

УДК 539.171.016

**Петр Борисович Кац<sup>1</sup>, Андрей Васильевич Кудравец<sup>2</sup>,  
Никита Иванович Куликович<sup>3</sup>, Анастасия Сергеевна Римашевская<sup>4</sup>**  
<sup>1</sup>канд. физ.-мат. наук, доц., доц. каф. общей и теоретической физики  
 Брестского государственного университета имени А. С. Пушкина  
<sup>2,3</sup>студент 2 курса физико-математического факультета  
 Брестского государственного университета имени А. С. Пушкина  
<sup>4</sup>магистрант физико-математического факультета  
 Брестского государственного университета имени А. С. Пушкина  
**Piotr Kats<sup>1</sup>, Andrei Kudravets<sup>2</sup>, Nikita Kulikovich<sup>3</sup>, Anastasiya Rymasheuskaya<sup>4</sup>**  
<sup>1</sup>Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor,  
 Associate Professor of the Department of General and Theoretical Physics  
 of Brest State A. S. Pushkin University

<sup>2,3</sup>2nd Year Student of the Faculty of Physics and Mathematics of Brest State A.S. Pushkin University

<sup>4</sup>Master Student of the Faculty of Physics and Mathematics of Brest State A. S. Pushkin University

e-mail: <sup>1</sup>katspyotr@yandex.ru

## МЕТОДЫ РАСЧЕТА СЕЧЕНИЯ СМЕЩЕНИЯ АТОМА РЕЛЯТИВИСТСКИМИ ЭЛЕКТРОНАМИ И ПОЗИТРОНАМИ

Рассмотрены основные приближенные методы расчета сечения смещения атома в веществе релятивистскими электронами и позитронами. Получена аналитическая формула для расчета сечения первичного смещения атома в рамках трижды модифицированного метода Лиджиана – Кинга – Женгминга. Выведены аналитические формулы для полного сечения смещения атома электроном при использовании простейшей модели Кинчина – Пиза в рамках метода Лиджиана – Кинга – Женгминга и его модификаций, а также второго и третьего борновских приближений. Получены аналитические выражения для сечения смещения атома в рамках укороченных вариантов метода Лиджиана – Кинга – Женгминга. Рассчитаны сечения первичного смещения электроном и полные сечения смещения электроном в углероде, кремнии, железе, свинце, уране, плутонии и эйнштейнии с помощью метода Лиджиана – Кинга – Женгминга и его модификаций. Для углерода, кремния и железа также расчеты выполнены с помощью второго и третьего борновских приближений. Для железа и свинца уточнены предыдущие результаты путем корректировки пороговой энергии смещения атома. Рассчитано сечение первичного смещения атома и полное сечение смещения атома позитронами в золоте с помощью метода LQZ и его сокращенных вариантов.

**Ключевые слова:** сечение смещения атома, модель Кинчина – Пиза, метод МакКинли – Фешбаха, метод Джонсона – Вебера – Маллина, метод Лиджиана – Кинга – Женгминга.

## Methods for Calculating the Atomic Displacement Cross Section by Relativistic Electrons and Positrons

The main approximate methods for calculating the cross section of the displacement of an atom in a substance by relativistic electrons and positrons are considered. An analytical formula has been obtained for calculating the cross section of the primary displacement of an atom within the framework of the thrice modified Ligian – Qing – Zhengming method. Analytical formulas are derived for the total cross section of the displacement of an atom by an electron using the simplest Kinchin – Pease model within the framework of the Ligian – Qing – Zhengming method and its modifications, as well as the second and third Born approximations. Analytical expressions for the displacement cross section of an atom are obtained within the framework of shortened variants of the Ligian – Qing – Zhengming method. The cross sections of the primary displacement by an electron and the total cross sections of the displacement by an electron in carbon, silicon, iron, lead, uranium, plutonium and einsteinium are calculated using the Ligian – Qing – Zhengming method and its modifications. For carbon, silicon and iron calculations are also performed using the second and third Born approximations. For iron and lead the previous results are refined by correcting the threshold energy of the displacement of the atom. The cross section of the primary displacement of an atom and the total displacement of an atom by positrons by positrons in gold are calculated using the LQZ method and its shortened variants.

**Key words:** displacement cross section, Johnson – Weber – Mullin method, McKinley – Feshbach method, Kinchin – Pease model, Ligian – Qing – Zhengming method.

### Введение

Облучение твердых тел различными частицами приводит к смещению атомов из положения равновесия. Такое воздействие имеет место в ядерных и термоядерных реакторах, ускорителях, электронных микроскопах, космических аппаратах. Оно приводит к изменению свойств материалов (радиационное охрупчивание, радиационная ползучесть, радиационное распухание и т. д. [1]. Обычно предполагается, что атом может быть смещен в случае, если он получает энергию, равную или превышающую некоторую пороговую энергию  $T_d$ , зависящую от вещества и кристаллографического направления [1]. В поликристалле можно ввести одно значение  $T_d$  для данного элемента. Если энергия электрона не слишком велика, то первично выбитый атом (ПВА) не может сам выбивать атомы из узлов кристаллической решетки. В этом случае для характеристики вероятности смещения атома используется сечение первичного смещения атома [2].

Вероятность смещения атома при столкновении с электроном или другой частицей характеризуется сечением смещения атома. Смещенный атом может сам приводить к смещениям новых атомов, если обладает достаточной энергией.

Если рассматривать только первичные смещения атомов, соответствующее сечение будем называть сечением первичного смещения. Оно вычисляется по формуле:

$$\sigma_p(E, T_d) = \int_{T_d}^{T_m} \frac{d\sigma}{dT} dT, \quad (1)$$

где  $\frac{d\sigma}{dT}$  – дифференциальное сечение передачи атому энергии  $T$  при столкновении с частицей с кинетической энергией  $E$ .  $T_m$  – максимальная кинетическая энергия, которая может быть передана атому при столкновении с электроном.

В статье мы будем рассматривать смещения атомов, вызываемые электронами и позитронами.

Переходя от переменной переданной энергии  $T$  к углу рассеяния [3], получим:

$$\sigma_p(E, T_d) = 2\pi \int_{\theta(T_d)}^{\pi} \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin\theta d\theta, \quad (2)$$

где связь угла рассеяния с переданной энергией:  $\sin^2 \frac{\theta}{2} = \frac{T}{T_m}$ .

Смещение атома могут вызывать только релятивистские электроны. Если пренебречь экранированием поля ядра электронами и размерами ядра, то необходимо использовать моттовское дифференциальное сечение рассеяния [4].  $T_m$  в случае релятивистских электронов, когда кинетическая энергия электрона много меньше энергии покоя ядра, определяется формулой [2]:

$$T_m = \frac{2E(E + 2m_e c^2)}{Mc^2}, \quad (3)$$

где  $m_e$  и  $M$  – массы электрона и ядра.

Моттовское дифференциальное сечение рассеяния выражается через медленно сходящиеся ряды по полиномам Лежандра, поэтому для практических результатов обычно используются упрощенные формулы. Часто применяют второе борновское приближение моттовского сечения. В этом приближении сечение первичного смещения атома [5]:

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

где  $\alpha$  – постоянная тонкой структуры.  $\beta = \frac{v}{c}$ .

Для больших зарядовых чисел второе борновское приближение приводит к очень высокой погрешности [6].

Нормированным моттовским сечением НМС будем называть отношение

$$R(\theta) = \sigma_M / \sigma_R, \quad \sigma_R \equiv \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_R = \left( \frac{Ze^2}{2pv} \right)^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)}. \quad (5)$$

где  $p$  – импульс электрона. Для нерелятивистских скоростей  $p = mv$  и  $\sigma_R$  представляет собой формулу Резерфорда.

В [7] Джонсоном, Вебером и Маллином было получено третье борновское приближение. Нормированное моттовское сечение в этом приближении выражается формулой:

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

где  $L_2$  обозначает дилогарифм Эйлера.

$R_{MF}$  – второе борновское приближение – приближение МакКинли – Фешбаха [8]:

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

В [6] было получено выражение для сечения первичного смещения атома в третьем борновском приближении. Было показано на ряде примеров, что погрешность третьего борновского приближения для сечения первичного смещения атомов в среднем меньше погрешности второго борновского приближения.

Другой возможный способ нахождения сечения смещения атома – использование аналитического приближения Лиджиана – Кинга – Женгминга LQZ [9] (например, [3]).

Сечение образования первичного смещения атома может быть представлено в виде [2]:

$$\sigma_p(E, T_d) = \frac{\pi Z^2 e^4}{m^2 c^4 \beta^4} (1 - \beta^2) \int_y^1 \frac{R(x, E)}{x^2} dx, \quad x = \sin^2 \frac{\theta}{2} = \frac{T}{T_m}, \quad y = T_d / T_m, \quad \beta = \frac{v}{c}. \quad (8)$$

Аналитическое приближение LQZ для НМС:

$$R_{LQZ} = \sum_{j=0}^4 a_j(Z, \beta) (1 - \cos \theta)^{j/2}, \quad a_j(Z, \beta) = \sum_{k=1}^6 d_z(j, k) (\beta - \bar{\beta})^{k-1} \quad (9)$$

В [10] разработаны т. н. модифицированный и дважды модифицированный варианты метода LQZ, которые приводят к более точным значениям НМС. В LQZ<sub>m2</sub> аналитическое приближение имеет вид:

$$R_{LQZm2}(\theta, Z, E) = 1 + \sum_{j=1}^5 a_j(Z, E)(1 - \cos \theta)^{j/2}. \quad (10)$$

Также в [10] получены аналитические выражения для  $\sigma_p$  в рамках метода LQZ, LQZ<sub>m</sub> и LQZ<sub>m2</sub> путем взятия интеграла (6):

$$\sigma_{pLQZ} = \frac{\pi Z^2 e^4}{m^2 c^4 \beta^4} \frac{(1 - \beta^2)}{y} [(1 - \sqrt{y}) (a_0 + (a_0 + 2\sqrt{2}a_1)\sqrt{y} + 4(\sqrt{2}a_3 + a_4)y + 4a_4y^{3/2}) - 2a_2y \ln y]. \quad (11)$$

$$\sigma_{pLQZm} = \frac{\pi Z^2 e^4}{m^2 c^4 \beta^4} (1 - \beta^2) [-1 - 2\sqrt{2}a_1 + 4(\sqrt{2}a_3 + a_4) + \frac{1}{y} + \frac{2\sqrt{2}a_1}{\sqrt{y}} - 4\sqrt{2}a_3\sqrt{y} - 4a_4y - 2a_2 \ln y]. \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{pLQZm2} = & \frac{\pi Z^2 e^4}{m^2 c^4 \beta^4} (1 - \beta^2) [-1 - 2\sqrt{2}a_1 + 4(\sqrt{2}a_3 + a_4) + \frac{1}{y} + \\ & + \frac{2\sqrt{2}a_1}{\sqrt{y}} - 4\sqrt{2}a_3\sqrt{y} - 4a_4y - 2a_2 \ln y + \frac{8}{3}\sqrt{2}a_5(1 - y^{3/2})]. \end{aligned} \quad (13)$$

Если учитывается также смещение атомов, вызываемое первично выбитым атомом, то речь идет о полном сечении смещения  $\sigma_{tot}$  [2]:

$$\sigma_{tot}(E, T_d) = \int_{T_d}^{T_m} \nu(T) \frac{d\sigma}{dT} dT, \quad (14)$$

где  $\nu(T)$  – каскадная функция, определяющая среднее число смещений атомов на один первично выбитый атом.

Существуют различные варианты каскадной функции. Простейшей является модель Кинчина – Пиза [11]. При использовании этой модели при  $T_m \leq 2T_d$  выбитый атом не может выбивать другие атомы и  $\sigma_{tot} = \sigma_p$ . При  $T_m > 2T_d$   $\nu(T) = T / 2T_d$ .

При использовании модели Кинчина – Пиза полное сечение смещения атома [2]:

$$\sigma_{tot}(E, T_d) = \frac{\pi Z^2 e^4 (1 - \beta^2)}{m^2 c^4 \beta^4} \left( \int_y^{2y} \frac{R(x, E)}{x^2} dx + \frac{1}{2y} \int_{2y}^1 \frac{R(x, E)}{x} dx \right), T_m > 2T_d. \quad (15)$$

### Расчет сечения первичного смещения атома электроном

В работе [2] рассчитаны сечения первичного смещения и полные сечения смещения атомов для большого числа элементов, энергий электронов и энергий смещения путем численного интегрирования моттовского дифференциального сечения рассеяния. Мы определяем точность результатов наших расчетов, основанных на приближенных формулах, сравнением с данными [2]. Относительная погрешность вычислялась по формуле

$$\delta_i = \frac{|\sigma(E_i) - \sigma_o(E_i)|}{\sigma_o(E_i)},$$

где  $\sigma_o$  – сечение смещения по данным [2].

Отметим, что при энергиях, близких к пороговой, во многих случаях данные в [2] приведены с малым числом значащих цифр, поэтому, строго говоря, нельзя утверждать, что погрешности при этом вычислены точно, однако мы вычисляем эти погрешности для определения среднего по энергиям значения и сравнения между собой разных методов.

В [12] разработан трижды модифицированный метод LQZ – LQZ<sub>m3</sub>:

$$R_{LQZ_{m3}} = 1 + \sum_{j=1}^6 a_j(Z, E)(1 - \cos \theta)^{j/2}, a_j(Z, \beta) = \sum_{k=1}^5 d_z(j, k)(\beta - \bar{\beta})^{k-1}. \quad (16)$$

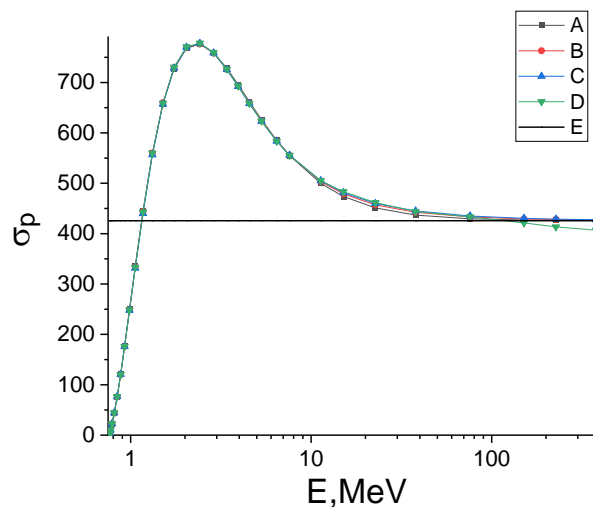
Из (4) в рамках LQZ<sub>m3</sub> к выражению, полученному в рамках LQZ<sub>m2</sub> требуется прибавить

$$\frac{\pi Z^2 e^4}{m^2 c^4 \beta^4} (1 - \beta^2) \int_y^1 a_6 \frac{(2x)^3}{x^2} dx = \frac{\pi Z^2 e^4}{m^2 c^4 \beta^4} (1 - \beta^2) 4a_6(1 - y^2).$$

В итоге получаем аналитическое выражение для сечения первичного смещения в рамках метода LQZ<sub>m3</sub>:

$$\sigma_{pLQZ_{m3}} = \frac{\pi Z^2 e^4}{m^2 c^4 \beta^4} (1 - \beta^2) [-1 - 2\sqrt{2}a_1 + 4(\sqrt{2}a_3 + a_4) + \frac{1}{y} + \frac{2\sqrt{2}a_1}{\sqrt{y}} - 4\sqrt{2}a_3\sqrt{y} - 4a_4y - 2a_2 \ln y + \frac{8}{3}\sqrt{2}a_5(1 - y^{3/2}) + 4a_6(1 - y^2)]. \quad (17)$$

Заметим, что при высоких энергиях вычисленная погрешность начинает расти и для модифицированных вариантов метода LQZ оказывается больше, чем для обычного метода. Это обстоятельство отмечалось в [6] и приводилось обоснование того, что, скорее всего, при высоких энергиях результаты [2] неточны. К такому же предположению можно прийти, исходя из рисунка 1. Горизонтальная линия соответствует асимптотическому значению сечения первичного смещения при энергии электрона, стремящейся к бесконечности [5]. Все аналитические приближения при большой энергии дают близкие к асимптотике значения, и только значения [2] опускаются ниже асимптотического значения, что подчеркивает вероятность того, что эти значения не точны. В связи с этим мы отбрасывали несколько самых высоких энергий, результаты для которых в [2] вызывают сомнения.



$Z = 94$ .  $T_d = 12$  эВ. A – LQZ, B – LQZ<sub>m2</sub>, C – LQZ<sub>m3</sub>, D – [2], E – асимптотическое значение

**Рисунок 1 – Сечение первичного смещения атома**

В [13] приводятся значения  $T_d$  для углерода и кремния для карбида кремния – 18 и 24 эВ соответственно. В [2] есть данные для кремния при  $T_d = 24$  эВ. Для углерода есть данные для  $T_d = 20$  эВ, поэтому для сравнения результатов примем  $T_d(C) = 20$  эВ.

Пороговая энергия смещения для урана, согласно [14], – 34 эВ. Для сравнения с результатами [2] можно взять пороговую энергию 32 эВ. Пороговая энергия для плутония и эйнштейния вычислялась по приближенной формуле [15]:

$$T_d \cong 175kT_m,$$

где  $T_m$  – температура плавления, и затем выбирали ближайшее значение  $T_d$ , для которого есть данные в [1].

Замечено [16], что минимальная кинетическая энергия электрона, вызывающая смещение атома  $E_d$ , вычисленная из условия равенства максимальной переданной при столкновении с атомом энергии (3) пороговой энергии, не совпадает точно с указываемой в [2] для данной относительной атомной массы и  $T_d$ . Если подобрать  $T_d$  так, чтобы  $E_d$  совпало с приведенным в [2], результаты расчетов с помощью аналитических приближений оказываются ближе к результатам численных расчетов [2]. В таблице 1 приведены значения  $E_d$  [2] и скорректированные значения  $T_d$ .

Таблица 1 – Скорректированные значения пороговой энергии

Z = 6, M = 12,011		Z = 14, M = 28,09	
$E_d = 0,099715$ МэВ	$T_d = 19,9946$ эВ	$E_d = 0,247304$ МэВ	$T_d = 23,9935$ эВ
Z = 26, M = 55,85		Z = 82, M = 207,21,	
$E_d = 0,372867$	$T_d = 19,9946$ эВ	$E_d = 0,680176$	$T_d = 11,9968$ эВ
Z = 92, M = 238		Z = 94, M = 242,00	
$E_d = 1,440231$ МэВ	$T_d = 31,9914$ эВ	$E_d = 0,759153$ МэВ	$T_d = 11,9968$ эВ
Z = 99, M = 254,00			
$E_d = 0,956450$ МэВ	$T_d = 15,9957$ эВ		

Коэффициенты  $d_Z$  для модифицированных методов LQZ для ряда элементов, для которых проводились вычисления сечения смещения атома, можно посмотреть в [17–23].

В таблицах 2–8 приводятся результаты расчетов сечения первичного смещения атома для углерода, кремния, железа, свинца, урана, плутония и эйнштейния.

Таблица 2 – Сечение первичного смещения атома (барн). Углерод. Z = 6, M = 12,011,  $T_d = 19,9946$  эВ

E, МэВ	0,100	0,101	0,103	0,106	0,110	0,115	0,121	0,129	0,139
$\sigma_{MF}$	0,15	0,67	1,65	3,00	4,60	6,31	8,03	9,87	11,63
$\sigma_{pLQZ}$	0,15	0,67	1,66	3,02	4,61	6,33	8,06	9,90	11,68
$\sigma_{pLQZm2}$	0,15	0,67	1,66	3,02	4,61	6,33	8,06	9,90	11,68
$\sigma_{pLQZm3}$	0,15	0,67	1,66	3,02	4,61	6,33	8,06	9,90	11,68
$\sigma_p [1]$	0,15	0,67	1,66	3,02	4,62	6,33	8,06	9,91	11,68
E, МэВ	0,154	0,174	0,199	0,229	0,269	0,319	0,378	0,448	0,518
$\sigma_{MF}$	13,51	15,12	16,32	17,14	17,73	18,13	18,40	18,62	18,79
$\sigma_{pLQZ}$	13,56	15,17	16,37	17,20	17,79	18,19	18,46	18,68	18,85
$\sigma_{pLQZm2}$	13,56	15,17	16,37	17,20	17,79	18,19	18,46	18,68	18,85
$\sigma_{pLQZm3}$	13,56	15,17	16,37	17,20	17,79	18,19	18,46	18,68	18,85
$\sigma_p [1]$	13,56	15,17	16,38	17,20	17,80	18,19	18,46	18,68	18,85
E, МэВ	0,598	0,698	0,847	0,997	1,49	1,99	2,99	4,98	9,97
$\sigma_{MF}$	18,97	19,16	19,41	19,61	20,10	20,39	20,69	20,90	21,01

Окончание таблицы 2

$\sigma_{pLQZ}(\delta)$	19,02	19,21	19,45	19,66	20,13	20,41	20,71	20,91	21,01
$\sigma_{pLQZm2}$	19,02	19,21	19,45	19,66	20,13	20,41	20,71	20,91	21,01
$\sigma_{pLQZm3}$	19,02	19,21	19,45	19,66	20,13	20,42	20,71	20,91	21,01
$\sigma_p [1]$	19,02	19,21	19,45	19,66	20,13	20,42	20,71	20,93	21,02
E, МэВ	19,9	29,9	49,8	69,8	99,7	199			
$\sigma_{MF}$	21,01	21,01	20,99	20,99	20,98	20,97			
$\sigma_{pLQZ}$	21,02	21,01	21,00	20,99	20,98	20,97			
$\sigma_{pLQZm2}$	21,02	21,01	21,00	20,99	20,98	20,97			
$\sigma_{pLQZm3}$	21,02	21,01	21,00	20,99	20,98	20,97			
$\sigma_p [1]$	21,03	21,02	21,02	21,01	21,01	21,01			

Таблица 3 – Сечение первичного смещения (барн). Кремний. Z = 14, M = 28,09, T<sub>d</sub> = 23,9935 эВ

E, МэВ	0,249	0,252	0,257	0,264	0,274	0,286	0,301	0,321
$\sigma_{MF}$	0,27	0,75	1,51	2,50	3,81	5,24	6,83	8,68
$\sigma_{pLQZ}$	0,28	0,76	1,54	2,56	3,90	5,36	6,98	8,88
$\sigma_{pLQZm2}$	0,28	0,76	1,54	2,56	3,90	5,35	6,98	8,87
$\sigma_{pLQZm3}$	0,28	0,76	1,54	2,56	3,90	5,35	6,98	8,87
$\sigma_p [1]$	0,28	0,76	1,54	2,56	3,90	5,35	6,98	8,87
E, МэВ	0,346	0,383	0,432	0,494	0,568	0,667	0,791	0,939
$\sigma_{MF}$	10,67	13,12	15,76	18,43	21,00	23,72	26,38	28,81
$\sigma_{pLQZ}$	10,92	13,43	16,12	18,86	21,46	24,22	26,90	29,34
$\sigma_{pLQZm2}$	10,91	13,42	16,12	18,85	21,46	24,22	26,90	29,34
$\sigma_{pLQZm3}$	10,91	13,42	16,12	18,86	21,47	24,23	26,91	29,35
$\sigma_p [1]$	10,91	13,42	16,12	18,86	21,47	24,23	26,91	29,35
E, МэВ	1,11	1,28	1,48	1,73	2,1	2,47	3,7	4,94
$\sigma_{MF}$	30,96	32,60	34,09	35,50	36,96	37,97	39,71	40,42
$\sigma_{pLQZ}(\delta)$	31,47	33,09	34,56	35,94	37,36	38,32	39,96	40,62
$\sigma_{pLQZm2}$	31,48	33,10	34,57	35,94	37,36	38,33	39,96	40,61
$\sigma_{pLQZm3}$	31,49	33,11	34,58	35,95	37,37	38,33	39,96	40,61
$\sigma_p [1]$	31,48	33,11	34,58	35,95	37,37	38,33	39,97	40,62
E, МэВ	7,41	12,3	24,7	49,4	74,1	123	173	247
$\sigma_{MF}$	40,93	41,11	41,04	40,91	40,84	40,78	40,75	40,73
$\sigma_{pLQZ}$	41,06	41,18	41,07	40,91	40,84	40,78	40,75	40,73
$\sigma_{pLQZm2}$	41,05	41,18	41,06	40,91	40,84	40,78	40,75	40,73
$\sigma_{pLQZm3}$	41,05	41,17	41,06	40,91	40,84	40,78	40,75	40,73
$\sigma_p [1]$	41,07	41,20	41,07	40,95	40,91	40,88	40,87	40,86

В [6] вычислено сечение смещения атома в железе с помощью второго и третьего борновских приближений.

В данной работе пересчитаны значения сечения первичного смещения атома с уточненной пороговой энергией смещения.

Также выполнены расчеты с помощью метода LQZ и его модифицированных вариантов.

Результаты приведены в таблице 4. В скобках приводится относительная погрешность.

Таблица 4 – Сечение первичного смещения (барн). Железо.  $Z = 26$ ,  $M = 55,85$ ,  $T_d = 19,9946$  эВ

E, МэВ	$\sigma_{PMF} (\delta)$	$\sigma_{JWM} (\delta)$	$\sigma_{LQZ} (\delta)$	$\sigma_{LQZm2} (\delta)$	$\sigma_{LQZm3} (\delta)$	$\sigma_{PO} [3]$
0,376	0,45 (8,1)	0,48 (2,6)	0,49	0,49	0,49	0,49
0,380	1,02 (7,4)	1,08 (1,8)	1,11	1,10	1,10	1,10
0,387	2,00 (7,5)	2,12 (1,9)	2,17	2,16	2,17	2,16
0,398	3,49 (7,8)	3,71 (2,1)	3,80	3,79	3,79	3,79
0,413	5,46 (7,9)	5,81 (2,1)	5,94	5,93	5,93	5,93
0,432	7,84 (8,1)	8,35 (2,1)	8,54	8,53	8,53	8,53
0,454	10,46 (8,2)	11,15 (2,1)	11,39	11,39	11,40	11,39
0,484	13,82 (8,3)	14,74 (2,12)	15,06	15,05	15,07	15,06
0,522	17,76 (8,3)	18,97 (2,1)	19,36	19,36	19,39	19,37
0,577	22,95 (8,3)	24,52 (2,0)	25,00	25,00	25,06	25,02
0,652	29,20 (8,1)	31,17 (1,9)	31,75	31,75	31,82	31,78
0,745	35,84 (7,9)	38,21 (1,8)	38,87	38,86	38,95	38,90
0,857	42,55 (7,5)	45,26 (1,6)	45,98	45,97	46,06	46,01
1,00	49,52 (7,1)	52,52 (1,4)	53,27	53,25	53,32	53,28
1,19	56,73 (6,5)	59,93 (1,2)	60,66	60,64	60,69	60,66
1,41	63,00 (5,9)	66,27 (1,0)	66,94	66,93	66,96	66,94
1,67	68,44 (5,3)	71,70 (0,80)	72,27	72,26	72,27	72,27
1,93	72,45 (4,8)	75,61 (0,63)	76,08	76,09	76,09	76,09
2,23	75,86 (4,3)	78,88 (0,49)	79,25	79,25	79,26	79,27
2,61	78,95 (3,8)	81,77 (0,34)	82,02	82,03	82,03	82,05
3,16	81,88 (3,2)	84,43 (0,18)	84,55	84,55	84,57	84,58
3,72	83,77 (2,7)	86,06 (0,07)	86,10	86,08	86,10	86,12
5,59	86,54 (1,8)	88,20 (0,13)	88,09	88,04	88,07	88,08
7,45	87,32 (1,2)	88,58 (0,20)	88,44	88,37	88,39	88,41
11,1	87,49 (0,75)	88,32 (0,20)	88,17	88,10	88,10	88,15
18,6	87,01 (0,30)	87,46 (0,22)	87,35	87,28	87,27	87,27
37,2	86,15 (0,06)	86,34 (0,15)	86,27	86,23	86,21	86,21
74,5	85,51 (0,17)	85,58 (0,09)	85,54	85,52	85,51	85,65
111	85,26 (0,25)	85,29 (0,21)	85,27	85,26	85,25	85,47
186	85,03 (0,33)	85,05 (0,30)	85,03	85,03	85,02	85,31

Корректировка пороговой энергии смещения приводит к заметному уменьшению погрешности при небольших энергиях.

В таблице 5 представлены данные вычислений по методу LQZ и его модификациям для свинца ( $Z = 82$ ).

Для таких больших значений  $Z$  борновские приближения неприменимы. В скобках для первых пяти значений приведены относительные погрешности в процентах.

Они заметно снизились после корректировки пороговой энергии смещения атома.

Мы не учитывали при оценке средней относительной погрешности энергию 288 МэВ для урана, энергии выше 75,9 МэВ для плутония и выше 47,8 МэВ для эйнштейния.

Значения с высокой погрешностью в таблицах выделены полужирным шрифтом.

Таблица 5 – Сечение первичного смещения (барн). Свинец.  $Z = 82$ ,  $M = 207,21$ ,  $T_d = 11,9968$  эВ

E, МэВ	0,686	0,693	0,707	0,727	0,754	0,789	0,829
$\sigma_{pLQZ}$	3,01 (1,1)	6,88 (1,0)	15,38 (0,62)	29,01 (0,24)	49,46 (0,09)	78,26	112,71
$\sigma_{pLQZmod2}$	3,035 (0,16)	6,928 (0,32)	15,43 (0,33)	28,97 (0,38)	49,23 (0,38)	77,73	111,90
$\sigma_{pLQZmod3}$	3,046	6,97	15,58	29,32	49,84	78,52	112,65
$\sigma_{pO}$	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
$\sigma_{pLQZ}$	160,41	217,02	290,44	376,18	452,87	513,62	561,76
$\sigma_{pLQZmod2}$	159,35	215,93	289,67	376,11	453,51	514,59	562,57
$\sigma_{pLQZmod3}$	159,48	215,42	287,94	373,38	450,74	512,65	561,87
$\sigma_{pO}$	159,68	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
$\sigma_{pLQZ}(\delta)$	589,65	598,20	592,48	580,39	563,95	544,03	518,06
$\sigma_{pLQZmod2}$	589,91	597,89	591,81	579,66	563,36	543,77	518,36
$\sigma_{pLQZmod3}$	590,09	598,17	591,66	579,00	562,27	542,44	517,12
$\sigma_{pO}$	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
$\sigma_{pLQZ}$	497,18	453,29	430,50	408,71	393,40	384,39	381,08
$\sigma_{pLQZmod2}$	497,99	455,14	432,74	411,00	395,21	385,26	381,26
$\sigma_{pLQZmod3}$	497,10	455,69	434,26	413,35	397,74	387,22	382,51
$\sigma_{pO}$	497,32	455,75	435,29	414,38	397,13	386,67	378,67

Таблица 6 – Сечение первичного смещения (барн). Уран.  $Z = 92$ ,  $M = 238,00$ ,  $T_d = 31,9914$  эВ

E, МэВ	1,45	1,46	1,49	1,54	1,59	1,67	1,75
$\sigma_{pLQZ}$	0,524	1,21	4,07	11,03	20,01	37,02	55,70
$\sigma_{pLQZmod2}$	0,543	1,24	4,11	11,01	19,89	36,74	55,28
$\sigma_{pLQZmod3}$	0,547	1,25	4,14	11,10	20,01	36,84	55,31
$\sigma_{pO}$	0,55	1,25	4,13	11,05	19,94	36,79	55,31
E, МэВ	1,87	2,01	2,23	2,52	2,88	3,31	3,88
$\sigma_{pLQZ}$	84,28	115,96	158,87	201,48	236,02	258,90	271,17
$\sigma_{pLQZmod2}$	83,79	115,53	158,72	201,72	236,54	259,45	271,44
$\sigma_{pLQZmod3}$	83,66	115,25	158,36	201,48	236,54	259,59	271,52
$\sigma_{pO}$	83,79	115,48	158,64	201,67	236,60	259,63	271,70
E, МэВ	4,60	5,47	6,48	7,48	8,64	10,00	12,20
$\sigma_{pLQZ}$	272,11	264,68	252,93	241,51	229,86	218,58	204,86
$\sigma_{pLQZmod2}$	271,93	264,09	252,14	240,73	229,24	218,26	205,04
$\sigma_{pLQZmod3}$	271,74	263,61	251,46	240,01	228,60	217,79	204,89
$\sigma_{pO}$	272,14	264,12	251,97	240,39	228,81	217,84	204,77
E, МэВ	14,40	21,60	28,80	43,20	72,00	144,00	288,00
$\sigma_{pLQZ}$	195,10	177,63	169,75	162,97	158,73	156,52	<b>155,84 (1,8)</b>
$\sigma_{pLQZmod2}$	195,74	179,19	171,68	165,03	160,52	157,72	<b>156,53 (2,26)</b>
$\sigma_{pLQZmod3}$	195,88	179,95	172,70	166,17	161,54	158,41	<b>156,94 (2,53)</b>
$\sigma_{pO}$	195,68	180,31	173,51	166,38	161,05	157,55	153,07

Таблица 7 – Сечение первичного смещения (барн). Плутоний.  $Z = 94$ ,  $M = 242,00$ ,  $T_d = 11,9968$  эВ

E, МэВ	0,766	0,774	0,789	0,812	0,842	0,880	0,926	0,986
$\sigma_{pLQZ}$	4,47	10,24	22,48	44,17	76,32	120,88	177,28	250,46
$\sigma_{pLQZm2}$	4,53	10,33	22,56	44,12	75,98	120,14	176,15	249,07
$\sigma_{pLQZm3}$	4,56	10,43	22,79	44,55	76,55	120,63	176,16	248,13
$\sigma_p [1]$	4,55	10,39	22,66	44,25	76,12	120,21	174,04	248,69
E, МэВ	1,06	1,17	1,32	1,51	1,74	2,04	2,42	2,88
$\sigma_{pLQZ}$	335,28	444,70	560,00	658,67	727,92	768,04	776,47	759,57
$\sigma_{pLQZm2}$	333,95	443,97	560,39	660,15	729,89	769,62	776,87	758,57
$\sigma_{pLQZm3}$	331,77	440,53	556,70	657,32	729,09	770,20	777,74	758,80
$\sigma_p [1]$	333,28	443,08	559,58	659,90	730,36	770,69	778,09	759,45
E, МэВ	3,41	3,94	4,55	5,31	6,45	7,59	11,3	15,1
$\sigma_{pLQZ} (\delta)$	728,41	695,98	661,98	626,27	585,11	555,11	499,88	473,71
$\sigma_{pLQZm2}$	726,37	693,52	659,59	624,44	584,52	555,79	503,61	478,98
$\sigma_{pLQZm3}$	725,75	692,35	658,19	623,16	583,79	555,73	505,17	481,34
$\sigma_p [1]$	726,63	693,21	658,81	623,36	583,53	555,25	505,25	483,34
E, МэВ	22,7	37,9	75,9	151	227	379		
$\sigma_{pLQZ}$	451,06	436,83	429,37	427,01 (1,32)	426,47 (3,15)	426,13 (4,73)		
$\sigma_{pLQZm2}$	457,23	442,56	433,38	429,40 (1,88)	428,13 (3,55)	427,14 (4,98)		
$\sigma_{pLQZm3}$	460,05	445,17	435,21	430,51 (2,15)	428,92 (3,74)	427,64 (5,10)		
$\sigma_p [1]$	461,70	443,89	433,19	421,46	413,44	406,89		

Таблица 8 – Сечение первичного смещения (барн). Эйнштейний.  $Z = 99$ ,  $M = 254,00$ ,  $T_d = 15,9957$  эВ

E, МэВ	0,966	0,975	0,994	1,02	1,06	1,10	1,16
$\sigma_{pLQZ}$	3,57	7,51	17,45	33,99	64,25	98,21	152,28
$\sigma_{pLQZm2}$	3,60	7,56	17,49	33,95	64,01	97,74	151,55
$\sigma_{pLQZm3}$	3,65	7,65	17,66	34,19	64,23	97,79	151,13
$\sigma_p [1]$	3,64	7,62	17,57	34,03	64,03	97,67	151,31
E, МэВ	1,24	1,33	1,48	1,67	1,91	2,19	2,58
$\sigma_{pLQZ}$	224,50	300,35	407,17	506,30	584,90	632,14	652,68
$\sigma_{pLQZm2}$	223,60	299,54	406,87	506,82	586,15	633,63	653,73
$\sigma_{pLQZm3}$	222,44	297,69	404,59	504,98	585,36	633,74	654,17
$\sigma_p [1]$	223,18	299,01	406,40	506,63	586,41	634,28	654,58
E, МэВ	3,06	3,63	4,30	4,97	5,73	6,69	8,12
$\sigma_{pLQZ} (\delta)$	644,05	616,73	580,65	547,75	516,35	484,97	451,21
$\sigma_{pLQZm2}$	644,08	615,63	578,76	545,60	514,36	483,56	450,93
$\sigma_{pLQZm3}$	644,15	615,13	577,89	544,69	513,64	483,21	451,13
$\sigma_p [1]$	644,80	615,99	578,75	545,19	513,82	483,00	450,59
E, МэВ	9,56	14,3	19,1	28,6	47,8	95,6	191
$\sigma_{pLQZ}$	427,75	387,20	369,62	355,16	346,10	341,08 (0,29)	339,14 (2,39)
$\sigma_{pLQZm2}$	428,60	390,67	374,32	360,49	350,96	344,44 (0,69)	341,11 (2,99)
$\sigma_{pLQZm3}$	429,24	391,98	375,76	361,82	351,94	345,00 (0,86)	341,41 (3,08)
$\sigma_p [1]$	428,68	392,67	378,03	362,81	350,13	342,09	331,21

В таблице 9 приведены средние значения модуля относительной погрешности всех методов. В скобках указаны результаты, полученные без корректировки пороговой энергии смещения.

Таблица 9 – Средняя относительная погрешность сечения первичного смещения атома  $\langle \delta \rangle$ , %

	C	Si	Fe	Pb	U	Pu	Es
MF	0,28 (0,63)	1,39	5,06(5,24)	–	–	–	–
JWM	–	–	1,13(1,33)	–	–	–	–
LQZ	0,10	0,091	0,10	0,44(0,59)	0,87	0,67(0,80)	0,66(0,76)
LQZ <sub>m2</sub>	0,10	0,089	0,090	0,24(0,42)	0,27	0,24(0,42)	0,25(0,41)
LQZ <sub>m3</sub>	0,10	0,084	0,10	0,31	0,19	0,27(0,32)	0,24(0,32)

Для углерода погрешность всех методов достаточно мала.

Для кремния средняя погрешность метода Маккинли – Фешбаха превышает один процент, тогда как погрешности метода LQZ и модификаций менее 0,1 %. При этом модифицированные методы незначительно точнее обычного метода.

Для углерода из 33 значений с данными [2] по методу MF совпадают два значения, по методу LQZ и LQZ<sub>m2</sub> – 20, по LQZ<sub>m3</sub> – 21 значение.

Для кремния по методу MF нет совпадений, по LQZ – 10 совпадений, по LQZ<sub>m2</sub> – 14, по LQZ<sub>m3</sub> – 21.

Для тяжелых элементов модифицированные методы значительно точнее обычного метода LQZ.

### Расчет полного сечения смещения атома электроном

В данном разделе получены аналитические выражения для полного сечения смещения атома в рамках методов LQZ, LQZ<sub>m2</sub> и LQZ<sub>m3</sub>, а также во втором и третьем борновском приближении. Использовалась каскадная функция, получаемая в простейшей модели Кинчина – Пиза.

При использовании этой модели  $\sigma_{tot} = \sigma_p$  при  $T_m \leq 2T_d$ . Для  $T_m > 2T_d$  получаются следующие выражения для полного сечения:

$$\sigma_{totLQZ} = \frac{\pi Z^2 e^4}{m^2 c^4 \beta^4} (1 - \beta^2) \left[ \frac{a_0}{2y} + \frac{2(\sqrt{2}-1)a_1}{\sqrt{y}} + 2a_2 \ln 2 + 4(2 - \sqrt{2})a_3 \sqrt{y} + 4a_4 y + \right. \\ \left. + \frac{1}{2y} \{-a_0 \ln(2y) + 2a_1(\sqrt{2} - 2\sqrt{y}) + 2a_2(1 - 2y) + \frac{4\sqrt{2}}{3} a_3(1 - (2y)^{3/2}) + 2a_4(1 - 4y^2)\} \right]. \quad (18)$$

$$\sigma_{totLQZm2} = \frac{\pi Z^2 e^4}{m^2 c^4 \beta^4} (1 - \beta^2) \left[ \frac{1}{2y} + \frac{2(\sqrt{2}-1)a_1}{\sqrt{y}} + 2a_2 \ln 2 + 4(2 - \sqrt{2})a_3 \sqrt{y} + 4a_4 y + \frac{8}{3}(\sqrt{2} - 4)a_5 y^{3/2} + \right. \\ \left. + \frac{1}{2y} \{-\ln(2y) + 2a_1(\sqrt{2} - 2\sqrt{y}) + 2a_2(1 - 2y) + \frac{4\sqrt{2}}{3} a_3(1 - (2y)^{3/2}) + 2a_4(1 - 4y^2) + \frac{8}{5} a_5(\sqrt{2} - 8y^{5/2})\} \right]. \quad (19)$$

$$\sigma_{totLQZm3} = \frac{\pi Z^2 e^4}{m^2 c^4 \beta^4} (1 - \beta^2) \left[ \frac{1}{2y} + \frac{2(\sqrt{2}-1)a_1}{\sqrt{y}} + 2a_2 \ln 2 + 4(2 - \sqrt{2})a_3 \sqrt{y} + \right. \\ \left. + 4a_4 y + \frac{8}{3}(\sqrt{2} - 4)a_5 y^{3/2} + 12a_6 y^2 + \frac{1}{2y} \{-\ln(2y) + 2a_1(\sqrt{2} - 2\sqrt{y}) + 2a_2(1 - 2y) + \right. \\ \left. + \frac{4\sqrt{2}}{3} a_3(1 - (2y)^{3/2}) + 2a_4(1 - 4y^2) + \frac{8}{5} a_5(\sqrt{2} - 8y^{5/2}) + \frac{8}{3} a_6(1 - 8y^3)\} \right]. \quad (20)$$

$$\sigma_{\text{totMF}} = \frac{\pi Z^2 e^4}{2m^2 c^4 \beta^4} (1 - \beta^2) \left\{ \frac{1 - \beta^2 - \ln(2y)}{y} + 2\beta^2 (1 - \ln(2)) + \right. \\ \left. + \pi Z \alpha \beta \left[ \frac{1}{y} + 4 \frac{1 - \sqrt{2}}{\sqrt{y}} + 2(1 - \ln(2)) \right] \right\}. \quad (21)$$

$$\sigma_{\text{totJWM}} = \sigma_{\text{totMF}} + \frac{\pi Z^2 e^4}{m^2 c^4 \beta^4} (1 - \beta^2) (Z\alpha)^2 H(y), \quad (22)$$

$$H(y) = \frac{1}{24y} [12 - 4\pi^2 + \beta^2 (7\pi^2 - 18 - 12\pi^2 \ln 2 + 6\zeta(3)) + 12\pi^2 \beta^2 \ln(1 + \sqrt{2y}) + 24(\ln(2y)) \times \\ \times (\ln(1 + \frac{1}{\sqrt{2y}}) - \ln(1 - \frac{1}{\sqrt{2y}}))] + 2(L_2(\frac{1}{\sqrt{2y}}) - L_2(-\frac{1}{\sqrt{2y}})) + 3\beta^2 \ln(1 - 2y)(\ln(2y))^2 + 12\pi^2 \sqrt{y} \times \\ \times (2 - 2\sqrt{2} - \beta^2) + 2y(4\pi^2 - 12 + \beta^2(18 + 5\pi^2)) + 12\pi^2 \beta^2 (\ln(1 + \sqrt{y}) - \ln(1 + \sqrt{2y})) + \pi^2 (4 - \beta^2) \times \\ \times \ln y + 24 \ln y \ln \frac{1 - \sqrt{y}}{1 + \sqrt{y}} + 12(\ln y)^2 - 9\beta^2 (\ln y)^2 \ln(1 - y) - 2(\ln y)^3 + \ln(2y)(12 - 4\pi^2 - 18\beta^2 + \\ + \pi^2 \beta^2) + 24 \ln(2y) \ln \frac{1 + \sqrt{2y}}{1 - \sqrt{2y}} + 3(\ln(2y))^2 (\beta^2 - 6) + 9\beta^2 (\ln(2y))^2 \ln(1 - 2y) + 2(\ln(2y))^3 + 192 \times \\ \times (y - \sqrt{y}) L_2(1 - \sqrt{y}) - 96(1 - 2\sqrt{2y} + 2y) L_2(1 - \sqrt{2y}) + 12(\beta^2(1 - 2y) - 4\sqrt{2y} + 2y \beta^2 \ln(2y)) \times \\ \times L_2(1 - 2y) + 24(2\sqrt{y} - \beta^2 y \ln y) L_2(1 - y) + 96y((1 - \beta^2 \ln y) L_2(\sqrt{y}) - (1 + \beta^2 \ln y) L_2(-\sqrt{y}) + \\ + L_2(-\sqrt{2y}) - L_2(\sqrt{2y})) + 12\beta^2 y (\ln y L_2(y) + 3L_3(y)) + 6\beta^2 (1 + 6y) (\ln(2y) L_2(2y) - L_3(2y))].$$

Здесь  $L_3$  – полилогарифм,  $\zeta(3)$  – постоянная Аперри.

Ниже представлены результаты расчетов полного сечения смещения для некоторых элементов.

Так как согласно каскадной модели Кинчина – Пиза при переданной энергии  $T < 2T_d$  полное сечение смещения совпадает с сечением первичного смещения, то приводятся данные, начиная с энергии, при которой полное сечение отличается от сечения первичного смещения, кроме случая кремния и третьего борновского приближения, т. к. в третьем борновском приближении сечение первичного смещения для кремния не вычислялось.

Таблица 10 – Полное сечение смещения (барн). Углерод.  $Z = 6$ ,  $M = 12,011$ ,  $T_d = 19,99462$  эВ

E, МэВ	0,199	0,229	0,269	0,319	0,378	0,448	0,518	0,598
$\sigma_{totMF}$	16,35	17,43	18,52	19,60	20,66	21,77	22,80	23,90
$\sigma_{totLQZ}$	16,41	17,49	18,59	19,67	20,73	21,85	22,87	23,97
$\sigma_{totLQZm2}$	16,41	17,49	18,59	19,67	20,73	21,85	22,87	23,97
$\sigma_{totLQZm3}$	16,41	17,49	18,59	19,67	20,73	21,85	22,87	23,97
$\sigma_{tot} [2]$	16,41	17,50	18,59	19,67	20,73	21,85	22,87	23,98
E, МэВ	0,698	0,847	0,997	1,49	1,99	2,99	4,98	9,97
$\sigma_{totMF}$	25,20	27,02	28,72	33,61	37,71	44,17	53,18	66,49
$\sigma_{totLQZ}$	25,27	27,09	28,80	33,68	37,78	44,25	53,26	66,57
$\sigma_{totLQZm2}$	25,28	27,09	28,80	33,69	37,78	44,25	53,26	66,57
$\sigma_{totLQZm3}$	25,28	27,09	28,80	33,69	37,78	44,25	53,26	66,57
$\sigma_{tot} [1]$	25,28	27,10	28,80	33,69	37,79	44,26	53,27	66,57
E, МэВ	19,9	29,9	49,8	69,8	99,7	199		
$\sigma_{totMF}$	80,39	88,73	99,28	106,30	113,73	128,17		
$\sigma_{totLQZ}$	80,47	88,81	99,36	106,38	113,81	128,25		
$\sigma_{totLQZm2}$	80,47	88,81	99,36	106,38	113,81	128,25		
$\sigma_{totLQZm3}$	80,47	88,81	99,36	106,38	113,81	128,25		
$\sigma_{tot} [1]$	80,48	88,83	99,39	106,42	113,87	128,33		

Таблица 11 – Полное сечение смещения (барн). Кремний.  $Z = 14$ ,  $M = 28,09$ ,  $T_d = 23,9935$  эВ

E, МэВ	0,494	0,568	0,667	0,791	0,939	1,11	1,28
$\sigma_{totMF}$	18,56	21,50	24,97	28,84	32,93	37,15	40,94
$\sigma_{totLQZ}$	18,98	21,98	25,52	29,42	33,56	37,81	41,63
$\sigma_{totLQZm2}$	18,98	21,98	25,52	29,42	33,56	37,82	41,63
$\sigma_{totLQZm3}$	18,98	21,99	25,53	29,44	33,57	37,83	41,64
$\sigma_{tot} [1]$	18,98	21,98	25,52	29,43	33,57	37,83	41,64
E, МэВ	1,48	1,73	2,1	2,47	3,7	4,94	7,41
$\sigma_{totMF}$	44,97	49,52	55,46	60,65	74,37	84,75	99,89
$\sigma_{totLQZ}$	45,69	50,26	56,22	61,44	75,19	85,59	100,75
$\sigma_{totLQZm2}$	45,70	50,27	56,23	61,44	75,19	85,59	100,74
$\sigma_{totLQZm3}$	45,71	50,28	56,23	61,44	75,19	85,58	100,73
$\sigma_{tot} [1]$	45,71	50,28	56,24	61,45	75,21	85,60	100,76
E, МэВ	12,3	24,7	49,4	74,1	123	173	247
$\sigma_{totMF}$	119,47	147,09	174,94	191,32	211,85	225,69	240,14
$\sigma_{totLQZ}$	120,34	147,96	175,82	192,20	212,73	226,56	241,02
$\sigma_{totLQZm2}$	120,33	147,95	175,81	192,19	212,72	226,56	241,01
$\sigma_{totLQZm3}$	120,32	147,94	175,79	192,18	212,71	226,54	241,00
$\sigma_{tot} [1]$	120,34	147,95	175,84	192,26	212,85	226,74	241,24

Таблица 12 – Полное сечение смещения, вычисленное в третьем борновском приближении (барн). Кремний.  $Z = 14$ ,  $M = 28,09$ ,  $T_d = 23,9935$  эВ

E, МэВ	0,249	0,252	0,257	0,264	0,274	0,286	0,301	0,321
$\sigma_{totJWM}$	0,28	0,76	1,53	2,55	3,88	5,34	6,94	8,84
E, МэВ	0,346	0,383	0,432	0,494	0,568	0,667	0,791	0,939
$\sigma_{totJWM}$	10,87	13,38	16,22	19,02	21,97	25,44	29,31	33,39
E, МэВ	1,11	1,28	1,48	1,73	2,1	2,47	3,7	4,94
$\sigma_{totJWM}$	37,61	41,40	45,43	49,98	55,91	61,10	74,82	85,19
E, МэВ	7,41	12,3	24,7	49,4	74,1	123	173	247
$\sigma_{totJWM}$	100,33	119,90	147,51	175,36	191,74	212,27	226,11	240,56

Таблица 13 – Полное сечение смещения (барн). Железо.  $Z = 26$ ,  $M = 55,85$ ,  $T_d = 19,9946$  эВ

E, МэВ	0,652	0,745	0,857	1,00	1,19	1,41	1,67
$\sigma_{totMF}$	29,20	36,16	43,74	52,44	62,72	73,23	84,20
$\sigma_{totJWM}$	32,35	39,32	46,91	55,62	65,92	76,44	87,42
$\sigma_{totLQZ}$	31,77	39,22	47,28	56,46	67,20	78,10	89,38
$\sigma_{totLQZm2}$	31,76	39,22	47,27	56,44	67,19	78,10	89,39
$\sigma_{totLQZm3}$	31,84	39,31	47,36	56,53	67,26	78,14	89,42
$\sigma_{tot} [2]$	31,79	39,25	47,31	56,48	67,22	78,12	89,41
E, МэВ	1,93	2,23	2,61	3,16	3,72	5,59	7,45
$\sigma_{totMF}$	93,94	103,97	115,23	129,32	141,65	173,45	196,52
$\sigma_{totJWM}$	97,16	107,19	118,45	132,53	144,86	176,63	199,68
$\sigma_{totLQZ}$	99,35	109,57	120,99	135,24	147,68	179,66	202,81
$\sigma_{totLQZm2}$	99,35	109,58	121,00	135,25	147,68	179,63	202,76
$\sigma_{totLQZm3}$	99,37	109,59	121,01	135,26	147,69	179,64	202,77
$\sigma_{tot} [2]$	99,37	109,60	121,03	135,28	147,73	179,67	202,81
E, МэВ	11,1	18,6	37,2	74,5	111	186	
$\sigma_{totMF}$	229,15	272,02	330,18	388,75	422,44	466,09	
$\sigma_{totJWM}$	232,28	275,12	333,24	391,78	425,46	469,11	
$\sigma_{totLQZ}$	235,50	278,41	336,59	395,15	428,84	472,48	
$\sigma_{totLQZm2}$	235,42	278,30	336,45	395,02	428,71	472,36	
$\sigma_{totLQZm3}$	235,42	278,30	336,44	394,99	428,68	472,33	
$\sigma_{tot} [2]$	235,47	278,28	336,40	395,09	428,91	472,74	

Таблица 14 – Полное сечение смещения (барн).  $Z = 82$ ,  $M = 207,21$ ,  $T_d = 11,9968$  эВ

E, МэВ	1,19	1,36	1,56	1,83	2,17	2,58
$\sigma_{totLQZ}$	376,97	460,81	539,65	623,98	707,20	786,18
$\sigma_{totLQZmod2}$	376,91	461,39	540,45	624,58	707,30	785,80
$\sigma_{totLQZmod3}$	374,18	458,68	538,55	623,80	707,30	785,99
$\sigma_{totO}$	376,03	460,58	540,07	624,80	707,94	786,53
E, МэВ	3,06	3,53	4,08	4,76	5,78	6,8
$\sigma_{totLQZ} (\delta)$	859,91	919,25	977,66	1038,41	1113,39	1175,27
$\sigma_{totLQZmod2}$	859,24	918,51	977,01	1037,99	1113,41	1175,73
$\sigma_{totLQZmod3}$	859,20	918,13	976,31	1037,05	1112,41	1174,86
$\sigma_{totO}$	859,77	918,76	976,92	1037,60	1112,86	1175,19
E, МэВ	10,2	13,6	20,4	34	68	136
$\sigma_{totLQZ}$	1327,75	1435,29	1586,87	1778,39	2039,38	2301,28
$\sigma_{totLQZmod2}$	1329,40	1437,71	1590,15	1782,33	2043,61	2305,32
$\sigma_{totLQZmod3}$	1329,42	1438,61	1592,27	1785,74	2048,16	2310,51
$\sigma_{totO}$	1329,45	1439,26	1592,75	1785,33	2047,87	2306,42

Таблица 15 – Полное сечение смещения (барн). Уран.  $Z = 92$ ,  $M = 238,00$ ,  $T_d = 31,9914$  эВ

E, МэВ	2,52	2,88	3,31	3,88	4,60	5,47
$\sigma_{totLQZ}$	202,87	244,27	281,83	319,56	355,57	388,95
$\sigma_{totLQZm2}$	203,10	244,75	282,28	319,75	355,39	388,44
$\sigma_{totLQZm3}$	202,87	244,75	282,44	319,89	355,33	388,14
$\sigma_{tot} [1]$	203,07	244,83	282,50	320,06	355,66	388,59
E, МэВ	6,48	7,48	8,64	10,00	12,20	14,40
$\sigma_{totLQZ}$	419,39	443,98	467,91	491,60	523,21	549,22
$\sigma_{pLQZm2}$	418,69	443,24	467,25	491,12	523,10	549,48
$\sigma_{totLQZm3}$	418,20	442,68	466,68	490,62	522,77	549,34
$\sigma_{tot} [1]$	418,66	443,06	466,97	490,83	522,83	549,33
E, МэВ	21,60	28,80	43,20	72,00	144,00	288,00
$\sigma_{totLQZ}$	612,14	656,56	719,13	798,07	905,43	1013,00
$\sigma_{totLQZm2}$	613,42	658,52	721,92	801,63	909,63	1017,52
$\sigma_{totLQZm3}$	613,84	659,34	723,21	803,37	911,74	1019,83
$\sigma_{tot} [1]$	614,08	659,74	723,32	803,21	911,02	1015,41

Таблица 16 – Полное сечение смещения (барн). Плутоний.  $Z = 94$ ,  $M = 242,00$ ,  $T_d = 11,9968$  эВ

E, МэВ	1,32	1,51	1,74	2,04	2,42	2,88	3,41
$\sigma_{totLQZ}$	561,35	672,20	772,76	871,17	964,94	1051,82	1130,54
$\sigma_{totLQZm2}$	561,74	673,60	774,50	872,48	965,22	1050,93	1128,78
$\sigma_{totLQZm3}$	558,06	671,09	773,64	872,85	965,89	1051,17	1128,36
$\sigma_{tot} [1]$	560,95	673,34	774,95	873,53	966,45	1051,97	1129,33
E, МэВ	3,94	4,55	5,31	6,45	7,59	11,3	15,1
$\sigma_{totLQZ} (\delta)$	1194,92	1257,24	1322,77	1404,09	1471,60	1636,17	1756,35
$\sigma_{totLQZm2}$	1192,74	1254,98	1320,78	1402,89	1471,33	1638,74	1761,07
$\sigma_{totLQZm3}$	1191,86	1253,82	1319,56	1401,89	1470,72	1639,42	1762,75
$\sigma_{tot} [1]$	1192,87	1254,60	1320,19	1402,13	1470,79	1639,37	1763,80
E, МэВ	22,7	37,9	75,9	151	227	379	
$\sigma_{totLQZ}$	1926,26	2141,33	2434,54	2726,19	2899,36	3117,29	
$\sigma_{totLQZm2}$	1933,68	2151,33	2446,73	2739,51	2913,05	3131,26	
$\sigma_{totLQZm3}$	1936,60	2155,45	2451,86	2745,18	2918,91	3137,27	
$\sigma_{tot} [1]$	1937,55	2154,96	2450,35	2735,09	2899,70	3105,55	

Таблица 17 – Полное сечение смещения (барн). Эйнштейний.  $Z = 99$ ,  $M = 254,00$ ,  $T_d = 15,9957$  эВ

E, МэВ	1,67	1,91	2,19	2,58	3,06	3,63
$\sigma_{totLQZ}$	508,39	601,00	679,79	759,87	832,29	897,74
$\sigma_{totLQZm2}$	508,90	602,18	681,10	760,74	832,28	896,81
$\sigma_{totLQZm3}$	507,07	601,38	681,16	761,12	832,39	896,47
$\sigma_{tot} [1]$	508,73	602,44	681,75	761,61	833,08	897,36
E, МэВ	4,30	4,97	5,73	6,69	8,12	9,56
$\sigma_{totLQZ} (\delta)$	958,39	1008,23	1056,14	1107,62	1171,55	1225,33
$\sigma_{totLQZm2}$	956,78	1006,33	1054,24	1106,02	1170,68	1225,31
$\sigma_{totLQZm3}$	956,10	1005,54	1053,48	1105,43	1170,43	1225,37
$\sigma_{tot} [1]$	957,00	1006,32	1053,95	1105,79	1170,40	1225,35
E, МэВ	14,3	19,1	28,6	47,8	95,6	191
$\sigma_{totLQZ}$	1358,33	1454,45	1589,20	1761,43	1994,63	2227,90
$\sigma_{totLQZm2}$	1360,83	1458,79	1595,80	1770,20	2005,22	2239,43
$\sigma_{totLQZm3}$	1361,63	1460,02	1597,46	1772,22	2007,50	2241,84
$\sigma_{tot} [1]$	1361,97	1461,12	1598,12	1771,45	2004,77	2229,62

В таблице 18 приводятся значения средней относительной погрешности для полного сечения смещения атома.

Таблица 18 – Средняя относительная погрешность полного сечения смещения атома  $\langle \delta \rangle$ , %

	C	Si	Fe	Pb	U	Pu	Es
MF	0,30	1,55	5,70	–	–	–	–
JWM	–	0,40	1,71	–	–	–	–
LQZ	0,086	0,063	0,079	0,30	0,63	0,43	0,40
LQZ <sub>m2</sub>	0,085	0,058	0,068	0,14	0,18	0,15	0,16
LQZ <sub>m3</sub>	0,085	0,059	0,085	0,24	0,13	0,21	0,18

Как и для сечения первичного смещения, для полного сечения смещения все методы дают среднюю погрешность значительно меньше 1 % для углерода.

Для кремния погрешность метода МакКинли – Фешбаха больше 1,5 %, а погрешность метода LQZ и его модификаций менее 0,1 %. Для железа погрешность метода LQZ и его модификаций остается менее 0,1 %. Погрешность расчета полного сечения смещения по методу МакКинли – Фешбаха больше, чем погрешность расчета сечения первичного смещения, а для метода LQZ и его модификаций – наоборот.

Как и для сечения первичного смещения, при высоких энергиях отличие метода LQZ и его модификаций и данных [2] растет, что, возможно, связано с погрешностью численных расчетов в [2].

Для рассмотренных примеров средняя погрешность третьего борновского приближения для расчета полного сечения смещения атома меньше погрешности второго борновского приближения. Для железа последняя превышает 5 %. Погрешности метода LQZ и его модификаций значительно меньше погрешностей борновских приближений. LQZ<sub>m3</sub> для железа оказался менее точен, чем обычный метод LQZ.

По критерию средней относительной ошибки для нормированного моттовского сечения трижды модифицированный метод LQZ становится точнее дважды модифицированного, начиная с  $Z = 101$  [21]. Однако для рассмотренных примеров в случае урана трижды модифицированный метод привел к меньшей погрешности и для  $\sigma_p$  и для  $\sigma_{tot}$ . Для тяжелых элементов модифицированные методы при расчете полного сечения смещения так же, как и для сечения первичного смещения атома, показали более высокую точность, чем обычный метод LQZ.

### Применение укороченных вариантов метода Лиджиана – Кинга – Женгминга для расчета сечения смещения атома позитроном

В [24] рассчитывалось сечение смещения атомов позитронами. Было показано, что сечения смещения позитронами всегда меньше, чем электронами, и что приближение МакКинли – Фешбаха даже менее применимо к случаю позитронов, чем к случаю электронов.

Ранее в ряде работ [25] мы рассмотрели варианты укороченного метода LQZ и показали, что, несмотря на использование меньшего числа подгоночных параметров, чем в традиционном методе, во многих применениях точность укороченных вариантов остается достаточно высокой. В данном разделе мы применили метод LQZ и укороченные варианты для расчета сечения смещения атомов золота позитронами. Мы не имеем возможности для точного сопоставления результатов численного интегрирования моттовского сечения и наших результатов, т. к. результаты для позитронов не табулированы. Поэтому мы будем сравнивать графики из работы [24] с полученными нами.

В укороченных вариантах метода LQZ нормированное моттовское сечение вычисляется по формуле (индекс  $ma$  означает число коэффициентов  $a_j$ , входящих в формулу для НМС):

$$R_{LQZ_{ma}}(\theta, Z, E) = 1 + \sum_{j=1}^m a_j(Z, E)(1 - \cos \theta)^{j/2}. \quad (23)$$

Так как укороченные варианты LQZ отличаются от модифицированных вариантов меньшим числом коэффициентов  $a_j$ , то из выражений для сечения смещения атомов (12) (19) можно сразу получить выражения в рамках укороченных методов:

$$\sigma_{p3a} = \frac{\pi Z^2 e^4}{m^2 c^4 \beta^4} (1 - \beta^2) \left[ -1 - 2\sqrt{2}a_1 + 4\sqrt{2}a_3 + \frac{1}{y} + \frac{2\sqrt{2}a_1}{\sqrt{y}} - 4\sqrt{2}a_3\sqrt{y} - 2a_2 \ln y \right]. \quad (24)$$

$$\sigma_{p2a} = \frac{\pi Z^2 e^4}{m^2 c^4 \beta^4} (1 - \beta^2) \left[ -1 - 2\sqrt{2}a_1 + \frac{1}{y} + \frac{2\sqrt{2}a_1}{\sqrt{y}} - 2a_2 \ln y \right]. \quad (25)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{tot3a} = & \frac{\pi Z^2 e^4}{m^2 c^4 \beta^4} (1 - \beta^2) \left[ \frac{1}{2y} + \frac{2(\sqrt{2}-1)a_1}{\sqrt{y}} + 2a_2 \ln 2 + 4(2-\sqrt{2})a_3 \sqrt{y} + \right. \\ & \left. + \frac{1}{2y} \{-\ln(2y) + 2a_1(\sqrt{2}-2\sqrt{y}) + 2a_2(1-2y) + \frac{4\sqrt{2}}{3}a_3(1-(2y)^{3/2})\} \right]. \end{aligned} \quad (26)$$

$$\sigma_{tot2a} = \frac{\pi Z^2 e^4}{m^2 c^4 \beta^4} (1 - \beta^2) \left[ \frac{1}{2y} + \frac{2(\sqrt{2}-1)a_1}{\sqrt{y}} + 2a_2 \ln 2 + \frac{1}{2y} \{-\ln(2y) + 2a_1(\sqrt{2}-2\sqrt{y}) + 2a_2(1-2y)\} \right]. \quad (27)$$

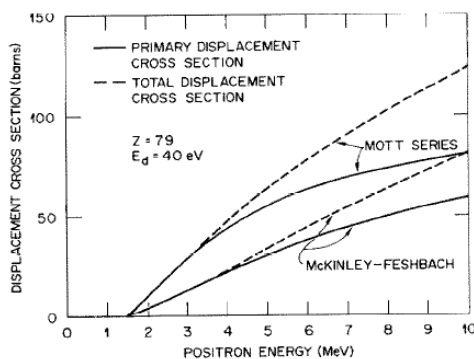
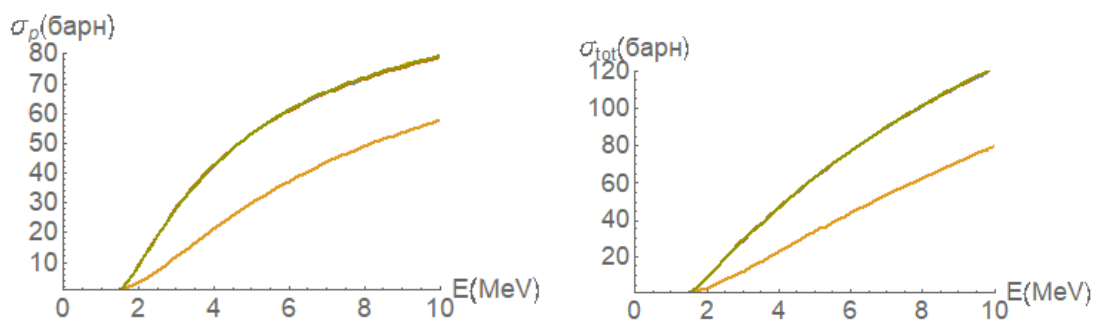
Коэффициенты  $a_j$  в методе LQZ и укороченных вариантах рассчитываются по формуле ( $L$  в разных вариантах укороченного метода принимает значения от 3 до 6):

$$a_j(Z, E) = \sum_{k=1}^L d_z(j, k) (\beta - \bar{\beta})^{k-1} \quad (28)$$

Подгоночные коэффициенты  $d_z$  для укороченных вариантов для  $Z = -79$  приводятся в работах [26–28].

Расчеты сечения смещения проводили для укороченных вариантов 3a6d, 3a5d, 3a4d, 3a3d, 2a6d, 2a5d, 2a4d, 2a3d и по обычному методу LQZ.

На рисунке 2 изображена зависимость сечения первичного смещения и полного сечения смещения атома золота позитроном от энергии для пороговой энергии смещения 40 эВ. Для сравнения приводится рисунок 1 из работы [24]. Нижняя кривая на каждом графике – сечение смещения в приближении МакКинли – Фешбаха.

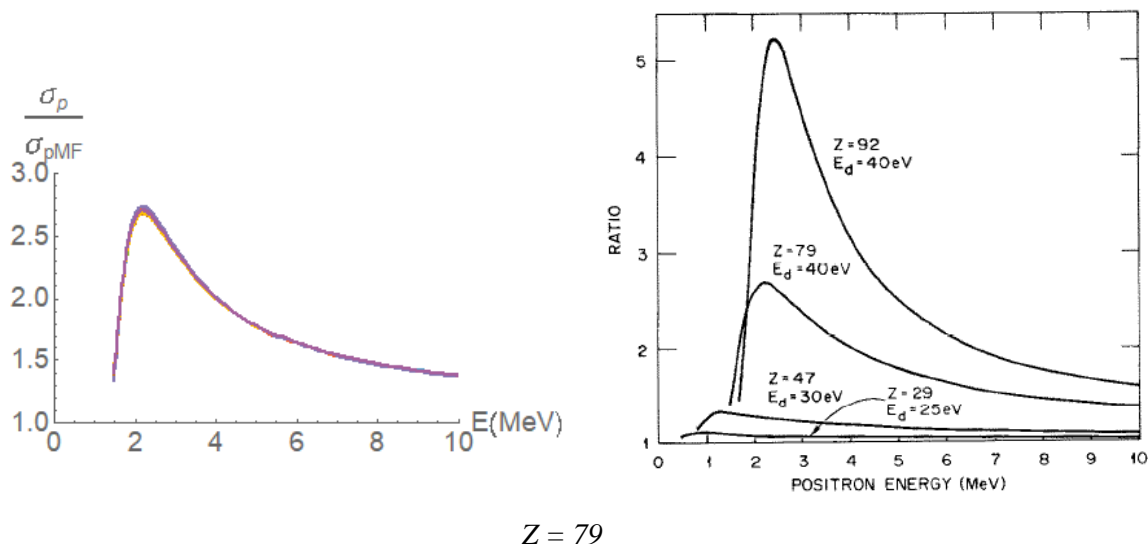


$Z = 79$

**Рисунок 2 – Сечение первичного смещения и полное сечение смещения атома позитроном**

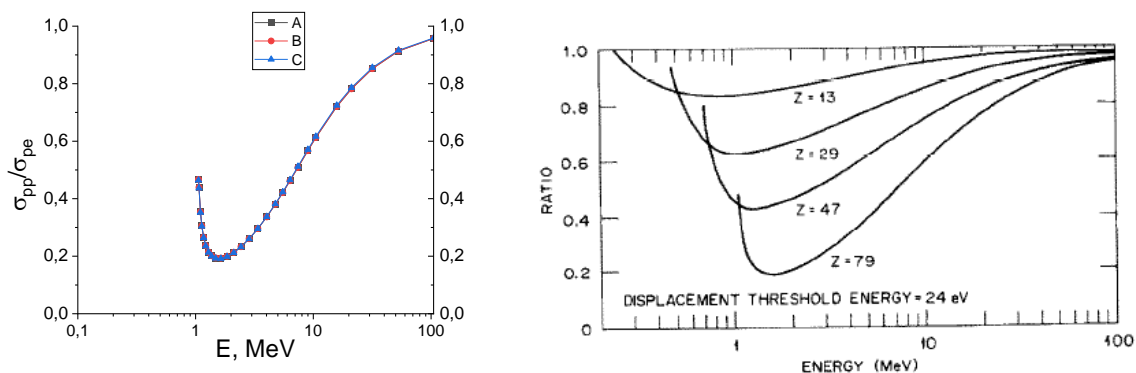
На рисунке 3 изображено отношение сечения первичного смещения атома золота позитроном к вычисленному в приближении МакКинли – Фешбаха, для сравнения приведен рисунок 2 [24].

Графики, рассчитанные по методу LQZ и всем укороченным вариантам, практически сливаются и согласуются с результатом численного расчета [24].



**Рисунок 3 – Отношение сечения первичного смещения атома позитроном к сечению, вычисленному в приближении МакКинли – Фешбаха**

На рисунке 4 изображено отношение сечений первичного смещения атома золота для позитронов и для электронов для пороговой энергии смещения 24 эВ. Для сравнения приводится рисунок 4 [24]. Данные по сечению смещения для электронов брались из [2].

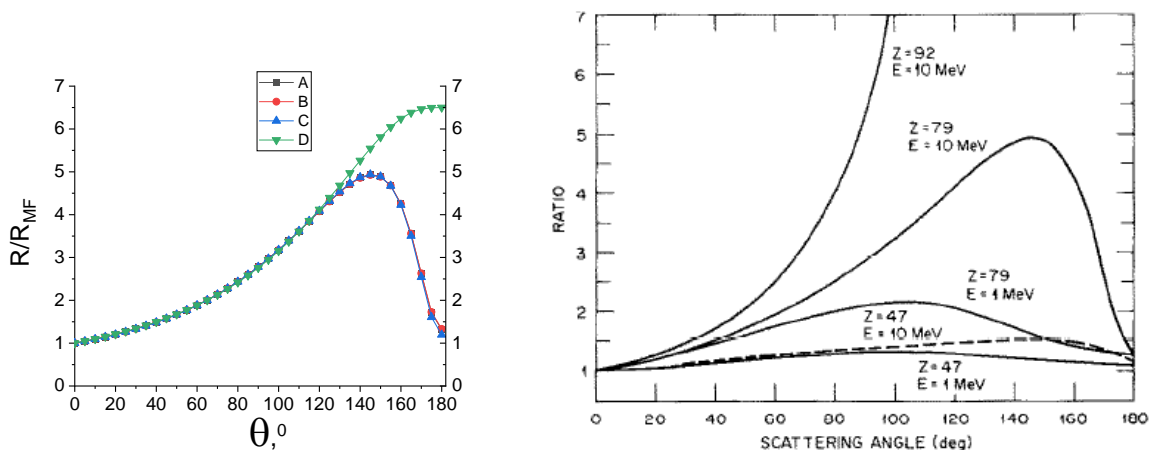


**Рисунок 4 – Отношение сечения первичного смещения атома позитроном к сечению первичного смещения атома электроном**

Результаты хорошо согласуются с [24]. При этом даже использование метода 2a3d дает высокую точность.

На рисунке 5 изображено отношение моттовского дифференциального сечения рассеяния позитронов ядром золота к полученному в приближении МакКинли – Фешбаха для энергии позитронов 10 МэВ. Для сравнения приводится рисунок 3 из работы [24].

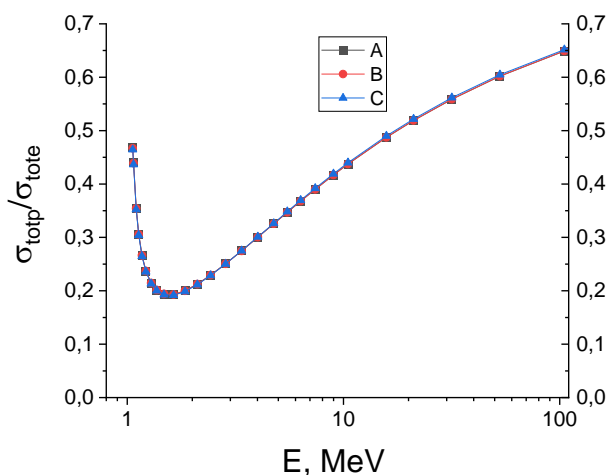
Из рисунка следует, что метод  $2a3d$  при высоких энергиях неприменим для рассеяния на большие углы. Однако, основной вклад в сечение смещения атома при высоких энергиях вносит рассеяние на малые углы, т. к. сечение рассеяния быстро убывает с ростом угла рассеяния. Поэтому все укороченные методы дают хорошую точность при расчете сечения смещения атома для широкого диапазона энергий.



$Z = 79$ .  $E = 10$  МэВ.  $A$  – численный расчет моттовского сечения,  $B$  –  $LQZ$ ,  $C$  –  $3ab d$ ,  $D$  –  $2a3d$ .

**Рисунок 5 – Отношение дифференциального сечения рассеяния атома позитроном к дифференциальному сечению рассеяния, вычисленному в приближении МакКинли – Фешбаха**

Мы рассчитали отношение полных сечений смещения атома золота позитронами и электронами. Для расчета использовалась модель Кинчина – Пиза, как и в [24]. Результаты приведены на рисунке 6.



$Z = 79$ .  $A$  – метод  $LQZ$ ,  $B$  – метод  $3ab d$ ,  $C$  – метод  $2a3d$ .

**Рисунок 6 – Отношение полного сечения смещения атома позитроном к полному сечению смещения электроном**

Все методы дают близкие результаты. Отличие сечений смещения для позитронов и электронов при высоких энергиях выше, чем для сечений первичного смещения.

При энергии 105 МэВ отношение сечений 0,65, в то время как для сечений первичного смещения отношение составляет 0,96.

Отметим, что в [29] отношение сечений полного смещения позитронов и электронов оказывается выше. Возможно, это связано с использованием другой каскадной функции.

### Заклучение

В работе рассмотрено использование аппроксимаций моттовского дифференциального сечения рассеяния для расчета сечения смещения атома релятивистскими электронами и позитронами. Получены следующие результаты:

1. Получено аналитическое выражения для расчета сечения первичного смещения атома в рамках трижды модифицированного метода Лиджиана – Кинга – Женгминга.

2. Получены аналитические выражения для расчета полного сечения смещения атома при использовании каскадной функции Кинчина – Пиза в рамках метода Лиджиана – Кинга – Женгминна и его второй и третьей модификаций, а также в рамках второго борновского приближения.

3. Получено выражение для полного сечения смещения атома в третьем борновском приближении через специальные функции.

4. Вычислены сечения смещения атома электроном в углероде, кремнии, железе, свинце, уране, плутонии и эйнштейнии с корректировкой пороговой энергии смещения атома. Для рассмотренных примеров средняя погрешность борновских приближений для расчета полного сечения смещения несколько больше, чем для расчета сечения первичного смещения. Средняя погрешность третьего борновского приближения в несколько раз меньше, чем второго. С ростом порядкового номера элемента погрешности борновских приближений растут.

5. Погрешности метода LQZ и его модификаций существенно меньше, чем борновских приближений. При этом средние погрешности для полного сечения смещения оказываются меньше, чем для сечения первичного смещения. Для тяжелых элементов средние погрешности выше, чем для легких, но во всех рассмотренных случаях средняя погрешность менее 1 %. Во всех рассмотренных случаях погрешность дважды модифицированного метода LQZ меньше или равна погрешности обычного метода. Погрешность трижды модифицированного метода LQZ для полного сечения смещения атома в железе выше, чем обычного метода. Для тяжелых элементов погрешности модифицированных вариантов метода LQZ значительно меньше, чем обычного метода.

6. Получены аналитические выражения для сечения смещения атома в рамках укороченных вариантов метода Лиджиана – Кинга – Женгминга. Рассчитано сечение первичного смещения атома и полное сечение смещения атома позитронами в золоте. Как метод LQZ, так и все укороченные варианты дают для сечения смещения атома значения, близкие между собой и согласующиеся с результатами численных расчетов, хотя укороченные методы для расчета моттовского сечения на большие углы при высоких энергиях могут быть неприменимы. Показано, что в случае использования каскадной модели Кинчина – Пиза при высоких энергиях различие полного сечения смещения позитронами и электронами больше, чем для сечения первичного смещения.

### СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Зеленский, В. Ф. Радиационные дефекты и набухание металлов / В. Ф. Зеленский, И. М. Нехлюдов, Т. П. Чернякова. – Киев : Наук. думка, 1988. – 296 с.
2. Oen, O. S. Cross sections for atomic displacements in solids by fast electrons / O. S. Oen // Oak Ridge National Laboratory Report. – 1973, Nr ORNL-4897.

3. Controlled Introduction of Defects to Delafossite Metals by Electron Irradiation / V. Sunko [et al.] // *Phys. Rev. X*. – 2020. – Vol. 10. – P. 021018-1–021018-16.
4. Mott, N. F. The Polarisation of Electrons by Double Scattering / N. F. Mott // *Proc. Roy. Soc. A*. – 1932. – Vol. 135/ – P. 429–458.
5. 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.
6. Архутик, А. В. О точности борновских приближений моттовского сечения рассеяния / А. В. Архутик, П. Б. Кац // *Вестн. Брѣсц. ун-та. Сер. 4, Фізика. Матэматыка*. – 2022. – № 2. – С. 5–28.
7. 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.
8. McKinley Jr, 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.
9. 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.
10. 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.
11. Pease, R. S. Displacement of atoms in solid by radiation / R. S. Pease, G. H. Kinchin // *Reports on Progress in Physics*. – 1955. – 18:1. – P. 1–51.
12. Римашевская, А. С. Трижды модифицированный метод LQZ на примере коперниция / А. С. Римашевская // *От творческого поиска к профессиональному становлению : материалы Всерос. науч.-практ. студенч. конф.* – Бузулук, 2022. – С. 253–257.
13. 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. 473–480.
14. 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.
15. Wolfer, W. G. Radiation Effects in Plutonium – What Is Known? Where Should We Go from Here? / W. G. Wolfer // *Los Alamos Science*. – 2020. – Nr 26. – P. 275–285.
16. Кац, П. Б. Расчеты полного сечения смещения атома электроном в уране, плутонии и эйнштейнии на основе метода Лиджиана – Кинга – Женгминга и его модификаций / П. Б. Кац, А. С. Римашевская // *Актуальные вопросы общества, науки и образования : сб. ст. III Междунар. науч.-практ. конф., Пенза, 15 янв. 2023 г. : в 2 ч.* – Пенза : МЦНС «Наука и Просвещение», 2023. – Ч. 2. – С. 20–26.
17. Мушинская, К. А. Дважды модифицированный метод LQZ для урана, плутония и эйнштейния / К. А. Мушинская // *НИРС-2021. Физика: научный и методический аспекты : сб. материалов студенч. науч. конф., Брест, 22–23 апр. 2021 г. / Брест. гос. ун-т им. А. С. Пушкина ; под общ. ред. В. С. Секержицкого.* – Брест : БрГУ, 2021. – С. 25.
18. 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.
19. Куликович, Н. И. Вычисление поправки Мотта для химических элементов с  $Z = 6, 12, 26, 36, 52, 60, 75, 80, 92, 104$  и  $114$  с помощью метода Лиджиана – Кинга – Женгминга и его модификаций и метода Матвеева – Толманова / Н. И. Куликович,

А. С. Римашевская // Большая студенческая конференция : сб. ст. III Междунар. науч.-практ. конф. : в 2 ч. – Пенза : МЦНС «Наука и Просвещение», 2022. – Ч. 1. – С. 12–18.

20. Кац, П. Б. Трижды модифицированный метод LQZ для первых десяти элементов периодической системы Д. И. Менделеева / П. Б. Кац, А. С. Римашевская // Актуальные вопросы подготовки будущих преподавателей физики и астрономии : материалы регион. науч.-практ. семинара, Брест, 17–18 нояб. 2022 г. – Брест, 2022. – С. 25–27.

21. Куликович, Н. И. Сравнительный анализ точности дважды и трижды модифицированного метода Лиджиана – Кинга – Женгминга для химических элементов от урана до бория / Н. И. Куликович, А. С. Римашевская // Наука и просвещение: актуальные вопросы, достижения и инновации : сб. ст. IX Междунар. науч.-практ. конф. – Пенза : МЦНС «Наука и Просвещение», 2022. – С. 10–18.

22. Куликович, Н. И. Расчет сечения первичного смещения атома электроном в углероде и кремнии / Н. И. Куликович, А. С. Римашевская // Modern scientific research : материалы II Междунар. науч.-практ. конф., Пенза, 23 янв. 2023 г., – Пенза : МЦНС «Наука и Просвещение», 2023. – С. 12–16.

23. Кац, П. Б. Расчет сечения смещения атома электроном в свинце на основе метода Лиджиана – Кинга – Женгминга и его модификаций / П. Б. Кац, А. С. Римашевская // International research forum – 2023 : сб. ст. Междунар. науч.-практ. конф., Петрозаводск, 9 марта 2023 г. – Петрозаводск : МЦНП «Новая наука», 2023. – С. 25–31.

24. Oen, O. S. Cross sections for atomic displacements in solids by fast positrons / O. S. Oen // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. – 1988. – Vol. B 33. – P. 744–747.

25. Кац, П. Б. Применение укороченных вариантов метода Лиджиана – Кинга – Женгминга для расчета поправки Мотта / П. Б. Кац, А. В. Кудравец // Современные тенденции развития науки и образования : сб. ст. Междунар. науч.-практ. конф. – Пенза : МЦНС «Наука и Просвещение», 2023. – С. 8–13.

26. Кац, П. Б. Сравнение точности вариантов укороченного модифицированного метода Лиджиана – Кинга – Женгминга  $3\alpha 3d$  и  $2\alpha 4d$  для вольфрама, золота, свинца, тория и урана / П. Б. Кац, А. В. Кудравец // Физико-математическое образование: цели, достижения и перспективы : материалы Междунар. науч.-практ. конф., Минск, 20–21 окт. 2022 г. ; редкол.: С. И. Василец [и др.]. – Минск : БГПУ, 2022. – С. 221–224.

27. Кац, П. Б. Применение укороченных вариантов метода Лиджиана – Кинга – Женгминга для расчета сечения смещения атома позитроном / П. Б. Кац, А. В. Кудравец // Современные научные исследования: актуальные вопросы, достижения и инновации : сб. ст. XXXI Междунар. науч.-практ. конф., Пенза 20 февр. 2023 г. – Пенза : МЦНС «Наука и Просвещение», 2023. – С. 12–18.

28. Кудравец, А. В. Укороченный модифицированный метод Лиджиана – Кинга – Женгминга  $2\alpha 3d$  для химических элементов от прометия до урана / А. В. Кудравец // Наука и просвещение: актуальные вопросы, достижения и инновации : сб. ст. IX Междунар. науч.-практ. конф. – Пенза : МЦНС «Наука и Просвещение», 2022. – С. 19–23.

29. 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. – Vol. 27. – Art. 101022.

## REFERENCES

1. Zielienskij, V. F. Radiacionnyje diefiekty i raspukhanije mietallov / V. F. Zielienskij, I. M. Niekliudov, T. P. Chierniakova. – Kijev : Nauk. dumka, 1988. – 296 s.

2. Oen, O. S. Cross sections for atomic displacements in solids by fast electrons / O. S. Oen // Oak Ridge National Laboratory Report. – 1973, Nr ORNL-4897.

3. Controlled Introduction of Defects to Delafossite Metals by Electron Irradiation / V. Sunko [et al.] // *Phys. Rev. X*. – 2020. – Vol. 10. – P. 021018-1–021018-16.
4. Mott, N. F. The Polarisation of Electrons by Double Scattering / N. F. Mott // *Proc. Roy. Soc. A*. – 1932. – Vol. 135. – P. 429–458.
5. 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.
6. Arkhutiĭ, A. V. O tochnosti bornovskikh priblizhenij mottovskogo siechienenija rassiejaniĭa / A. V. Arkhutiĭ, P. B. Kac // *Viesn. Bresc. un-ta. Sier. 4, Fizika. Matematika*. – 2022. – № 2. – S. 5–28.
7. 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.
8. McKinley Jr, 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.
9. 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.
10. 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.
11. Pease, R. S. Displacement of atoms in solid by radiation / R. S. Pease, G. H. Kinchin // *Reports on Progress in Physics*. – 1955. – 18:1. – P. 1–51.
12. Rimashevskaja, A. S. Trizhdy modifitsirovannyj mietod LQZ na primierie kopiernicija / A. S. Rimashevskaja // *Ot tvorchieskogo poiska k professional'nomu stanovlienuju : materialy Vsieros. nauch.-prakt. studiench. konf.* – Buzuluk, 2022. – S. 253–257.
13. 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. 473–480.
14. 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.
15. Wolfer, W. G. Radiation Effects in Plutonium – What Is Known? Where Should We Go from Here? / W. G. Wolfer // *Los Alamos Science*. – 2020. – Nr 26. – P. 275–285.
16. Kac, P. B. Raschioty polnogo siechienenija smieschenija atoma eliektronom v uranie, plutonii i ejnshtejnii na osnovie mietoda Lidzhiana – Kinga – Zhengminga i jego modifikacij / P. B. Kac, A. S. Rimashevskaja // *Aktual'nyje voprosy obshchiestva, nauki i obrazovanija : sb. st. III Miezhdunar. nauch.-prakt. konf., Pienza, 15 janv. 2023 g. : v 2 ch.* – Pienza : MCNS «Nauka i Prosvieshchienije», 2023. – Ch. 1. – S. 20–26.
17. Mushinskaja, K. A. Dvazhdy modifitsirovannyj mietod LQZ dlia urana, plutonija i ejnshtejniĭa / K. A. Mushinskaja // *NIRS-2021. Fizika: Nauchnyj i mietodichieskij aspiekty : sb. materialov studiench. nauch. konf., Briest, 22–23 apr. 2021 g. / Brest. gos. un-t im. A. S. Pushkina ; pod obshch. ried. V. S. Siekierzhickogo*. – Briest : BrGU, 2021. – S. 25.
18. Kac, P. B. Koeffitsienty dvazhdy modifitsirovannogo mietoda LQZ dlia aliuminija, miedi, olova i svinca / P. B. Kac, K. A. Mushinskaja // *Sovriemiennyje nauchnyje probliemy i voprosy priepodavanija tieorietichieskoj i matiematichieskoj fiziki, fiziki kondensirovannykh sried i astronomi i: sb. materialov VIII Riesp. nauch.-prakt. konf., Briest, 21 okt. 2021 g. / Briest. gos. un-t im. A. S. Pushkina ; pod obshch. ried. A. V. Diemidchika*. – Briest : BrGU, 2021. – S. 20–22.
19. Kulikovich, N. I. Vychislieniĭe popravki Motta dlia khimichieskikh eliemientov s  $Z = 6, 12, 26, 36, 52, 60, 75, 80, 92, 104$  i  $114$  s pomoshchju mietoda Lidzhiana – Kinga –

Zhengminga i jego modifikacij i mietoda Matviejeva – Tolmanova / N. I. Kulikovich, A. S. Rimashevskaja // Bol'shaja studienchieskaja konfierencija : sb. st. III Miezhdunar. nauch.-prakt. konf. : v 2 ch. – Pienza : MCNS «Nauka i Prosvieshchienije», 2022. – Ch. 1. – S. 12–18.

20. Kac, P. B. Trizhdy modifitsirovannyj mietod LQZ dlia piervykh diesiati eliemientov pieriodichieskoj sistiemy D. I. Miendieliejeva / P. B. Kac, A. S. Rimashevskaja // Aktual'nyje voprosy podgotovki budushchikh priepodavatieliej fiziki i astronomii : materialy riegiion. nauch.-prakt. sieminara, Briest, 17–18 nojab. 2022 g. – Briest, 2022. – S. 25–27.

21. Kulikovich, N. I. Sravnitel'nyj analiz tochnosti dvazhdy i trizhdy modifitsirovannogo mietoda Lidzhiana – Kinga – Zhengminga dlia khimichieskikh eliemientov ot urana do borija / N. I. Kulikovich, A. S. Rimashevskaja // Nauka i prosvieshchienije: aktual'nyje voprosy, dostizhenija i innovacii : sb. st. IX Miezhdunar. nauch.-prakt. konf. – Pienza : MCNS «Nauka i Prosvieshchienije», 2022. – S. 10–18.

22. Kulikovich, N. I. Raschiot siechienija piervichnogo smieshchienija atoma eliektro-nom v ugljerodie i kriemni / N. I. Kulikovich, A. S. Rimashevskaja // Modern scientific research : materialy II Miezhdunar. nauch.-prakt. konf., Pienza, 23 janv. 2023 g. – Pienza : MCNS «Nauka i Prosvieshchienije», 2023. – S. 12 – 16.

23. Kac, P. B. Raschiot siechienija smieshchienija atoma eliektromom v svinca na osnovie mietoda Lidzhiana – Kinga – Zhengminga i jego modifikacij / P. B. Kac, A. S. Rimashevskaja // International research forum – 2023 : sb. st. Miezhdunar. nauch.-prakt. konf., Pietrozavodsk, 9 marta 2023 g. – Pietrozavodsk : MCNP «Novaja nauka», 2023. – S. 25–31.

24. Oen, O. S. Cross sections for atomic displacements in solids by fast positrons / O. S. Oen // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. – 1988. – Vol. B 33. – P. 744–747.

25. Kac, P. B. Primienienije ukorochnykh variantov mietoda Lidzhiana – Kinga – Zhengminga dlia raschiota popravki Motta / P. B. Kac, A. V. Kudravec // Sovriemiennye tendencii razvitija nauki i obrazovanija : sb. st. Miezhdunar. nauch.-prakt. konf. – Pienza : MCNS «Nauka i Prosvieshchienije», 2023. – S. 8–13.

26. Kac, P. B. Sravnenije tochnosti variantov ukorochnogo modifitsirovannogo mietoda Lidzhiana – Kinga – Zhengminga 3a3d i 2a4d dlia vol'frama, zolota, svinca, torija i urana / P. B. Kac, A. V. Kudravec // Fiziko-matiematikieskoje obrazovanie: celi, dostizhenija i pier-spiektivy : materialy Miezhdunar. nauch.-prakt. konf., Minsk, 20–21 okt. 2022 g. ; riedkol.: S. I. Vasilec [i dr.]. – Minsk : BGPU, 2022. – S. 221–224.

27. Kac, P. B. Primienienije ukorochnykh variantov mietoda Lidzhiana – Kinga – Zhengminga dlia raschiota siechienija smieshchienija atoma pozitromom / P. B. Kac, A. V. Kudravec // Sovriemiennye nauchnyje issliedovanija: aktual'nyje voprosy, dostizhenija i innovacii : sb. st. XXXI Miezhdunar. nauch.-prakt. konf., Pienza, 20 fievr. 2023 g. – Pienza : MCNS «Nauka i Prosvieshchienije», 2023. – S. 12–18.

28. Kudravec, A. V. Ukorochennyj modifitsirovannyj mietod Lidzhiana – Kinga – Zhengminga 2a3d dlia khimichieskikh eliemientov ot promietija do urana / A. V. Kudravec // Nauka i prosvieshchienije: aktual'nyje voprosy, dostizhenija i innovacii : sb. st. IX Miezhdunar. nauch.-prakt. konf. – Pienza : MCNS «Nauka i Prosvieshchienije», 2022. – S. 19–23.

29. 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. – Vol. 27. – Art. 101022.

*Рукапіс наступіў у рэдакцыю 10.04.2023*