

# Diffraction rasante d'atomes rapides ( $\sim$ keV) sur des surfaces

GILAD Grazing incidence atom diffraction

Une nouvelle technique d'analyse des surfaces.  
*Pour sonder le potentiel projectile-surface*

P.Rousseau en thèse jusqu'à Sept 2006

H. Khemliche et P.Roncin LCAM

Coll. V. Etgens INSP Paris,

F.Martin Madrid



# PLAN

---

- Rappel sur la diffraction d'hélium thermique.
- Dispositif expérimental
- De la diffusion à la diffraction  
Snapshots, Rocking curves
- Perspectives



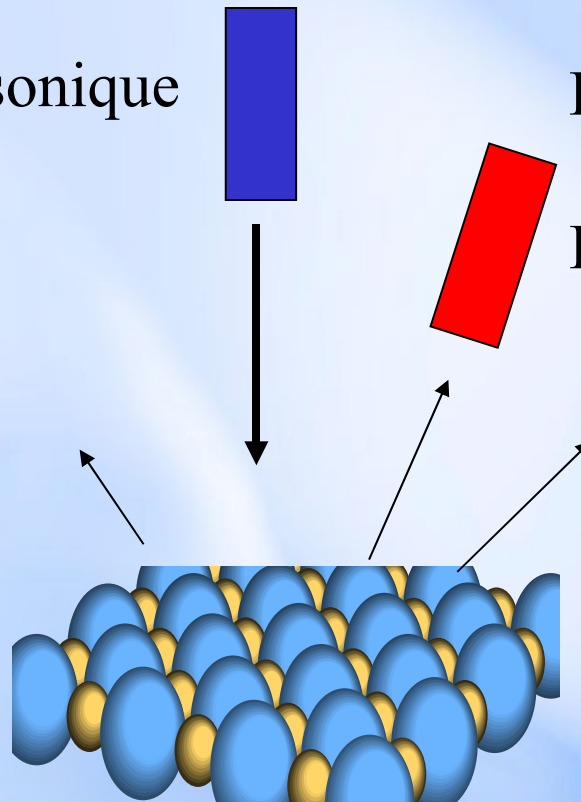
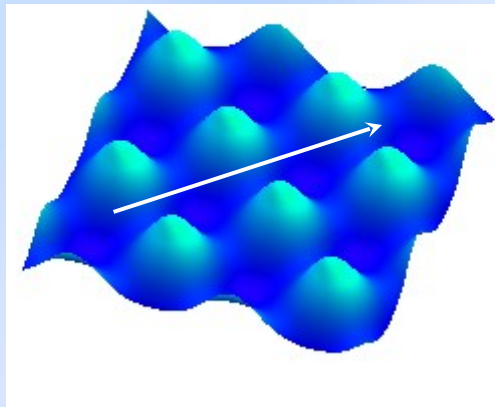
# Diffraction d'atomes thermiques

Esterman et Stern 1930 : He, H<sub>2</sub> sur LiF et NaCl

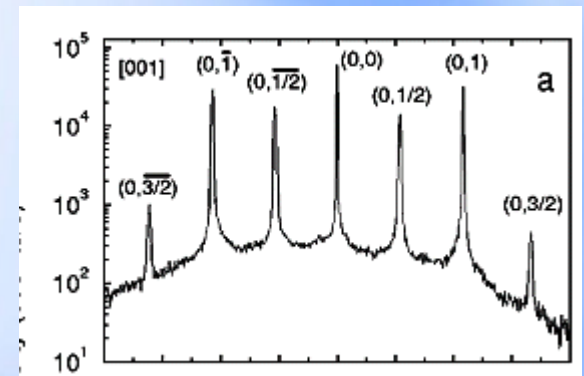
Lapujoulade et Armand CEN Saclay

Toennis Goettingen

Jet supersonique



Détecteur à ionisation  
+ quadrupole  
Le tout sur bras articulé



# Modèle de la tôle bosselée

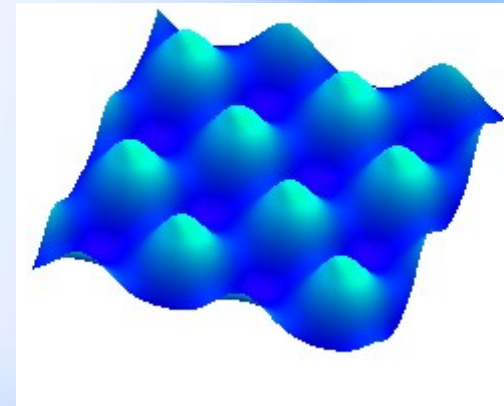
Dans les années 70-80, les modélisations ont montré que le motif d'interférence est bien reproduit par des trajectoires semi-classique sur une surface rigide.

Pour  $E$  donnée,  $V(x,y,z) \rightarrow Z_t(x,y)$

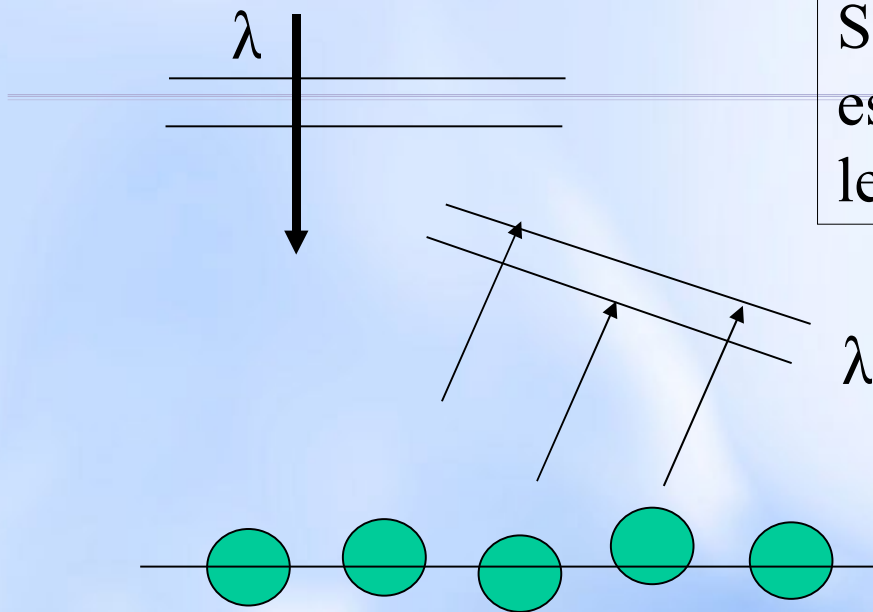
On identifie  $V(x,y,Z_t)=E$

Pour  $E$  compris entre 10 et 100 meV  $Z_t$  reste assez loin de la surface.

La longueur d'onde  $\lambda$  de l'ordre de 1'Å est bien adaptée à la diffraction.



La distance d'approche Z et la  
résolution dZ dépendent de E et  $\lambda$ .  
l'agitation thermique limite E  
« Debye-Waller »



Si le déplacement moyen  $u(T)$   
est voisin de  $\lambda$  ( $u/\lambda \sim 2\pi$ ,  $k \cdot u \sim 1$ )  
les interférences se brouillent.

$$I = I_0 \cdot \exp(-\delta k \cdot u)^2$$

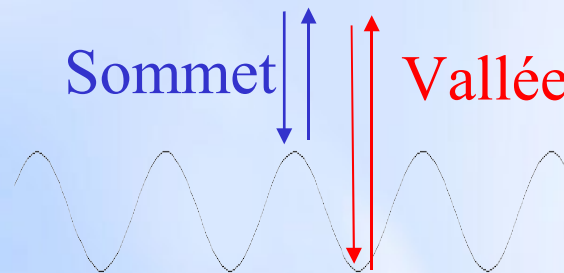
→  $E < 100 \text{ meV}$

→ la cible est refroidie.



# Points forts - points faibles

- + Les résultats sont simples à interpréter :  $Z(x,y)$ , effet Beeby, Armand..
- + Exclusivement sensible à la surface.
- + Grande sensibilité grâce au caractère « interférométrique ».



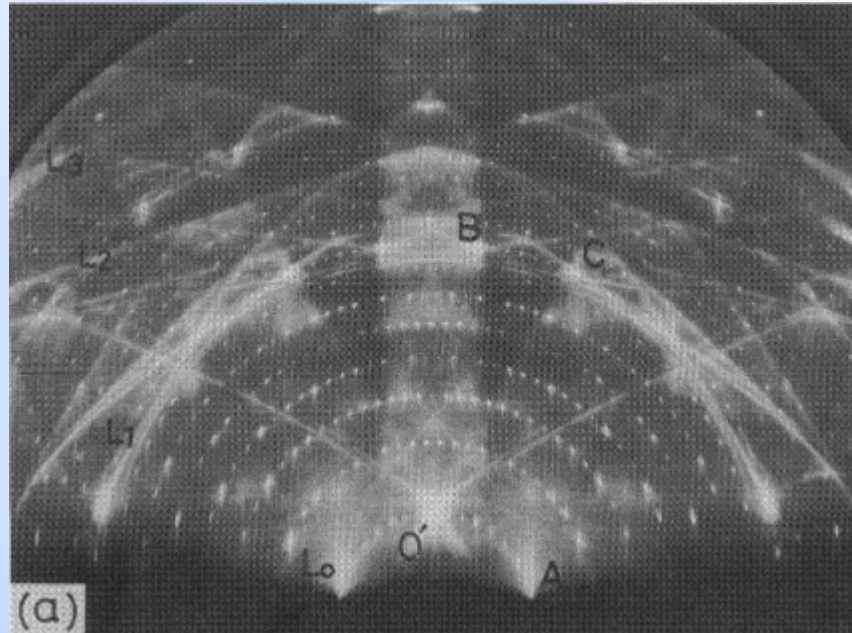
$$h_c = \text{Sommet} - \text{Vallée}$$

$$ddm = 2 * h_c, \quad d\phi = 2 * \pi * ddm / \lambda$$

- Technique intrinsèquement lente car il faut balayer point par point l'espace recouvrant la cible.
- On sonde la surface dans une région asymptotique  $Z > a$ .  
(Sur LiF ou NaCl les alcalins sont invisibles)



# RHEED Reflexion High Energy Electron Diffraction

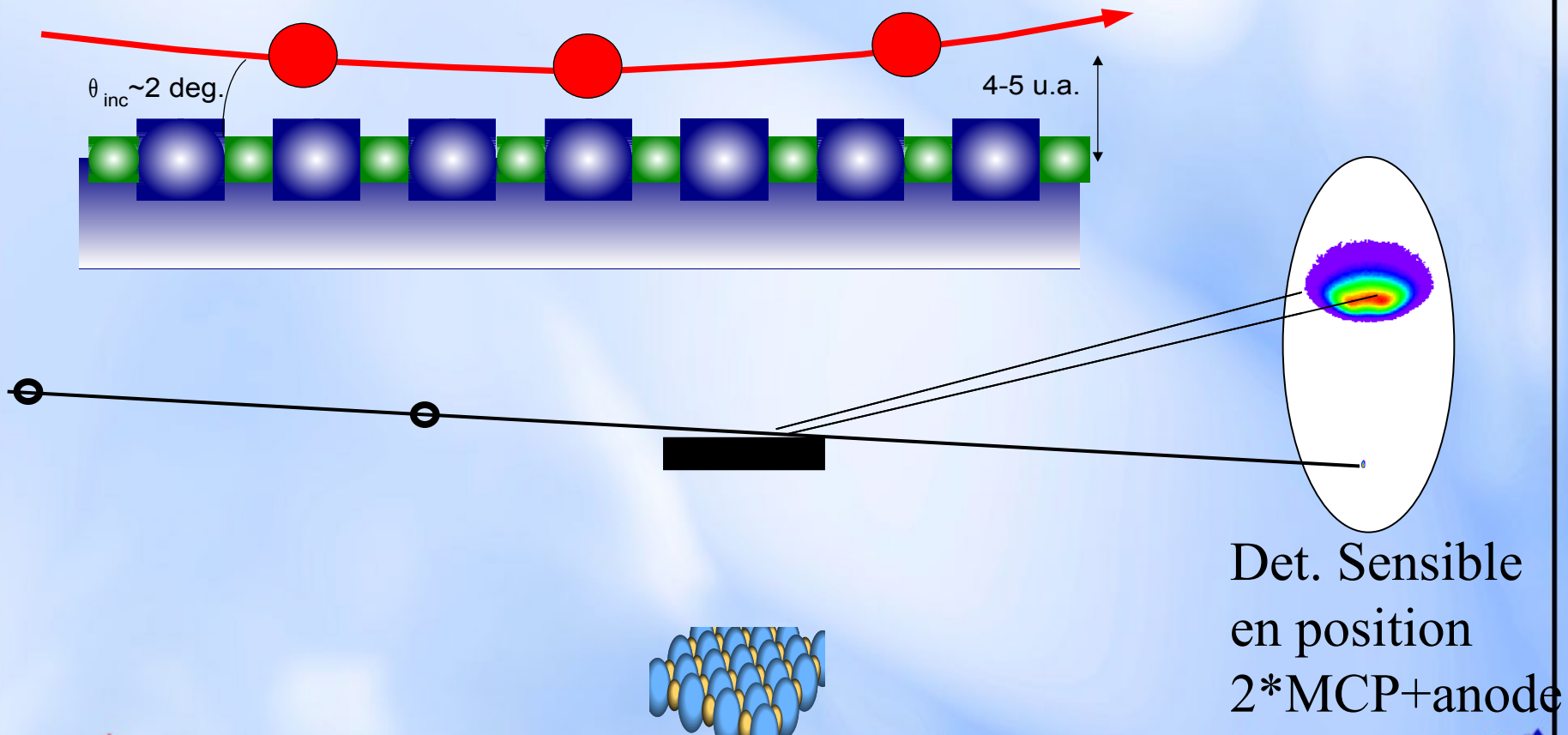


Technique « miracle », quasi universelle en MBE, car elle renseigne sur la cristallographie en surface et laisse la cible « dégagée ».

- difficile à interpréter quantitativement (autre que la maille)
- Difficulté avec les isolants.

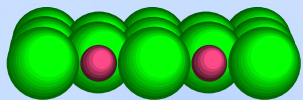
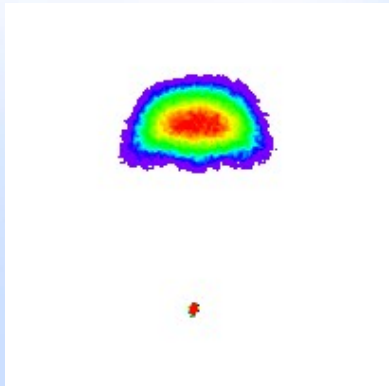


# Diffusion d'atomes rapides ( $E \sim \text{keV}$ ) $\lambda \sim \text{pm} \ll \delta u \ll \text{maille}$

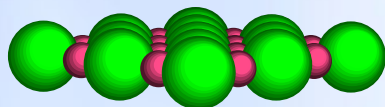
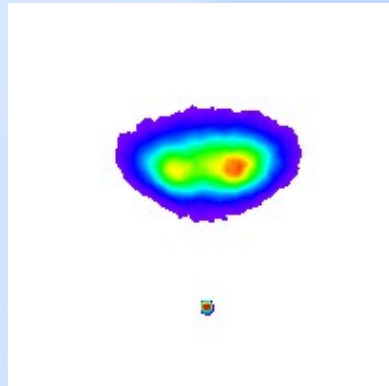




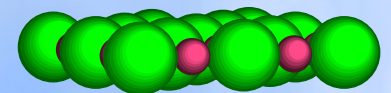
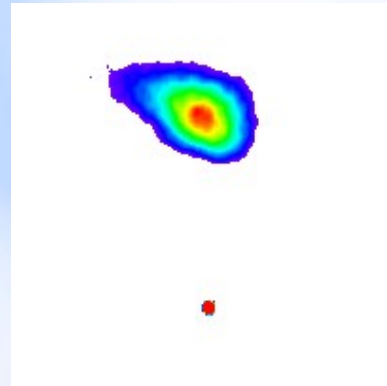
# dépendance azimuthale de la diffusion



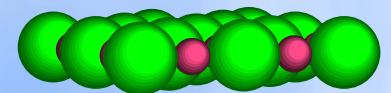
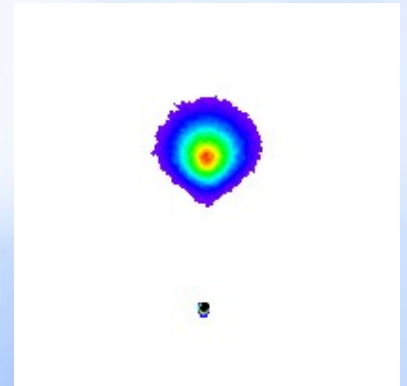
$\langle 100 \rangle$



$\langle 110 \rangle$



$\langle 110 \rangle + 2^\circ$



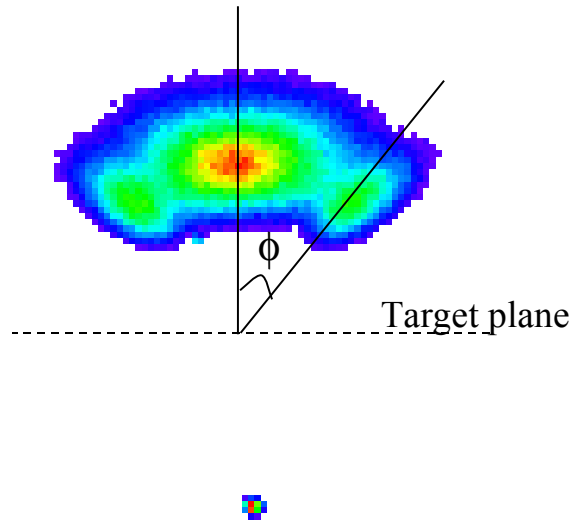
$\langle 210 \rangle$

Plus la surface est corrugée, plus l'angle d'ouverture est grand



# direction de canalisation : Classique

H° 500eV on NaCl(001)  $\theta_{in}=2,3^\circ$



L'angle d'ouverture du profil signe la pente maximal du potentiel

$$P(\phi) \sim P(dV(y,z)/dy)$$

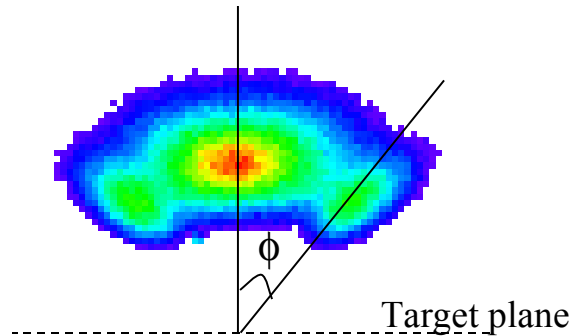
(hors zig-zag)



# direction de canalisation : Quantique

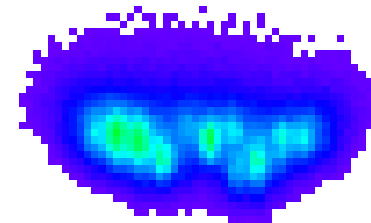
H° 500eV on NaCl(001)  $\theta_{in}=2,3^\circ$

T=200°C



Room temperature

$\theta = 1,4^\circ$

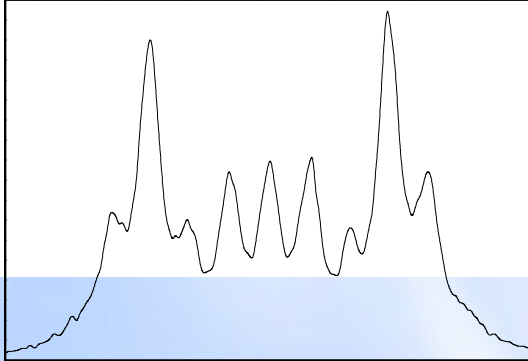
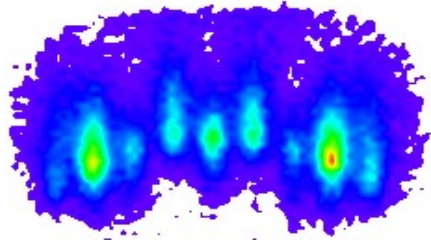


$d=3,9 \text{ \AA}$   
( $a=(5.63 \text{ \AA})$ )



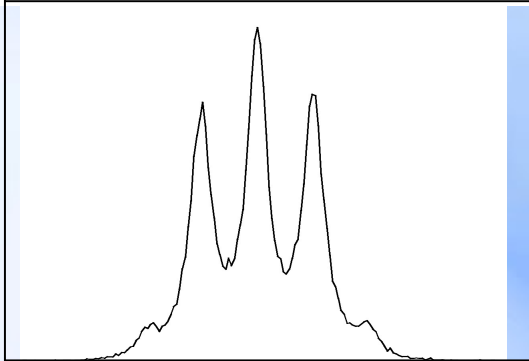
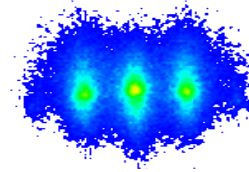
# écart entre pic donne la périodicité des sillons

He° à 200 eV sur LiF(001) le long de [110]



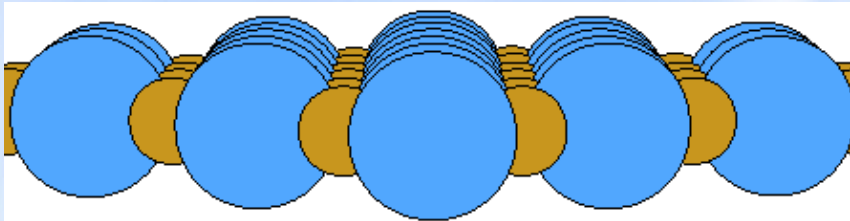
$$d = a/\sqrt{2}$$

He° 200 eV LiF(001) [100]

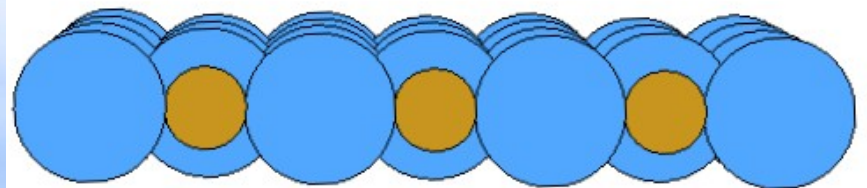


$$d = a/2$$

LiF(001) along  $\langle 110 \rangle$

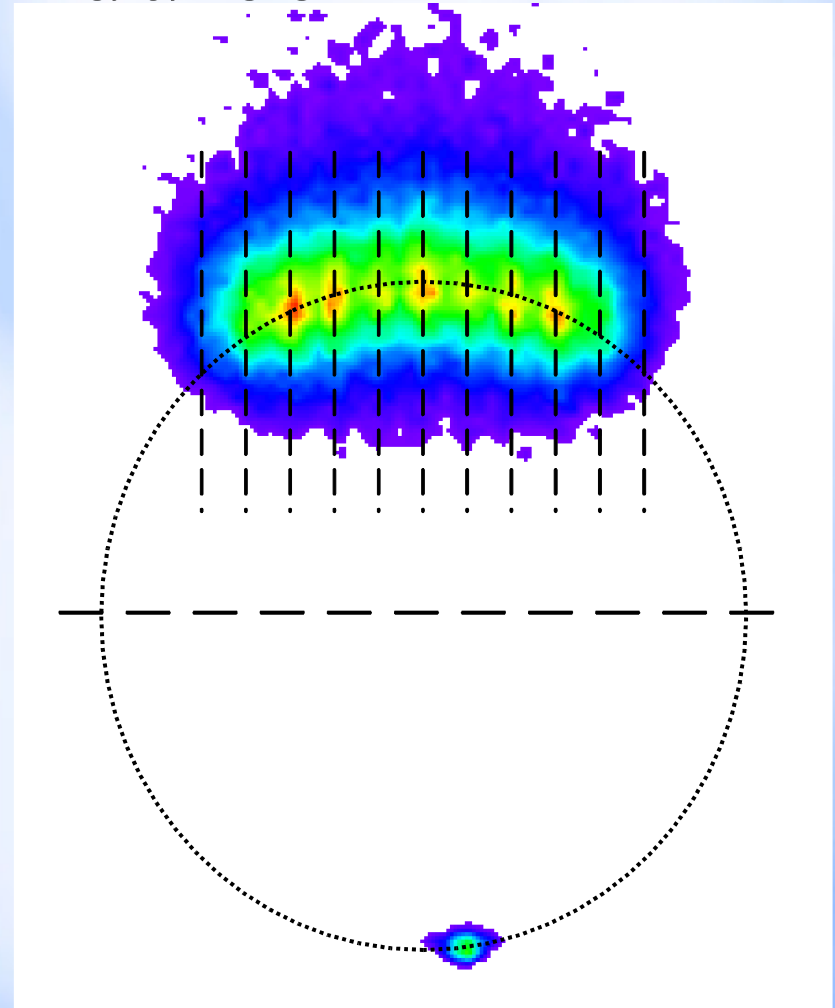
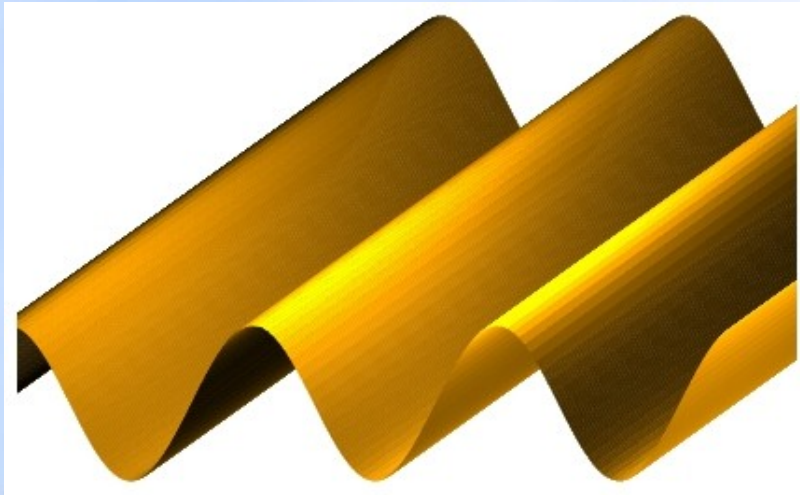


LiF(001) along  $\langle 100 \rangle$

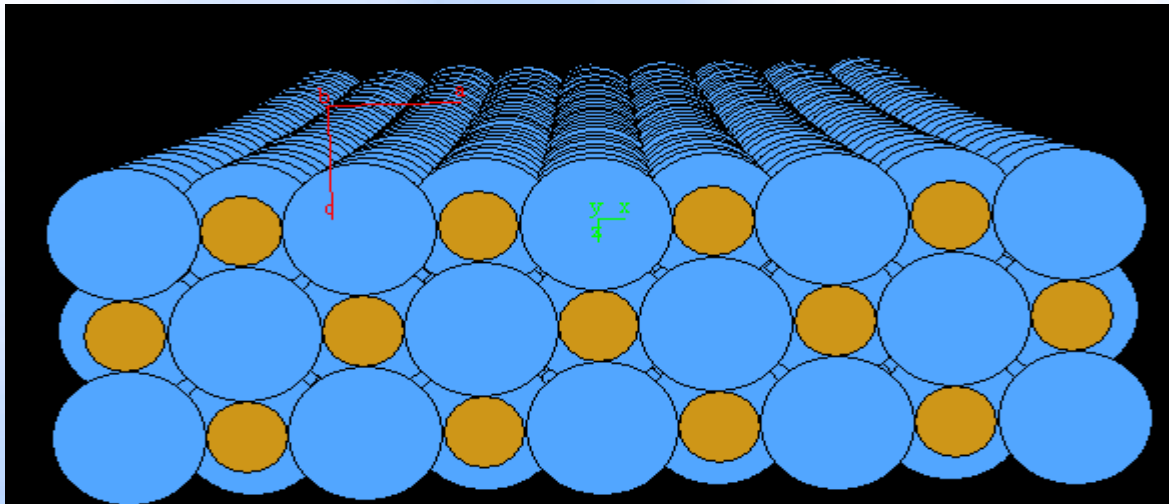


# Modèle de la tôle ondulée

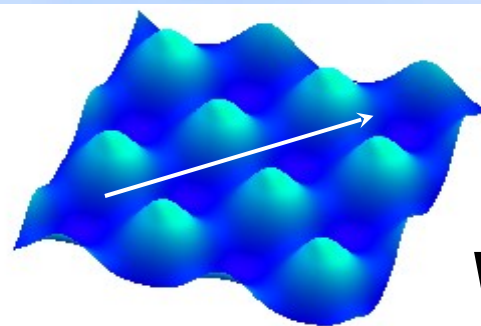
Les spots sont situés sur les plan de Bragg et sur un cercle d'énergie normale constante  $E_{\perp} = E_0 \sin^2 \theta_i$   
→ énergie normale est conservée  
→ Découplage des mouvements parallèles et perpendiculaire



Vue sous incidence rasante, la surface est formée de sillons.

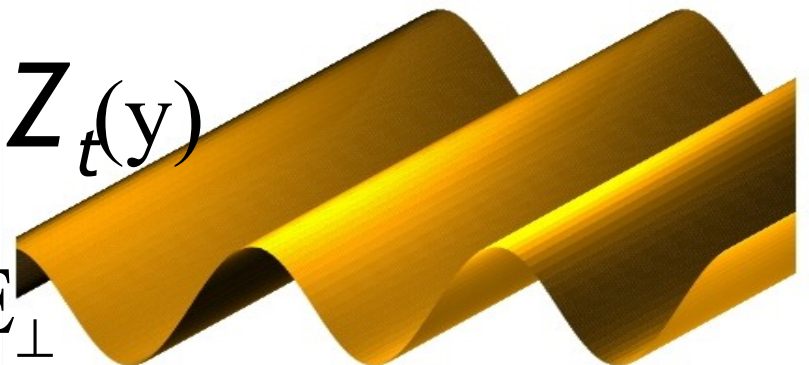


$$V(x,y,z) \rightarrow V(y,z) = V \text{ moyenné sur } x$$

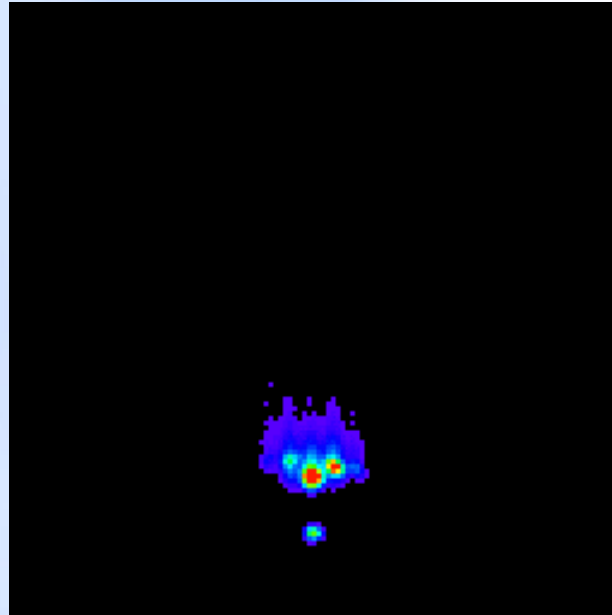


$$Z_t(x,y) \rightarrow Z_t(y)$$

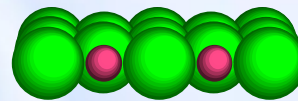
$$V(y, Z_t) = E_{\perp}$$



# Angular dependance : Rocking curve



L'intensité d'un ordre donné oscille en fonction de  $\theta$ .



$\langle 100 \rangle$



# Un système model (pas de chimie)

## He<sup>o</sup> LiF<100> 200 eV

A.G. Borisov

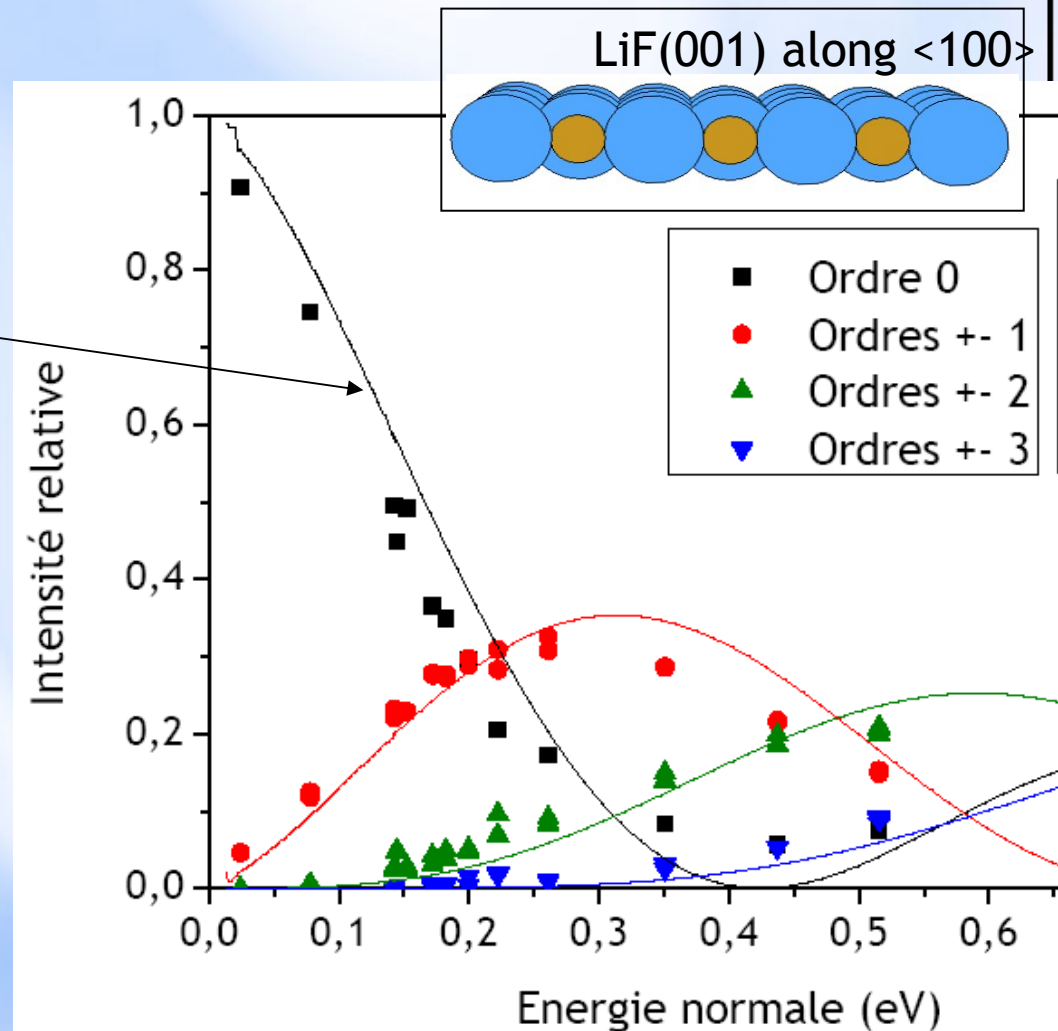
Paquet d'onde 3D sur une surface gelée.

Aucun paramètre ajustable

→ Validation du découplage  
//, ⊥

→ Potentiel sinusoïdal  
(on ne voit pas les Li<sup>+</sup>.)

$$P_n = J_n^2 \left( \frac{hc}{\lambda_{\perp}} \right)$$





# Atténuation thermique : Debye-Waller modifié

D'une manière générale, vibrations thermiques = perte de cohérence  
→ atténuation de l'intensité diffractée  $I = I_0 \cdot e^{-\langle u^2 \rangle \cdot \Delta k^2}$

NaCl(001) :

LEED :  $I/I_0 \sim e^{-3}$  à 300 K et  $E_e = 130$  eV

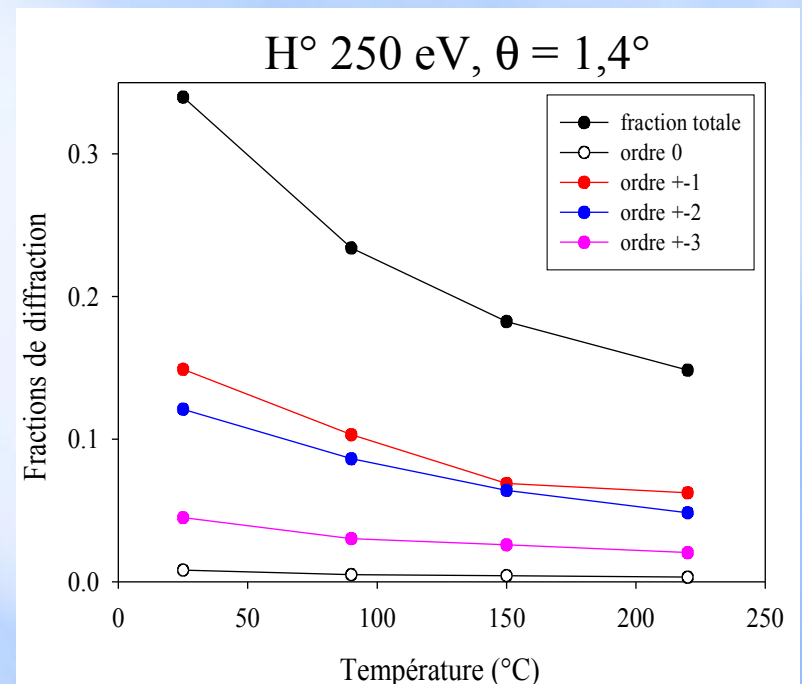
HAS :  $I/I_0 \sim e^{-5}$  à 300 K et  $E_{He} = 50$  meV

- atténuation exponentielle
- même facteur pour tous les ordres
- mais atténuation faible,  $I/I_0 \sim e^{-1}$

Longues trajectoires !

Vibrations thermiques moyennées ?

Définition d'un nouveau facteur  
d'atténuation thermique



# Un mouvement classique combiné à un mouvement quantique

Le mouvement rapide permet

- de moyennner le potentiel  $V(x,y,z) \rightarrow \bar{V}(y,z)$
- de moyennner les fluctuations  $u \rightarrow u/\sqrt{n}$
- de détecter directement les atomes diffusés sur une MCP
- de projeter l'ensemble de la diffraction (normale sur  $2\pi$ ) dans un cône étroit.

→ Demande de brevet « dispositif d'analyse de surface »



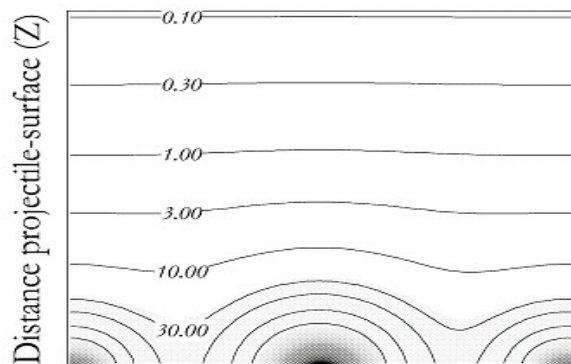
# Résumé He\_LiF

Au premier ordre (en négligeant l'agitation thermique), tout se passe comme si l'onde associée au mouvement transverse lent ( $E_{\perp} = E_0 \sin^2\theta$ ) diffractait sur les sillons.

Le mouvement rapide selon  $x$  transforme le potentiel 3D  $V(x,y,z)$  en un potentiel potentiel 2D moyen  $V(y,z) \rightarrow$  tôle ondulée 1D :  $Z(y)$

pour chaque incidence  $\theta$  on obtient un  $Z(y)$  à une énergie  $E_{\perp}$

Rocking curve  $\rightarrow$  2D potentiel  $Z(y, E_{\perp})$  entre 10 meV et 1 eV

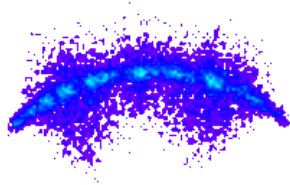


On obtient  $Z(y)$  et  $dV/dZ$

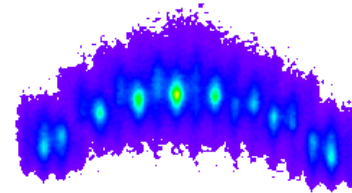


# Semi conducteurs (groupe V. Etgens)

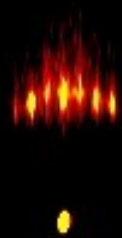
${}^3\text{He}^0$  - GaAs(001)  
 $E_0 = 300$  eV - axe [100]



${}^3\text{He}^0$  - ZnSe(001)  
 $E_0 = 400$  eV - axe  $[1\bar{1}0]$



# Reconstruction de surface $H_2$ sur ZnSe



<110>

+45°



<100>

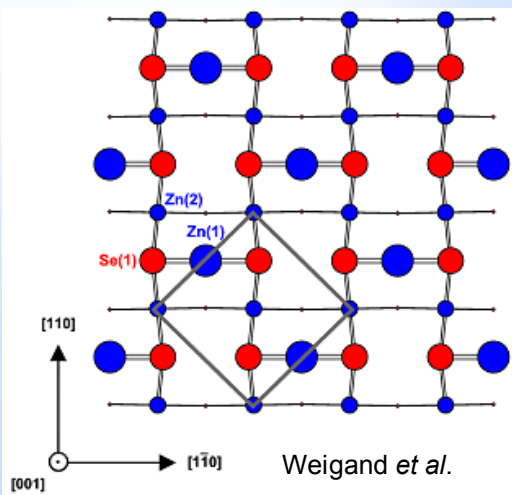
+45°



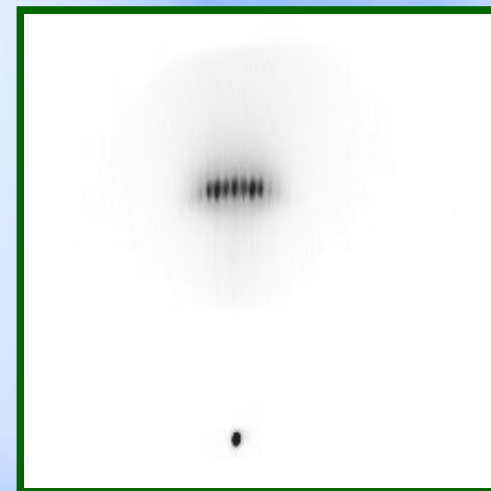
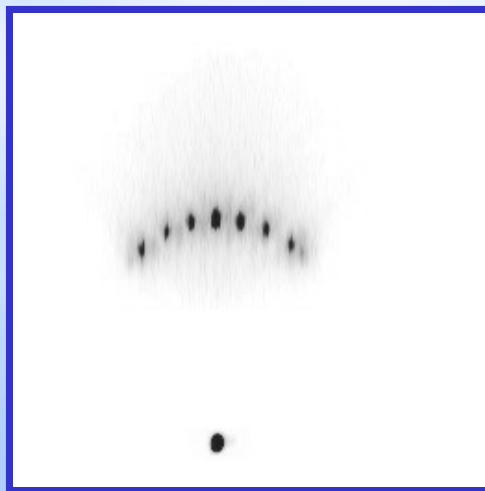
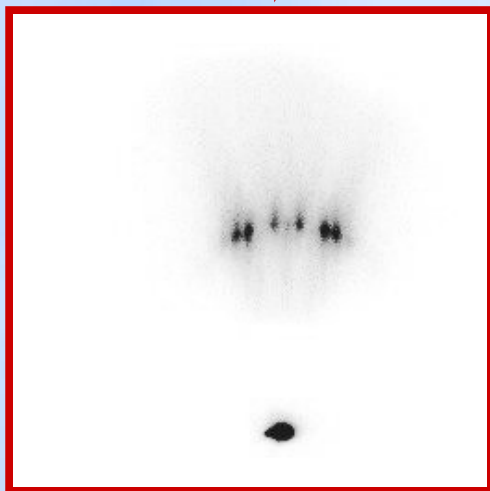
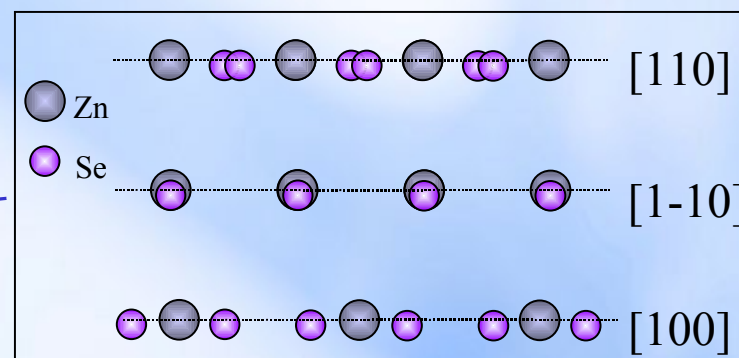
<1-10>



# Structure de ZnSe(001) c(2x2)

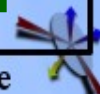


- Lacunes de Zn
- contraction de la 1<sup>ère</sup> couche de Zn
- déplacement des Se de la 2<sup>ème</sup> couche
- transfert d'électron de Zn vers Se

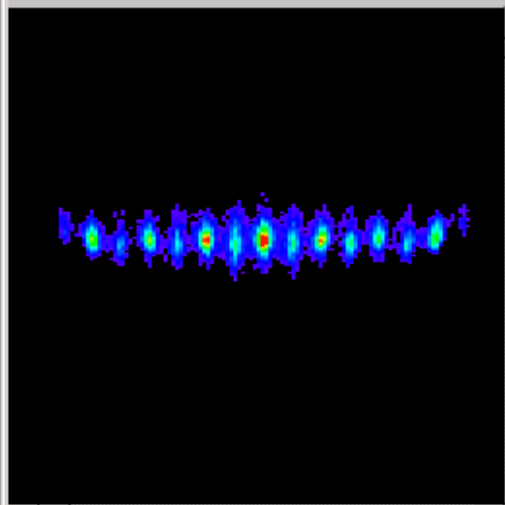


He à 400 eV

Équipe ions multichargés - surface



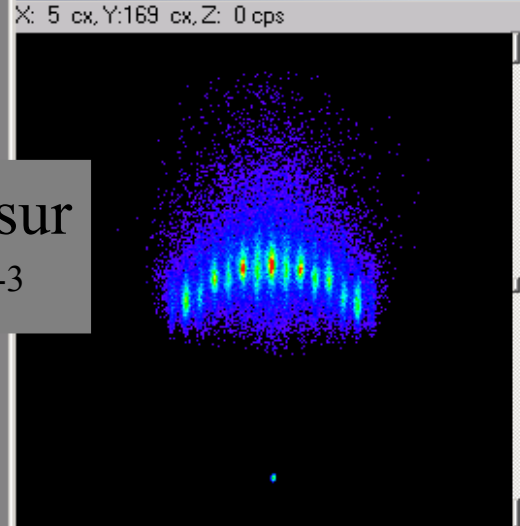
#39 new\_XY (y06\_b\_51)



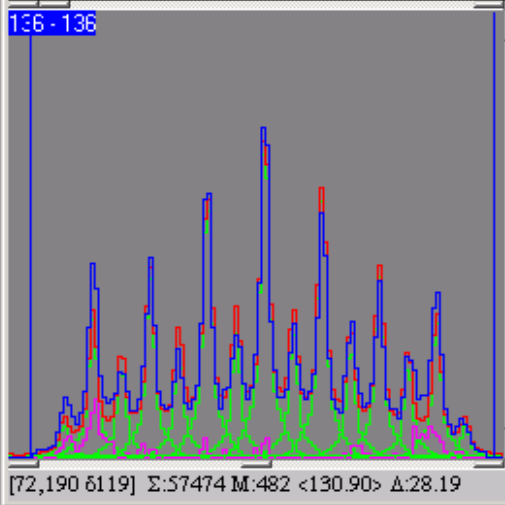
Init 1/1 Fit3 Sav OK  
 LM  Pond Rec View  
 5 GG\_ HW\_F Dia  
 Chi2=15.635  
 y0 20.000  
 X0 131.896  
 dX 7.390  
 w 2.032  
 W2 8.000  
 a 0.468  
 l 54460.465  
 Fd 22.985  
 Be 0.000  
 h1 0.476 53.8%  
 h2 0.373 42.2%  
 h3 0.017 1.9%  
 h4 0.052 5.8%  
 h5 -0.043 -4.9%

Précision sur Bragg  $\sim 10^{-3}$

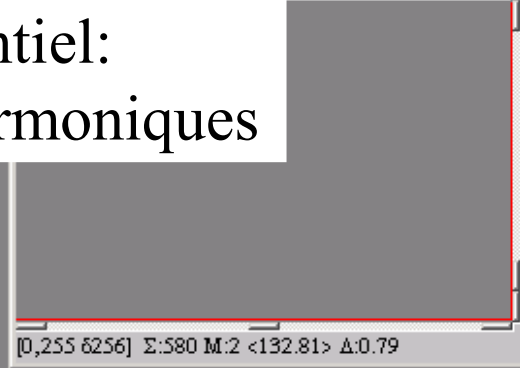
#11 XY brut (y06\_b\_51)



Potentiel:  
5 Harmoniques



[72,190 6119]  $\Sigma$ :57474 M:482 <130.90>  $\Delta$ :28.19

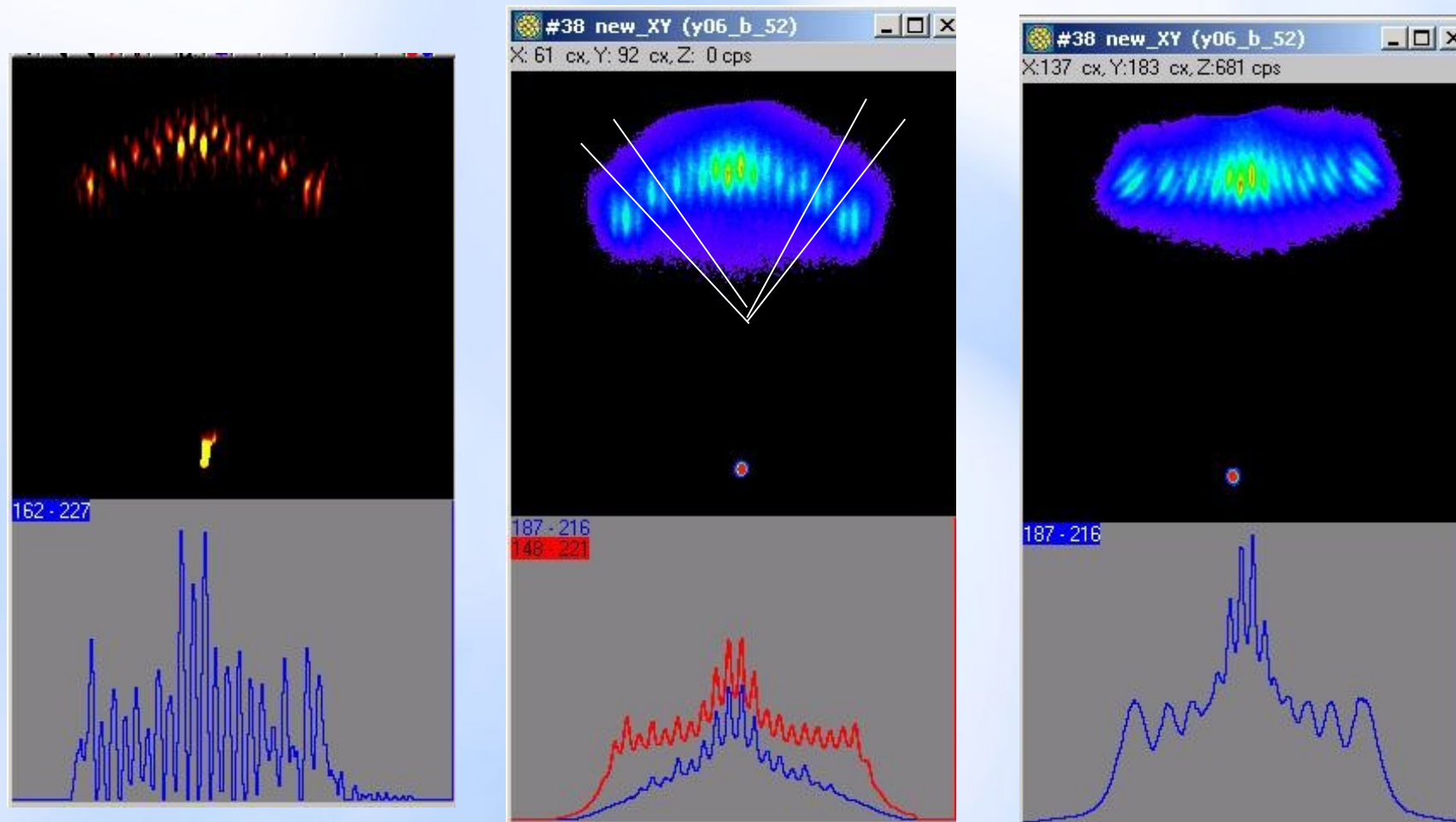


[0,255 6256]  $\Sigma$ :580 M:2 <132.81>  $\Delta$ :0.79

He<sup>o</sup> 500 eV sur ZnSe



# Au delà de bragg



← Dérivé seconde

→ transformation polaire

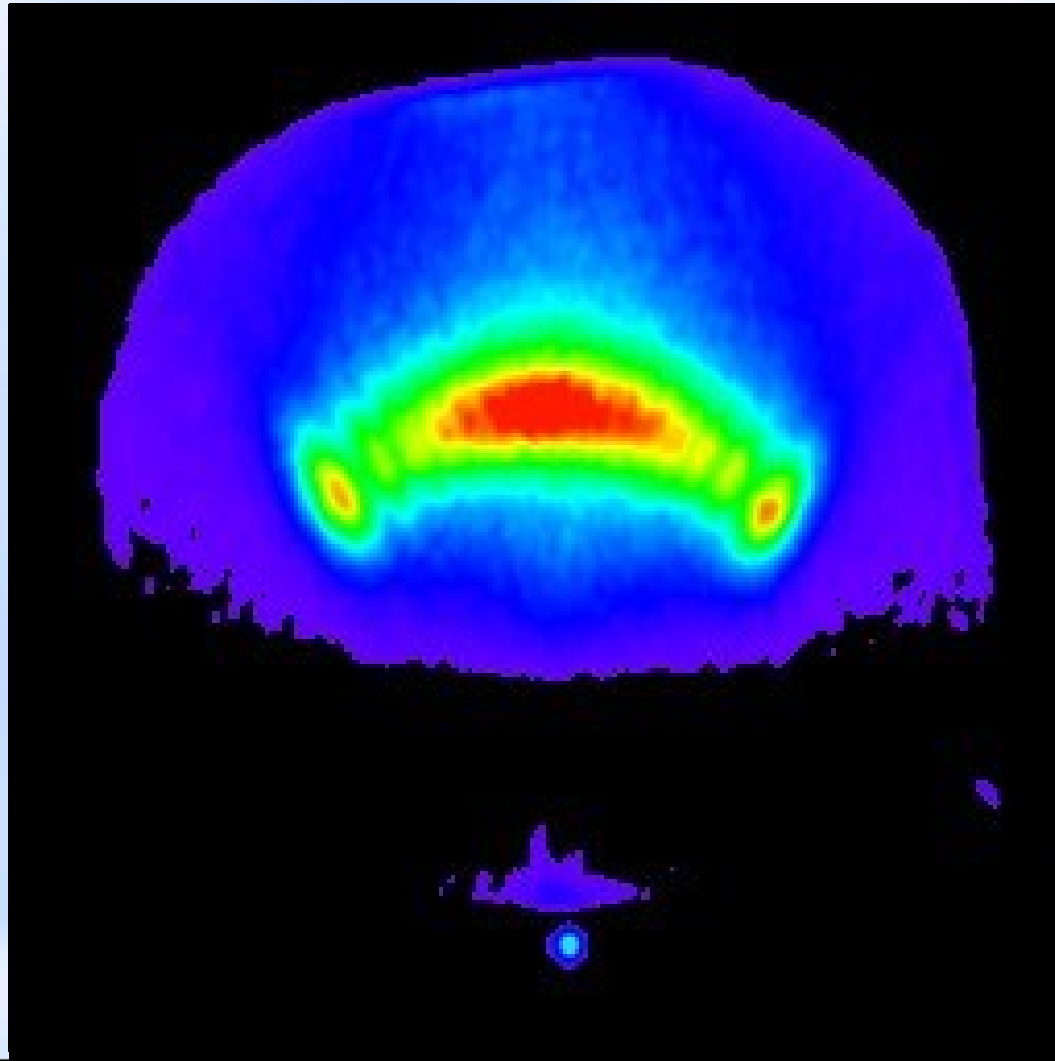




Haute énergie,  $\rightarrow$  Limite classique.  
On conserve l'information sur la forme.

He 3 keV  
ZnSe

Ne 0.3 keV  
ZnSe



# Perspectives

- Mouvement des atomes de surface:  
 $P(\theta)$  dépend de  $u(T)$ , quelle est l'information  $IC(\theta)$   
??  $P(\theta)^n$ , corrélation?
- Processus inélastiques (Welcher Weg..)
- Potentiel attractif, quelle est la sensibilité ?
- Sonder la densité électronique → liaisons ?
- Combiner DRS, LEIS et GILAD pour les films minces: Projet soumis à l'ANR
- Contribuer à ce GDR
  - 1) mesurer un potentiel particulier
  - 2) prendre des idées

