

## 第四章 結論

H : Si(100)- $2\times 1$  表面到  $3\times 1$  表面已經有些理論推敲一些結果出來，但是可惜的事並無實驗數據可以佐證，我們實驗室利用化學氣象沉積的方式，在 400 K Si(100)乾淨表面上吸附氫氣以形成  $3\times 1$  表面，同時加熱樣品到 583 K 後利用掃描穿隧電子顯微鏡看樣品表面結構的變化。最後會發現到樣品從  $3\times 1$  的區域相變成  $2\times 1$  區域。

實驗結果發現 H : Si(100)- $2\times 1$  加熱樣品後，會相變化成  $3\times 1$  表面，在演化過程中同時產生缺陷，可分為單原子缺陷與雙原子缺陷。同時我們闡述了相變化的機制來驗證理論計算的結果以及提出新的看法。

- 1、就相變化的現象來說，發現開始相變初期時會產生三種不同類型。分別是 Type A、Type B、Type C。Type A 是  $1\times 1$  區域，Type B 是典型的  $3\times 1$  區域，Type C 是兩對 dimer 聚集所造成。
- 2、進而發現 Type A 區域會直接造成氫脫附，產生  $2\times 1$  區域；而 Type B 區域會直接以一個  $3\times 1$  區域直接產生  $2\times 1$  區域延長擴張；Type C 會產生  $\sigma$  鍵偏移一個晶格距離造成  $2\times 1$  區域聚集，進而造成新的  $1\times 1$  區域聚集造成脫附氫原子脫附或是往 dimer 方向延長擴張  $2\times 1$  區域。
- 3、當  $2\times 1$  形成時會對  $3\times 1$  造成切割， $3\times 1$  區域數目變多也變小，這使得  $3\times 1$  變得破碎般，使得  $2\times 1$  在各自小區域迅速成長。當  $3\times 1$  區域數目變多時，總會有一些小區塊會轉結合成  $2\times 1$  區域或是被別的  $2\times 1$  區域擴展開來而被併構，反而讓  $3\times 1$  區域減少。

- 4、 $2\times 1$  區域會隨著  $3\times 1$  區域的減小而增加，並且知道在加熱初期，平均每一個  $2\times 1$  island 中平行 dimer row 方向的  $2\times 1$  區域擴大的速度比垂直 dimer row 橫方向快。這是因為 Type A 成長開來，會形成垂直 dimer row 方向兩列 dimer 並向著 dimer row 方向成長；而 Type B 成長會形成 4 列 dimer 垂直 dimer row 方向，之後往 dimer row 方向成長；Type C 形成兩列 dimer 垂直 dimer row 並往 dimer row 方向成長開來。
- 5、再加熱初期會發現有原子錯排的情形，這是由於表面上 antiboundary 方向的不一致而且  $1\times 1$  區域的容易形成  $2\times 1$  區域會造成不同區域有著同樣一排或是錯排一個晶格常數，在加熱後期，錯排的情形會慢慢消失。
- 6、在缺陷形成方面，由實驗結果可知  $1\times 1$  區域特別容易形成缺陷，並且在形成單一原子缺陷後接著會形成雙原子缺陷。而且隨著加熱時間久，表面上的缺陷數目也會隨著增加。

