fizikai szemle

AZ EÖTVÖS LORÁND FIZIKAI TÁRSULAT LAPJA

Alapította Eötvös Loránd 1891-ben Mathematikai és Physikai Lapok néven

XXXIX. évfolyam | 11. szám | 1989. november

SZÁMÍTÓGÉP AZ OKTATÁSBAN

A RUTHERFORD-SZÓRÁS SZÁMÍTÓGÉPES SZIMULÁCIÓJA

Horváth Gábor
MTA Központi Fizikai Kutatóintézete,
Biofizikai csoport

HU ISSN 0015–3257

SZÁMÍTÓGÉP AZ OKTATÁSBAN

A RUTHERFORD-SZÓRÁS SZÁMÍTÓGÉPES SZIMULÁCIÓJA

Horváth Gábor
MTA Központi Fizikai Kutatóintézete,
Biofizikai csoport

Bevezetés

A klasszikus Rutherford-Geiger-Marsden-féle szórási kísérletet [1] hallgatói fizikai laboratóriumi gyakorlat keretén belül meglehetősen nehéz lenne elvégezni; didaktikailag ugyanakkor nagyon fontos lenne, ha az oktatásba mégis bevonulhatna ez, az anyag szerkezetéről alkotott képünk kialakításában nagy jelentőségű fizikai kísérlet. Kézenfekvőnek tűnik a szóbanforgó kísérlet számítógépen történő szimulációja, mely testközelbe hozza a Rutherford-szórást és a vele kapcsolatos ismereteket.

Éppen ezért ebben a cikkben a Rutherford-szórás számítógépes szimulációját tárgyaljuk. Először egy kétdimenziós α-részecskefluxus egyetlen atommagon való szóródására vezetünk le egy elméleti formulát, majd a Rutherford-szórás számítógépes szimulációjának kétdimenzióban történő megvalósításáról szólunk. Konkréten azt a feladatot tűzzük ki (mely akár egy elvégzendő fizikai laboratóriumi gyakorlat feladata is lehetne), hogy a számítógépes szimulációval nyert kétdimenziós szórási képből miként határozható meg a szóró atom rendszáma a szóródó α-részecskefluxus paramétereinek ismeretében.

A probléma tárgyalása során csak nehéz elemeken való szóródást vizsgálunk, azaz egyszerűsítésképpen

a szóró atommagot egyhelyben rögzítettnek tekintjük. A kétdimenziós α-részecskefluxus a számítógépre való alkalmazást könnyíti meg, mert így a képernyőn látható szórási kép információja közvetlenül felhasználható a szóró atom rendszámának meghatározására. Ugyancsak a könnyebb szimulációt szolgálja, hogy a szokással [1] ellentétben nem több atommagon (azaz nem egy fólián) való töltött részecske szórást, hanem csak egyetlen mag szórását vizsgáljuk.

Számos olyan érdekes és fontos fizikai jelenség, kísérlet létezik, amelyet közvetlenül demonstrálni, elvégezni nehéz vagy éppenséggel lehetetlen lenne, ugyanakkor számítógépes szimulációval viszonylag könnyen tárgyalhatók, vizsgálhatók ezek a jelenségek, problémák [3,4,5]. Ezek közé tartozik cikkünk témája is.

1. Kétdimenziós α-részecskefluxus szóródása egyetlen atommagon

Vegyük az 1. ábra szerinti kétdimenziós α-részecskefluxust. Az α-részek sebessége a magtól végtelen távolságban legyen v_∞, tömege m_α, a lineáris α-részecskefluxus sűrűség legyen állandó n_0, a szóró atommag rendszáma Z, töltése Ze, az α-részecskék töltése 2e. Ekkor a mag szóró potenciálja

$$V=\frac{Z\cdot e^2}{2\pi\epsilon_0 r}\equiv\frac{a}{r}. \qquad (1)$$

Vizsgáljuk az α-részecskefluxus azon részecskéjének szóródását, amelyik ρ ütközési paraméterrel rendelkezik, a szóródási szöge pedig Θ (az 1. ábra szerinti módon). [1,2] szerint ha egy töltött részecske az (1) szerinti szórópotenciálon szóródik, és a szóró mag tömege sokkal nagyobb a szóródó α-részecskéénél, akkor az ütközési paraméter a következőképpen fejezhető ki:

$$\rho=\frac{a}{m_\alpha v_\infty^2}\,\mathrm{ctg}\,(\Theta/2). \qquad (2)$$

Nyilván a Θ és $\Theta+d\Theta$ elemi szögtartományba szóródó részecskék száma (lásd az 1. ábrát):

$$dN=n_0 d\rho=n_0\cdot\left|\frac{d\rho}{d\Theta}\right| d\Theta. \qquad (3)$$

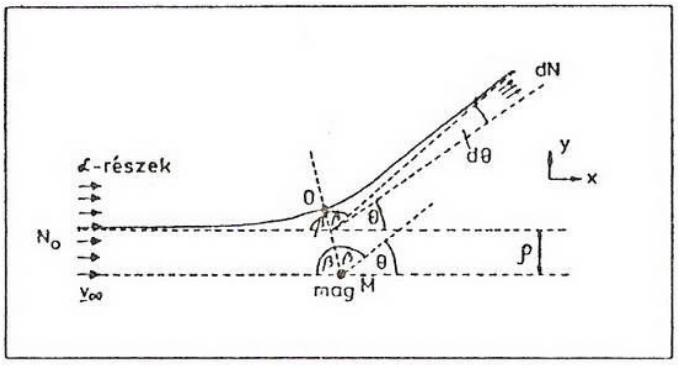
(3)-ban n_0 állandósága azt jelenti, hogy az α-részecskefluxus az y irányban homogén eloszlású. (2)-ből képződve a $d\rho/d\Theta$ differenciálhányadost, s ezt (3)-ba helyettesítve, kapjuk:

$$dN=\frac{an_0}{2m_\alpha v_\infty^2}\,\frac{1}{\sin^2\left(\frac{\Theta}{2}\right)}\,d\Theta. \qquad (4)$$

A $\Theta^*\leq\Theta\leq\pi$ szögtartományba szórt α-részecskék száma:

$$N_{\Theta^*}=\int_{\Theta^*}^{\pi} dN=\frac{n_0 Ze^2}{4\pi\epsilon_0 m_\alpha v_\infty^2}\int_{\Theta^*}^{\pi}\frac{1}{\sin^2\left(\frac{\Theta}{2}\right)}\,d\Theta=$$

$$=\frac{Ze^2 n_0}{2\pi\epsilon_0 m_\alpha v_\infty^2}\,\mathrm{ctg}\,(\Theta^*/2). \qquad (5)$$



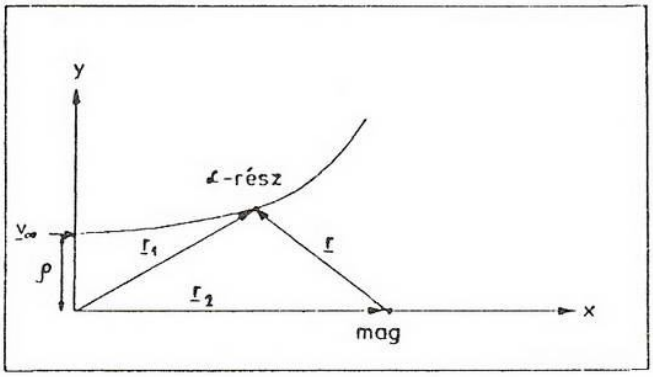
1. ábra Egyetlen atommagon szóródó α-részecske pályája

Azért határoztuk meg a $\Theta^*\leq\Theta\leq\pi$ szögtartományba szóródó α-részecskék (5) szerinti számát, mert az a Rutherford-szórás számítógépes szimulációjával kapható kétdimenziós szórási képből könnyen leolvasható, s ebből könnyen kiszámítható a szóró mag Z rendszáma.

2. A Rutherford-szórás számítógépes szimulációja

Írjuk fel egy α-részecske mozgásegyenletét a 2. ábra koordinátarendszerében, ahol $\mathbf{r}_1$ a szóródó α-részecske helyvektora, $\mathbf{r}_2$ pedig a rögzítettnek tekintett magé:

$$m_\alpha\ddot{\mathbf{r}}_1=\frac{e^2 Z}{2\pi\epsilon_0 r^2}\,\frac{\mathbf{r}}{r}. \qquad (6)$$



2. ábra A szórásszámításhoz használt kétdimenziós Descartes-koordinátarendszer

A helyvektorok koordinátái:

$$\mathbf{r}_1 = (x,y),\ \mathbf{r}_2 = (r_m,0),\ \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 = (x - r_m, y) \quad (7)$$

(6), (7)-ből a vizsgált α-részecske gyorsulásvektorának komponensei:

$$a_x = \frac{e^2 Z \cdot (x - r_m)}{2\pi\epsilon_0 m_\alpha \cdot \left[(x-r_m)^2 + y^2\right]^{3/2}},$$

$$a_y = \frac{e^2 Z y}{2\pi\epsilon_0 m_\alpha \left[(x-r_m)^2 + y^2\right]^{3/2}}. \quad (8)$$

Az α-részecske (6) szerinti mozgásegyenlete teljesen analóg egy gömbszimmetrikus gravitációs erőtérben mozgó tömegpont mozgásegyenletével azzal a különbséggel, hogy itt most taszító potenciálról van szó. (6)-ot analitikusan is meg lehet oldani, de mert mi most számítógépen akarjuk szimulálni a Rutherford-szórást, ezért numerikusan oldjuk meg. A gravitációs kölcsönhatásokkal való analógia miatt (6)-ot a [3, 4]-ben leírt módszerrel oldjuk meg numerikusan. Tehát a (6) szerinti differenciálegyenletet számítógép felhasználásával integráljuk ki úgy, hogy az α-részecske mozgását infinitezimális dt intervallumokra bontjuk az időben, s ezen elemi dt időtartamok alatt egyenletesen gyorsulónak tekintjük. Az i-edik és i+1-edik intervallumra a következő rekurzióval élünk:

$$a_x^{(i)} = \text{állandó}^{(i)}, \quad a_y^{(i)} = \text{állandó}^{(i)}$$

$$v_x^{(i+1)} = v_x^{(i)} + a_x^{(i)} \cdot dt,\ v_y^{(i+1)} = v_y^{(i)} + a_y^{(i)} \cdot dt,$$

$$x_{i+1} = x_i + 0{,}5(v_x^{(i)} + v_x^{(i+1)})dt + 0{,}5a_x^{(i)} \cdot (dt)^2,$$

$$y_{i+1} = y_i + 0{,}5(v_y^{(i)} + v_y^{(i+1)})dt + 0{,}5a_y^{(i)} \cdot (dt)^2. \quad (9)$$

Az $a_x^{(i)}$-t és $a_y^{(i)}$-t (8)-ból számítjuk.

Egy ciklus alatt a (9) kijelölte számításokat végzi el a számítógép, a ciklus végén a kezdőértékek helyébe az újonnan kapott értékeket helyettesíti, s ismételten elvégzi a (9) szerinti számításokat. Ezzel a módszerrel annál pontosabban oldhatjuk meg (6)-ot, minél kisebbre választjuk dt-t. Az α-részecske minden egyes számított pályapontjába egy pontot teszünk ki a számítógép képernyőjére, így kirajzolódik a szóródó részecske pályája.

Az előzőek alapján különböző ütközési paraméterrel, azonos v_∞ kezdősebességgel indítunk α-részeket az 1. ábra szerinti módon. Kérdés, honnan célszerű az α-részecskefluxust indítani. Nyilván a maghoz túl közelről nem lehet, mert ekkor túl nagy a taszítóerő, s így nem tudjuk szimulálni a részecskefluxus végtelenből történő indítását; de túl távolról sem célszerű az indítás, mert ekkor oly kicsi a taszítóerő, hogy sokáig az α-részek szinte csak egyenes mentén egyre közelednek a maghoz. Az utóbbi esetben jelentősen megnő a számítógépes szimuláció futási ideje. Ezért egy optimális kezdőtávolságot kell választanunk, mely nem túl nagy ahhoz, hogy a futásidő nagyon hosszú legyen, de nem is túl kicsi ahhoz, hogy meghamisítsuk a végtelenből való indítási peremfeltételt. (Hasonló peremfeltételválasztási probléma fordul elő az analóg gravitációs kölcsönhatás számítógépes szimulációjánál is [3,4]). Célszerű az α-részecskefluxust néhány Bohr-sugárnyi távolságban indítani a szóró atommagtól, ez a távolság fogadható el a szórási folyamatoknál optimálisnak. Így tehát a kezdeti feltételek a következők:

$$\mathbf{r}_1^0 = (0,\rho),\ \mathbf{r}_2^0 = (r_{Bohr}(n),0),\ \dot{\mathbf{r}}_1^0 = (v_\infty,0). \quad (10)$$

(10)-ben n a H-atom főkvantumszáma, a Bohr-sugár pedig a következő módon fejezhető ki [1]:

$$r_{Bohr}(n) = \frac{h^2 n^2}{4\pi^2 m_e e^2 Z}. \quad (11)$$

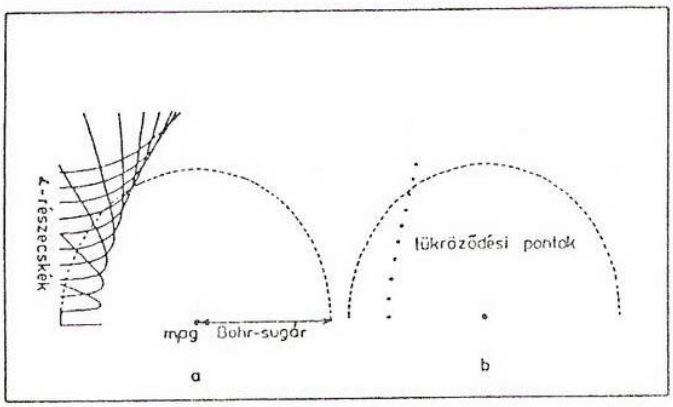
Az atommaggal centrálisan ütköző α-részecske pályaegyenesétől számított ütközési paraméter maximuma a részecskefluxusban szintén Bohr-sugárnyi legyen ($\rho_{max} = r_{Bohr}$), s indítsunk N_0 számú α-részecskét homogén eloszlással, így a lineáris részecskefluxus sűrűség:

$$n_0 = \frac{N_0}{r_{Born}}. \quad (12)$$

Ebben az esetben (5)-ből a $\Theta^* \leq \Theta \leq \pi$ szögtartományba szóródó részecskék száma így alakul:

$$\frac{N_{\Theta^*}}{N_0} = A(Z) \cdot \mathrm{ctg}\left(\Theta/2^*\right),\ A(Z) = \frac{Ze^2}{2\pi\epsilon_0 r_{Bohr} m_\alpha v_\infty^2}. \quad (13)$$

Az előzőek alapján elvégzett számítógépes szimuláció eredményét láthatjuk a 3/a. ábrán. Az egyes α-részecskék szóródási szögét nem lehet a számítógép képernyőjéről úgy meghatározni, hogy meghúzzuk a pályák aszimptotáját, hiszen a képernyőre a teljes pályáknak csak kis része kerülhet (de a legfon-



3. ábra (a) Az α-részecskefluxus szórási képe kétdimenzióban a Rutherford-szórás számítógépes szimulációja után
b. Az α-részecskék pályájának tükrözési pontjai

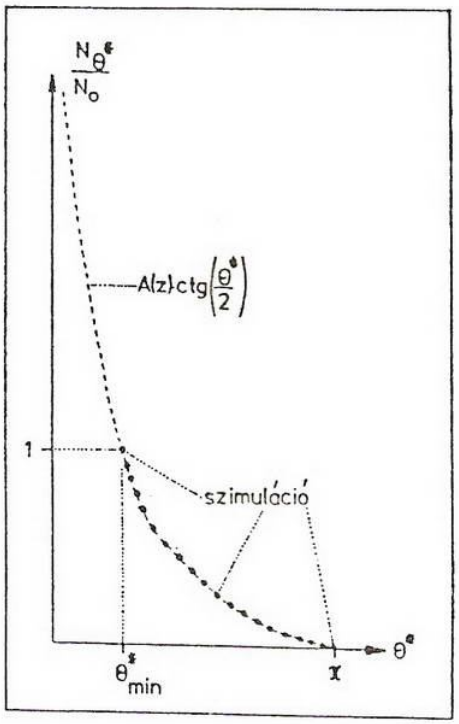
tosabb, ún. tükröződési része). Ezért a szóródási szögeket a pályák tükröződési vagy "forduló" pontja alapján lehet meghatározni. Úgy kell megírni a programot, hogy a számítógép jegyezze meg az α-részecskék pályájának tükröződési pontjait, s a szórási szimuláció után csak ezeket jelenítse meg a 3/b. ábrán látható módon. Azért van erre szükség, mert a nagyobb ütközési paraméterű részecskék pályája meglehetősen lapos, így vizuálisan csak pontatlanul lehetne meghatározni a képernyőről a tükröződési pontokat. Ha N_0-t megfelelően nagynak választjuk, akkor kvázifolytonos lesz a szórási kép. A szimuláció elvégzésével nyert 3/b. ábráról le lehet olvasni, hogy a $\Theta^* \leq \Theta \leq \pi$ szögtartományba hány részecske szóródott. A pályák tükröződési pontjaihoz (a magból, mint centrumból) húzott sugár könnyen leolvasható β szöge és a Θ szóródási szög közötti összefüggés az 1. ábra alapján a következő:

$$\Theta = \pi - 2\beta . \qquad (14)$$

Így (14)-ből a szórási szöget β ismeretében számítani tudjuk. (14) lényegében azt fejezi ki, hogy az α-részecske pályája szimmetrikus az MO egyenesre (1. ábra).

A 3/b. ábra alapján ezek után már meghatározható a szóródásra jellemző N_{Θ^*}/N_0 relatív szóródási szám Θ^* függvényében. Az eredményt a 4. ábrán láthatjuk. A 4. ábra pontjaira a (13) szerinti függvényt kell illeszteni (pl. a legkisebb négyzetek módszerével). Az illesztéssel meg lehet határozni A(Z) numerikus értékét, majd ebből (13), (11) alapján e, ϵ_0, r_{Bohr}, m_α, v_∞, ismeretében kiszámítható a keresett Z rendszám.

Mikor például egy hallgatói fizikai laboratóriumi gyakorlat keretében a Rutherford-szórás számítógépes szimulációját elvégeztetjük, nyilván a programban valahogyan el kell rejteni Z értékét, vagy meg kell akadályozni, hogy ez az érték — pl. a program listázásával — kideríthető legyen, hiszen Z meghatározása a feladat. Ha a dt időfelbontást megfelelően kicsinek választjuk (ami a program futási idejének megnövekedésével jár), akkor az előbb leírtak alapján meghatározott rendszám jó közelítéssel megegyezik a programba eredetileg betáplált értékkel, s a pontosság annál nagyobb, minél kisebb a dt.



4. ábra A szórási kép alapján meghatározott relatív integrális szórt részecskeszám. Ezekre a pontokra az elméleti $A(Z)\cdot ctg\left(\frac{\Theta^*}{2}\right)$ függvényt kell illeszteni A(Z) meghatározása végett

IRODALOM

[1] Budó Ágoston—Mátrai Tibor: Kísérleti fizika III. (Optika és atomfizika), 328. §. Az α-sugarak szóródása; az atommag. A Rutherford-féle atommodell, 335—340. o., Tankönyvkiadó, Bp. (1980)

[2] Landau-Lifsic: Elméleti fizika I. (Mechanika), 18. §. Részecskék szórása, 70—73. o., 19. §. A Rutherford-szórás, 77—79. o., Tankönyvkiadó, Bp. (1974)

[3] Horváth Gábor—Jánosi Imre: Gravitációs reakciók számítógépes modellezése I. Bolygó-hold-mesterséges hold rendszerek., Fizikai Szemle *37*, 406—411. (1987)

[4] Horváth Gábor—Bátori Endre: Gravitációs reakciók számítógépes modellezése II. Galaxis-galaxis kölcsönhatások., Fizikai Szemle *37*, 456—461. (1987)

[5] Horváth Gábor: A Brown-mozgás számítógépes szimulációja, Fizikai Szemle, *38*, 271—275 (1988)