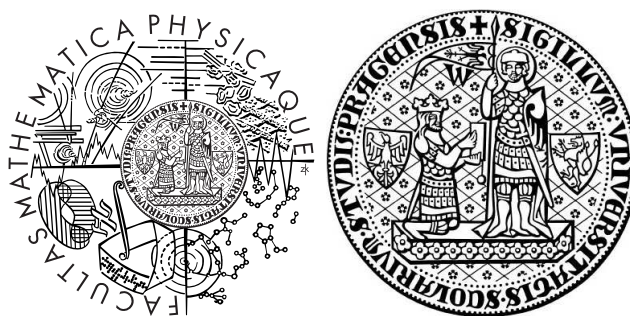


Univerzita Karlova v Praze
Matematicko-fyzikální fakulta

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE



Vojtěch Kulvait

Srážky záporných exotických částic s atomy a molekulami

Ústav teoretické fyziky

Vedoucí bakalářské práce: RNDr. Martin Čížek, Ph.D.

Studijní program: Obecná fyzika

2006

Děkuji RNDr. Martinovi Čížkovi, Ph.D. za vedení, konzultace a pomoc při vytváření bakalářské práce. Děkuji také mamce, která mě po celou dobu mých studií podporuje a živí.

Prohlašuji, že jsem svou bakalářskou práci napsal samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů. Souhlasím se zapůjčováním práce a jejím zveřejňováním.

V Praze dne 31.5.2006.

Vojtěch Kulvait

Obsah

1 Úvod	7
1.1 Historie	7
1.2 Srážky záporných exotických částic s atomy a molekulami	7
1.3 Účel práce	8
2 Popis metody CTMC	10
2.1 Generování vstupních dat	10
2.2 Výpočet klasických trajektorií	10
2.3 Zpracování výsledků	10
3 Metoda CTMC pro srážky antiprotonu a atomu vodíku	11
3.1 Generování vstupních dat	11
3.1.1 Volba souřadnic fázového prostoru	12
3.1.2 Generování počátečních podmínek pro terčíkový atom vodíku	12
3.1.3 Generování počátečních podmínek pro antiproton	16
3.2 Výpočet klasických trajektorií	18
3.3 Zpracování výsledků	19
3.3.1 Zjišťování vzniku protonia	19
3.3.2 Účinný průřez	20
3.3.3 Statistické zpracování energií	20
4 Výsledky	21
4.1 Nastavení parametrů výpočtu	21
4.2 Účinný průřez	22
4.3 Četnosti jednotlivých energetických hladin protonia	24
4.4 Četnosti jednotlivých energetických stavů vodíku	26
4.5 Shrnutí	28

A	Dodatky	29
A.1	Atomové jednotky	29
A.2	Hmotnost protonu	29
	Literatura	30

Název práce: Srážky záporných exotických částic s atomy a molekulami
Autor: Vojtěch Kulvait
Ústav teoretické fyziky
Vedoucí bakalářské práce: RNDr. Martin Čížek, Ph.D.
e-mail vedoucího: cizek@mbox.troja.mff.cuni.cz

Abstrakt:

Práce pojednává o srážkách antiprotonu s atomem vodíku při termálních energiích. Cílem bylo prostudovat dostupnou literaturu o srážkách antiprotonu s atomy a molekulami při nízkých energiích, seznámit se s používanými modely těchto srážek a se současným stavem poznání v této oblasti. Jádrem práce je implementace algoritmu pro výpočet účinného průřezu tvorby protonia metodou CTMC (Classical Trajectory Monte Carlo) a detailní popis jeho kroků. Současně s prací byl vytvořen i program pro modelování srážek metodou CTMC včetně implementace generování vstupních dat a řešení pohybových rovnic. Byl navržen upravený algoritmus pro generování vstupních dat. Výpočet účinného průřezu byl proveden pro 11 typických počátečních energií antiprotonu z intervalu $0.05 - 0.8Ha$. Pro energie $0.1Ha$ a $0.5Ha$ bylo nalezeno rozložení energií vzniklého protonia a pro proces excitace tercičkového atomu vodíku také rozložení energií tohoto atomu po průletu antiprotonu. Přitom jsou diskutovány změny obou rozložení v závislosti na energii \bar{p} . V práci byly zpřesněny odhady účinných průřezů oproti odhadům uváděným v původních pracech z 80. let 20. století. Dále byla diskutována fyzikální podstata zkoumaných jevů.

Klíčová slova:

antičástice, antiproton, srážky, protonium, exotická částice

Title: Capture of negative exotic particles by atoms and molecules
Author: Vojtěch Kulvait
Department: Institute of Theoretical Physics
Supervisor: RNDr. Martin Čížek, Ph.D.
Supervisor's e-mail address: cizek@mbox.troja.mff.cuni.cz

Abstract:

This thesis main concern are the collisions of antiprotons with Hydrogen atoms. One goal was to study available literature about collisions of antiprotons with Hydrogen atoms and molecules and to focuss our attention to models describing such collisions. We furthermore implemented algorithm for computing cross section of protonium formation with CTMC method (Classical Trajectory Monte Carlo). The algorithm for generation of statistical ensemble of initial conditions is described in more details. The calculation itself was performed for 11 typical starting energies of antiproton from interval $0.05 - 0.8Ha$. For representative energies of $0.1Ha$ and $0.5Ha$ the energy distribution of the formed protonium is found. If the electron remains bound to proton the energy of the excited target hydrogen atom is calculated instead. Also the differences in the distributions according to \bar{p} energy are discussed. The work precise estimates about cross sections from former works. The improved algorithm for generating initial conditions was described.

Keywords:

antiparticle, antiproton, collisions, protonium, exotic particle

Kapitola 1

Úvod

Tato část shrnuje současný stav poznání v oblasti modelování srážek exotických záporných částic s atomy a molekulami jak je nastíněn v práci [1].

1.1 Historie

Částicová fyzika zaznamenala v minulých letech velký rozvoj. Na rozdíl od doby, kdy vznikala kvantová fyzika jako nový vědní obor v první polovině 20. století, nyní existuje mnoho výkonných urychlovačů, synchrotronů a zařízení, která dokáží produkovat relativně velká množství exotických elementárních částic. Tyto částice pak lze využít k ověření tvrzení plynoucích z modelů konstruovaných na základě poznatků, které fyzika o takových částicích má. Na rozdíl od doby vzniku kvantové fyziky, je nyní principiálně možné stále více modelů ověřit přímým experimentem. Případný rozpor mezi kvantově-mechanickým modelem a experimentální realitou by mohl znamenat náš další krok na cestě k pochopení skutečnosti.

1.2 Srážky záporných exotických částic s atomy a molekulami

S rozvojem experimentální částicové fyziky přichází velká poptávka po modelech popisujících srážky a zachytávání záporně nabitých částic na atomech a molekulách. V minulých desetiletích bylo vyvinuto mnoho metod modelujících tyto reakce. Modely vycházejí buď z klasické nebo kvantové mechaniky,

případně kombinují vlastnosti obou. Takovým kombinovaným metodám říkáme semiklasické. Důraz je při tvorbě modelů kladen jak na míru, se kterou popisují experimentální skutečnost, tak i na čas potřebný k provedení výpočtů. Výběr modelu závisí do značné míry na povaze zkoumaného jevu. Pro jednotlivé typy částic nebo pro jeden typ částic a jejich rozdílné rychlosti jsou často vhodné rozdílné modely. Roli hraje také výpočetní výkon, který máme k dispozici.

Jednou z nejzákladnějších reakcí je záchyt antiprotonu v atomu vodíku. Je to jednak proto, že antiprotony jsou částice, které je poměrně snadné připravit a zkoumat tak vlastnosti antihmoty, jednak proto, že vodík je nejběžnější prvek, který se vyskytuje v různých podobách všude kolem nás a podle našich poznatků je rozhodující část hmoty vesmíru tvořena právě tímto prvkem.

Při srážkách antiprotonu a atomu vodíku může dojít k několika různým procesům. Pro vysoké energie nalétávajícího antiprotonu je typický průlet částice kolem atomu vodíku aniž dojde k tvorbě vázaného stavu protonu a antiprotonu. Přitom se mohou měnit hybnosti jednotlivých částic. Může dojít k ionizaci, tedy vyražení elektronu z orbity vodíku. Pokud k ní nedojde, je často elektron excitován na vyšší energetickou hladinu. Dále může být antiproton zachycen a vytvořit vázaný stav s protonem. Tento "kvázium", kde obíhají obě částice kolem sebe se nazývá protonium. Tato reakce nastává typicky pro termální energie antiprotonu, kdy je záchyt vodíkem pravděpodobný. Tato práce se zaměřuje především na modelování záchytu antiprotonu při srážkách s atomem vodíku při termálních energiích.

1.3 Účel práce

Účelem práce bylo nejen popsat, ale zároveň i implementovat jednu z metod zkoumání srážek vodíku a antiprotonu. Zvolená metoda se nazývá CTMC (Classical Trajectory Monte Carlo), tedy metoda klasických trajektorií s náhodně generovanými počátečními podmínkami. Metoda vznikla v druhé polovině 20. století a je popsána a použita v pracích [2], [3] a [4]. Je zástupcem takzvaných semiklasických metod, tedy metod, které kombinují kvantově mechanický přístup s přístupem vycházejícím z metod klasické mechaniky. Je zajímavá především z toho důvodu, že do klasické mechaniky vnáší pravděpodobnostní popis a tak se svými prostředky přibližuje kvantové mechanice. I když je pravděpodobnostní popis zaveden jiným způsobem než v kvantové mechanice, je zajímavé sledovat do jaké míry se oba přístupy liší

co do výsledků. Je překvapivé, že výsledky obou popisů jsou v některých případech velmi podobné. Jako součást práce byla metoda CTMC implementována. Výstupem práce je tak nejen tento text, ale i software počítající touto metodou trajektorie částic, účinný průřez tvorby protonia při srážkách antiprotonu s atomem vodíku a statistická rozložení některých veličin.

Kapitola 2

Popis metody CTMC

Metoda CTMC se skládá z následujících tří částí.

2.1 Generování vstupních dat

Ve fázovém prostoru se náhodně vybere soubor stavů odpovídající přibližně počátečnímu rozdělení hodnot veličin daného kvantově-mechanického systému. Každý stav v souboru reprezentuje možnou realizaci daného modelu. Žádný stav v souboru není nijak rozmazaný a každý tak jednoznačně určuje počáteční podmínky pro řešení pohybových rovnic.

2.2 Výpočet klasických trajektorií

Metodami klasické mechaniky se vypočtou trajektorie částic systému ve fázovém prostoru. Tento výpočet se provede jednotlivě pro každý stav ze souboru stavů.

2.3 Zpracování výsledků

Se souborem výsledků pak pracujeme jako s jedním stavem reprezentujícím rozložení pravděpodobnosti ve fázovém prostoru po proběhnutí zkoumaného procesu. Tímto způsobem je do modelu vneseno rozmazání hodnot jednotlivých veličin. Soubor lze dále zpracovávat statistickými metodami.

Kapitola 3

Metoda CTMC pro srážky antiprotonu a atomu vodíku

Metoda CTMC byla pro modelování srážek antiprotonu s atomem vodíku použita už v roce 1967 viz [2]. V následujících sekcích je podrobně popsáno jakým způsobem byla metoda implementována pro účely naší práce. Dále je vysvětleno, jak byla zpracována data pro stanovení účinného průřezu tvorby protonia a pro získání statistiky rozložení energií.

3.1 Generování vstupních dat

Pro metodu je klíčové generovat vstupní data tak, aby odpovídala rozložení hybností a poloh částic v počátečním stavu daného kvantového systému. Popisujeme časový vývoj tří částic: protonu, elektronu a antiprotonu. Elektron je v základním stavu na orbitě atomu vodíku. Antiproton s danou počáteční hybností nalétává na těžiště atomu vodíku. Antiproton je přitom vyslán z kruhové plochy kolmé na směr jeho hybnosti. Tento směr je určen směrem spojnice středu této plochy a těžiště atomu.

Počáteční parametry výpočtu jsou:

- poloměr plochy odkud jsou \bar{p} vysílány r^{test}
- počáteční vzdálenost atomu vodíku a této plochy r^{start}
- počáteční velikost hybnosti antiprotonu p^{start} .

Úloha generování vstupních dat sestává z následujících kroků.

- Volba vhodných souřadnic fázového prostoru
- Určení souřadnic pro terč (atom vodíku s elektronem v základním stavu)
- Určení souřadnic pro projektil (\vec{p}).

3.1.1 Volba souřadnic fázového prostoru

I když by bylo možné volbou vhodných souřadnic ve fázovém prostoru separovat pohyb těžiště celé soustavy částic a získat tak ménědimenzionální fázový prostor, rozhodl jsem se pro reprezentaci každé částice pomocí šesti veličin, tří složek rychlosti a tří složek hybnosti v kartézských souřadnicích. Zjednoduší se tím testování správnosti výpočtu. Počátek souřadné soustavy volím jako těžiště atomu vodíku na začátku experimentu. Z hlediska stability výpočtu je vhodné, abychom zvolili přirozené jednotky, ve kterých budou mít typické hodnoty používaných veličin podobný řád. Takovou vhodnou soustavou veličin jsou atomové jednotky (viz dodatek). Generování jedné počáteční podmínky, které říkám scéna, znamená vygenerovat 18 čísel odpovídajících souřadnicím vektorů polohy a hybnosti jednotlivých částic ve fázovém prostoru s hodnotami v atomových jednotkách.

3.1.2 Generování počátečních podmínek pro terčíkový atom vodíku

Rozložení pravděpodobnosti v klasickém modelu

Rádi bychom zajistili, aby rozložení počátečních podmínek bylo pokud možno co nejbližší kvantově-mechanickému modelu. V prvním zjednodušení, které je použité například v [4], vezmeme planetární Bohrovův model atomu, kde elektron obíhá kolem protonu po elipse. Jeho energie odpovídá energii základního stavu atomu vodíku. Jedná se tedy o klasický problém dvou těles. Ten lze převést na řešení ekvivalentní úlohy s částicí o redukované hmotnosti $m^{(red)}$ pohybující se v poli centrální síly. Velikost této síly je stejná jako velikost síly, kterou na sebe vzájemně obě tělesa působí viz [5]. Vzdálenost částice s redukovanou hmotností od centra síly přitom odpovídá vzdálenosti daných dvou těles. Značíme ji R .

Pro hmotnost $m^{(red)}$ platí:

$$\frac{1}{m^{(red)}} = \frac{1}{m^{(e)}} + \frac{1}{m^{(p)}}$$

Přítom $m^{(e)}$ a $m^{(p)}$ jsou hmotnosti elektronu a protonu. Protože potenciální energie je rovna

$$V = \frac{-1}{R}$$

daný problém je keplerovský viz [5].

Parametry elipsy orbity elektronu a protonu

Podle prvního Keplerova zákona se záporný elektron v poli kladně nabitého protonu pohybuje po elipse s ohniskem v protonu.

Druhý Keplerův zákon říká, že plocha opsaná průvodičem elektronu za jednotku času je neměnná.

Platí přitom viz [5], že je konstantní výraz

$$\gamma = R^2 \dot{\phi}$$

R a ϕ jsou polární souřadnice částice.

Proto, abychom mohli umístit elektron a proton do fázového prostoru, tedy realizovat náhodně jejich polohy, je třeba znát parametry dané elipsy.

Eliptická trajektorie je v polárních souřadnicích popsána rovnicí

$$R = \frac{p^*}{1 + \epsilon \cos \phi}$$

Přítom ϕ je úhel měřený od levého ohniska v kladném geometrickém směru. ϵ je z intervalu $[0, 1)$ a určuje numerickou výstřednost elipsy.

$$p^* = m^{(red)} \gamma^2$$

$$\epsilon = \sqrt{1 + 2m^{(red)} \gamma^2 E}$$

Kde E je energie základního stavu elektronu v atomu vodíku. Její velikost je $E = -0.5 a.u.$. Zná-li redukovanou hmotnost $m^{(red)}$ a energii E , je elipsa je jednoznačně určena pomocí své výstřednosti. Konstantu γ můžeme chápat jako funkci výstřednosti elipsy $\gamma = \gamma(\epsilon)$.

V souladu s [4] jsem volil rozložení ϵ^2 rovnoměrné na intervalu $[0, 1)$. Takto generovaný model atomu má stejné rozložení hybností jako kvantově-mechanický model atomu vodíku. Rozdělení vzdáleností elektronu od jádra se ale liší viz [4].

Znám-li parametry elipsy, mohu na elipsu umístit částici. Rozdělení musí být ve shodě s druhým Keplerovým zákonem. Neodpovídá tedy přesně rovnoměrnému rozložení úhlu v intervalu $[0, 2\pi)$.

Abychom našli body na elipse měly rozložení odpovídající konstantní plošné rychlosti, použil jsem následující algoritmus.

1. Zjistím velikost hlavní a vedlejší poloosy elipsy.

Hlavní poloosa je pro fixní energii vždy

$$a = -\frac{1}{2E}$$

Velikost vedlejší poloosy je

$$b = a\sqrt{1 - \epsilon^2}$$

Vzdálenost středu elipsy od ohniska je

$$f = \epsilon a$$

2. Obdélník o rozměrech $2a$ a $2b$ orientuji v prostoru následujícím způsobem

- Obdélník je nakreslen kolmo na osu z v souřadnicové rovině xy .
- Delší strana obdélníka je rovnoběžná s osou x , kratší s osou y .
- Střed obdélníka má souřadnice $(f, 0, 0)$

3. Obdélníku vepíšu elipsu s poloosami a a b .

4. Najdu čísla x_1 a x_2 , $x_1 \in [a - f, a + f]$, $x_2 \in [0, 2b]$ obě rovnoměrně rozložená.

5. Zjistím, zda bod (x_1, x_2) obdélníka leží vně elipsy.

6. Pokud ano, vrátím se k bodu 4.

7. Pokud ne, bod (x_1, x_2) je náhodný bod uvnitř elipsy.
8. Najdu bod A ležící na průsečíku přímky procházející bodem $(x_1, x_2, 0)$ a levým ohniskem elipsy (bodem $(0, 0, 0)$).

Bod A je bod, jehož rozdělení odpovídá konstantní plošné rychlosti. Je to proto, že každá oblast uvnitř elipsy se stejnou plochou může se stejnou pravděpodobností obsahovat náhodný bod (x_1, x_2) . Rozdělení četnosti takto generovaných bodů na každé části okraje elipsy je tedy úměrné ploše, kterou opíše průvodič při průchodu touto oblastí. Z toho je zřejmé, že jsou body A na celé elipse rozděleny v souladu s konstantní plošnou rychlostí.

Máme tedy elipsu a její bod. Ten určuje polohu částice na elipse. K velikosti hybnosti částice dojdeme ze zákona zachování energie.

$$p = \sqrt{(E - V(R)) * 2 * m^{(red)}}$$

Kde E je energie základního stavu elektronu $E = -0.5a.u.$ a V je potenciál $V(R) = -1/R$.

Pro určení směru hybnosti použijeme následující algoritmus.

- Spočítáme úhel θ mezi vektorem vedoucím z pravého ohniska k bodu určujícímu polohu částice na elipse a vektorem opačným k vektoru vedoucímu z levého ohniska k částici na elipse.
- Otočíme vektor vedený z pravého ohniska k dané částici o polovinu úhlu θ a získáme tak směr hybnosti.
- Získaný směrový vektor znormujeme a vynásobíme velikostí hybnosti.
- Získáme tak hledaný vektor hybnosti. Směr hybnosti přitom odpovídá oběhu elektronu v kladném geometrickém směru.

Algoritmus využívá faktu, že úsečky vedené z ohnisek k libovolnému bodu na elipse svírají obě stejný úhel s tečnou elipsy v daném bodě. Přímka půlíčí jejich úhel je tedy zároveň kolmicí k tečně v daném bodě.

Nyní je třeba přejít od systému částice s redukovanou hmotností v poli centrální síly zpět k systému elektronu a protonu a spočítat jejich polohy a hybnosti v prostoru.

Transformační vztahy jsou ve shodě s [5]

$$x_1^{(p)} = -\frac{m^{(e)}}{m^{(p)} + m^{(e)}} A_1$$

$$\begin{aligned}
x_2^{(p)} &= -\frac{m^{(e)}}{m^{(p)} + m^{(e)}} A_2 \\
x_3^{(p)} &= 0 \\
x_1^{(e)} &= \frac{m^{(p)}}{m^{(p)} + m^{(e)}} A_1 \\
x_2^{(e)} &= \frac{m^{(p)}}{m^{(p)} + m^{(e)}} A_2 \\
x_3^{(e)} &= 0
\end{aligned}$$

Hybnost elektronu odpovídá vypočtené hybnosti částice s redukovanou hmotností. Protože pracujeme (vzhledem k atomu vodíku) v těžišťovém systému, je hybnost protonu opačná k hybnosti elektronu.

Algoritmem pro hledání bodu A je zajištěno, že těžiště atomu vodíku je v počátku a eliptická trajektorie elektronu je orientovaná tak, že osa x je rovnoběžná s poloosou elipsy a a osa y s poloosou elipsy b .

3.1.3 Generování počátečních podmínek pro antiproton

Máme tedy vygenerováno prvních 12 souřadnic ve fázovém prostoru. Zbývá určit souřadnice poslední částice, tedy antiprotonu.

Generování hybnosti a polohy antiprotonu v prostoru

Aby vzájemná poloha elektronu a antiprotonu byla náhodná, bude náhodně volen směr odkud \bar{p} přilétá. Nemusíme se tak pouštět do natáčení atomu vodíku v prostoru.

Náhodně vygeneruji směr, odkud antiproton přilétá. Náhodný vektor najdu následujícím postupem.

- Vygeneruji tři náhodná čísla (a, b, c) , všechna z intervalu $[-1, 1]$.
- Pokud platí, že $a^2 + b^2 + c^2 > 1$ opakuji postup dokud nenajdu vektor s normou menší nebo rovnou 1.
- Vektor (a, b, c) znormuji aby měl velikost 1. Získám směrový vektor (s_1, s_2, s_3)

Hybnost antiprotonu stanovím jako velikost jeho hybnosti p^{start} (parametr výpočtu) násobenou normovaným vektorem $(-s_1, -s_2, -s_3)$. Konkrétně

$$\begin{aligned} p_1^{(\bar{p})} &= -s_1 p^{start} \\ p_2^{(\bar{p})} &= -s_2 p^{start} \\ p_3^{(\bar{p})} &= -s_3 p^{start} \end{aligned}$$

Hlavním výstupem práce je spočítání účinného průřezu. Antiproton posíláme z testovací plochy. Tato plocha má tvar kruhu o poloměru r^{test} (parametr výpočtu).

Nejprve vygeneruji náhodně bod na kruhu o poloměru r^{test} . Udělám to následujícím postupem.

- Vygeneruji dvě čísla (g, h) z intervalu $[-r^{test}, r^{test}]$.
- Pokud $\sqrt{g^2 + h^2} > r^{test}$ generuji další dvojici dokud neplatí, že $\sqrt{g^2 + h^2} \leq r^{test}$.
- Bod (g, h) je náhodný na kruhu o poloměru r^{test} .

Posledním krokem je určení polohy antiprotonu v prostoru. Ve vzdálenosti antiprotonu r^{start} (parametr výpočtu) a ve směru vektoru (s_1, s_2, s_3) umístím kolmo na tento vektor testovací plošku o poloměru r^{test} a na ní vyberu dva kolmé vektory, které mi poslouží jako vektory báze. Souřadnici antiprotonu pak vypočítám jako součet vektoru ve směru (s_1, s_2, s_3) velikosti r^{start} a prvního vektoru báze násobeného složkou g vektoru (g, h) a druhého vektoru báze násobeného složkou h vektoru (g, h) .

K nalezení vektoru polohy antiprotonu použiju následující algoritmus.

- Najdu náhodný jednotkový vektor f stejným postupem jako jsem našel vektor (s_1, s_2, s_3) .
- Vektory f a (s_1, s_2, s_3) vektorově vynásobím. Postup opakuji dokud je výsledkem nulový vektor.
- Získám tak vektor kolmý na (s_1, s_2, s_3) .
- Nalezený vektor znormuji.

- Znormovaný vektor je prvním vektorem báze v .
- Vektor v vektorově vynásobím vektorem (s_1, s_2, s_3) .
- Získám jednotkový vektor w kolmý na vektory v a (s_1, s_2, s_3) .
- Vektor w tvoří druhý vektor báze.
- Trojice vektorů (s_1, s_2, s_3) , v a w tvoří ortonormální systém.
- Vektor polohy antiprotonu získám následovně.

$$\begin{aligned}x_1^{(\bar{p})} &= s_1 r^{start} + v_1 g + w_1 h \\x_2^{(\bar{p})} &= s_2 r^{start} + v_2 g + w_2 h \\x_3^{(\bar{p})} &= s_3 r^{start} + v_3 g + w_3 h\end{aligned}$$

Po určení polohy a hybnosti antiprotonu, máme máme vygenerovanou sadu všech 18 počátečních souřadnic a na souboru takto vygenerovaných stavů spustíme výpočet klasických trajektorií.

3.2 Výpočet klasických trajektorií

Výpočet trajektorií jsem provedl řešením Hamiltonových pohybových rovnic.

$$\begin{aligned}\dot{x}_i^{(j)} &= \frac{\partial H}{\partial p_i^{(j)}} \\ \dot{p}_i^{(j)} &= -\frac{\partial H}{\partial x_i^{(j)}} \\ i &= 1, 2, 3; j = e, p, \bar{p}\end{aligned}$$

Hamiltonián má tvar

$$H = T + V = \sum_{i,j} \frac{p_i^{(j)2}}{2m^{(j)}} + V$$

Potenciální energie má tvar

$$V = \sum_{j,k,j \neq k} V(j,k) = - \sum_{j,k,j \neq k} \frac{q^{(j)}q^{(k)}}{r^{(j)(k)}}$$

$r^{(j)(k)}$ je přitom vzdálenost j-té a k-té částice.

$$r^{(j)(k)} = \sqrt{\sum_i (x_i^{(j)} - x_i^{(k)})^2}$$

Je třeba si uvědomit, že velikost náboje částic v atomových jednotkách je vždy 1.

Hamiltonovy rovnice tvoří soustavu 18 obyčejných diferenciálních rovnic prvního řádu pro neznámé funkce popisující hybnosti a polohy všech zkoumaných částic. Soustava má tvar (pro i-tou souřadnici a (j)-tou částici).

$$p_i^{(j)} = \sum_{k,j \neq k} q^{(j)}q^{(k)} \frac{x_i^{(j)} - x_i^{(k)}}{r_{(j)(k)}^3}$$

$$x_i^{(j)} = \frac{p_i^{(j)}}{m^{(j)}}$$

Tyto rovnice řeším metodou Runge-Kuta s proměnnou délkou kroku (Cash-Karp), kterou jsem implementoval. Metoda je popsána v [6]. Jedná se o hybridní metodu s přesností úměrnou páté mocnině délky integračního kroku. Výhodou této metody je, že umožňuje stanovit požadovanou přesnost výpočtu a algoritmus sám řídí velikost integračního kroku. Metoda tak minimalizuje výpočetní nároky v místech s malými hodnotami derivací a naopak udržuje danou hodnotu chyby i v místech s velkou dynamikou zkoumaných funkcí.

3.3 Zpracování výsledků

Primárním cílem bylo určit účinný průřez pro několik typických termálních energií nalétávajícího antiprotonu. Dále jsem zpracovával statistické soubory energií protonia v případě jeho vzniku nebo soubory energií vodíku v případě, že po průletu antiprotonu zůstal elektron vázán v obalu protonu.

3.3.1 Zjišťování vzniku protonia

Protože máme o poznání větší výpočetní kapacitu než autoři průkopnických prací, bylo možné identifikovat vznik protonia až v době, kdy je to snadné

aniž by se zásadním způsobem zvýšily nároky na výpočetní kapacitu. Zároveň jsem si mohl dovolit postavit antiproton do velké vzdálenosti tak, že dráha elektronu nebyla nijak významně ovlivněna přítomností antiprotonu v této vzdálenosti. Jako tuto vzdálenost jsem volil $100a.u.$

Testy vzniku protonia jsem volil následujícím způsobem.

Kontroloval jsem, kdy se od sebe libovolné dvě částice vzdálí na vzdálenost větší než $100a.u.$

Pokud jsou pak proton a antiproton blíž než $100a.u.$ a pokud je jejich celková energie záporná, došlo ke vzniku protonia. V takovém případě lze sledovat jakou má daný vázaný stav energii.

Pokud jsou pak proton a elektron blíž než $100a.u.$ a jejich celková energie je záporná, zůstal zachován atom vodíku. V tomto případě lze sledovat energii atomu.

3.3.2 Účinný průřez

Ve shodě s [3] jsem určoval účinný průřez jako

$$\sigma = S \frac{N_{OK}}{N}$$

S je plocha, ze které antiprotony posíláme. V našem případě, je-li poloměr testovací plošky r^{test} platí

$$S = \pi r_{test}^2$$

N_{OK} je počet trajektorií, které vedly ke vzniku protonia a N je počet všech trajektorií souboru, pro které byly řešeny pohybové rovnice.

Standardní odchylku statistického souboru lze spočítat viz [3] jako

$$\sigma \sqrt{\frac{N - N_{OK}}{N N_{OK}}}$$

3.3.3 Statistické zpracování energií

Program pro výpočet trajektorií si pro každou trajektorii zvlášť ukládá údaje o energii protonia, pokud došlo k jeho tvorbě a o energii elektronu v atomu vodíku pokud došlo k jeho excitaci. Z těchto údajů je pak možné vycházet při statistickém zpracování výsledků (střední hodnoty, histogramy, ...). Pro grafický výstup histogramů byla použita knihovna NPlot.[9]

Kapitola 4

Výsledky

4.1 Nastavení parametrů výpočtu

Antiproton je vysílán z kruhové plochy o poloměru r^{test} . Většina trajektorií vedoucích ke vzniku protonia vychází z míst na ploše blízko středu. Přesto by plocha měla být dostatečně velká, aby do průřezu mohly být zahrnuty i trajektorie antiprotonů vylétajících daleko od jejího středu a tvořících protonium. S počtem příznivých trajektorií roste přesnost výpočtu (viz 3.3.2). Bylo by tedy dobré minimalizovat počet trajektorií nepříznivých. Tyto dva požadavky jsou ale do značné míry protichůdné. Pokud příliš zvětšíme plochu, vystavujeme se riziku, že jen málo trajektorií povede ke vzniku protonia a statistická chyba určení účinného průřezu bude velká. Na druhou stranu pokud plochu příliš snížíme, mohou ve výpočtu chybět některé trajektorie vedoucí na vznik protonia.

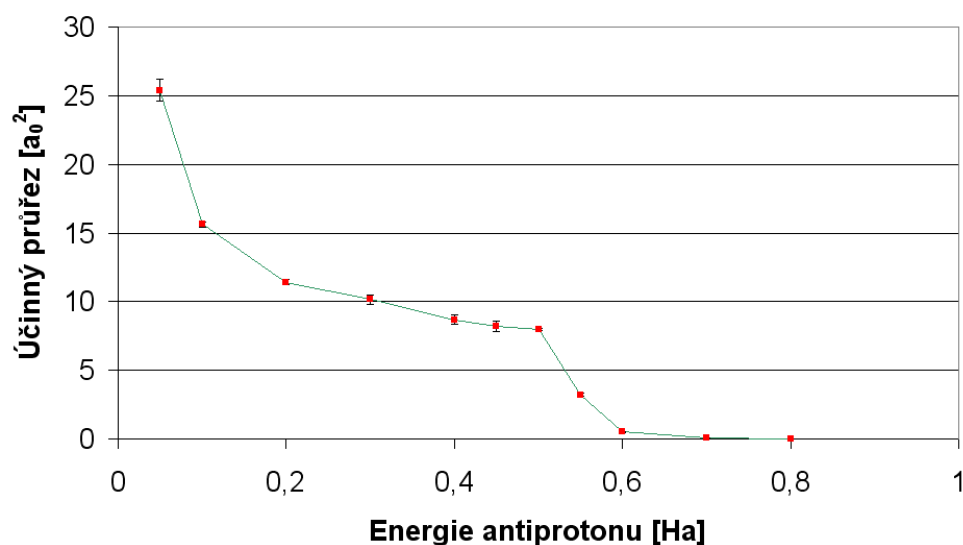
Poloměr kruhové plochy r^{test} jsem stanovil tak, že jsem provedl počáteční měření s velkým poloměrem pro několik tisíc trajektorií. Pak jsem zjišťoval, jaká byla největší vzdálenost antiprotonu od středu plochy r^{max} taková, že se uskutečnil zkoumaný proces. Tuto vzdálenost jsem pak zdvojnásobil a spustil výpočet s tímto nastavením poloměru. Pro některé energie jsem tuto proceduru neprovedl a poloměr stanovil jako poloměr pro nejbližší nižší energii. Jak se totiž ukázalo, s nárůstem energie antiprotonu, klesá účinný průřez a i poloměr r^{max} . Výpočet pro energii $0.05a.u.$ jsem dělal dodatečně a poloměr stanovil na $15a.u.$ Tato volba se ukázala být příliš nízká, protože nejdále nastala tvorba protonia blízko této hranici ve vzdálenosti $14.62a.u.$

4.2 Účinný průřez

Následující tabulka a graf uvádí výsledky výpočtů účinného průřezu pro jednotlivé energie nalétávajícího antiprotonu. V tabulce je uvedena energie antiprotonu E , účinný průřez σ a jeho chyba $\Delta\sigma$ (viz 3.3.2), chyba účinného průřezu v procentech, poloměr testovací plochy r^{test} , maximální vzdálenost od středu plochy taková, že z ní vedla příznivá trajektorie r^{max} a počet všech počítaných trajektorií v daném souboru.

Energie	σ	$\Delta\sigma$	V procentech	r^{test}	r_{max}	Trajektorií
0.05	25.40	0.79	3.12	15.00	14.62	27630
0.1	15.62	0.20	1.25	6.00	4.96	39983
0.2	11.41	0.18	1.55	7.20	3.04	54892
0.3	10.15	0.37	3.61	10.00	2.08	22994
0.4	8.69	0.32	3.70	10.00	2.41	25708
0.45	8.20	0.37	4.57	10.00	2.37	17856
0.5	8.000	0.077	0.96	4.90	2.57	90002
0.55	3.20	0.11	3.37	5.00	2.12	20671
0.6	0.501	0.011	2.11	2.90	1.89	116000
0.7	0.0573	0.0021	3.75	2.00	1.20	155103
0.8	0.0110	0.0018	16.43	2.00	0.65	42420

Účinný průřez tvorby protonia pro různé energie antiprotonu



[Graf 1]

Data se v rámci chyby shodují s daty v [2] a zpřesňují je. Původní výsledky jsou dostupné jako přídatný materiál k [1].

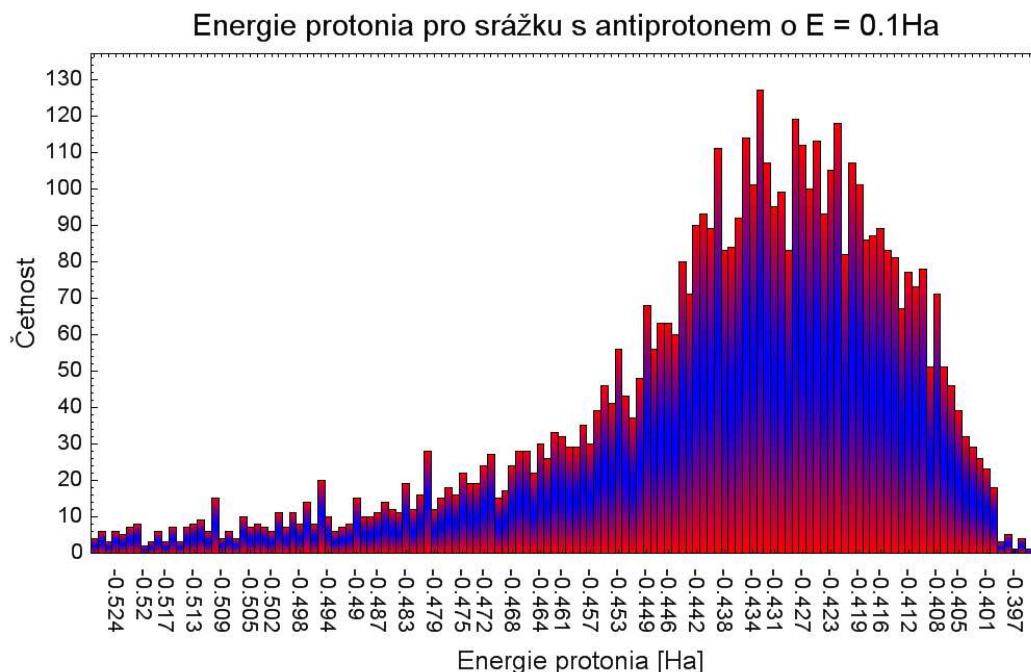
Na grafu účinného průřezu je zajímavé, že se vzrůstající energií antiprotonu účinný průřez klesá. Po dosažení energie antiprotonu 0.5 a.u. nastává zlom a pokles probíhá ještě rychleji.

Antiproton a atom vodíku na sebe vzájemně působí coulombickou interakcí. Vodík se působením pole antiprotonu polarizuje a vzniká indukovaný dipólový moment, který na antiproton působí přitažlivou silou úměrnou $1/r^4$, kde r je vzdálenost obou částic. Antiprotony s nižší rychlostí jsou tak delší čas v průběhu své dráhy vystaveny přitažlivému působení. To způsobí, že se při průletu více přiblíží k atomu vodíku. Je pak pravděpodobnější, že vyrazí elektron a vytvoří s protonem vázaný stav.

Proč dochází k poklesu v oblasti energií antiprotonu 0.5 a vyšších, bude diskutováno později.

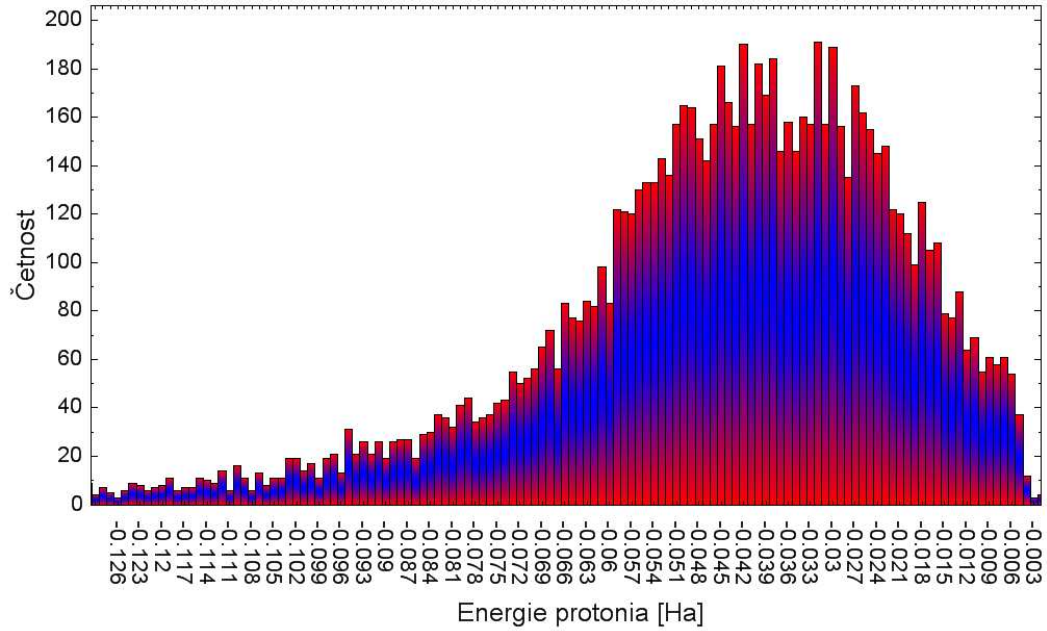
4.3 Četnosti jednotlivých energetických hladin protonia

Pro trajektorie, které vedou k tvorbě protonia jsem zpracoval statistiku jeho energií do histogramů. První z nich zachycuje rozložení energetických stavů protonia vzniklého při srážkách s antiprotonem o energii $0.1a.u.$, druhý při energii $0.5a.u.$ Měl jsem dostatečně velké soubory vytvořených částic, aby histogramy mohly být dost husté. V případě energie $0.1a.u.$ to bylo 5521, pro energii $0.5a.u.$ jsem měl 9546 případů vzniku protonia. Velikost dílku histogramu jsem zvolil $0.001a.u.$



[Graf 2]

Energie protonia pro srážku s antiprotonem o $E = 0.5\text{Ha}$



[Graf 3]

Z grafů jsou vidět některé zajímavé skutečnosti. Zatímco přechod k nižším energiím od místa maxima je pozvolný, při přechodu k energiím vyšším nastává velký a rychlý zlom do oblasti energií, kde se žádné protonium netvoří. Je to dáno ze zákona zachování energie. Ten má pro tvorbu protonia tvar

$$E_{col} - \frac{1}{2} = E_{el} + E_{p\bar{p}}$$

Kde E_{col} je energie nalétávajícího antiprotonu, $-\frac{1}{2}$ je energie základního stavu atomu vodíku E_{el} je kinetická energie vyraženého elektronu a $E_{p\bar{p}}$ je energie protonia. Energie $E_{p\bar{p}}$ je shora omezená výrazem $E_{col} - \frac{1}{2}$, protože E_{el} je kladná. Graf je ve skutečnosti také grafem četnosti kinetických energií elektronu. Energii $E_{p\bar{p}}$ odpovídá energie $E_{el} = E_{col} - \frac{1}{2} - E_{p\bar{p}}$.

Zajímavé také je, že pro různé energie nalétávajícího antiprotonu jsou různé typické střední hodnoty energie vytvořeného protonia. Vidíme, že pro energii nalétávajícího antiprotonu $0.1a.u.$ se tvoří pevně vázaný stav protonia, zatímco pro energii $0.5a.u.$ je tvořený stav silně excitovaný. Toho by se dalo využít při sestavování experimentů, kde je třeba, aby doba života protonia byla co nejdelší. I když je pro energie antiprotonu v blízkosti 0.1 větš

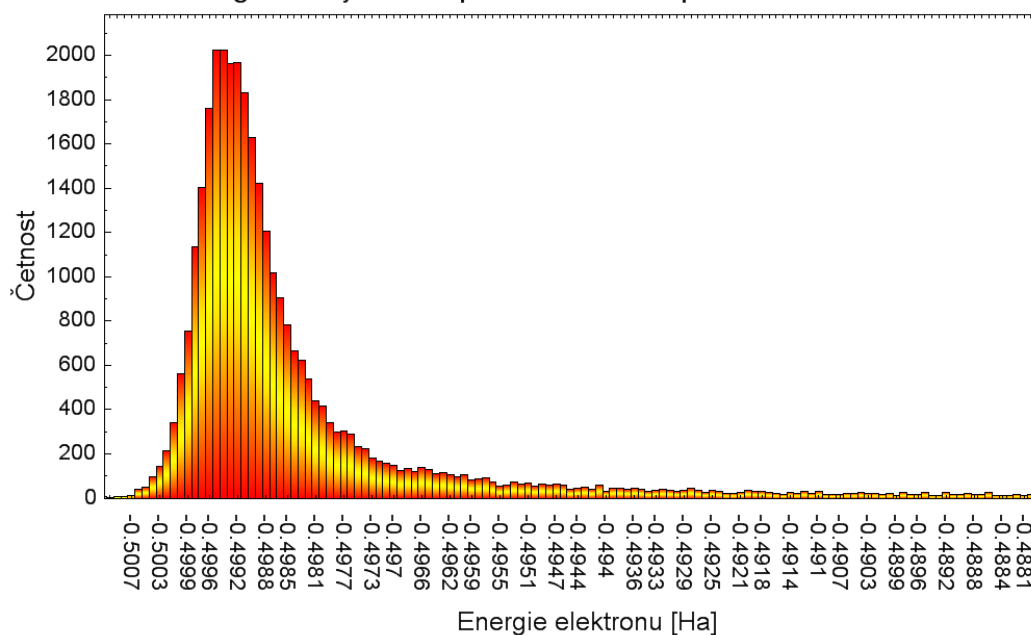
účinný průřez, je zároveň stav protonia pevněji vázaný a k jeho anihilaci dojde dříve než tomu je u silně excitovaného stavu pro energie antiprotonu blízko $0.5a.u.$. Z toho důvodu se jeví výhodnější ostřelovat vodík rychlejšími antiprotony s energií přibližně $0.5a.u.$

To, že se účinný průřez po dosažení $0.5a.u.$ tak rychle snižuje, je zřejmě dáno tím, že existuje jistá střední energie, kterou při vyražení elektronu z atomového obalu antiproton elektronu předá. Pokud dojde k předání této energie pro velkou počáteční hybnost antiprotonu, nesníží to jeho energii natolik, aby zůstal vázaný v atomu vodíku. Dojde tak k rozletu všech tří částic. Maximum četností by se tak v grafu odsunulo do oblastí s kladnými energiemi, kde už protonium nevzniká.

4.4 Četnosti jednotlivých energetických stavů vodíku

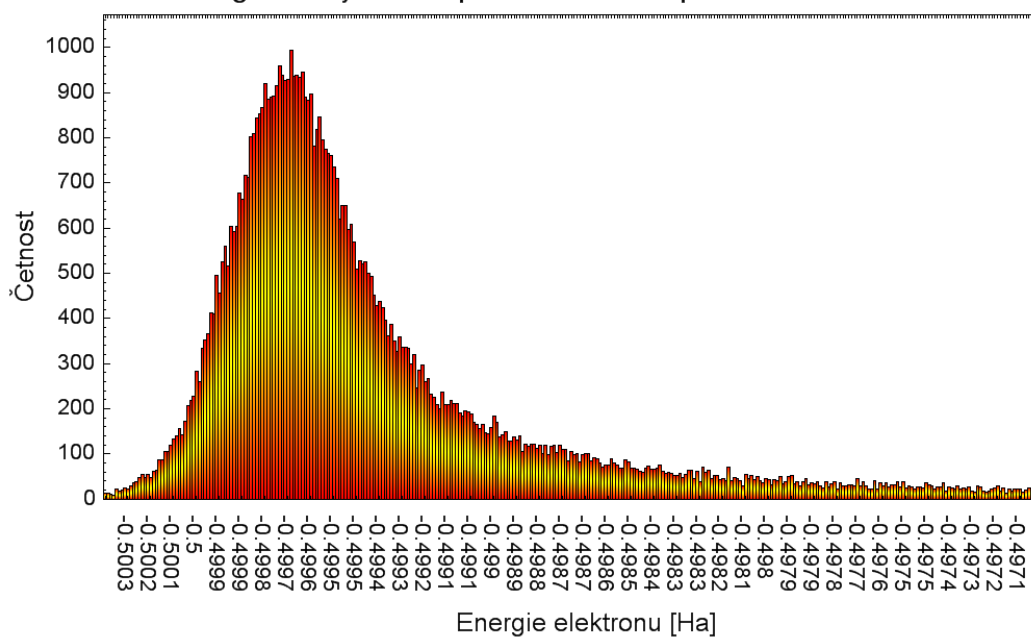
V porovnání s tvorbou protonia je mnohem typičtější případ, kdy elektron zůstane vázaný s protonem. Pro tyto stavy jsem měřil míru excitace elektronu průletem antiprotonu. Protože je tento případ nejběžnější, byla většina zkoumaných trajektorií právě tohoto typu. Pro energii $0.1a.u.$ jich bylo 34453 a pro energii $0.5a.u.$ 80394. Pro energii antiprotonu $0.5a.u.$ jsem zvolil $0.00001a.u.$ jako krok histogramu, pro energii $0.1a.u.$ jsem zvolil krok histogramu $0.0001a.u.$

Energie orbity vodíku pro srážku s antiprotonem o $E = 0.1\text{Ha}$



[Graf 4]

Energie orbity vodíku pro srážku s antiprotonem o $E = 0.5\text{Ha}$



[Graf 5]

Z grafů je zřejmé, že se jedná o velmi úzká rozložení. Přitom je širší distribuce energií u případu nalétajícího antiprotonu o energii $0.1a.u.$ To není příliš překvapivé, protože hybnost elektronu a antiprotonu jsou pro tuto energii bližší a je tedy snazší si ji vzájemně předávat.

To, že je spektrum úzké a v okolí energie základního stavu atomu je také indikátorem toho, že velikost plochy odkud letí antiprotony není malá, protože většina trajektorií významně neovlivní ani energetickou hladinu vodíku. Vliv má i to, že síla, kterou antiproton působí na elektron, když k atomu přilétá má přibližně opačný směr než síla, kterou na něj působí, když od atomu odlétá a vlivy obou částí se do značné míry kompenzují.

V histogramu se vyskytují i stavy s energií menší než je energie základního stavu atomu vodíku. Je to dáno použitým klasickým modelem, kde je možné, aby energetická hladina vodíku při interakci s antiprotonem klesla pod $0.5a.u.$ V kvantovém popisu by se takové stavy nemohly vyskytnout, neboť energie elektronu v atomu vodíku je zdola omezená energií jeho základního stavu.

4.5 Shrnutí

V práci byla navržena modifikace algoritmu CTMC snažší na implementaci oproti originálnímu algoritmu. Zlepšil jsem odhady přesnosti výpočtu účinného průřezu pro termální energie metodou CTMC oproti původní práci [2]. Byla vypočtena distribuce energií protonia pro různé energie nalétávajícího protonu. Dále byla nalezena souvislost mezi zvětšováním energie nalétávajícího antiprotonu a zvyšováním excitace energetické hladiny protonia. Na závěr byla diskutována fyzikální podstata zkoumaných jevů.

Příloha A

Dodatky

A.1 Atomové jednotky

Pro stabilitu numerické metody výpočtu diferenciálních rovnic je zásadní, aby použité proměnné měly přibližně stejný řád. To by zřejmě nebylo možné, pokud bychom pracovali v jednotkách SI. Proto je vhodné použít jiné jednotky. Pro daný účel bylo nejvhodnější zvolit atomové jednotky viz [8].

Jednotka	Název	Hodnota SI
délka	Bohrův poloměr	$5.291772108(18) \times 10^{-11} m$
hmotnost	klidová hmotnost elektronu	$9.1093826(16) \times 10^{-31} kg$
náboj	elementární náboj	$1.60217653(14) \times 10^{-19} C$
energie	Hartree	$4.35974417(75) \times 10^{-18} J$
moment hybnosti	Dirakova konstanta	$1.05457168(18) \times 10^{-34} Js$
čas		$2.418884326505(16) \times 10^{-17} s$

A.2 Hmotnost protonu

Hmotnost protonu a antiprotonu v atomových jednotkách uvádí [7]:

$$m_p = 1836.15267261(85)$$

Literatura

- [2] James S. Cohen: *Formation of protonium in collisions of antiprotons with H and H-*, PHYSICAL REVIEW A, vol.36, num. 5, 13th April 1987.
- [4] James S. Cohen: *Slowing down and capture of negative muons by hydrogen: Classical-trajectory Monte Carlo calculation*, PHYSICAL REVIEW A, vol.27, num. 1, January 1983.
- [8] Wikipedia: *Atomic units*, http://en.wikipedia.org/wiki/Atomic_units
- [7] The NIST Reference on Constants, Units and Uncertainty *proton-electron mass ratio*, <http://physics.nist.gov/cgi-bin/cuu/Value?mpsme>
- [5] M. Brdička, A. Hladík: *Teoretická mechanika*, Academia Praha 1987
- [6] W.H. Press, B.P. Flannery, S.A. Teukolsky, and W.T. Vetterlins: *Numerical Recipes in C: THE ART OF SCIENTIFIC COMPUTING*, (1988 - 1992), <http://www.nr.com>
- [1] James S. Cohen: *Capture of negative exotic particles by atoms, ions and molecules*, Rep. Prog. Phys. 67 (2004), 1769-1819 a textový soubor výsledků měření účinných průřezů na <http://ej.iop.org/links/q76/VLxJVmKugdoS5xyFI5MQIg/CrossSectionData.txt>
- [3] R. Abrines, I. C. Percival: *Classical theory of charge transfer and ionization of hydrogen atoms by protons*, Proc. Phys. Soc., 1966, vol. 88 (861 - 872)
- [9] NPLLOT: *Scientific Charting Library for .NET / C # /VB.NET*, <http://www.nplot.com/>