УДК 539.171.016

П. Б. Кац, А.С. Римашевская
P. Kats, A. Rymasheuskaya
Брестский государственный университет
имени А. С. Пушкина
(Брест, Беларусь)

ТРИЖДЫ МОДИФИЦИРОВАННЫЙ МЕТОД ЛИДЖИАНА – КИНГА – ЖЕНГМИНГА ДЛЯ ЭЛЕМЕНТОВ С Z = 113 – 118

THRICE MODIFIED LIJIAN – QING – ZHENGMING METHOD FOR ELEMENTS WITH Z = 113 – 118

Вычислены коэффициенты для трижды модифицированного метода Лиджиана – Кинга – Женгминга (LQZ) для элементов с Z = 113 – 118. Усредненные по углам и скоростям погрешности трижды модифицированного метода (LQZ_{m3}) для всех рассмотренных элементов ниже, чем погрешности дважды модифицированного метода (LQZ_{m2}) и обычного метода (LQZ_m). Для Z = 118 погрешность при малых и больших скоростях для LQZ_m значительно меньше, чем для LQZ_{m2} и LQZ. При β = 0,16 точность LQZ_{m3} выше точности LQZ_{m2} и LQZ для большинства углов.

The coefficients for the thrice modified Lijian – Qing – Zhengming (LQZ) method for elements with Z = 113 – 118 are calculated. The errors averaged by angles and velocities of the thrice-modified Lijian – Qing – Zhengming method for all the elements considered are lower than the errors of the twice-modified method and the usual method. For Z = 118, the error at low and high velocities for the thrice modified method is significantly less than for the twice modified and conventional method. At β = 0.16, the accuracy of the thrice modified method is higher than the accuracy of the twice modified and conventional method for most angles.

Ключевые слова: рассеяние электронов, моттовское сечение рассеяния, метод Лиджиана – Кинга – Женгминга.

Keywords: electron scattering Mott’s differential cross section, Lijian – Qing – Zhengming method.

Во многих физических приложениях, например, при анализе разрушающего действия частиц космических лучей на аппаратуру космических аппаратов, влияния радиоактивных излучений на конструкционные элементы ядерных реакторов, потерь энергии тяжелых ионов в веществе требуется расчет моттовского дифференциального сечения рассеяния и интегралов от него.

Моттовское дифференциальное сечение рассеяния выражается через медленно сходящиеся ряды по полиномам Лежандра, потому расчеты с ним встречаются с большими техническими трудностями. В связи с этим для расчетов иногда используют борновские приближения. Но их точность для тяжелых ядер не достаточна. Одним из эффективных способов расчетов является метод Лиджиана – Кинга – Женгминга [1].

В этом методе нормированное моттовское сечение рассеяния НМС аппроксимируется аналитической функцией относительной скорости $\beta = \dfrac{\mathrm{v}}{c}$ и угла рассеяния θ:

$$R(\theta; Z, \beta) = \sum_{j=0}^{4} a_j(Z,\beta)(1-\cos\theta)^{j/2}, a_j(Z,\beta) = \sum_{k=1}^{6} d_Z(j,k)(\beta-\overline{\beta})^{k-1}, \overline{\beta} = 0{,}7181287. \quad (1)$$

$$R(\theta) = \sigma_M / \tilde{\sigma}_R, \tilde{\sigma}_R = \sigma_R(1-\beta^2), \sigma_R \equiv \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_R = \left(\frac{Ze^2}{2mv^2}\right)^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)}. \quad (2)$$

σ_R – резерфордовское сечение рассеяния, $\tilde{\sigma}_R$ – сечение Дарвина – Резерфорда [2], R – нормированное моттовское сечение. m – масса электрона, e – элементарный заряд, Z – порядковый номер элемента в периодической системе элементов Д. И. Менделеева.

В [3] мы предложили модифицированный и дважды модифицированный метод LQZ. В частности для LQZ_{m2} :

$$R_{LQZ\,m2}(\theta, Z, \beta) = 1 + \sum_{j=1}^{5} a_j(Z,\beta)(1-\cos\theta)^{j/2}, \overline{\beta} = 0{,}668269. \quad (3)$$

При таком выборе выражения для R обеспечивается стремление НМС к единице при θ → 0. Расчеты показали, что погрешность LQZ_{m2} в среднем по углам и скоростям ниже, чем LQZ для всех рассмотренных атомных номеров Z.

Мы разработали трижды модифицированный метод LQZ_{m3}, который отличается от дважды модифицированного метода тем, что при том же общем числе коэффициентов $d_Z(j,k)$ вычисляется не 5 коэффициентов $a_j(Z,E)$, а 6, и, соответственно, для каждого $a_j(Z,E)$ вычисляется не 6 $d_Z(j,k)$, а 5:

$$R_{LQZ\,\mathrm{m}3}(\theta,Z,\beta)=1+\sum_{j=1}^{6}a_j(Z,\beta)(1-\cos\theta)^{j/2}.\ a_j(Z,\beta)=\sum_{k=1}^{5}d_Z(j,k)(\beta-\overline{\beta})^{k-1}. \quad (4)$$

Для рассеяния электронов на копернции оказалось, что усредненная по углам и скоростям погрешность LQZ_{m3} в 1,34 раза меньше, чем LQZ_{m2} и в 2,48 раза меньше погрешности LQZ. В настоящей работе мы рассмотрели метод LQZ_{m3} для Z = 113 – 118. Метод LQZ_{m2} для этих элементов рассмотрен в [4].

В таблице 1 приведены коэффициенты $d_Z(j,k)$ для оганесона (Z = 118).

Таблица 1 **– Коэффициенты $d_Z(j,k)$. Оганесон (Z = 118)**

j/k	1	2	3	4	5
1	−0,625001	7,586650	37,31775	−56,04525	−227,0984
2	12,87557	−55,04708	−397,0441	464,6519	2272,396
3	−52,96765	102,5638	1268,787	−1090.133	−7087.61
4	80,28160	−49,24440	−1639,614	987,0585	9356,325
5	−48,8015	−0,881983	927,8085	−333,4748	−5505,976
6	10,35887	0,641256	−194,2360	20,99285	1192,885

В таблице 2 приводится среднее арифметическое значение по скоростям от 0,1 c до 0,999 c относительной ошибки ER [1].

Таблица 2 **– Среднее арифметическое значение относительной ошибки**

Z	112	113	114	115	116	117	118
$\langle ER\rangle_{LQZ}$, %	2,70	2,88	3,09	3,13	3,55	3,81	4,09
$\langle ER\rangle_{LQZm2}$, %	1,46	1,54	1,62	1,71	1,80	1,89	1,99
$\langle ER\rangle_{LQZm3}$, %	1,09	1,12	1,16	1,20	1,24	1,29	1,33

С ростом Z для всех трех методов растет погрешность, погрешность LQZ_{m3} ниже погрешности LQZ_{m2}, которая, в свою очередь, ниже погрешности LQZ.

Зависимость ER(β) изображена на рисунке 1. Также как для Z = 112, для Z = 118 погрешность при малых и больших скоростях для LQZ_{m3} значительно меньше, чем для LQZ_{m2} и LQZ. При β = 0,999 ER_{LQZ} = 2,1 %, ER_{LQZm2} = 0,50 %, ER_{LQZm3} = 0,37 %.

При β = 0,16 ER_{LQZm3} = 4,4 %, ER_{LQZm2} = 9,5 %, ER_{LQZ} = 18,7 %. На рисунке 2 изображена зависимость R(θ) для Z = 118 при β = 0,16. Как и при β = 0,15 для

$Z = 112$ точность метода LQZ_{m3} выше точности LQZ_{m2} и LQZ для большинства углов. Интересно отметить, что до примерно до $70°$ сечение Дарвина – Резерфорда, а примерно до $45°$ сечение Резерфорда ближе к моттовскому сечению, чем полученное с помощью LQZ_{m3}.

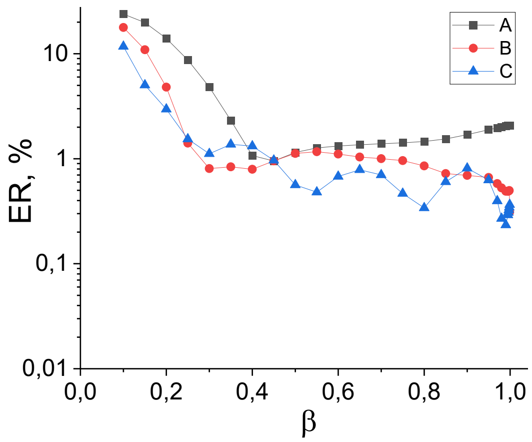

Рисунок 1 – Относительная ошибка ER как функция относительной скорости.
A – LQZ, B – LQZ_{m2}, C – LQZ_{m3}

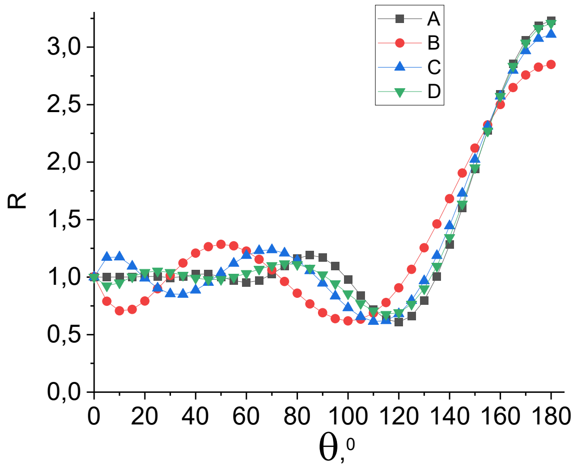

Рисунок 2 – Нормированное моттовское сечение. $Z = 118$, $\beta = 0{,}16$. A – численный расчет, B – LQZ, C – LQZ_{m2}, D – LQZ_{m3}

Таким образом, показано, что трижды модифицированный метод LQZ для тяжелых элементов, для которых погрешность обычного метода велика, дает меньшую погрешность, чем обычный метод и дважды модифицированный. Это может позволить выполнять более точные расчеты для сечения смещения атомов, необходимые для анализа повреждающего влияния высокоэнергетических излучений на материалы. Исследование данного метода планируется продолжить для других значений Z.

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. Влияние обратного моттовского рассеяния на бета-спектр при прохождении через поглотитель с учетом ионизационных потерь / А. Д. Левкович и др. // Вестник Белорусского государственного университета имени В. И. Ленина. Сер. 1, Физика. Математика. Механика. – 1990. – № 3. – С. 9–12.

3. Kats, P.B. Some approaches to the calculation of the normalized Mott cross section, displacement cross section, and the Mott correction to the Bethe formula / P.B. Kats, K.V. Halenka, I.D. Halenka, O.O. Voskresenskaya // Radiation Physics and Chemistry. – 2022. – V. 192. – P. 109919-109927.

4. Куликович Н.И. Расчет коэффициентов дважды модифицированного метода LQZ для некоторых сверхтяжелых элементов / Н.И. Куликович // 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. Соболь [и др.]. – Минск : БГПУ, 2022. – С. 44–47.