

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
И 2А4D ДЛЯ ВОЛЬФРАМА, ЗОЛОТА,
СВИНЦА, ТОРИЯ И УРАНА**

**COMPARISON OF ACCURACY OF VARIANTS
SHORTENED MODIFIED METHOD LIGIAN – QING –
ZHENGMING 3A3D AND 2A4D FOR TUNGSTEN,
GOLD, LEAD, THORIUM AND URANIUM**

Рассчитаны коэффициенты укороченного метода LQZ_{S2a4d} для позитронов для пяти элементов таблицы Менделеева с $Z = 74, 79, 82, 90$ и 92 и LQZ_{S3a3d} для $Z = 74, 79, 82, 90$. Вычислена усредненная по энергиям относительная погрешность. Для LQZ_{S3a3d} погрешность растет с номером элемента. Для всех рассмотренных элементов средняя погрешность метода LQZ_{S2a4d} ниже погрешности метода LQZ_{S3a3d} . Погрешность LQZ_{S2a4d} с ростом Z сначала убывает, а затем растет.

The coefficients of the shortened method LQZ_{S2a4d} for positrons for five elements of the periodic table with $Z = 74, 79, 82, 90$ and 92 and LQZ_{S3a3d} for $Z = 74, 79, 82, 90$ are calculated. The energy-averaged relative error is calculated. For LQZ_{S3a3d} , the error increases with the element number. For all the considered elements, the average error of the LQZ_{S2a4d} method is lower than the error of the LQZ_{S3a3d} method. The error of LQZ_{S2a4d} decreases first with the growth of Z , and then increases.

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

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

Общеизвестно, что рассеяние электронов и позитронов на точечном ядре в нерелятивистской механике описывается формулой Резерфорда. Такая же формула выводится в нерелятивистской квантовой механике. Однако в релятивистской квантовой механике дифференциальное сечение рассеяния электронов и позитронов – моттовское сечение рассеяния – выражается через условно сходящиеся ряды по полиномам Лежандра. При этом даже вычисление дифференциального сечения рассеяния является сложной задачей. Для практических нужд, например, для расчетов смещения атомов из узлов кристаллической решетки под действием релятивистских частиц требуется вычисление интегралов от моттовского сечения рассеяния. Иногда для облегчения таких расчетов применяют второе борновское приближение, но его точность мала для тяжелых элементов. В 1995 г. Лиджиан и др. [1] разработали метод аналитической аппроксимации моттовского сечения рассеяния. При этом нормированное моттовское сечение рассеяния (НМС) – отношение моттовского сечения рассеяния к резерфордовскому, модифицированному релятивистской формулой для импульса, – выражается аналитической функцией от угла рассеяния и скорости частицы. Это позволяет легко вычислять НМС, а также включающие его интегралы. Мы называем данный метод – LQZ – по инициалам авторов метода. В методе LQZ необходимо введение для каждого химического элемента значений 30 коэффициентов $d_z(j,k)$, где j меняется от 0 до 4, а k – от 1 до 6.

В работе [2] вычислены коэффициенты для 118 химических элементов как для электронов, так и для позитронов. При этом показано, что если для электронов погрешность растет с ростом Z , для позитронов погрешность остается очень маленькой для всех Z . В связи с этим у нас появилось желание исследовать укороченный метод LQZ – LQZ_s. В этом методе число коэффициентов для каждого химического элемента меньше – от 18 и ниже. Снижение количества коэффициентов несколько уменьшает точность, но при этом точность остается достаточно высокой для практического использования. Рассматриваются варианты укороченного метода, в которых выражение для НМС:

$$R_{LQZ_s}(\theta; Z, \beta) = 1 + \sum_{j=1}^{11} a_j(Z, \beta)(1 - \cos \theta)^{j/2}, \quad a_j(Z, \beta) = \sum_{k=1}^{12} d_z(j, k)(\beta - \bar{\beta})^{k-1}, \quad \bar{\beta} = 0,668269. \quad (2)$$

$\beta = \frac{v}{c}$ – отношение скорости частицы к скорости света в вакууме. $\bar{\beta}$ – усредненное значение относительной скорости. В текущее время мы исследуем точность приближений с разным числом коэффициентов a и d .

В предыдущем докладах было показано, что для рассеяния позитронов для легких элементов точность метода LQZ_{S3a3d} выше точности метода LQZ_{S2a4d}. Для оганесона ($Z = 118$) точность метода LQZ_{S2a4d} выше точности метода LQZ_{S3a3d} для

урана ($Z = 92$). В данной работе вычислена точность этих методов для некоторых тяжелых элементов, рассеяние на которых позитронов анализировалось в [3, 4].

В таблицах 1–2 приведены коэффициенты $d_z(j,k)$ для обоих методов. Коэффициенты для LQZ_{S3a3d} для урана см. в [5].

Таблица 1 – 3a3d

j/k	1	2	3
Вольфрам W ($Z = -74$)			
1	-0,262795	-0,783746	-0,577166
2	$4,55411 \cdot 10^{-4}$	-0,016087	-0,020872
3	$-1,64778 \cdot 10^{-4}$	-0,093265	-0,198367
Золото Au ($Z = -79$)			
1	-0,262360	-0,793585	-0,600310
2	$-1,23751 \cdot 10^{-4}$	-0,012651	-0,010047
3	$1,36566 \cdot 10^{-3}$	-0,091013	-0,201510
Свинец Pb ($Z = -82$)			
1	-0,261932	-0,797695	0,611191
2	$-6,01236 \cdot 10^{-4}$	-0,012317	$-6,67268 \cdot 10^{-3}$
3	$2,24239 \cdot 10^{-3}$	-0,089276	-0,202349
Торий Th ($Z = -90$)			
1	-0,260405	-0,803078	-0,630192
2	$-2,12284 \cdot 10^{-3}$	-0,016462	$-7,39288 \cdot 10^{-3}$
3	$4,39345 \cdot 10^{-3}$	-0,083680	-0,201574

Таблица 2 – 2a4d

j/k	1	2	3	4
Вольфрам W ($Z = -74$)				
1	-0,269046	-0,751573	-0,26349	0,446765
2	$9,40168 \cdot 10^{-3}$	-0,124893	-0,607601	-0,647261
Золото Au ($Z = -79$)				
1	-0,269882	-0,761960	-0,287192	0,434165
2	0,012453	-0,112409	-0,613113	-0,682588
Свинец Pb ($Z = -82$)				
1	0,270183	-0,766817	-0,299287	0,427009
2	0,014067	-0,105882	-0,617351	-0,703589
Торий Th ($Z = -90$)				
1	-0,270483	-0,77563	-0,323210	0,412103
2	0,017749	-0,091458	0,632415	-0,760280
Уран U ($Z = -92$)				
1	-0,270479	-0,777041	-0,327242	0,409736
2	0,018556	-0,088437	0,637075	-0,774830

В таблице 3 приводятся усредненные по скоростям относительные ошибки $\langle ER \rangle$ [1].

Таблица 3 – Усредненная по скоростям относительная ошибка $\langle ER \rangle$, %

	W	Au	Pb	Th	U
LQZ _{S3a3d}	0,660	0,762	0,824	0,986	1,03
LQZ _{S2a4d}	0,333	0,317	0,309	0,303	0,305

Для всех рассмотренных элементов погрешность LQZ_{S3a3d} выше погрешности LQZ_{S2a4d}. С ростом Z погрешность LQZ_{S3a3d} монотонно растет, как для ранее рассмотренных легких элементов, так и для тяжелых элементов. Погрешность LQZ_{S2a4d} уменьшается от вольфрама до тория, но для урана погрешность выше, чем у тория. Таким образом, можно предположить, что среди элементов с Z от 82 до 90 имеется элемент с минимальным значением погрешности LQZ_{S2a4d}. Также погрешность LQZ_{S2a4d} растет с ростом Z для легких элементов, следовательно, для какого-то элемента погрешность метода достигает максимума. Вопросы о поведении погрешности метода LQZ_{S2a4d} в зависимости от Z планируется рассмотреть в дальнейших исследованиях.

Список использованных источников

1. Lijian, T. Analytic 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. Oen, O.S. Cross sections for atomic displacements in solids by fast positrons / O.S. Oen // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. – 1988. – V. B33. – P. 744–747.
4. Evaluation of displacement damage in solids induced by fast positrons: Modeling and effect on vacancy measurement / Qiang Yan et al // Nuclear Materials and Energy. – 2021. – V. 27. – 101022.
5. Кац, П.Б. Рассмотрение вариантов укороченного модифицированного метода LQZ на примере урана / П. Б. Кац, А.В. Кудравец // Математическое моделирование и новые образовательные технологии в математике : сб. материалов Респ. науч.-практ. конф.; Брест, 28-29 апр. 2022 г. / Брест. гос. ун-т им. А.С. Пушкина ; под общ. ред. А.И. Басика. – Брест : БрГУ, 2022. – С. 190– 192.