

산란 및 투과된 수소 이온의 분자 전산 연구 II. 니켈 (100) 표면의 45° 입사

서승혁, 민응기
계명대학교 화학공학과

Molecular Simulation Studies of Scattered and Penetrated Hydrogen Ions II. 45° Incident Angle to Ni (100) Surface

Soong-Hyuck Suh, Woong-Ki Min

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

Abstract

In this paper molecular dynamics simulations were employed to investigate the structural and dynamic properties of hydrogen ions impacted on the Ni (100) surface with the 45° incident angle. The initial kinetic energies of the hydrogen ion range from 100 to 1,600 eV. Together with the trajectory visualization of hydrogen ions, we computed scattering and penetration yields, mean energies and angles, and probability and energy distributions as a function of longitudinal and azimuthal directions. In the case of lower energy scattering ions, the multiple collision effects were found to be important to the third layers or lower. For higher energy penetrating ions, compared with the normal incident angle, it was significant the effective channeling effects through the Ni layers and the angle dependencies were indicated both in the longitudinal and the azimuthal angle directions.

1. 서론

일정한 에너지 및 주사각을 지닌 이온이나 원자가 고체 표면과 충돌하여 산란 및 투과하는 경우에 충격 이온의 진행 방향과 에너지 분포 특성은 이온과 표면 구성 원자 사이의 상호 작용 및 인력 관계를 이해할 수 있을 뿐만 아니라, 반도체 표면 개질 공정에서 발생하는 여러 가지 현상들을 규명하는데 많은 도움이 된다. 또한, 이온 산란 분광법(ion scattering spectroscopy)을 이용한 금속 표면 분석, 미세공 박막 제조 및 필름 제조와 같은 실제 산업 분야에서도 다양하게 응용되고 있다^{1,2)}. 일반적으로 수십 내지 수 백 eV의 발사 에너지 범위 내에서 고체 표면에 충돌한 이온의 산란(scattering), 투과(penetration) 현상은 강체형 동력학에 의한 이원자 충돌(binary collision) 이론에 의해 해석될 수 있다³⁾. 그러나 충격 이온과 표면 구성 원자와의 질량비가 증가하거나, 원자 상호간의 인력이 증가할수록 다중 충돌(multiple collision) 효과가 증대되어 단순 이원자 충돌 이론에 근거한 이론식들은 많은 제약점과 한계점을 지니게 된다⁴⁾. 또한, 초기 충격 이온에 대한 주사각의 변화는 고체 표면에 전달되는 에너지의 양에 큰 영향을 미치며, 충격 이온이 금속 표면과 충돌 후 가지는 산란율과 투과율에 큰 차이를 보이는 것으로 보고되고 있다⁵⁾.

충격 이온의 열적 및 동적 현상들을 직접 규명하기 위해서는 충격 이온이 가지는 복합 인자 및 발사 에너지, 주사각 그리고 충격 이온과 고체 표면 원자의 인력적 관계 등을 분자 차원에서 고려하여야 한다. 그러나 실제 실험 측정 수준을 분자 차원의 정밀한 수준으로 높인다는 것은 기술적으로 매우 어려울 뿐만 아니라, 이론적인 측면에서도 이들 실험 측정된 자료들을 통계 열역

학적으로 적용하기에는 분자 자체 특성을 단순화한 이유로 직접 비교 활용이 거의 불가능하다. 최근에는 컴퓨터 성능의 향상에 힘입어 실제 실험에서 수반되는 어려움을 극복하고 대체할 수 있는 방법으로 분자 전산 모사(molecular simulation)에 의한 사고 실험(thought experiment)이 다양하게 수행되고 있으며, Monte Carlo 기법을 이용한 TRIM⁶⁾이나 이원자 충돌 형태의 MARLOWE⁷⁾ 등과 같은 전산 프로그램 코드가 개발된 바 있다. 최근 Kim⁸⁾ 등은 (100) 니켈 금속 표면에 10~500 eV의 He, Ne, Ar, Kr, Xe 등의 원자를 충격시켜 충격 이온의 질량에 따른 산란 및 투과 이온의 에너지 분포 등을 조사한 바 있으며, Nordlund⁴⁾는 1~100 keV 범위의 이온을 고체 표면에 충격시켰을 때 나타나는 충격 이온의 에너지 전달 범위를 이원자 충돌 이론과 molecular dynamics(MD) 전산 모사 방법을 통해 구현하고 그 결과값의 차이를 비교 분석하였다. 보다 최근에 Richard-Viard⁹⁾ 등은 주사각의 변화에 따라 금속 표면과 충돌 후 산란 및 투과하는 충격 이온의 에너지 분포, 산란각과 투과각의 변화 등을 체계적으로 고찰하기 위해 매우 작은 주사각을 가진 4 keV의 Ne과 Na 이온 등을 NaCl (100) 표면에 주사시켜 산란각을 측정 후 이를 수직 및 수평 방향에 대하여 분포도를 작성하여 이온화율과의 관계를 언급하였다.

전보¹⁰⁾에서 본 연구자들은 100~1,600 eV의 발사 에너지 범위에서 충격 수소 이온을 Ni (100) 표면에 수직 주사시키는 MD 전산 실험을 수행하여, 산란 및 투과에 따른 수소 이온의 운동에너지 분포도, 산란 및 투과 평균각의 변화 등을 조사하였다. 본 연구에서는 동일한 조건의 발사 에너지를 가지는 수소 이온을 니켈 표면에 45°로 주사시켜 충돌 후 주사각의 변화에 따른 산란 및 투과

수소 이온의 궤적 특성, 산란율과 투과율의 변화, 그리고 산란각과 투과각에 따른 수소 이온의 운동에너지 분포, 산란 및 투과 평균각의 변화 등 에너지 및 방향성에 지배되는 통계 열역학적 특성값들을 측정하였다. 본 연구에서 얻어진 전산 모사 결과는 수직 주사 결과와 비교하여 발사 에너지 및 주사각의 변화에 따른 충격 이온의 미시적 동적 효과를 분자 차원에서 해석하고자 하였다.

2. 전산 모사 방법

니켈 금속 표면과 충돌하여 산란 및 투과하는 충격 수소 이온의 산란, 투과 특성을 규명하기 위해 본 전산 실험에서는 격자 상수가 3.524 Å인 니켈 원자를 $11 \times 11 \times 7$ 개의 (100) 니켈 면심 입방체 (face-centered cubic, FCC)로 구성하였다. 또한, 니켈 원자 상호간의 진동 에너지를 고려하기 위해 평균 근제곱 변위값을 Debye 온도로부터 계산한 후 이를 표면의 수직, 수평 그리고 벌크 방향으로 각각 0.122 Å, 0.08 Å, 0.062 Å의 값을 부여하여 니켈 원자들의 위치를 단위 격자점으로부터 무작위 변위시켜 300 K 온도에서 니켈 원자들의 초기 평형 상태를 구현하였다. 한편, 100~1,600 eV의 발사 에너지를 가지는 수소 이온은 니켈 xy-평면에서 수직 방향으로 4.0 Å의 높이에서 니켈 표면으로 45°의 입사각으로 주사되며, 통계적 오차 범위를 줄이기 위해 $1.277 \times 1.277 \text{ Å}^2$ 의 단위 충격 지역(impact zone)에 40×40 개의 주사점을 설정하여 1,600회 반복 실험을 수행하였다.

거동 분자의 위치와 운동 궤적을 실제 시간의 변화에 따라 Newton의 운동 방정식으로부터 직접 계산하는 MD 전산 모사 방법에서는 충격된 수소 이온 및 니켈 원자들의 시간 변화에 따른 위치 및 속도 변화는 다

음과 같은 Verlet 알고리즘¹¹⁾을 이용해 계산되었다.

$$r_i(t + \delta t) = 2r_i(t) - r_i(t - \delta t) + \frac{f_i(t)}{m} \delta t^2 \quad (1)$$

$$v_i(t) = \frac{r_i(t + \delta t) - r_i(t - \delta t)}{2\delta t} \quad (2)$$

식(1)과 식(2)에서 나타나는 r_i , v_i , f_i 는 거동 원자 i의 위치 벡터, 속도 벡터 및 힘 벡터를 나타내며 각각의 거동 원자에 작용하는 힘은 포텐셜 에너지를 미분한 형태인 아래의 식으로 표현된다.

$$f_i = \sum_{j=1}^N f_{ij} = - \sum_{j=1}^N \nabla V_{ij}(r_{ij}) \quad (3)$$

위 식의 우측 항에 포함되어 있는 ∇ 는 상대 거리 r_{ij} 에 대한 미분을 의미하며 V_{ij} 는 원자 i와 j 사이의 상호 포텐셜 에너지를 의미한다.

본 전산 모사 연구에서 원자 상호간의 포텐셜 에너지는 ZBL(Ziegler-Biersack-Litmark), spline 및 Morse 형태의 세 가지 포텐셜을 상대 거리에 따라 사용하였다. 수소 이온과 니켈 원자 사이의 상호 에너지 포텐셜은 식(4)와 같은 순수 척력항만을 포함한 ZBL 형태의 screened-Coulomb 포텐셜 에너지 함수로 주어졌다.

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

식(4)에서 Z_1 과 Z_2 는 원자 번호, r_{ij} 는 두 원자 사이의 상대 거리, e 와 ϵ_0 는 각각 전자의 전하량 및 진공 상태에서의 유전율을 의미한다.

또한, 전기적 차폐 길이(screened length) a_0 는 Bohr의 수소 원자 반경 a_B 를 포함한 식(5)로부터 계산되었다. ZBL 포텐셜에서

b_i 및 c_i 값은 전자 분포에 따른 에너지 보정항을 나타내는 보편 상수로서 문헌에 보고된 바와 같다^{12,13)}.

$$a_o = \frac{0.8853 a_B}{Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23}} \quad (5)$$

니켈 원자 상호간의 에너지 포텐셜은 두 원자 사이의 상대 거리가 1.5 Å 이내에서는 ZBL 형태의 척력적 에너지 포텐셜로 계산되었으며, 상대 거리가 3.0 Å 이상의 거리에서는 인력적 에너지 포텐셜인 Morse 형태의 식(6)에 의하여 계산되었다.

$$V^{Morse}(r_{ij}) = D \exp(-2a(r_{ij} - r_o)) - 2D \exp(-a(r_{ij} - r_o)) \quad (6)$$

위 식의 변수 D , a , r_o 값들은 각각 0.4205 eV, 1.42 \AA^{-1} , 2.78 \AA 으로 주어졌다. 한편 $1.5 \text{ \AA} < r_{ij} < 3.0 \text{ \AA}$ 구간에서는 식(7)과 같은 멱급수 형태의 spline 포텐셜 에너지 함수로부터 계산되었다.

$$V^{spline}(r_{ij}) = a_1 + a_2 r_{ij} + a_3 r_{ij}^2 + a_4 r_{ij}^3 \quad (7)$$

여기에서 변수 a_1 , a_2 , a_3 , a_4 는 각각 325.57 eV, -376.45 eV/\AA , 142.23 eV/\AA^2 , -17.66 eV/\AA^3 으로 주어졌다.

발사 이온과 표적 원자는 충돌 후 운동량이 보존되는 완전 탄성 충돌(elastic collision)을 하는 것으로 가정하였으며, 원자 상호간의 neighbor list¹¹⁾를 적용하여 매 10 회 시간 간격마다 재작성하여 전산 모사에 소요되는 계산 시간을 최적화 하였다. 또한, 전산 실험에 사용한 충격 수소 이온의 발사 에너지에 따라 20~100 femto second의 최대 궤적 시간까지 원자의 궤적을 구현 하였다.

3. 결과 및 고찰

Table 1에 MD 전산 실험으로 구현된 초기 수소 이온의 발사 에너지 E_o 에 따른 수소 이온의 산란율 Y_s , 수소 이온의 산란 및 투과 평균에너지 $\langle E \rangle$, 산란 및 투과 수소 이온의 길이(longitudinal) 방향 평균 측정각 $\langle \theta \rangle$, 방위(azimuthal) 방향 평균 측정각 $\langle \phi \rangle$ 를 수록하였다. 이들 평균값에 나타나는 하첨자 s 및 p 는 각각 수소 이온의 산란 및 투과를 의미한다. 한편, 길이 방향 측정각 θ 는 니켈 xy-평면으로부터 직각 z-축 방향으로 측정된 값으로 $0^\circ \sim 90^\circ$ 의 범위를 가지며, ϕ 는 FCC (100) 방향에서 (110) 방향으로 측정된 $0^\circ \sim 45^\circ$ 의 범위를 갖는다.

Fig. 1에 $E_o = 100 \text{ eV}$ 및 $1,600 \text{ eV}$ 의 발사 에너지를 가지는 충격 수소에 대한 4×4 개의 특정 궤적을 xz-평면에 대하여 도식화 하였다. 그림에서 나타난 바와 같이 100 eV 의 낮은 발사 에너지를 갖는 수소 이온의 궤적은 $1,600 \text{ eV}$ 의 높은 발사 에너지를 가지는 수소 이온보다 높은 산란율, 또는 낮은 투과율을 보이고 있다. $E_o = 100 \text{ eV}$ 의 충격 수소를 수직으로 주사한 경우, 수소 이온은 상충부 표면의 첫 번째 및 두 번째 니켈 원자 층과 주된 다중 충돌 현상을 보이던 것과는 달리 45° 로 주사된 수소 이온의 경우에는 두 번째 층 이하의 니켈 원자들도 복합적 충돌 현상을 일으키는 것으로 나타나고 있다. 즉, 수직으로 주사된 낮은 에너지의 수소 이온은 단위 충돌 면적 내에 존재하는 첫 번째 및 두 번째 층의 니켈 원자와 정면으로 충돌하며 산란한다. 반면에 충격 수소 이온을 45° 로 주사시킨 경우에는 두 번째 및 세 번째 층의 니켈 원자들도 단위 충격 지역 내에 노출되어 보다 많은 충격 수소 이온이 니켈 원자들의 측면과 충돌한다. 따라서 수직 주사의 경우보다 수소 이온과 니켈 원자간의 유효 충돌 면적이 작아

수직으로 주사된 수소 이온의 경우보다 적은 양의 에너지가 니켈 표면으로 전달된다. $E_0=1,600$ eV의 높은 발사 에너지를 가지는 수소 이온이 니켈 표면을 투과하는 경우에는 단위 충격 지역 내에 위치한 니켈 원자 층이 투과 수소 이온의 특성에 큰 영향을 미치는 것으로 나타났다. 즉, 충격 수소 이온을 수직으로 주사하는 경우에 FCC 니켈 (100) 원자층은 충격 수소 이온의 진행 방향과 동일한 z -축 방향으로 주된 통로가 형성되는 반면, 45° 주사각인 경우에는 (110) 방향으로 주된 통로가 형성된다. 따라서 충격 수소 이온의 주사각이 수직에서 45° 로 변화함에 따라 유효 통로 (effective channel)가 감소하게 되어 45° 로 주사된 투과 수소 이온은 니켈 원자와 더 많은 충돌을 일으키며, 수직 주사에 비해 많은 양의 에너지를 표면으로 전달하면서 유효 통로를 따라 투과하게 된다.

Fig. 2(a)에 발사 에너지 E_0 에 대한 산란 평균에너지 $\langle E_s \rangle$ 및 에너지비 $\langle E_s \rangle / \langle E_0 \rangle$ 를 Fig. 2(b)에 투과 평균에너지 $\langle E_p \rangle$ 및 에너지비 $\langle E_p \rangle / \langle E_0 \rangle$ 를 각각 나타내었다. 그림에서 보는 바와 같이 산란 평균에너지 $\langle E_s \rangle$ 와 투과 평균에너지 $\langle E_p \rangle$ 는 E_0 가 증가함에 따라 선형적으로 증가하며, 100 eV의 수소 이온에 대한 산란 평균에너지비 $\langle E_s \rangle / \langle E_0 \rangle$ 는 1,600 eV의 수소 이온에 비해 상대적으로 작은 값을 가지는 것으로 나타나고 있다. 이는 충격 수소 이온과 니켈 원자 사이의 다중 충돌에 의한 에너지 전달이 크다는 것을 의미한다. 한편, 초기 수소 이온의 발사 에너지가 증가함에 따라 산란 평균 에너지비는 이원자 충돌에 근거한 이론식에 근접하여 $E_0=1,600$ eV에서는 $\langle E_s \rangle / E_0 = 0.96$ 의 값을 가진다. 이는

높은 발사 에너지의 수소 이온이 니켈 원자와 충돌하여 산란하는 경우에는 강제형 동력학에 의한 이원자 충돌(binary collision) 현상으로 해석할 수 있음을 의미한다. 또한, 투과 수소의 경우 Fig. 2(b)에 나타난 것처럼 투과 평균 에너지비 $\langle E_p \rangle / E_0$ 는 E_0 가 증가함에 따라 1.0에 근접한다.

Fig. 3(a)부터 3(c)에 각각 $E_0=100$ eV, 400 eV 및 1,600 eV의 수소 이온에 대한 산란 및 투과 확률 분포 함수를 발사 에너지에 대한 함수로 도식화하였다. 그림에서 검은색의 막대형 그래프는 투과 수소의 경우를 의미하며 흰색 막대는 산란 수소의 경우를 의미한다. 산란 수소의 경우는 투과 수소의 경우에 비하여 상대적으로 넓은 범위의 분포를 보이며, 낮은 발사 에너지의 수소 이온이 높은 발사 에너지의 수소 이온보다 광범위한 분포를 갖는다. $E_0=100$ eV의 산란 및 투과 수소 이온은 90~95 eV 부근에서 $E_0=1,600$ eV의 수소 이온에 비해 상대적으로 낮은 최고점을 가지는 넓은 범위의 확률 분포 특성을 가진다. 이러한 확률 분포 특성은 수직 주사의 경우와 유사한 형태의 확률 분포이다. 그러나 수직으로 주사된 수소 이온과 비교해 산란 수소의 경우에는 최고점을 가지는 에너지에서의 확률은 감소하여 높은 에너지의 확률로 전이된 것으로 나타났으며, 투과의 경우에는 최고점을 가지는 에너지에서의 확률이 낮은 에너지에서의 확률로 전이되었다. 이는 다중 충돌의 영향에 의해 해석되는 낮은 발사 에너지의 수소 이온은 니켈 원자와 충돌할 때 수직 주사에 비해 니켈 표면 원자와의 충돌 면적이 감소하여 표면으로 전달되는 에너지의 양이 적음을 의미한다. 또한, $E_0=1,600$ eV의 높은 발사 에너지를 가지는 수소 이온의 산란 확률 분포는 높은 에너지 구간에서 큰 최대값의 좁은 확률 분포를 가지는 것으로

나타났다. 그러나 최대값을 가지는 높은 에너지 구간에서의 확률은 수직 주사의 경우에 비해 감소하여 낮은 에너지 구간으로 전이되었다. 이러한 결과는 강제형 동력학에 의한 이원자 충돌로 해석되는 높은 발사 에너지의 경우, 45° 로 주사되는 수소 이온은 니켈 원자 층의 세 번째 층 이하의 상호 충돌 가능성 및 충돌 횟수의 증가를 내포한다. 한편, 45° 로 주사된 투과 수소 이온의 경우에는 수직 주사의 경우와 마찬가지로 강제형 충돌이 없이 투과되고 있음을 보이고 있다.

Fig. 4(a)에 길이 방향에 대한 수소 이온의 산란 및 투과 평균각을 발사 에너지에 따라 도식화하였으며, Fig. 4(b)에 방위 방향에 대한 산란 및 투과 평균각을 도식화하였다. 여기에서 사용된 열린 원과 닫힌 원은 각각 산란과 투과의 경우를 나타낸다. Fig. 4(a)에 나타난 것처럼 길이 방향에 대한 투과 수소의 평균각은 발사 에너지가 증가함에 따라 낮은 발사 에너지에서 약간의 작은 감소 경향을 보이며, $E_0=1,600$ eV에서 48.7° 의 길이 방향 평균 투과각을 가지는 것으로 나타났다. 반면에 Fig. 4(b)에 도식화된 방위 방향에 대한 투과 수소의 평균각은 발사 에너지가 증가함에 따라 지속적으로 증가하는 것으로 나타났다. 이는 45° 로 충격된 수소 이온이 니켈 표면을 투과하는 경우에는 수직 주사의 경우와는 달리 발사 에너지에 무관하게 수직 방향성은 초기 45° 주사각을 유지하는 반면, 수평 방향 특성은 발사 에너지가 증가함에 따라 점차 증가하는 것을 의미한다. 산란 수소 이온의 경우 발사 에너지가 증가함에 따라 길이 방향에 대한 산란 평균각은 점차 감소하나, $E_0=1,600$ eV에서는 증가하는 것으로 나타나고 있다. 한편, 방위 방향에 대한 산란 수소 이온의 평균각은 상호 특정 상관 관계가 나타나지 않고 있다. 이처럼 45° 로 주사된 수소 이온

의 산란 및 투과에 대한 방향 특성은 수직 주사의 경우와 비교할 때, 투과 수소 이온의 경우에는 발사 에너지가 증가함에 따라 수직 방향 특성이 감소하였으며 수평 방향 특성은 증가하였다. 반면에 산란 수소 이온의 경우에는 수직 주사의 경우와 유사한 수직 및 수평 방향 특성을 가진 것으로 나타났다.

Fig. 5에 발사 에너지 증가에 따른 산란 및 투과 수소 이온의 길이 방향에 대한 확률 분포 및 에너지 분포를 나타내었다. $E_0=100$ eV의 충격 수소가 산란하는 경우에는 $\cos\theta$ 의 전 구간에서 넓은 산란 확률 분포를 보이며, 산란 에너지 분포 또한, 모든 구간에서 고른 분포를 나타내고 있다. 그러나 충격 수소 이온의 발사 에너지가 증가함에 따라, $\cos\theta=1$ 에 가까울수록 점차 제한적인 산란 확률 분포 및 산란 에너지 분포를 가지는 것으로 나타났다. 이러한 경향은 충격 수소의 발사 에너지가 증가할수록 분명하게 나타나, $E_0=1,600$ eV의 충격 수소 이온의 경우 $\cos\theta\approx 1$ 에서 높은 최고점을 가지는 좁은 범위의 산란 확률 분포를 갖는 것으로 나타났다. 이는 발사 에너지가 낮은 수소 이온은 니켈 표면과 다중 충돌 후 무작위로 산란하여 특정 산란각과 관계없이 고른 확률 분포 및 에너지 분포를 가지는 반면에 $E_0=1,600$ eV의 높은 발사 에너지의 수소 이온은 이원자 충돌에 따라 니켈 표면 원자와 충돌하여 $\cos\theta\approx 1$ 에서 보다 많은 산란이 일어나는 것으로 해석할 수 있다. 또한, $1,600$ eV의 수소 이온을 수직으로 주사할 때 통계적 문제로 인해 발생하는 비연속적인 산란 분포는 산란수의 증가로 인해 45° 충격 수소 이온의 경우에 감소한 것으로 나타났다. 이러한 결과는 충격 수소 이온을 45° 로 주사시키는 경우, 충격된 수소 이온이 니켈 원자와 강제형 정면 충돌된 원자의 수가 감소하는 것을 의미한다. 한편,

$E_0=100$ eV의 충격 수소가 투과하는 경우에는 $\cos \theta$ 가 0.4~0.8의 구간에서 완만한 최대값의 확률 분포 및 에너지 분포를 가진다. 초기 발사 에너지가 증가할수록 투과 수소에 대한 주사각의 영향도 증가되어, $E_0=1,600$ eV의 충격 수소는 평균 투과각이 초기 주사각과 거의 일치하는 48° 부근에서 큰 기울기의 높은 최대값을 가지는 확률 분포 및 에너지 분포를 가진다. 이는 45° 주사각의 1,600 eV의 충격 수소 이온은 니켈 표면의 (110) 방향으로 형성되어 있는 통로(channel)를 따라 투과하는 것을 의미한다.

Fig. 6에 산란 및 투과하는 수소 이온의 방위 방향각 ϕ 에 대한 확률 및 에너지 분포 곡선을 도식화하였으며, Fig. 7에 $E_0=100$ eV 및 $E_0=1,600$ eV의 발사 에너지를 가지는 충격 수소에 대한 4×4 개의 특정 궤적을 xy-평면에 대하여 도식화하였다. 방위 방향각에 대한 특정 방향성은 길이 방향각 θ 에 비하여 상대적으로 작다. 이는 수소 이온의 니켈 원자에 대한 유효 충돌 지름(effective collision diameter)이 매우 작기 때문에 기인하는 현상으로서 이러한 조건에서의 충격 수소는 니켈 원자와 충돌 후 특정 방향성을 유지하기 어렵다. 특히, 산란의 경우 $E_0=100$ eV의 낮은 발사 에너지를 가진 수소 이온은 니켈 표면과 다중 충돌 후 산란하여 무작위적인 방향성을 가지며, 높은 발사에너지의 산란 수소 역시 방위 방향에 대한 특징적인 방향성을 보이지 않는다. 한편, 투과의 경우 $E_0=1,600$ eV의 수소 이온에 대한 투과 확률 및 투과 에너지 분포에서는 (100) 방향에서 (110) 방향으로 투과하는 수소 이온의 수가 증가하는 경향을 보이고 있다. 여기에서 확률 및 에너지 분포는 수직 주사의 경우와 유사하나 (110)

방향에 대한 확률은 수직 주사에 비해 상대적으로 증가하였다. 이는 수직 주사에 비해 45° 주사각의 수소 이온은 니켈 평면에 대한 수직 운동 성분이 감소한 반면 수평 성분은 증가하여 초기 주사각에 대한 자체 방향성이 감소한 것을 의미한다.

4. 결론

본 연구에서는 MD 분자 전산 모사 기법을 이용하여 100~1,600 eV 범위의 발사 에너지를 가지는 수소 이온을 45° 로 FCC 니켈 (100) 표면에 주사시켜 충돌 후 산란 및 투과 수소 이온의 궤적 특성, 산란율 및 투과율의 변화, 그리고 산란각과 투과각에 따른 수소 이온의 운동에너지 및 확률 분포, 산란 및 투과 평균각의 변화 등을 조사하였다. $E_0=100$ eV의 낮은 발사 에너지를 갖는 수소 이온의 궤적은 1,600 eV의 높은 발사 에너지를 가지는 수소 이온보다 높은 산란율을 보이며 수직 주사에 비해 단위 충격 지역 내에 노출되는 두 번째 및 세 번째 층의 니켈 원자들과 상호 복합적 충돌 현상을 일으키는 것으로 나타났다. 수소 이온의 평균 에너지는 발사 에너지가 증가함에 따라 선형적으로 증가하였으며 산란 평균 에너지 비는 발사 에너지가 증가함에 따라 이원자 충돌에 근거한 이론식에 근접하는 것으로 나타났다. 구간별 에너지 분포함수는 낮은 에너지의 발사 수소 이온이 높은 에너지의 발사 수소 이온보다 광범위한 분포를 보이며 산란 수소의 경우가 투과 수소의 경우에 비하여 넓은 분포를 보이는 것으로 나타났다. 이는 1,600 eV의 높은 발사 에너지의 수소 이온이 니켈 원자와 충돌하여 산란하는 경우에는 강제형 동력학에 의한 이원자 충돌(binary collision) 이론으로 해석할 수 있음을 의미한다. 한편, 발사 에너지 증가에

따른 산란 수소의 길이 방향 확률 분포 및 에너지 분포는 $E_0=100$ eV인 수소 이온의 경우, 니켈 표면과 다중 충돌 후 무작위로 산란하여 특정 산란각과 관계없이 $\cos \theta$ 의 전 구간에서 넓은 산란 확률 분포를 보이며, 산란 에너지 분포 또한 모든 구간에서 고른 분포를 보이는 것으로 나타났다. $E_0=1,600$ eV의 산란 수소 이온의 경우에는 $\cos \theta=1$ 에 가까울 수록 점차 제한적인 산란 확률 분포 및 산란 에너지 분포를 가지는 것으로 나타났다. 확률 및 에너지 분포 곡선에 대한 방위 방향각 ϕ 에 대한 특정 방향성은 수소 이온의 니켈 원자에 대한 유효 충돌 지름이 매우 작기 때문에 길이 방향각 θ 에 비하여 상대적으로 작으며 $E_0=1,600$ eV에 대한 수소 이온의 투과 확률 분포는 (100) 방향에서 (110) 방향으로 증가를 보이는 것으로 나타났다.

후기

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

5. 참고문헌

1. J. Aser, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B, 89(1994), 315
2. J. B. Hudson, "Surface Science: An Introduction", Butterworth-Heinemann, Boston, (1992)
3. M. C. Yang, C. Kim, H. W. Lee and H. Kang, Surf. Sci., 357(1996), 595
4. K. Nordlund, Comp. Mat. Sci., 3(1995), 448
5. T. Ohashi, K. Miyake and K. Ohashi, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B, 121(1997), 40
6. 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)
7. M. T. Robinson, Phys. Rev., B40(1989), 10717
8. C. Kim, H. Kang and S. C. Park, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B, 95(1995), 695
9. M. Richard-Viard, C. Benazeth, P. Benoit-Cattin, P. Cafarelli, S. Abidi and J. P. Ziesel, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B, 164(2000), 575
10. S.-H. Suh and W.-K. Min, J. Korean Hydrogen Energy Soc., 11(2000), 127
11. M. P. Allen and D. J. Tildesley, "Computer Simulation of Liquids", Clarendon Press, Oxford, (1987)
12. R. Smith (ed.), "Atomic and Ion Collisions in Solids and at Surfaces", Cambridge Univ. Press, (1997)
13. W. D. Eckstein, "Computer Simulation of Ion-Solid Interactions", Springer-Verlag, Berlin, (1991)

Table 1. System characteristics and MD simulation results for the normal¹⁰⁾ and the 45° incident angle.

E_0 [eV]	incident angle[°]	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	90	0.3705	90.6	94.5	47.1	24.9	60.1	24.2
	45	0.5777	92.1	92.8	50.4	26.8	53.8	22.5
200	90	0.1461	186.4	196.1	42.7	25.4	69.9	24.1
	45	0.4050	186.9	192.1	46.2	26.8	51.0	25.1
400	90	0.0683	375.9	397.1	39.3	24.5	76.6	24.2
	45	0.2350	380.0	392.3	38.9	26.0	50.2	27.3
800	90	0.0239	759.5	798.2	38.2	23.3	80.9	23.1
	45	0.1178	766.8	792.7	33.1	23.2	50.4	30.5
1,600	90	0.0094	1528.2	1598.7	31.6	26.2	84.0	29.5
	45	0.0480	1532.2	1593.5	36.1	26.0	48.7	33.4

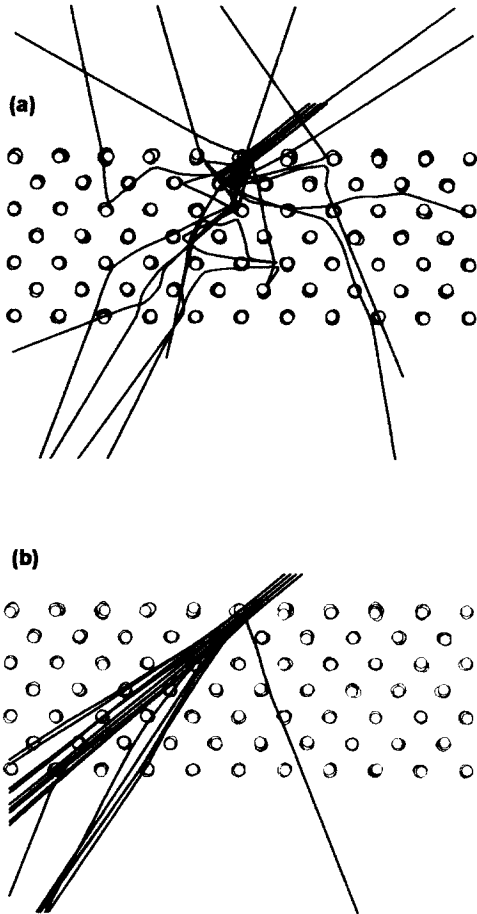


Fig. 1. Trajectory visualization for hydrogen ion bombardment on Ni (100) surface on the xz -plane; (a) $E_o = 100$ eV and (b) $E_o = 1,600$ eV.

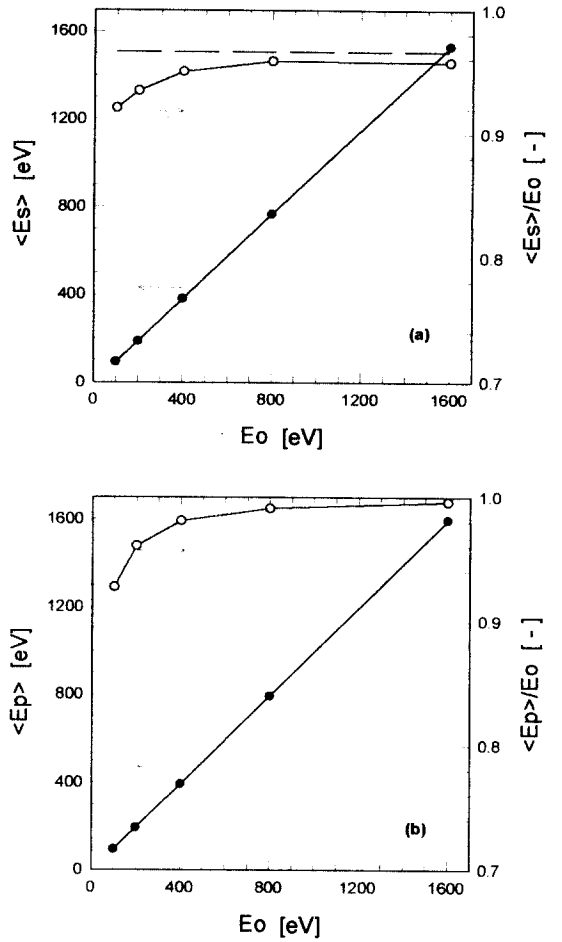


Fig. 2. Mean energies as a function of E_o ; (a) scattering mean energies and (b) penetration mean energies. The long-dashed line in Fig. 2(a) represents the binary collision approximation.

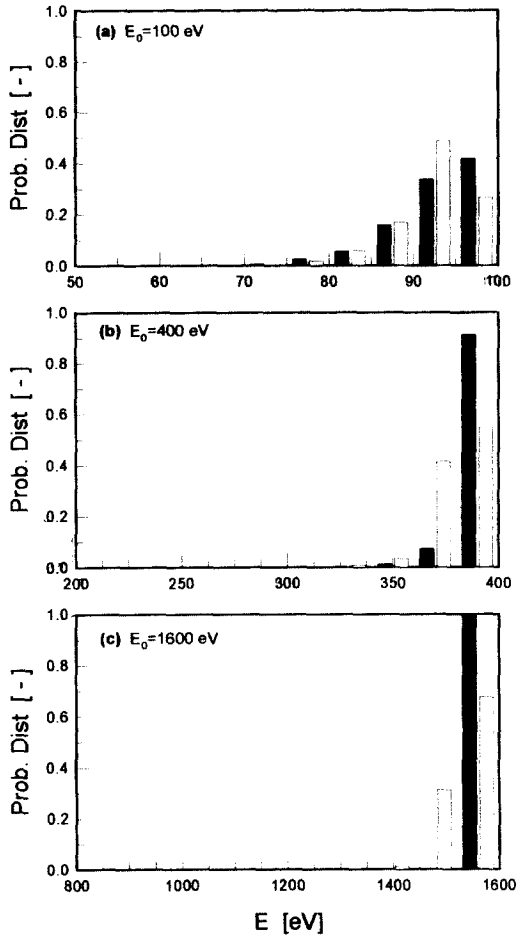


Fig. 3. Probability distributions as a function of E ; (a) $E_0=100$ eV, (b) $E_0=400$ eV and (c) $E_0=1,600$ eV. The open and the solid bars correspond to scattering and penetration, respectively.

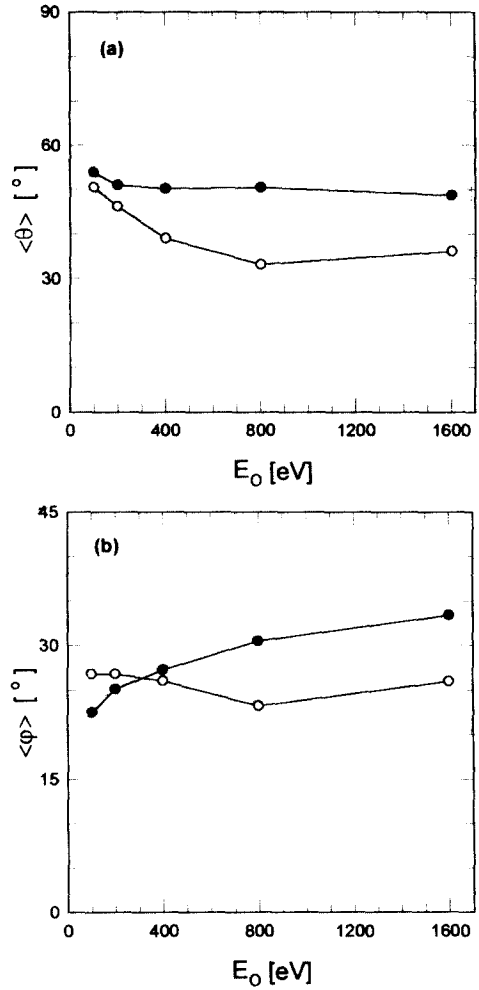


Fig. 4. Mean angles as a function of E_0 ; (a) longitudinal direction and (b) azimuthal direction. The open and the solid circles correspond to scattering and penetration, respectively.

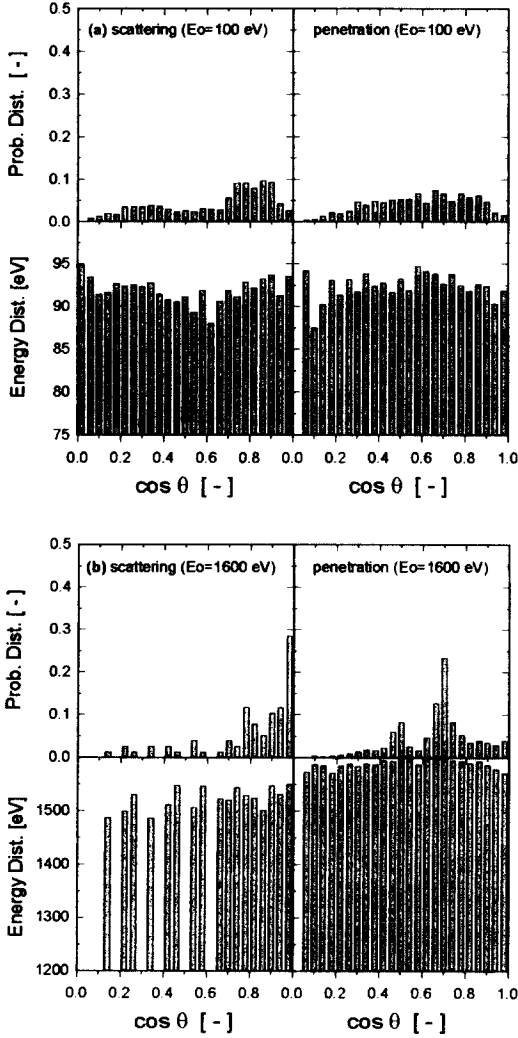


Fig. 5. Probability and energy distributions for scattering and penetration as a function of $\cos \theta$; (a) $E_0 = 100$ eV and (b) $E_0 = 1,600$ eV.

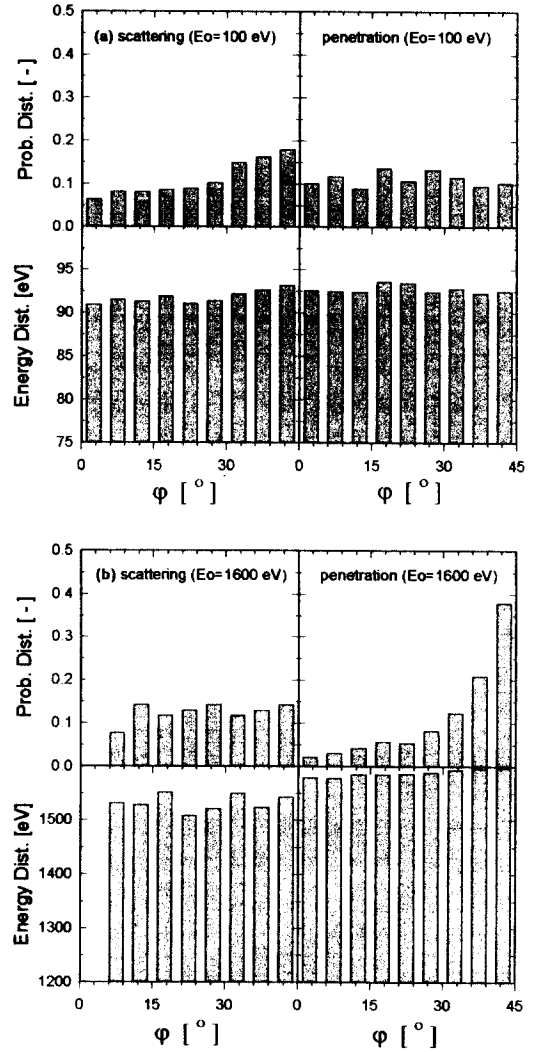


Fig. 6. Probability and energy distributions for scattering and penetration as a function of ϕ ; (a) $E_0 = 100$ eV and (b) $E_0 = 1,600$ eV.

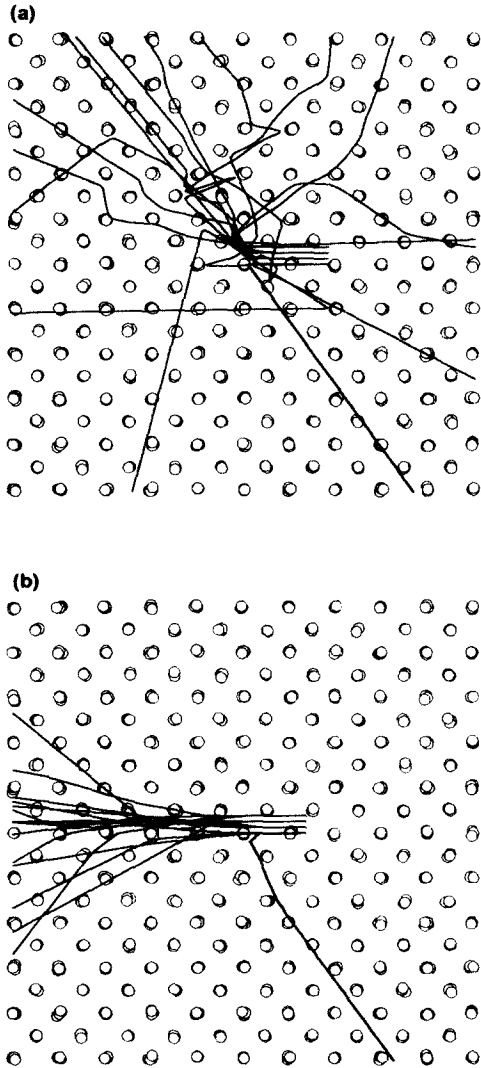


Fig. 7. Trajectory visualization for hydrogen ion bombardment on Ni (100) surface on the xy-plane; (a) $E_0 = 100$ eV and (b) $E_0 = 1,600$ eV.