

П. Б. Кац, А. В. Кудравец

P. Kats, A. Kudravets

*Брестский государственный университет имени А. С. Пушкина**(Брест, Беларусь)*

**УКОРОЧЕННЫЙ МЕТОД
ЛИДЖИАНА – КИНГА – ЖЕНГМИНГА
ДЛЯ ОЛОВА, БАРИЯ, ЛАНТАНА, ЦЕРИЯ,
ПРАЗЕОДИМА, НЕОДИМА И ПРОМЕТИЯ**

**THE SHORTENED LIGIAN–QING–ZHENGMING METHOD
FOR TIN, BARIUM, LANTHANUM, CERIUM,
PRASEODYMIUM, NEODYMIUM AND PROMETHIUM**

Проанализирована точность некоторых вариантов укороченного метода LQZ для некоторых элементов из средней части периодической системы элементов. Для LQZ_{S3a3d} и LQZ_{S2a3d} погрешность растет с номером элемента, для LQZ_{S2a4d} погрешность достигает максимума для празеодима ($Z = 59$), а затем начинает снижаться. Средние по углам и скоростям погрешности LQZ_{S3a3d} и LQZ_{S2a4d} примерно сравниваются для церия ($Z = 58$). При $Z > 58$ метод LQZ_{S2a4d} дает более точные результаты. Для церия при скоростях меньше 0,85 с лучше использовать LQZ_{S2a4d} , а при больших скоростях – LQZ_{S3a3d} .

The accuracy of some variants of the shortened LQZ method for some elements from the middle part of the periodic system of elements is analyzed. For LQZ_{S3a3d} and LQZ_{S2a3d} , the error increases with the element number, for LQZ_{S2a4d} , the error reaches a maximum for the praseodymium ($Z = 59$), and then begins to decrease. The average angular and velocity errors of LQZ_{S3a3d} and LQZ_{S2a4d} are approximately compared for cerium ($Z = 58$). For $Z > 58$ the LQZ_{S2a4d} method gives more accurate results. For cerium at speeds less than 0,85 s, it is better to use LQZ_{S2a4d} , and at high speeds – LQZ_{S3a3d} .

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

Keywords: positron scattering, Mott's differential cross section, shortened LQZ method.

Дифференциальное сечение рассеяния релятивистских электронов и позитронов на ядре описывается формулой Мотта [1]. Эта формула включает условно сходящиеся ряды по полиномам Лежандра. Для расчетов радиационного повреждения твердых тел высокоэнергетическими электронами и позитронами требуется брать интеграл от моттовского сечения рассеяния, что является очень сложной технической задачей. Часто для облегчения расчетов используют второе борновское приближение моттовского сечения рассеяния [2], но точность этого приближения для тяжелых элементов очень мала. Более приемлемо использование метода, разработанного Лиджианом и др. [3]. Мы называем этот метод LQZ – по фамилиям авторов. В этом методе для каждого химического элемента надо ввести 30 подгоночных коэффициентов d . При этом нормированное моттовское сечение (отношение моттовского сечения к модифицированной формуле Резерфорда) выражается в виде простой функции от угла рассеяния, которую легко проинтегрировать. Известно [4], что метод LQZ для позитронов приводит к очень маленькой погрешности (до 0,05 %) для всех Z . В связи с этим нам представляется целесообразным ввести укороченный метод LQZ_s, в котором для каждого химического элемента вводится не 30 коэффициентов, а меньше. Мы рассматриваем варианты метода LQZ_{s11a12d}. При этом число коэффициентов равно $l_1 \cdot l_2$. В частности исследуются варианты LQZ_{s3a3d} и LQZ_{s2a4d}, в которых число коэффициентов равно 9 и 8 соответственно. Такое уменьшение числа коэффициентов приводит к некоторому снижению точности, но она все равно остается достаточно высокой.

Из предыдущих докладов следует, что для легких элементов укороченный метод LQZ_{s3a3d} точнее метода LQZ_{s2a4d}, для $Z \geq 74$ ситуация обратная. При $Z \geq 74$ на некотором участке погрешность уменьшается с ростом Z . Отсюда следует, что во-первых, должен иметься локальный максимум погрешности LQZ_{s2a4d} в интервале $Z = 5 - 74$, а во-вторых, в этом интервале должен быть элемент, для которого погрешности методов LQZ_{s2a4d} и LQZ_{s3a3d} приблизительно равны.

В данной работе мы рассмотрели данные методы для элементов с $Z = 50, 56 - 60$. Данные по усредненной по скоростям относительной ошибке ER [1] внесены в таблицу. Там же приводится ошибка для LQZ_{s2a3d}.

Таблица 1 – Усредненная по скоростям относительная ошибка $\langle ER \rangle, \%$

	Sn	Ba	La	Ce	Pr	Nd	Pm
LQZ _{s3a3d}	0,256	0,335	0,350	0,3658	0,382	0,400	
LQZ _{s2a4d}	0,353	0,365	0,3662	0,36662	0,36667	0,3664	0,3658
LQZ _{s2a3d}	0,460	0,535	0,549	0,563	0,577	0,591	

Погрешности LQZ_{S2a3d} заметно превышают погрешности LQZ_{S2a4d} . Однако вплоть до $Z = 60$ (Nd) средняя погрешность не превышает 0,6%. Во всем рассмотренном диапазоне скоростей ER для Nd менее 1%. Максимальное значение погрешности имеет место для малых и больших скоростей (0,1 с и 0,999 с). Поэтому, метод LQZ_{S2a3d} до $Z = 60$ может использоваться, когда подобная погрешность допустима (см. рисунок 1). В диапазоне углов до 150° точность LQZ_{S2a3d} очень высока.

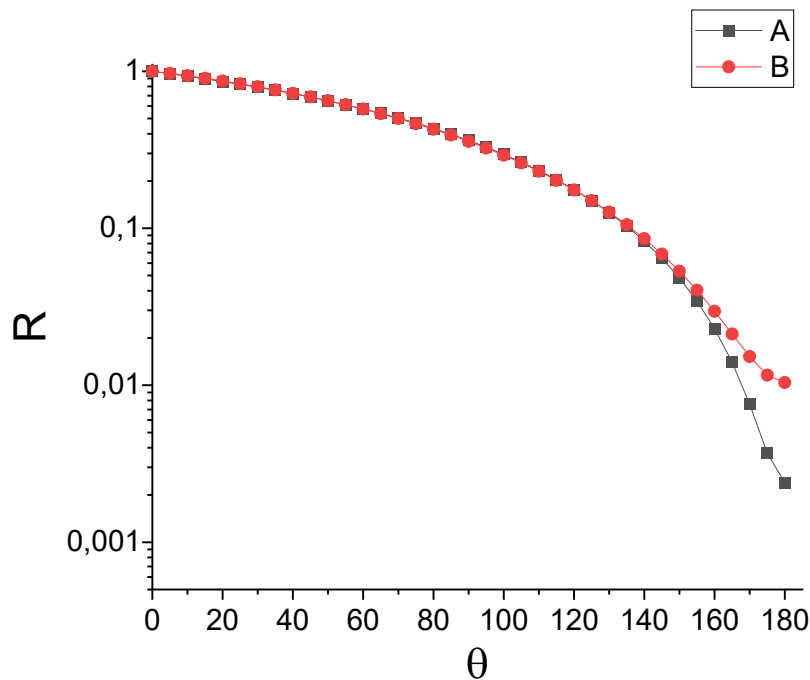


Рисунок 1 – Нормированное моттовское сечение для неодима. $\beta = 0,999$.

A – численный расчет, B – LQZ_{S2a3d}

Погрешность LQZ_{S3a3d} монотонно растет в рассмотренном диапазоне, как и в ранее рассмотренных.

Погрешность LQZ_{S2a4d} достигает максимума при $Z = 59$ (Pr), а затем начинает снижаться.

Погрешности LQZ_{S3a3d} и LQZ_{S2a4d} сравниваются при $Z = 58$ (Ce). Таким образом, можно заключить, что при $Z > 58$ перспективней использовать LQZ_{S2a4d} , а при $Z < 58$ – LQZ_{S3a3d} . На рисунке 2 приведена зависимость $ER(\beta)$ для LQZ_{S3a3d} и LQZ_{S2a4d} .

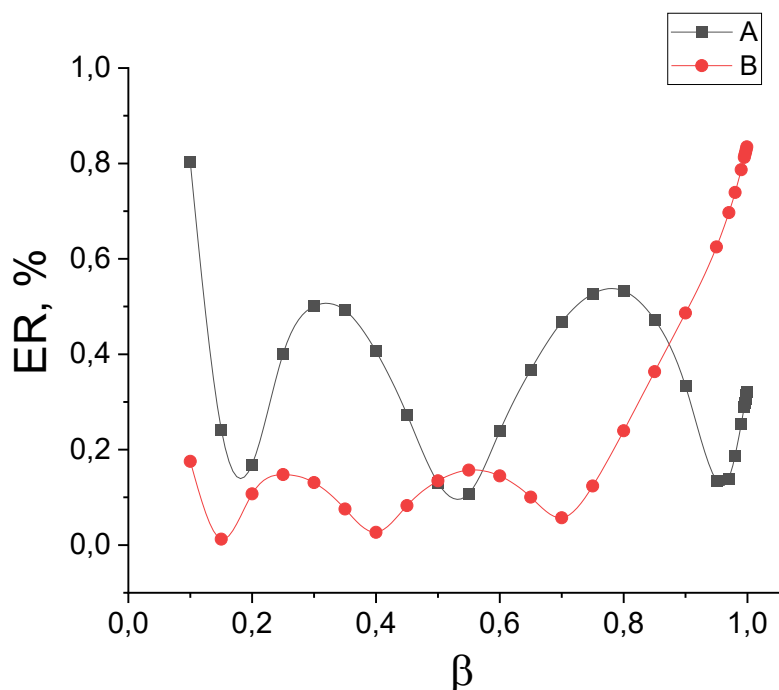


Рисунок 2 – Относительная ошибка $ER(\beta)$ для церия. А – LQZ_{S3a3d} , В – LQZ_{S2a4d}

Из рисунка видно, что для церия при скоростях меньше 0,85 с лучше использовать LQZ_{S2a4d} , а при больших скоростях – LQZ_{S3a3d} .

Приведем коэффициенты для методов LQZ_{S3a3d} и LQZ_{S2a4d} для церия.

Таблица 2 – 3a3d

j/k	1	2	3
1	-0,259891	-0,721298	-0,458447
2	$-1,54701 \cdot 10^{-3}$	-0,058591	-0,104627
3	$-5,25735 \cdot 10^{-3}$	-0,092596	-0,170590

Таблица 3 – 2a4d

j/k	1	2	3	4
1	-0,261664	-0,692868	-0,164196	0,471427
2	$-4,80515 \cdot 10^{-3}$	-0,181929	-0,599222	-0,521116

Таким образом, в докладе показано, что для LQZ_{S2a4d} погрешность достигает максимума для празеодима ($Z = 59$), а затем начинает снижаться. Средние по углам и скоростям погрешности LQZ_{S3a3d} и LQZ_{S2a4d} примерно сравниваются для церия ($Z = 58$). При $Z > 58$ метод LQZ_{S2a4d} дает более точные результаты. Для церия при скоростях меньше 0,85 с лучше использовать LQZ_{S2a4d} , а при больших скоростях – LQZ_{S3a3d} .

Список использованных источников

1. Mott, N.F. The Polarisation of Electrons by Double Scattering / N.F. Mott // Proc. Roy. Soc. A – 1932. – V. 135 – P. 429–458.
2. Khandelwal, G.S. Displacement Cross Sections for Fast Electrons Incident on Gold / G.S. Khandelwal, E. Merzbacher // Phys. Rev. – 1963. – V. 130, № 5. – P. 1822–1825.
3. 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.