

รัฐภาภรณ์ ทรัพย์เรืองเนตร : การจัดเรียงตัวใหม่ของผิวของผลึกซิลิคอนในระนาบ  
(001) แบบ c(4×4) (Si(001)-c(4×4) SURFACE RECONSTRUCTION)  
อาจารย์ที่ปรึกษา: ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.ประยูร ส่งศิริฤทธิกุล, 120 หน้า.  
ISBN 974-533-606-8

ในงานวิทยานิพนธ์นี้ ได้มีการศึกษาพื้นผิวของซิลิคอนชนิด (001) บนผิวหน้าที่มีการจัดเรียงตัวใหม่แบบ c(4×4) โดยใช้เทคนิคการเลี้ยวเบนของอิเล็กตรอนพลังงานต่ำ เทคนิคไอเจอร์อิเล็กตรอนสเปกโทรสโกปี เทคนิคโฟโตอิมิตชันสเปกโทรสโกปีโดยใช้แสงซินโครตรอน และการคำนวณแบบ *ab initio* โดยอาศัยทฤษฎีฟังก์ชันแนลความหนาแน่น พบว่าพื้นผิวของซิลิคอนชนิด (001) บนผิวหน้าที่มีการจัดเรียงตัวใหม่แบบ c(4×4) จะเกิดขึ้นเมื่อให้ความร้อนแก่พื้นผิวซิลิคอนที่มีการจัดเรียงตัวใหม่แบบ (2×1) ในช่วงอุณหภูมิระหว่าง 580°C ถึง 630°C ในระบบสุญญากาศระดับสูงสุด การเปลี่ยนแปลงเฟสระหว่าง (2×1) และ c(4×4) เฟส สามารถผันกลับได้ ผลจากการวัด AES ยืนยันว่าการจัดเรียงตัวใหม่แบบ c(4×4) นี้มีความสัมพันธ์กับการมีอะตอมของคาร์บอนปนเปื้อนอยู่บนพื้นผิว นอกจากนี้ผลจากการคำนวณแสดงให้เห็นว่าแบบจำลองที่น่าจะเป็นไปได้มากที่สุดสำหรับพื้นผิวที่มีการจัดเรียงตัวใหม่แบบ c(4×4) คือแบบจำลองที่ประกอบด้วยอะตอมของคาร์บอนอยู่ที่ชั้นที่ 2 ได้ผิวที่รวมตัวเป็นกลุ่มของซิลิคอนคาร์ไบด์เล็ก ๆ

สาขาวิชาฟิสิกส์  
ปีการศึกษา 2549

ลายมือชื่อนักศึกษา \_\_\_\_\_  
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา \_\_\_\_\_  
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม \_\_\_\_\_

RATCHADAPHON SAPRUEANGNET : Si(001)-c(4×4) SURFACE  
RECONSTRUCTION. THESIS ADVISOR : ASST. PROF. PRAYOON  
SONGSIRIRITTHIGUL, Ph.D. 120 PP. ISBN 974-533-606-8

Si(001)-c(4×4)/LEED/AES/PHOTOEMISSION/ DENSITY FUNCTIONAL  
CALCULATIONS

In this thesis work, the Si(001)-c(4×4) surface reconstruction has been investigated by low-energy electron diffraction (LEED), Auger electron spectroscopy (AES), synchrotron photoemission spectroscopy (PES) and *ab initio* calculations based on density functional theory. It has been demonstrated that the Si(001)-c(4×4) surface reconstruction occurs when a clean Si(001)-(2×1) surface is heated at temperature between ~ 580°C and 630°C in ultra high vacuum environment. The transition between the (2×1) phase and the c(4×4) phase is reversible. The results of AES measurements confirm that the c(4×4) surface reconstruction is related to the presence of carbon atoms contaminating on the surface. The results from the calculations also suggest that the model consisting of carbon atoms at the second layer below the surface that form small SiC clusters is the most likely model for the c(4×4) reconstruction.

School of Physics

Academic Year 2006

Student's Signature \_\_\_\_\_

Advisor's Signature \_\_\_\_\_

Co-advisor's Signature \_\_\_\_\_