

TD no 4 Cristallographie de surface : Sn/Ge(111)

Résumé

Dans ce TD nous abordons certains aspects de la cristallographie de surface par le biais d'un système physique qui a été très étudié ces dernières années : Sn/Ge(111). Il s'agit d'un système présentant une surprenante transition de phase dont nous allons décrire la structure cristallographique, sans entrer dans le détail de l'origine physique de cette transition encore partiellement comprise.

1 Sn/Ge(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}R30^\circ$

On considère la surface (111) du Germanium (structure diamant) sur laquelle on dépose 1/3 de monocouche d'étain (Sn). La structure de surface obtenue est la suivante :

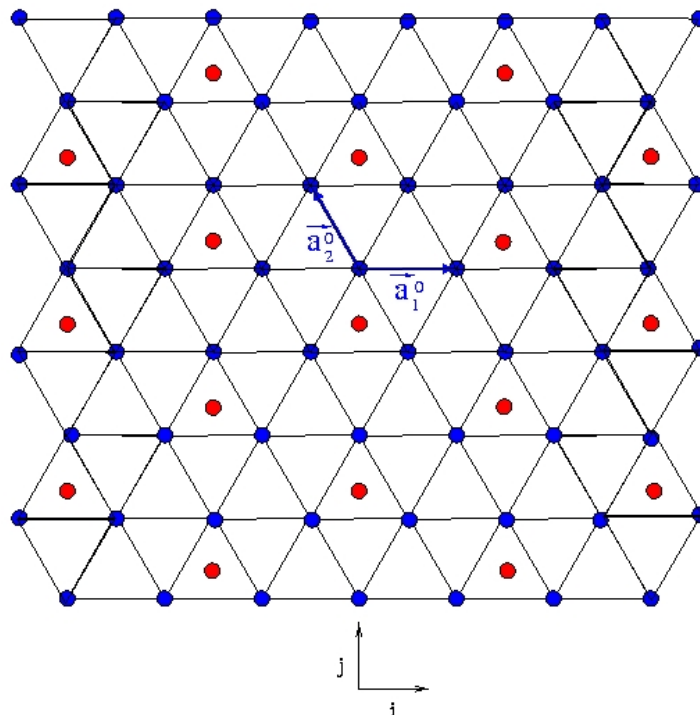


FIG. 1 – Surface Sn/Ge(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}R30^\circ$

Où les atomes représentés en bleu sont les atomes de la couche externe de Germanium et les atomes représentés en rouge sont ceux d'étain.

Question no 1 : On note \mathbf{a}_1^0 et \mathbf{a}_2^0 les vecteurs de base du réseau triangulaire de la surface (111) du Germanium. Dessinez la cellule de Wigner Seitz du réseau triangulaire. Déterminez \mathbf{g}_1^0 et \mathbf{g}_2^0 les vecteurs de base du réseau réciproque.

Question no 2 : Déterminez \mathbf{a}_1 et \mathbf{a}_2 les vecteurs de base du réseau formé par les adatoms d'étain en fonction de \mathbf{a}_1^0 et \mathbf{a}_2^0 . Quelle est la longueur des vecteurs \mathbf{a}_1 et \mathbf{a}_2 et l'angle formé entre \mathbf{a}_1 et \mathbf{a}_2 ? Expliquez pourquoi cette structure est notée $\sqrt{3} \times \sqrt{3}R30^\circ$.

La notation $(p \times q)R\theta^\circ$ est une notation très utile (et très utilisée) en physique des surfaces pour décrire la structure cristallographique d'adsorbats déposés sur une surface. Elle signifie que la cellule unité des adsorbats est tournée d'un angle θ par rapport à celle de la surface "nue" et que la longueur des vecteurs de base est multipliée par p et q respectivement.

Question no 3 : Dessinez la cellule de Wigner Seitz du réseau formé par les adsorbats.

Question no 4 : Déterminez \mathbf{g}_1 et \mathbf{g}_2 les vecteurs de base du réseau réciproque des adsorbats.

2 Sn/Ge(111) 3×3

En fait à basse température (environ 100K) une transition de phase se produit au cours de laquelle 2/3 des atomes (en vert) se rapprochent de la surface de Germanium tandis que le dernier 1/3 des atomes (en rouge) s'éloigne de la surface. La structure obtenue est schématiquement la suivante :

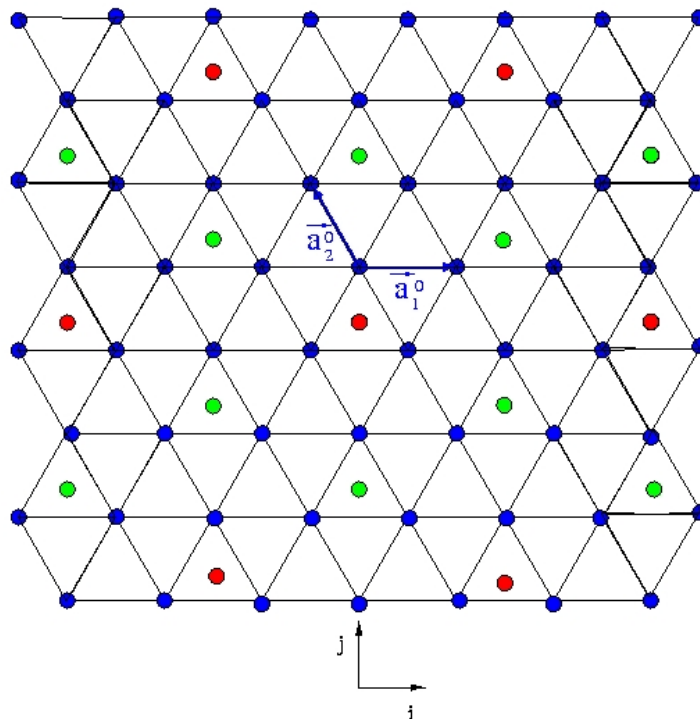


FIG. 2 – Surface Sn/Ge(111) 3×3

Question no 5 : Dessinez les vecteurs de base a'_1 et a'_2 et expliquez pourquoi cette transition de phase est notée $\sqrt{3} \times \sqrt{3}R30^\circ \leftrightarrow 3 \times 3$

Question no 6 : Déterminez les vecteurs de base g'_1 et g'_2 du réseau réciproque de la structure 3×3 que vous dessinerez sur le même schéma que les vecteurs g_1 et g_2 . Représentez également la première zone de Brillouin de la structure 3×3 .

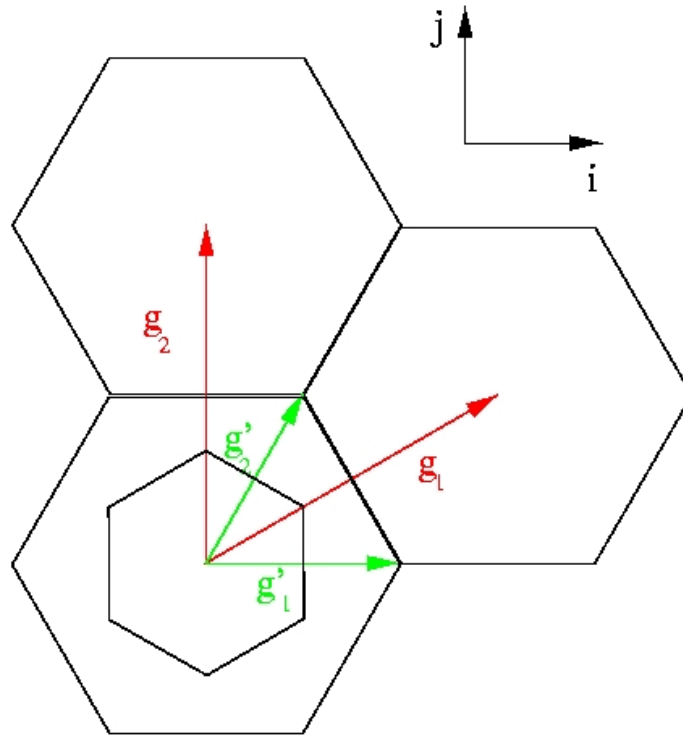


FIG. 3 – Première zone de Brillouin des structures $\sqrt{3} \times \sqrt{3}R30^\circ$ et 3×3

Question no 7 : Montrez que la première zone de Brillouin de la structure $\sqrt{3} \times \sqrt{3}R30^\circ$ peut se "replier" dans celle de la structure 3×3 .