

науч.-практ. конф., Минск, 20–21 окт. 2022 г. / Белорус. гос. пед. ун-т им. М. Танка ; редкол.: С. И. Василец [и др.]. – Минск : БГПУ, 2022.

УДК 539.171.016

П. Б. КАЦ, А. С. РИМАШЕВСКАЯ

Брест, БрГУ имени А. С. Пушкина

МЕТОД LQZ_{m3} ДЛЯ ЭЛЕМЕНТОВ С $Z = 50-56$

Рассчитаны коэффициенты $d_z(j,k)$ для метода LQZ_{m3} для элементов с $Z = 50-56$. Значения коэффициентов приведены в таблице.

Таблица – Коэффициенты LQZ_{m3} для $Z = 50-56$

j/k	1	2	3	4	5
$Z = 50$					
1	0,180643	0,919615	1,721643	-1,974342	-4,871394
2	1,131233	2,493203	-9,928032	-2,892591	22,14781
3	-1,308204	-11,47420	4,273350	44,47346	2,11405
4	-0,126805	14,42706	15,20788	-81,96401	-162,1622
5	0,461337	-8,591464	-16,82810	56,38533	138,5037
6	-0,140918	1,883730	4,824262	-13,52002	-36,61043
$Z = 51$					
1	0,177699	0,885799	1,706153	-1,704983	-4,370206
2	1,111641	3,044518	-8,653189	-6,727512	13,09944
3	-1,101043	-12,86031	-1,180591	56,61186	76,60757
4	-0,439818	15,97603	23,15138	-97,39101	-211,2911
5	0,644213	-9,424513	-21,68378	65,12156	168,2961
6	-0,179894	2,052248	5,895728	-15,36109	-43,1409
$Z = 52$					
1	0,175264	0,846721	1,671994	-1,393648	-3,757588
2	1,083092	3,623161	-7,184674	-10,86232	3,025351
3	-0,869480	-14,28178	-7,132460	69,34441	113,6530
4	-0,778096	17,53770	31,60763	-113,2758	-262,9509
5	0,838772	-10,25281	-26,76720	73,98216	199,1310
6	-0,220910	2,217503	7,002512	-17,20352	-49,80837
$Z = 53$					
1	0,173363	0,802614	1,619385	-1,042115	-3,037424
2	1,045539	4,225382	-5,530043	-15,26749	-8,007062
3	-0,614055	-15,72576	-13,54394	82,55995	152,9649
4	-1,140317	19,09467	40,51106	-129,4547	-316,6818
5	1,043995	-11,06581	-32,03232	82,86221	230,6934

Продолжение таблицы

Z = 54					
1	0,172021	0,753785	1,548326	-0,652274	-2,211968
2	0,998976	4,846821	-3,696147	-19,91185	-19,93778
3	-0,335471	-17,17789	-20,37729	96,14257	194,2709
4	-1,524925	20,62778	49,79604	-145,7588	-372,0370
5	1,258712	-11,85202	-37,43296	91,65432	262,6757
Z = 55					
1	0,171367	0,700100	1,459103	-0,225530	-1,291528
2	0,942812	5,485724	-1,695290	-24,76228	-32,63255
3	-0,033193	-18,62978	-27,57423	109,9628	237,0744
4	-1,931615	22,12453	59,36671	-161,9962	-428,2716
5	1,482371	-12,60358	-42,90341	100,2355	294,5885
Z = 56					
1	0,171356	0,642242	1,352046	0,234772	-0,277148
2	0,877502	6,135307	0,463834	-29,77889	-46,04254
3	0,290951	-20,06147	-35,09426	123,8873	281,1430
4	-2,357576	23,55974	69,15689	-177,9832	-485,0020
5	1,713150	-13,30589	-48,39874	108,4930	326,1687

В [1] были рассчитаны коэффициенты для дважды модифицированного метода LQZ. На рисунке изображена зависимость относительной ошибки ER [2] от $\beta = v/c$ для $Z = 50$ для LQZ, LQZ_{m2} и LQZ_{m3}.

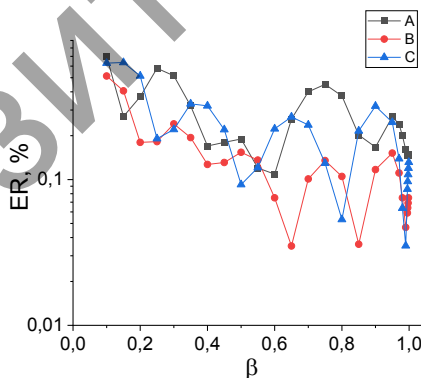


Рисунок – Относительная ошибка ER как функция относительной скорости. А – ER_{LQZ} , В – ER_{LQZm2} , С – ER_{LQZm3} для $Z = 50$

ER_{LQZm3} для многих скоростей выше, чем ER_{LQZ} .

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кац, П. Б. Коэффициенты дважды модифицированного метода LQZ для алюминия, меди, олова и свинца / П. Б. Кац, К. А. Мушинская // Современные научные проблемы и вопросы преподавания теоретической и математической физики, физики конденсированных сред и астрономии :

сб. материалов VIII Респ. науч.-практ. конф., Брест, 21 окт. 2021 г. / Брест. гос. ун-т им. А. С. Пушкина ; под общ. ред. А. В. Демидчика. – Брест : БрГУ, 2021. – С. 20–22.

УДК 539.171.016

П. Б. КАЦ, А. С. РИМАШЕВСКАЯ

Брест, БрГУ имени А. С. Пушкина

**ТРИЖДЫ МОДИФИЦИРОВАННЫЙ МЕТОД LQZ
ДЛЯ ПЕРВЫХ ДЕСЯТИ ЭЛЕМЕНТОВ ПЕРИОДИЧЕСКОЙ
СИСТЕМЫ Д. И. МЕНДЕЛЕЕВА**

В [1] предложен трижды модифицированный метод LQZ. Для тяжелых элементов ($Z = 112–118$) [2] этот метод приводит в среднем к меньшей погрешности, чем обычный и дважды модифицированный метод LQZ [3].

В данной работе рассчитаны коэффициенты $d_z(j,k)$ для LQZ_{m3} для элементов с $Z = 1–10$. Значения коэффициентов приведены в таблице 1.

Таблица 1 – Коэффициенты LQZ_{m3} для $Z = 1–10$

j/k	1	2	3	4	5
Водород H ($Z = 1$)					
1	0,010876	0,016224	$1,95421 \cdot 10^{-5}$	$-4,58790 \cdot 10^{-6}$	$-2,23417 \cdot 10^{-4}$
2	-0,230605	-0,679717	-0,500007	$1,33562 \cdot 10^{-5}$	$8,58883 \cdot 10^{-4}$
3	$6,98861 \cdot 10^{-4}$	$6,04219 \cdot 10^{-5}$	$3,68814 \cdot 10^{-5}$	$-1,888263 \cdot 10^{-5}$	$-1,44562 \cdot 10^{-3}$
4	$6,12894 \cdot 10^{-4}$	$-1,95008 \cdot 10^{-4}$	$-1,07228 \cdot 10^{-4}$	$1,51043 \cdot 10^{-5}$	$1,34465 \cdot 10^{-3}$
5	$-2,86025 \cdot 10^{-4}$	$1,12055 \cdot 10^{-4}$	$5,30886 \cdot 10^{-5}$	$-6,20566 \cdot 10^{-6}$	$-6,37449 \cdot 10^{-4}$
6	$5,45663 \cdot 10^{-5}$	$-2,40739 \cdot 10^{-5}$	$-1,02446 \cdot 10^{-5}$	$1,06297 \cdot 10^{-6}$	$1,23087 \cdot 10^{-4}$
Гелий He ($Z = 2$)					
1	0,021813	0,032488	$1,71266 \cdot 10^{-4}$	$-4,33722 \cdot 10^{-5}$	$-1,91659 \cdot 10^{-3}$
2	-0,237087	-0,691135	-0,500307	$7,59939 \cdot 10^{-5}$	$6,81422 \cdot 10^{-3}$
3	$-3,08125 \cdot 10^{-3}$	$1,53042 \cdot 10^{-4}$	$5,34974 \cdot 10^{-4}$	$-3,74771 \cdot 10^{-5}$	0,010919
4	$2,76235 \cdot 10^{-3}$	$-6,30022 \cdot 10^{-4}$	$-7,37248 \cdot 10^{-4}$	$-2,41705 \cdot 10^{-5}$	$9,79756 \cdot 10^{-3}$
5	$-1,31243 \cdot 10^{-3}$	$3,45652 \cdot 10^{-4}$	$3,38408 \cdot 10^{-4}$	$3,39633 \cdot 10^{-5}$	$-4,50788 \cdot 10^{-3}$
6	$2,53908 \cdot 10^{-4}$	$-7,18082 \cdot 10^{-5}$	$-6,26977 \cdot 10^{-3}$	$-9,49853 \cdot 10^{-6}$	$8,52613 \cdot 10^{-4}$
Литий Li ($Z = 3$)					
1	0,032786	0,048834	$5,896532 \cdot 10^{-3}$	$-1,33637 \cdot 10^{-4}$	$-6,63521 \cdot 10^{-3}$
2	-0,242634	-0,702653	-0,501082	$-2,80265 \cdot 10^{-5}$	0,021392
3	$-7,30682 \cdot 10^{-3}$	$4,92246 \cdot 10^{-4}$	$1,42628 \cdot 10^{-3}$	$6,44667 \cdot 10^{-4}$	-0,031611
4	$6,58596 \cdot 10^{-3}$	$-1,50151 \cdot 10^{-3}$	$-1,57519 \cdot 10^{-3}$	$-9,96340 \cdot 10^{-4}$	0,026502
5	$-3,14312 \cdot 10^{-3}$	$7,88640 \cdot 10^{-4}$	$6,09639 \cdot 10^{-4}$	$6,25102 \cdot 10^{-4}$	-0,011450
6	$6,10226 \cdot 10^{-4}$	$-1,59430 \cdot 10^{-4}$	$-9,69988 \cdot 10^{-5}$	$-1,40838 \cdot 10^{-4}$	$2,06469 \cdot 10^{-3}$