

第一章 緒 論

1-1 簡介

表面重構(Surface reconstruction)

原子及分子在材料表面的排列會隨著環境改變而重新排列以使其適應環境的變化，使介面能達到最低，進而達到最穩定的狀態。而表面為了適應環境從一個狀態到另一個狀態的變化過程，即稱為表面重構。例如：要形成乾淨的表面，最簡單的方法是使用劈裂法，材料會沿劈裂平面分裂成兩半，形成乾淨的兩個表面。此時的表面原子結構與材料內部結構不同，有表面原子重組現象。此種表面原子重組可簡單分成兩種：

- 表面原子沿平面法向量方向移動鬆弛，此稱為表面鬆弛(surface relaxation)。
- 表面原子在平面方向重構，此稱為表面重構。

由廣義來看，表面原子重組現象可統稱為表面重構。

皺化(Faceting)

皺化為表面重構的一種方式，是一種平坦的表面結構轉變為高低起伏的結構，並且轉變後每個面的方向與原來平面的方向不同，即稱為皺化。在 1990 年，Madey 和其研究團隊用低能電子繞射儀(LEED)

及穿隧掃描顯微鏡(STM)對 W(111)面進行研究：發現在 W(111)面上鋪覆少量的 Pd、Pt、Au、Ir、Rh 後，對 W(111)面進行加熱退火的動作，使其表面原子產生重構現象，形成一個由三個(211)面所構成的金字塔結構[1-5]。表面皺化現象的原因是 W(111)面上吸附了貴金屬原子後，增加表面能異向性所造成，亦有理論計算證明出表面能異向性[6,7]。皺化現象由場離子顯微鏡觀察，可以明顯看到某些面的擴張，對於擴張的面往往是表面自由能較低的面，皺化的過程開始後，表面自由能低的指數面擴張以至於覆蓋表面能高的指數面，若由被覆蓋面的垂直方向來看，是被堆高隆起的。最明顯的例子就是單原子針的形成[5]。

1-2 研究動機

在本實驗室的研究團隊的研究中，長久以來對單原子針的研究有相當好的成果。繼純金屬鎢或在鎢上鋪覆其他金屬原子都成功地形成單原子針後[8-10]，也開發了金屬銥的單原子針[11]。然而，銥與鉑性質相近的兩金屬，那鉑是否也能夠形成單原子針？若可以，條件是什麼？若不可，又是因為什麼原因？最後我們再與銥做比較。

由於場離子顯微鏡(FIM)的使用，在樣品表面成長及變化的資訊，可以提供最直接具體的觀察。並且對於場離子顯微鏡下所能觀察的指數面可以是全面性的，何以這麼說！就其他的原子解析設備而言，大多都使用塊材。但是塊材在切割時，絕大部分的高指數的面在裁切下來後，都容易受熱效應產生重構或在大氣中受其他氣體的影響產生變化，再經過這麼多的干擾後，進真空腔時，早已面目全非，失去原來指數面的形貌，重要的是，這是無法還原的。而場離子顯微鏡卻可以在這類的指數面起變化後，以場蒸發的方式破壞這些變化，重新形成該指數面的儀器，因此在觀察多個指數面的變化是非常直接且具體的。

重構除了上述的皸化行為之外，還有失蹤原子列的重構形貌，而且對於通道面上失蹤原子列這一種重構已有多年的研究，到後期大多都以掃描穿隧顯微鏡(STM)以及低能電子繞射儀(LEED)做這方面的

研究，因為可以看到單一指數面大規模的重構。然而如上段所敘述的，這些儀器在同個金屬能做的指數面不多，由場離子顯微鏡卻沒有限制。所以在本實驗，將用場離子顯微鏡做較大規模的研究如(110)、(311)...等面。而後對於這些現象(如皺化及失蹤原子列)的分析，提出新的見解，以及去證實整體的重構對於各指數面而言，表面的變化在各晶面間是連續的。

最後是對於合金的研究，在日常生活中合金的運用價值是比純金屬高的，例如 Fe-Al 合金與 Pt-Ir 合金。在鐵中加入少量的鋁可以抗氧化，而加入銱在鉑中，就能比純白金更加堅硬。在本篇的研究中，關注在鉑銱合金，觀察銱與鉑含量為 $\text{Pt}_{80}\text{Ir}_{20}$ 的合金。由於鉑銱合金針經常被應用在掃描穿隧顯微鏡(STM)，這項研究能提供探針相關資訊。

1-3 研究要點

對於鉑及鉑銱合金，本文將以下列幾點方式加以討論實驗中發現的結構變化：

A、鉑的皺化：溫度對於鉑的皺化行為有何影響，那些指數面會有較劇烈的皺化反應。

B、失蹤原子列：在通道面(011)、(311)...等面有明顯結構改變，並且討論形成的方式。

C、綜合討論：對於以上兩點的綜合分析，並且將鉑的皺化與性質相近的金屬銱做比較。

D、鉑銱合金：鉑銱合金的結構分析探討。