

用解析和数值方法研究动量淀积深度分布

张 莱¹ 许 峰² 张竹林²

1 (安徽理工大学计算机科学与技术系 淮南 232001)

2 (安徽理工大学数理系 淮南 232001)

摘要 基于解析和数值两种方法,作者研究了 Glazov 于 1994 年提出的计算由原子弹性碰撞引起动量淀积的空间分布。本文证明了 Glazov 推导出的积微分方程是不正确的,因为其中将两个原本独立的变量“纠缠”起来。分布函数在靶表面的“奇点”正是由这种“纠缠”引起的。动量淀积分布函数所满足的传统 Boltzmann 输运方程与 Glazov 方程并不等价。所以,由 Glazov 方程推导出的一切结果就都成问题了。另一方面,作者证明了由 Glazov 同样的高精度计算(通常 $n=300$ 阶矩,28 位小数)精度不足以再现 Glazov 文中的大部分图表。在这个工作中,作者用 Padé 逼近以及更高精度($n=980$ 阶矩,500 位小数)计算了动量淀积分布函数的富利叶变换 $f(k,\eta)$ 和 $f_L(k)$ 。我们的数值计算结果表明:对于这类输运问题的研究,Padé 逼近是一种强大的理论工具。

关键词 输运方程,动量空间淀积分布,Padé 逼近

中图分类号 O571.33

溅射物理是粒子同固体相互作用物理学的一个重要组成部分。溅射在溅射离子源、二次离子质谱分析、离子束分析、核辐射防护、微电子技术、溅射镀膜、离子镀、粒子束刻蚀、表面细微加工、微型机械零件制造以及离子束与生物材料的相互作用等领域都有着广泛的应用。Sigmund 理论已被世界同行公认为传统的溅射理论。但由于溅射现象本身的复杂性以及分析测量技术的困难,Sigmund 的溅射理论尚不完善。鉴于实验测量和计算机模拟两个方面都表明了溅射各向异性的存在,张竹林于 1999 年发表了多元靶碰撞级联中的各向异性原子谱理论公式^[1,2]。这个公式由两项构成:第一项为能量淀积所产生的各向同性项,这就是著名的 Sigmund 溅射理论;第二项就是由动量淀积产生的各向异性修正项。1994 年,俄罗斯理论家 Glazov 发表了三篇论文^[3-5],从解析理论,尤其是高精度数值计算(28 位小数,300 阶矩)论证动量和能量淀积分布函数在靶表面存在奇点或不连续。Glazov 的这三篇论文十分引人注目,曾多次被引用^[6]。2002 年,对于离子束轰击无定型靶,基于材料的平移不变性,张竹林证明了能量和动量淀积深度分布函数为无限可微函数,如果他们存在的话^[7]。本文的重点就是:(1)用解析法证明 Glazov 动量和能量淀积方程是错误的;(2)运用 Padé 逼近^[8]加更高精度数值计算(500

位小数,980 阶矩),重新研究能量淀积分布函数分布。

1 Glazov 理论及其问题

考虑一无定型靶, N 为原子数密度(原子数/ m^3)以及 M 为原子量,令轴沿正方向垂直靶表面并指向靶内, $z=0$ 表示靶表面, z 轴表示深度。假定另一原子量为 M 的原子以速度为 $\vec{v}$ (能量为 $E = \frac{1}{2} M v^2$) 射入到上述靶内并在其中碰撞激发碰撞级联。

$\bar{P}(z, \vec{v})$ 表示碰撞级联中动量淀积分布函数,亦即

$\bar{P}(z, \vec{v}) dz$ 表示淀积在深度范围 z 到 $z+dz$ 之间平均

动量沿 z 轴方向的分量。在线性碰撞级联范围内,

根据靶材料的平移不变性, $\bar{P}(z, \vec{v})$ 满足如下线性

Boltzmann 方程^[8]:

$$\bar{P}(z, \vec{v}) = N \delta z \int d\sigma [\bar{P}(z, \vec{v}') + \bar{P}(z, \vec{v}'')] + (1 - N \sigma \delta z) \bar{P}(z - \eta \delta z, \vec{v}) \quad (1)$$

这里,总散射截面 σ 必须为有限,因为概率

2005 年安徽省教育厅自然科学基金重点项目(2005kj034ZD)资助

第一作者:张 莱,男,1977 年出生,2004 年毕业于安徽理工大学,现为安徽理工大学计算系硕士研究生

通讯作者:张竹林

收稿日期:2006-04-04,修回日期:2006-05-10

$N\sigma\delta z$ 必须小于 1。根据动量守恒, 我们还可得到

归一化条件: $\int_{-\infty}^{\infty} dz \bar{P}(z, \bar{v}) = Mv\eta$ 。式中: η 为入

射原子运动方向和 z 轴正方向之间的夹角的余弦;

$d\sigma = d\sigma(\bar{v}; \bar{v}', \bar{v}'')$ 为一个原子以速度 $\bar{v}$ 撞击另一个

静止原子的微分散射截面($\bar{v}'$ 和 $\bar{v}''$ 分别为散射原子和反冲原子的速度)。这里 Mv 是入射原子的初始动量。文献 [3—5] 中, 方程 (1) 常写成如下形式:

$$-\eta \partial \bar{P}(z, \bar{v}) / \partial z = N \int_0^E d\sigma \times [\bar{P}(z, \bar{v}) - \bar{P}(z, \bar{v}') - \bar{P}(z, \bar{v}'')] \quad (2)$$

通常求解方程 (2) 用的是幂指数微分散射截面:

$$d\sigma(E, T) = CE^{-m} T^{-1-m} dT, \quad 1 > m > 0 \quad (3)$$

其总散射截面 $\sigma = \int_0^E d\sigma(E, T)$ 为无限大。也就

是说, 方程 (2) 并不一定与方程 (1) 等价。考虑如下幂指数微分散射截面:

$$d\sigma(E, T) = \begin{cases} CE^{-m} T^{-1-m} dT, & \text{若 } E \geq T \geq \xi E \\ 0, & \text{其它} \end{cases} \quad (4)$$

这里 ξ 为一独立参数且 $1 > \xi \geq 0$ 。当然, 若

$\xi = 0$, (4) 式就简化为著名的指数散射截面 (3)。

若 $\xi \neq 0$, (4) 的总散射截面 $\sigma = \int_{\xi E}^E d\sigma(E, T)$ 为有

限, 方程 (2) 与方程 (1) 等价。在这个情况下, 可以将 ξ 看作参数并将 (4) 代入到方程 (2) 求解。如果当 ξ 趋于零时, 方程 (2) 的解一致收敛于某个分布函数并且使得方程 (2) 的右边积分有限, 方程 (2) 与方程 (1) 的等效性才可以延拓到 $\xi = 0$ 。求解方程 (1)、(2) 的标准方法由 Sigmund 等^[8]给出, 发现 $\bar{P}(z, \bar{v})$ 具有一个很简单的标度关系并可写成如下形式:

$$\bar{P}(z, \bar{v}) = \frac{1}{3} (2M)^{0.5} NCE^{0.5-2m} F(x, \eta) \quad (5)$$

这里 $x = zNC/E^{2m}$ 为无单位的约化深度; $\eta = \cos \theta$, θ 为入射角。将 $F(x, \eta)$ 用勒让德 (Legendre) 多项式展开:

$$F(x, \eta) = \sum_{L=0}^{\infty} (2L+1) P_L(\eta) F_L(x) \quad (6)$$

可得 $F(x, \eta)$ 的各阶矩:

$$F^n(\eta) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot x^n F(x, \eta) \\ = \sum_{L=0}^{\infty} (2L+1) P_L(\eta) F_L^n, \quad n=0, 1, 2, 3, \dots$$

以及如下递推公式:

$$F_L^n \equiv \int_{-\infty}^{\infty} x^n F_L(x) dx = \frac{n[LF_{L-1}^{n-1} + (L+1)F_{L+1}^{n-1}]}{(2L+1)I_L(2mn+0.5)}, \\ n=1, 2, 3, 4, \dots \quad (7)$$

若

$$I_L(s) = \int_0^1 t^{-1-m} dt \times [1 - P_L(\sqrt{1-t}) \cdot (1-t)^s - P_L(\sqrt{t}) \cdot t^s] \neq 0,$$

归一化条件可给出递推初值:

$$F_L^0 = \delta_{L1}, \quad \text{这里 } \delta_{L1} = \begin{cases} 1, & L=1 \\ 0, & L=0 \end{cases}$$

(1) Glazov “奇点” 的解析理论根源

与上述传统方法^[8]不同, Glazov 直接将标度关系 (6) 代入到方程 (2) 中, 推导出如下关于 $F_L(x) (F_{-1} \equiv 0)$ 的积微分方程:

$$-\frac{\partial}{\partial x} [LF_{L-1}(x) + (L+1)F_{L+1}(x)] = (2L+1) \times \\ \int_{\xi}^1 t^{-1-m} dt [F_L(x) - P_L(\sqrt{1-t})(1-t)^{0.5-2m} \times \\ F_L(x/(1-t)^{2m}) - P_L(\sqrt{t})t^{0.5-2m} F_L(x/t^{2m})] \quad (8)$$

这里的 $t = T/E$, 与文献 [8] 中 Lindhard, Winterbon 等用的 $t = \varepsilon^2 T/T_m$ 无关。很明显, 当 $\xi \neq 0$ 时, Glazov 方程 (8) 与方程 (1) 等价, 因而是正确的。但是, 在文献 [3—5] 中, Glazov 代入的是幂指数微分散射截面 (3), 亦即 $\xi = 0$ 。这样, Glazov 方程 (8) 与方程 (1) 可能不等价。正是根据方程 (8), Glazov 发现动量淀积分布函数的所谓 “奇点”。具体分析如下:

为简单明了起见, 只考虑 $m=0.5$ 。若 $L=0$, Glazov 方程 (8) 简化为

$$-\frac{\partial}{\partial x} F_1(x) = \int_{\xi}^1 t^{-1.5} dt [F_0(x) - \\ (1-t)^{-0.5} F_0(x/(1-t)) - t^{-0.5} F_0(x/t)] \quad (9)$$

只考虑方程 (9) 右边的最后一项的贡献, 于是

就有

$$\begin{aligned}\frac{dF_1(x)}{dx} &\sim \int_{\xi}^1 t^{-2} F_0(x/t) dt = x^{-1} \int_x^{\eta\xi} F_0(y) dy \\ &= \int_1^{\eta\xi} F_0(xy) dy\end{aligned}$$

我们知道 $F_0(x)$ 是 x 的奇函数且 $F_0(x=0)=0$, 故有:

$$\begin{aligned}\lim_{\xi \rightarrow 0} \left\{ \lim_{x \rightarrow \pm 0} \left[\int_{\xi}^1 t^{-2} F_0(x/t) dt \right] \right\} &= 0, \text{ 而} \\ \lim_{x \rightarrow \pm 0} \left\{ \lim_{\xi \rightarrow 0} \left[\int_{\xi}^1 t^{-2} F_0(x/t) dt \right] \right\} &= \lim_{x \rightarrow 0} \left[x^{-1} \int_x^{\infty} F_0(y) dy \right] \\ &= \pm \infty\end{aligned}\quad (10)$$

这后一个关系式由 Glazov 给出, 作为所谓“奇点”的证据。事实上, 这正说明了当 ξ 趋于零时 $\frac{dF_1(x)}{dx}$ 的极限不存在, 方程 (9) 与方程 (1) 不等价, 因而是错误的。此外, 在文献中, Glazov 直接对方程 (9) 两边对 x 积分, 得到如下结果:

$$\begin{aligned}F_1(0) &= \int_0^{\infty} dx \frac{\partial F_1(x)}{\partial x} = \int_0^{\infty} dx F_0(x) \times \\ &\int_0^1 t^{-3/2} dt [1 - (1-t)^{0.5} - t^{0.5}] \rightarrow -\infty\end{aligned}\quad (11)$$

但 Glazov 在这里交换了 x 和 t 的积分顺序, 是违反傅比尼定理的^[9]。

至于其他的 $F_L(x)$, 就更不能决定了。因为它们是由 Glazov 方程 (9) 迭代得出的。我们可以把 Glazov 方程 (9) 的解看成是带参量 ξ 的 x 的函数。由于 Glazov 方程 (9) 的右边被积函数中存在 $F_L(x/t^{2m})$, 尽管 $F_L(x)$ 是一个解析函数, 但当 t 趋于 0 时, $F_L(x/t^{2m})$ 就等于将 $F_L(x)$ 向竖直坐标轴 $t=0$ 无限压缩, 致使 $F_L(x)$ 乃至 $F(x)$ 违反材料的平移不变性^[7]。传统的输运方程 (1) 不存在类似问题。这说明 Glazov 奇点 $x=0$ 是由方程本身造成的。

(2) Glazov 数值计算方面的问题

用矩 $F^n(\eta)$ 来重新构造分布函数, 通常用正交函数法。但这些传统方法对计算动量淀积分布效果不好。Glazov 分别引入 $F(x, \eta)$ 和 $F_L(x)$ 的傅立叶变换 $f(x, \eta)$ 和 $f_L(x)$:

$$\begin{cases} f(k, \eta) \\ f_L(k) \end{cases} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} \begin{cases} F(x, \eta) \\ F_L(x) \end{cases} dx \quad (12)$$

以及相应的傅立叶逆变换

$$\begin{cases} F(x, \eta) \\ F_L(x) \end{cases} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \begin{cases} f(k, \eta) \\ f_L(k) \end{cases} dk \quad (13)$$

根据 $F_L(x)$ 函数的偶奇性, 不难知道 $f_{2L+1}(k)$ 一定是 k 的实对称函数; 而 $f_{2L}(k)$ 一定是 k 的虚反对称函数。将 $\exp(-ikx)$ 的泰勒展开式代入到 (16), Glazov 得到:

$$\begin{cases} f(k, \eta) \\ f_L(k) \end{cases} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-ik)^n}{n!} \begin{cases} F^n(\eta) \\ F_L^n \end{cases} \quad (14)$$

我们重复了 Glazov 原文的计算, 对多项式 (14) 进行了 28 位小数、300 阶矩的高精度计算, 结果表明, 当 $k > k_0 \approx 37$ 时多项式 (14) 发散 (如图 1)。

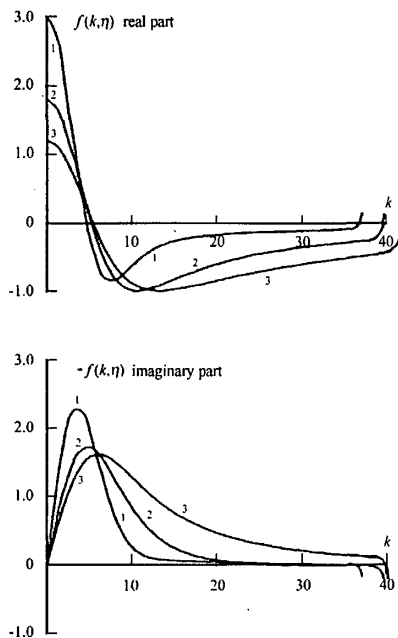


图 1 傅立叶变换 $f(k, \eta)$ 的实部 (上) 和虚部 (下) 对 k 的函数关系。 $m=1/2$, $\eta=1$ (1), $\eta=0.6$ (2), $\eta=0.4$ (3)

Fig.1 Dependencies of the real (up) and imaginary (down) parts of the Fourier transform $f(k, \eta)$ on k . $m=1/2$, $\eta=1$ (1), $\eta=0.6$ (2), $\eta=0.4$ (3)

结果表明当 $k_0 \approx 37$ 时多项式 (14) 发散。此外, 我们将精度提高到 500 位小数、980 阶矩, 发散点也提高到 $k_0 \approx 67$ 。可见 Glazov (原文中公式 (11)) 所得出的如下渐进关系:

$$\begin{aligned}f_L(k) &\sim \begin{cases} \text{const} \tan t \times |k|^{-\frac{1}{2m}} & \text{odd } L, k \rightarrow \pm\infty \\ \text{sgn}(k) \left[\text{const} \tan t \times |k|^{-\frac{1}{2} - \frac{1}{2m}} + \text{const} \tan t \times |k|^{-\frac{3}{2} - \frac{1}{4m}} \right] & \text{even } L, k \rightarrow \pm\infty \end{cases}\end{aligned}$$

是完全不可能的。利用公式(14)的计算结果作 $f(k,\eta)$ 以及 $f_L(k)$ 的傅立叶逆变换,精度显然过低。考虑一个分布函数 $F(x)$, $-\infty < x < \infty$ 。它的傅立叶变换为 $f(k)$, $-\infty < k < \infty$ 。但由于频率受级数(14)发散的限制,仿佛只能通过一个有限的频率窗口来观察。这时, $f(k)$, $-\infty < k < \infty$ 就被代以

$$h(k)=g(k)\cdot f(k)=\begin{cases} f(k), & |k|\leq k_0 \\ 0, & |k|>k_0 \end{cases}$$

此处 $g(k)=\text{rect}(k)$,称为截断函数,它的傅立叶逆变换是 $G(x)=\sin(k_0x)/(\pi x)$ 。这就相当于原来的分布函数 $f(x)$ 被如下分布函数所替代:

$$H(x)=\int_0^x G(y)F(x-y)dy$$

它的效果就是把 $f(x)$ 平滑化,从而破坏了分布函数的精细结构,尤其在原点 $x=0$ 附近。由截断函数的傅立叶逆变换 $G(x)=\sin(k_0x)/(\pi x)$,我们可以将 $\pi/k_0\equiv\Delta x$ 看成约化深度 x 的分辨区间。可见,频域区间与约化深度 x 的分辨区间存在着测不准关系

$$k_0\Delta x=\pi \tag{15}$$

当然希望 Δx 越小越好。如果 k_0 趋于无穷大, Δx 就趋于0,那么 $G(x)=\delta(x)$ 。于是, $H(x)=F(x)$ 就是严格的了。对于使用有限个矩、有限精度的数值计算而言, k_0 趋于无穷大是不可能的,就是说, Δx 不可能为0。事实上,由傅立叶变换立即可得

$$\left\{ \begin{matrix} F(0,\eta) \\ F_L(0) \end{matrix} \right\} = \int_{-\infty}^{\infty} dk \left\{ \begin{matrix} f(k,\eta) \\ f_L(k) \end{matrix} \right\}$$

$F(0,\eta)$ 和 $F_L(0)$ 的严格计算要求为 $k_0\rightarrow\infty$,或者 $\Delta x=0$,尤其当 $L=1,3,5,7,\cdots$, $F_L(x)$ 为偶函数时。如图1所示,Glazov的计算结果为 $k_0<40$ 。测不准关系(15)给出其约化深度 x 的分辨区间 $\Delta x\approx 0.1$ 。

2 利用 Padé 逼近计算动量淀积分布函数

前面讨论了用多项式(14)逼近 $f(k,\eta)$,但逼近效果差。假定 $f(z)\equiv\sum_{i=0}^{\infty}c_i z^i$ 在 $(-a,a)$ 上具有 $N=n+m+1$ 阶导数,如果有理函数

$$R_{nm}(z)=\frac{a_0+a_1z+\cdots+a_nz^n}{1+b_1z+\cdots+b_mz^m}=\frac{P_n(z)}{Q_m(z)} \tag{16}$$

其中, $P_n(z)$ 与 $Q_m(z)$ 互质,且满足条件

$$R_{nm}^{(j)}(0)=f^{(j)}(0), \quad j=0,1,2,\cdots,n+m$$

则称 $R_{nm}(z)$ 为函数 $f(z)$ 在 $z=0$ 处的 (n,m) 阶 Padé 逼近,记作 $R(n,m)$ 。可以证明:有理函数 $R_{nm}(z)$ 是 $f(z)$ 的 (n,m) 阶 Padé 逼近的充要条件是多项式 $P_n(z)$ 以及 $Q_m(z)$ 的系数 $a_0,a_1,\cdots,a_n$ 及 $b_1,b_2,\cdots,b_m$ 由以下求解 Padé 方程给出:

$$\begin{pmatrix} c_m & c_{m-1} & \cdots & c_{m-n+1} \\ c_{m+1} & c_m & \cdots & c_{m-n+2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{m+n-1} & c_{m+n-2} & \cdots & c_m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} c_{m+1} \\ c_{m+2} \\ \vdots \\ c_{m+n} \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ c_1 & c_0 & 0 & \cdots & 0 \\ c_2 & c_1 & c_0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_m & c_{m-1} & c_{m-2} & \cdots & c_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix}.$$

如果矩阵中 c 的下标 $j<0$,则令 $c_j=0$ 。鉴于 $R_{nm}(z)$ 是 z 的有理函数,它的傅立叶逆变换是很容易求出的。基于 Padé 逼近,根据矩 $\left\{ \begin{matrix} F^n(\eta) \\ F_L^n \end{matrix} \right\}$,可以重建

$$\left\{ \begin{matrix} f(k,\eta) \\ f_L(k) \end{matrix} \right\}, \quad \text{只须令 } c_n \equiv \frac{1}{n!} \left\{ \begin{matrix} F^n(\eta) \\ F_L^n \end{matrix} \right\} \text{ 即可。}$$

我们利用数值计算软件 Maple9.5 对多项式(14)进行了500位小数、980阶矩的 Padé 逼近 $R(490,490)$ 高精度计算。结果表明至少当 $k<630$ 时 $f(k,\eta)$ 以及 $f_L(k)$ 均不发散。测不准关系(15)给出其约化深度 x 的分辨区间 $\Delta x\approx 0.005$ 。图2中实线表示直接由 $F^n(\eta)$ 计算得出的 $f(k,\eta)$,图3中实线表示直接由 F_L^n 计算得出的 $f_L(k)$,这里 $L=0,1,2,3,4,5,6,7$ 。计算表明:当 $L>20$ 时, $|f_L(k)|<0.001$,所以,基本上可以不计。事实上,若略去 $f_{L>20}(k)$, (7)式简化为

$$f(k,\eta)=\sum_{L=0}^{20} (2L+1)P_L(\eta)f_L(k) \tag{17}$$

图2中虚线表示由(17)式计算得出的 $f(k,\eta)$ 。可见,两者吻合得很好。

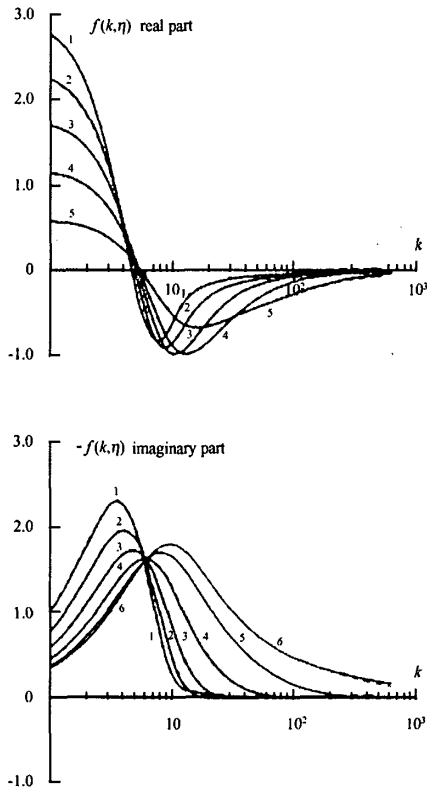


图2 傅立叶变换 $f(k, \eta)$ 的实部 (上) 和虚部 (下) 对 k 的函数关系。 $m=1/2$, $\eta=1$ (1), $\eta=0.8$ (2), $\eta=0.6$ (3), $\eta=0.4$ (4), $\eta=0.2$ (5), $\eta=0$ (6)

Fig.2 Dependencies of the real (up) and imaginary (down) parts of the Fourier transform $f(k, \eta)$ on k . $m=1/2$, $\eta=1$ (1), $\eta=0.8$ (2), $\eta=0.6$ (3), $\eta=0.4$ (4), $\eta=0.2$ (5), $\eta=0$ (6)

3 结论

(1) 本文仔细分析了 Glazov 提出的动量淀积分布函数解析理论, 发现该理论的基本方程是错误的, 并找出 Glazov 文的错误根源。可见以 Glazov 文中错误的基本方程为基础所推出的一切其他结论都是不可靠的。

(2) 本文重复了 Glazov 的数值计算工作, 发现 Glazov 文中所用的 28 位精度 300 阶矩计算远远达不到 Glazov 文中所给出的结论以及图示。

(3) 本文提出并实施了利用 Padé 逼近以及高精度数值计算 (500 位小数, 980 阶矩) 可以提高计算效果 10 倍以上。

(4) 本文利用 Padé 逼近以及高精度数值计算的计算结果表明: 就 $m=1/2$ 的动量淀积分布函数 $F(x, \eta)$ 而言, 其勒让德展开式 (7) 中, $f_{L>20}(x)$ 基本上可以忽略不计。

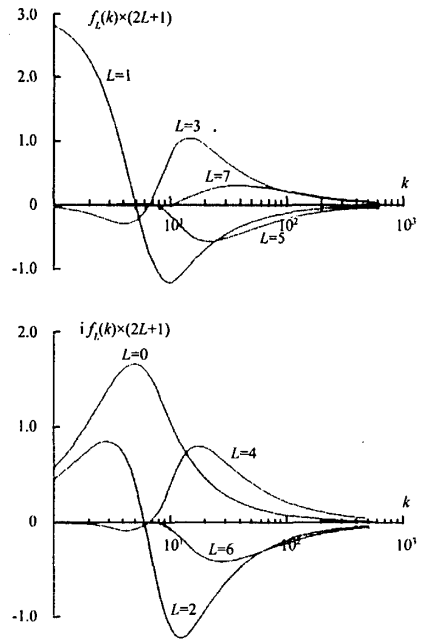


图3 傅立叶变换 $f_L(k)$ 对 k 的函数关系, 这里, $L=0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7$, $m=1/2$

Fig.3 Dependencies of the Fourier transform $f_L(k)$ on k , here, $L=0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7$. $m=1/2$

参考文献

- 1 Zhang Z L. Nucl Instr Meth B, 1999, 149: 272—284
- 2 Zhang Z L. Nucl Instr Meth B, 1999, 152: 252—266
- 3 Glazov L G. J Phys Condens Matter, 1994, 6: 4181—4196
- 4 Glazov L G. J Phys Condens Matter, 1994, 6: 10647—10658
- 5 Glazov L G. J Phys Condens Matter, 1995, 7: 6365—6377
- 6 Sckerl M W, Sigmund P, Vicanek M K. Dan Vidensk Selsk Mat Fys Medd, 1996, 44(3): 1—63
- 7 Zhang Z L. Chin Phys, 2002, 11(4): 389—392
- 8 Winterbon K B, Sigmund P, Sanders J B K. Dan Vidensk Selsk Mat Fys Medd, 1970, 37(14): 1—73
- 9 Zhang Z L. Nucl Instr Meth B, 2001, 179: 24—28

Research on momentum deposition depth distribution based on analytical and numerical methods

ZHANG Lai¹ XU Feng² ZHANG Zhulin²

1 (Department of Computer Science and Technology, Anhui University of Science and Technology, Huainan 232001)

2 (Department of Mathematics and Physics, Anhui University of Science and Technology, Huainan 232001)

Abstract Based on both analytical and numerical methods, the authors have investigated a theory proposed by Glazov in 1994 for finding the depth distributions of momentum deposition by atomic particles in elastic collisions. It is shown that the integro-differential equations derived by Glazov are incorrect because of the “entanglement” of two original independent variables. The “singularity” of the distributions at the target surface originated from the “entanglement”. The traditional Boltzmann transport equation of the depth distributions of momentum deposition cannot be equivalent to the Glazov’s equation. Therefore, all of the results derived from the Glazov’s equation turned out to be questionable. On the other hand, the numerical calculations with high accuracy (usually the moments were found up to $n=300$ with 28-decimal-digits precision) published by Glazov at the same time were repeated in this work, and it was shown that the Glazov’s numerical results were not accurate enough to reproduce most of figs in his work. In this work, the Padé approximation has been used with higher accuracy (the moments found up to $n=980$ with 500-decimal-digits precision) to compute the Fourier transform of the momentum deposition depth distribution functions $f(k, \eta)$ and $f_L(k)$. Our numerical results show that the Padé approximation is a powerful tool to research these depth distribution functions.

Key words Transport equation, Momentum deposition depth distribution, Padé approximation

CLC O571.33