

산란 및 투과된 수소 이온의 분자 전산 연구 I. 니켈 (100) 표면의 직각 입사

서승혁, 민웅기

계명대학교 화학공학과

Molecular Simulation Studies of Scattered and Penetrated Hydrogen Ions I. Normal Incident Angle to Ni (100) Surface

Soong-Hyuck Suh, Woong-Ki Min

Department of Chemical Engineering, Keimyung University, Taegu 704-701, Korea

Abstract

Molecular dynamics simulations have been carried out to investigate the scattering and penetration properties of hydrogen ions with the normal incident angle to Ni (100) surface. The initial kinetic energies of hydrogen ions range from 100 to 1,600 eV. The simulation results are used to assess the applicabilities of theoretical predictions based on the binary collision approximation, and, in the high kinetic regime, theoretical results for scattering energies were shown to be a good agreement with molecular simulations. The angle dependencies on both scattering and penetration distributions were found in the longitudinal direction, but not in the azimuthal direction except for the high kinetic energy of 1,600 eV.

1. 서론

이온 및 원자의 고체 표면에서 산란(scattering) 또는 투과(penetration) 특성은 미세공 박막 제조, 금속 표면 분석, 반도체 표면 개질 등 다양한 분야에서 응용되고 있다. 일반적으로 수 십 내지 수 백 eV 이상의 운동 에너지를 갖는 충격 이온의 고체 표면 구성 원자와의 충돌 효과는 강체형 동력학(hard-sphere dynamics)이 주된 요인이 되는 이원자 충돌(binary collision)에 의하여 설명될 수 있으며, 이러한 이론식은 금속 표면 원자의 물리 화학적 특성값을 측정하는 이온 산란 분광법(ion scattering spectroscopy)의 기초가 되고 있다.¹⁾ 그러나 충격 이온과 표면 구성 원자와의 질량비가 증가할수록, 또는 원자 상호 인력이 증가할수록 다중 충돌 효과가 증대되어 단순 이원자 충돌에 근거한 이론식은 많은 제약점과 한계점을 지니고 있다. 예를 들어, 실리콘 표면에 크세논 또는 세슘 이온을 충격시킬 경우 이원자 이론식에 의한 최대 산란각은 약 12°이며, 대부분 실제 실험에서 사용되는 직각 산란 측정법을 이용할 경우 다중 충돌에 의한 굴절 이온들만이 검출될 수 있다.

실험 결과와 이론식과의 직접 비교 검증은 고체 표면 특성에 따르는 복합 인자 이외에도 발사(projectile) 이온 또는 원자 및 고체 표면을 구성하는 표적(target) 원자 상호 간의 척력적 및 인력적 영향을 포함한 분자 단위의 매우 정밀한 실험이 요구된다. 실제 실험에 수반되는 어려움을 극복하기 위하여 최근에는 실제 실험을 대체할 수 있는 방법으로 분자 전산 모사(molecular simulation)에 의한 사고 실험(thought experiment)이 다양하게 수행되고 있으며, 이론적 및 실험적 측면에서 이를 이용하려는 연구가 활발하게 진행되고 있다. 이러한

고체 표면에서 이온 또는 원자의 충돌 현상에 관한 분자 전산 모사 및 응용을 포함한 최근 동향은 Urbassek의 총설²⁾ 및 Smith 등의 저서³⁾에 체계적으로 기술된 바 있다.

충돌 이온의 정적 및 동적 특성을 분자 단위 차원에서 직접 재현할 수 있는 분자 전산 모사 기법은 크게 나누어 확률론적인 Monte Carlo(MC) 기법과 결정론적인 molecular dynamics(MD) 기법의 두 가지 방법으로 대별된다.⁴⁾ Gibbs의 앙상블 평균(ensemble average) 개념을 기초로 하는 MC 방법은 단지 정적 열역학 모사값만을 재현하는 단점이 있으나 양자적 에너지 효과를 포함한 다양한 포텐셜 함수에 적용할 수 있다. 한편, Boltzmann의 시간 평균(time average) 개념 하에서 원자 또는 분자의 운동 궤적을 고전 동력학으로부터 직접 계산하는 MD 방법은 MC 방법으로는 구할 수 없는 계의 시간 지배 특성치를 포함한 동적 상태를 직접 구현할 수 있다는 장점이 있다.

본 연구에서는 다양한 에너지 범위를 갖는 충격 이온의 고체 표면에서 산란 및 투과 특성을 체계적으로 고찰하려는 바, MD 분자 전산 방법을 적용하여 수소 이온을 니켈 금속 표면에 모의 실험을 수행하고 이로부터 계산된 수소 이온의 산란 및 투과에 따른 운동 에너지 분포도, 산란 및 투과의 평균각 변화 등 에너지 및 방향성에 지배되는 통계 열역학적 특성값들을 분자 차원에서 측정하였다. 이러한 전산 모의 실험은 일반 실험에서 검증하기 어려운 높은 에너지를 갖는 충격 이온의 미시적 동적 효과를 해석하는데 가장 이상적인 재현 방법으로, 금속 표면이 갖는 구조적 특성을 이해하고 거동 이온의 동적 특이 현상을 규명하는데 확대 적용될 수 있을 것이다.

2. 전산 모사 방법

MD를 포함한 분자 전산 모사에 필요한 미시적 분자 거동은 단지 분자 간의 에너지 포텐셜에 의하여 계산될 수 있다. 본 전산 모사에서 수소 이온 및 니켈 원자의 상호 에너지 포텐셜은 다음과 같은 Ziegler-Biersack-Littmark(ZBL) 형태의 척력적 screened-Coulomb 에너지 함수에 의하여 주어졌다.

$$V^{ZBL}(r_{ij}) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \sum_{k=1}^{\infty} b_k \exp\left(-c_k \frac{r_{ij}}{a_0}\right) \quad (1)$$

여기에서 Z_1 과 Z_2 는 수소 이온과 니켈의 원자 번호이며, r_{ij} 는 수소 이온과 니켈 원자의 상대 거리, e 와 ϵ_0 는 각각 전자 전하량 및 진공 상태에서의 유전율을 의미한다. 전자 분포에 따른 에너지 보정항을 포함한 ZBL 포텐셜의 b_i 값 및 c_i 값은 보편 상수 값(universal constant)으로 문헌에 나타난 바와 같으며,^{3,5)} 또한 전기적 차폐 길이(screened length) a_0 는 Bohr의 수소 원자 반경 a_B 를 포함한 아래 식으로부터 계산되었다.

$$a_0 = \frac{0.8853 a_B}{Z_1^{0.21} + Z_2^{0.23}} \quad (2)$$

또한, 니켈 자체 상호 에너지 포텐셜은 상대 거리 1.5 Å 이내 구간에서는 위와 유사한 니켈 원자에 대한 ZBL 형태의 척력적 에너지로 계산되었으며, 상대 거리 3.0 Å 이상 구간에서는 아래와 같은 Morse 형태의 인력적 에너지 포텐셜이 사용되었다.

$$V^{Morse}(r_{ij}) = D \exp(-2\alpha(r_{ij} - r_0)) - 2D \exp(-\alpha(r_{ij} - r_0)) \quad (3)$$

위 식에서 D , α 및 r_0 는 니켈 원자에 대하여 각각 0.4205 eV, 1.42 \AA^{-1} , 2.78 \AA 으로 주어졌다. 동시에 원자 상대 거리 1.5~3.0 Å의 두 구간 사이에서 에너지 포텐셜은 멱급수 형태를 갖는 spline 함수로부터 계산되었다. 본 전산 모사에서 사용한 니켈 에너지 포텐셜은 Gaussian basis set 6-31G를 적용

한 양자 역학적 restricted Hartree-Fock 계산 결과와 직접 비교하여 최소 에너지에서 니켈 원자의 평형 거리가 약 2.8 Å이 되도록 하였다. 이러한 spline 형태의 에너지 포텐셜은 전산 이온 충격 실험에 널리 이용되고 있다.^{6,8)}

시간 진행에 따른 수소 이온 및 구성 니켈 원자의 MD 궤적은 각각의 위치 벡터, 속도 벡터 및 힘 벡터를 포함한 Verlet 알고리즘을 이용하여 Newton 운동 방정식을 $2 \times 10^{17} \sim 4 \times 10^{17}$ 초의 일정 시간 간격에 따라 반복 적분하였다.⁹⁾ 발사 이온과 표적 원자는 충돌 후 운동량이 보존되는 완전 탄성 충돌(elastic collision)을 하며, 원자 당 유효 포텐셜 거리는 니켈 원자의 반경 분포 함수(radial distribution function)의 두 번째와 세 번째 봉우리의 중간에 위치하도록 3.9 Å에 설정하였다. 또한, 전산 소요 시간을 최적화하기 위하여 상호 원자들의 neighbor list를 적용하고 이를 매 10 회 시간 간격마다 재작성하였다. 본 전산 실험에서는 발사 이온의 초기 에너지 조건에 따라 20~100 femto second(fs)까지 모사 궤적을 구현하였다.

고체 니켈 원자들은 격자 상수(lattice constant)가 3.524 Å인 면심 입방체 구조의 FCC(face-centered cubic) 형태를 가지며, 본 전산 실험에서는 FCC (100) 방향을 갖는 xy-축 평면에 11×11 개의 니켈 원자들로 배열되어 있으며 동시에 z-축 수직 하향 방향으로 7 층(layer)의 높이로 이루어진 총 847 개의 니켈 원자로 구성하였다. 300 K 온도에서 니켈 원자들의 초기 평형 상태를 구현하기 위하여, 니켈 원자의 고체 진동 에너지를 고려한 Debye 온도에서 계산된 평균 근제곱 변위를 표면 수직 방향 0.122 Å, 표면 수평 방향 0.08 Å 및 벌크 방향 0.062 Å의 값들로 니켈 원자들의 위치를 단위 격자점으로부터 무작위 변위하였다.

한편, 발사 수소 이온의 초기 위치는 니켈 평면의 수직 축 상향 방향으로 4.0 Å 높이에 위치하였으며, 수소 이온의 입사각은 니켈 평면의 xy-축 방향에 대하여 90°로 정면 수직으로 충격하였다. 초기 수소 이온의 운동 에너지 범위는 100~1,600 eV으로 주어졌으며, 이와 같은 에너지 범위에서 니켈 원자의 자체 운동은 발사 수소의 속도에 비하여 거의 무시될 수 있다. 통계적 오차를 줄이기 위하여 약 $1.246 \times 1.246 \text{ \AA}^2$ 의 단위 충격 지역(impact zone)에 40×40 개의 주사 점을 일정 간격으로 설정하고 동일한 에너지 조건을 갖는 수소 이온에 대하여 총 1,600 번의 반복 충격 실험을 수행하였다.

3. 결과 및 고찰

MD 전산 실험으로 구현된 초기 수소 에너지 조건 E_0 에서 산란을 Y_s , 산란 및 투과 수소 이온의 평균 에너지 $\langle E \rangle$, 산란 및 투과 수소 이온의 길이(longitudinal) 방향 평균 측정각 $\langle \theta \rangle$, 방위(azimuthal) 방향 평균 측정각 $\langle \phi \rangle$ 등을 Table 1에 수록하였다. 이들 평균값에 나타나는 하첨자 s 및 l 는 각각 산란 및 투과를 의미한다. 한편, θ 는 니켈 xy-투영면으로부터 직각 z-축 방향으로 측정된 값으로 0~90°의 범위를 가지며, ϕ 는 FCC (100) 방향에서 (110) 방향으로 측정각으로 0~45°의 범위를 갖는다.

Fig. 1(a) 및 (b)에 $E_0=100 \text{ eV}$ 및 $E_0=1,600 \text{ eV}$ 의 발사 수소에 대한 4×4 개의 특정 궤적을 xz-평면에 도식화하였다. 100 eV의 낮은 발사 에너지를 갖는 수소 이온 궤적은 1,600 eV의 높은 발사 에너지 경우보다 높은 산란을 또는 낮은 투과율을 보이고 있으며, 특히 낮은 에너지를 갖는 수소

이온은 상층부 표면 니켈 원자 층과 다중 충돌이 두드러짐을 보이고 있다. 이러한 다중 충돌 투과 효과는 Table 1에서 알 수 있는 바와 같이 발사 에너지에 대한 투과 수소 이온의 에너지값 차이, 즉 E_0 증가에 따른 $E_0 - \langle E_p \rangle$ 값의 감소로 설명될 수 있다. 이는 낮은 발사 에너지를 갖는 수소 투과 이온의 경우 니켈 구성 원자와 보다 많은 충돌을 일으키며 이에 기인되는 니켈 원자로의 점진적인 충돌 에너지 전달을 의미한다.

완전 탄성 충돌 조건에서 이원자 충돌에 의한 운동학적 이론식에 의하면,³⁾ 초기 운동 에너지 E_0 를 갖는 발사 이온의 충돌 후 운동 에너지 E_1 은 충돌 반사각 ϕ 에 대하여 다음과 같은 관계식을 갖는다.

$$E_1 = E_0 \left(\frac{M_1}{M_1 + M_2} \right)^2 \left(\cos \phi \pm \left[\left(\frac{M_2}{M_1} \right)^2 - \sin^2 \phi \right]^{1/2} \right)^2 \quad (4)$$

여기에서 M_1 과 M_2 는 각각 발사 이온 및 표적 원자의 질량을 의미한다. 식 (4)의 오른쪽 항에 포함된 \pm 부호는 $M_2/M_1 > 1$ 인 상대 질량이 작은 발사 이온의 경우 양의 부호만을 가지며, 따라서 $\phi=90^\circ$ 로 주어지는 backscattering 조건에서 발사 이온의 충돌 후 운동 에너지 E_b 는 다음과 같이 계산될 수 있다.

$$E_b = E_0 \frac{M_2 - M_1}{M_2 + M_1} \quad (5)$$

Fig. 2(a) 및 2(b)에 각각 산란 및 투과된 충돌 수소의 평균 에너지 및 발사 에너지에 대한 평균 에너지비를 발사 에너지 E_0 의 함수로 나타내었다. 산란 평균 에너지 $\langle E_s \rangle$ 및 투과 평균 에너지 $\langle E_p \rangle$ 는 E_0 의 증가에 따라 선형적인 증가를 보이고 있으며, 또한 투과 평균 에너지비 $\langle E_p \rangle / E_0$ 는

E_0 의 증가에 따라 1.0에 근접한다. 특히, Fig. 2(a)에 나타난 산란 평균 에너지비 $\langle E_s \rangle / E_0$ 의 값들은 발사 에너지가 증가함에 따라 이원자 충돌식에 근거한 식 (5)에 접근함을 보이고 있으며, 이는 높은 에너지의 수소 이온이 니켈 원자와 산란 충돌하는 경우 이원자 강제구 충돌 효과가 주된 요인임을 보여주고 있다. 반면 낮은 발사 에너지를 갖는 수소 이온에서의 산란 충돌 효과는 니켈 구성 원자와 척력적 포텐셜에 의한 영향이 큼을 알 수 있다. 이러한 산란 및 투과 특성은 Kim 등^{10,11)}에 의하여 10~500 eV의 범위를 갖는 다양한 불활성 충돌 이온을 니켈 (100) 표면에 입사각 45°로 모의 충격 실험한 전산 결과와 일치함을 보이고 있다. 이들의 전산 결과에 의하면 헬륨 및 네온 등 질량이 작은 발사 이온은 이원자적 충돌 효과에 의하여 발사 에너지 증가에 따른 평균 산란 에너지의 선형적 증가 경향을, 반면 크세논과 같이 질량이 큰 발사 이온은 구성 원자 충돌의 충돌 에너지 전달에 기인되는 평균 산란 에너지의 감소 경향을 보여주었다.

Fig. 3(a)부터 3(c)에 각각 $E_0=100, 400$ 및 1,600 eV를 갖는 발사 수소에 대한 산란 및 투과의 막대형 확률 분포 곡선을 구간별 에너지 함수로 도식화하였다. 산란의 경우가 투과의 경우에 비하여 상대적으로 광범위한 분포를 보이고 있으며, 동시에 산란 및 투과의 모든 경우 낮은 에너지의 발사 수소가 높은 에너지의 발사 수소에 비하여 보다 광범위한 분포도를 갖는다. $E_0=100$ eV의 경우 산란 및 투과의 다양한 에너지 분포는 니켈 원자 충돌과의 다중 충돌 효과에 기인되며, 낮은 에너지 구간에서 긴 꼬리형 분포는 셋째 층 이하 니켈 원자들과의 상호 충돌 가능성을 내포하고 있다. 이러한 다중 충돌 효과는 산란의 경우 $E_0=400$ eV에서

나타나는 반면 투과의 경우 대부분의 수소 이온들은 자체 발사 에너지를 유지하고 있다. $E_0=1,600$ eV의 산란 확률 분포도에서 높은 에너지 구간에서 피크값은 정면 충돌 후 산란 특성을 의미하고 있으며, 투과 수소는 거의 강제형 충돌이 없이 투과되고 있음을 보이고 있다. 한편, Fig. 3(c)에서 투과 특성은 단순 피크 형태로 나타내고 있으나 이는 단지 큰 유한 구간을 적용한 확률 분포도 때문이며, 실제 실험에 의한 4 keV에서 알루미늄 박막 및 금 박막을 통과하는 수소 이온의 투과 에너지 분포도는 가우스 (Gauss) 형태의 분포 특성을 갖는다고 보고되고 있다.¹²⁾

발사 에너지 E_0 의 변화에 따른 산란 및 투과 수소의 방향성을 조사하기 위하여 Fig. 4(a)에 길이 방향에 대한 산란 및 투과 평균각을, 또한 Fig. 4(b)에 방위 방향에 대한 산란 및 투과 평균각을 도식화하였다. 여기에서 사용된 열린 원과 닫힌 원은 각각 산란과 투과의 경우에 해당된다. Fig. 4(a)에 나타나는 길이 방향 특성은 산란 평균각의 경우 발사 에너지 증가에 따라 선형적 감소 경향을, 투과 평균각의 경우 지수적 증가 경향을 보이고 있다. 즉, E_0 가 증가할수록 산란 수소는 니켈 평면 방향으로의 수평 방향 궤적 특성을, 반면 투과 수소는 수직 방향 궤적 특성을 보이고 있다. 한편, 방위 방향 평균각에 대하여서는 Fig. 4(b)에 표시된 바와 같이 상호 특정적 상관 관계가 나타나지 않고 있다.

이러한 발사 에너지 증가에 따른 반사각 및 투과각의 방향성 변화 추세는 Fig. 5 및 Fig. 6에 나타나는 산란 및 투과에 대한 막대형 확률 분포 곡선 및 에너지 분포 곡선과 함께 설명될 수 있다. Fig. 5의 길이 방향 분포 함수는 $\cos \theta$ [0,1] 구간에 대하여 25 개의 동일 구간으로 나누었으며, Fig. 6

의 방위 방향 분포 함수는 ψ [$0^\circ, 45^\circ$] 구간에 대하여 9 개의 동일 구간으로 나누어 계산하였다. 직각으로 투사된 낮은 발사 에너지를 갖는 충돌 수소는, Fig. 5(a)의 $E_o = 100$ eV에서 나타나는 바와 같이, 길이 방향 각에 대하여 넓은 범위의 산란 및 투과의 방향성 분포를 갖는다. 이 경우 산란각 $\cos \theta$ 에 대한 에너지는 균일하게 분포하나, 투과의 경우 니켈 평면 층에 대하여 직각 방향으로 투과된 경우가 평행 방향으로 투과된 경우에 비하여 보다 높은 에너지를 가지며 투과각이 감소할수록 선형적 감소 추세의 에너지 분포를 갖는다. 반면, Fig. 5(b)의 $E_o = 1,600$ eV 경우와 같이 높은 발사 에너지에서는 보다 제한적인 산란각 및 투과각 범위를 갖는다. 산란의 경우 나타나는 비연속적 분포는 단지 통계적인 이유이다. 즉, $E_o = 1,600$ eV의 조건에서 발사 수소는 총 1,600 회의 반복 모사 중 대부분 투과하고 산란의 경우는 단지 15 회에 지나지 않기 때문이다. 높은 에너지 조건에서 산란 평균각은 니켈 평면 축으로부터 평균값이 약 32° 인 사선 방향으로 일어나며 투과 평균각은 평균값이 약 84° 인 직각 방향성을 갖는다. 한편, 에너지 분포 곡선은 낮은 발사 에너지 조건과 유사한 특성을 보이고 있다. 즉, 산란의 경우에서 에너지 분포는 특정 방향성을 갖지 않으나, 투과의 경우에는 비록 낮은 발사 에너지에 비하여 변화율은 미미하나 직각 방향으로 투과된 수소가 평행 방향의 투과 수소에 비하여 높은 에너지 분포를 보이고 있다.

Fig. 6에 도식화한 바와 같이 확률 및 에너지 분포 곡선에서의 방위 방향각 ψ 에 대한 특정 방향성은 길이 방향각 θ 에 비하여 상대적으로 매우 적다. 이러한 주된 이유는 수소 이온의 니켈 원자에 대한 유효 충돌 지름(effective collision diameter)이 매우 작

기 때문이며, 이러한 조건에서 충돌 반사는 특히 산란의 경우 무작위적 방향각을 갖는다. 또한, 낮은 운동 에너지를 갖는 수소 이온은 대부분 니켈 원자 층과 다중 충돌 후 산란 및 투과를 하기 때문에 특정 방향성이 유지되기 어렵다. 따라서 유효 충돌 지름이 증가할수록 무작위적 반사 효과 및 다중 충돌 효과가 감소될 것이며 동시에 특정 산란 방향성은 증대될 것이다. Fig. 6에 모든 조건에 대한 결과를 도시화하지 않았으나 전체적인 분포 특성을 살펴볼 때 $E_o = 800$ eV 이하에의 조건에서는 방위 방향에 대한 특징적인 변화가 없으며, 확률 및 에너지 분포는 평균값에 대응하는 균일한 분포를 보이고 있다. 이러한 결과는 Karolewski가 발표한 격자 상수가 큰 Ca (100) 원자 층에 투사한 4 keV 에너지를 갖는 아르곤 이온에 대한 전산 모사 결과와 유사한 결과이다.⁷⁾ 한편, 투과의 경우 Fig. 6(b)에서 나타난 바와 같이 $E_o = 1,600$ eV에 대한 투과 확률 분포 곡선에서 $\psi = 0^\circ$ 에서 $\psi = 45^\circ$ 로, 즉 (100) 방향에서 (110) 방향으로 투과 수소의 증가 추세를 보이고 있다. 여기에서 에너지 분포 곡선은 평균 투과 에너지값인 약 1599 eV에 해당하는 균일 분포를 보이고 있다. 측정된 투과 수소의 길이 방향 평균각은 약 84° 로 니켈 평면에 수직적인 운동을 하며, 따라서 속도 벡터 성분은 수직 z-축으로 큰 값을 가지며 ψ 방향의 속도 벡터 성분은 상대적으로 매우 작은 값이다. 이러한 경우 강체구 충돌에 가까운 높은 발사 에너지의 투과 수소는 비교적 용이하게 자유 체적이 큰 (110) 방향으로 투과 진행할 수 있으나, 반면 낮은 발사 에너지의 경우 ψ 방향의 속도 벡터 성분이 증가하여 자체 방향성이 감소하게 됨을 알 수 있다.

4. 결론

본 연구에서는 MD 분자 전산 모사 기법을 이용하여 100~1,600 eV 범위의 초기 발사 에너지를 갖는 충격 수소 이온을 니켈 FCC (100) 표면 층에 수직 주사하고, 산란 및 투과된 충격 수소 이온의 에너지 변화율 및 방향성에 따르는 분포 특성을 분자 차원에서 조사하였다. 산란 및 투과된 수소 이온의 평균 에너지는 발사 에너지가 증가함에 따라 선형적으로 증가함을 보였으며, 또한 높은 발사 에너지의 경우 산란 평균 에너지비는 이원자 충돌식에 근거한 이론식에 근접하였다. 구간별 에너지 분포 함수는 낮은 에너지 발사 수소가 높은 에너지 발사 수소에 비하여 보다 광범위한 분포를 보이고 있으며, 이는 낮은 운동 에너지를 갖는 투과 수소의 경우 니켈 상층부 원자들과의 다중 충돌에 의한 전달 에너지 증가를 의미한다. 한편, 산란 및 투과 수소는 길이 방향에 대하여 산란 평균각의 선형적 증가 및 투과 평균각의 지수적 증가 등 방향적 특성을 보였으나, 방위 방향의 분포 함수는 1,600 eV 조건에서 확률 분포 함수를 제외하고 특징적인 방향성이 나타나지 않았다. 본 연구에서 조사된 충격 수소 이온의 에너지 및 방향성 특성은 니켈 표면 특성과 매우 밀접한 관계가 있으며, 표면 원자 층의 변화 및 주사각 변화 등에 따른 충돌 특성 모사 결과는 추후 연속 보문으로 발표할 예정이다.

후기

본 연구는 한국과학재단 및 교육부 BK21(핵심분야)의 학술 연구비 지원과 연구개발정보센터의 전산 지원에 의하여 수행되었으며, 이에 감사드립니다.

참고 문헌

1. J. B. Hudson, "Surface Science: An Introduction", Butterworth-Heinemann, Boston, (1992)
2. H. M. Urbassek, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B, 122(1997), 427
3. R. Smith (ed.), "Atomic and Ion Collisions in Solids and at Surfaces", Cambridge Univ. Press, U.K., (1997).
4. M. P. Allen and D. J. Tildesley, "Computer Simulation of Liquids", Clarendon Press, Oxford, (1987)
5. W. D. Eckstein, "Computer Simulation of Ion-Solid Interactions", Springer-Verlag, Berlin, (1991).
6. M. A. Karolewski, Surf. Sci., 440(1999), 87
7. M. A. Karolewski, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B, 159(1999), 28
8. Z. B. Guvenc, Y. Hundur and R. Hippler, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B, 164(2000), 241
9. K. Nordlund, Comp. Mat. Sci., 3(1995), 448
10. C. Kim, H. Kang and S. C. Park, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B, 95(1995), 695
11. M. C. Yang, C. Kim, H. W. Lee and H. Kang, Surf. Sci., 357(1996), 595
12. M. Fama, G. H. Lantschner, J. C. Eckardt, C. D. Denton and N. R. Arista, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B, 164(2000), 241

Table 1. System characteristics and MD simulation results

| E_0 [eV] | Y_s [-] | $\langle E_s \rangle$ [eV] | $\langle E_p \rangle$ [eV] | $\langle \theta_s \rangle$ [°] | $\langle \varphi_s \rangle$ [°] | $\langle \theta_p \rangle$ [°] | $\langle \varphi_p \rangle$ [°] |
|------------|-----------|----------------------------|----------------------------|--------------------------------|---------------------------------|--------------------------------|---------------------------------|
| 100 | 0.3705 | 90.6 | 94.5 | 47.1 | 24.9 | 60.1 | 24.2 |
| 200 | 0.1461 | 186.4 | 196.1 | 42.7 | 25.4 | 69.9 | 24.1 |
| 400 | 0.0683 | 375.9 | 397.1 | 39.3 | 24.5 | 76.6 | 24.2 |
| 800 | 0.0239 | 759.5 | 798.2 | 38.2 | 23.3 | 80.9 | 23.1 |
| 1,600 | 0.0094 | 1528.2 | 1598.7 | 31.6 | 26.2 | 84.0 | 29.5 |

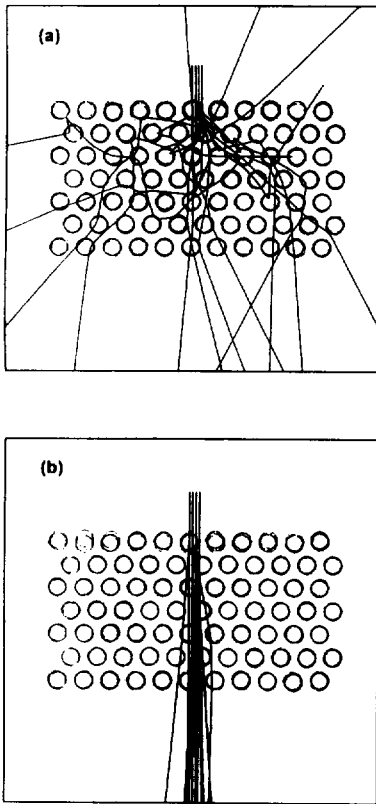


Fig. 1. Trajectory visualization for hydrogen ion bombardment on Ni (100) surface on the xz -plane; (a) $E_0 = 100$ eV and (b) $E_0 = 1,600$ eV.

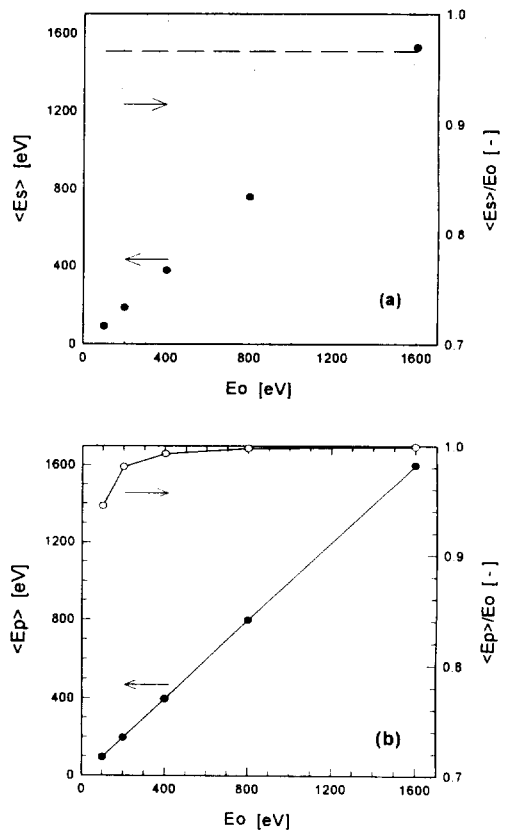


Fig. 2. Mean energies as a function of E_0 ; (a) scattering mean energies and (b) penetration mean energies. The long-dashed line in Fig. 2(a) represents the binary collision approximation in Eq. (5).

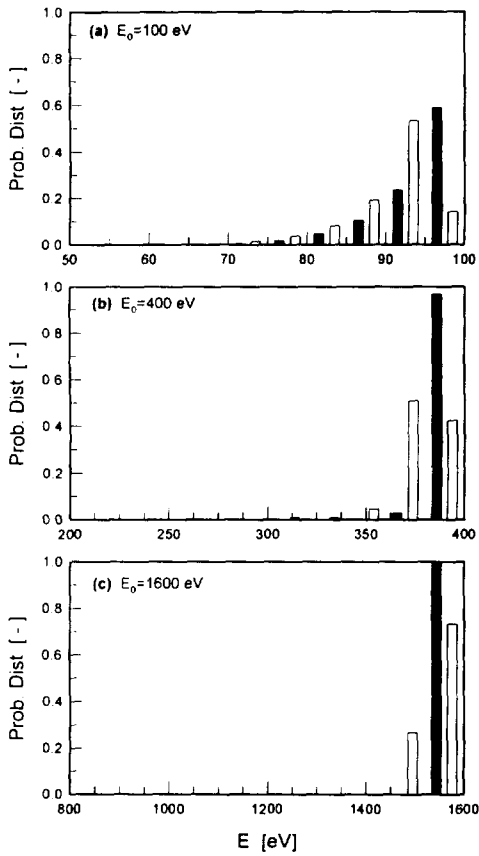


Fig. 3. Probability distributions as a function of E ; (a) $E_0 = 100$ eV, (b) $E_0 = 400$ eV and (c) $E_0 = 1,600$ eV. The open and the solid bars correspond to scattering and penetration, respectively.

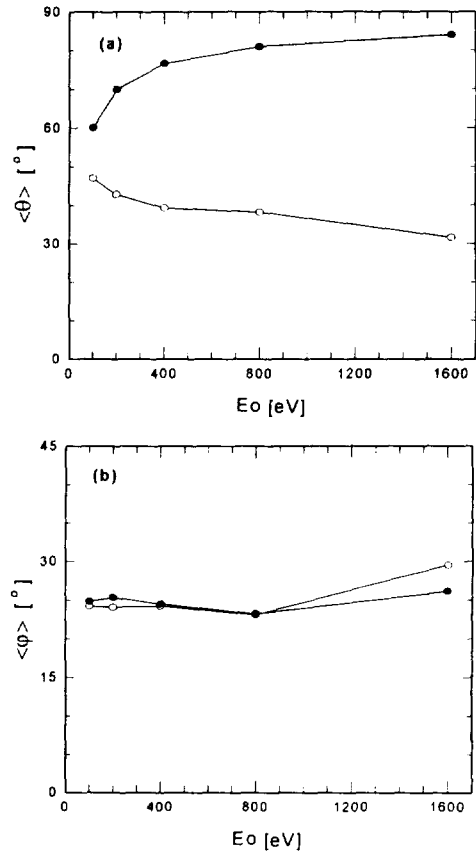


Fig. 4. Mean angles as a function of E_0 ; (a) longitudinal direction and (b) azimuthal direction. The open and the solid circles correspond to scattering and penetration, respectively.

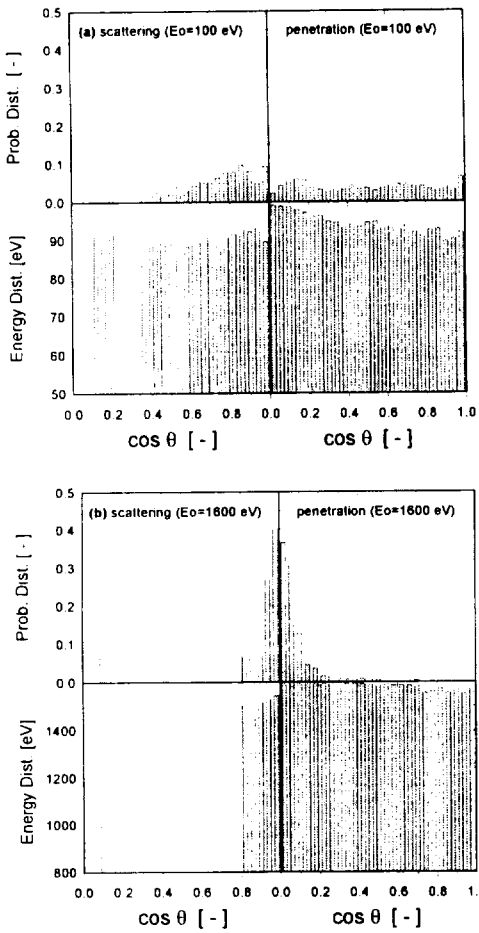


Fig. 5. Probability and energy distributions for scattering and penetration as a function of $\cos \theta$; (a) $E_0=100$ eV and (b) $E_0=1,600$ eV.

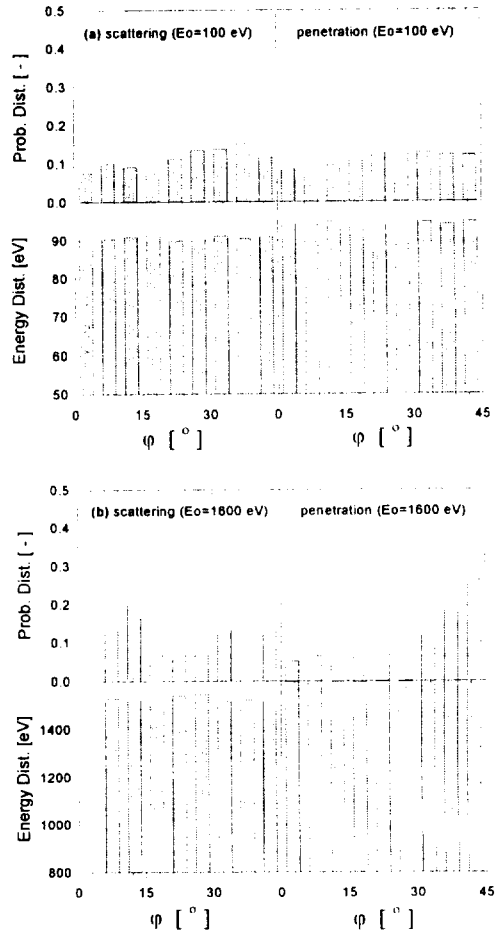


Fig. 6. Probability and energy distributions for scattering and penetration as a function of ϕ ; (a) $E_0=100$ eV and (b) $E_0=1,600$ eV.