

Table des matières

Avant-propos	xi
Introduction	xvii
I Le concept de surface	1
1 Description thermodynamique d'une surface	5
1.1 Cas des fluides : travail de création de surface	6
1.1.1 Travail mécanique en présence d'une interface : expression du 1 ^{er} principe	6
1.1.2 Du système réel à sa modélisation : définition des grandeurs d'excès	8
1.1.3 Travail de création de surface vu comme une grandeur d'excès	11
1.2 Cas des solides cristallisés	15
1.2.1 Anisotropie cristalline et travail de déformation de surface (surface plane)	15
1.2.2 Les tenseurs de contraintes de surface et de déformation de surface vus comme des grandeurs d'excès	18
1.2.3 Éléments de thermodynamique des surfaces cristallines	21
1.3 Détermination expérimentale et théorique de γ et s	24
1.3.1 Mesure de γ pour un liquide	24
1.3.2 Mesure de γ pour un cristal	28
1.3.3 Mesure de \tilde{s} pour une surface cristalline	32
1.3.4 Détermination théorique des énergies de surface	34
2 Description macroscopique d'une surface cristalline	43
2.1 Classification des surfaces	43
2.1.1 Travail de création d'une face vicinale	44
2.1.2 Énergie de surface d'une face K et notion de stabilité de surface	49

2.1.3	Énergie de surface d'une face F et extension d'une facette plane sur la forme d'équilibre	50
2.2	Évolution d'une surface avec la température	52
2.2.1	Transition rugueuse d'une face plane	53
2.2.2	Transition rugueuse d'une face vicinale	59
2.2.3	Observation de la transition rugueuse	62
2.3	Fusion de surface	64
2.3.1	Variation d'énergie libre pendant le processus de fusion	64
2.3.2	Travail de création de surface et effet de taille	66
2.3.3	Fusion de surface	67
3	Structure atomique des surfaces cristallines	71
3.1	Groupes ponctuels et groupes d'espace de surface	71
3.2	Relaxation et reconstructions de surface	74
3.2.1	Notations utilisées	76
3.2.2	Exemple de la reconstruction 7×7 de Si(111)	79
3.3	Formations de domaines de surface	80
	Problèmes et exercices	85
II	Propriétés des surfaces	95
1	Propriétés vibrationnelles	99
1.1	Introduction	99
1.2	Vibrations cristallines d'une chaîne linéaire diatomique de longueur finie	100
1.2.1	Cas de la chaîne infinie	100
1.2.2	Cas de la chaîne diatomique semi-infinie	102
1.3	Cas des cristaux tridimensionnels	105
1.4	Propriétés thermiques de surface	108
2	Structure électronique d'une surface	109
2.1	Densité électronique près d'une surface et travail de sortie	110
2.1.1	Modèle des électrons libres	110
2.1.2	Approche de Lang et Kohn	117
2.2	États électroniques de surface	120
2.2.1	Méthode des électrons presque libres	120
2.2.2	Méthode des liaisons fortes	122
2.3	Magnétisme de surface	125
2.3.1	Aperçu qualitatif du magnétisme de la matière	125
2.3.2	Influence de la surface	127

3 Propriétés optiques	131
3.1 Introduction : limites de l'approche classique	131
3.2 Au-delà de la discontinuité d'indice : modèle macroscopique de Drude	135
3.3 Approche microscopique et non localité	138
3.3.1 Expression asymptotique des champs	139
3.3.2 Description de la couche de surface	140
3.3.3 Discussion	142
3.3.4 Calcul de la fonction diélectrique	144
3.4 Plasmons de surface	145
3.4.1 Approche classique	145
3.4.2 Au-delà de l'approche classique	148
4 Composition chimique de surface d'un alliage	149
4.1 Phénomène de ségrégation	149
4.2 Description élémentaire de la ségrégation de surface	150
4.2.1 Minimisation de l'énergie libre	150
4.2.2 Expression de l'énergie libre	151
4.2.3 Calcul des concentrations d'équilibre	152
4.3 Discussion	153
Problèmes et exercices	159
III Les moyens de caractérisation courants	165
1 Surface propre et environnement ultra-vide	169
2 La spectroscopie Auger	173
2.1 Principe général	173
2.2 Instrumentation : sources, détecteurs, modes de détection . . .	175
2.2.1 Sources	175
2.2.2 Détection	176
2.3 Utilisation quantitative : volume détecté, quantités relatives . .	179
2.3.1 Volume détecté	180
2.3.2 Détermination de la quantité relative de surface	181
2.3.3 Quelques questions pratiques	187
3 La spectroscopie de photoélectrons excités par rayons X : l'XPS	191
3.1 Principe général	191
3.2 Physique des processus d'excitation	192
3.3 Instrumentation	194
3.3.1 Les sources	194
3.3.2 Influence du travail de sortie du détecteur	195

3.4	Mesure quantitative	197
3.4.1	Niveaux de cœur (XPS)	197
3.4.2	Niveaux de valence (UPS)	198
3.4.3	États de surface	199
4	Techniques de diffraction de surface LEED et RHEED	203
4.1	Principe	203
4.2	Diffraction sur une surface bidimensionnelle : approche simplifiée	204
4.3	Grandeurs caractéristiques	206
4.3.1	Longueur d'onde	206
4.3.2	Écarts entre points de diffraction	207
4.3.3	Profondeur de pénétration	208
4.3.4	Cohérence du faisceau d'électrons	209
4.4	Instrumentation et image de diffraction en LEED	210
4.5	Instrumentation et image de diffraction en RHEED	212
4.5.1	Image RHEED et imperfections du système	212
4.5.2	Construction du réseau à partir des images RHEED	214
4.5.3	Cas des surstructures	216
4.5.4	Influence de la morphologie de la surface	219
5	Techniques de microscopie de surface	221
5.1	Techniques dérivées de la microscopie électronique classique	221
5.1.1	Rappels de microscopie électronique	221
5.1.2	Microscopie en réflexion (REM)	223
5.1.3	Microscopie à faible énergie (LEEM)	225
5.1.4	Conclusion partielle	226
5.2	Microscopies à champ proche	227
5.2.1	Principe	227
5.2.2	Microscopie STM	229
5.2.3	Microscopie AFM	235
6	Étude expérimentale des propriétés optiques de surface	239
6.1	Méthodes sensibles à la surface : réflectométrie et ellipsométrie	239
6.1.1	Réflectométrie	239
6.1.2	Ellipsométrie	240
6.2	Vraies méthodes de surface : réflectance anisotrope et génération de fréquence somme	243
6.2.1	Génération de fréquence somme	243
6.2.2	Réflectance anisotrope	245
	Problèmes et exercices	249

IV	Surface et rayonnement synchrotron	259
1	Principe du rayonnement synchrotron	263
1.1	Idées de base	263
1.2	Émission de rayonnement par une particule chargée	264
1.3	Caractéristiques du rayonnement synchrotron	265
2	Interaction rayonnement – matière	271
2.1	Hamiltonien d'un système photons + particules	271
2.1.1	Expression générale et signification physique	271
2.1.2	Ordre de grandeur de l'interaction, résonance	273
2.1.3	Approximation dipolaire électrique	275
2.2	Probabilité de transition, sections efficaces, diffusion	275
2.2.1	Règle d'or de Fermi	275
2.2.2	Section efficace d'absorption	277
2.2.3	Section efficace de diffusion élastique : diffraction	277
2.3	Transitions dipolaires et règles de sélection	282
3	Absorption d'un rayonnement et surface	285
3.1	L'EXAFS	285
3.1.1	Principe	285
3.1.2	Formalisme de l'EXAFS en diffusion simple	290
3.1.3	Traitement des données	293
3.1.4	EXAFS en diffusion multiple	295
3.1.5	La polarisation : un atout supplémentaire	299
3.2	Le dichroïsme magnétique circulaire	302
3.2.1	Principe et description	302
3.2.2	Modèle dit en deux étapes	304
3.2.3	Exploitation des données expérimentales	305
3.2.4	Intérêts de la technique	308
4	Diffraction des rayonnements par une surface	311
4.1	La diffraction de surface	311
4.1.1	Intensité diffractée : tiges de troncature	311
4.1.2	Sensibilité à la surface	315
4.1.3	Comparaison avec la diffraction d'électrons	319
4.2	Le DAFS : structure fine de diffusion anormale	320
4.2.1	Principe et formulation	320
4.2.2	Exemples d'application	322
	Problèmes et exercices	327

V	Adsorption sur une surface	335
1	Classification des interactions adsorbat/surface	339
1.1	Description qualitative : coefficient de collage, physisorption, chimisorption	339
1.2	Formalisme de la physisorption	341
1.2.1	Attraction de Van der Waals entre dipôles	341
1.2.2	Attraction Van der Waals par une surface	342
1.2.3	Interaction atome surface : généralisation	343
1.3	Formalisme de la chimisorption	343
1.4	Physisorption ou chimisorption ?	346
2	La référence : le cristal en équilibre avec sa vapeur	347
2.1	Potentiel chimique d'un gaz monoatomique parfait	348
2.2	Potentiel chimique d'un cristal d'Einstein	349
2.3	Pression de vapeur saturante, sur- et sous-saturation	349
2.4	Modèle proches voisins et notion de pas répétable	350
3	La surface en présence d'une vapeur étrangère : phases 2D	353
3.1	Cas de l'adsorption	353
3.1.1	Caractéristiques du flux adsorbé	354
3.1.2	Diffusion de surface et sites de nucléation	355
3.1.3	Structure de la couche adsorbée : (dé-)localisation, (in-)commensurabilité	358
3.2	Description de la désorption	363
3.2.1	Énergie de désorption	363
3.2.2	Exemples de cinétiques de désorption	364
3.2.3	Caractéristiques du flux désorbé	367
3.3	Isothermes d'adsorption et phases 2D	372
3.3.1	Équilibre de phases bidimensionnelles	372
3.3.2	Conditions de stabilité de la couche adsorbée	377
3.3.3	Adsorption en multicouches	379
3.4	Transitions de phases bidimensionnelles	381
3.4.1	Diagramme de phase 2D	381
3.4.2	Effets du substrat	383
3.4.3	Transition 2D \rightarrow 3D	384
	Problèmes et exercices	391
VI	Introduction à la croissance cristalline	401
1	Mécanismes de croissance sur une surface	405
1.1	Notion de sursaturation	405
1.2	Croissance d'une face K	406

1.3	Croissance limitée par la cinétique de diffusion :	
	cas d'une face S	407
1.3.1	Distance parcourue par un adatome à la surface	407
1.3.2	Cinétique d'incorporation dans un gradin rectiligne	408
1.3.3	Instabilités de croissance des faces S	411
1.4	Croissance limitée par la nucléation 2D :	
	cas d'une face F parfaite	413
1.5	Croissance d'une face F réelle :	
	effet des dislocations émergentes	415
1.6	Remarques	418
2	Croissance épitaxiale	421
2.1	Le concept d'épitaxie	421
2.2	Approche énergétique des modes de croissance	424
2.2.1	Cas sans élasticité	424
2.2.2	Cas avec élasticité	431
2.3	Transition 2D/3D cinétique	442
2.3.1	Modèle de croissance	442
2.3.2	Détermination des modes de croissance :	
	les oscillations de RHEED	445
	Problèmes et exercices	453
VII	Introduction à l'auto-organisation	
	et application à la croissance	
	de nanostructures	465
1	Élasticité comme moteur de l'auto-organisation de surface	469
1.1	Description du mécanisme	469
1.2	Modèle à une dimension	470
1.2.1	Expression de la période	470
1.2.2	Exemples expérimentaux	472
1.3	Vers un modèle à deux dimensions	474
1.4	Utilisation des surfaces auto-organisées en croissance cristalline	476
2	La relaxation plastique comme moteur de la croissance	
	organisée	479
	Appendice A : Élasticité	483
	Appendice B : Règle d'or de Fermi	493
	Appendice C : Méthode des phases	497