deriva del llamado potencial efectivo

$$V' = V + \frac{L^2}{2mr^2} \quad \text{Ec. 16}$$

Combinando las ecuaciones 8, 14 y 16 se obtiene:

$$V' = \frac{1}{r} + \frac{r^2}{2} - 1.5 + \frac{Eb^2}{r^2} \quad \text{Ec. 17}$$

Las ecuaciones aquí obtenidas se han deducido para un positrón, pero pueden ser adaptadas para el caso de un electrón, si cambiamos de signo al miembro derecho de las ecuaciones 5, 6, 7, 8, 9 y 10, ya que el electrón tiene carga -6 . Por ejemplo, el potencial efectivo para el electrón es:

$$V' = \frac{1}{r} - \frac{r^2}{2} - 1.5 + \frac{Eb^2}{r^2} \quad \text{Ec. 18}$$

2.3. Ecuaciones diferenciales a integrar

Si hacemos los cambios $t = x$, $x = Y1$, $y = Y2$, $x = Y3$ y $y = Y4$, se obtienen las ecuaciones:

$$\frac{dY_1}{dx} = Y_3 \quad \text{Ec. 19}$$

$$\frac{dY_2}{dx} = Y_4 \quad \text{Ec. 20}$$

Por otra parte, la ecuación 9, para $r < 1$, conduce a las siguientes ecuaciones:

$$\frac{dY_3}{dx} = \frac{Y_1}{r^3} - Y_1 \quad \text{Ec. 21}$$

$$\frac{dY_4}{dx} = \frac{Y_2}{r^3} - Y_2 \quad \text{Ec. 22}$$

Y la ecuación 10, para $r \geq 1$, conlleva a:

$$\frac{dY_3}{dx} = 0 \quad \text{Ec. 23}$$

$$\frac{dY_4}{dx} = 0 \quad \text{Ec. 24}$$

Las expresiones de la 19 a la 24 son las ecuaciones diferenciales que rigen el movimiento del positrón y cuya integración se llevará a cabo a través de un programa de computador que usa el método numérico de Runge-Kutta de cuarto orden.

3. Análisis de resultados

La figura 2 muestra tres trayectorias para un positrón disparado con una energía $E=0.5$, parámetro de impacto 0.1, 0.5 y 0.9. Se observa que el centro de fuerza actúa repulsivamente en este caso y que el ángulo de dispersión disminuye a medida que aumenta el parámetro de impacto. En

este caso no se presentan trayectorias que forman lazos, hecho que se puede explicar observando que las curvas de potencial efectivo no forman pozos (ver figura 3).

La figura 4 es un caso análogo al anterior, pero el centro de fuerza es atractivo, debido a que la partícula incidente es un electrón. Se nota que para parámetros de impactos pequeños el electrón trata inicialmente de orbitar alrededor del núcleo, pero logra salir del átomo, hecho que es de esperar debido a que la energía es positiva. En la medida en que el parámetro de impacto aumenta, la trayectoria del electrón defleca, pero no alcanza a dar una vuelta alrededor del núcleo.

Un caso especial se presenta en la figura 5, que corresponde a la dispersión de un electrón con energía de 0.25 y parámetros de impacto cercanos a 0.9. Se ve que el electrón forma lazos alrededor del núcleo con parámetro de impacto de 0.9 y sólo se desvía ligeramente con parámetros superiores a 0.9. Esto también se puede apreciar con las curvas de potencial efectivo mostradas en la figura 6.

El programa utilizado para la solución de este problema se anexa al final.

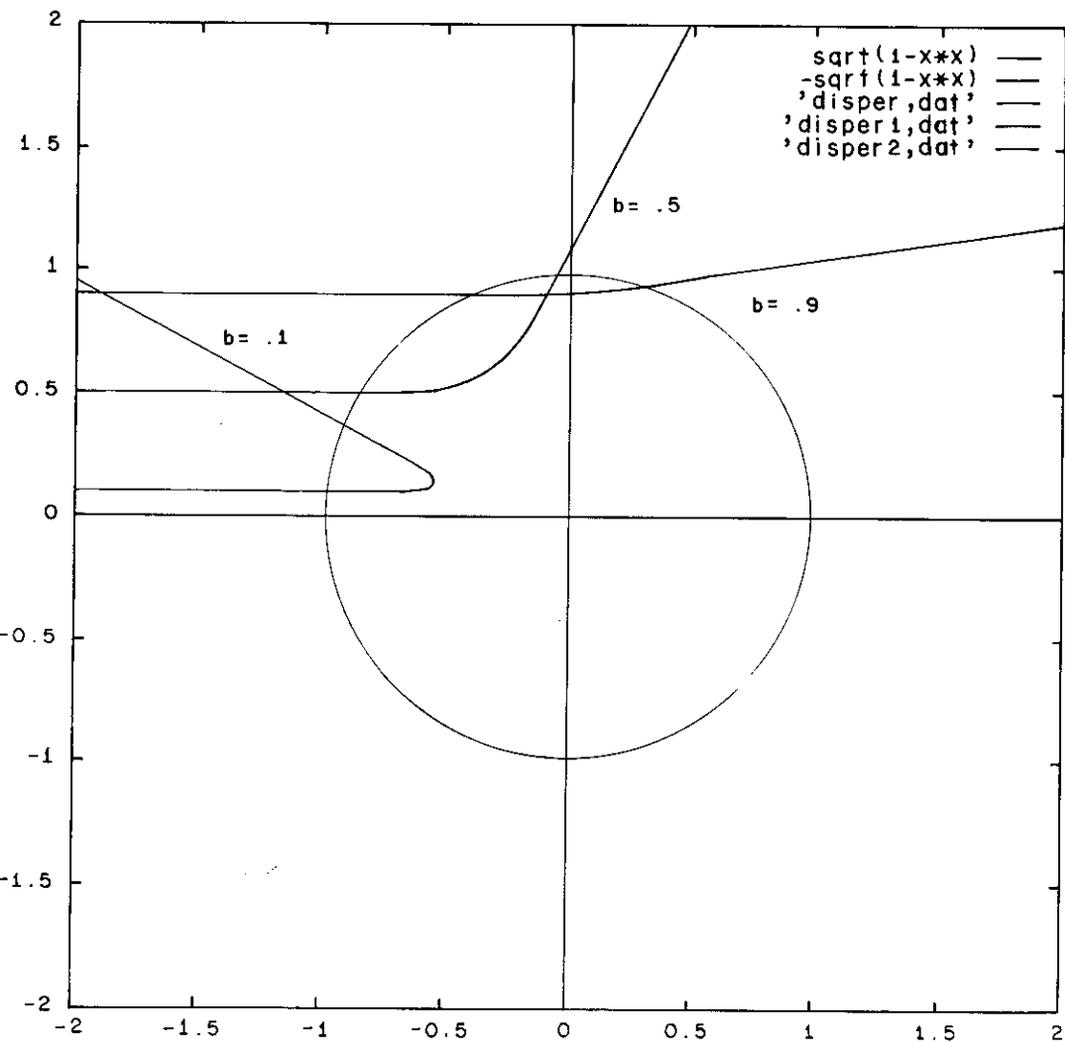


Figura 2. $E = .5, q = 1, b = .1, .5, .9$

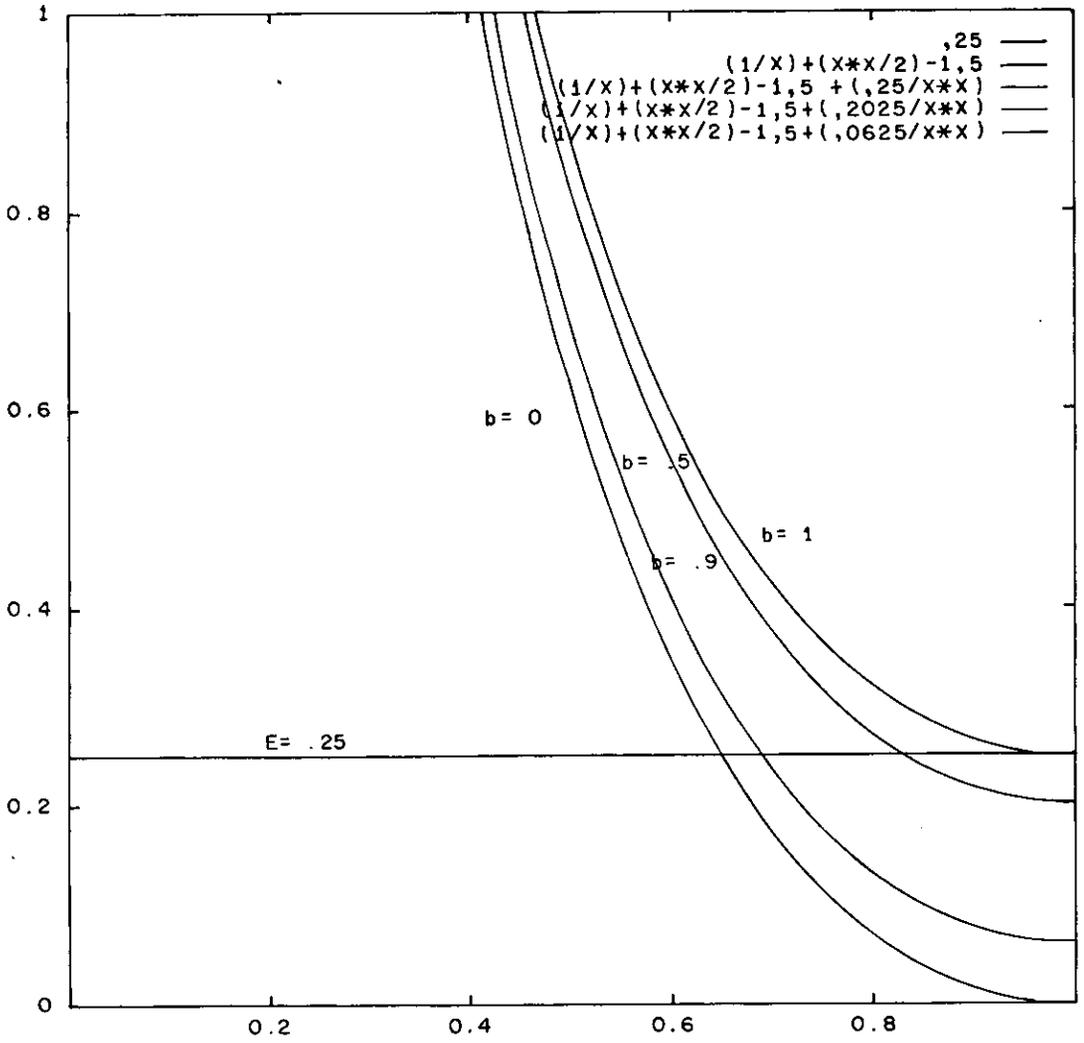


Figura 3. Potencial efectivo para un positrón incidente

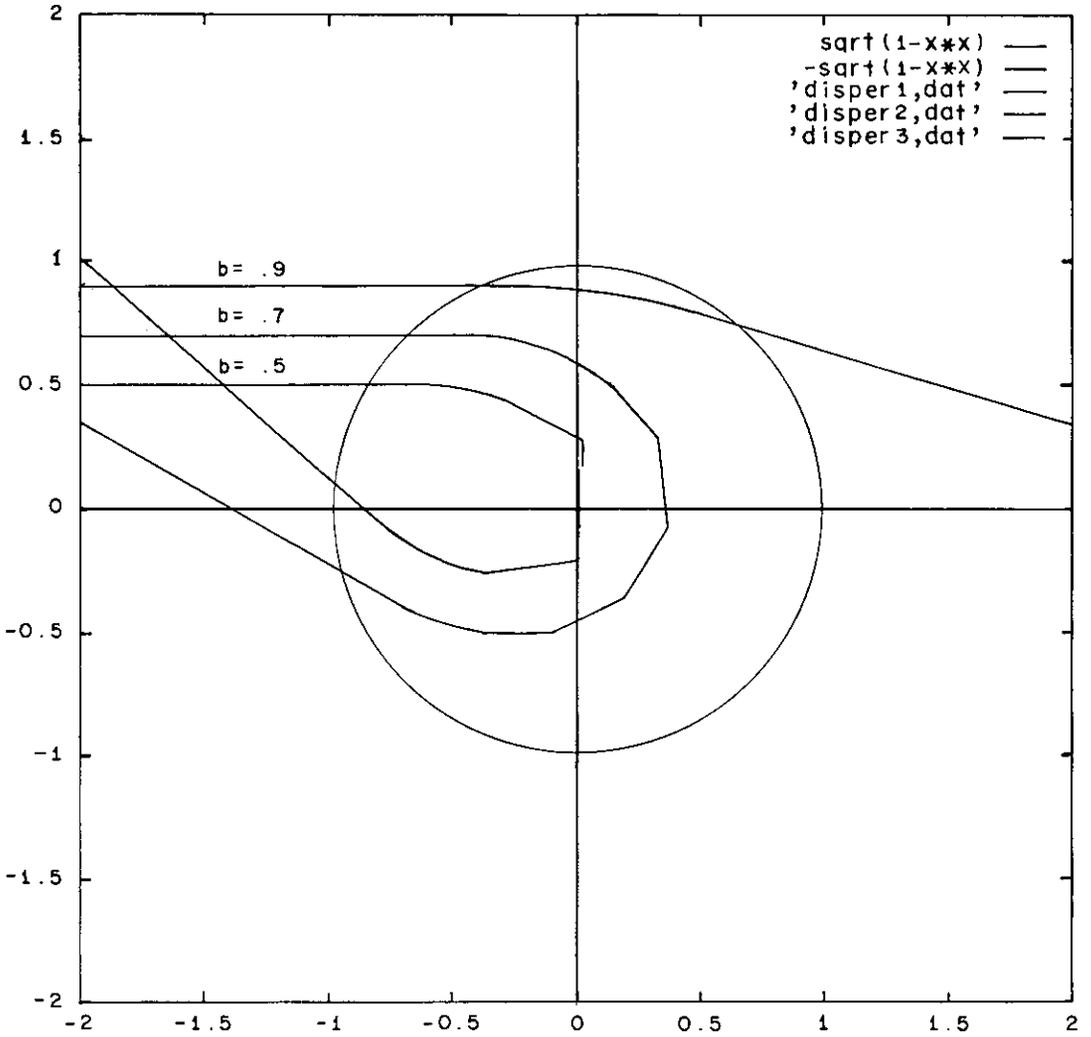


Figura 4. $E = .5$; $q = -1$; $b = .5, .7, .9$

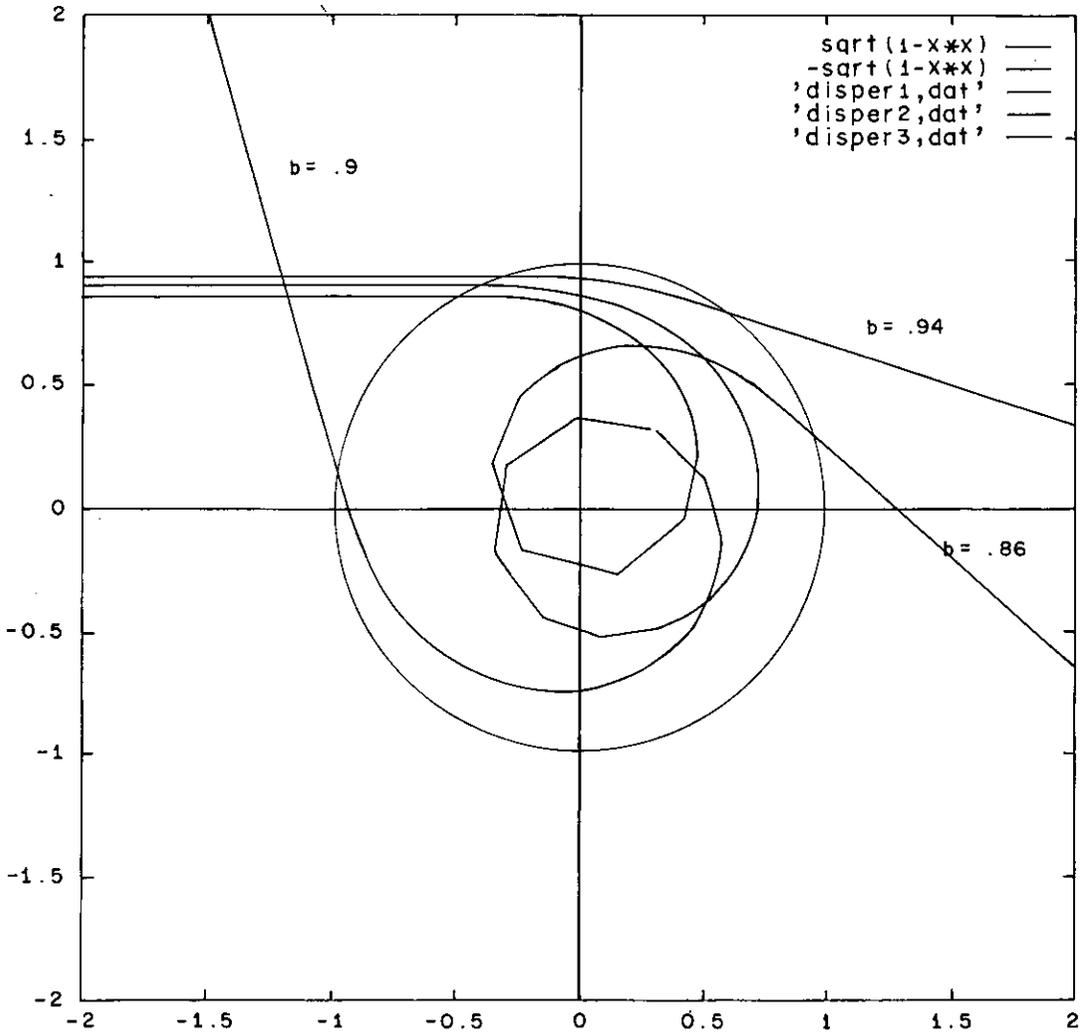


Figura 5. $E = .25$; $q = -1$; $b = .9, .94, .86$

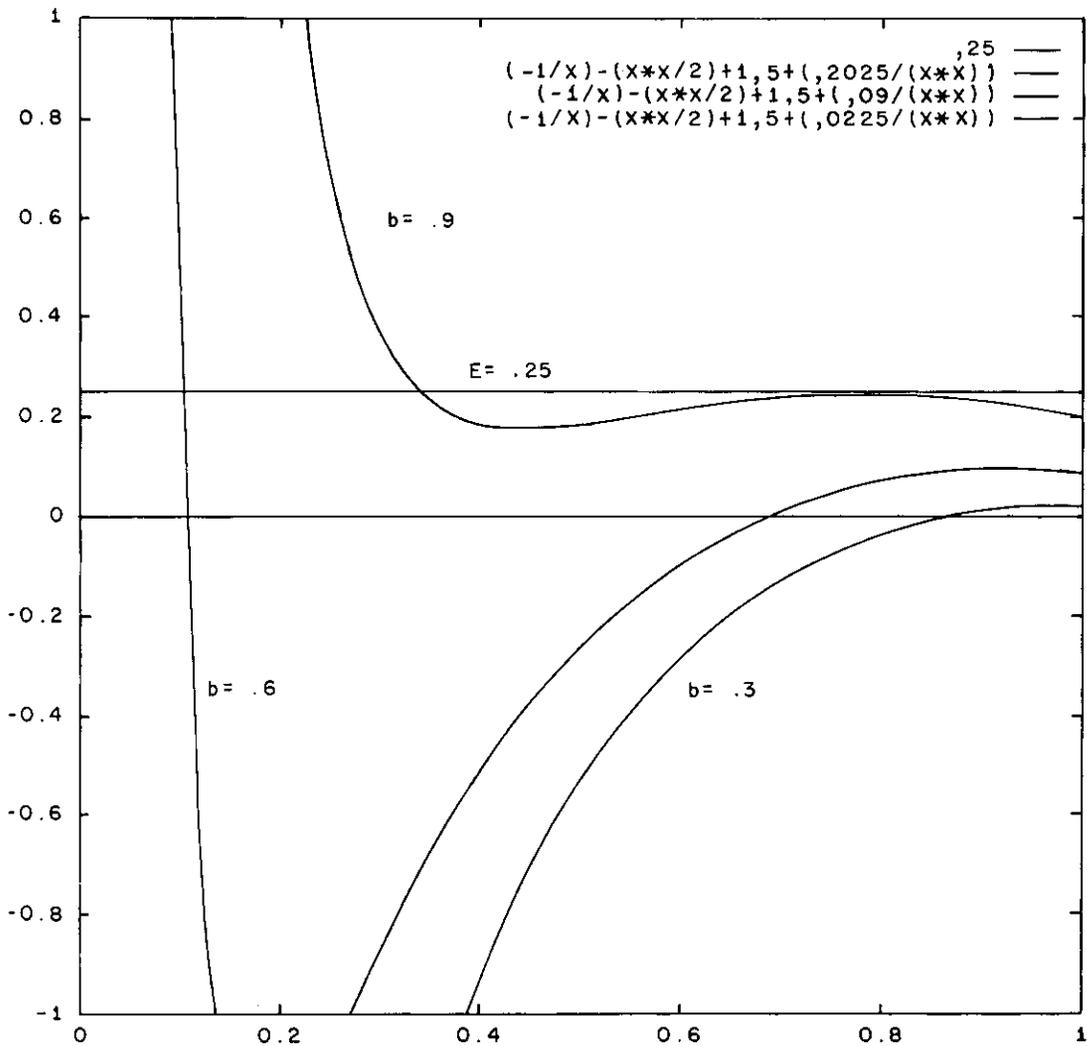


Figura 6. Potencial efectivo para un electr3n incidente

Bibliografía

GOLDSTEIN, Herbert. *Mecánica Clásica*. Madrid: Aguilar, 1950.

REITZ, John R., MILFORD, Frederick J. *Fundamentos de la Teoría Electromagnética*. 3ª ed. México: Addison Wesley, 1986.

MERRIL, John R., MORROW, Richard A. *An Introductory Scattering Experiment by Simulation*. American Journal of Physics. Vol. 38, No. 9. September, 1970.

C PROGRAMA DISPERSION

C MODELO DISPERSION DE PARTICULAS

C Este programa resuelve las ecuaciones diferenciales que rigen el movimiento de un electrón o de un positrón dispersados por un átomo de hidrógeno, fijo, considerando que la carga del electrón ligado al átomo origina una densidad volumétrica de carga eléctrica uniforme, distribuida en una esfera de radio R_0 , con centro en el protón, $R_0 =$ radio de Bohr del átomo de H., en su estado fundamental.

C METODO NUMERICO: RUNGE-KUTTA DE CUARTO ORDEN.
 IMPLICIT REAL*8 (A-H, O-Z)
 PARAMETER (N=4,NPT=400)
 DIMENSION Y(N),DYDX(N),
 YOUT(N),XX(NPT),YY1(NPT),
 YY2(NPT)
 COMMON Q
 write(6,*) 'digite b:'
 read(5,*) b
 write(6,*) 'digite E:'
 read(5,*) E
 write(6,*) 'digite Q:'
 read(5,*) Q

C TIEMPO INICIAL
 X=0. D0

C CONDICION INICIAL
 Y(1)=-3.0

Y(2)=b

Y(3)=DSQRT(2.*E)

Y(4)=0

CALL DERIVS(X,Y,DYDX)

C PASO

H=.05D0

C PRIMER PASO

CALL RK4 (Y,DYDX,N,X,H,
 YOUT)

C CICLO SOBRE EL INTERVALO

DO 3 J=1, NPT

X=X+H

DO 2 I=1,N

Y(I)=YOUT(I)

2 CONTINUE

CALL DERIVS (X,Y,DYDX)

CALL RK4 (Y,DYDX,N,X,H,
 YOUT)

XX(J)=X+H

XY1(J)=YOUT(1)

XY2(J)=YOUT(2)

3 CONTINUE

OPEN(2,FILE='DISPER5.DAT')

DO 1000 I=1,100

J=4*I

WRITE(2,*) YY1(J),YY2(J)

1000 CONTINUE

CLOSE(2)

END

SUBROUTINE DERIVS(X,Y,
 DYDX)

IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)

DIMENSION Y(*),DYDX(*)

COMMON Q

C ECUACIONES DIFERENCIALES

DYDX(1)=Y(3)

DYDX(2)=Y(4)

r=DSQRT(Y(1)*Y(1)+Y(2)*Y(2))

DYDX(3)=0

DYDX(4)=0

IF(r.LE.1.)DYDX(3)=Q*(Y(1)/

```

(r**3)-Y(1))
IF(r.LE.1.)DYDX(4)=Q*(Y(2)/
(r**3)-Y(2))
RETURN
END
SUBROUTINE RK4(Y,DYDX,N,
X,H,YOUT)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
PARAMETER (NMAX=10)
DIMENSION Y(N),DYDX(N),
YOUT(N),YT(NMAX),
DYT(NMAX),DYM(NMAX)
HH=H*0.5D0
H6=H/6.D0
XH=X+HH
DO 11 I=1,N
YT(I) = (Y(I)+HH*DYDX(I))

```

```

11 CONTINUE
CALL DERIVS(XH,YT,DYT)
DO 12 I=1,N
YT(I)=Y(I)+HH*DYT(I)
12 CONTINUE
CALL DERIVS(XH,YT,DYM)
DO 13 I=1,N
YT(I) =Y(I)+H*DYM(I)
DYM(I)=DYT(I)+DYM(I)
13 CONTINUE
CALL DERIVS(X+H,YT,DYT)
DO 14 I=1,N
YOUT(I)=Y(I)+H6*(DYDX(I)+
2.D0*DYM(I))
14 CONTINUE
RETURN
END

```