

二、實驗原理

2.1 量子穿隧效應：

在古典力學的理论中，假設有一個能量為 E 的粒子試圖通過位障 U 時。當在 $U > E$ 的情形下，此粒子是沒有任何的機會能夠通過此一位障的。但是在量子力學的理论中，使用一維的薛丁格方程式來嘗試模擬這樣的情況。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_{(x)}}{dx^2} + U_{(x)} \psi_{(x)} = E \psi_{(x)}$$

解此偏微分方程可以得到

$$\psi_{(x)} = \psi_{(0)} e^{-kx} \quad \left(\text{其中 } k = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar} \right)$$

表示對量子力學的理论而言，在這樣的位障下，電子仍有一定的機率穿過此一位障。而穿越此位障的機率會隨著位障的寬而呈現指數衰減。因此，穿隧電流可以很敏銳的感覺位障寬的改變。我們所做用的 STM 就是利用這樣的原理。金屬探針與樣品之間的距離就是位障的寬，當我們施以固定的電壓（bias）並加以掃描時，樣品表面上原子的高低起伏就會改變其與探針之間的距離，而使得穿隧電流有明顯的改變。一般來說，探針的針尖和樣品的距離必須在 $10 \text{ \AA}$ 左右才會有穿隧電流產生。當兩者距離每增加 $1 \text{ \AA}$ ，穿隧電流值便減為原來的 $1/10$ ，因而使得我們的量測得到 $0.1 \text{ \AA}$ 以下的原子解析度。將這樣的電流改變記錄下來，用不同亮度的點的代表，就呈現了樣品表面的高解析原子圖像。

2.2 局域電子態密度 (Local Density of State ; LDOS) :

影響穿隧電流的原因除了 bias 與前述的距離之外，LDOS 也是一個重要的因素。LDOS 定義為空間中某一特定的位置，單位體積、單位能量的電子個數。在探針與表面距離為 z ，電子能量為 E 的狀態下，樣品表面的局域電子態密度 ($\rho_s(z, E)$) 可以表示為：

$$\rho_s(z, E) \equiv \frac{1}{\delta} \sum_{E_n=E-\delta}^E |\psi_n(z)|^2$$

穿隧電流可以表示成：

$$I \propto V \rho_s(0, E_F) e^{-2kz}$$

因電子的某一特定的態 n 的機率分佈可以表示為 $|\psi_n|^2$ ，而 $|\psi_n|^2$ 對於整個所考慮的空間的積分值為 1。當所探討的體積增加時，單一能態 n 的機率分佈 $|\psi_n|^2$ 必隨之而減小，但單位能量的能態個數卻是增加的，而兩者的乘積為一定值，因而使得總局域電子態密度的大小保持不變。

2.3 電子態 (Electron state)：

我們在使用探針探測樣品表面時，必須對樣品與針尖之間施以一適當偏壓 (bias)，以期改變針尖和樣品間的電子能態，而有機會產生穿隧電流。我們所謂的偏壓是以樣品為主，當樣品的電壓大於針尖時，我們稱之為正偏壓；反之，若針尖的電壓大於樣品時，我們稱之為負偏壓。依照所施加偏壓的正負不同，穿隧電流的發生可以分為下列二種不同的情況：

a. empty state

當所施加的電壓為正偏壓時，電子流將由針尖流向樣品。也就是會從針尖的填滿態 (occupied state) 穿隧到樣品表面的未填滿態 (unoccupied state)。因此，若樣品表面某些原子的電子是處於填滿態，即使它們處於樣品表面較高的位置，在所得的穿隧圖形中仍然會是低電流的暗點。

b. filled state

當所施加的電壓為負偏壓時，電子流將由樣品表面穿隧到探針針尖。也就是會從樣品表面的填滿態穿隧到探針針尖的未填滿態。同樣的，若樣品表面某些原子的電子是處於未填滿態，即使它們處於樣品表面較高的位置，在所得的穿隧圖形中也仍然會是低電流的暗點。

2.4 STM 取像法：

當我們利用 STM 對於樣品表面進行探測取像時，共有三種不同的探測方式可以選擇。

a. 定電流取像法（constant current mode）：

定電流取像法是以固定值的穿隧電流為回饋訊號，配合穿隧電流和距離的高靈敏度關係作為回饋電路。當探針在樣品表面掃描時，為了維持固定的穿隧電流，因此必須隨時調整掃描探針的高度。所以探針針尖路徑的高度變化即可反映出樣品表面的形貌變化。

這種方法的優點是可以容忍較高的高度變化，較不易因為表面高度變化過劇而損壞掃描探針。然而其缺點則是因為其探針的動作必須依賴回饋系統的調制，因此掃描速度較慢，也較容易受到低頻雜訊的干擾。

b. 定高度取像法（constant height mode）：

定高度取像法顧名思義即為固定探針針頭的高度，而直接以穿隧電流的數值作為成像的依據。當探針以固定的高度掃描樣品表面時，由於樣品表面的高度變化不定，因此造成了探針針頭和樣品表面間距的改變，如此一來隨之改變的穿隧電流值便成為了成像的依據。

這種取像方法的優點為掃描速度較快，較有機會捕捉表面動態的變化；而其缺點則為當樣品表面的高度起伏過大的時候，掃描探針較容易損壞。

c. 電流密度取像法（current image tunneling spectroscopy；CITS）：

穿隧電流的大小除了和探針針尖與樣品表面間距有關之外，也和表面的電子密度有關。因此 STM 除了可以得知樣品表面的形態之外，也能夠獲得表面的局部電子特性，此即 CITS 的主要目的。

CITS 的方法結合了定高度與定電流的取像法，並在其中利用調整作壓作為取像的變數。

其作法如下：

以定電流法為基本架構，確保掃描過程中探針和樣品表面的間距為固定值。再於每一個掃描點讓外加偏壓在設定的範圍內依所設定的間距調變，同時記錄下偏壓及對應的電流值。如此以得到在各個不同掃描點的 $\frac{dV}{dI}$ 值。

這樣的方法因為在每一掃描點均需得到數個不同的偏壓及對應的電流值，因此必須花費更多的時間，而且探針也很容易在改變偏壓的過程中毀損。

2.5 矽基底的結構

矽原子的晶體為我們所熟悉的鑽石結構 (diamond structure)，其結構因為碳原子所組成的鑽石而得名。此結構的空間晶格是面心立方堆積 (fcc)，對這樣的矽晶體沿不同的方向切割就可以得到不同的切割面，而我們所使用的矽基底就是沿著 (111) 方向切割而得到的剖面。由於切割必伴隨矽原子間的鍵結斷去，因此表面上會形成許多不成對的電子。為了使表面的能量重新回到最低的狀態，表面的分子就會重新排列形成新的結構，此即重構 (reconstruction)。在 Si (111) 的表面上， 7×7 是能量最低，最穩定的一種重構。 7×7 的 7 代表此種結構的單位晶胞邊長為未重構前單位晶胞邊長的 7 倍。

1985 年，Takayanagi 等人完成了 Si (111) - 7×7 重構模型的細節部份研究，並提出了 DAS-model^{[7][8]} (dimers adatoms stacking fault model)，此為目前最被大家所接受的 Si (111) - 7×7 模型。

DAS-model 說明在此重構中包含了 9 個 dimer、12 個 adatom 以及一層 stacking fault layer。此 stacking fault layer 包含有 corner hole 和兩個呈對稱三角形的單位半晶胞 (HUC; half unit cell)。此外，在 12 個 adatom、adatom 周圍的第二層的 6 個 rest atom 及 corner hole 的中心上均有懸鍵 (dangling bond)。由於懸鍵的位置不盡相同，其所具有的態也不一樣。因此，在 STM 所得的圖形裡，FHUC (faulted half unit cell)

與 UHUC (unfaulted half unit cell) 在負偏壓的情況下，呈現的亮度會有些微的差異。

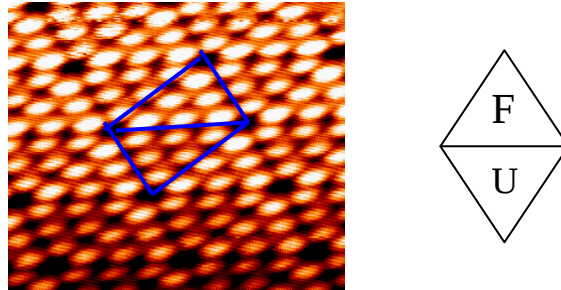


圖 2.1 負偏壓下，FHUC 與 UHUC 所呈現不同亮度的圖形

-2V 5x5nm²

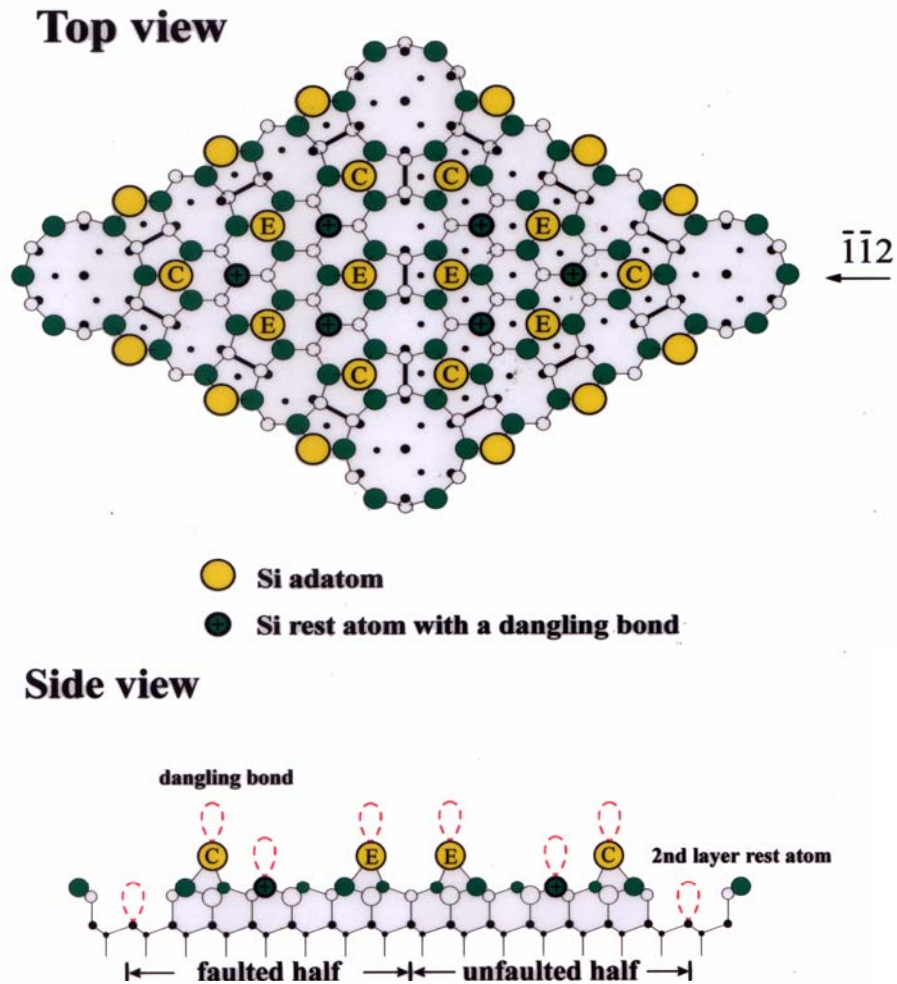


圖 2.1 Si(111)-7x7 的 DAS-model 示意圖