

Вестнік

Брэсцкага ўніверсітэта

Рэдакцыйная калегія

галоўны рэдактар
А. М. Сендзер

намеснік галоўнага рэдактара
А. Я. Будзько

адказны рэдактар
М. М. Сендзер

А. Б. Антаневіч (Беларусь)
А. І. Басік (Беларусь)
В. М. Волкаў (Беларусь)
М. А. Громаў (Расія)
А. У. Дзямідчык (Беларусь)
М. І. Ляўчук (Беларусь)
І. П. Маргынаў (Беларусь)
А. І. Мелькер (Расія)
В. С. Манахаў (Беларусь)
У. А. Плецохоў (Беларусь)
В. М. Радзькоў (Беларусь)
В. Р. Самойленка (Украіна)
А. А. Трафімук (Беларусь)
Уба Люба (Польшча)

Пасведчанне аб рэгістрацыі
ў Міністэрстве інфармацыі
Рэспублікі Беларусь
№ 1338 ад 28 красавіка 2010 г.

Адрас рэдакцыі:
224016, г. Брэст,
бульвар Касманаўтаў, 21
тэл.: +375-(162)-21-72-07
e-mail: vesnik@brsu.brest.by

Часопіс «Вестнік Брэсцкага
ўніверсітэта» выдаецца
са снежня 1997 года

Серыя 4

ФІЗІКА

МАТЭМАТЫКА

НАВУКОВА-ТЭАРЭТЫЧНЫ ЧАСОПІС

Выходзіць два разы ў год

Заснавальнік – установа адукацыі
«Брэсцкі дзяржаўны ўніверсітэт імя А. С. Пушкіна»

№ 2 / 2022

У адпаведнасці з Дадаткам да загада
Вышэйшай атэстацыйнай камісіі Рэспублікі Беларусь
ад 01.04.2014 № 94 у рэдакцыі загада Вышэйшай атэстацыйнай
камісіі Рэспублікі Беларусь ад 28.01.2022 № 14
(са змяненнямі, унесенымі загадам ВАК ад 20.09.2022 № 363)
часопіс «Вестнік Брэсцкага ўніверсітэта.

Серыя 4. Фізіка. Матэматыка»
ўключаны ў Пералік навуковых выданняў Рэспублікі Беларусь
для апублікавання вынікаў дысертацыйных даследаванняў у 2022 г.
па фізіка-матэматычных навуках (Фізіка)

◇ ◇ ◇

У адпаведнасці з дагаворам паміж установай адукацыі
«Брэсцкі дзяржаўны ўніверсітэт імя А. С. Пушкіна»
і ТАА «Навуковая электронная бібліятэка» (ліцэнзійны дагавор
№ 457-11/2020 ад 03.11.2020) часопіс «Вестнік Брэсцкага ўніверсітэта.

Серыя 4. Фізіка. Матэматыка»
размяшчаецца на платформе eLIBRARY.RU
і ўключаны ў Расійскі індэкс навуковага цытавання (РІНЦ)

УДК 539.171.016

Артем Вячеславович Архутик¹, Петр Борисович Кац²

¹студент-выпускник Брестского государственного университета имени А. С. Пушкина

²канд. физ.-мат.наук, доц., доц. каф. общей и теоретической физики
Брестского государственного университета имени А. С. Пушкина

Artsiom Arkhutsik¹, Piotr Kats²

¹Graduate Student of the Brest State A. S. Pushkin University

²Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor,
Associate Professor of the Department of General and Theoretical Physics
of the Brest State A. S. Pushkin University

e-mail: ¹artboyarh@gmail.com; ²katspyotr@yandex.ru

О ТОЧНОСТИ БОРНОВСКИХ ПРИБЛИЖЕНИЙ МОТТОВСКОГО СЕЧЕНИЯ РАССЕЯНИЯ

Рассмотрены первое, второе и третье борновские приближения моттовского сечения рассеяния. Рассчитана усредненная по углам и энергиям относительная ошибка всех трех борновских приближений для первых 30 элементов периодической системы элементов Д. И. Менделеева и второго и третьего приближений – для первых ста элементов. Проведено сравнение точности второго и третьего борновских приближений и метода LQZ для расчета нормированного моттовского сечения рассеяния на ядрах элементов с $Z = 1 - 6$. Проанализирована точность борновских приближений для расчета поправки Мотта в формуле Бете – Блоха для $Z = 1 - 27$ для второго борновского приближения и $Z = 1 - 100$ – для третьего приближения. Получено выражение для сечения первичного смещения атома в третьем борновском приближении. Для железа, серебра и свинца рассчитано сечение первичного смещения атома для ряда энергий электронов. Для ряда примеров рассчитано, начиная с какой энергии электронов отличие сечения, полученного по асимптотической формуле, от полученного по формуле МакКинли – Фешбаха, будет менее 1 %.

Ключевые слова: нормированное моттовское сечение, борновские приближения, относительная ошибка, поправка Мотта, сечение первичного смещения атома.

On the Accuracy of Born Approximations Mott Scattering Cross Section

The first, second and third Born approximations of the Mott scattering cross section are considered. The relative error of all three Born approximations averaged by angles and energies is calculated for the first 30 elements of the periodic system of elements of D. I. Mendeleev and the second and third approximations for the first hundred elements. The accuracy of the second and third Born approximations and the LQZ method for calculating the normalized Mott scattering cross section on the nuclei of elements with $Z = 1 - 6$ are compared. The accuracy of the Born approximations for calculating the Mott correction in the Bethe – Bloch formula for $Z = 1 - 27$ for the second Born approximation and $Z = 1 - 100$ for the third approximation is analyzed. An expression is obtained for the cross section of the primary displacement of the atom in the third Born approximation. For iron, silver and lead, the cross section of the primary displacement of the atom for a number of electron energies is calculated. For a number of examples, it is calculated starting from which electron energy the difference of the cross section obtained by the asymptotic formula from that obtained by the McKinley–Feshbach formula will be less than 1 %.

Key words: normalized Mott cross-section, Born approximations, relative error, Mott correction, cross-section of the primary displacement of the atom.

Введение

В 1911 г. вышла статья Резерфорда [1], в которой в рамках классической механики была выведена знаменитая формула Резерфорда для дифференциального сечения рассеяния заряженных частиц на точечном кулоновском центре.

Для рассеяния электронов и позитронов Резерфордское сечение выражается формулой:

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

В 1928 г. была решена соответствующая задача в нерелятивистской квантовой механике [2; 3]. По счастливой случайности классическая механика для кулоновского потенциала приводит к той же формуле, что и нерелятивистская квантовая механика, что позволило Резерфорду создать ядерную модель атома.

Немного позже Моттом было найдено решение задачи в рамках релятивистской квантовой механики [4; 5]:

$$\sigma_M \equiv \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_M = \left(\frac{\hbar}{mv} \right)^2 (1 - \beta^2) \left(\frac{\xi^2 |F_M|^2}{\sin^2(\theta/2)} + \frac{|G_M|^2}{\cos^2(\theta/2)} \right), \quad (2)$$

где

$$F_M(\theta) = \frac{1}{2} i \sum_{l=0}^{\infty} (-1)^k [k C_M^{(k)} + (k+1) C_M^{(k+1)}] P_k(\cos \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} F_M^{(k)} P_k(\cos \theta),$$

$$G_M(\theta) = \frac{1}{2} i \sum_{l=0}^{\infty} (-1)^k [k^2 C_M^{(k)} - (k+1)^2 C_M^{(k+1)}] P_k(\cos \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} G_M^{(k)} P_k(\cos \theta),$$

$$C_M^{(k)} = -e^{-i\pi\rho_k} \frac{\Gamma(\rho_k - i\eta)}{\Gamma(\rho_k + 1 + i\eta)}, \quad \eta = \frac{Z\alpha}{\beta}, \quad \xi = \eta \sqrt{1 - \beta^2}, \quad \rho_k = \sqrt{k^2 - (Z\alpha)^2}, \quad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c},$$

$$F_M(\theta) = F_0(\theta) + F_1(\theta), \quad G_M(\theta) = G_0(\theta) + G_1(\theta)$$

$$F_0(\theta) = \frac{1}{2} i \sum_{l=0}^{\infty} (-1)^k [k C_Z^{(k)} + (k+1) C_Z^{(k+1)}] P_k(\cos \theta),$$

$$G_0(\theta) = \frac{1}{2} i \sum_{l=0}^{\infty} (-1)^k [k^2 C_Z^{(k)} - (k+1)^2 C_Z^{(k+1)}] P_k(\cos \theta),$$

$$F_1(\theta) = \frac{1}{2} i \sum_{l=0}^{\infty} (-1)^k [k D^{(k)} + (k+1) D^{(k+1)}] P_k(\cos \theta),$$

$$G_1(\theta) = \frac{1}{2} i \sum_{l=0}^{\infty} (-1)^k [k^2 D^{(k)} - (k+1)^2 D^{(k+1)}] P_k(\cos \theta),$$

$$C_Z^{(k)} = -e^{-i\pi k} \frac{\Gamma(k - i\eta)}{\Gamma(k + 1 + i\eta)}, \quad D^{(k)} = C_M^{(k)} - C_Z^{(k)}.$$

Здесь α – постоянная тонкой структуры, Γ – гамма-функция, P_k – полиномы Лежандра.

Функции $F_0(\theta)$ и $G_0(\theta)$ могут быть записаны как

$$F_0(\theta) = \frac{i}{2} \frac{\Gamma(1 - i\eta)}{\Gamma(1 + i\eta)} \sin^{2i\eta} \left(\frac{\theta}{2} \right), \quad G_0(\theta) = -i\eta \frac{F_0(\theta)}{\tan^2(\theta/2)}. \quad (3)$$

Формулу (2) называют точной формулой для дифференциального сечения рассеяния.

Первое численное суммирование этих рядов было выполнено Моттом [5]. Начиная с этой работы, в подобных вычислениях начали вводить величину, равную отношению σ_M к модифицированному сечению Резерфорда ($\tilde{\sigma}_R$),

$$R(\theta) = \sigma_M / \tilde{\sigma}_R, \quad \tilde{\sigma}_R = \sigma_R(1 - \beta^2), \quad \beta = \frac{v}{c}, \quad (4)$$

или нормированное моттовское сечение (НМС). Его можно представить в виде:

$$R_M(\theta) = \frac{4\sin^2(\theta/2)}{\eta^2} \left[\xi^2 |F|^2 + \tan^2\left(\frac{\theta}{2}\right) |G|^2 \right]. \quad (5)$$

Так как точное моттовское сечение рассеяния (2) и НМС (5) включают медленно сходящиеся ряды, их применение – сложная задача. В связи с этим становится важным использование аналитических приближений.

Одним из способов получения таких приближений является разложение точного НМС в ряд по степеням αZ . Их называют борновскими приближениями моттовского сечения рассеяния [6].

Первое борновское приближение было получено самим Моттом [5]:

$$R_B(\theta) = 1 - \beta^2 \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right). \quad (6)$$

Второе борновское приближение было получено МакКинли и Фешбахом [7]:

$$R_{MF}(\theta) = R_B + \pi\alpha\beta Z \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \left[1 - \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \right]. \quad (7)$$

Третье борновское приближение получено Джонсоном, Вебером и Маллином [8]:

$$\begin{aligned} R_{JWM} = R_{MF} + (\alpha Z)^2 \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) & \left\{ L_2 \left[1 - \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \right] - 4L_2 \left[1 - \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \right] + 2\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \ln^2 \left[\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \right] + \right. \\ & + \frac{\pi^2}{2} \left[1 - \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \right] + \frac{\pi^2}{6} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) + \beta^2 \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \left(L_2 \left[1 - \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \right] + \frac{\sin^2(\theta/2) \ln^2[\sin(\theta/2)]}{1 - \sin^2(\theta/2)} + \right. \\ & \left. \left. + \frac{\pi^2}{4} \frac{1 - \sin(\theta/2)}{1 + \sin(\theta/2)} - \frac{\pi^2}{6} \right) \right\}, \quad (8) \end{aligned}$$

где L_2 обозначает дилогарифм Эйлера:

$$L_2(x) = -\int_0^x \frac{\ln(1-y)}{y} dy.$$

Первое борновское прилижение широко используется в физике частиц [9]. В этом приближении получена формула Бете – Блоха для потерь энергии заряженных частиц в веществе [10].

Второе борновское приближение часто используется при анализе радиационных повреждений вещества электронами [11–15]. В этом приближении получается простая формула для сечения первичного смещения атома электроном [16]. Также во втором борновском приближении была получена поправка Мотта к формуле Бете – Блоха [17].

Третье борновское приближение используется реже в связи с тем, что само представляет собой достаточно сложное выражение. Морган и Эби [18] получили поправку Мотта в формуле Бете – Блоха в третьем борновском приближении.

Точность борновских приближений оценивалась для различных частных случаев и самими авторами формул: [7; 8] и другими исследователями [18–22].

Одно из наиболее обширных сравнений расчетов во втором борновском приближении и точных расчетов дано Оеном [23].

Еще МакКинли и Фешбах оценили границы применимости своего метода как $Z\alpha \leq 0,2$, т. е. $Z \leq 27$. Однако существует ряд работ, в которых второе борновское приближение применяется к случаям $Z > 30$ [24–28].

В монографии [29, с. 15] утверждается, что вычисление по (7) при $Z \leq 40$ не превышает 1 %.

В представленной работе будет проанализирована точность борновских приближений для расчетов моттовского сечения рассеяния и поправки Мотта для широкого диапазона Z и β . Также для некоторых примеров будет вычислено сечение смещения атома и проанализированы условия применимости высокоэнергетического приближения для сечения смещения.

Проверка точности борновских приближений для моттовского сечения рассеяния

Для характеристики точности приближенных методов будем использовать понятие средней относительной ошибки ER , заимствованное из работы [30]:

$$ER = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{36} [R(\theta_i) - R^{EXACT}(\theta_i)]^2}{\sum_{i=1}^{36} [R^{EXACT}(\theta_i)]^2}}. \quad (9)$$

Было вычислено среднее арифметическое по энергиям средней относительной ошибки $\langle ER \rangle$ для 15 значений энергии – от 5 кэВ до 10 МэВ. Результаты представлены в таблице 1 и на рисунке 1.

Таблица 1. – Среднее арифметическое значение относительной ошибки

Z	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$\langle ER \rangle_B, \%$	0,41	0,83	1,3	1,7	2,2	2,6	3,1	3,6	4,1
$\langle ER \rangle_{MF}, \%$	$7,2 \cdot 10^{-3}$	0,029	0,066	0,12	0,18	0,27	0,37	0,48	0,61
$\langle ER \rangle_{JWM}, \%$	$9,0 \cdot 10^{-5}$	$7,1 \cdot 10^{-4}$	$2,4 \cdot 10^{-3}$	$5,6 \cdot 10^{-3}$	0,011	0,019	0,030	0,044	0,062
Z	10	11	12	13	14	15	16	17	18
$\langle ER \rangle_B, \%$	4,6	5,1	5,6	6,2	6,7	7,3	7,8	8,4	9,0
$\langle ER \rangle_{MF}, \%$	0,75	0,91	1,1	1,3	1,5	1,7	2,0	2,2	2,5
$\langle ER \rangle_{JWM}, \%$	0,085	0,11	0,14	0,18	0,225	0,27	0,33	0,39	0,46
Z	19	20	21	22	23	24	25	26	27
$\langle ER \rangle_B, \%$	9,6	10,2	10,8	11,4	12,0	12,7	13,3	14,0	14,6
$\langle ER \rangle_{MF}, \%$	2,8	3,1	3,4	3,8	4,1	4,5	4,9	5,3	5,7
$\langle ER \rangle_{JWM}, \%$	0,54	0,63	0,72	0,83	0,94	1,1	1,2	1,3	1,5

Окончание таблицы 1

Z	28	29	30	31	32	33	34	35	36
$\langle ER \rangle_B, \%$	15,3	16,0	16,7						
$\langle ER \rangle_{MF}, \%$	6,1	6,5	7,0	7,5	8,0	8,5	9,0	9,5	10,1
$\langle ER \rangle_{JWM}, \%$	1,6	1,8	2,0	2,2	2,4	2,6	2,8	3,1	3,3
Z	37	38	39	40	41	42	43	44	45
$\langle ER \rangle_{MF}, \%$	10,6	11,2	11,8	12,4	13,0	13,6	14,2	14,9	15,5
$\langle ER \rangle_{JWM}, \%$	3,6	3,9	4,1	4,4	4,8	5,1	5,4	5,8	6,1
Z	46	47	48	49	50	51	52	53	54
$\langle ER \rangle_{MF}, \%$	16,2	16,9	17,6	18,3	19,0	19,7	20,5	21,2	22,0
$\langle ER \rangle_{JWM}, \%$	6,5	6,9	7,3	7,7	8,2	8,6	9,1	9,6	10,1
Z	55	56	57	58	59	60	61	62	63
$\langle ER \rangle_{MF}, \%$	22,7	23,5	24,3	25,1	25,9	26,7	27,5	28,3	29,2
$\langle ER \rangle_{JWM}, \%$	10,6	11,1	11,6	12,2	12,7	13,3	13,9	14,5	15,1
Z	64	65	66	67	68	69	70	71	72
$\langle ER \rangle_{MF}, \%$	30,0	30,9	31,7	32,6	33,4	34,3	35,2	36,0	36,9
$\langle ER \rangle_{JWM}, \%$	15,7	16,4	17,0	17,7	18,4	19,1	19,8	20,5	21,2
Z	73	74	75	76	77	78	79	80	81
$\langle ER \rangle_{MF}, \%$	37,8	38,7	39,6	40,4	41,3	42,2	43,1	44,0	44,9
$\langle ER \rangle_{JWM}, \%$	22,0	22,7	23,5	24,3	25,0	25,8	26,6	27,5	28,3
Z	82	83	84	85	86	87	88	89	90
$\langle ER \rangle_{MF}, \%$	45,8	46,7	47,6	48,5	49,3	50,2	51,1	52,0	52,9
$\langle ER \rangle_{JWM}, \%$	29,1	30,0	30,8	31,7	32,5	33,4	34,3	35,1	36,0

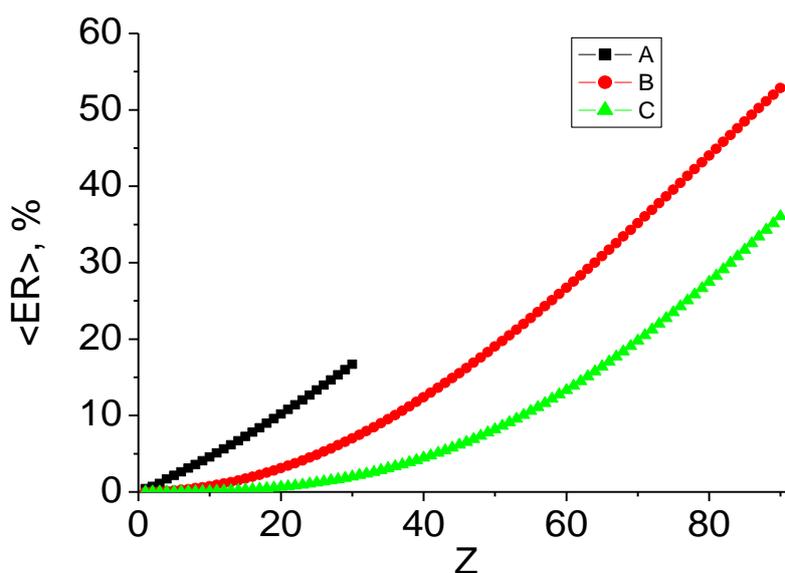
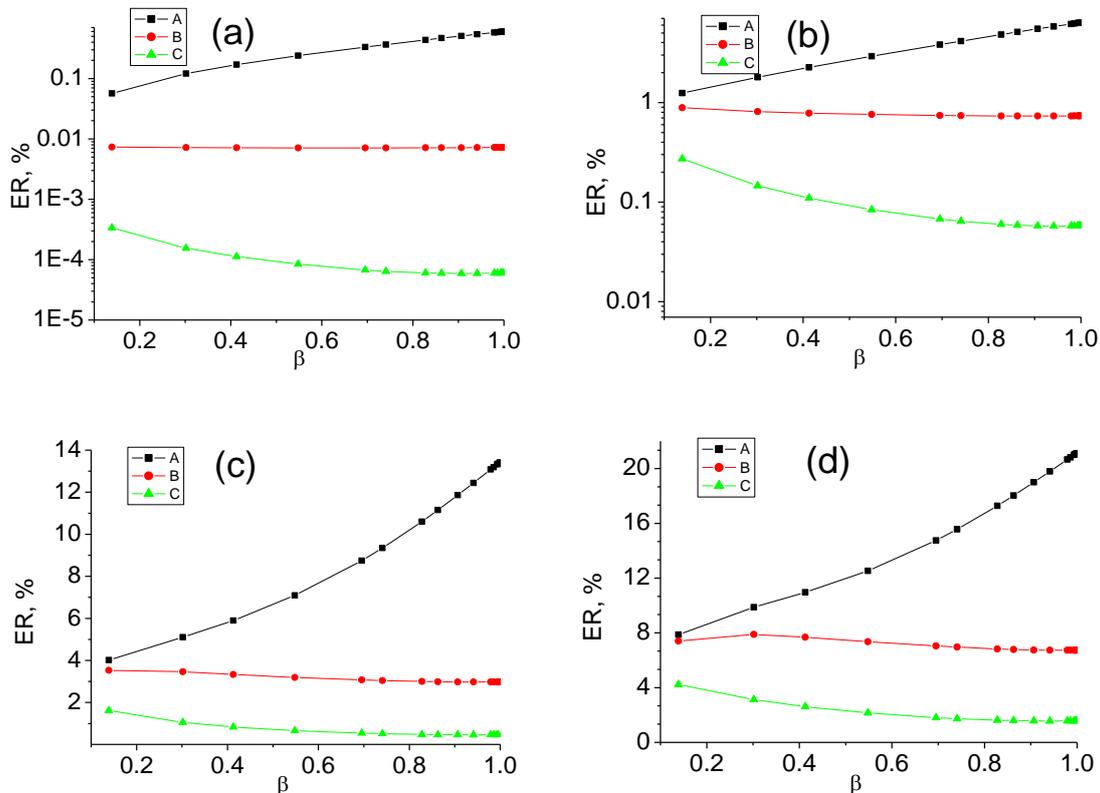


Рисунок 1. – Среднее арифметическое значение относительной ошибки А – $\langle ER \rangle_B$, , В – $\langle ER \rangle_{MF}$, , С – $\langle ER \rangle_{JWM}$.

На рисунке 2 представлена зависимость $ER(\beta)$ для элементов с $Z = 1, 10, 20$ и 30 .



**Рисунок 2. – ER как функция относительной скорости.
A – ER_B , B – ER_{MF} , C – ER_{JWM} для $Z = 1$ (a), 10 (b), 20 (c), 30 (d)**

Из рисунка видно, что погрешность первого борновского приближения растет с ростом скорости, погрешность второго борновского приближения слабо зависит от скорости, а погрешность третьего борновского приближения с ростом скорости уменьшается. Точность растет с номером приближения.

$\langle ER \rangle_B$ превышает 1 % для лития, 3 % для азота, 5 % для натрия, 10 % для кальция и 15 % для никеля. $\langle ER \rangle_{MF}$ превышает 1 % для магния, 3 % для кальция и 5 % для железа. Обычно считается, что приближение МакКинли – Фешбаха применимо до $Z = 27$.

По нашим расчетам, $\langle ER \rangle_{MF}$ при этом достигает 5,7 %. $\langle ER \rangle_{MF}$ превышает 10 % для криптона, 15 % для родия и 20 % для теллура.

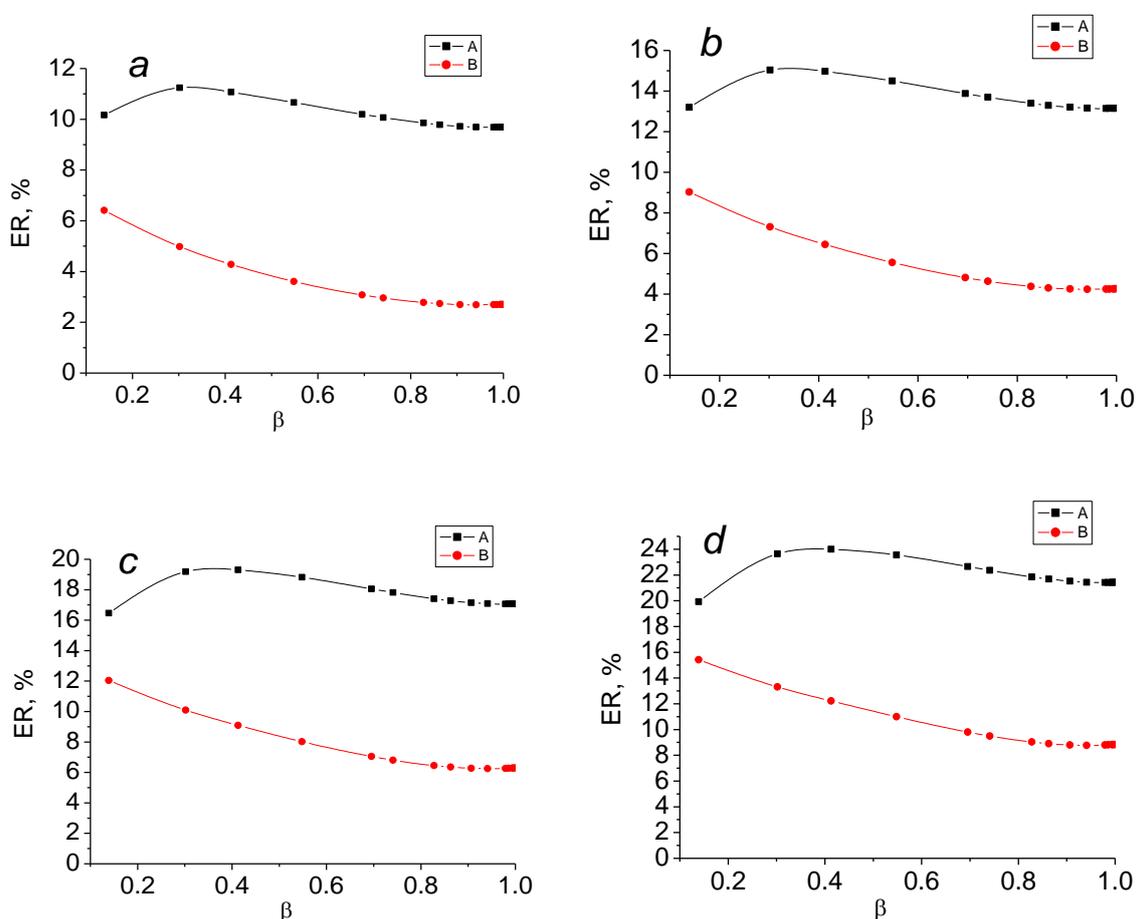
$\langle ER \rangle_{JWM}$ превышает 1 % для хрома, для цинка достигает 2 %.

Усредненная по углам и энергиям относительная ошибка при вычислении НМС превышает 10 % для первого борновского приближения, начиная с $Z = 20$, для второго – с $Z = 36$, для третьего – с $Z = 54$.

На рисунке 3 представлена зависимость $ER(\beta)$ для элементов с $Z = 36, 42, 48$ и 54 . Из рисунка видно, что погрешность второго борновского приближения сначала растет с ростом скорости, достигает максимума в районе $\beta = 0,3-0,4$ и затем уменьшается.

По нашим расчетам, для $Z = 40$ $\langle ER \rangle_{MF}$ превышает 12 %, при 25 кэВ $ER = 13,7$ %. При этом относительная погрешность вычисления нормированного моттовского сечения для этой энергии превышает 20 % при углах рассеяния более 150° . Это опровергает

утверждение, приведенное в [29], что погрешность второго борновского приближения для $Z \leq 40$ не превышает 1 %. Интересно, что до 87° относительная погрешность менее 10 %, а до 60° погрешность второго борновского приближения меньше, чем третьего. Надо отметить при этом, что само нормированное сечение в этой области углов и энергий мало отличается от единицы (менее чем на 10 %).



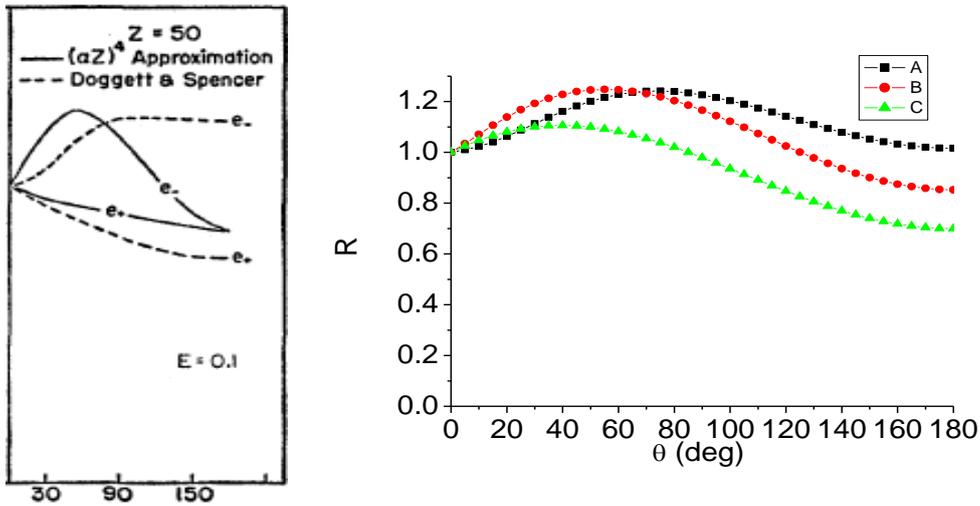
**Рисунок 3. – ER как функция относительной скорости.
 А – ER_{MF} , В – ER_{JWM} для $Z = 36$ (a), 42 (b), 48 (c), 54 (d)**

В [8], согласно графику, наблюдается очень заметная разница между нормированным сечением рассеяния, вычисленным с помощью численного расчета и полученным в третьем борновском приближении для олова при энергии электронов 0,1 МэВ. На рисунке 4 приведен график из [8] и построенный нами. На фрагменте графика из [8] приведены также графики для позитронов. Как видно из нашего графика, на самом деле третье борновское приближение не дает такой погрешности. Можно предположить, что в [8] допущена ошибка для графика точного нормированного моттовского сечения.

На рисунке 5 представлена зависимость ER от относительной скорости $\beta = v/c$ для $Z = 60, 70, 80$ и 90 . Для больших Z становится заметным наличие максимума на графике $\langle ER \rangle_{MF}$. С ростом Z положение максимума погрешности смещается в сторону больших скоростей. Для $Z = 22$ максимальное значение ER достигает в районе $\beta = 0,2$, для $Z = 60$ – в районе $\beta = 0,42$, для $Z = 90$ – в районе $\beta = 0,55$.

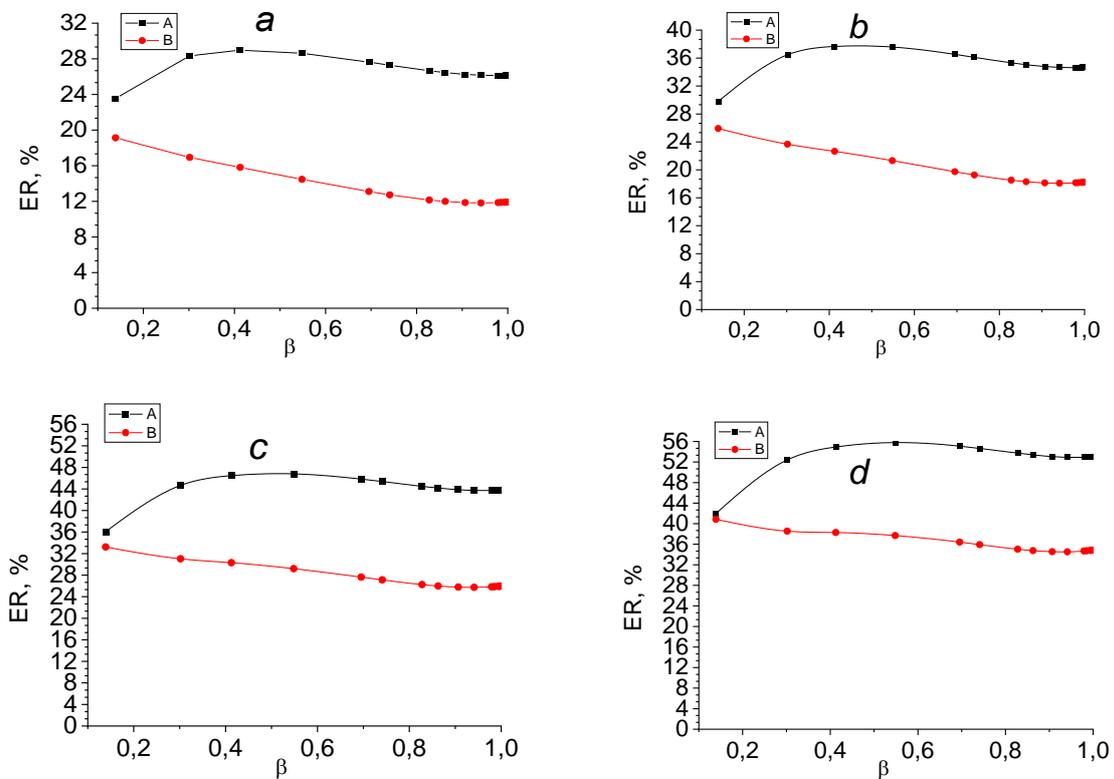
На рисунке 6 приведены графики зависимости НМС $R(\theta)$ от для разных энергий для $Z = 27$, до которого считается применимым второе борновское приближение.

До энергии 25 кэВ точность нерелятивистского приближения (резерфордское сечение) оказывается выше точности первого и второго борновского приближений.



A – результат численного расчета НМС, *B* – третье борновское приближение, *C* – второе борновское приближение.

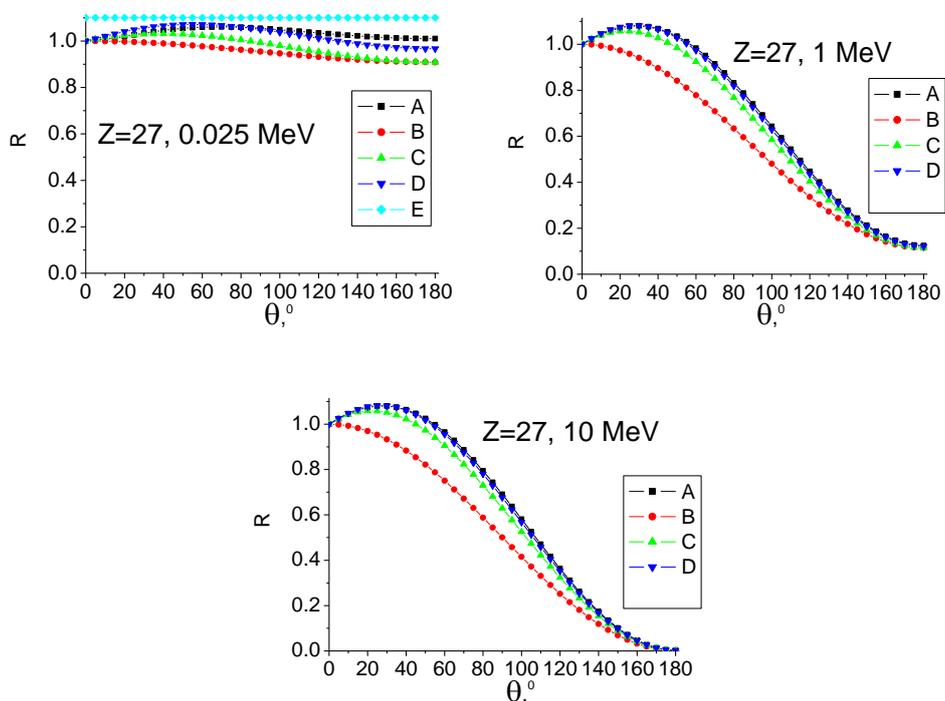
Рисунок 4. – Сравнение численного расчета и третьего борновского приближения для олова при энергии электронов 0,1 МэВ согласно [8] и нашим расчетам



A – ER_{MF} , *B* – ER_{JWM} для $Z = 60$ (a), 70 (b), 80 (c), 90 (d)

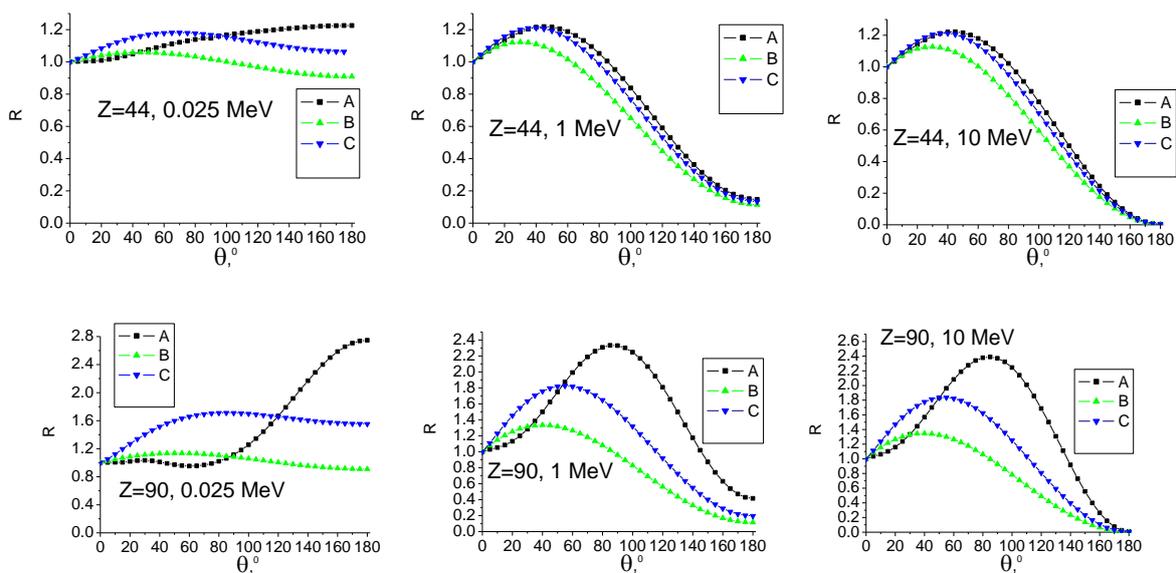
Рисунок 5. – ER как функция относительной скорости

Для $Z = 44$ $\langle ER \rangle_{JWM}$ близка к $\langle ER \rangle_{MF}$ для $Z = 27$. Графики для $Z = 44$ и $Z = 90$ приведены на рисунке 7.



A – численный расчет, B – первое борновское приближение, C – второе борновское приближение, D – третье борновское приближение, E – нерелятивистское приближение для рассеяния электронов с энергией 0,025 МэВ, 1 МэВ и 10 МэВ на ядрах с $Z = 27$

Рисунок 6. – НМС $R(\theta)$ как функция угла рассеяния



A – численный расчет, B – второе борновское приближение, C – третье борновское приближение для электронов с энергией 0,025 МэВ, 1 МэВ и 10 МэВ на ядрах с $Z = 44$ и 90.

Рисунок 7. – НМС как функция угла рассеяния

Сравнение точности борновских приближений и метода LQZ для расчета нормированного моттовского сечения рассеяния на ядрах легких элементов

В 1995 г. в [30] предложено новое приближение, основанное на аналитическом фитировании точного моттовского сечения. Мы называем это приближение LQZ.

Для каждого элемента с помощью метода наименьших квадратов рассчитываются 30 коэффициентов.

Как показали авторы [30], LQZ приводит к малой погрешности. С ростом порядкового номера элемента погрешность борновских приближений растет, и для больших Z предпочтительным оказывается использование метода LQZ.

В данном разделе мы рассмотрим вопрос, существуют ли элементы, для которых точность борновских приближений превышает точность метода LQZ.

Вычислена средняя относительная ошибка ER для 26 скоростей от 0,1 c до 0,999 c для методов MF, JWM и LQZ, а также усреднение этой величины по скоростям. При этом коэффициенты для метода LQZ брались из работ [30] и [31]. Результаты приведены в таблице 2.

Таблица 2. – Среднее арифметическое значение относительной ошибки

Z	1	2	3	4	5	6
$\langle ER \rangle_{MF}, \%$	$7,2 \cdot 10^{-3}$	0,029	0,066	0,12	0,19	0,27
$\langle ER \rangle_{JWM}, \%$	$1,1 \cdot 10^{-4}$	$8,7 \cdot 10^{-4}$	$2,9 \cdot 10^{-3}$	$6,8 \cdot 10^{-3}$	0,013	0,023
$\langle ER \rangle_{LQZ}, \%$ [30]	$1,2 \cdot 10^{-2}$	$5,9 \cdot 10^{-3}$	$4,0 \cdot 10^{-3}$	$4,0 \cdot 10^{-3}$	$3,4 \cdot 10^{-3}$	$4,1 \cdot 10^{-3}$
$\langle ER \rangle_{LQZ}, \%$ [31]	$8,0 \cdot 10^{-5}$	$3,0 \cdot 10^{-4}$	$7,4 \cdot 10^{-4}$	$1,4 \cdot 10^{-3}$	$2,4 \cdot 10^{-3}$	$3,6 \cdot 10^{-3}$

Для $Z \leq 3$ погрешность JWM оказывается ниже погрешности LQZ с коэффициентами из [30]. Погрешность LQZ с коэффициентами из [31] для всех элементов ниже погрешности борновских приближений. Для водорода погрешность LQZ при использовании коэффициентов из [30] аномально велика и даже превышает погрешность MF.

При очень малой погрешности на результат может влиять точность вычисления нормированного моттовского сечения рассеяния. Для вычисления точного значения НМС использовалось суммирование моттовских рядов по методу, предложенному в [22], до $L = 150$. Для проверки влияния количества членов сумм мы вычислили погрешность метода JWM для $Z = 1, \beta = 0,999$ (при этой скорости получалась минимальная погрешность) при $L = 150$ и $L = 300$. В первом случае $ER_{JWM} = 6,0 \cdot 10^{-5}\%$, во втором – $\langle ER \rangle_{JWM} = 5,7 \cdot 10^{-5}\%$.

Анализ точности второго и третьего борновских приближений для расчета поправки Мотта

Поправка Мотта возникает в формуле Бете – Блоха вследствие отличия моттовского сечения рассеяния от получаемого в первом борновском приближении. Поправка Мотта во втором борновском приближении была получена в [17; 18] и представляется простым выражением:

$$\Delta L_{M_2} = \frac{1}{2} \pi \alpha \beta Z. \quad (10)$$

Видно, что поправка Мотта в этом приближении зависит линейно от скорости и заряда ядра.

Поправка Мотта в третьем борновском приближении получена Морганом и Эби [18]. Она определяется выражением:

$$\Delta L_{ММЕЗ} = \frac{1}{2} \left\{ \pi \alpha \beta Z + (\alpha Z)^2 \left[\pi^2 / 3 + 1 + \beta^2 \left\{ \pi^2 (3/4 - \ln 2) + 0.5(\zeta(3) - 3) \right\} \right] \right\}, \quad (11)$$

где $\zeta(3)$ – дзета-функция Римана.

Как отметили в [18], поправка (1) применима только при небольших Z . В [20] проведено сравнение (1) с разностью поправок Линдхарда – Соренсена и Блоха для $Z = 10, 18$ и 36 при $\beta \rightarrow 1$. Как было показано в [21], эта разность совпадает с поправкой Мотта.

Будем характеризовать точность расчета поправки Мотта во втором или третьем борновском приближении относительной ошибкой:

$$\delta_{M2(3)} = \frac{|\Delta L_{M2(3)} - \Delta L_M|}{\Delta L_M} \cdot 100\%, \quad (12)$$

где $\Delta L_M = \Delta L_{МВСТТ}$ рассчитывалась по методу ВСТТ, разработанному в [32].

С ростом скорости для второго борновского приближения относительная погрешность снижается. В таблице 3 приведены значения β , начиная с которых относительная погрешность ниже 5 %.

Таблица 3. – Значение β , начиная с которой $\delta_{M2} < 5\%$

Z	1	2	3	4	5
β	0,186	0,369	0,548	0,721	0,887

В таблице 4 приведены значения β , начиная с которых погрешность ниже 10 %.

Таблица 4. – Значение β , начиная с которой $\delta_{M2} < 10\%$

Z	6	7	8	9	10	11
β	0,514	0,598	0,681	0,763	0,844	0,924

В таблице 5 приведены значения β , начиная с которых погрешность ниже 20 %.

Таблица 5. – Значение β , начиная с которой $\delta_{M2} < 20\%$

Z	12	13	14	15	16	17	18	19
β	0,428	0,465	0,502	0,539	0,577	0,614	0,653	0,691
Z	20	21	22	23	24	25	26	
β	0,730	0,769	0,808	0,848	0,888	0,928	0,969	

При $Z = 27$ для любых скоростей относительная погрешность превышает 20 %. Значение $Z = 27$ обычно приводится как максимальное значение, при котором применимо второе борновское приближение. При $Z = 27$ средние по углам относительные погрешности в расчете дифференциального сечения рассеяния не превышают 7 %. Таким образом, можно сделать вывод, что относительная погрешность при использовании второго борновского приближения в вычислении поправки Мотта выше, чем при вычислении дифференциального сечения рассеяния.

Третье борновское приближение дает хорошую точность для поправки Мотта при высоких скоростях, но неверное поведение при малых скоростях [21]. Мы провели

вычисления поправки Мотта для $Z = 1 - 100$ с помощью третьего борновского приближения по (11), а также численный расчет по методу, изложенному в [32].

Согласно [18], поправка Мотта в третьем борновском приближении при $\beta = 0,95$ дает очень хорошее согласие с численным расчетом для Z от -52 до 80 . При $\beta = 0,85$ хорошее согласие до $Z \approx 60$, а при $\beta = 0,99$ – до $Z \approx 92$.

Приведем значения относительной погрешности третьего борновского приближения для указанных Z и β .

Таблица 6. – Относительная погрешность поправки Мотта в третьем борновском приближении для некоторых Z и β

	$Z = 80, \beta = 0,95$	$Z = 60, \beta = 0,85$	$Z = 92, \beta = 0,99$
$\delta_{M3}, \%$	4,39	5,75	3,98

Для $Z = 1 - 3$ погрешность менее 3 % для всех $\beta \geq 0,1$. Определим, начиная с какой β , δ_{M3} становится менее 6 %. Результаты представлены в таблице 7.

Таблица 7. – Значение β , начиная с которой $\delta_{MME} < 6 \%$

Z	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
β	0,105	0,121	0,145	0,168	0,191	0,214	0,237	0,259	0,281	0,302
Z	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23
β	0,323	0,343	0,364	0,383	0,402	0,421	0,439	0,457	0,474	0,490
Z	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33
β	0,506	0,522	0,537	0,552	0,566	0,580	0,594	0,607	0,619	0,631
Z	34	35	36	37	38	39	40	41	42	43
β	0,643	0,654	0,665	0,676	0,686	0,696	0,706	0,715	0,724	0,733
Z	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53
β	0,741	0,750	0,757	0,765	0,772	0,780	0,787	0,793	0,800	0,806
Z	54	55	56	57	58	59	60	61	62	63
β	0,812	0,818	0,824	0,830	0,835	0,840	0,845	0,850	0,855	0,860
Z	64	65	66	67	68	69	70	71	72	73
β	0,865	0,869	0,874	0,878	0,882	0,886	0,890	0,894	0,898	0,902
Z	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83
β	0,905	0,909	0,913	0,916	0,920	0,923	0,926	0,930	0,933	0,936
Z	84	85	86	87	88	89	90	91	92	93
β	0,940	0,943	0,946	0,949	0,952	0,956	0,959	0,962	0,965	0,969
Z	94	95	96	97	98	99	100			
β	0,972	0,975	0,979	0,982	0,986	0,989	0,993			

Соответственно, можно определить, до какого Z включительно погрешность ниже 6 % для данного β .

Таблица 8. – Максимальное значение Z , при котором $\delta_{MME} < 6 \%$

β	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,85	0,9	0,95	0,99
Z_{\max}	4	8	12	17	23	30	39	52	61	72	87	99

Несмотря на то что точность третьего борновского приближения для больших Z становится очень низкой, точность поправки Мотта остается высокой при высокой энергии.

В [20] приведены значения разности поправки Линдхарда – Соренсена (LS) и поправки Блоха при $\beta \rightarrow 1$. Как было показано в [21], эта разность совпадает с поправкой Мотта. Приведем наши результаты расчетов поправки Мотта методом ВСТТ [32], разности поправки LS и Блоха ΔL_{LSMB} и поправки Мотта во втором и третьем борновском приближении, а также значения разности поправок из [20].

Таблица 9. – Поправка Мотта при $\beta \rightarrow 1$

Z	ΔL_{MBCTT}	ΔL_{LSMB}	ΔL_{M2}	ΔL_{M3}	$\Delta L_{LSMB}, [20]$	δ_{M_2}	$\delta_{M_2}, [20]$
10	0,125241	0,125241	0,114627	0,125149	0,119	8,5	3,4
18	0,240932	0,240932	0,206328	0,240241	0,220	14,4	6,4
36	0,551343	0,551343	0,412656	0,551343	0,473	25,2	12,7

В последних столбцах приведена погрешность второго борновского приближения по нашим вычислениям (δ_{M_2}) и по результатам [20].

Так как результат расчета поправки Мотта по методу ВСТТ совпал с результатом расчета разности поправки Линдхарда – Соренсена и Блоха и очень близок к результату, полученному в третьем борновском приближении, можно полагать, что приведенные в [20] результаты ошибочны.

Погрешность второго борновского приближения оказывается еще выше, чем получилась бы по результатам, приведенным в [20].

Применение борновских приближений к расчету сечения смещения атомов для железа, серебра и свинца

Для расчета повреждения материалов высокоэнергетическими электронами вычисляют сечение смещения атома [23]. Для вычисления сечения первичного смещения широко используется формула, полученная на основе второго борновского приближения дифференциального сечения рассеяния релятивистских электронов на точечном ядре [16]:

$$\sigma_{pMF} = \frac{\pi Z^2 e^4}{m^2 c^4 \beta^4} (1 - \beta^2) \left\{ \frac{1}{y} - 1 + \beta^2 \ln(y) + \pi \alpha \beta \left(\frac{2}{\sqrt{y}} - 2 + \ln(y) \right) \right\}, y = \frac{T_d}{T_m}. \quad (13)$$

T_d – пороговая энергия смещения атома, T_m – максимальная энергия, которая может быть передана атому:

$$T_m = \frac{2E(E + 2m_e c^2)}{Mc^2}, \quad (14)$$

где m_e и M – массы электрона и ядра, E – кинетическая энергия электрона.

В ряде работ [23; 33; 34] было показано, что с ростом Z точность расчетов по (13) снижается по сравнению с результатами, получаемыми при использовании точного моттовского сечения рассеяния. В [35] было рассчитано сечение первичного смещения атома для ряда материалов с использованием третьего борновского приближения и показано, что его точность выше, чем у второго борновского приближения.

Согласно [6], второе борновское приближение применимо до $Z = 27$. Атомный номер железа $Z = 26$ мы рассматриваем в связи с тем, что для него имеются результаты численного расчета сечения смещения атома [23]. По нашим оценкам, средняя относительная погрешность для $Z = 44$ при использовании третьего борновского приближения близка к погрешности второго борновского приближения при $Z = 27$. В [23] имеются

данные для $Z = 47$. В [26] приводится пороговая энергия для $Z = 47$. Согласно [26], пороговая энергия для свинца – 11,5 эВ. Для свинца и пороговой энергии 12 эВ данные приведены в [23].

Сечение образования первичного смещения атома может быть представлено в виде [23]:

$$\sigma_p(E, T_d) = \frac{\pi Z^2 e^4}{m^2 c^4 \beta^4} (1 - \beta^2) \int_{T_d/T_m}^1 \frac{R(x, E)}{x^2} dx, \quad x = \sin^2 \frac{\theta}{2} = \frac{T}{T_m}, \quad (15)$$

где R – нормированное моттовское сечение НМС.

Путем подстановки (8) в (2) удается взять неопределенный интеграл и, подставив верхний и нижний пределы интегрирования в формулу Ньютона – Лейбница, получить выражение для сечения первичного смещения атома в третьем борновском приближении:

$$\begin{aligned} \sigma_{pJWM} &= \sigma_{pMF} - \frac{\pi Z^2 e^4}{m^2 c^4 \beta^4} (1 - \beta^2) \sigma_3, \\ \sigma_3 &= 2\pi^2 + \beta^2 \left(\pi^2 \ln 2 + \frac{3}{2} \zeta(3) \right) - \frac{\pi^2}{\sqrt{y}} - \pi^2 \beta^2 \ln[1 + \sqrt{y}] + \ln[y] \cdot \\ &\cdot \left(2 \ln \left[\frac{1 + \sqrt{y}}{1 - \sqrt{y}} \right] - \frac{\pi^2}{12} (4 - \beta^2) \right) + \ln[y]^2 \cdot \left(\frac{3\beta^2}{4} \ln[1 - y] - 1 \right) + \frac{\ln[y]^3}{6} + 8 \left(\frac{1}{\sqrt{y}} - 1 \right) L_2(1 - \sqrt{y}) - \\ &- \left(\frac{2}{\sqrt{y}} - \beta^2 \ln[y] \right) L_2(1 - y) + 4 \left(L_2(-\sqrt{y}) - L_2(\sqrt{y}) \right) + \frac{3\beta^2}{2} (\ln[y] \cdot L_2(y) - L_3(y)), \quad y = \frac{T_d}{T_m}, \end{aligned} \quad (16)$$

где $L_3(y)$ – полилогарифм.

Используя (13) и (16), мы рассчитали сечение первичного смещения атома для железа, серебра и свинца для ряда энергий. Результаты приведены в таблицах 10 и 11. Результаты сравнивались с результатами численных расчетов σ_{pO} , приведенными в [23]. В скобках приводится относительная погрешность:

$$\delta = \frac{|\sigma_p(E_i) - \sigma_{pO}(E_i)|}{\sigma_{pO}(E_i)} \cdot 100 \%$$

Таблица 10. – Первичное сечение смещения атома для железа и серебра

$Z = 26, M = 55,85, T_d = 20 \text{ эВ}$				$Z = 47, M = 107,88, T_d = 24 \text{ эВ}$			
$E, \text{ МэВ}$	$\sigma_{pMF} (\delta)$	$\sigma_{pJWM} (\delta)$	σ_{pO}	$E, \text{ МэВ}$	$\sigma_{pMF} (\delta)$	$\sigma_{pJWM} (\delta)$	σ_{pO}
0,376	0,439 (10)	0,465 (5,1)	0,49	0,707	0,36 (28)	0,433 (13)	0,50
0,380	1,007 (8,5)	1,07 (2,7)	1,10	0,714	0,752 (27)	0,901 (13)	1,03
0,387	1,98 (8,3)	2,11 (2,3)	2,16	0,728	1,58 (27)	1,90 (12)	2,17
0,398	3,48 (8,1)	3,70 (2,4)	3,79	0,749	2,94 (27)	3,55 (12)	4,04
0,413	5,45 (8,1)	5,79 (2,4)	5,93	0,777	4,92 (28)	5,94 (13)	6,79
0,432	7,83 (8,2)	8,33 (2,3)	8,53	0,812	7,59 (28)	9,21 (12)	10,51
0,454	10,44 (8,3)	11,13 (2,3)	11,39	0,854	11,01 (28)	13,37 (12)	15,24
0,484	13,80 (8,4)	14,72 (2,3)	15,06	0,91	15,77 (28)	19,15 (12)	21,76
0,522	17,75 (8,4)	18,95 (2,2)	19,37	0,98	21,82 (27)	26,46 (12)	29,94
0,577	22,93 (8,4)	24,50(2,1)	25,02	1,08	30,32 (26)	36,64 (11)	41,18

Окончание таблицы 10

0,652	29,18 (8,2)	31,15 (2,0)	31,78	1,22	41,46 (25)	49,83 (10)	55,46
0,745	35,82 (7,9)	38,19 (1,8)	38,90	1,40	54,12 (24)	64,54 (9,1)	71,00
0,857	42,52 (7,6)	45,24 (1,7)	46,01	1,61	66,52 (22)	78,63 (8,0)	85,46
1,00	49,49 (7,1)	52,49 (1,5)	53,28	1,89	79,66 (20)	93,17 (6,7)	99,87
1,19	56,70 (6,5)	59,90 (1,3)	60,66	2,24	91,94 (18)	106,26 (5,4)	112,32
1,41	62,97 (5,9)	66,25 (1,0)	66,94	2,66	102,40 (16)	116,93 (4,1)	121,96
1,67	68,42 (5,3)	71,67(0,83)	72,27	3,15	110,76 (14)	124,96 (3,0)	128,79
1,93	72,42 (4,8)	75,59(0,66)	76,09	3,64	116,45 (12)	130,07 (2,1)	132,82
2,23	75,84 (4,3)	78,86(0,52)	79,27	4,20	120,88 (11)	133,71 (1,3)	135,43
2,61	78,92 (3,8)	81,74(0,38)	82,05	4,90	124,48 (9,1)	136,29(0,50)	136,98
3,16	81,86 (3,2)	84,40(0,21)	84,58	5,95	127,53 (7,3)	137,95(0,30)	137,54
3,72	83,74 (2,8)	86,04(0,10)	86,12	7,00	129,07 (5,9)	138,29(0,83)	137,15
5,59	86,51 (1,8)	88,17(0,10)	88,08	10,5	130,16 (3,1)	136,56 (1,6)	134,35
7,45	87,29 (1,3)	88,56(0,17)	88,41	14,0	129,46 (1,8)	134,25 (1,8)	131,88
11,1	87,47(0,77)	88,30(0,17)	88,15	21,0	127,70(0,60)	130,73 (1,8)	128,47
18,6	86,99(0,32)	87,44(0,19)	87,27	35,0	125,30(0,27)	126,90 (1,6)	124,96
37,2	86,13(0,09)	86,31(0,12)	86,21	70,0	122,75(0,38)	123,38(0,90)	122,28
74,5	85,49(0,19)	85,55(0,12)	85,65	140	121,17(0,16)	121,40(0,35)	120,98
111	85,23(0,28)	85,27(0,23)	85,47	210	120,59(0,16)	120,72(0,27)	120,40

Таблица 11. – Сечение первичного смещения атома для свинца

Z = 82, M = 207,21, T _d = 12 эВ							
E, МэВ	0,686	0,693	0,707	0,727	0,754	0,789	0,829
σ _{рMF}	1,03	2,38	5,33	10,06	17,22	27,53	40,28
σ _{рJWM}	1,64	3,78	8,45	15,92	27,19	43,31	63,10
σ _{рO}	3,04	6,95	15,48	29,08	49,42	77,98	112,13
E, МэВ	0,884	0,952	1,05	1,19	1,36	1,56	1,83
σ _{рMF}	58,78	82,22	115,52	159,89	207,11	253,38	302,33
σ _{рJWM}	91,54	127,12	176,78	241,26	307,61	369,97	432,42
σ _{рO}	159,44	215,75	289,11	375,21	452,69	514,18	562,78
E, МэВ	2,17	2,58	3,06	3,53	4,08	4,76	5,78
σ _{рMF} (δ)	347,28	384,45	412,80	430,63(26)	443,77 (21)	453,04 (17)	459,01 (11)
σ _{рJWM} (δ)	485,47 (18)	524,76 (12)	550,15 (7,1)	562,47(3,0)	567,95(0,89)	567,51(4,5)	560,02(8,2)
σ _{рO}	590,56	598,58	592,18	579,66	562,94	543,00	517,52
E, МэВ	6,8	10,2	13,6	20,4	34	68	136
σ _{рMF} (δ)	460,19 (7,5)	453,38 (0,52)	444,15 (2,0)	429,76(3,7)	413,55 (4,1)	397,90 (2,9)	388,66 (2,6)
σ _{рJWM} (δ)	549,64 (11)	515,87 (13)	490,74 (12,7)	459,25 (11)	429,20 (8,1)	404,04 (4,5)	390,93 (3,2)
σ _{рO}	497,32	455,75	435,29	414,38	397,13	386,67	378,67

Для железа с ростом энергии погрешность вычисления сечения первичного смещения атома в основном снижается. Точность третьего борновского приближения выше, чем второго. Погрешность второго борновского приближения становится ниже 5 % начиная с энергии электронов 1,93 МэВ (при T_d = 20 эВ). Для третьего борновского приближения погрешность 3 % и ниже, начиная с 0,38 МэВ.

Для серебра погрешность второго борновского приближения в основном снижается с ростом энергии и становится меньше 6 % при энергии 3,72 МэВ (T_d = 24 эВ). Погрешность третьего борновского приближения в основном ниже, чем второго, и стано-

вится меньше 6 % при энергии 2,24 МэВ. Начиная с энергии 21 МэВ, погрешность второго борновского приближения становится меньше, чем третьего. По-видимому, объяснение состоит в том, что основной вклад в сечение смещения атома дают малые углы рассеяния вблизи нижнего предела интегрирования:

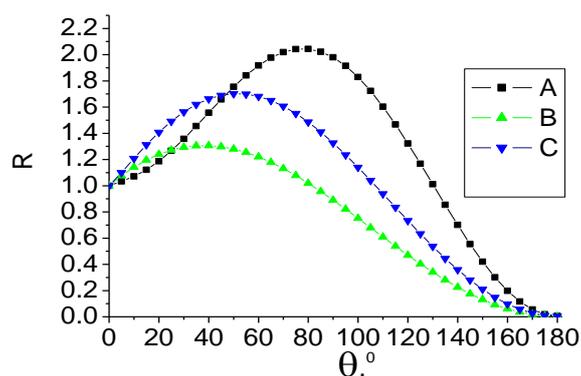
$$\theta_{\min} = \arcsin\left(\sqrt{\frac{T_d}{T_m}}\right). \quad (17)$$

С ростом энергии минимальный угол рассеяния снижается. При $E = 21$ МэВ для серебра $\theta_{\min} = 5,85^\circ$. Для этого угла относительная погрешность второго борновского приближения для дифференциального сечения рассеяния – 0,66 %, а для третьего борновского приближения – 1,64 %. Поэтому, несмотря на то, что в среднем по углам точность третьего приближения выше, его точность для сечения смещения атома оказывается ниже.

При энергии 0,854 МэВ погрешность второго и третьего борновского приближений соответственно 28 % и 12 %. Для этой энергии $\theta_{\min} = 120,36^\circ$. С угла 120° и до 180° относительная погрешность для дифференциального сечения второго и третьего борновского приближений составляет соответственно 25–27 % и 11–12 %, что согласуется с погрешностью сечения смещения атома.

Для свинца точность борновских приближений в большом диапазоне энергий очень низкая. Погрешность третьего борновского приближения меньше 10 % для энергий в интервале 3,06–5,78 МэВ и более 34 МэВ (для $T_d = 12$ эВ). Отметим, что интервал энергий неточный, т. к. для проверки мы пользуемся данными, что приведены в [23]. Погрешность второго борновского приближения менее 10 %, начиная с 6,8 МэВ.

При энергиях 10,2 МэВ и 13,6 МэВ погрешность третьего борновского приближения достигает 13 % и значительно превосходит погрешность второго борновского приближения. Минимальные углы рассеяния для этих энергий соответственно $11,55^\circ$ и $8,75^\circ$. Приведем на рисунке 8 график зависимости нормированного моттовского сечения от угла рассеяния для энергии 10,2 МэВ (для 13,6 МэВ зависимость практически идентичная, т. к. она определяется скоростью электрона, которая практически одинакова для этих энергий).



$Z = 82$. $E = 10,2$ МэВ. A – численный расчет,
B – второе борновское приближение, C – третье борновское приближение

Рисунок 8. – Нормированное моттовское сечение рассеяния

Из графика видно, что погрешность второго борновского приближения при этих углах значительно меньше, чем погрешность третьего борновского приближения.

О высокоэнергетической асимптотике различных приближений при расчете сечения смещения атомов

Как показано в [23, с. 10–11], приближение МакКинли – Фешбаха при высоких энергиях приводит для тяжелых элементов к результатам, близким к получаемым численным интегрированием точного моттовского сечения, тогда как при более низких энергиях расхождения результатов очень значительные. Аналогичные результаты были получены для платины и золота в [34]. На первый взгляд, это может показаться удивительным, т. к. даже при очень высоких энергиях сечение рассеяния во втором борновском приближении очень сильно отличается от точного моттовского сечения.

Из (13) можно получить асимптотическое выражение для сечения смещения атома при $\frac{T_d}{T_m} \ll 1$. В этом случае можно пренебречь всеми слагаемыми, кроме первого.

$$\sigma_{pMFass} = \frac{\pi Z^2 e^4}{m^2 c^4 \beta^4} (1 - \beta^2) \frac{T_m}{T_d} = \frac{\pi Z^2 e^4}{m^2 c^4 \beta^4} (1 - \beta^2) \frac{2E(E + 2m_e c^2)}{T_d} \frac{1}{Mc^2}.$$

Если кинетическая энергия электрона много больше энергии покоя, то можно пренебречь отличием β от единицы в знаменателе и отличием кинетической энергии от полной и слагаемым $m_e c^2$ в числителе. Тогда (13) можно еще упростить:

$$\sigma_{pMFass} = \frac{\pi Z^2 e^4}{m^2 c^4 \beta^4} (1 - \beta^2) \frac{T_m}{T_d} = \frac{2\pi Z^2 e^4}{T_d M c^2}. \quad (18)$$

Данное выражение в высокоэнергетическом пределе для моттовского сечения получено в работе [16].

В работе [36] и нескольких других работах этих авторов утверждается, что формулу (5) можно использовать для электронов с энергией 0,9 МэВ для кремния с пороговой энергией $T_d = 24\text{--}25$ эВ и углерода с $T_d = 18$ эВ. Они обосновывают это тем, что энергия электронов значительно превышает пороговую энергию, при которой происходит смещение атомов. Энергия 0,9 МэВ менее чем в два раза превышает энергию покоя электронов. Поэтому условия применимости асимптотики (18) явно не выполняются. В [36] приводятся асимптотические значения сечения первичного смещения атома для углерода и кремния ~ 23 барн и ~ 40 барн соответственно. Расчет по (18) приводит к результатам для углерода – 23,3 барн, для кремния – 40,7 барн и 39,0 барн для $T_d = 24$ и 25 эВ соответственно. Расчет же по (3) приводит, соответственно, к результатам 22,1 барн, 28,2 барн и 26,5 барн. Отличие асимптотического результата от результата по (13) для углерода около 5 %. Для кремния 44–47 %. При этом энергия электронов в случае кремния превышает пороговую, вызывающую смещение атома в 3,5–3,6 раза. Таким образом этого явно недостаточно для применимости асимптотики (18).

Мы вычислили для ряда элементов сечение первичного смещения атома, используя второе и третье борновские приближения. Результаты приведены в таблице 12.

Также приводятся $\frac{T_m}{T_d}$, $\frac{E}{E_d}$ – отношение кинетической энергии электрона к пороговой

кинетической энергии электрона, при которой происходит смещение, результат расчета по (18) и относительная погрешность этой формулы по отношению к формуле (13) δ . Жирным выделена погрешность, превышающая 1 %. Для сравнения в таблице приводится результат численных расчетов сечения из [23].

Таблица 12. – Сечение первичного смещения атома

Z = 1, M = 1,008, T _d = 4 эВ, E = 18,3 МэВ						
σ _{рMF}	σ _{рJWM}	σ _{рMFass}	δ, %	T _m /T _d	E/E _d	σ _{р0} [1]
34,7151	34,7151	34,6883	0,077	1,88E5	9,98E3	34,74
Z = 1, M = 1,008, T _d = 96 эВ, E = 169 МэВ						
1,44541	1,44541	1,44535	0,004	6,38E5	3,99E3	1,45
Z = 2, M = 4,003, T _d = 4 эВ, E = 72,4 МэВ						
34,9444	34,9444	34,9396	0,014	7,13E5	9,99E3	34,98
Z = 2, M = 4,003, T _d = 96 эВ, E = 304 МэВ						
1,45596	1,45596	1,45582	0,010	5,18E5	1995	1,46
Z = 4, M = 9,013, T _d = 20 эВ, E = 305 МэВ						
12,4164	12,4164	12,4144	0,016	1,11E6	3,99E3	12,44
Z = 4, M = 9,013, T _d = 24 эВ, E = 362 МэВ						
10,3468	10,3468	10,3453	0,015	1,30E6	3998	10,36
Z = 6, M = 12,011, T _d = 32 эВ, E = 304 МэВ						
13,1048	13,1048	13,1002	0,035	5,18E5	1994	13,13
Z = 6, M = 12,011, T _d = 36 эВ, E = 338 МэВ						
11,6485	11,6486	11,6446	0,034	5,69E5	1999	11,67
Z = 13, M = 26,98, T _d = 12 эВ, E = 523 МэВ						
73,0389	73,0392	73,0074	0,043	1,82E6	3998	73,29
Z = 13, M = 26,98, T _d = 16 эВ, E = 168 МэВ						
54,8363	54,8379	54,7556	0,15	1,41E5	995	55,01
Z = 29, M = 63,54, T _d = 16 эВ, E = 173 МэВ						
116,273	116,304	115,700	0,49	6,36E5	500	116,66
Z = 29, M = 63,54, T _d = 20 эВ, E = 206 МэВ						
92,9919	93,0142	92,5598	0,46	72E3	499	93,3
Z = 50, M = 118,7, T _d = 12 эВ, E = 450 МэВ						
246,471	246,527	245,477	0,40	3,06E5	999	243,87
Z = 50, M = 118,7, T _d = 96 эВ, E = 184 МэВ						
31,4575	31,5911	30,6847	2,46	6,14E3	99,5	31,33
Z = 82, M = 207,21, T _d = 12 эВ, E = 340 МэВ						
382,567	383,13	378,215	1,14	1,00E5	500	366,88
Z = 82, M = 207,21, T _d = 96 эВ, E = 257 МэВ						
49,1778	49,6897	47,2769	3,87	7157	99,8	47,96
Z = 92, M = 238, T _d = 32 эВ, E = 288 МэВ						
159,475	160,359	155,436	2,53	23,5E3	200	153,07
Z = 92, M = 238, T _d = 36 эВ, E = 310 МэВ						
141,706	142,474	138,165	2,50	24,2E3	200	135,97
Z = 94, M = 242, T _d = 4 эВ, E = 166 МэВ						
1298,05	1301,7	1276,68	1,65	61,5E3	499	1228,85
Z = 94, M = 242, T _d = 96 эВ, E = 281 МэВ						
55,6319	56,3762	53,1952	4,38	7,3E3	99,7	53,66
Z = 99, M = 254, T _d = 4 эВ, E = 172 МэВ						
1372,75	1376,95	1349,21	1,71	62,9E3	497	1290,06
Z = 99, M = 254, T _d = 96 эВ, E = 289 МэВ						
58,9237	59,7914	56,2172	4,59	7,38E3	99,7	56,56

Даже при $E/E_d = 100$ погрешность при использовании упрощенной формулы (18) для тяжелых элементов превышает 4 %. При $E/E_d = 500$ погрешность для тяжелых элементов превышает 1 %. При каких конкретно энергиях можно пользоваться асимптоти-

ческим выражением для сечения смещения атома, для каждого конкретного случая надо оценивать специально.

Для ряда примеров, для которых в различных источниках используют определенные значения T_d , мы рассчитали, начиная с какой энергии электронов E отличие сечения, полученного по асимптотической формуле (18), от полученного по (13), будет менее 1 %. Результаты приведены в таблице 13. Также приводится $\frac{E}{E_d}$ – отношение кинетической энергии электрона к пороговой кинетической энергии электрона, при которой происходит смещение. Пороговую кинетическую энергию можно найти из (2), приравняв максимальную энергию (14) к T_d :

$$E_d = \sqrt{m^2c^4 + \frac{T_dMc^2}{2}} - mc^2. \tag{19}$$

Таблица 13. – Сечение первичного смещения атома

Z = 4, M = 9,012			T_d , эВ	Е, МэВ	E/E_d	29[9]	71,7	168,3
T_d , эВ	Е, МэВ	E/E_d	14 [6]	11,4	76,0	Z = 24, M = 63,54		
22[6]	2,78	33,3	16 [9]	3,393	20,1	T_d , эВ	Е, МэВ	E/E_d
Z = 5, M = 10,81			Z = 14, M = 28,09			22[9]	66,76	175,7
T_d , эВ	Е, МэВ	T_d , эВ	T_d , эВ	Е, МэВ	E/E_d	24[6]	69,71	171,4
28 [6]	4,89	39,7	13	15,4	105,7	Z = 25, M = 54,94		
Z = 6, M = 12,01			24 [7]	18,7	75,6	T_d , эВ	Е, МэВ	E/E_d
T_d , эВ	Е, МэВ	E/E_d	25[7]	18,92	73,9	19[6]	67,25	190,3
18 [7]	2,92	32,3	33[8]	20,6	64,1	Z = 26, M = 55,85		
33 [6]	5,61	35,8	100 [10]	11,17	15,1	T_d , эВ	Е, МэВ	E/E_d
Z = 8, M = 16,00			Z = 15, M = 30,97			16 [9]	65,43	209,7
T_d , эВ	Е, МэВ	E/E_d	T_d , эВ	Е, МэВ	E/E_d	20[6]	73,11	196,0
16,5 [8]	3,064	28,2	12	18,36	124,1	Z = 27, M = 58,93		
100[8]	11,92	24,2	$Z = 22, M = 47,87$ [9]			T_d , эВ	Е, МэВ	E/E_d
Z = 12, M = 24,31			T_d , эВ	Е, МэВ	E/E_d	22[6]	82,54	197,0
T_d , эВ	Е, МэВ	E/E_d	19	53,05	167,6	23[9]	84,4	194,6
14	2,872	21,0	Z = 23, M = 50,94			Z = 30, M = 65,38		
25	4,834	21,3	T_d , эВ	Е, МэВ	E/E_d	T_d , эВ	Е, МэВ	E/E_d
Z = 13, M = 26,98			26 [6]	67,9	159,4	52 [8]	152	179,4

E/E_d меняется для рассмотренных случаев от 15,1 до 209,7. Интересен случай алюминия: при переходе от $T_d = 14$ эВ к $T_d = 16$ эВ E/E_d падает от 76 до 20,1. Это связано с тем, что при $T_d = 14$ эВ погрешность опускается ниже 1 % уже при энергии 2,98 МэВ, но уже при 7,9 МэВ становится по модулю выше 1 % и достигает максимального по модулю значения около 1,024 %. Для $T_d = 16$ эВ после 3,393 МэВ модуль погрешности остается менее 1 %.

Для рассмотренных в таблице 13 элементов второе борновское приближение дает хорошую точность, и можно полагать, что погрешность асимптотического выражения менее 1 % для второго борновского приближения обеспечивает соответствующее малое значение погрешности для точного сечения смещения. Отметим, что при энергиях более 10 МэВ уже начинает играть роль размер ядра и само использование моттовского сечения рассеяния, полученного для точечного ядра, не является точным.

Заключение

В работе рассмотрены борновские приближения для рассеяния электронов на ядрах с зарядовыми числами от 1 до 100.

Получены следующие результаты:

1. Относительная погрешность при вычислении НМС достигает по модулю 5 % для первого борновского приближения при $Z = 5$, для второго – при $Z = 18$, для третьего – при $Z = 31$ при энергии электронов 10 МэВ. До энергии 25 кэВ точность нерелятивистского приближения (резерфордовское сечение) оказывается выше точности первого и второго борновских приближений.

2. Погрешность первого борновского приближения растет с ростом скорости, погрешность второго борновского приближения слабо зависит от скорости (для больших значений Z на графике зависимости заметен максимум), а погрешность третьего борновского приближения с ростом скорости уменьшается.

3. Усредненная по углам и скоростям относительная погрешность $\langle ER \rangle$ достигает 5 % для $Z = 11$, $Z = 26$ и $Z = 42$ для первого, второго и третьего борновского приближения соответственно.

4. Показано, что при использовании коэффициентов для LQZ из [30] для $Z \leq 3$ погрешность третьего борновского приближения оказывается ниже погрешности метода LQZ.

5. Погрешность борновских приближений при расчете поправки Мотта растет с ростом Z . С ростом скорости относительная погрешность снижается. Относительная погрешность при использовании второго борновского приближения в вычислении поправки Мотта выше, чем при вычислении дифференциального сечения рассеяния.

6. Точность поправки Мотта в третьем борновском приближении остается высокой при высокой энергии.

7. Получено выражение для сечения первичного смещения атома в третьем борновском приближении через специальные функции. Для железа погрешность в вычислении первичного сечения смещения атома – менее 5 % при энергии выше 1,93 МэВ и выше 0,380 МэВ для второго и третьего борновского приближений соответственно; для серебра – при энергиях выше 3,72 и 1,41 МэВ. Показано, что в некоторых случаях погрешность третьего борновского приближения выше, чем второго. Проанализированы причины.

8. Показано, что даже при превышении пороговой энергии в 100 раз погрешность упрощенной формулы для второго борновского приближения может превышать для тяжелых элементов 4 %.

9. Для ряда примеров рассчитано, начиная с какой энергии электронов отличие сечения, полученного по асимптотической формуле, от полученного по формуле Мак-Кинли – Фешбаха, будет менее 1 %. Отношение полученной энергии электрона к пороговой кинетической энергии электрона, при которой происходит смещение, колеблется для рассмотренных случаев от 15,1 до 209,7. Это показывает, что требуется с большой осторожностью применять упрощенную формулу для расчета сечения первичного смещения атома.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Rutherford, E. The Scattering of α and β Particles by Matter and the Structure of the Atom / E. Rutherford // Philosophical Magazine. Series 6. – 1911. – Vol. 21. – P. 669–688.
2. Gordon, W. Über den Stoss zweier Punktladungen nach der Wellenmechanik / W. Gordon // Z. Physik. – 1928. – 48. – P. 180–191.

3. Mott, N. F. The Solution of the Wave Equation for the Scattering of Particles by a Coulombian Centre of Force. / N. F. Mott // Proc. Roy. Soc. – 1928. – A118. – P. 542–549.
4. Mott, N. F. The Scattering of Fast Electrons by Atomic Nuclei / N. F. Mott // Proc. Roy. Soc. A. – 1929. – Vol. 124 – P. 425–442.
5. Mott, N. F. The Polarisation of Electrons by Double Scattering / N. F. Mott // Proc. Roy. Soc. A. – 1932. – Vol. 135. – P. 429–458.
6. Motz, J. W. Electron Scattering without Atomic or Nuclear Excitation / J. W. Motz, Haakon Olsen, H. V. Koch // Rev. Mod. Phys. – 1964. – Vol. 135. – P. 881–928.
7. McKinley, W. A. The Coulomb Scattering of Relativistic Electrons by Nuclei / W. A. McKinley, Jr. H. Feshbach // Phys. Rev. – 1948. – Vol. 74, nr 12. – P. 1759–1763.
8. Johnson, W. R. Coulomb Scattering of Polarized Electrons / W. R. Johnson, T. A. Weber, C. J. Mullin // Phys. Rev. – 1961. – Vol. 121, nr 4. – P. 933–939.
9. Ландау, Л. Д. Теоретическая физика : учеб. пособие : в 10 т. / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – М. : Наука, гл. ред. физ.-мат. лит. – Т. IV / В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский. – 1989. – 728 с.
10. Weaver, B. A. Energy loss of relativistic heavy ions in matter / B. A. Weaver, A. J. Westphal // Nucl. Instrum. Methods B. – 2002. – Vol. 187. – P. 285–301.
11. Howe, L. M. Electron displacement damage in cobalt in a high voltage electron microscope / L. M. Howe // The Philosophical Magazine: A. Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics. – 1970. – Vol. 22. – P. 965–981.
12. Bourgoin, J. C. Threshold energy for atomic displacement in diamond / J. C. Bourgoin, B. Massarani // Phys. Rev. B. – 1976. – Vol. 14, nr 8. – P. 3690–3694.
13. Рязанов, А. И. Разработка теоретических моделей и проведение численных расчетов образования первичных радиационных дефектов в материалах коллиматоров большого адронного коллайдера в ЦЕРНе при взаимодействии с ними пучков протонов с энергиями 7 ТэВ / А. И. Рязанов, Е. В. Семенов. – М. : Рос. науч. центр «Курчат. ин-т», 2007. – 50 с.
14. Nuclear and Non-ionizing Energy-Loss Of Electrons With Low And Relativistic Energies In Matherials And Space Environment [Electronic resource] / M. J Boschini [et al.] // 13th ICATPP Conference on Astroparticle, Particle, Space Physics and Detectors for Physics Applications, Como, Italy, 3–7 oct. 2011. – P. 961–982. – Mode of access: <https://arxiv.org/abs/1111.4042v4>.
15. Jun, I. Effects of Secondary Particles on the Total Dose and the Displacement Damage in Space Proton Environments / I. Jun // Ieee Transactions on Nuclear Science. – 2001. – Vol. 48, nr 1. – P. 162–175.
16. Khandelwal, G. S. Displacement Cross Sections for Fast Electrons Incident on Gold / G. S. Khandelwal, E. Merzbacher // Phys. Rev. – 1963. – Vol. 130, nr 5. – P. 1822–1825.
17. Jackson, J. D. z^3 Corrections to Energy Loss and Range / J. D. Jackson, R. L. McCarthy // Phys. Rev. B. – 1972. – Vol. 6, nr 11. – P. 4131–4141.
18. Morgan Jr., S. H. Corrections to the Bethe-Bloch Formula for Average Ionization Energy Loss of Relativistic Heavy Nuclei Close Collisions / S. H. Morgan Jr., P. B. Eby // Nucl. Instrum. Methods. – 1973. – Vol. 106. – P. 429–435.
19. Idoeta, R. Review and calculation of Mott scattering cross section by unscreened point nuclei / R. Idoeta, F. Legarda // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. – 1992. – Vol. B71. – P. 116–125.
20. Lindhard, J. Relativistic theory of stopping for heavy ions / J. Lindhard, A. H. Sorensen // Phys. Rev. A. – 1996. – Vol. 53, nr 4. – P. 2443–2456.
21. Kats, P. B. Comparison of the Lindhard – Sorensen and Mott – Bloch corrections to the Bethe stopping formula at moderately relativistic energies / P. B. Kats, K. V. Halenka, O. O. Voskresenskaya // Phys. Part. Nuclei Lett. – 2021. – Vol. 18, nr 3. – P. 267–276.

22. Kats, P. B. Normalized Mott Cross Section in Different Approaches / P. B. Kats, K. V. Halenka, O. O. Voskresenskaya // *Phys. Part. Nuclei Lett.* – 2021. – Vol. 18, nr 3. – P. 277–283.
23. Oen, O. S. Cross sections for atomic displacements in solids by fast electrons / O. S. Oen // *Oak Ridge National Laboratory (ORNL)*. – 1973. – Report nr 4897.
24. Displacement Mechanisms in Electron-Irradiated Molybdenum / R. Rizk [et al.] // *Phys. Stat. Sol. (a)*. – 1973. – Vol. 18. – P. 241–246.
25. Swift heavy ion irradiation effects in nanocrystalline gold / Y. Chimi [et al.] // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. – 2006. – Vol. 245. – P. 171–175.
26. MeV electron irradiation induced crystallization in metallic glasses: Atomic structure, crystallization mechanism and stability of an amorphous phase under the irradiation / T. Nagase [et al.] // *Journal of Non-Crystalline Solids*. – 2012. – Vol. 358. – P. 502–518.
27. Iwamoto, Y. Implementing displacement damage calculations for electrons and gamma rays in the Particle and Heavy-Ion Transport code System / Y. Iwamoto // *Nuclear Inst. and Methods in Physics Research B*. – 2018. – Vol. 419. – P. 32–37.
28. The dynamics of electron beam scattering on metal membranes: nanopore formation in metal membranes using transmission electron microscopy / Hyun-Mi Kim [et al.] // *Nano Convergence*. – 2018. – Vol. 5, nr 32. – P. 1–7.
29. Ванина, Е. А. Упорядочение радиационных дефектов в неорганических системах / Е. А. Ванина, Е. М. Веселова, В. А. Рокосей. – Благовещенск : Изд-во АмГУ, 2014. – 115 с.
30. Lijian, T. Analytic Fitting to the Mott Cross Section of Electrons / T. Lijian, H. Qing, L. Zhengming // *Radiat. Phys. Chem.* – 1995. – Vol. 45, nr 2. – P. 235–245.
31. 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. – Vol. 90. – P. 39–66.
32. Выражение для мотовских поправок к формуле Бете – Блоха в терминах мотовских парциальных амплитуд / О. О. Воскресенская [и др.] // *Письма в ЖЭТФ*. – 1996. – Т. 64, вып. 9. – С. 604–607.
33. Oen, O. S. Cross section for atomic displacements in solids by fast positrons / O. S. Oen // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. – 1988. – Vol. 33. – P. 744–747.
34. 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 [et al.] // *Radiat. Phys. Chem.* – 2022. – Vol. 192. – Art. 109919.
35. Кац, П. Б. Расчет сечения смещения атомов, вызванного упругими столкновениями релятивистских электронов с ядрами / П. Б. Кац, А. М. Билькевич // *Вычислительные методы, модели и образовательные технологии : сб. материалов VII междунар. науч.-практ. конф., Брест, 19 окт. 2018 г. / Брест. гос. ун-т им. А. С. Пушкина ; под общ. ред. А. А. Козинского. – Брест : БрГУ им. А. С. Пушкина, 2018. – С. 93–94.*
36. Similarities and distinctions of defect production by fast electron and proton irradiation: moderately doped silicon and silicon carbide of n-type / V. V. Emtsev [et al.] // *Физика и техника полупроводников*. – 2012. – Т. 46, вып. 4. – С. 473–481.

REFERENCES

1. Rutherford, E. The Scattering of α and β Particles by Matter and the Structure of the Atom / E. Rutherford // *Philosophical Magazine. Series 6*. – 1911. – Vol. 21. – P. 669–688.

2. Gordon, W. Über den Stoss zweier Punktladungen nach der Wellenmechanik / W. Gordon // *Z. Physik.* – 1928. – 48. – P. 180–191.
3. Mott, N. F. The Solution of the Wave Equation for the Scattering of Particles by a Coulombian Centre of Force. / N. F. Mott // *Proc. Roy. Soc.* – 1928. – A118. – P. 542–549.
4. Mott, N. F. The Scattering of Fast Electrons by Atomic Nuclei / N. F. Mott // *Proc. Roy. Soc. A.* – 1929. – Vol. 124 – P. 425–442.
5. Mott, N. F. The Polarisation of Electrons by Double Scattering / N. F. Mott // *Proc. Roy. Soc. A.* – 1932. – Vol. 135. – P. 429–458.
6. Motz, J. W. Electron Scattering without Atomic or Nuclear Excitation / J. W. Motz, Haakon Olsen, H. V. Koch // *Rev. Mod. Phys.* – 1964. – Vol. 135. – P. 881–928.
7. McKinley, W. A. The Coulomb Scattering of Relativistic Electrons by Nuclei / W. A. McKinley, Jr. H. Feshbach // *Phys. Rev.* – 1948. – Vol. 74, nr 12. – P. 1759–1763.
8. Johnson, W. R. Coulomb Scattering of Polarized Electrons / W. R. Johnson, T. A. Weber, C. J. Mullin // *Phys. Rev.* – 1961. – Vol. 121, nr 4. – P. 933–939.
9. Landau, L. D. Теоретическая физика : учеб. пособие : в 10 т. / L. D. Landau, Ye. M. Lifshic. – М. : Наука, gl. ried. fiz.-mat. lit. – Т. IV / V. B. Bieriestieckij, Ye. M. Lifshic, L. P. Pitajevskij. – 1989. – 728 s.
10. Weaver, B. A. Energy loss of relativistic heavy ions in matter / B. A. Weaver, A. J. Westphal // *Nucl. Instrum. Methods B.* – 2002. – Vol. 187. – P. 285–301.
11. Howe, L. M. Electron displacement damage in cobalt in a high voltage electron microscope / L. M. Howe // *The Philosophical Magazine: A. Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics.* – 1970. – Vol. 22. – P. 965–981.
12. Bourgoïn, J. C. Threshold energy for atomic displacement in diamond / J. C. Bourgoïn, B. Massarani // *Phys. Rev. B.* – 1976. – Vol. 14, nr 8. – P. 3690–3694.
13. Riazanov, A. I. Razrabotka teoreticheskikh modeliej i proviedienije chisliennykh raschiotov obrazovanija piervichnykh radiacionnykh diefektov v materialakh kollimatorov bol'shogo adronnogo kollajdera v CERNe pri vzaimodiejstvii s nimi puchkov protonov s energiyami 7 TeV / A. I. Riazanov, Ye. V. Siemionov. – М. : Ros. nauch. centr «Kurchat. in-t», 2007. – 50 s.
14. Nuclear and Non-ionizing Energy-Loss Of Electrons With Low And Relativistic Energies In Matherials And Space Environment [Electronic resource] / M. J Boschini [et al.] // 13th ICATPP Conference on Astroparticle, Particle, Space Physics and Detectors for Physics Applications, Como, Italy, 3–7 oct. 2011. – P. 961–982. – Mode of access: <https://arxiv.org/abs/1111.4042v4>.
15. Jun, I. Effects of Secondary Particles on the Total Dose and the Displacement Damage in Space Proton Environments / I. Jun // *Ieee Transactions on Nuclear Science.* – 2001. – Vol. 48, nr 1. – P. 162–175.
16. Khandelwal, G. S. Displacement Cross Sections for Fast Electrons Incident on Gold / G. S. Khandelwal, E. Merzbacher // *Phys. Rev.* – 1963. – Vol. 130, nr 5. – P. 1822–1825.
17. Jackson, J. D. z^3 Corrections to Energy Loss and Range / J. D. Jackson, R. L. McCarthy // *Phys. Rev. B.* – 1972. – Vol. 6, nr 11. – P. 4131–4141.
18. Morgan Jr., S. H. Corrections to the Bethe-Bloch Formula for Average Ionization Energy Loss of Relativistic Heavy Nuclei Close Collisions / S. H. Morgan Jr., P. B. Eby // *Nucl. Instrum. Methods.* – 1973. – Vol. 106. – P. 429–435.
19. Idoeta, R. Review and calculation of Mott scattering cross section by unscreened point nuclei / R. Idoeta, F. Legarda // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research.* – 1992. – Vol. B71. – P. 116–125.
20. Lindhard, J. Relativistic theory of stopping for heavy ions / J. Lindhard, A. H. Sorensen // *Phys. Rev. A.* – 1996. – Vol. 53, nr 4. – P. 2443–2456.

21. Kats, P. B. Comparison of the Lindhard – Sorensen and Mott – Bloch corrections to the Bethe stopping formula at moderately relativistic energies / P. B. Kats, K. V. Halenka, O. O. Voskresenskaya // *Phys. Part. Nuclei Lett.* – 2021. – Vol. 18, nr 3. – P. 267–276.
22. Kats, P. B. Normalized Mott Cross Section in Different Approaches / P. B. Kats, K. V. Halenka, O. O. Voskresenskaya // *Phys. Part. Nuclei Lett.* – 2021. – Vol. 18, nr 3. – P. 277–283.
23. Oen, O. S. Cross sections for atomic displacements in solids by fast electrons / O. S. Oen // *Oak Ridge National Laboratory (ORNL)*. – 1973. – Report nr 4897.
24. Displacement Mechanisms in Electron-Irradiated Molybdenum / R. Rizk [et al.] // *Phys. Stat. Sol. (a)*. – 1973. – Vol. 18. – P. 241–246.
25. Swift heavy ion irradiation effects in nanocrystalline gold / Y. Chimi [et al.] // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. – 2006. – Vol. 245. – P. 171–175.
26. MeV electron irradiation induced crystallization in metallic glasses: Atomic structure, crystallization mechanism and stability of an amorphous phase under the irradiation / T. Nagase [et al.] // *Journal of Non-Crystalline Solids*. – 2012. – Vol. 358. – P. 502–518.
27. Iwamoto, Y. Implementing displacement damage calculations for electrons and gamma rays in the Particle and Heavy-Ion Transport code System / Y. Iwamoto // *Nuclear Inst. and Methods in Physics Research B*. – 2018. – Vol. 419. – P. 32–37.
28. The dynamics of electron beam scattering on metal membranes: nanopore formation in metal membranes using transmission electron microscopy / Hyun-Mi Kim [et al.] // *Nano Convergence*. – 2018. – Vol. 5, nr 32. – P. 1–7.
29. Vanina, Ye. A. Uporiadochienne radiacionnykh diefektov v nieorganichieskikh sistiemah / Ye. A. Vanina, Ye. M. Viesielova, V. A. Rokosiej. – *Blagovieshchiensk : Izd-vo AmGU*, 2014. – 115 s.
30. Lijian, T. Analitic Fitting to the Mott Cross Section of Electrons / T. Lijian, H. Qing, L. Zhengming // *Radiat. Phys. Chem.* – 1995. – Vol. 45, nr 2. – P. 235–245.
31. 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. – Vol. 90. – P. 39–66.
32. Vyrasheniye dlia motovskikh popravok k formulie Bete – Blokha v tierminakh motovskikh parcial'nykh amplitud / O. O. Voskriesienskaja [i dr.] // *Pis'ma v ZhETF*. – 1996. – T. 64, vyp. 9. – S. 604–607.
33. Oen, O. S. Cross section for atomic displacements in solids by fast positrons / O. S. Oen // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. – 1988. – Vol. 33. – P. 744–747.
34. 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 [et al.] // *Radiat. Phys. Chem.* – 2022. – Vol. 192. – Art. 109919.
35. Кас, P. B. Raschiot siechienija smieshchienija atomov, vyzvannogo uprugimi stolknovienijami rielativistskikh eliektronov s jadrami / P. B. Кас, A. M. Bil'kievich // *Vychislitel'nyje mietody, modeli i obrazovatel'nyje tiekhnologii : sb. materialov VII miezhdunar. nauch.-prakt. konf., Briest, 19 okt. 2018 g. / Briest. gos. un-t im. A. S. Pushkina ; pod obshch. ried. A. A. Kozinskogo. – Briest : BrGU im. A. S. Pushkina, 2018. – S. 93–94.*
36. Similarities and distinctions of defect production by fast electron and proton irradiation: moderately doped silicon and silicon carbide of n-type / V. V. Emtsev [et al.] // *Физика и техника полупроводников*. – 2012. – Т. 46, вып. 4. – С. 473–481.