

П. Б. Кац, А. В. Кудравец

P. Kats, A. Kudravets

Брестский государственный университет имени А. С. Пушкина

(Брест, Беларусь)

**СРАВНЕНИЕ ТОЧНОСТИ ВАРИАНТОВ
УКОРОЧЕННОГО МОДИФИЦИРОВАННОГО МЕТОДА
ЛИДЖИАНА – КИНГА - ЖЕНГМИНГА 3А3D, 2А4D
И 2А3D ДЛЯ ВОДОРОДА, ГЕЛИЯ,
ЛИТИЯ, БЕРИЛЛИЯ И БОРА**

**COMPARISON OF ACCURACY
OF SHORTENED VARIANTS MODIFIED LIJIAN –
QING – ZHENGMING METHOD 3A3D, 2A4D
AND 2A3D FOR HYDROGEN, HELIUM, LITHIUM,
BERYLLIUM AND BORON**

Рассчитаны коэффициенты вариантов укороченного метода LQZ_S $3a3d$, $2a4d$ и $2a3d$ для первых пяти элементов таблицы Менделеева. Вычислена усредненная по энергиям относительная погрешность. Погрешность растет с номером элемента. Для всех рассмотренных элементов средняя погрешность метода LQZ_{S2a4d} в 2–3 раза выше погрешности метода LQZ_{S3a3d} . При переходе к LQZ_{S2a3d} погрешность возрастает незначительно. Для бора $\langle ER \rangle$ незначительно превышает 0,01 %. Таким образом, для легких элементов перспективным является использование метода LQZ_{S2a3d} , в котором используется 6 коэффициентов для элемента вместо тридцати, как в традиционном методе LQZ .

Coefficients of variants of the shortened method CLASS $3a3d$, $2a4d$ and $2a3d$ for the first five elements of the periodic table are calculated. The energy-averaged relative error is calculated. The error increases with the element number. For all the considered elements, the average error of the LQZ_{S2a4d} method is 2-3 times higher than the error of the LQZ_{S3a3d} method. When switching to LQZ_{S2a3d} , the error increases slightly. For boron, it slightly exceeds 0,01%. Thus, for light elements, it is promising to use the

LQZS2a3d method, which uses 6 coefficients for an element, instead of thirty, as in the traditional LQZ method.

Ключевые слова: рассеяние позитронов, моттовское сечение рассеяния, укороченный метод LQZ, легкие элементы.

Keywords: positron scattering, Mott differential cross section, shortened LQZ method, light elements.

В работах [1–2] был разработан метод аналитической аппроксимации моттовского сечения рассеяния. Этот метод позволяет легко вычислять моттовское сечение рассеяния, а также интегралы, его включающие. Такие интегралы требуются для расчетов повреждающего воздействия высокоэнергетических частиц на материалы. Мы называем данный метод LQZ – по первым буквам фамилий авторов [1]. В методе LQZ для каждого химического элемента надо вводить 30 коэффициентов d_z . В [2] показано, что точность метода для позитронов очень высока – погрешность для всех порядковых номеров элементов до 118 менее 0,05 %. В связи с этим мы предложили укороченный метод, в котором можно обойтись меньшим числом коэффициентов, сохраняя высокую точность.

В работах [1–2] был рассмотрен метод LQZ_s тремя коэффициентами a_j (LQZ_{s3a} для гелия для разного числа L). Было показано, что с уменьшением L погрешность метода растет, но остается крайне малой для L = 3.

В предыдущем докладе мы рассмотрели метод LQZ_{s2a} в применении к оганесону (Z = 118) и показали, что точность LQZ_{s2a4d} выше, чем LQZ_{s3a3d}.

В этой работе мы сравним точность вариантов метода 3a3d, 2a4d и 2a3d для пяти первых элементов таблицы Менделеева. Ниже в таблицах 1–3 приведены коэффициенты $d_z(j,k)$ для соответствующих методов. Коэффициенты метода 3a3d для гелия см. в [2].

Таблица 1 – 3a3d

j/k	1	2	3
Водород H (Z = -1)			
1	-0,010728	-0,016210	$1,40328 \cdot 10^{-5}$
2	-0,215621	-0,656731	0,499967
3	$-4,34075 \cdot 10^{-5}$	$-9,39840 \cdot 10^{-5}$	$-6,53267 \cdot 10^{-5}$
Литий Li (Z = -3)			
1	-0,031528	-0,048666	$2,15896 \cdot 10^{-4}$
2	-0,200276	-0,633152	-0,499958
3	$-3,61660 \cdot 10^{-4}$	$-8,35019 \cdot 10^{-4}$	$-5,24814 \cdot 10^{-4}$
Бериллий Be (Z = -4)			
1	-0,041585	-0,064927	$3,77207 \cdot 10^{-4}$
2	-0,192761	-0,622528	-0,494080

j/k	1	2	3
3	$-6,17812 \cdot 10^{-4}$	$-1,473049 \cdot 10^{-3}$	$-9,00992 \cdot 10^{-4}$
Бор В (Z=-5)			
1	-0,051401	-0,081210	$5,05178 \cdot 10^{-4}$
2	-0,185059	-0,608848	-0,500173
3	$-9,26340 \cdot 10^{-4}$	$-2,281206 \cdot 10^{-3}$	$-1,379587 \cdot 10^{-3}$

Таблица 2 – 2a4d

j/k	1	2	3	4
Водород Н (Z = -1)				
1	-0.010686	-0.016119	$7,20321 \cdot 10^{-5}$	$-1,41484 \cdot 10^{-5}$
2	-0,215621	-0,656731	-0.500093	$2,49065 \cdot 10^{-5}$
Гелий He (Z = - 2)				
1	-0.021080	-0.032065	$2,95793 \cdot 10^{-4}$	$-7,31987 \cdot 10^{-5}$
2	-0.208287	-0.645813	-0.500387	$1,68881 \cdot 10^{-4}$
Литий Li (Z = - 3)				
1	-0.0311831	-0.0478585	$6,80023 \cdot 10^{-4}$	$-1,20147 \cdot 10^{-4}$
2	-0.201021	-0.634916	-0.500897	$4,68532 \cdot 10^{-4}$
Бериллий Be (Z = -4)				
1	-0.040998	-0.063528	$1,22907 \cdot 10^{-3}$	$-1,02500 \cdot 10^{-5}$
2	-0.193915	-0.624209	-0.501640	$8,79341 \cdot 10^{-4}$
Бор В (Z= -5)				
1	-0.050528	-0.079103	$1,94188 \cdot 10^{-3}$	$4,55442 \cdot 10^{-3}$
2	-0.186968	-0.613668	-0.502625	$1,29434 \cdot 10^{-3}$

Таблица 3 – 2a3d

j/k	1	2	3
Водород Н (Z = -1)			
1	-0.010686	-0.016121	$7,60062 \cdot 10^{-5}$
2	-0.215710	-0.656923	-0.500101
Гелий He (Z = - 2)			
1	-0.021081	-0.032074	$3,16354 \cdot 10^{-4}$
2	-0.208284	-0.645792	-0.500434
Литий Li (Z = - 3)			
1	-0.031185	-0.047874	$7,13771 \cdot 10^{-4}$
2	-0.201015	-0.634857	-0.501029
Бериллий Be (Z = -4)			
1	-0.040999	-0.063529	$1,23195 \cdot 10^{-3}$
2	-0.193902	-0.624099	0.501887
Бор В (Z=-5)			
1	-0.050522	-0.079046	$1,81395 \cdot 10^{-3}$
2	-0.186950	-0.613505	-0.502989

В таблице 4 приводится усредненная по скоростям относительная ошибка $\langle ER \rangle$ для рассмотренных элементов.

Таблица 4 – Усредненная по скоростям относительная ошибка $\langle ER \rangle$, %

	LQZ	LQZ _{S3a3d}	LQZ _{S2a4d}	LQZ _{S2a3d}
H	$4,96 \cdot 10^{-5}$	$1,52 \cdot 10^{-4}$	$5,83 \cdot 10^{-4}$	$6,03 \cdot 10^{-4}$
He	$3,02 \cdot 10^{-4}$	$7,46 \cdot 10^{-4}$	$2,26 \cdot 10^{-3}$	$2,29 \cdot 10^{-3}$
Li	$7,09 \cdot 10^{-4}$	$1,75 \cdot 10^{-3}$	$4,96 \cdot 10^{-3}$	$5,08 \cdot 10^{-3}$
Be	$1,31 \cdot 10^{-3}$	$3,27 \cdot 10^{-3}$	$8,62 \cdot 10^{-3}$	$8,95 \cdot 10^{-3}$
B	$2,08 \cdot 10^{-3}$	$5,39 \cdot 10^{-3}$	$1,32 \cdot 10^{-2}$	$1,39 \cdot 10^{-2}$

Из таблицы видно, что погрешность растет с номером элемента. Для всех рассмотренных элементов средняя погрешность метода LQZ_{S2a4d} в 2–3 раза выше погрешности метода LQZ_{S3a3d}. При этом переход к LQZ_{S2a3d} приводит к незначительному возрастанию погрешности. Даже при использовании LQZ_{S2a3d}, где используется всего 6 коэффициентов, погрешность очень мала. Таким образом, для легких элементов перспективным является использование метода LQZ_{S2a3d}, в котором для данного химического элемента надо вводить не 30, а только 6 значений $d_z(j,k)$.

Список использованных источников

1. Lijian, T. Analitic Fitting to the Mott Cross Section of Electrons / T. Lijian, H. Qing, L. Zhengming // Radiat. Phys. Chem. – 1995, – V.45, № 2, – P. 235–245.
2. An Expression for the Mott Cross Section of Electrons and Positrons on Nuclei with Z up to 118 / M.J Boschini et al // Radiation Physics and Chemistry. – 2013. – V.90. – P. 39–66.
3. Кудравец А.В. Расчет коэффициентов укороченного модифицированного метода LQZ для гелия / А.В. Кудравец // Инновационные подходы к обучению физике, математике, информатике : материалы Междунар. студ. науч.-практ. интернет-конф., г. Минск, 22 апреля 2022 г. / Белорус. гос. пед. ун-т им. М. Танка; редкол. С. И. Василец, А. Ф. Климович (отв. ред.), В. Р. Соболев [и др.]. – Минск : БГПУ, 2022. – С. 41–44.
4. Кудравец, А.В. Варианты укороченного модифицированного метода LQZ для гелия / А.В. Кудравец // «НИРС-2022. Физика: научный и методический аспекты»: сб. материалов факультетской студенческой научной конференции, Брест, 26-27 апреля 2022 г. / Брест. гос. ун-т им. А. С. Пушкина ; под общ. ред. А. В. Демидчика. – Брест : БрГУ, 2022. – С. 9.