

저에너지 (10-500eV) 불활성 기체에 의한 니켈 (001) 표면의
스퍼터링에 대한 분자 동역학 계산

김철훈 강현
포항공과대학 화학과

스퍼터링이란 큰 운동에너지를 가진 입자가 고체 표면에 충돌했을 때 고체 구성입자가 튀어나오는 현상을 말한다. 스퍼터링 과정과 같이 강한 섭동이 국부적으로 가해지는 계를 연구하기 위하여 분자 동역학 (molecular dynamics, MD) 계산을 시도하였다. 효율적인 계산을 하기 위하여 근거리 ($< 5 \text{ \AA}$) 상호작용을 주로 고려하고, 계산에 필요한 입자의 수를 줄이기 위해서 확률적 (stochastic MD) 방법을 사용하여 계의 경계를 묘사하였다. 불활성 기체 (He, Ne, Ar, Kr, Xe) 가 니켈 (001) 표면에 대해 45° 로 입사되는 것을 10-500eV 영역에서 계산한 결과, 스퍼터링 수율 (입사된 입자의 수/스퍼터링된 입자의 수)은 입사 에너지의 증가에 따라 그림 1과 같이 증가하는 것으로 나타났다. 500eV 정도의 에너지를 가지는 입자가 입사되었을 때, 스퍼터링 과정은 $\sim 5 \times 10^{-13} \text{ sec}$ 정도에 끝나는 것으로 나타났고, 스퍼터링되어 나오는 니켈원자들의 운동에너지 분포는 문턱에너지 이상에서는 입사에너지에 상관없이 비슷하게 나타났다 (그림 2). 그리고 입사 입자의 에너지와 종류에 따라 산란된 입사 입자와 스퍼터링된 입자들의 공간 분포가 나타나는 형태가 달라짐을 볼 수 있었다.

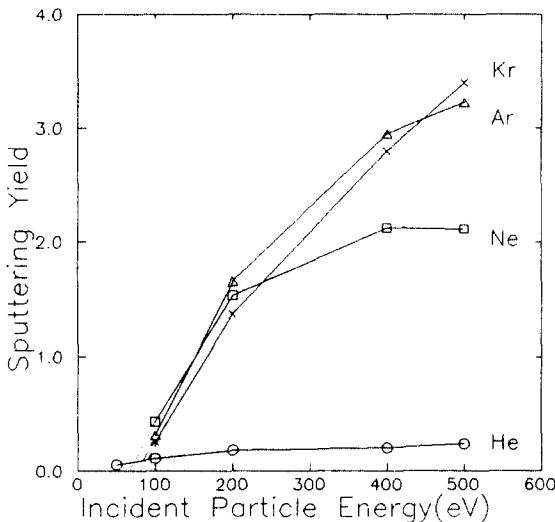


그림 1. 입사되는 입자와 에너지 변화에 따른 전체 스퍼터링 수율.

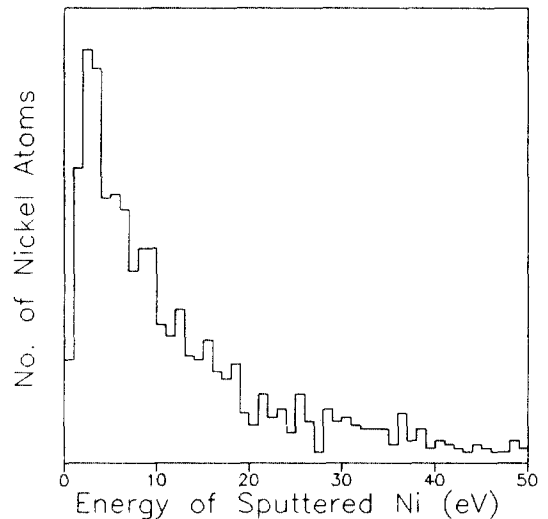


그림 2. 500 eV Ar에 의해 스퍼터링된 니켈 원자들의 에너지 분포.