

## Cu(100) 표면에 충격된 불활성 이온의 산란 특성에 관한 분자 전산 연구

민웅기 · 박상훈 · 서승혁<sup>†</sup>

계명대학교 공과대학 화학공학과  
704-701 대구시 달서구 신당동 1000  
(2002년 8월 26일 접수, 2002년 12월 18일 채택)

## Molecular Simulation Studies of Scattering Properties for Noble Gas Ions Impacted on Cu(100) Surfaces

Woong-Ki Min, Sang-Hoon Park and Soong-Hyuck Suh<sup>†</sup>

Department of Chemical Engineering, Keimyung University, 1000 Sindang-dong, Dalseo-gu, Daegu 704-701, Korea  
(Received 26 August 2002; accepted 18 December 2002)

### 요 약

본 연구에서는 초기 충격에너지 100 eV에서 1,600 eV 범위의 He, Ne, Ar, Kr, Xe 등을 포함한 다양한 충돌 원자 이온을 Cu(100) 표면에 수직으로 주사시켜 산란 특성을 조사하는 분자 동력학적 전산 모의실험을 수행하여 충돌 이온의 에너지 및 질량 변화에 따른 산란 이온의 에너지 변화, 방향성에 관한 분포 특성 등을 분자 차원에서 고찰하였다. 상대 질량이 작은 He 과 Ne 이온들의 경우 주사 에너지에 대한 평균 산란 에너지비는 이원자 강체 충돌 효과에 근거한 이론식에 근접하는 것으로 나타났다. 반면, 상대 질량이 큰 Ar, Kr, Xe 이온들의 경우 초기 충돌 에너지가 작을 때 산란 특성은 첫 번째 및 두 번째 층의 Cu 원자와 다중 충돌 효과가 주된 충돌 특성임을 보였다. 초기 충돌 에너지 및 충격 이온의 질량이 증가할수록 산란 에너지 및 확률 분포는 보다 좁은 것으로 나타났다. 한편, 길이와 방향에 따른 방향성 분포 특성은 상대 질량이 작은 경우 무관한 분포 특성을 나타내었으나 상대 질량이 큰 경우 길이 방향에 대하여 제한적인 방향성을 나타내었다.

**Abstract** – In this study, molecular dynamics simulations have been carried out to investigate the scattering properties of impacted ions on Cu(100) surfaces with the normal incident angle for various noble gas atoms including He, Ne, Ar, Kr and Xe. The initial kinetic energy of the projectile atoms was ranged from 100 eV to 1,600 eV. The simulation results are focused upon the scattering energy variations and the angle dependencies according to the incident energy and the projectile mass. For light atoms(He and Ne), the ratio of the scattered to the incident projectile energy was in a good agreement with the theoretical prediction based on the binary collision approximation. However, in the low energy regime, the scattering trajectories of heavy atoms(Ar, Kr and Xe) were characterized by the multiple collisions with the top and the second layer surfaces. With increasing the initial kinetic energy and the projectile mass, the scattering energy and the probability distribution were shown to be sharp and narrow. The angle dependencies of both longitudinal and azimuthal directions were not significant for light projectiles, while the longitudinal angle dependencies on the scattering distribution were indicated for heavy projectiles.

Key words: Ion-Surface Collision, Scattering Properties, Collisional Angle Dependency, Molecular Dynamics Simulation

### 1. 서 론

높은 에너지의 충격 이온(projectile ion)을 금속 재료의 표면 구성 원자(target atom)에 충돌시키는 경우, 충격 이온은 원자들과의 상호 작용에 의해 자신의 에너지를 전달하는 상대 원자에 전달한 후 재료 표면 위로 산란하거나 재료의 격자 사이로 투과하게 된다. 한편, 충돌로 인해 대부분의 에너지를 잃은 충격 이온은 재료의 내부에 장시간 체류하는 trapping 현상을 보이게 된다. 일반적으로 이와 같은 이온 충격 실험에

있어서 충격 이온과 재료 구성 원자의 충돌 특성은 강체형 동력학에 기초한 이체 충돌(binary collision)에 의해 설명될 수 있으며, 이들 원자들의 궤적은 두 원자 사이의 상호 작용으로 기술될 수 있다[1-3]. 이처럼 충격 이온과 표면 구성 원자들의 에너지 분포 특성 및 방향성을 조사하는 이온 충격 실험들은 고체내의 물질 연구를 비롯해 반도체 표면 개질, 고분자의 표면 처리, 금속의 표면 분석 등에 사용되는 이온 산란법의 기초로서 현재 산업적인 측면에 다양하게 응용되고 있다[4-6].

충격 이온과 표적 원자들의 열적 및 동적 현상들을 규명하는 이온 충격 실험은 충격 이온의 에너지 및 충격 방향, 금속 표면의 밀도 등과 같은 복합 인자를 비롯해, 충격 이온과 고체 표면 원자의 인력적 상호 관계 등을 분자 차원에서 고려하여야 한다. 이에 따라 최근에는 컴퓨터의

<sup>†</sup>To whom correspondence should be addressed.  
E-mail: shsuh@kmu.ac.kr

성능 향상과 더불어 실제 실험에서 수반되는 어려움을 극복하기 위해 분자 전산 모사(molecular simulation) 방법에 의한 사고 실험(thought experiment)이 다양하게 수행되고 있다. 이들 전산 모사 방법들 중에 이체 충돌 이론에 기초를 둔 Monte Carlo(MC) 전산 모사 방법[7]의 MARLOWE와 TRIM 코드는 Robinson과 Torrens[8]와 Ziegler 등[9]에 의해 개발되어 현재 다양한 결정 표면을 대상으로 하는 이온 충격 모의실험에 널리 사용되고 있다. 그러나 이체 충돌 이론에 기초한 MC 방법의 MARLOWE와 TRIM 코드는 충격 에너지가 낮아지거나 충격 이온과 표면 구성 원자간의 질량비가 큰 경우, 충돌 입자간의 다중 충돌 현상을 정확히 표현할 수 없다는 단점이 있다. 또한 linear-cascade 영역 밖에서 일어나는 표면 구성 원자들의 스퍼터링(sputtering) 및 클러스터(cluster) 형성 등과 관련된 현상들을 정확히 표현할 수 없다는 단점을 가지고 있다[10]. 반면에 Boltzmann의 시간 평균(time average) 개념 하에서 원자 또는 분자들의 운동 궤적을 Newton의 고전 동역학으로부터 직접 계산하는 molecular dynamics(MD) 전산 모사 방법[7]은 MC 방법에서 구현할 수 없는 시간 지배 특성을 포함한 원자들의 동적 상태를 직접 재현할 수 있다는 장점이 있다.

Nordlund와 Kuronen[11]은 100 keV 이하의 에너지 범위에서 Si 이온을 Si 표면에 충격시키는 MD 모의실험을 수행하여 이체 충돌 이론을 기초로 하는 DSACRY 및 TRIM 코드의 결과값과 상호 비교하여 깊이 측면도(depth profile)에 차이를 보인다는 사실을 보고하였다. Ohashia 등[12]은 낮은 에너지 조건에서 중성 원자를 Al 필름에 충격시키는 MD 전산 모사를 실시하여 충격 에너지 및 방향에 따른 충돌 원자들의 궤적을 모사하여 특정 운동 방향성을 보고하였다. 또한 Lahaye 등[13]은 0.01-100 eV의 에너지 영역에서 Ag(111) 표면에 충돌한 Ar 이온의 산란 현상에 관한 연구를 양자 역학적 영향을 고려한 MD 모의실험을 통해 재현하여, Ag 표면의 온도 및 다중 충돌 효과 등에 따른 Ar 이온의 산란 특성을 보고한 바 있다. Kim 등[14]은 10-500 eV의 He, Ne, Ar, Kr, Xe 등의 불활성 이온들을 Ni(100) 표면에 충격시키는 MD 전산 모사를 실시하여, 매우 낮은 에너지 조건에서 충격 이온의 질량에 따른 산란 및 스퍼터링 원자들의 에너지 분포와 방향성을 조사한 바 있다. 이들의 연구에 의하면 낮은 에너지 영역에서 질량이 무거운 Kr 및 Xe 충격 이온은 첫 번째 층의 Ni 원자와 다중 충돌 현상이 지배적이며, 질량이 가벼운 He 및 Ne 충격 이온들의 경우 충격에너지가 증가할수록 이체 충돌 현상이 충격 이온의 산란 및 표면 원자들의 스퍼터링 현상에 지배적인 것으로 보고하였다.

한편, 본 연구자 등[15]은 100-1,600 eV 범위의 충격에너지를 갖는 수소 이온을 Ni(100) 표면에 수직 및 45°로 충돌시키는 MD 모의실험을 수행하여 충격 방향 및 에너지에 따른 Ni 표면충돌의 운동에너지 변화 특성, 산란 및 투과 수소 이온의 궤적 특성, 에너지 분포 및 방향성에 관한 특성 등을 조사한 바 있다. 충격 이온이 수소 이온인 경우 니켈 원자와의 질량비가 매우 작다. 따라서 충격 수소 이온은 에너지에 따라 니켈 격자 사이를 투과할 확률이 다른 이온에 비해 높기 때문에, 이에 따른 수소 이온의 투과 및 산란 운동 특성은 다른 충격 이온과 비교해 특이 현상을 수반하였다. 본 연구 논문에서는 100-1,600 eV의 높은 충격 에너지를 가지는 He, Ne, Ar, Kr, Xe 이온을 Cu(100) 표면에 충격시키는 MD 모의실험으로서 충격 이온과 표적 원자의 질량비 및 충격에너지 등에 따른 산란 이온의 에너지 분포도, 산란각의 분포 등, 에너지 및 방향성에 지배되는 통계 열역학적 특성값들을 분자 차원에서 체계적으로 측정하였다. 본 전산 모의실험 결과는 낮은 충격에너지 영역에서 수행된 기존의 연구 논문들과 비교 분석함으로써 높은 에너지 영역에서 충격 이온의 미시적 동적 특성을 해석할 수 있을 뿐 아니라, 충격 이온의 질량에 따른 산란 특성 규명에 확대 적용될 수 있을 것이다.

## 2. 전산 모사 방법

MD 분자 전산 모사에서 분자들의 거동은 단지 분자 사이의 에너지

포텐셜에 의해 계산된다. 본 연구에서는 충격 이온(He, Ne, Ar, Kr, Xe)과 구리 원자의 상호 에너지 포텐셜은 척력적 Screened-Colomb 형태의 Ziegler-Biersack-Littmark(ZBL) 포텐셜로 주어졌다.

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

여기에서  $Z_1$ 과  $Z_2$ 는 충격 이온과 표면을 구성하는 구리 원자의 원자 번호이며,  $r_{ij}$ 는 충격 이온과 구리 원자 사이의 상대 거리,  $e$ 와  $\epsilon_0$ 는 각각 전자의 전하량 및 진공 상태의 유전율을 의미한다. 전자 분포에 따른 에너지 보정항을 포함하는 ZBL 포텐셜 식 (1)에서  $b_k$  및  $c_k$ 는 보편 상수(universal constant)로서 문헌에 나타난 바와 같으며 [1, 2], 전기적 차폐 길이(screened length)  $a_0$ 는 Bohr의 수소 원자 반경  $a_B$ 를 포함한 다음 식으로 주어진다.

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

또한 표면의 구리-구리 원자의 자체 에너지 포텐셜은 두 원자의 상대 거리에 따라 ZBL 형태의 척력적 포텐셜, Morse 형태의 인력적 포텐셜 그리고 이 두 포텐셜을 먹금수 형태의 spline 포텐셜로부터 계산되었다. 두 원자의 상대 거리  $R_a=1.5 \text{ \AA}$  이내의 구간에서는 위의 식 (1)에서 나타난 ZBL 형태의 척력적 에너지 포텐셜로 계산되었으며, 상대 거리  $R_b=2.1 \text{ \AA}$  이상의 구간에서는 아래와 같은 Morse 형태의 인력적 에너지 포텐셜이 적용되었다.

$$V^{morse}(r_{ij}) = \text{Dexp}(-2\alpha(r_{ij}-r_0)) - 2\text{Dexp}(-\alpha(r_{ij}-r_0)) \quad (3)$$

여기에서  $D$ 와  $r_0$ 는 각각 이합체의 에너지와 평형 상태에서 원자들의 변위를 나타내며,  $\alpha$ 는 벌크 탄성률로부터 계산되었다. 구리 원자의 경우 각각  $D=0.3429 \text{ eV}$ ,  $r_0=2.866 \text{ \AA}$ ,  $\alpha=1.3588 \text{ \AA}^{-1}$ 로 주어진다. 한편 상대 거리가  $1.5\text{-}2.1 \text{ \AA}$  사이의 구간에서 구리 원자들 사이의 에너지 포텐셜은 다음과 같은 먹금수 형태의 spline 함수로 주어졌다.

$$V^{spline}(r_{ij}) = a_1 + a_2 r_{ij} + a_3 r_{ij}^2 + a_4 r_{ij}^3 \quad (4)$$

위의 spline포텐셜 함수에서 변수  $a_1, a_2, a_3, a_4$ 는 각각  $340.68 \text{ eV}$ ,  $-394.50 \text{ eV/\AA}$ ,  $149.29 \text{ eV/\AA}^2$ ,  $-18.559 \text{ eV/\AA}^3$ 의 값을 가진다. 이처럼 일정 구간에서 ZBL 포텐셜과 Morse 포텐셜을 조합하는 spline 형태의 포텐셜은 이온 충격 실험에 관한 분자 전산 모사 방법에 널리 사용되고 있다[16, 17].

충격 이온과 구리 원자의 충돌 및 구리 원자 상호 간의 충돌이 진행됨에 따라 원자들의 궤적은 Verlet 알고리즘을 이용하여 Newton의 운동 방정식을 일정 시간 간격에 따라 반복 적분하여 계산할 수 있다[7, 18]. 또한 충격 이온과 표적 원자는 충돌 후 운동량이 완전 보존되는 탄성 충돌(elastic collision)을 하며, 원자 당 유효 포텐셜 반경( $R_c$ )은 구리 원자의 반경 분포 함수(radial distribution function)를 고려하여  $4.0 \text{ \AA}$ 로 설정하였다. 한편, 원자들의 궤적을 모사하는데 소요되는 전산 시간을 최적화하기 위해 매 10회 시간 간격마다 원자 상호간의 neighbor list를 재작성한 후 충격 이온과 충격에너지에 따라 40-350 femto second(fs)까지 원자들의 궤적을 계산하였다.

초기 충격 이온이 충돌되는 구리 표적은  $3.6147 \text{ \AA}$ 의 격자 상수(lattice constant)를 가지는 면심입방체의 격자 구조로서 xy-평면에 대해 각각  $19 \times 19$ 개의 구리 원자를 배열한 후 이를 z-축 방향인 수직으로 6층을 배열하여, 총 2,166개의 구리 원자로 구성된 완전 결정 상태로 구현하였다. 이는 충격 이온의 크기 및 에너지에 따라 Cu 표면에 수직으로 충격된 충격 이온이 Cu 원자와 충돌한 후 입방체의 측면으로 빠져나가는 효과(side effect)를 최소한으로 줄일 수 있는 충분한 크기이다. 한편 100-1,600 eV의 충격에너지 범위에서 충격 이온의 초기 위치는 구리 입방체의 xy-평면으로부터 수직인 z-축 상향 방향으로  $3.5 \text{ \AA}$ 의 높이에 위치

하며, 충격 이온의 충격 방향은 구리 입방체의  $xy$ -평면에 수직으로 충돌되도록 설정하였다. 또한 입사각과 결정 구조의 대칭성을 고려하여  $1.331 \times 1.331 \text{ \AA}^2$ 의 단위 충격 지역(reduced impact zone)[19]을 설정하고 각각의 조건에서  $25 \times 25$ 번의 충돌 실험을 수행하였다.

### 3. 결과 및 고찰

이체 충돌에 관한 운동학적 이론식에 의하면 완전 탄성 충돌 조건에서 표적 원자와 충돌한 충격 이온의 운동에너지  $E_1$ 는 다음 식으로 표현된다.

$$E_1 = E_0 \left( \frac{M_1}{M_1 + M_2} \right)^2 \left( \cos \phi \pm \left[ \left( \frac{M_2}{M_1} \right)^2 - \sin^2 \phi \right]^{1/2} \right)^2 \quad (5)$$

여기서  $E_0$  및  $E_1$ 는 각각 충격 이온의 초기 운동에너지 및 충돌 후 나타내는 운동에너지를 의미한다. 또한  $M_1$ 과  $M_2$ 는 각각 충격 이온과 표적 원자의 질량을 나타내며,  $\phi$ 는 충돌 반사각을 나타낸다. 충격 이온과 표적 구성 원자와의 질량비가 증가할수록 이체 충돌에 근접한 최대 충돌 반사각  $\phi_{\max}$ 는 아래의 식으로부터 계산된 값보다 작다.

$$\phi_{\max} = \sin^{-1} \left( \frac{M_2}{M_1} \right) \quad (6)$$

한편, 식 (5)의 오른쪽 항에 포함된  $\pm$ 부호는 상대 질량이 작은 충격 이온의 경우, 즉  $M_2/M_1 > 1$ 인 경우에만 양의 부호를 가진다. 따라서  $\phi = 90^\circ$ 로 주어지는 backscattering 조건에서 충격 이온의 충돌 후 운동에너지  $E_p$ 는 다음과 같이 계산될 수 있다.

$$E_p = E_0 \frac{M_2 - M_1}{M_2 + M_1} \quad (7)$$

Fig. 1에  $E_0 = 100\text{--}1,600 \text{ eV}$ 의 범위에서 산란 이온의 평균 에너지 비를  $E_s$ 에 대한 로그 함수로 나타내었다. 상대 질량이 작은 He과 Ne 이온의 경우  $E_0$ 의 값이 증가함에 따라 평균 산란에너지 비는 점차 증가하여 이체 충돌식 (7)로부터 계산된 값에 접근하는 것으로 나타났다. 이는 Suh와 Min[15]이 실시한  $E_0 = 100\text{--}1,600 \text{ eV}$  범위의 수소 이온이 Ni(100) 표

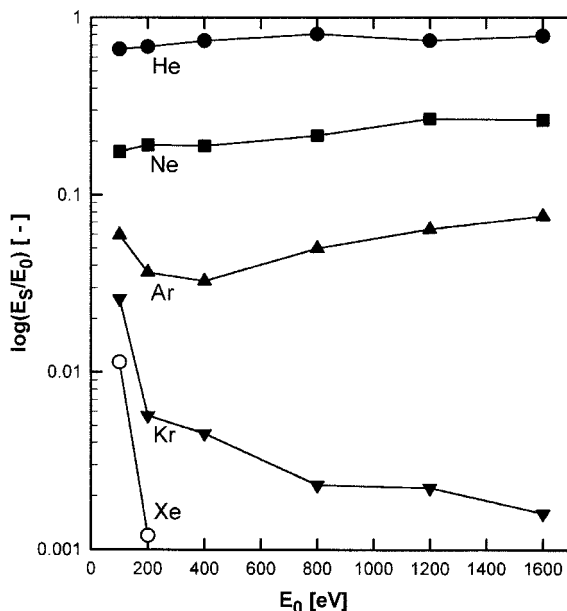


Fig. 1. The mean scattered energy of various projectile ions as a function of  $\langle E_0 \rangle$ .

면에 충격될 때 나타나는 수소 이온의 산란 특성과 유사한 결과로서 낮은 충격에너지 조건에서 상대 질량이 작은 He과 Ne 이온의 산란 현상은 표적 원자와의 다중 충돌에 의한 영향이 크며, 높은 충격에너지에서 He과 Ne 이온의 산란 현상은 이원자 강체구 충돌 효과가 주된 요인임을 보여주고 있다. Lee와 Kang[20]은 He, Ne, Ar, Xe의 불활성 기체 이온을 Si 표면에 충돌시키는 실험을 수행한 바 있다. 이들은  $E_0 = 20\text{--}300 \text{ eV}$ 의 범위에서 단일 이체 충돌 산란(single binary scattering, SS), 유사 단일 충돌 산란(quasi-single binary scattering, QSS), 연속적인 이체 충돌 산란(successive binary scattering, DS) 및 다중 충돌 등으로 충격에너지에 따른 이온들의 산란 현상을 설명하였다. 이들의 연구 결과에 따르면  $E_0 < 50 \text{ eV}$  영역에서 비교적 상대 질량이 작은 He과 Ne 이온의 평균 산란에너지 비는 DS의 영향으로 인해 SS 식으로부터 계산된 값보다 큰 것으로 나타나 낮은 충격에너지 영역에서 He 및 Ne 이온의 산란 현상을 이체 충돌만으로 해석하는 것은 불가능한 것으로 판단하였다. 또한 초기 충격 에너지  $E_0$ 의 값이 증가할수록 He 및 Ne의 평균 에너지 비는 선형적으로 감소하여  $E_0 = 300 \text{ eV}$ 에서는 QSS 및 SS 이론에 근거한 값에 접근하는 것으로 보고하였다.

한편, Fig. 1에 나타낸 바와 같이  $E_0 = 100\text{--}200 \text{ eV}$ 의 구간에서 He 및 Ne 이온의 평균 산란에너지 비는 증가하는 추세를 보이는 반면 Ar, Kr, Xe 이온의 평균 산란에너지 비는 큰 폭으로 감소하는 것으로 나타났다. 특히 상대 질량이 증가할수록 평균 산란에너지의 감소 폭은 큰 것으로 나타났다. 이러한 결과는  $E_0 = 100\text{--}200 \text{ eV}$ 의 범위에서 상대 질량이 작은 He 및 Ne 이온은 표면의 Cu 원자와의 척력적 포텐셜의 영향이 매우 크며, 상대 질량이 큰 충격 이온일수록 Cu 표면의 첫 번째 및 두 번째 층 원자와의 다중 충돌 효과로 인해 표면의 Cu 원자로 전달되는 에너지의 양이 증가함으로써 충격 이온의 평균 산란에너지가 감소함을 의미한다. 한편  $E_0 = 200 \text{ eV}$  이상의 높은 충격에너지 범위에서 Ar 이온의 평균 산란에너지 비는 점차 감소 후 증가 추세를 보였으며, Kr 이온의 평균 산란에너지 비는 충격에너지가 증가할수록 선형적으로 감소하는 경향을 나타내었다. 그러나  $E_0 = 200 \text{ eV}$  이상에서 Xe 이온의 경우 산란 현상이 일어나지 않는 것으로 나타났다.  $E_0 = 20\text{--}300 \text{ eV}$  범위에서 수행한 Lee와 Kang[20]의 연구 결과에 의하면 낮은 충격에너지  $E_0 = 20 \text{ eV}$  조건에서 Si(100)표면에 충돌된 Ar과 Xe 이온의 평균 산란에너지 비는 0.9 이상으로 Ar과 Xe 이온은 대부분의 초기 충격에너지가 그대로 유지되는 것으로 보고하였다. 또한 충격에너지가 증가할수록 Ar 이온의 평균 산란에너지 비는 점차 감소하여  $E_0 = 120 \text{ eV}$  이상에서는 0.2 이하로 감소하며 Xe 이온은  $E_0 = 150 \text{ eV}$  이상에서 산란 현상이 일어나지 않는 것으로 보고하였다. 이러한 사실들은 본 연구에서의 Kr 및 Xe 이온의 평균 산란에너지 비에 대한 곡선과 상호 유사한 경향을 나타낸다. 특히  $E_0 = 50 \text{ eV}$  이하에서 상대 질량이 큰 Ar 및 Xe 이온은 식 (6)에 의한 제한적인 산란각으로 인해 He 및 Ne 이온에 비해 큰 평균 산란에너지 비를 가지는 것으로 보고하였다[20]. 그러나 본 연구에서는  $E_0 = 100\text{--}1,600 \text{ eV}$ 의 범위에서 상대 질량이 작은 충격 이온일수록 평균 산란에너지의 비는 큰 것으로 나타났다. 이처럼 초기 충격에너지에 따라 충격 이온의 평균 산란에너지 비에 차이를 보이는 이유는 충격 이온과 표면 원자와의 질량 비 및 충돌 면적, 충격에너지에 따른 이온의 중성화도, 표적 원자의 구조에 따른 산란 메커니즘의 차이 등에 기인한다.

Fig. 2에  $E_0 = 200 \text{ eV}$ ,  $400 \text{ eV}$ ,  $1,600 \text{ eV}$ 의 조건에서 He과 Kr 이온의 산란 확률 분포를 산란에너지  $E_s$ 에 대한 초기 충격에너지  $E_0$ 의 비로 나타내었다. Fig. 2에 모든 충격 이온에 대한 산란 확률 분포를 나타내지는 않았지만 충격 이온과 표적 원자의 질량비( $M_1/M_2$ )에 따라 산란 확률 분포에 큰 차이를 보이는 것으로 나타났다. 일반적으로  $E_0 = 100\text{--}1,600 \text{ eV}$  범위에서는 낮은 충격에너지 조건에서의 산란 확률 분포가 높은 충격에너지 조건에서의 산란 확률 분포에 비해 넓은 것으로 나타났다. 또한 충격 이온과 표적 원자의 질량비가 증가할수록 산란 확률 분포는 좁은

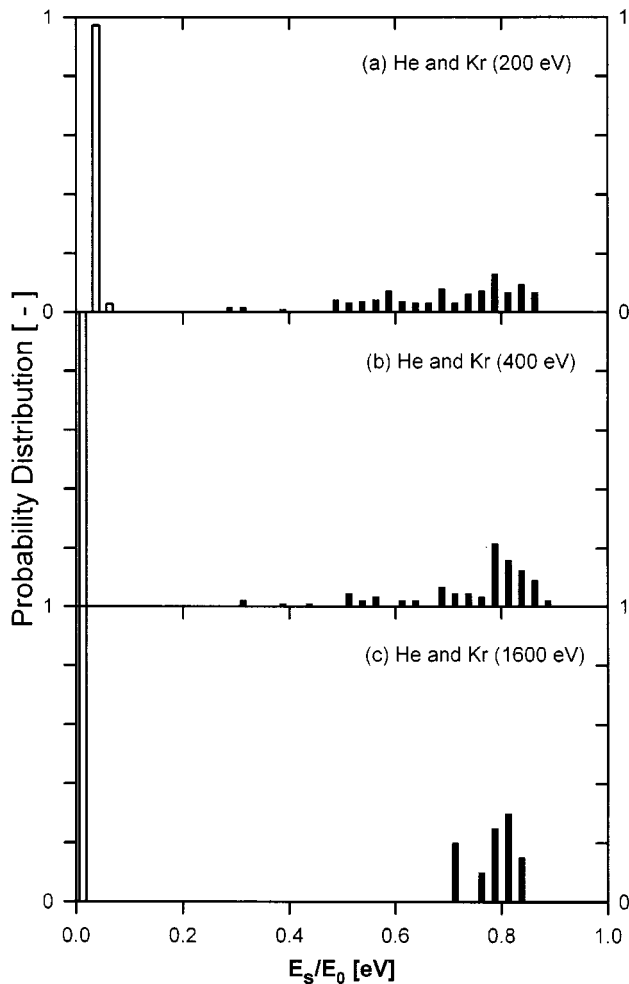


Fig. 2. The energy probability distribution of scattered ions as a function of  $E_s/E_0$ : (a)  $E_0=200$  eV, (b)  $E_0=400$  eV and (c)  $E_0=1,600$  eV. The open and the solid bars correspond to Kr and He projectile ions, respectively.

것으로 나타났다. Fig. 2에 도식화한 He과 Kr 이온의 Cu 원자에 대한 질량비는 각각 0.063, 1.319로서 상호 큰 차이를 가진다. 이에 따라 상대 질량과 충격에너지의 변화에 대한 He 및 Kr 이온의 산란 확률 분포도에서는 다음과 같은 특성이 관찰되었다.  $E_0=100$ -1,600 eV의 범위에서 He 이온의 산란 확률 분포는 Kr 이온에 비해 넓은 것으로 나타났으며, 충돌로 인해 Cu 표면으로 전달되는 에너지의 양은 Kr 이온이 He 이온에 비해 큰 것으로 나타났다.  $E_0=200$  eV의 조건에서 넓은 산란 확률 분포를 가지는 He 이온은  $E_0$ 의 값이 증가함에 따라 점차 높은 에너지 구간에서 제한적인 산란 확률 분포를 보이는 것으로 나타났다. 또한  $E_0=400$  eV 이상에서 He 이온의 산란 확률 분포는 이체 충돌식으로부터 계산된 에너지비  $\langle E_s \rangle/E_0=0.88$ 에 근접한 지점에서 최대의 확률 분포를 가지는 것으로 나타났다. 실제로  $E_0=400$  eV 및 1,600 eV에서 He 이온은  $\langle E_s \rangle/E_0=0.79, 0.81$ 에서 각각 최대 확률 분포를 보이는 것으로 나타났다. 특히 Fig. 2(a)에 도식화한  $E_0=200$  eV 조건에서 He 이온의 산란 확률 분포도에 나타나는 낮은 에너지 구간의 긴 꼬리형 분포는 Cu 원자와의 다중 충돌 효과 및 Cu 표면 자체의 굴곡 현상(corrugation effect)에 의한 것으로서, 질량이 작은 He 이온이 Kr 이온에 비해 Cu 표면의 굴곡 현상에 보다 큰 영향을 받는다는 사실을 내포하고 있다. 이는 Lee와 Kang[20]이 수행한  $E_0=30$  eV 및 300 eV에서 Si(100) 표면에 충돌된 Ne 이온의 산란 현상에 대한 TOF 분석 및 산란 확률 분포도와 상호 유

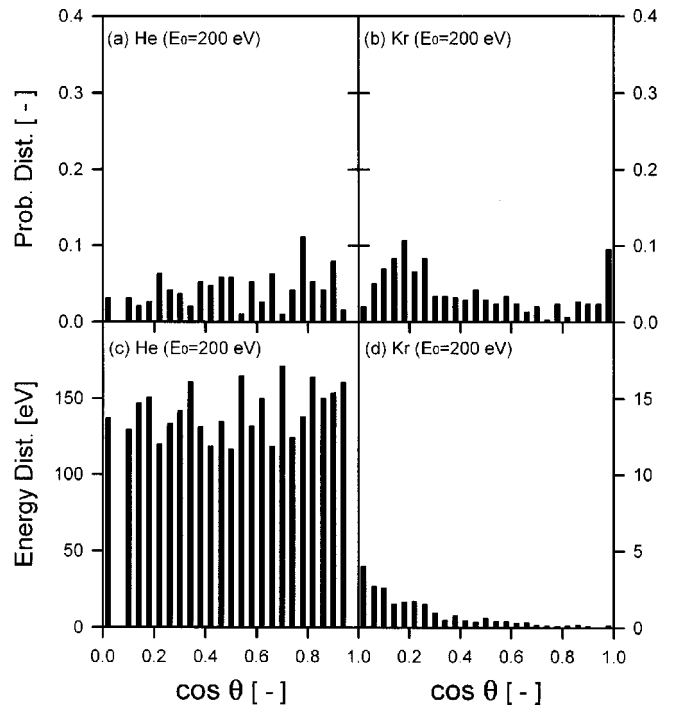


Fig. 3. The probability and the energy distributions for scattered ions as a function of  $\cos \theta$  ( $E_0=200$  eV). The left and the right columns correspond to He and Kr projectile ions, respectively.

사한 결과이다. 이들의 연구 결과에 따르면 낮은 충격에너지의 Ne 이온은 DS에 의한 산란이 대부분이며, 충격에너지가 증가함에 따라 Ne 이온의 산란은 SS에 의한 산란으로 이동하는 것으로 보고하였다. 반면에 이와 동일 조건에서 Kr 이온은 상대 질량이 작은 He 이온에 비해 낮은 에너지 구간에서 보다 제한적인 산란 확률 분포를 나타내었다. 이는 질량이 가벼운 He 충격 이온의 경우 충격에너지가 증가할수록 Cu 표면의 첫 번째 층과 다중 충돌에 의한 산란에서 점차 이체 충돌에 의한 산란 효과로 전환되며, 질량이 무거운 Kr 충격 이온의 경우 초기 충격에너지가 증가할수록 두 번째 층 이하 Cu 원자와의 충돌 가능성 및 Cu 표면내 Kr 이온의 투과 및 trapping 현상에 의한 산란 회수의 감소를 의미한다.

충격 이온의 산란각은 각각 길이(longitudinal) 방향과 방위(azimuthal) 방향에 따라  $\theta$  및  $\psi$ 로 구분하였다. 길이 방향 산란각  $\theta$ 는 Cu 표면의 xy-평면으로부터 직각인 z-축 방향으로 측정하여  $0-90^\circ$ 의 산란 범위를 가지며, 방위 방향 산란각인  $\psi$ 는 FCC(100) 방향에서(110) 방향으로 측정하여  $0-45^\circ$ 의 산란 범위를 가진다. 이에 따라 Fig. 3에  $E_0=200$  eV의 He 및 Kr 이온의 길이 방향 산란각에 대한 산란 확률 분포 및 산란에너지 분포를 각각 나타내었다. 그림에 나타난 길이 방향 확률 분포 및 에너지 분포는  $\cos \theta=[0, 1]$  구간에 대해 25개의 동일 구간으로 나누었다. Fig. 3(a) 및 Fig. 3(b)에 나타난  $E_0=200$  eV의 길이 방향 확률 분포도에서는 He 이온의 경우 길이 방향인  $\cos \theta$ 에 대해 특정 방향성과 무관하게 넓은 길이 방향성 분포를 보이는 것으로 나타났다. 이는 충격 이온의 표면 구성 원자에 대한 유효 충돌 지름 (effective collision diameter)의 차이로 설명될 수 있다. 즉, 유효 충돌 지름이 작은 He 이온은 Cu 원자와 무작위적 충돌 반사를 일으킬 확률이 Kr 및 Xe 이온보다 높다는 것을 의미한다. 또한 Kr 이온의 경우 Cu 원자와 충돌한 후 z-축 방향으로 산란하는 확률이 He 이온에 비해 높게 나타났으며,  $\cos \theta$ 에 대해 넓은 길이 방향성 분포를 보이는 것으로 나타났다. 이와 유사한 실험으로서 Kim과 Kang[14]은  $E_0=10$  eV에서  $45^\circ$ 로 Ni(100) 표면에 충격된 불활성 기체 이온들의 길이 방향 산란 확률 분포를 도식화한 바 있

다. 이들의 연구 결과에 따르면 상대 질량이 작은 He 이온의 산란각은 충격 입사각에 매우 가까우며 넓은 산란 확률 분포를 나타내는 것으로 보고하였다. 또한 Kr 및 Xe 이온의 산란각은 충격 입사각보다 큰 값을 가지며, 산란 확률 분포는 He 이온에 비해 대단히 좁은 것으로 보고하였다. 본 연구 결과와 비교하여 상대 질량이 큰 Kr과 Xe 이온의 확률 분포도에서 큰 차이점을 찾아 볼 수 있다. 즉,  $E_0=10$  eV에서의 Kr 및 Xe 이온의 확률 분포는 대단히 좁은 것으로 보고 된 반면에 Fig. 3(b)에 나타난 바와 같이  $E_0=200$  eV의 Kr 이온의 확률 분포는  $\cos \theta$ 에 대해 상당히 넓은 것으로 나타났다. 이는 충격 이온의 표면 구성 원자에 대한 충격 지점 (impact point)의 차이로 설명될 수 있다. 이러한 차이는 충돌 지점이 충격 이온의 산란 궤적에 미치는 영향을 암시한다. 즉  $E_0=10$  eV의 Kr 이온이 나타내는 산란 궤적은 충격 지점에 큰 영향을 받지 않으며,  $E_0=200$  eV의 Kr 이온은 충격 지점에 따라 다양한 산란 궤적을 나타낸다는 사실을 의미한다. 또한 충격 지점의 차이는 충격 이온과 표적 원자간의 유효 충돌 면적에 차이를 보인다. 이러한 사실은 Fig. 3(c)과 Fig. 3(d)에 도식화한  $E_0=200$  eV에 대한 He 및 Kr 이온의 길이 방향 산란에너지 분포도에서도 확인이 가능하다. Fig. 3(c)에 나타난 He 이온의 경우 표면 구성 원자인 Cu 원자와의 무작위적 충돌 반사로 인해 길이 방향인  $\cos \theta$ 에 관계없이 무작위적 산란에너지 분포를 보인다. 반면에 Fig. 3(d)에 도식화한 Kr 이온의 경우에는 유효 충돌 지름이 큰, Cu 표면의 z-축 방향으로 산란하는 경우가 유효 충돌 지름이 작은 xy-평면 방향으로 산란하는 경우에 비해 높은 산란에너지를 가지는 것으로 나타났다. 또한 산란각이 감소할수록 선형적 감소 추세의 산란 에너지 분포를 갖는 것으로 나타났다.

한편, Fig. 4에 나타낸  $E_0=1,600$  eV의 충격에너지 조건에서 He 및 Kr 이온의 길이 방향 산란각에 대한 산란 확률 분포 및 산란에너지 분포는 특정 방향성을 찾아 볼 수 없으며, Fig. 3에 도식화한  $E_0=200$  eV 조건에 비해 제한적인 비연속적 산란 확률 분포 및 산란에너지 분포를 갖는 것으로 나타났다. 이러한 결과는 다음과 같은 사실로부터 설명될 수 있다. 즉, 충격에너지가 증가할수록 Cu 원자에 대한 유효 충돌 지름이 작은 He

이온은 Cu 격자 사이를 투과할 확률이 증가하며, 유효 충돌 지름이 큰 Kr 이온은 Cu 격자내 trapping 확률이 증가하여 산란수가 감소하게 된다. 따라서 충격에너지가 증가함에 따라 He 및 Kr 이온의 길이 방향에 대한 산란 확률 및 에너지 분포는 비연속적으로 나타나게 된다. 실제로  $E_0=1,600$  eV, 625 회의 반복 실험에서 충격 이온에 따른 산란/trapping 현상은 각각 20/0(He), 51/33(Ne), 32/119(Ar), 7/302(Kr)인 것으로 나타났다.

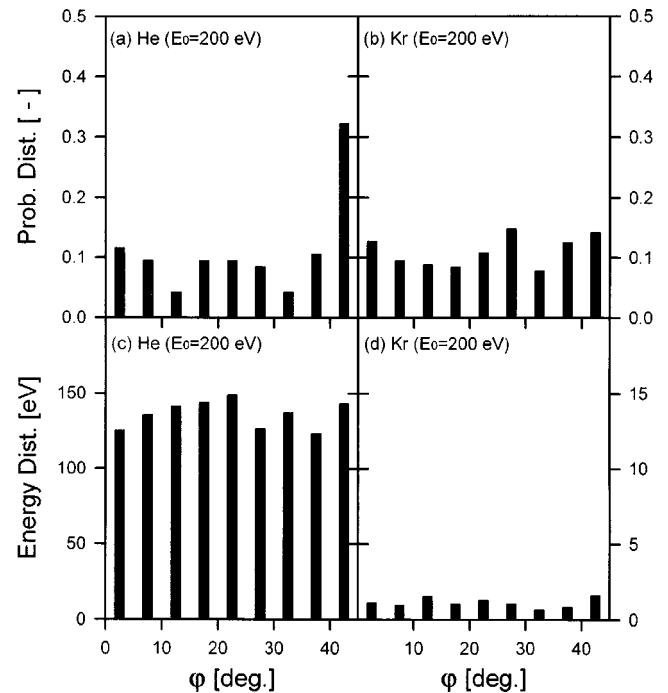


Fig. 5. The probability and the energy distributions for scattered ions as a function of  $\psi$  ( $E_0=200$  eV). The left and the right columns correspond to He and Kr projectile ions, respectively.

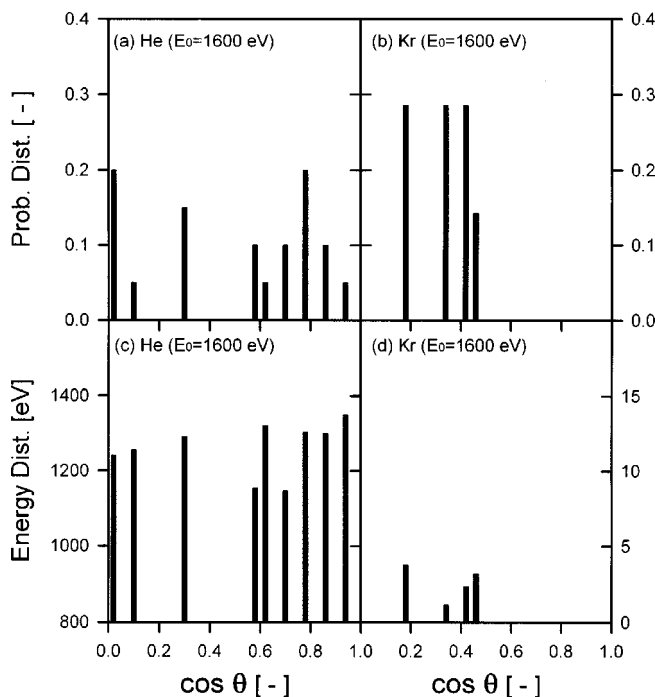


Fig. 4. The probability and the energy distributions for scattered ions as a function of  $\cos \theta$  ( $E_0=1,600$  eV). The left and the right columns correspond to He and Kr projectile ions, respectively.

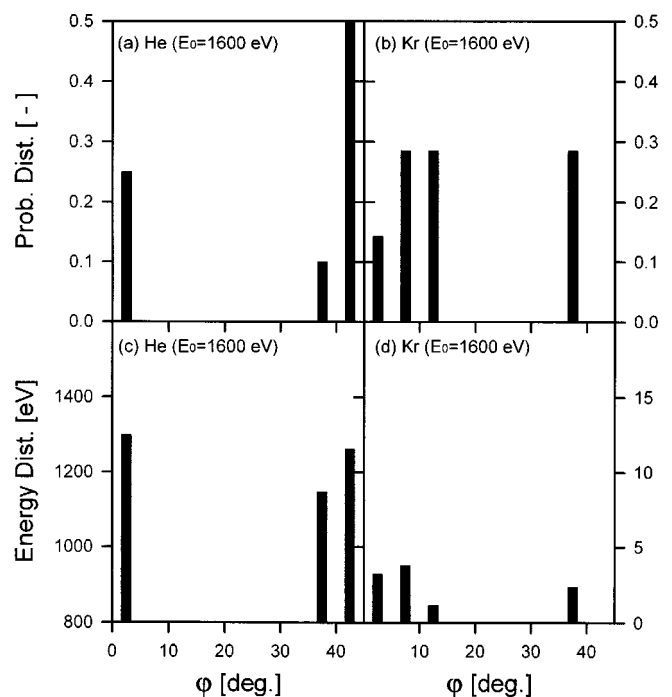


Fig. 6. The probability and the energy distributions for scattered ions as a function of  $\psi$  ( $E_0=1,600$  eV). The left and the right columns correspond to He and Kr projectile ions, respectively.

Fig. 5와 Fig. 6에  $E_0=200$  eV 및 1,600 eV 조건에서 He 및 Kr 충격 이온의 방위 산란각  $\psi$ 에 대한 확률 분포 함수 및 에너지 분포 함수를 도식화하였다. 각각의 그림에서 보는 바와 같이 He 및 Kr 이온의 방위 방향 산란각의 분포는 길이 방향 산란각  $\theta$ 에 비해 특정 방향성을 나타내지 않는다. 이러한 결과는 충격 이온의 Cu 원자에 대한 유효 충돌 지름 및 Cu 원자와의 다중 충돌에 의한 영향으로 해석될 수 있다. Fig. 5(a)와 Fig. 5(b)에 나타난  $E_0=200$  eV 조건에서 He 및 Kr 이온의 산란 확률 분포는 특정 방위 방향 산란각과 무관하게 0-45° 범위에서 넓게 분포하는 것으로 나타났다. 이에 따라 Fig. 5(c)와 Fig. 5(d)에 나타난 산란에너지 분포도에서는 충격 이온에 따라 산란에너지의 크기에만 차이를 보일 뿐 특정 방위 방향 산란각에 무관하게 넓게 분포하는 것으로 나타났다. 그러나 방위 방향 산란각에 따른 충격 이온의 산란에너지 편차는 차이를 보이는 것으로 나타났다. He 이온의 경우 평균 산란 에너지는 137.2 eV로서 방위 산란각  $\psi$ 에 따라 다소 큰 편차를 보인다. 반면 Kr 이온의 경우에는 방위 산란각  $\psi$ 에 무관하게 비교적 적은 편차의 넓은 산란에너지 분포를 보이는 것으로 나타났다. 충격에너지가 증가할수록 He 이온은 무작위적 충돌 반사 및 다중 충돌 효과에서 벗어나 특정 방위 방향에 대해 제한적인 산란각을 갖는 것으로 나타났다.

$E_0=1,600$  eV 조건에서 He 이온의 방위 방향각  $\psi$ 에 대한 산란 확률 및 산란에너지 분포를 Fig. 6(a)와 Fig. 6(c)에 도식화하였다. 그림에서 보는 바와 같이 대부분의 He 이온은  $\langle 100 \rangle$  방향 및  $\langle 110 \rangle$  방향으로 산란할 확률이 높으며, 다른 방위 방향에 비해 높은 산란에너지를 가지는 것으로 나타났다. 이러한 결과는 충격에너지 및 유효 충돌 지름이 증가할수록 충격 이온과 표면 원자와의 무작위적 반사 효과 및 다중 충돌 효과의 감소로 충격 이온이 가진 자체 방향성이 유지됨을 나타낸다. 한편 Fig. 6(b)와 Fig. 6(d)에 도식화된  $E_0=1,600$  eV 조건에서의 Kr 이온은 대부분이 Cu 격자를 투과하거나 Cu 격자 내부에 trapping되어 산란수의 감소로 인한 통계적인 이유 때문에 방위 산란각  $\psi$ 에 대한 산란 특성을 정확히 파악할 수가 없는 것으로 나타났다. 실제로  $E_0=1,600$  eV, 625회의 반복 실험에서 충돌 후 Kr 이온의 산란 및 투과, trapping의 횟수는 각각 7회, 316회, 302회로 나타났다.

#### 4. 결 론

본 연구에서는  $E_0=100-1,600$  eV의 He, Ne, Ar, Kr, Xe 이온을 Cu (100) 표면에 수직으로 충돌시키는 MD 모의실험을 수행하여 충격 이온과 표적 원자의 질량비 및 에너지에 따른 산란 이온의 에너지 변화, 방향성에 관한 분포 특성 등을 분자 차원에서 고찰하였다. 상대 질량이 작은 He와 Ne 이온은  $E_0$ 의 값이 증가할수록 이원자 강체구 충돌 효과로 인해 평균 산란에너지 비는 증가하여 이체 충돌식으로 계산된 값에 접근하는 것으로 나타났다. 반면에 Ar, Kr, Xe 이온은  $E_0=200$  eV 미만에서 Cu 표면의 첫 번째 및 두 번째 층의 원자와 다중 충돌 효과로 인해 평균 산란에너지 비는 큰 폭으로 감소하는 추세를 보였다.  $E_0=200$  eV 이상에서 Ar 이온의 평균 산란에너지 비는 감소 후 증가 추세를 보였다. 또한 Kr 이온은 선형적 감소 현상을 나타내었으나, Xe 이온은  $E_0=200$  eV 이상에서 산란 현상이 일어나지 않는 것으로 나타났다. 산란 확률 분포 및 산란에너지 분포는 충격에너지 및 표적 원자와의 질량비가 증가할수록 좁은 것으로 나타났다. 낮은 충격에너지 조건에서 He 이온은 Cu 원자와의 다중 충돌 효과 및 Cu 표면 자체의 굴곡 현상에 의해 긴 꼬리형 확률 분포를 보이며, 충격에너지가 증가할수록 Cu 표면의 첫 번째 층과 다중 충돌에 의한 산란에서 점차 이체 충돌에 의한 산란 효과로 전환하여 좁은 산란 분포 및 산란 에너지 분포를 나타내었다. 질량이 무거운 Kr 충격 이온은 초기 충격에너지가 증가할수록 두 번째 층 이하 Cu 원자와의 충돌 가능성 및 Cu 격자 내 Kr 이온의 투과 및 trapping 현상이 증가하여 좁은 산란 분포 및 산란 에너지 분포를 나

타내었다. 한편, 산란각에 따른 방향성은 낮은 충격에너지 조건에서 He 이온은 Cu 원자와의 무작위적 충돌 반사로 인해  $\cos \theta$  및  $\psi$ 에 무관한 넓은 방향성 분포 특성을 나타내었으며,  $E_0$ 의 값이 증가할수록 점차 제한적인 비연속적 산란각을 가지는 것으로 나타났다. 낮은 충격에너지 조건에서 Kr 이온은 길이 방향에 대해 수직 방향성이 나타났으며, 방위 방향에는 특정 방향성이 나타나지 않았다.

#### 참고문헌

1. Eckstein, W. D., "Computer Simulation of Ion-Solid Interactions," Springer-Verlag, Berlin(1991).
2. Smith, R. and Jakas, M., "Atomic and Ion Collision in Solids and at Surfaces: Theory, Simulation and Applications," (Ed.) Smith, R., Cambridge Univ. Press(1997).
3. Rabalais, J. W., "Low Energy Ion-Surface Interactions," John Wiley and Son, New York(1994).
4. Asher, J., "MeV ion Processing Applications for Industry," *Nucl. Instr. Meth. B*, **89**, 315-321(1994).
5. Boerma, D. O., "Plasmon Excitation in Ion-solid Interactions," *Nucl. Instr. Meth. B*, **183**, 73-83(2001).
6. Tolstogouzov, A., Daolio, S. and Pagura, C., "Sputtering of Solid Deuterium by He-ions," *Nucl. Instr. Meth. B*, **183**, 116-120(2001).
7. Allen, M. P. and Tildesley, D. J., "Computer Simulation of Liquids," Clarendon, Oxford(1987).
8. Robinson, M. T. and Torrens, I. M., "Computer Simulation of Atomic-Displacement Cascades in Solids in the Binary-Collision Approximation," *Phys. Rev. B*, **9**, 5008-5024(1974).
9. Biersack, J. P. and Eckstein, W., "Sputtering Studies With Monte Carlo Program TRIM.SP," *Appl. Phys. A*, **34**, 73-94(1984).
10. Urbassek, H. M., "Molecular-Dynamics Simulation of Sputtering," *Nucl. Instr. Meth. B*, **122**, 427-441(1997).
11. Nordlund, K. and Kuronen, A., "Molecular Dynamics Simulation of Ion Ranges at keV Energies," *Nucl. Instr. Meth. B*, **115**, 528-531(1996).
12. Ohashi, T., Miyake, K. and Ohashi, K., "Molecular Dynamics Simulations of Low Energy Atomic Collisions Between an Atom and a Substrate: Effect of Incident Angle and Energy," *Nucl. Instr. Meth. B*, **121**, 40-43(1997).
13. Lahaye, R. J. W. E., Kley, A. W., Stolte, S. and Holloway, S., "The Scattering of Ar from Ag(111): A Molecular Dynamics Study," *Surf. Sci.*, **338**, 169-182(1995).
14. Kim, C., Kang, H. and Park, S.-C., "Hyperthermal(10-500 eV) Collisions of Noble gases with Ni(100) Surface. Comparison Between Light and Heavy Atom Collisions," *Nucl. Instr. Meth. B*, **95**, 171-180(1995).
15. Suh, S.-H. and Min, W.-K., *J. Korean Hydrogen Energy Soc.*, **11**, 127(2000); *ibid.*, **12**, 51(2001).
16. Nordlund, K., "Molecular Dynamics Simulation of Ion Ranges in the 1-100 keV Energy Range," *Comp. Mat. Sci.*, **3**, 448-455(1995).
17. Karolewski, M. A., "Classical Dynamics Simulations of 4 keV Ar Sputtering of Ca(100)," *Nucl. Instr. Meth. B*, **159**, 28-39(1999).
18. Haile, J. M., "Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods," John Wiley and Son, New York(1992).
19. Harrison, D. E., Carlston, C. E. and Magnuson, G. D., "Kinetic Emission of Electrons from Monocrystalline Targets," *Phys. Rev.*, **139**, A737-A745(1963).
20. Lee, H.-W. and Kang, H., "Scattering of Noble Gas Ions from a Si(100) Surface at Hyperthermal Energies(20-300 eV)," *Bull. Kor. Chem. Soc.*, **16**, 101-104(1995).