

# H : Si(100)-3x1 to 2x1 表面結構相變化的觀察

學生：林昌廷

指導教授：林登松 教授

國立交通大學物理研究所碩士班

## 摘要

長久以來對於人們對於對於氫氣在矽表面的吸附反應已經有很多研究，但是對於氫脫附的動力學機制一直不是很瞭解；同時對於 H : Si(100)-3x1 至 2x1 之間的相變機制一直存在疑惑。本論文研究利用 H : Si(100)-3x1 至 2x1 的相變化觀察中試圖去解決一些問題。實驗方法是利用化學氣象沉積方式吸附氫氣在 Si 樣品上，並讓樣品保持在 400 K 以形成 H : Si(100)-3x1 結構後，加熱樣品到 583 K 以形成 H : Si(100)- 2x1 結構，之後再利用掃描穿隧顯微鏡 (STM) 觀察樣品變化。實驗結果顯示 H : Si(100)-3x1 在 583 K 時，會慢慢變成 2x1 結構。在相變的初期裡，表面上 H : Si(100)- 1x1 區域會先直接造成氫原子結合脫附而產生 2x1 區域，在原本的 H : Si(100)-3x1 區域則會產生兩種相變機制，一種是兩個氫原子直接從一個 H : Si(100)-3x1 單位中結合脫附造成兩列 dimer，且之後會往 dimer row 方向擴散。另一種是會造成 H : Si(100)-2x1 區域的聚集，而有  $\sigma$  鍵偏移一個晶格位子的現象，之後也是會延著 dimer 擴張 H : Si(100)-2x1 區域。

同時我們發現在相變過程中，H : Si(100)- 1x1 區域會產生單原子缺陷 (single vacancy ; SV) 與雙原子缺陷 (double vacancies ; DV)。本實驗對於氫氣的脫附與 Si 原子的再鍵結提出一些解釋，此外在形成 H : Si(100)-2x1 的過程中原子的重新排列生長擴張以及錯位現象提供證據與解釋。

# **Real-Space Observation of H : Si(100)-3×1 to 2×1 Phase Transition**

**Student : Chang-Ting Lin**

**Adviser : Dr. Deng-Sung Lin**

**Institute of Physics  
National Chiao Tung University**

## **Abstract**

The adsorption of atomic hydrogen on the Si(100) surfaces has been widely studied for many years, but the detailed desorption mechanism remains a mystery. The mechanism of the structure transition from H : Si(100)-3×1 to 2×1 phase is also not yet clear. This work investigated dynamics and kinetics of H : Si(100)-3×1 to 2×1 phase transition. The H : Si(100)-2×1 surfaces were exposed to atomic H at sample temperature of 600 K and 400 K to obtain the H : Si(100)-2×1 and H : Si(100)-3×1 surface structure, respectively. Then, we heated the H : Si(100)-3×1 sample to 583 K and applied scanning tunneling microscopy (STM) to observe the surface morphology. The conversion of H : Si(100)-3×1 to 2×1 could occur slowly at the temperature and H : Si(100)-1×1 to 2×1 could be converted directly. Two H atoms must desorb in order to convert a sequence of dihydride-monohydride-dihydride(DMD) to a sequence of monohydride-monohydride(MM). The fact that  $\sigma$ -bond shift was found in this pathway.

During the conversion of H : Si(100)-3×1 to 2×1, etching vacancies had always been found in H : Si(100)-1×1 domain. There were two kinds of vacancies, labeled SV

(single vacancy) and DV (double vacancies). This thesis proposed the mechanism of desorption and H : Si(100)-3×1 to 2×1 rearrangement.



## 誌謝

謝謝我的指導教授林登松老師這兩年來的指導，讓我對表面物理有較深層的了解，確實的作了一些研究，培養了做實驗應有的嚴謹態度。同時也要謝謝張立與孟心飛老師的指導，使得論文能夠順利進行。

謝謝鎧銘學長在實驗上給我建議與指導，在我有疑問的時候熱心的為我解惑。還有實驗室伙伴明峰、世鑫、俊緯同學，時常和我討論實驗細節，以及互相勉勵與打氣。另外也要謝謝人資、祺雄、和君黛三位學弟妹給我的幫助。

最後要謝謝我的父母，在研究所這兩年給我的支持與關懷，沒有他們，就沒有我的成功。還有妹妹俐宣、弟弟昌見，在精神上給我鼓勵，使我能順利渡過一些難關。還有謝謝我女朋友郁嫻給我衷心誠摯的支持，並鼓勵我唸博士班。並謝謝我周遭的長輩、同學對我的關心，讓我能順利的完成這本論文，謝謝大家。



中文摘要.....	錯誤! 尚未定義書籤。
英文摘要.....	錯誤! 尚未定義書籤。
誌謝.....	IV
目錄.....	V

## 第一章 簡介.....1

1.1 研究動機.....	1
1.2 矽晶體結構.....	2
1.3 相關文獻.....	6
1.3.1 H : Si(100)-2×1 .....	6
1.3.2 H : Si(100)-3×1 .....	7
1.3.3 H : Si(100)-2×1 to 3×1 .....	10
1.3.4 H : Si(100)-vacancy .....	11
1.3.5 H : Si(100)-3×1 to 2×1 理論計算.....	13

## 第二章 實驗儀器與原理 .....16

2.1 真空系統.....	16
2.2 掃描穿隧顯微鏡( Scanning Tunneling Microscopy : STM ) .....	19
2.2.1 量子穿隧效應.....	19
2.2.2 STM 細部結構 .....	22
2.2 探針與樣品的準備.....	23
2.3.1 探針( tip )的製作.....	23
2.3.2 樣品的準備.....	26
2.4 曝氫的過程與問題.....	27

## 第三章 實驗結果與分析 .....28

3.1 H : Si(100)-3×1 至 2×1 起初變化.....	28
3.1.1 H : Si(100)-2×1 成長模式 .....	28

3.1.2	TypeA , typeB , 以及 typeC.....	29
3.2	TypeA , TypeB , TypeC 的成長 2×1 區域模式 .....	39
3.2.1	TypeA 成長 2×1 區域模式 .....	39
3.2.2	TypeB 成長 2×1 區域模式.....	43
3.2.3	TypeC 成長模式.....	46
3.3	TypeA , TypeB , TypeC 的生成機制 .....	49
3.4	H : Si(100)-3×1 區域縮小與 2×1 區域擴張.....	54
3.4.1	H : Si(100)-3×1 區域縮小 .....	54
3.4.2	H : Si(100)-2×1 區域擴張 .....	57
3.4.3	H : Si(100)-1×1 區域減少 .....	60
3.5	H : Si(100)-2×1 區域之間的錯排 .....	62
3.6	dihydride 缺陷的形成 .....	65
3.6.1	缺陷的形成.....	65
3.6.2	缺陷數目與溫度的關係.....	67
3.6.3	缺陷與氫擴散.....	70
 第四章 結論.....		 73
 參考文獻.....		 75

