

산란 및 투과된 수소 이온의 분자 전산 연구 III. 니켈 (100) 표면 층의 운동에너지

서승혁, 민용기
계명대학교 화학공학과

Molecular Simulation Studies of Scattered and Penetrated Hydrogen Ions III. Kinetic Energies in Ni (100) layers

Soong-Hyuck Suh and Woong-Ki Min

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

Abstract

In this paper molecular dynamics simulations have been carried out to investigate energy and momentum transfer of hydrogen ions impacted on the Ni (100) surface with 45° and 90° incident angles. The initial kinetic energies of the hydrogen ion were ranged from 100 eV to 1,600 eV to study the layer-by-layer energy variation as a dependence of incident energies and angles. At low incident energies, the scattering energy transfer is dominated by the normal motion of surface layers due to thermal vibrations and multiple collision effects. For higher incident energies, the scattering energy transfer in a normal direction is greater than that in a parallel direction. In the case of penetration, the amount of transferred energies do not affect much on Ni layers at low incident energy. It was found channeling effects through Ni layers with increasing incident energies.

1. 서론

전보에서 본 연구자들은 100~1,600 eV의 초기 발사 에너지를 가지는 수소 이온을 니켈 (100) 표면에 충격시켜 수소 이온의 궤적 특성 및 에너지 분포, 평균 산란각과 투과각 등을 비롯하여 에너지 및 방향성에 지배되는 통계 열역학적 특성값들을 molecular dynamics (MD) 전산 모사 방법을 이용하여 조사한 바 있다^{1,2)}. 이러한 충격 이온의 에너지 분포 특성과 표면 구성 원자들의 운동 특성을 조사하는 이온 충격 실험은 충격 이온과 표면 구성 원자 사이의 상호 인력 관계를 이해할 수 있을 뿐 아니라, 발사 에너지가 증가함에 따라 금속 표면으로부터 방출되는 이온이나 전자의 분포를 통해 금속 표면이 가지는 구조적 특성 및 충돌로 인한 금속 표면의 손상 정도를 파악할 수 있다. 최근에 이러한 이온 충격 실험은 불순물의 분포를 정밀하게 조절하거나 마스크의 수를 감소시켜 반도체 소자 제조 공정을 단순화시킬 수 있음에 따라 산업적인 측면에서 활발한 연구가 진행되고 있다^{3,4,5)}. 특히 재료의 표면에 충돌하여 산란하는 충격 이온의 입자 분포, 표면 구성 원자들의 운동 에너지 변화 등은 최종적으로 재료 표면의 물리적 특성을 좌우하기 때문에 충격 이온의 동적 특성들을 분석하는 일은 중요한 연구 과제가 되고 있다⁶⁾.

충격 이온의 열적 및 동적 현상들을 직접 규명하기 위해서는 충격 이온이 가지는 복합 입자 및 발사 에너지, 충격 이온과 고체 표면 원자의 인력적 관계 등을 분자 차원에서 고려해야 한다. 그러나 실제 이온 충격 실험의 측정 수준을 분자 차원의 정밀한 수준으로 높인다는 것은 기술적으로 매우 어려울 뿐 아니라, 이론적인 측면에서도 이들 실험 측정된 자료들을 통계 열역학적으로 적용하는 것은 분자 자체의 특성을 단순화

한 이유로 직접 비교 활용이 불가능하다. 최근에는 컴퓨터 성능의 향상에 힘입어 분자 전산 모사 (molecular simulation)에 의한 사고 실험 (thought experiment)이 다양하게 수행되어 실제 실험에서 수반되는 어려움을 극복하고 있다. 일반적으로 100 keV 이상의 높은 에너지 범위에서 이온과 고체 표면 원자의 충돌 효과는 강체형 동역학 (hard-sphere dynamics)에 의한 이원자 충돌 (binary collision)로 해석되어 Ziegler 등⁷⁾이 적용한 Monte Carlo (MC) 전산 모사 방법을 통해 성공적으로 구현되고 있다. 하지만 충격 이온과 표면 구성 원자 사이의 질량비가 증가하거나, 100 keV 이하의 낮은 에너지 범위에서는 다중 충돌 (multiple collision) 효과의 증가로 인해 단순 이원자 충돌 이론에 근거한 MC 전산 모사 방법은 많은 제약점과 한계점을 가지게 된다. 이에 따라 100 keV 이하의 낮은 에너지 범위에서는 시간 변화에 따른 원자들의 충돌 운동 방정식의 해를 직접 계산하는 MD 전산 모사 방법을 통해 이온 충격 실험을 재현하고 있다^{8,9)}.

Tilinin과 Betz¹⁰⁾는 낮은 에너지 영역에서 매우 작은 질량의 충격 입자와 표면 구성 원자와의 충돌에 관한 산란 이론을 제안하고 이온을 C, Al, Cu, Ag, Au 표면에 충격시켜 발사 에너지에 따라 후방 산란되는 양성자의 산란 계수 (scattering coefficient)를 MC 전산 모사 방법을 통해 조사하였다. Morokoff와 Kersch¹¹⁾는 강체구 (hard sphere) 및 연체구 (soft sphere)를 비롯한 다양한 계에 대한 산란 모델을 제시하고 각각의 계에 대한 점성 계수 및 확산 계수를 조사하여 상호 비교 분석하였다. 또한, Lahaye¹²⁾ 등은 100 eV 이하의 hyperthermal 에너지 영역에서 Ar 원자를 Ag (100) 표면에 충격시키는 MD 전산 모사를 실시하여 주사각 및 온도의 영향에 의

한 산란 특성을 조사하였다.

한편, 본 연구자들^{1,2)}은 100~1,600 eV 범위의 발사 에너지를 가지는 수소 이온을 Ni (100) 표면에 충격시키는 MD 전산 실험을 수행하여, 주사각에 따라 산란 및 투과하는 수소 이온의 운동에너지 분포도, 산란 및 투과 평균각의 변화 등을 조사한 바 있다. 본 연구 논문에서는 이전의 논문과 동일한 발사 에너지를 가지는 수소 이온을 수직 및 45°로 니켈 (100) 표면에 충격시켜 수소 이온의 운동 메커니즘에 따른 니켈 표면의 운동에너지 변화를 전산 모사 시간에 따라 조사하여 수평 및 수직 방향에 따른 니켈 표면 층들의 운동 에너지 변화 특성, 포텐셜 에너지 표면 (potential energy surface) 변화 및 수소 이온의 궤적 특성 분자 차원에서 측정하였다. 이러한 MD 전산 모의 실험의 결과들은 실제 이온 충격 실험에서 정성적인 정보로만 얻을 수 있는 충격 이온 및 고체 표면 구성 원자들의 미시적 동적 효과를 해석하는데 가장 이상적인 재현 방법으로서, 고체 표면이 갖는 구조적 특성 및 거동 이온의 동적 특이 현상을 규명해 반도체 제조 공정과 같은 실제 산업 분야에서 미량의 입사 이온으로 인해 발생하는 기판의 결함, 입사 이온의 거동 분포 특성 등을 정량적인 방법으로 분석하는데 확대 적용될 수 있을 것이다.

2. 전산 모사 방법

본 전산 모의 실험에서는 니켈 (100) 표면에 충격된 수소 이온의 산란 및 투과 현상에 따른 니켈 표면의 에너지 변화 특성을 조사하기 위해 MD 전산 모사 방법을 이용하였다. MD 전산 모사 방법에서 충격 이온 및 니켈 원자들의 위치 및 운동 궤적은 Newton의 운동 방정식에 의해 수치적으로

계산된다¹³⁾. 충격 수소 이온과 니켈 원자 사이의 상호 에너지 포텐셜은 ZBL 형태의 순수 척력항을 포함한 Screened-Coulomb 포텐셜로 주어졌다. 또한, 니켈 원자 상호간의 포텐셜은 두 니켈 원자 사이의 거리가 1.5 Å 이하인 경우에는 ZBL (Ziegler-Biersack-Litmark) 포텐셜을, 상대 거리가 3.0 Å 이상인 영역에서는 Morse 포텐셜을 사용하였다. 한편, 니켈 원자 사이의 상대 거리가 1.5 Å~3.0 Å 영역에서는 멱급수 형태의 spline 포텐셜 함수로 표현되었다. 각각의 포텐셜 함수에 필요한 변수를 포함한 자세한 MD 기법은 본 연구자들이 발표한 이전 연구 논문에 기술된 바와 같다^{1,2)}.

모의 실험의 초기 상태는 300 K 온도에서 격자 상수가 3.524 Å인 니켈 원자를 11×11×7개의 단위 격자로 이루어진 (100) 니켈 면심 입방체 (face-centered cubic, FCC)로 구성하였다. 또한 니켈 원자간의 진동 에너지를 고려한 초기 평형 상태는 평균 근계급 변위값을 Debye 온도로부터 계산하여 수직, 수평 및 벌크 방향으로 각각 0.122 Å, 0.08 Å, 0.062 Å의 값을 부여하여 단위 격자점으로부터 니켈 원자들의 초기 위치를 무작위 변위시켰다. 한편 충격 수소 이온은 니켈 xy-평면에서 수직 방향으로 4.0 Å의 높이에서 100~1,600 eV 범위의 발사 에너지를 가지고 수직 및 45°의 입사각으로 (100) 방향으로 충격되도록 설정하였다. 또한 통계적 오차 범위를 줄이기 위해 단위 충격 지역 (impact zone)에 40×40개의 주사점을 설정하여 1,600 회 반복 실험을 수행하였다. 발사 이온과 표적의 니켈 원자는 충돌 후 운동량이 보존되는 완전 탄성 충돌 (elastic collision)을 하는 것으로 가정하였으며, 원자 상호간의 neighbor list¹³⁾를 적용하여 매 10 회 시간 간격마다 다시 작성하여 전산 모사에 소요되는 계산 시간을 최적

화하였다. 수소 이온 및 니켈 원자들의 시간 변화에 따른 위치 및 속도 변화는 Verlet 알고리즘^{13,14)}을 이용해 계산하였으며 충격 수소 이온의 발사 에너지에 따라 20~100 femto second까지 원자의 궤적을 추적하였다.

수소 이온의 충돌로 인해 니켈 표면으로 전달되는 운동에너지의 변화량은 니켈 평면과 수평인 xy-평면, 수직인 z-축 방향에 대하여 각각 측정하였다. 수평 방향에 대한 운동에너지의 변화는 니켈 xy-평면의 원점으로부터 $d_0 = \pm 1.246 \text{ \AA}$ 범위까지 측정하였다. 이러한 방법은 수소 이온의 충격량이 미치지 않는 거리에서 니켈 원자 자체의 운동을 배제하여 충돌로 인한 니켈 표면의 운동에너지 변화량만을 계산할 수 있다. 또한 최대 모사 시간 이후에도 니켈 입방체의 옆면으로 운동하는 수소 이온은 산란 및 투과 수소 이온의 수에서 배제하여 측면 효과(side effect)를 최소화하였다.

3. 결과 및 고찰

Fig. 1에 수직 및 45°로 충격된 100 eV, 400 eV, 1,600 eV의 조건에서 수소 이온이 니켈 (100) 표면에 충돌 후 산란하는 경우 니켈 표면의 전체 운동에너지 변화를 전산 모사 시간에 따라 나타내었다. Fig. 1(a) 및 Fig. 1(d)에 나타낸 $E_0 = 100 \text{ eV}$ 의 낮은 발사 에너지를 가지는 수소 이온은 주사각과 관계없이 니켈 표면 충돌의 에너지 변화는 상호 유사한 형태를 보이는 것으로 나타났다. 즉, 낮은 발사 에너지의 수소 이온이 니켈 표면 원자와 충돌 후 산란하는 경우 니켈 표면의 운동에너지 변화는 수소 이온의 충격 지역, 충돌 면적, 주사각과 무관하게 시간이 지남에 따라 충돌 니켈 층에 고르게

분포되어 표면의 각 층을 구성하는 니켈 원자들의 열 진동(thermal vibration)에 의한 자체 운동만으로 해석이 가능하다.

발사 에너지가 증가함에 따라 수소 이온의 속도 벡터도 증가하여 $E_0 = 400 \text{ eV}$ 이상의 수소 이온은 첫 번째 층의 니켈 원자와 가장 두드러진 충돌을 일으킨다. 이 과정에서 니켈 표면으로 전달된 운동에너지는 전산 모사 시간 동안 니켈 표면으로 전달되는 전체 운동에너지의 대부분을 차지한다. 수직 주사의 경우, 첫 번째 니켈 층의 운동에너지 변화가 다른 층의 운동에너지 변화에 비하여 매우 큰 것으로 나타났다. 45°로 충격된 수소 이온은 첫 번째 층의 니켈 원자와 가장 먼저 충돌하지만 니켈 표면 층의 운동에너지 변화는 두 번째 및 세 번째 층에서 가장 큰 변화를 보이는 것으로 나타났다. 특히, Fig. 1 (c)의 $E_0 = 1,600 \text{ eV}$ 의 수소 이온이 수직으로 충격되는 경우 니켈 원자들의 수직 운동이 에너지 전달에 큰 영향을 미치는 것으로 보인다. 수직으로 충격된 수소 이온은 표면 층의 니켈 원자와 정면 충돌을 하므로 Fig. 1 (f)의 45°로 충격된 수소 이온보다 큰 충돌 면적을 가지게 되며, 이 때 많은 양의 에너지가 니켈 표면 층으로 전달된다. 반면에 45°로 충격된 수소 이온은 니켈 원자의 수직 운동으로 인해 충돌 시간에 차이가 생기므로 수직으로 충격된 수소 이온에 비해 작은 충돌 면적을 가지며 니켈 원자의 옆면과 충돌하는 횟수가 증가하게 된다. 이러한 사항은 본 연구자들이 이전 연구 논문에서 서술한 산란각과 에너지 분포 특성에서 부분적으로 설명한 바 있다.

한편, Someren 등¹⁵⁾은 Xe 원자를 60° 주사각으로 구리 (110) 표면에 충격시켰을 때 발생하는 스퍼터링(sputtering) 현상에 관한 전산 모의 실험을 수행한바 있다. 이들은 구리 원자의 스퍼터링 메커니즘을 Xe 원자, 구리 충돌 원자 및 주변의 다른 구리 원

자 사이의 인력 및 척력적 상호 작용을 기준으로 단일 이원자 충돌 (single binary collision), 준단일 충돌 (quasi-single collision), 준다중 충돌 (quasi-double collision), 다중 충돌 (multiple collision) 등의 형태로 분류하여 해석하였다. 본 연구에서도 이와 유사한 방법으로 충격 수소 이온의 산란 메커니즘을 해석할 수 있다. 일반적으로 낮은 발사 에너지의 충격 이온은 표면 구성 원자와의 척력적 포텐셜의 영향으로 포텐셜 에너지가 낮은 표면으로 나선형 궤적을 그리면서 표면 원자와 충돌하여 포텐셜 에너지 표면에 굴곡 (corrugation) 현상을 보이게 된다. 반면에 높은 발사 에너지의 충격 이온은 자체 이온의 충격량만으로 표면 구성 원자 상호간의 포텐셜 에너지 표면을 투과하여 표면 원자와 직접 충돌이 가능하다. 본 전산 모의 실험의 경우, 니켈 원자에 대한 수소 이온의 충돌 반경 및 질량비는 매우 작다. 따라서 낮은 발사 에너지의 수소 이온은 Fig. 4 (d)와 같은 다중 충돌 현상에 의해 니켈 표면으로 운동에너지를 전달한다. 그러나 충격 수소 이온의 발사 에너지가 증가함에 따라 점차 Fig. 4 (c) 및 Fig. 4 (b)에 나타난 준다중 충돌 및 준단일 충돌에 의한 에너지 전달 현상이 다중 충돌 현상보다 지배적이다. 따라서 $E_0 = 1,600$ eV의 높은 발사 에너지를 가지는 수소 이온은 니켈 원자 상호간의 포텐셜 에너지를 극복할 수 있는 충분한 크기의 자체 운동에너지를 가지므로 Fig. 4 (a)에 나타난 단일 이원자 충돌에 따라 니켈 원자와 직접 충돌한 후 산란하게 된다.

Fig. 2에 수직 및 45° 로 충격된 100 eV, 400 eV 및 1,600 eV의 수소 이온이 니켈 (100) 표면에 충돌하여 산란하는 경우 니켈 표면 충돌의 수직 성분 운동에너지 변화를, Fig. 3에 수평 성분의 운동에너지 변화를 전산 모사 시간에 따라 도식화하였다. Fig. 2

에 나타난 수직 성분의 운동에너지 변화는 Fig. 3에 나타난 수평 성분의 운동에너지 변화에 비해 매우 높으며, Fig. 1에 나타난 니켈 표면 충돌의 전체 운동에너지 변화와 상호 유사한 형태를 보인다. 또한 주사각이 수직에서 45° 로 감소함에 따라 니켈 표면으로 전달되는 수직 성분의 운동에너지 변화는 감소하는 것으로 나타났다. 이는 주사각이 감소함에 따라 니켈 원자에 대한 수소 이온의 충돌 반경이 감소하여 니켈 표면으로 전달되는 운동에너지의 양이 감소함을 의미한다. 특히, 수직으로 충격된 $E_0 = 1,600$ eV의 수소 이온은 첫 번째 층의 니켈 원자와 큰 충돌 면적의 단순 이원자 충돌을 일으키며 수직 방향의 에너지가 첫 번째 니켈 층에 전달된다. 반면에 45° 로 충격된 $E_0 = 1,600$ eV의 수소 이온은 첫 번째 층의 니켈 원자와 충돌한 후에도 두 번째 및 세 번째 층의 니켈 원자와 연속적인 이원자 충돌을 일으키며 세 번째 층의 니켈 원자까지 수직 성분의 운동에너지가 전달된다. 니켈 (100) 표면에 대한 주사각의 차이는 충격 이온이 면심 입방체의 니켈 격자 사이에 형성된 터널을 따라 운동하는 터널 현상 (tunneling effect), 충격 이온의 진행 방향을 방해하는 니켈 원자의 가리움 현상 (shadowing effect) 및 방해 현상 (blocking effect) 등^{16,17,18)}에 영향을 미치게 되어 실제 수소 이온의 산란을 및 니켈 원자와의 충돌 면적, 니켈 표면으로 전달되는 에너지의 양 등에 직접 영향을 미치게 된다.

발사 에너지가 100 eV, 400 eV 및 1,600 eV의 수소 이온이 수직 및 45° 로 니켈 (100) 표면에 충격되어 투과하는 경우 니켈 표면의 전체 운동에너지 변화를 Fig. 5에, 수직 및 수평 방향에 대한 니켈 표면의 운동에너지 변화를 Fig. 6과 Fig. 7에 각각 나타내었다. Fig. 6 및 Fig. 7에 나타난 니켈 표면의 수직 및 수평 성분에 대한 운동에너

지 변화는 주사각에 관계없이 모의 실험 시간 동안 100~1,600 eV의 발사 에너지 범위에서 유사한 형태를 나타내었다. 수직 방향에 대한 니켈 표면 층들의 운동에너지 변화는 수평 방향의 운동에너지 변화에 비해 큰 진폭의 파동 현상을 보이는 것으로 나타났다. 첫 번째 층의 니켈 원자들은 계산 시간이 지남에 따라 점차 큰 진폭의 자유 진동 현상을 보이며 두 번째 층 이하의 니켈 원자들은 계산 시간 및 주사각과 무관하게 니켈 표면의 자체 열 진동에 의해 일정 진폭의 조화 진동자(harmonic oscillator)와 유사한 에너지 변화를 보인다. 이는 투과 수소 이온의 대부분이 표면의 니켈 원자와 별다른 충돌없이 주사각에 따라 니켈 표면의 (100) 및 (110) 방향으로 형성된 큰 자유 체적의 터널을 따라 투과하는 것을 의미한다. 따라서 충격된 수소 이온이 니켈 표면을 투과할 때 니켈 표면 층들의 운동에너지 변화는 표면의 각 층을 구성하는 니켈 원자 자체의 열적 운동만으로 해석이 가능하다.

4. 결론

본 연구 논문에서는 100~1,600 eV의 수소 이온을 니켈 (100) 표면에 수직 및 45°로 충격시키는 MD 분자 진산 모사를 수행하였다. 충격된 수소 이온의 산란 및 투과 메커니즘에 따라 니켈 표면 층들의 수직 및 수평 방향에 대한 운동에너지 변화를 조사하였다. $E_o=100$ eV의 낮은 발사 에너지를 가지는 수소 이온이 표면의 니켈 원자와 충돌하여 산란하는 경우, 니켈 표면의 수직 방향 운동에너지 변화는 수소 이온의 충격 지역, 충돌 면적, 주사각과 무관하게 계산 시간 동안 니켈 원자들의 열 진동에 의한 자체 운동으로 해석이 가능하다. 반면에 $E_o=1,600$

eV의 높은 발사 에너지에서는 수직 충격의 경우 첫 번째 니켈 층의 수직 방향 운동에너지 변화가 지배적이며, 45° 충격의 경우에는 두 번째 및 세 번째 층의 수직 방향 운동에너지에 큰 변화를 보이는 것으로 나타났다. 한편 주어진 발사 에너지 범위에서 수직 및 45°로 충격된 수소 이온이 니켈 (100) 표면을 투과하는 경우 니켈 표면의 수직 방향 운동에너지 변화는 계산 시간이 증가함에 따라 첫 번째 층을 구성하는 니켈 원자들의 자유 진동에 큰 영향을 받으며 두 번째 이하의 니켈 원자들은 자체 열 진동에 의한 일정 진폭의 조화 진동자와 유사한 운동에너지 변화를 보였다.

후기

본 연구는 교육부 BK21(핵심분야) 사업의 학술 연구비 지원과 연구개발정보센터(KISTI)의 전산 지원에 의하여 수행되었으며, 이에 감사드립니다.

참고 문헌

1. S.-H. Suh and W.-K. Min : J. Korean Hydrogen Energy Soc., 11 (2000), 127
2. S.-H. Suh and W.-K. Min : J. Korean Hydrogen Energy Soc., 12 (2001), 51
3. G. Bourque and B. Terreault : Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B, 155 (1996), 468
4. J. Asher : Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B, 89 (1994), 315
5. J. E. Rubio, L. A. Marques, M. Jaraiz, L. A. Gailon and J. Barbolla : Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B, 102

- (1995), 301
6. H. M. Urbassek : Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B, 122 (1997), 427
 7. J. F. Ziegler, J. P. Biersack and U. Littmark : "The Stopping and Range of Ion in Solids, Vol. 1 : The Stopping and Range of Ions in Matter" , Pergamon, New York, (1985)
 8. K. Nordlund : Comp. Mat. Sci., 3 (1995), 448
 9. K. Nordlund and A. Kuronen : Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B, 115 (1996), 528
 10. I. S. Tilinin and G. Betz : Vacuum, 48 (1997), 395
 11. W. J. Morokoff and A. Kersch : Comp. Math. Appl. 35 (1998), 155
 12. R. J. W. E. Lahaye, A. W. Kleyn, S. Stolte and S. Holloway : Surf. Sci., 338 (1995) 169
 13. M. P. Allen and D. J. Tildesley : "Computer Simulation of Liquids", Clarendon Press, Oxford, (1987)
 14. L. Verlet : Phys. Rev., 159 (1967) 98
 15. B. van Someren, T. T. Nuver, H. Rudolph, P. A. Z. van Emmichoven, I. F. Urazgil'din and A. Niehaus : Surf. Sci., 423 (1999) 276
 16. R. Smith (ed.) : "Atomic and Ion Collisions in Solids and at Surfaces", Cambridge Univ. Press, (1997)
 17. W. D. Eckstein : "Computer Simulation of Ion-Solid Interactions", Springer-Verlag, Berlin, (1991)
 18. J. W. Rabalais : "Low Energy Ion-Surface Interactions", John Willy, New York, (1994)

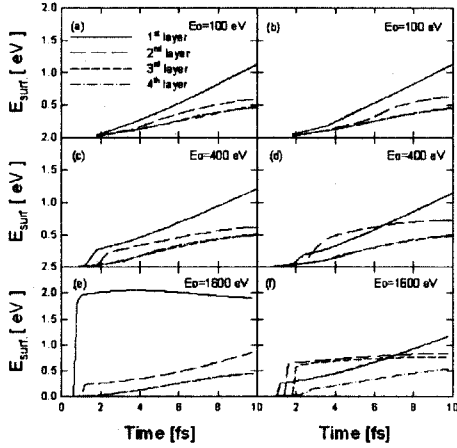


Fig. 1. The total layer-by-layer energy transfer for scattering on Ni (100) surface with the 90° and 45° incident angles.

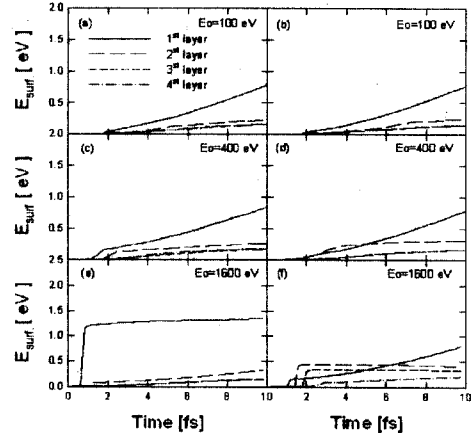


Fig. 2. The normal layer-by-layer energy transfer for scattering on Ni (100) surface with the 90° and 45° incident angles.

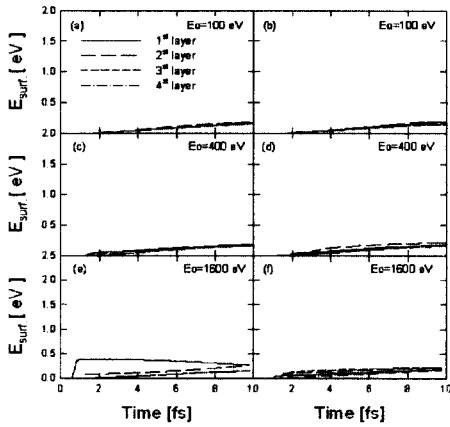


Fig. 3. The parallel layer-by-layer energy transfer for scattering on Ni (100) surface with the 90° and 45° incident angles.

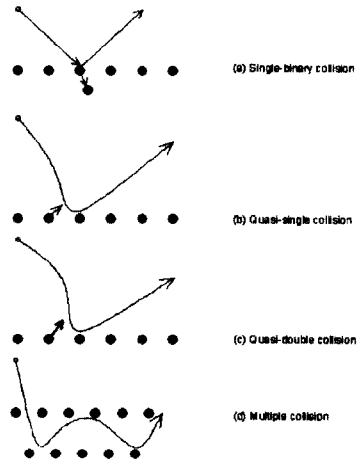


Fig. 4. Schematic representations for various collision dynamics. (a) single-binary collision, (b) quasi-single collision, (c) quasi-double collision, (d) multiple collision.

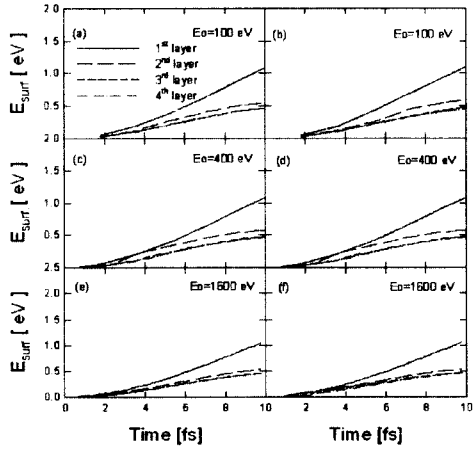


Fig. 5. The total layer-by-layer energy transfer for penetration on Ni (100) surface with the 90° and 45° incident angles.

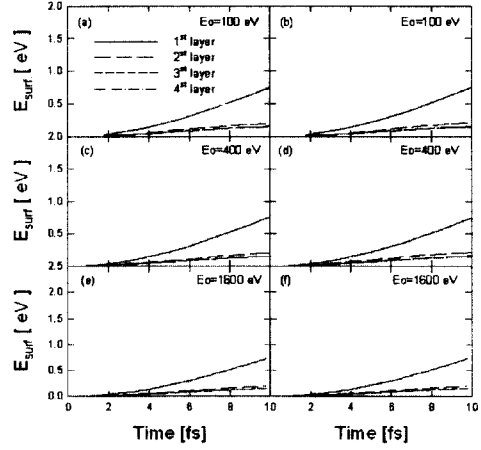


Fig. 6. The normal layer-by-layer energy transfer for penetration on Ni (100) surface with the 90° and 45° incident angles.

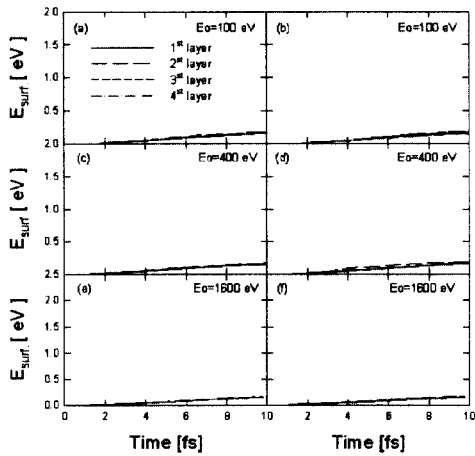


Fig. 7. The parallel surface layer energy transfer for penetration on Ni (100) surface with the 90° and 45° incident angles.