



HAL
open science

Diffraction d'électrons lents - DEL. Diffraction d'Electrons Lents DEL, Low Energy Electron Diffraction LEED, Low Energy Electron Microscopy LEEM

Ludovic Douillard

► **To cite this version:**

Ludovic Douillard. Diffraction d'électrons lents - DEL. Diffraction d'Electrons Lents DEL, Low Energy Electron Diffraction LEED, Low Energy Electron Microscopy LEEM. Master. Spectrométries de surface, Univ. Paris Saclay - Département de Physique, France. 2023. hal-04487547

HAL Id: hal-04487547

<https://hal.science/hal-04487547>

Submitted on 3 Mar 2024

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

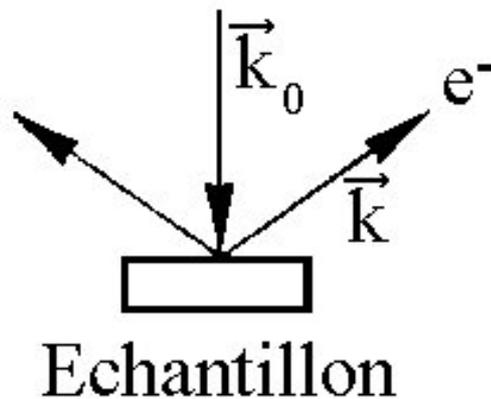
L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Diffraction d'électrons lents - DEL.

Diffraction d'Electrons Lents DEL,
Low Energy Electron Diffraction LEED,
Low Energy Electron Microscopy LEEM.

➤ **Principe.** - C.J. Davisson, L.H. Germer *Phys. Rev.* **30** (1927) 705.

Diffraction élastique d'électrons lents par la surface d'un échantillon cristallin.



1). **Electrons lents** d'énergie 10 eV à 300 eV.

La longueur d'onde de *de Broglie* λ_e , associée à un électron d'énergie E s'écrit (h constante de Planck, m_e masse d'un électron) :

$$\lambda_e = \frac{h}{\sqrt{2m_e E}}, \text{ soit } \lambda_e(\text{\AA}) \approx \frac{12.26}{\sqrt{E(\text{eV})}}$$

$$10 \text{ eV} < E < 300 \text{ eV} \Leftrightarrow 0.71 \text{ \AA} < \lambda_e < 3.16 \text{ \AA},$$

λ_e du même ordre de grandeur que les distances cristallographiques (inter-atomiques) des solides \Rightarrow **diffraction**,

2). **Électrons lents** d'énergie 10 eV à 300 eV.

λ libre parcours moyen élastique $\approx 5 \text{ \AA}$ à 10 \AA ,

\Rightarrow le phénomène de **diffraction élastique** met en jeu les plans atomiques les plus externes de la surface analysée – **diffraction de surface**.

Diffraction d'électrons lents - Aspects cristallographiques.

➤ Surface cristalline - Aspects cristallographiques.

Le phénomène de diffraction résulte de l'interaction entre 1) la période d'une onde sonde λ_e et 2) la période d'un arrangement régulier de centres diffuseurs,

Onde sonde = Électrons lents, longueur d'onde λ_e ,
Arrangement de centres diffuseurs = Surface cristalline, maille.

Une surface cristalline est un arrangement bidimensionnel d'atomes. Cet arrangement est décrit via les définitions **d'un réseau cristallin** et **d'une base**.

➤ Réseau cristallin.

Le **réseau cristallin** définit la périodicité bidimensionnelle de l'arrangement par la donnée des **vecteurs de translation fondamentaux** ($\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$).

Dans le système d'axes cristallographiques ($O, \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$), un nœud n quelconque du réseau est repéré par un vecteur \mathbf{r}_n :

$$\mathbf{r}_n = u\mathbf{a}_1 + v\mathbf{a}_2, (u, v) \text{ entiers quelconques,}$$
$$\mathbf{r}'_n = \mathbf{r}_n + u'\mathbf{a}_1 + v'\mathbf{a}_2, (\text{équivalence par translation})$$

Les vecteurs de translation fondamentaux ($\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$) définissent **la maille élémentaire ou primitive de surface** (un seul nœud).

Diffraction d'électrons lents - Aspects cristallographiques.

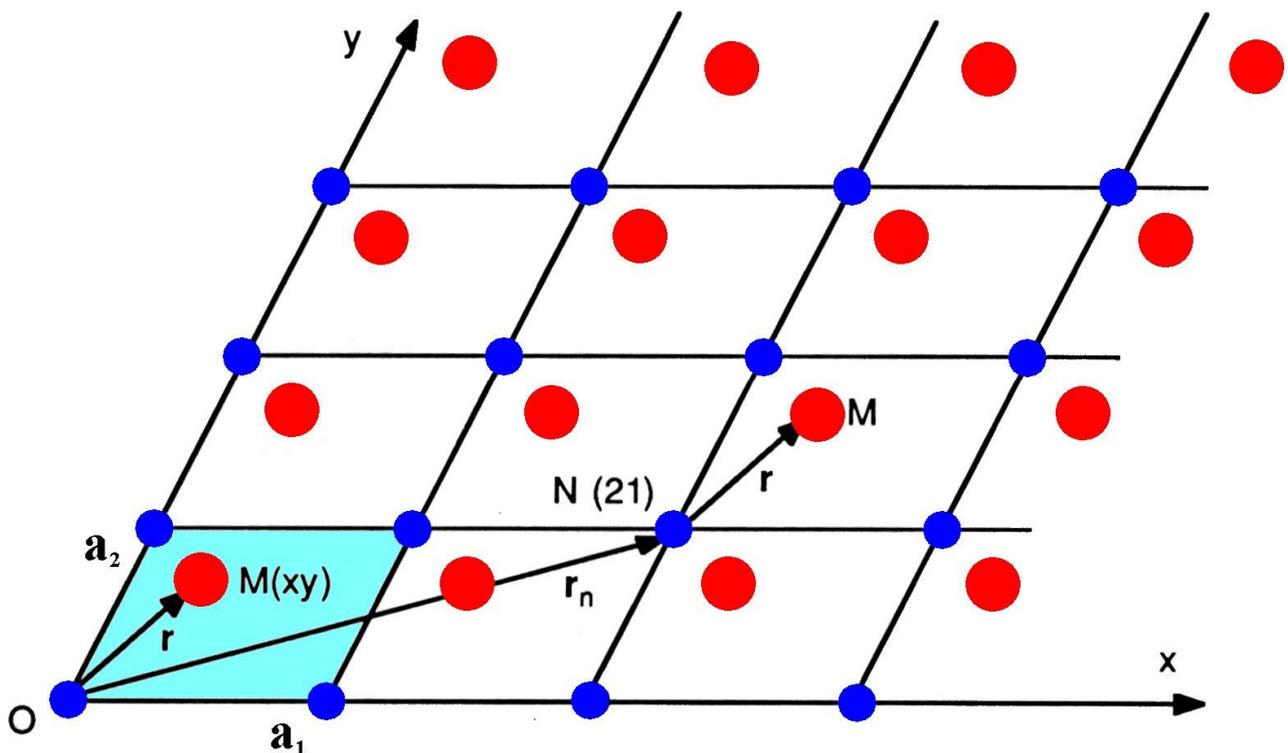
➤ Motif atomique (base).

Le réseau cristallin est une abstraction mathématique. Pour décrire une structure cristalline, il faut attacher à chaque nœud un **motif (base) atomique** représentatif du contenu de la maille.

La position d'un atome M à l'intérieur d'une maille est repérée par un vecteur $\mathbf{r}(xy)$:

$$\mathbf{r}(xy) = x\mathbf{a}_1 + y\mathbf{a}_2, \quad (0 \leq x < 1, 0 \leq y < 1)$$

Structure cristalline 3D = Réseau 3D + Base 3D
Surface cristalline = Réseau 2D + Base



Réseau = Réseau oblique ($\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$),

Base à 2 atomes = 1 atome bleu (0, 0) + 1 atome rouge ($1/3, 2/3$).

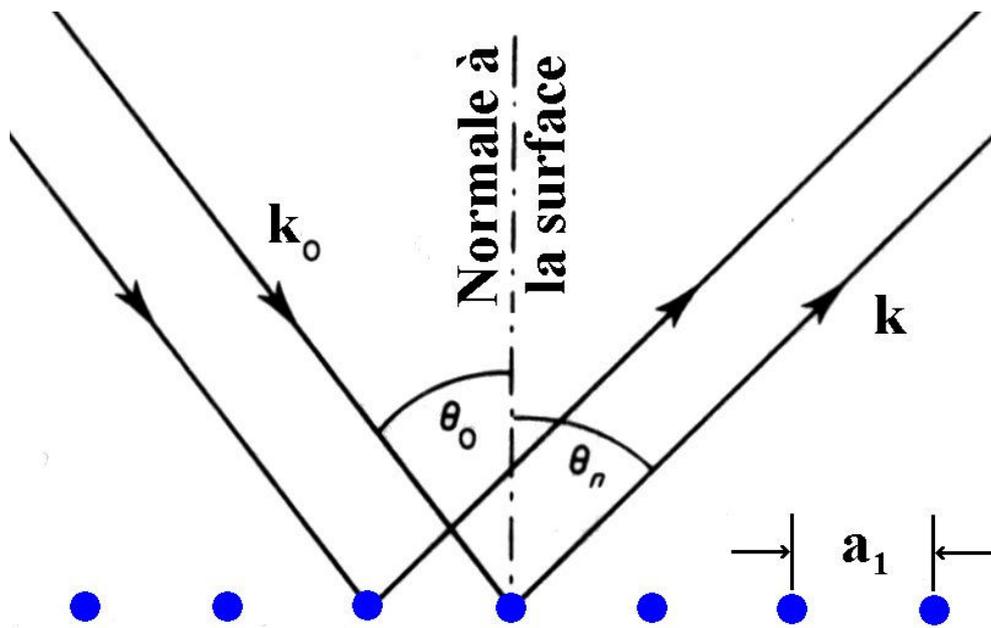
Diffraction d'électrons lents - Généralités sur la diffraction.

➤ Généralités sur la diffraction - Condition de Laüe.

Diffraction d'une onde = Diffusion de l'onde dans des directions discrètes autres que la réflexion spéculaire (miroir),

Pour qu'il y ait diffraction d'un **faisceau d'électrons lents** λ_e , dans une direction donnée, par **une surface cristalline**, il faut que toutes les *mailles de surface diffusent en phase*, i.e. interfèrent en phase, dans cette direction (théorie cinématique = 1 seul événement de diffusion).

➤ Condition de diffraction de Laüe d'un réseau linéaire.



$$a_1(\sin \vartheta_n - \sin \theta_0) = n\lambda_e, \quad n \in \mathbb{N} \quad \text{notation algébrique}$$

$$\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) = 2\pi n, \quad (a_1 \Delta \vec{k}_{\parallel} = 2\pi n) \quad \text{notation vectorielle}$$

$$\mathbf{a}_1 \cdot \Delta \mathbf{k} = 2\pi n,$$

$\Delta \mathbf{k} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$ est appelé **vecteur de diffusion** avec $\vec{k} = (2\pi/\lambda_e)\vec{n}_k$
 $\approx (0.5\sqrt{E})\vec{n}_k$ vecteur d'onde des e^- , $|\vec{k}_0| = |\vec{k}|$.

Les différents vecteurs de diffusion définissent les faisceaux diffractés (directions de diffusion en phase).

Diffraction d'électrons lents - Espace réciproque.

➤ Généralités sur la diffraction - Espace réciproque.

➤ Condition de diffraction de Laüe d'un réseau linéaire.

La condition de diffraction de Laüe $\mathbf{a}_1 \cdot \Delta \mathbf{k} = 2\pi n$ peut également s'écrire sous la forme :

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 \cdot \Delta \mathbf{k} &= 2\pi n, \\ \Delta \mathbf{k} &= n \mathbf{a}_1^*, \quad \mathbf{a}_1^* \cdot \mathbf{a}_1 = 2\pi \end{aligned}$$

Le vecteur \mathbf{a}_1^* constitue le vecteur de translation d'un espace réciproque dans lequel l'expression de la condition de diffraction de Laüe est simplifiée.

➤ Espace réciproque d'une surface cristalline.

Le réseau cristallin d'une surface réelle est défini par la donnée des vecteurs de translation fondamentaux $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2)$,

À cet espace réel correspond un espace réciproque déterminé par les vecteurs réciproques de translation fondamentaux $(\mathbf{a}_1^*, \mathbf{a}_2^*)$ définis par :

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_1^* &= \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_2^* = 2\pi, \\ \mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2^* &= \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_1^* = 0, \text{ soit } \mathbf{a}_1 \perp \mathbf{a}_2^* \text{ et } \mathbf{a}_2 \perp \mathbf{a}_1^* \end{aligned}$$

$$\mathbf{a}_1^* = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \wedge \mathbf{u}}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \wedge \mathbf{u})}, \quad \mathbf{a}_2^* = 2\pi \frac{\mathbf{u} \wedge \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \wedge \mathbf{u})},$$

$\mathbf{u} = (\mathbf{hkl})$ vecteur unitaire normal à la surface.

Dans le système d'axes cristallographiques $(O, \mathbf{a}_1^*, \mathbf{a}_2^*)$, un nœud hk quelconque du réseau réciproque est repéré par un vecteur \mathbf{r}_{hk}^* :

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_{hk}^* &= h\mathbf{a}_1^* + k\mathbf{a}_2^*, \quad h \in \mathbf{N}, k \in \mathbf{N}, \\ \mathbf{r}_{mn}^* &= \mathbf{r}_{hk}^* + (m-h)\mathbf{a}_1^* + (n-k)\mathbf{a}_2^*, \quad (\text{équivalence par translation}) \end{aligned}$$

Diffraction d'électrons lents - Espace réciproque.

➤ Conditions de Laüe d'une surface cristalline.

La diffraction en phase d'un faisceau d'électrons lents par une surface cristalline doit satisfaire aux deux conditions de Laüe suivantes:

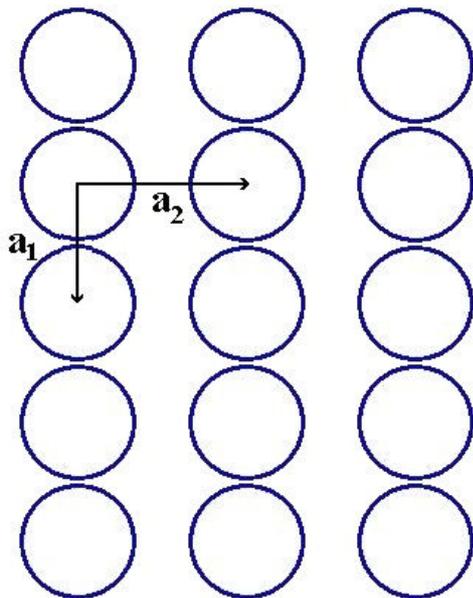
$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 \cdot \Delta \mathbf{k} &= 2\pi h \\ \mathbf{a}_2 \cdot \Delta \mathbf{k} &= 2\pi k \end{aligned} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{aligned} \Delta \mathbf{k} &= h \mathbf{a}_1^* + k \mathbf{a}_2^* \\ \Delta \mathbf{k} &= \mathbf{r}_{hk}^* \end{aligned}$$

La condition de diffraction est vérifiée lorsque le vecteur de diffusion est un vecteur du réseau réciproque $\Delta \mathbf{k} = \mathbf{r}_{hk}^$*

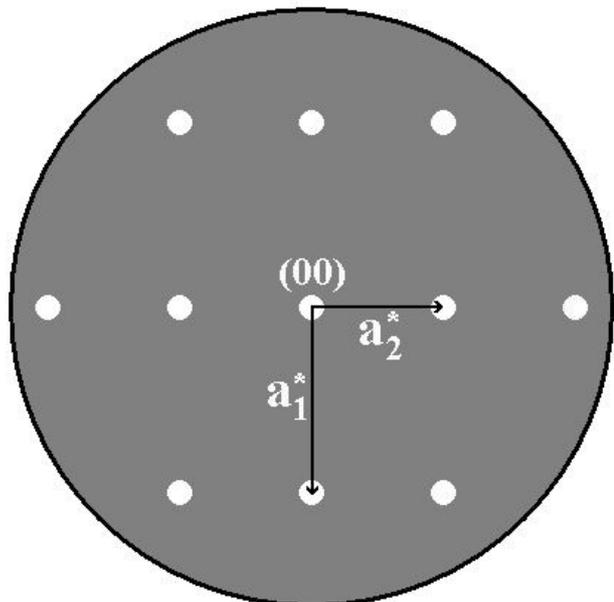
La figure de diffraction DEL d'une surface cristalline est une représentation (homothétique $|k| \propto E^{1/2}$) de l'espace réciproque de la surface.

Les positions des points de diffraction DEL sont caractéristiques de la symétrie de la surface (a_1, a_2).

Surface CFC (110)



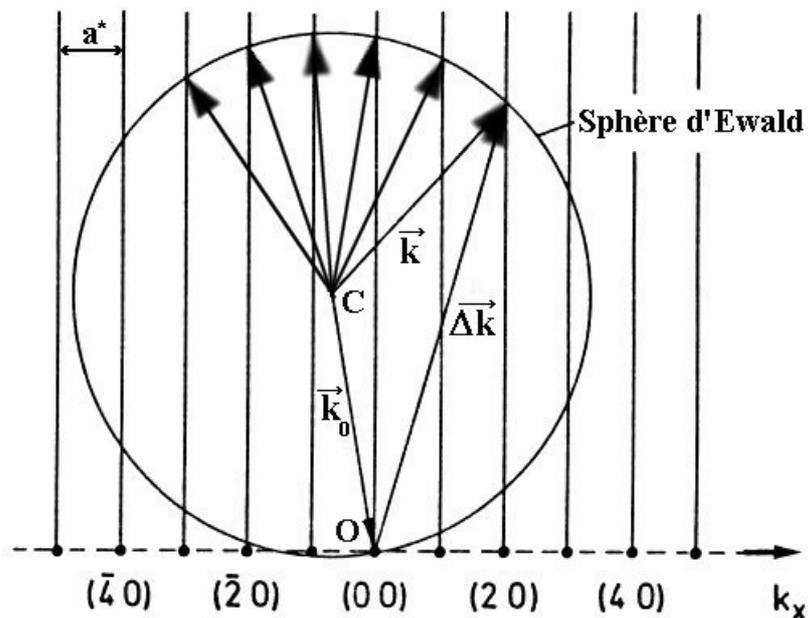
Cliché de diffraction



Diffraction d'électrons lents - Sphère d'Ewald.

➤ Cdt de Laüé d'une surface cristalline - Sphère d'Ewald.

Considérons une sphère de rayon $|\vec{k}_0| = |\vec{k}| = 2\pi/\lambda_e \approx 0.5\sqrt{E}$ et centrée en C, origine des vecteurs d'onde \vec{k} , \vec{k}_0 . L'origine du réseau réciproque est choisie à l'extrémité O du vecteur d'onde de l'onde incidente $\vec{k}_0 = \vec{CO}$



Dans un espace à 2 dimensions, la condition de diffraction est vérifiée lorsque le vecteur de diffusion est un vecteur du réseau réciproque de la surface $\Delta\vec{k} = \vec{r}_{hk}^ \Leftrightarrow \Delta\vec{k}_{//} = \vec{r}_{//}^*$*

Il y a relâchement complet des conditions de diffraction suivant la normale à la surface.

Les domaines de diffraction 2D sont des droites perpendiculaires à la surface réelle et passant par les nœuds du réseau réciproque 2D : **tiges de diffraction** (période infinie dans l'espace direct - pas de discrétisation).

Par construction, un vecteur de diffusion est défini par l'intersection d'une tige de diffraction avec la sphère d'Ewald.

Diffraction d'électrons lents - Cristallographie de surface.

➤ Généralités sur les surfaces propres & reconstructions.

Le réseau cristallin ($\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$) d'une *surface réelle idéale* est accessible par la donnée :

- 1) de la cristallographie de volume du cristal - CFC, HC...
- 2) de l'orientation de la surface - indices de Miller (hkl).

Exemples : CFC(100), HC(111)...

Fréquemment, la symétrie d'une surface réelle ne correspond pas au cas idéal déduit de considérations cristallographiques de volume.

Cet écart peut résulter :

- 1) d'une *reconstruction intrinsèque* de la surface,

La surface d'un cristal est une zone de discontinuité (volume - vide) au niveau de laquelle les liaisons constitutives du matériau se retrouvent insatisfaites. *La reconstruction du plan de surface*, par déplacements atomiques latéraux, permet de stabiliser le plan de surface par minimisation du nombre de liaisons célibataires.

Exemples : Si(111) p(7x7), SiC(100) c(4x2), Ir(110) p(1x2)

.Extrêmement fréquent au niveau des matériaux covalents,

- 2) de la présence ordonnée d'un adsorbat - obtention d'une **surstructure**.

En présence d'atomes étrangers, *une reconstruction extrinsèque avec incorporation ordonnée d'adsorbats* permet également de stabiliser le plan de surface.

Exemples : c(2x2) S / Mo(100), c(2x2) N / Cu(100)

.Conditionne les propriétés physico-chimiques des surfaces.

Diffraction d'électrons lents - Cristallographie de surface.

La reconstruction d'une surface introduit des périodicités multiples supplémentaires aisément accessibles à la diffraction d'électrons lents.

L'*étude géométrique du diagramme de diffraction* permet de déterminer la *symétrie de la surface réelle* reconstruite, qu'elle soit d'origine intrinsèque ou extrinsèque (adsorbat),

L'*étude des intensités diffractées* donne théoriquement accès *aux positions atomiques*, cependant l'interprétation en reste difficile (cf. cours diffraction de photoélectrons).

➤ Études structurales des surfaces reconstruites.

Dans l'espace réel, le réseau d'une surstructure quelconque est défini par la donnée de ses vecteurs de translation fondamentaux ($\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$).

Ceux-ci peuvent être exprimés sur la base des vecteurs de translation de la surface réelle idéale, c'ad non reconstruite ($\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$) :

$$\mathbf{b}_1 = m_{11} \mathbf{a}_1 + m_{12} \mathbf{a}_2$$

$$\mathbf{b}_2 = m_{21} \mathbf{a}_1 + m_{22} \mathbf{a}_2$$

Soit en notation matricielle :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{b}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \mathbf{b} = \mathbf{M} \cdot \mathbf{a}$$

Diffraction d'électrons lents - Cristallographie de surface.

➤ Etudes structurales des surfaces reconstruites.

Des relations équivalentes existent dans l'espace réciproque associé et nous pouvons écrire :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{b}_1^* \\ \mathbf{b}_2^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_{11}^* & m_{12}^* \\ m_{21}^* & m_{22}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1^* \\ \mathbf{a}_2^* \end{pmatrix} \Leftrightarrow \mathbf{b}^* = M^* \cdot \mathbf{a}^*$$

Les relations univoques entre espaces réel et réciproque conduisent à l'établissement d'un lien direct entre matrices réelle M et réciproque M^* .

Ce lien permet de déterminer la *symétrie de la surface réelle* reconstruite par *étude géométrique du diagramme de diffraction* (par observation).

$$\begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} = \frac{1}{\det M^*} \begin{pmatrix} m_{22}^* & -m_{21}^* \\ -m_{12}^* & m_{11}^* \end{pmatrix}$$

$$\det M^* = m_{11}^* m_{22}^* - m_{21}^* m_{12}^*$$

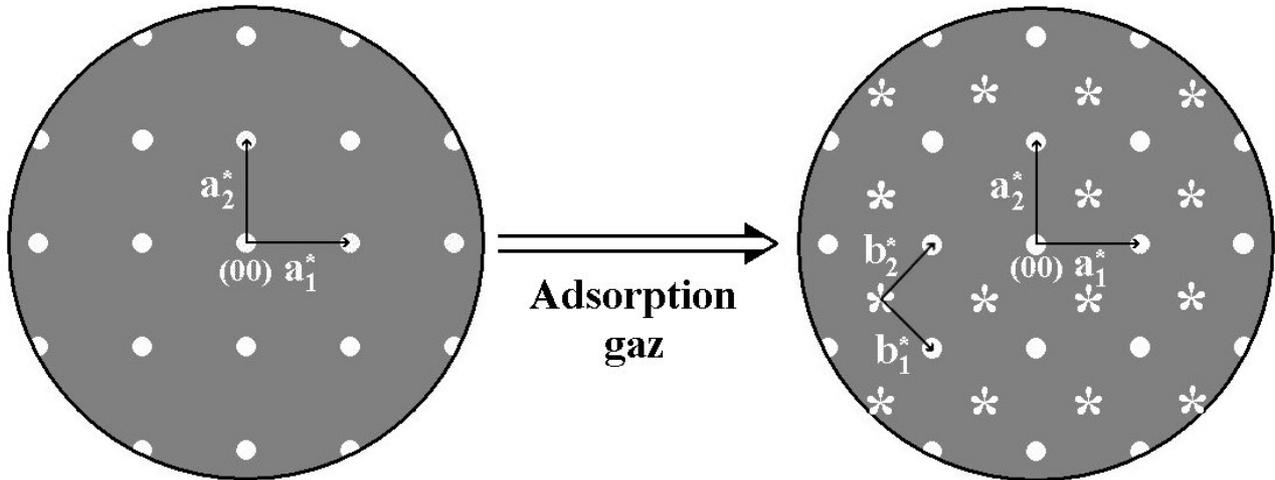
Le déterminant de la matrice réciproque $\det M^*$ représente une mesure de la surface de la maille de surstructure relativement à celle de la maille de surface non reconstruite.

Inversement (équivalence mathématique esp. réel et réciproque) :

$$\begin{pmatrix} m_{11}^* & m_{12}^* \\ m_{21}^* & m_{22}^* \end{pmatrix} = \frac{1}{\det M} \begin{pmatrix} m_{22} & -m_{21} \\ -m_{12} & m_{11} \end{pmatrix}$$

Diffraction d'électrons lents - Cristallographie de surface.

➤ Études structurales des surfaces reconstruites - Exemple.



Adsorption de gaz sur une surface non reconstruite (1x1).

Diagramme de diffraction
DEL avant adsorption,
Surface non reconstruite.

Diagramme de diffraction
DEL après adsorption,

1) Étude géométrique du diagramme de diffraction de la surface après adsorption.

.détermination du réseau réciproque (\mathbf{b}_1^* , \mathbf{b}_2^*),

.détermination de la matrice réciproque \mathbf{M}^* .

Note. Expérimentalement tous les points du diagramme de diffraction sont identiques à l'exception de leurs intensités relatives.

$$\mathbf{b}_1^* = 0.5\mathbf{a}_1^* - 0.5\mathbf{a}_2^*$$

$$\mathbf{b}_2^* = 0.5\mathbf{a}_1^* + 0.5\mathbf{a}_2^*$$

Soit en notation matricielle :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{b}_1^* \\ \mathbf{b}_2^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.5 & -0.5 \\ 0.5 & 0.5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1^* \\ \mathbf{a}_2^* \end{pmatrix} \Leftrightarrow \mathbf{M}^* = \begin{pmatrix} 0.5 & -0.5 \\ 0.5 & 0.5 \end{pmatrix}$$

Diffraction d'électrons lents - Cristallographie de surface.

➤ Études structurales des surfaces reconstruites - Exemple.

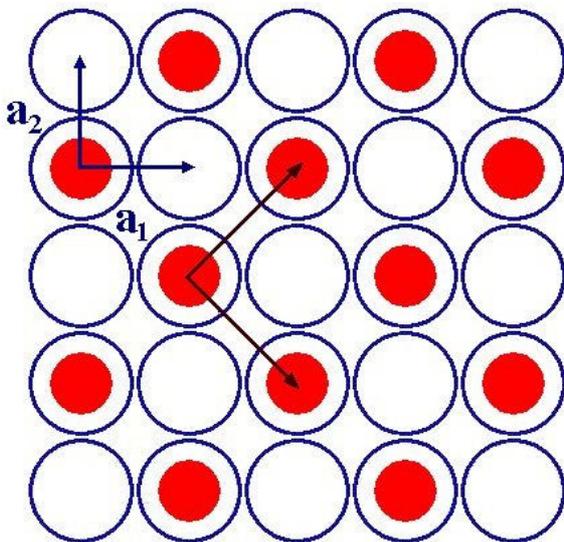
2) Détermination de la symétrie de la surface après adsorption - symétrie de la surstructure.

.détermination de la matrice réelle M ,

.détermination du réseau réel de la surstructure (\mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2).

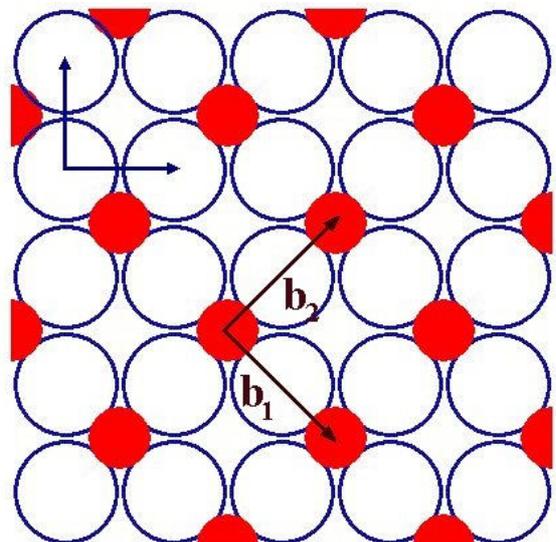
$$M^* = \begin{pmatrix} 0.5 & -0.5 \\ 0.5 & 0.5 \end{pmatrix}, \det M^* = (0.5).(0.5) - (0.5)(-0.5) = 0.5$$

$$M = \frac{1}{0.5} \begin{pmatrix} 0.5 & -0.5 \\ -(-0.5) & 0.5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$



$$\mathbf{b}_1 = \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2$$

$$\mathbf{b}_2 = \mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2$$



$$\mathbf{b}_1 = \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2$$

$$\mathbf{b}_2 = \mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2$$

Obtention de *la symétrie de la surstructure dans l'espace réel*
 – aucune information sur *les positions exactes des adsorbats*.

Diffraction d'électrons lents - Cristallographie de surface.

➤ **Études structurales des surfaces reconstruites - Notation de Wood** - E.A. Wood *J. Appl. Phys.* **35** (1964) 1306.

En pratique, surstructure et surface parente présentent fréquemment des symétries proches.

Par suite, il est souvent possible et avantageux de décrire une reconstruction via une notation simplifiée due à E.A. Wood.

Ainsi, la reconstruction d'une surface $S(hkl)$ pour laquelle :

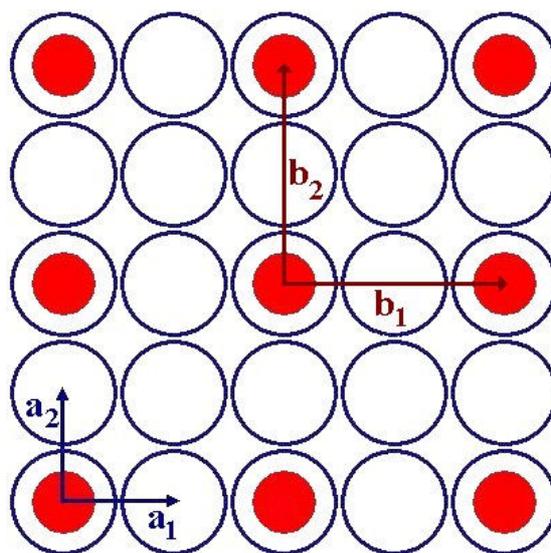
1) les angles entre vecteurs de translation ($\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$) et ($\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$) sont identiques, soit $\text{mes}(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2) = \text{mes}(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2)$,

2) les modules des vecteurs de translation ($\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$) et ($\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$) sont dans un rapport simple, soit $\mathbf{b}_1 = m|\mathbf{a}_1|$, $\mathbf{b}_2 = n|\mathbf{a}_2|$,

3) les vecteurs \mathbf{b}_1 et \mathbf{a}_1 sont colinéaires (direction commune),

est répertoriée $S(hkl) p(m \times n)$, où p signifie que la maille de surstructure est *primitive* (un seul noeud).

Une reconstruction identique consécutive à la présence de η atomes ou molécules A par maille de surstructure (origine extrinsèque) est notée $S(hkl) p(m \times n) - \eta A$.



CFC (001) p(2x2) - A

Diffraction d'électrons lents - Cristallographie de surface.

➤ **Études structurales des surfaces reconstruites - Notation de Wood** - E.A. Wood *J. Appl. Phys.* **35** (1964) 1306.

La reconstruction d'une surface $S(hkl)$ pour laquelle :

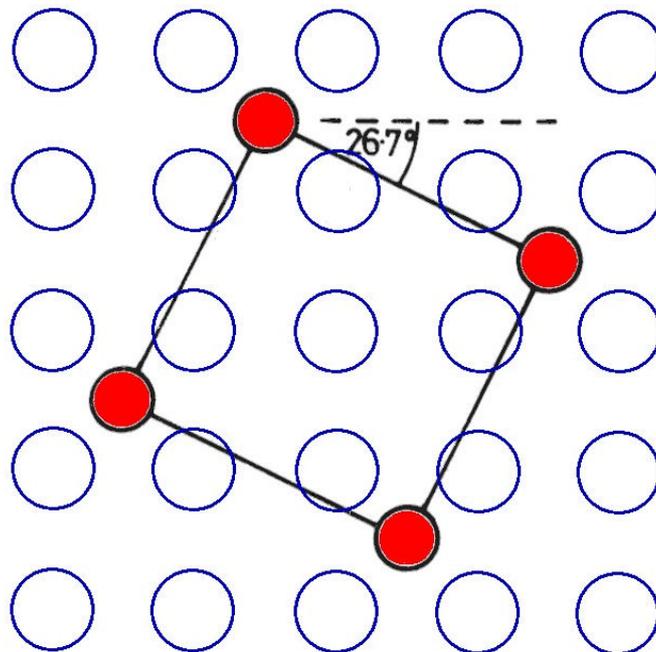
1) les angles entre vecteurs de translation ($\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$) et ($\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$) sont identiques, soit $\text{mes}(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2) = \text{mes}(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2)$,

2) les modules des vecteurs de translation ($\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$) et ($\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$) sont dans un rapport simple, soit $\mathbf{b}_1 = m|\mathbf{a}_1|$, $\mathbf{b}_2 = n|\mathbf{a}_2|$,

3) les vecteurs \mathbf{b}_1 et \mathbf{a}_1 font un angle α (rotation d'angle α),

est répertoriée $S(hkl) p(m \times n)R\alpha$, où p signifie que la maille de surstructure est *primitive* (un seul motif).

Une reconstruction identique consécutive à la présence de η atomes ou molécules A par maille de surstructure (origine extrinsèque) est notée $S(hkl) p(m \times n)R\alpha - \eta A$.



$\text{Mo}(001) p(\sqrt{5} \times \sqrt{5})R26.7^\circ - S$

Diffraction d'électrons lents - Cristallographie de surface.

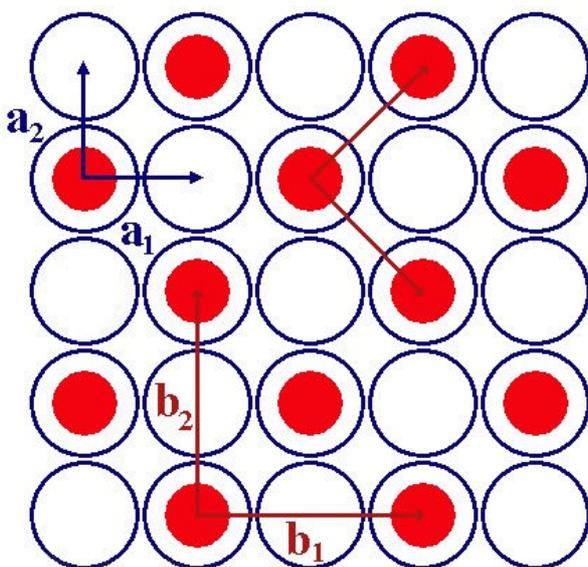
➤ **Études structurales des surfaces reconstruites - Notation de Wood** - E.A. Wood *J. Appl. Phys.* **35** (1964) 1306.

La reconstruction d'une surface $S(hkl)$ pour laquelle :

- 1) les angles entre vecteurs de translation ($\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$) et ($\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$) sont identiques, soit $\text{mes}(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2) = \text{mes}(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2)$,
- 2) les modules des vecteurs de translation ($\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$) et ($\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$) sont dans un rapport simple, soit $\mathbf{b}_1 = m|\mathbf{a}_1|$, $\mathbf{b}_2 = n|\mathbf{a}_2|$,
- 3) les vecteurs \mathbf{b}_1 et \mathbf{a}_1 font un angle α (rotation d'angle α),
- 4) la maille de surstructure contient un atome/molécule A *cristallographiquement équivalent* en son centre (maille non primitive).

est répertoriée $S(hkl) c(m \times n)R\alpha$, où c signifie que la maille de surstructure est *centrée* (et non primitive).

Une reconstruction identique consécutive à la présence de η atomes ou molécules A par maille de surstructure (origine extrinsèque) est notée $S(hkl) c(m \times n)R\alpha - \eta A$.



Notations de Wood

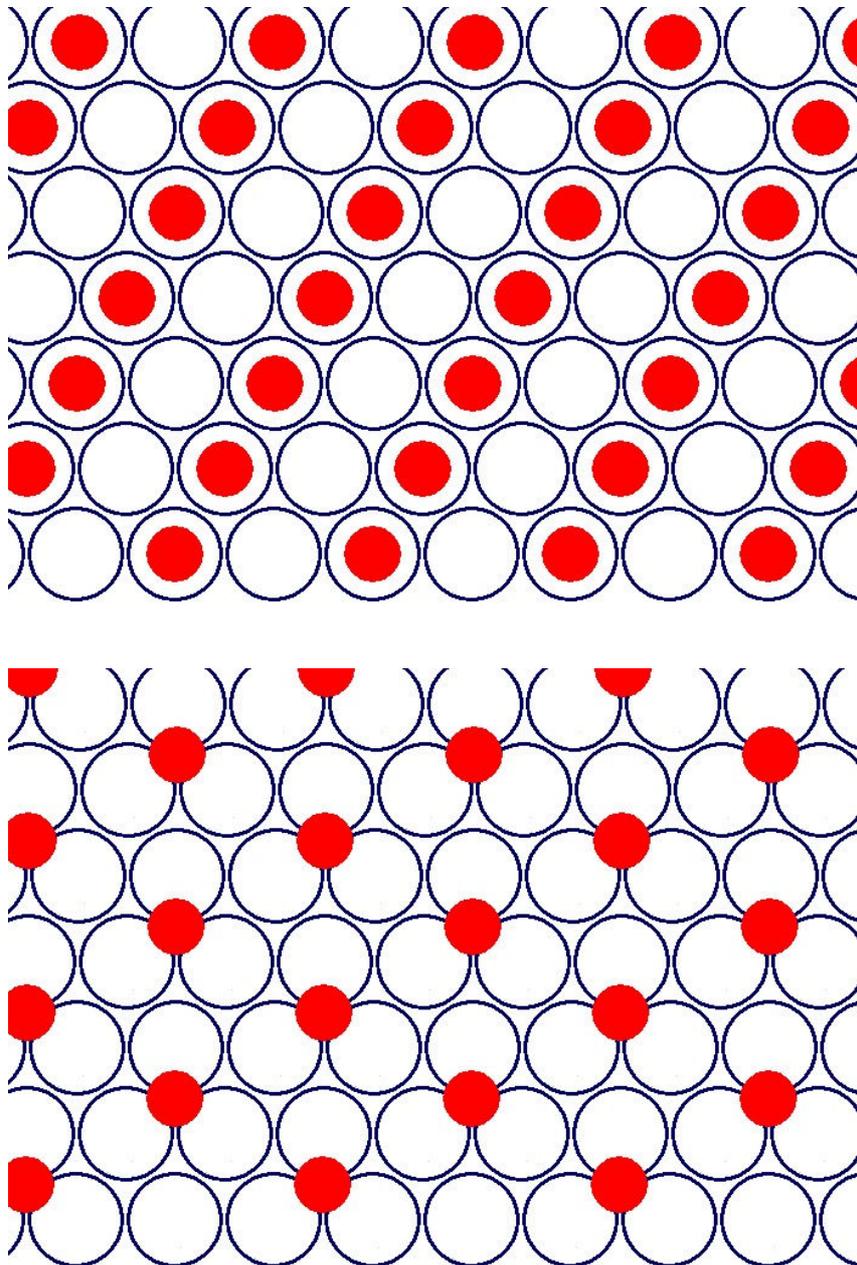
- 1). CFC (100) $c(2 \times 2)$
- 2). CFC (100) $p(\sqrt{2} \times \sqrt{2})R45^\circ$

Diffraction d'électrons lents - Cristallographie de surface.

➤ **Études structurales des surfaces reconstruites - Notation de Wood** - E.A. Wood *J. Appl. Phys.* **35** (1964) 1306.

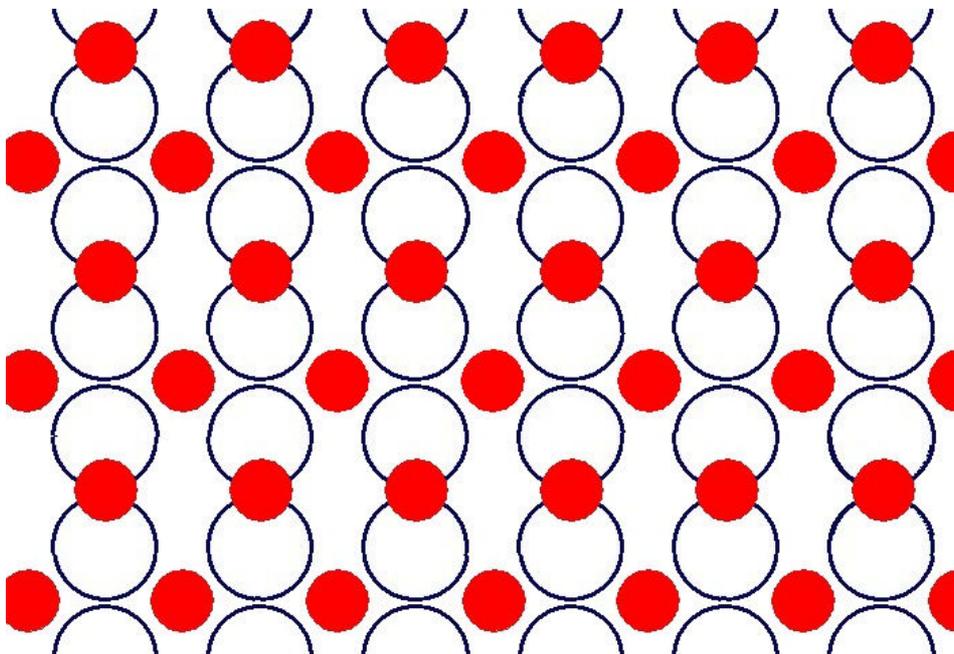
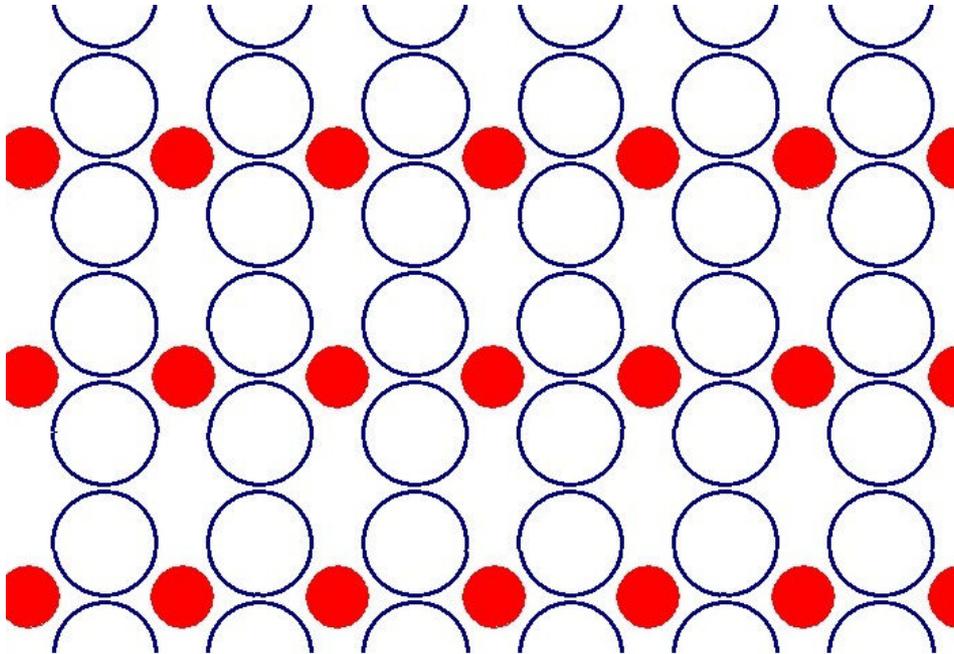
La notation de Wood est susceptible de conduire à certaines ambiguïtés, par suite et par convention \mathbf{a}_1 correspond au vecteur de translation le plus court.

➤ **Mise en pratique** - Répertoriez les surstructures suivantes dans le cadre de la notation de Wood.



Diffraction d'électrons lents - Cristallographie de surface.

➤ Études structurales des surfaces reconstruites - Notation de Wood - E.A. Wood *J. Appl. Phys.* **35** (1964) 1306.



Diffraction d'électrons lents - Domaines.

➤ Études structurales des surfaces reconstruites - Définition de domaines.

Une reconstruction est susceptible de présenter plusieurs orientations.

Une zone au sein de laquelle l'orientation cristallographique de la surstructure est constante porte le nom de *domaine*.

Fréquemment, une surface reconstruite se présente sous la forme d'une *mosaïque de domaines* d'orientations spécifiques.

Sous réserve que ces domaines possèdent :

1) une taille supérieure à *la longueur de cohérence des électrons* : $L_c \approx 100 \text{ \AA}$,

2) une taille inférieure au diamètre du faisceau d'électrons :
 $\phi_{\text{électron}} \approx 1 \text{ mm} \approx 10^7 \text{ \AA}$,

soit $10^2 \text{ \AA} < \textit{Tailles des domaines} < 10^7 \text{ \AA}$

le diagramme de diffraction d'une *mosaïque de domaines* correspond à la *superposition des diagrammes de diffraction* de chaque domaine pris individuellement.

Ce type de condition est fréquemment rencontré en pratique.

Si la surface se présente sous la forme d'une mosaïque de domaines de tailles inférieures à *la longueur de cohérence des électrons* ($L_c \approx 100 \text{ \AA}$), le diagramme de diffraction d'électrons lents résulte de l'interférence entre les différents faisceaux diffractés issus de domaines d'orientations spécifiques.

Ce type de condition est rarement rencontré en pratique.

Diffraction d'électrons lents - Domaines.

➤ Études structurales des surfaces reconstruites - Occurrence de domaines.

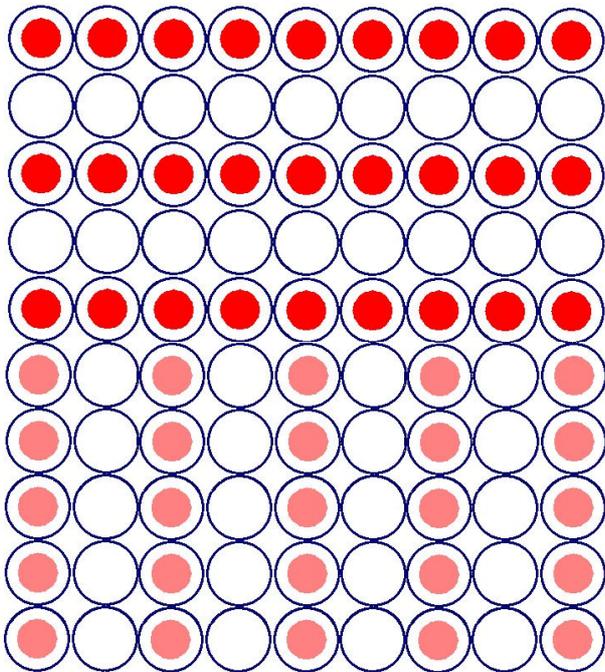
Un domaine peut résulter d'une *translation*, d'une *rotation*, d'une *réflexion miroir*, voire d'une combinaison de ces éléments.

En l'absence d'une asymétrie de la surface parente (défauts, marches spécifiques...), les différents domaines possèdent une même probabilité d'occurrence (même énergie).

Par suite, sous incidence normale, quelle que soit la symétrie de la surstructure, le diagramme de diffraction d'une mosaïque de domaines équiprobables possède **la symétrie de la surface parente** (mêmes éléments de symétrie que le substrat).

➤ Mise en garde. - *Sous incidence normale, l'observation d'un diagramme de diffraction hautement symétrique n'implique pas nécessairement une haute symétrie de la structure de surface.*

Exemple: Rotation à 90° de domaines (2x1) et (1x2).



Domaines (2x1) + (1x2)

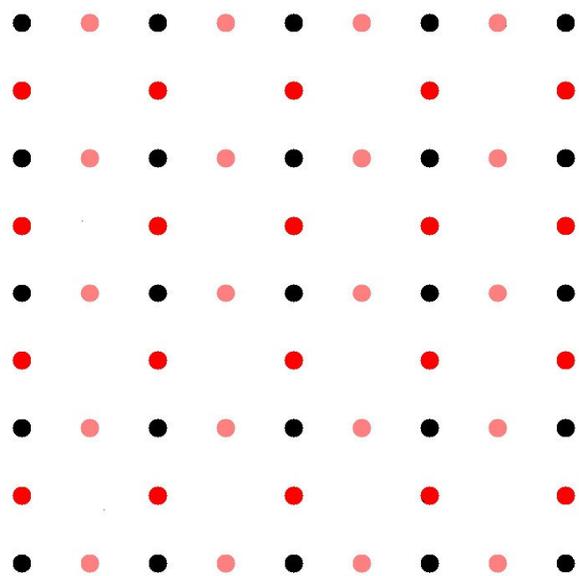


Diagramme de diffraction

Diffraction d'électrons lents - Domaines.

➤ Études structurales des surfaces reconstruites - Occurrence de domaines.

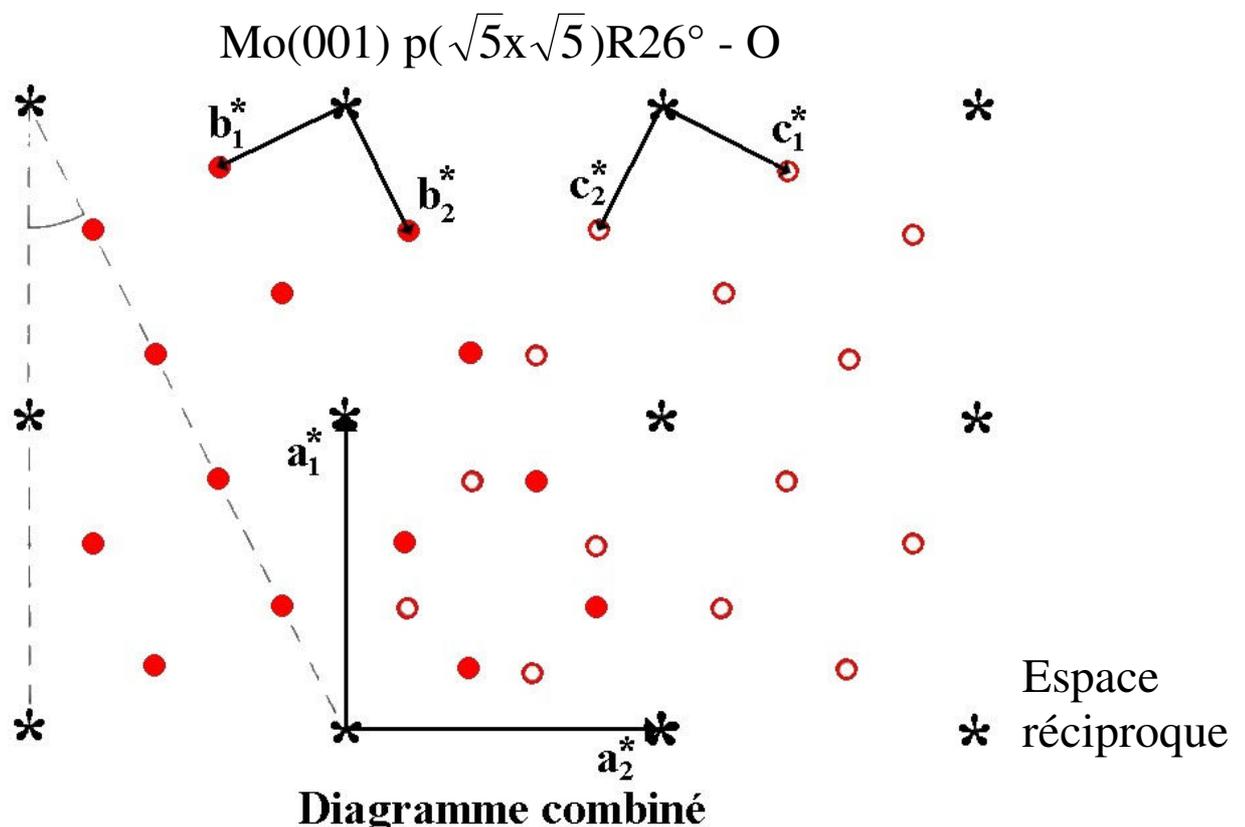
La détection de domaines est un problème difficile.

Méthodes expérimentales - Briser l'équiprobabilité d'occurrence des domaines par l'introduction d'une asymétrie de surface.

.marches d'orientation spécifique (surface vicinale),
.endommagement volontaire de la surface (déformation asymétrique des spots par accommodation du désordre),
...

Méthode générale - Rechercher à différencier les domaines.

.Rechercher les alignements parallèles de spots équidistants entre deux spots de substrat (spots intenses) de sorte à isoler la maille de surface.

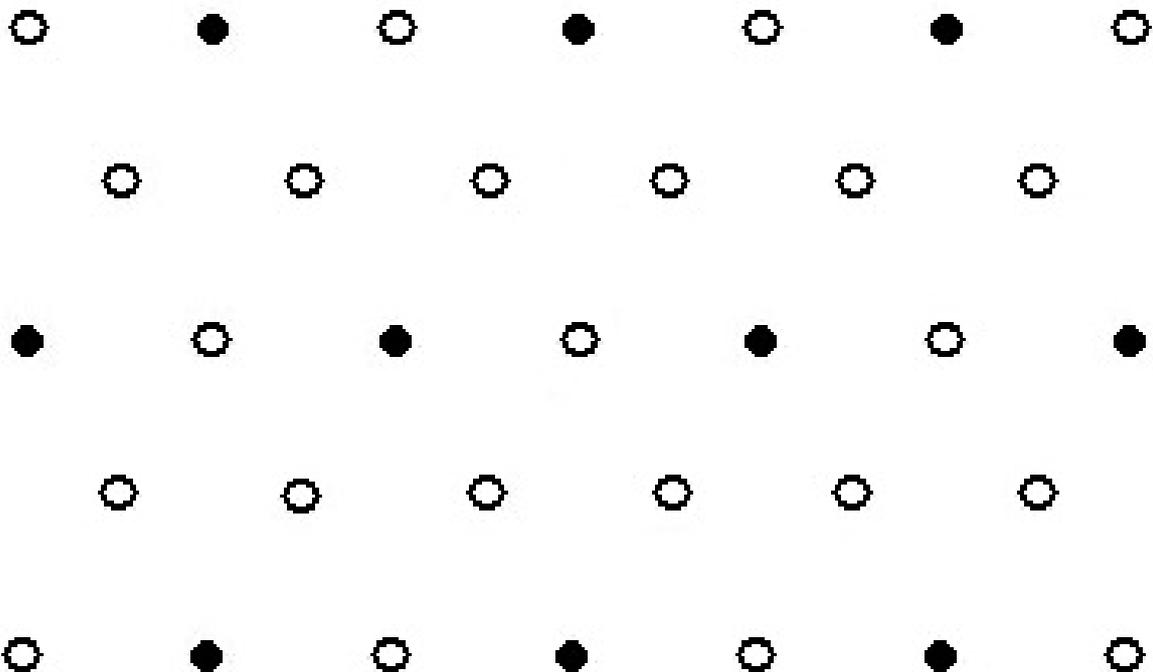


Diffraction d'électrons lents - Domaines.

➤ Etudes structurales des surfaces reconstruites - Occurrence de domaines.

.Exemple: Reconstructions de plans CFC(111)

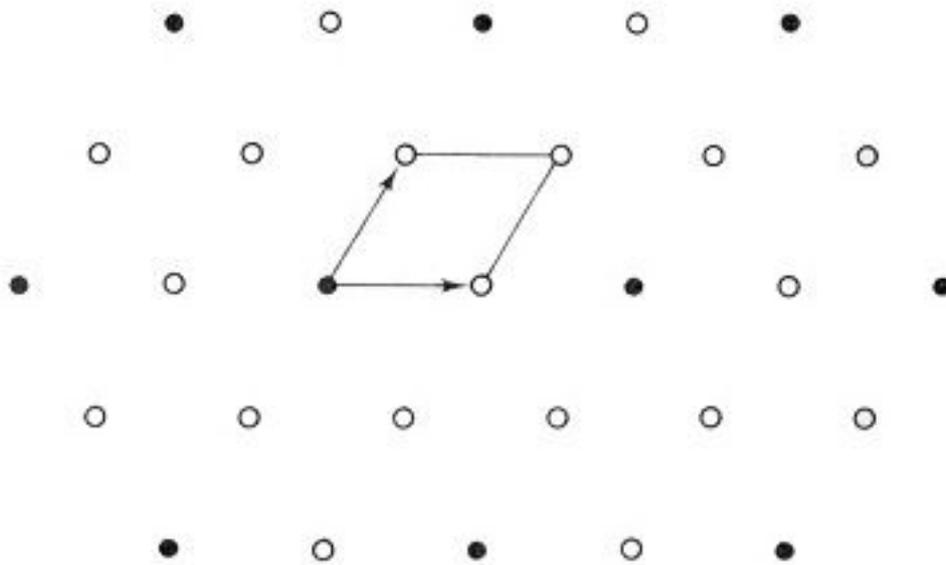
Déterminer les reconstructions possibles susceptibles de rendre compte du diagramme de diffraction ci-dessous.



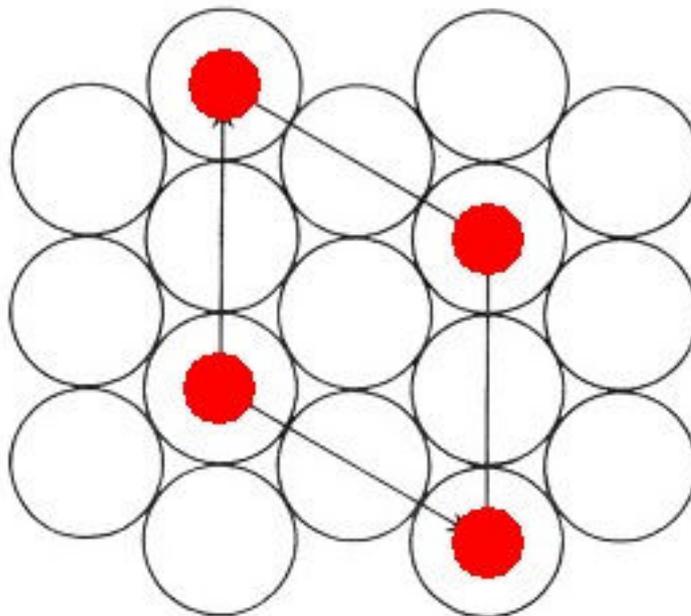
• Spots de substrat ○ Spots de surstructure

Diffraction d'électrons lents - Domaines.

➤ Etudes structurales des surfaces reconstruites - Occurrence de domaines - Exemple Plan CFC (111) p(2x2).



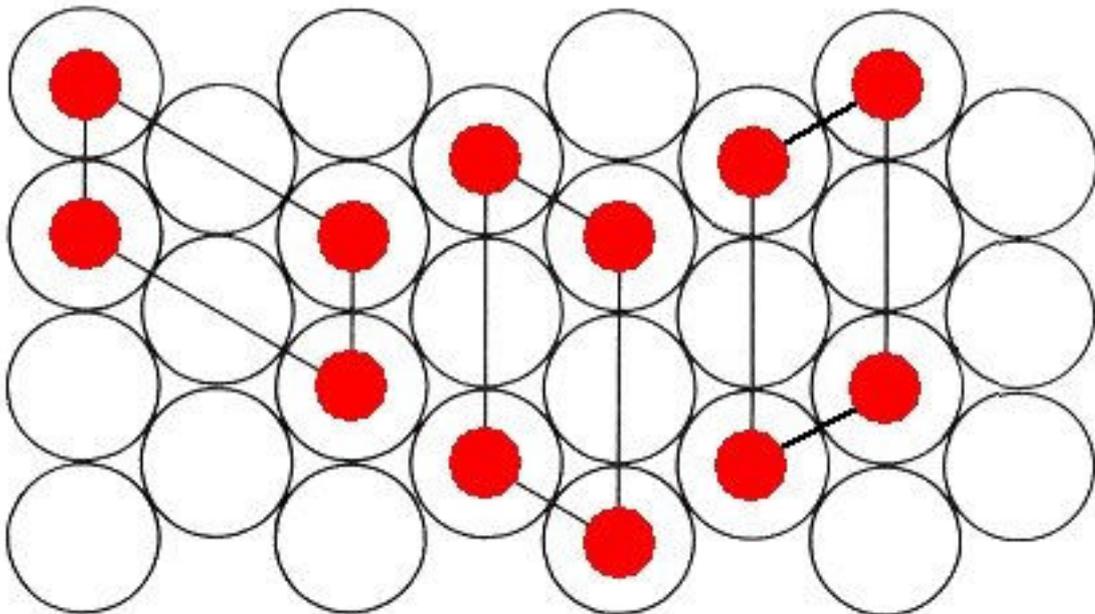
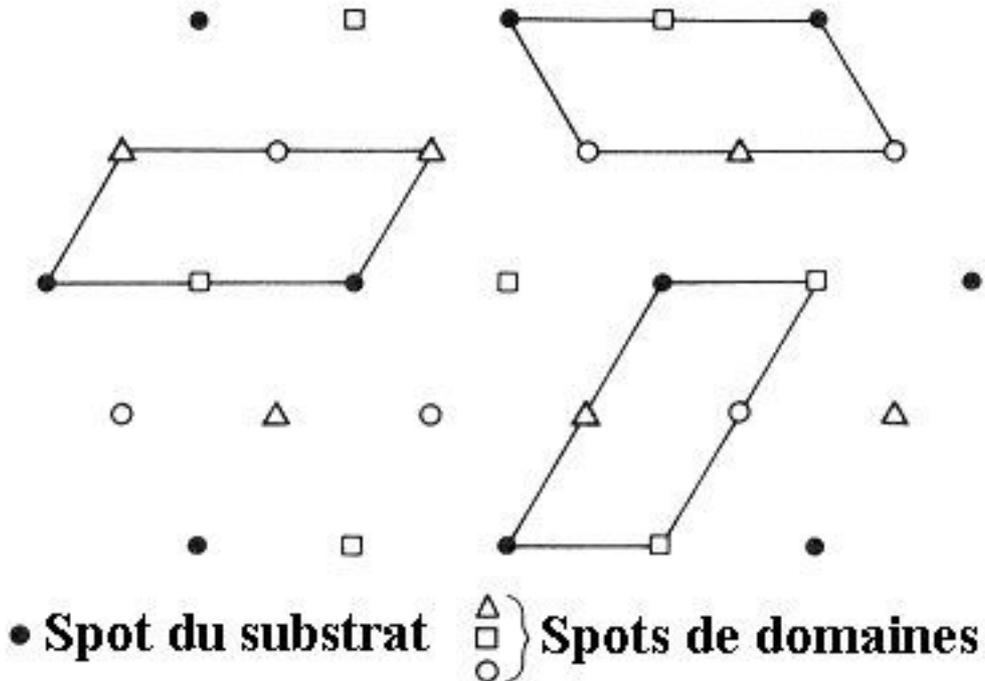
● Spots de substrat ○ Spots de surstructure



Reconstruction (111) p(2x2)

Diffraction d'électrons lents - Domaines.

➤ Etudes structurales des surfaces reconstruites - Occurrence de domaines - Exemple Plan CFC (111) domaines $p(2 \times 1)$.



Domaines (2x1) possibles

Diffraction d'électrons lents - Cristallographie de surface.

➤ Études structurales des surfaces reconstruites - Diffraction multiple par plusieurs plans atomiques.

Rappel. Dans l'espace réel, le réseau d'une surstructure quelconque est défini par la donnée de ses vecteurs de translation fondamentaux ($\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$).

Ceux-ci peuvent être exprimés sur la base des vecteurs de translation de la surface réelle non reconstruite ($\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$):

$$\begin{pmatrix} \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{b}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \mathbf{b} = \mathbf{M} \cdot \mathbf{a}$$

Suivant les valeurs des éléments m_{ij} de la matrice \mathbf{M} , trois types de situation se rencontrent :

1). Les éléments de matrice m_{ij} sont des entiers. La relation entre les mailles primitives de la surface support (substrat) et de la surstructure (reconstruction) est simple, et la surstructure est elle-même qualifiée de *simple*,

2). Les éléments de matrice m_{ij} sont des rationnels (rapports d'entiers). Les mailles primitives de la surface support (substrat) et de la surstructure possèdent alors une *maille de coïncidence*, et la surstructure est qualifiée de *commensurable*,

3). Au moins un élément de matrice m_{ij} est un irrationnel ($\pi, \sqrt{2} \dots$). Les mailles primitives de la surface support (substrat) et de la surstructure ne possèdent *pas de maille de coïncidence*, et la surstructure est qualifiée d'*incommensurable*,

Diffraction d'électrons lents - Cristallographie de surface.

➤ Études structurales des surfaces reconstruites - Diffraction multiple par plusieurs plans atomiques.

Des électrons d'énergie de 10 eV à 300 eV possèdent un libre parcours moyen $\lambda \approx 5 \text{ \AA}$ à 10 \AA .

Le phénomène de *diffraction élastique* met en jeu les plans atomiques les plus externes de la surface.

La diffraction d'électrons lents est une *diffraction de surface*, néanmoins, **elle ne se limite pas au plan atomique le plus externe.**

Fréquemment, surstructure et surface support possèdent des symétries différentes (commensurable, incommensurable) susceptibles de modifier le diagramme de diffraction en présence de diffraction multiple.

➤ Surface non reconstruite et diffraction multiple.

La symétrie d'un diagramme de diffraction d'un plan d'atomes est définie par la symétrie des atomes dans le plan (différence de phase).

Les directions de diffraction en phase du faisceau d'électrons lents par une surface cristalline satisfont aux deux conditions de Laüé:

$$\mathbf{a}_1 \cdot \Delta \mathbf{k} = 2\pi h$$

$$\mathbf{a}_2 \cdot \Delta \mathbf{k} = 2\pi k$$

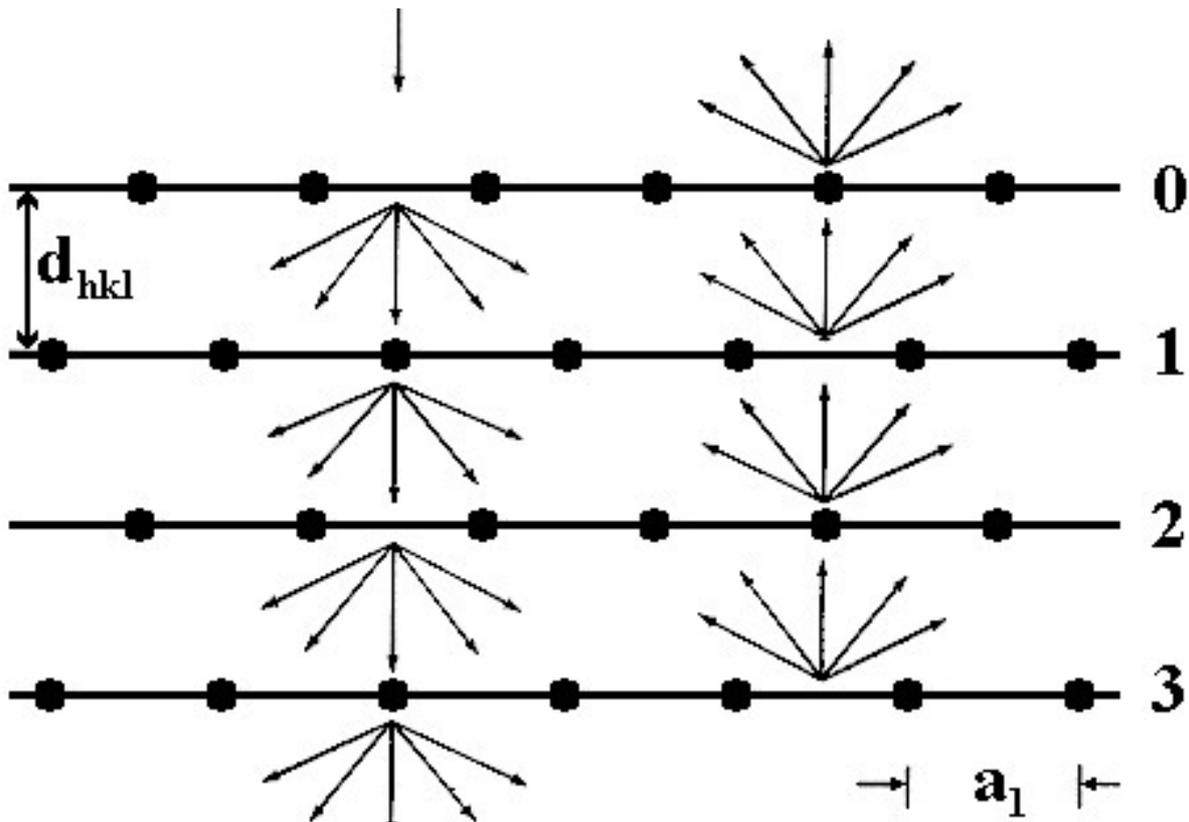


$$\mathbf{k}_{hk} - \mathbf{k}_0 = h\mathbf{a}_1^* + k\mathbf{a}_2^*$$

Diffraction d'électrons lents - Cristallographie de surface.

➤ Surface non reconstruite et diffraction multiple.

Une surface (hkl) peut être décrite comme un empilement régulier de plans de même symétrie distants de z_{hkl} , éventuellement latéralement décalés les uns relativement aux autres (translation latérale).



Diffraction par le plan 0 ($z = 0$)

$$\mathbf{k}_{hk} - \mathbf{k}_0 = h\mathbf{a}_1^* + k\mathbf{a}_2^*, (h, k) \in \mathbb{N}$$

Diffraction par le plan 1 ($z = -z_{hkl}$)

$$\mathbf{k}_{mn} - \mathbf{k}_{hk} = m\mathbf{a}_1^* + n\mathbf{a}_2^*, (m, n) \in \mathbb{N}$$

$$\mathbf{k}_{mn} - \mathbf{k}_0 = (m + h)\mathbf{a}_1^* + (n + k)\mathbf{a}_2^*$$

Par suite, la diffraction multiple par plusieurs plans de symétrie identique joue uniquement sur les intensités relatives des spots, aucuns nouveaux spots (direction de diffraction en phase) ne sont introduits.

Diffraction d'électrons lents - Cristallographie de surface.

➤ Reconstructions commensurables et diffraction multiple.

Dans le cas d'une reconstruction commensurable avec la surface, la prise en compte de la diffraction multiple s'exprime sous la forme :

Diffraction par le plan 0 ($z = 0$) - Surstructure de maille ($\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$)

$$\mathbf{k}_{hk} - \mathbf{k}_0 = h\mathbf{b}_1^* + k\mathbf{b}_2^*, (h, k) \in \mathbb{N}$$

Diffraction par le plan 1 ($z = -z_1$) - Surface support ($\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$)

$$\mathbf{k}_{mn} - \mathbf{k}_{hk} = m\mathbf{a}_1^* + n\mathbf{a}_2^*, (m, n) \in \mathbb{N}$$

$$\mathbf{k}_{mn} - \mathbf{k}_0 = h\mathbf{b}_1^* + k\mathbf{b}_2^* + m\mathbf{a}_1^* + n\mathbf{a}_2^*$$

Diffraction par le plan 2 ($z = -(z_1 + z_{hkl})$) - Surface support ($\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$)

$$\mathbf{k}_{pq} - \mathbf{k}_{mn} = p\mathbf{a}_1^* + q\mathbf{a}_2^*, (p, q) \in \mathbb{N}$$

$$\mathbf{k}_{pq} - \mathbf{k}_0 = h\mathbf{b}_1^* + k\mathbf{b}_2^* + (m + p)\mathbf{a}_1^* + (n + q)\mathbf{a}_2^*$$

Dans le cas d'une reconstruction commensurable, nous avons:

$$\mathbf{b}_1^* = (c/d)\mathbf{a}_1^* + (e/f)\mathbf{a}_2^*, (c, d, e, f) \in \mathbb{N} \text{ (espace réciproque),}$$

$$\mathbf{b}_2^* = (c'/d')\mathbf{a}_1^* + (e'/f')\mathbf{a}_2^*, (c', d', e', f') \in \mathbb{N},$$

$$\mathbf{k}_{mn} - \mathbf{k}_0 = (m + h \cdot \frac{c}{d} + k \cdot \frac{c'}{d'})\mathbf{a}_1^* + (n + h \cdot \frac{e}{f} + k \cdot \frac{e'}{f'})\mathbf{a}_2^*$$

Par suite, en présence de diffraction multiple et si les éléments m_{ij} sont rationnels, le diagramme de diffraction d'une reconstruction commensurable se présente comme la somme des diagrammes de diffraction :

.de la surface support ($\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$),

.de la surstructure ($\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$),

.de la maille de coïncidence (points supplémentaires possibles,

$d\mathbf{b}_1^* = c\mathbf{a}_1^*, d'\mathbf{b}_2^* = c'\mathbf{a}_1^*, d, d' \in [2, 10]$). **Vraie périodicité.**

Diffraction d'électrons lents - Cristallographie de surface.

➤ Reconstructions simples, commensurables et diffraction multiple - Exemples.

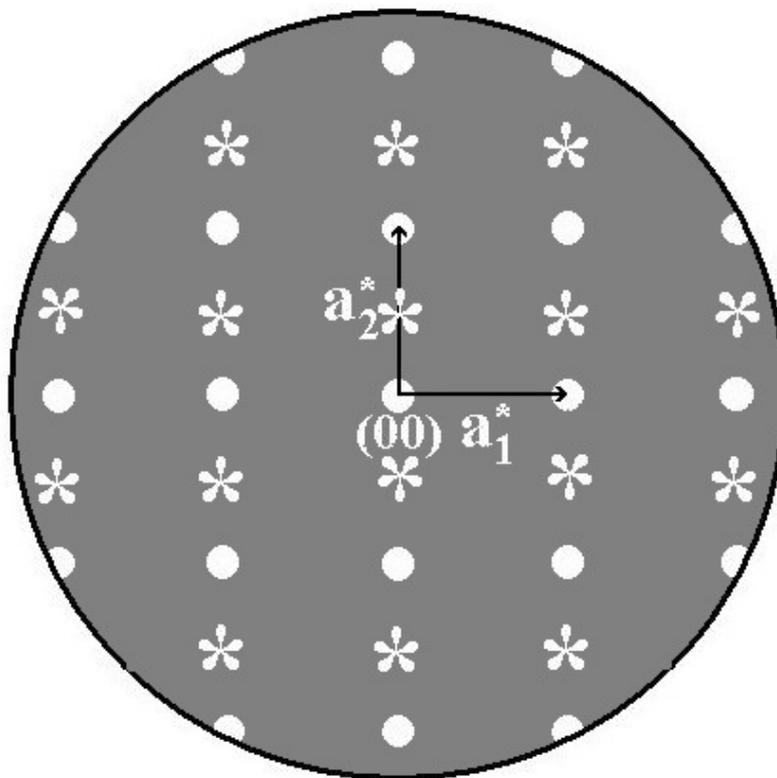
1). Soit une reconstruction *simple* définie par:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{b}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \end{pmatrix}, \text{ soit } \begin{pmatrix} \mathbf{b}_1^* \\ \mathbf{b}_2^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1^* \\ \mathbf{a}_2^* \end{pmatrix}$$

Les directions de diffraction en phase sont déterminées par la condition de Laüe:

$$\mathbf{k}_{mn} - \mathbf{k}_0 = (m + h)\mathbf{a}_1^* + \left(n + \frac{k}{2}\right)\mathbf{a}_2^*$$

$$\mathbf{k}_{mn} - \mathbf{k}_0 = (m + h)\mathbf{a}_1^* + n.\mathbf{a}_2^* + \frac{k}{2}\mathbf{a}_2^*$$



Maille de coïncidence p(1x2)

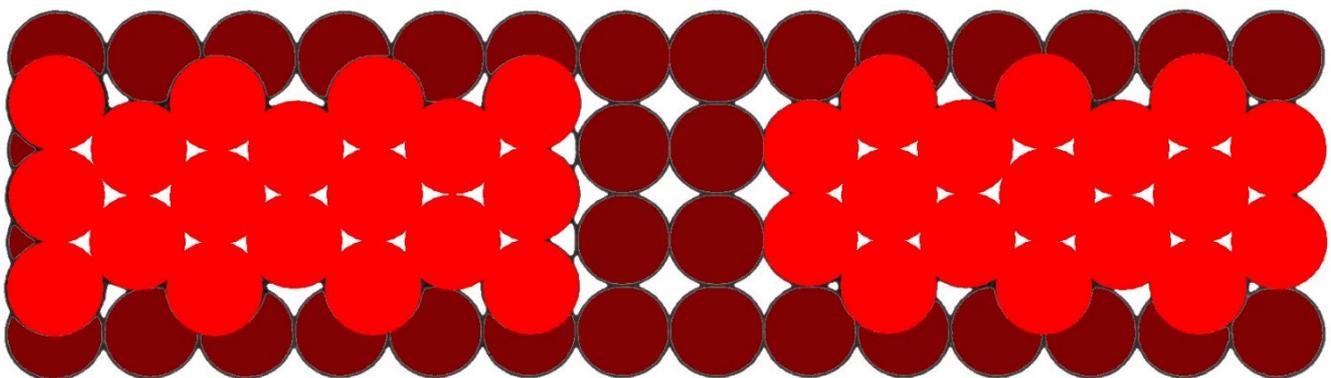
Diffraction d'électrons lents - Cristallographie de surface.

➤ Reconstructions simples, commensurables et diffraction multiple - Exemples.

2). Reconstruction commensurable Ir(100) - p(5x1)

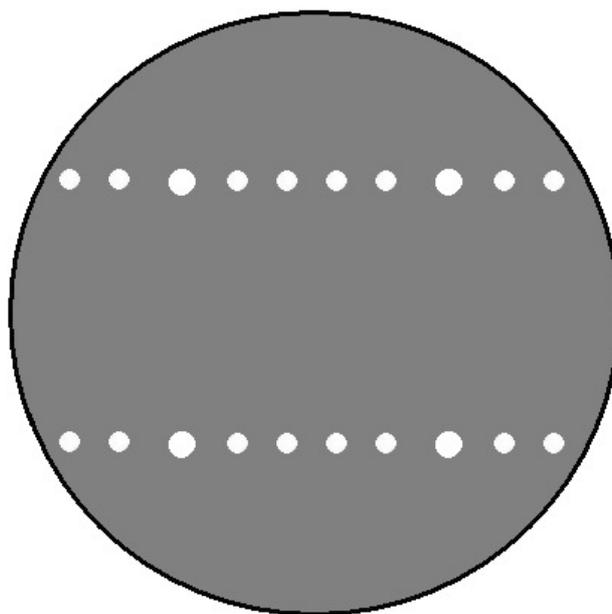
La surface Ir(100) présente une reconstruction p(5x1).
Maille de coïncidence = 5 mailles (\mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2), i.e. la maille de coïncidence est de type (5x1).

Surface Ir(100) idéale de symétrie 4 - carrée,
Surface Ir(100) reconstruite de symétrie 6 - quasi-hexagonale,
Deux arrangements atomiques possibles (a) et (b).



(a)

(b)



Diffraction d'électrons lents - Cristallographie de surface.

➤ Reconstructions incommensurables et diffraction multiple.

Dans certains cas, la symétrie de la surstructure est totalement indépendante de celle de la surface support, les vecteurs de translation fondamentaux $\{(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2), (\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2)\}$ sont liés de façon irrationnelle et la reconstruction est dite *incommensurable*.

Exemple : Gaz rares Ar, Kr, Xe adsorbés sur une surface métallique.

Dans le cas d'une reconstruction incommensurable avec la surface, la prise en compte de la diffraction multiple s'exprime sous la forme :

Diffraction par le plan 0 ($z = 0$) - Surstructure de maille $(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2)$

$$\mathbf{k}_{hk} - \mathbf{k}_0 = h\mathbf{b}_1^* + k\mathbf{b}_2^*, (h, k) \in \mathbb{N}$$

Diffraction par le plan 1 ($z = -d$) - Surface support $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2)$

$$\mathbf{k}_{mn} - \mathbf{k}_{hk} = m\mathbf{a}_1^* + n\mathbf{a}_2^*, (m, n) \in \mathbb{N}$$

$$\mathbf{k}_{mn} - \mathbf{k}_0 = h\mathbf{b}_1^* + k\mathbf{b}_2^* + m\mathbf{a}_1^* + n\mathbf{a}_2^*$$

Diffraction par le plan 2 ($z = -(d + d_{hkl})$) - Surface support $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2)$

$$\mathbf{k}_{pq} - \mathbf{k}_{mn} = p\mathbf{a}_1^* + q\mathbf{a}_2^*, (p, q) \in \mathbb{N}$$

$$\mathbf{k}_{pq} - \mathbf{k}_0 = h\mathbf{b}_1^* + k\mathbf{b}_2^* + (m+p)\mathbf{a}_1^* + (n+q)\mathbf{a}_2^*$$

Par suite, en présence de diffraction multiple, la forme du diagramme de diffraction d'une reconstruction incommensurable est tributaire :

- .de la symétrie de la surface support $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2)$,
- .de la symétrie de la surstructure $(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2)$,
- .des interférences entre les deux.

Diffraction d'électrons lents - Cristallographie de surface.

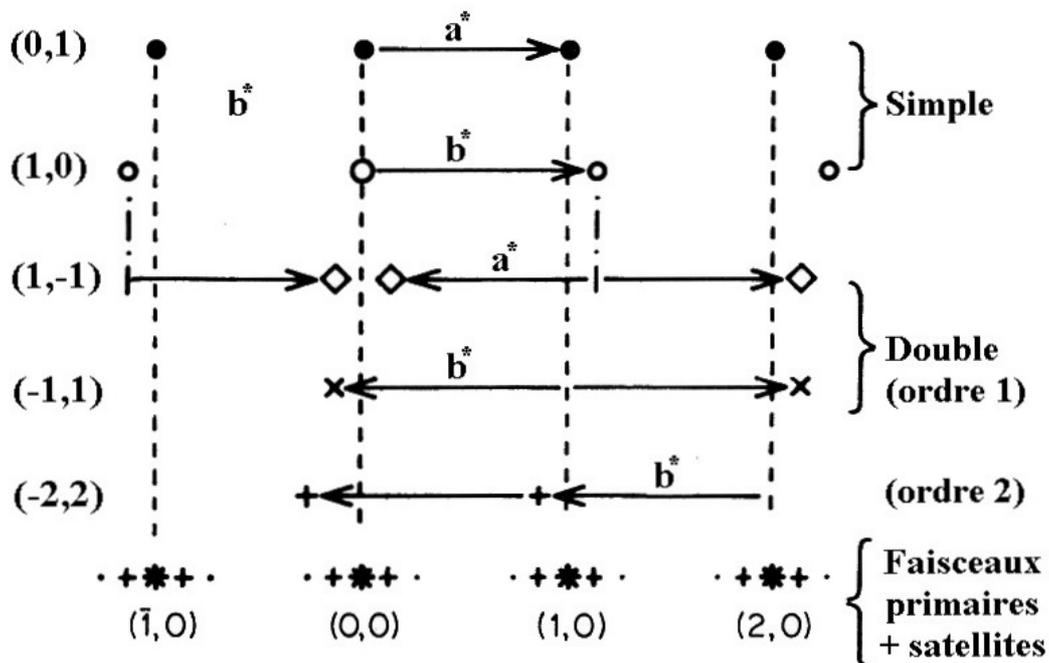
➤ Reconstructions incommensurables et diffraction multiple.

Dans la mesure où les réseaux $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2)$ et $(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2)$ ne présentent pas de rapport simple, le diagramme de diffraction théorique s'obtient par balayage des différentes combinaisons possibles de quadruplets d'entiers (h, k, m, n) .

En pratique, seuls les spots associés à une diffraction simple, voire double seront détectables, de sorte que les combinaisons à envisager sont celles à petits entiers, soit $(h, k, m, n) \in \{0,1,2\}$.

En première approximation, les spots de diffraction d'ordre 1 (double diffraction) sont un ordre de grandeur moins intenses que les spots de diffraction d'ordre 0 (simple diffraction).

Exemple : Diffraction multiple à 1 dimension.



Le diagramme de diffraction d'une reconstruction incommensurable présente fréquemment des spots principaux intenses (ordre 0), décorés de spots satellites plus faibles (ordre 1).

Diffraction d'électrons lents - Cristallographie de surface.

➤ Reconstructions incommensurables et diffraction multiple - Exemple - Système Ar/graphite.

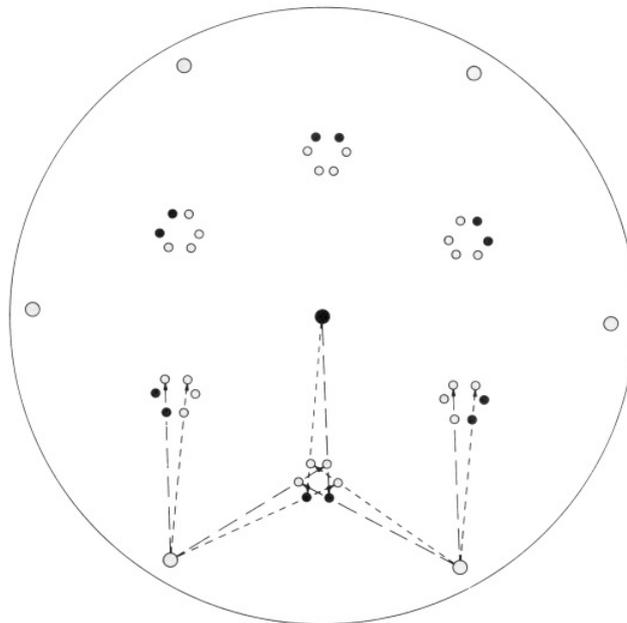
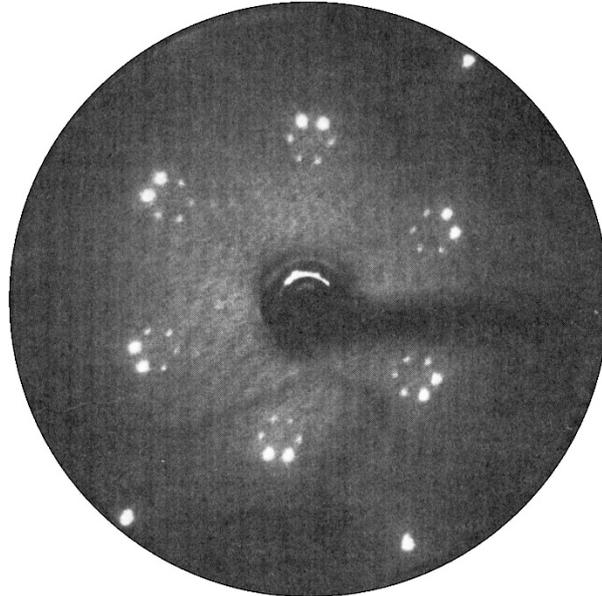


Diagramme de diffraction d'une monocouche Ar sur un substrat de graphite hexagonal - Deux domaines plans compacts Ar d'orientations $\theta = \pm 3.5^\circ$ - Cercles évidés périphériques = C_g ordre 1, cercles pleins = Ar ordre 1, cercles évidés = (Ar + C_g) ordre 1.

© American Physical Society, C. G. Shaw, S. C. Fain, M.D. Chin *Phys. Rev. Lett.* **41** (1978) 955.

Diffraction d'électrons lents - Cristallographie de surface.

➤ **Symétries d'une surface cristalline.** *International Tables for X-Ray Crystallography*, ed. K. Lonsdale, Kynoch Press Birmingham, England.

Une structure cristalline possède des opérations de symétrie qui la laissent invariante. Ces opérations de symétrie comprennent :

1). Les opérations de translation du réseau suivant les vecteurs de translation fondamentaux (\mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2) (**groupe de translation**),

2). Les opérations de symétrie ponctuelles (**groupe ponctuel**), à savoir:

.les rotations d'angle $2\pi/n$ autour d'un axe passant par un nœud du réseau. Les angles possibles sont $2\pi/1$ (360°), $2\pi/2$ (180°), $2\pi/3$ (120°), $2\pi/4$ (90°) et $2\pi/6$ (60°). Ces rotations sont notées par le symbole n adéquat, $n = \{1, 2, 3, 4, 6\}$,

.les symétries par rapport à un plan passant par un nœud du réseau. Ces réflexions miroir sont notées m ,

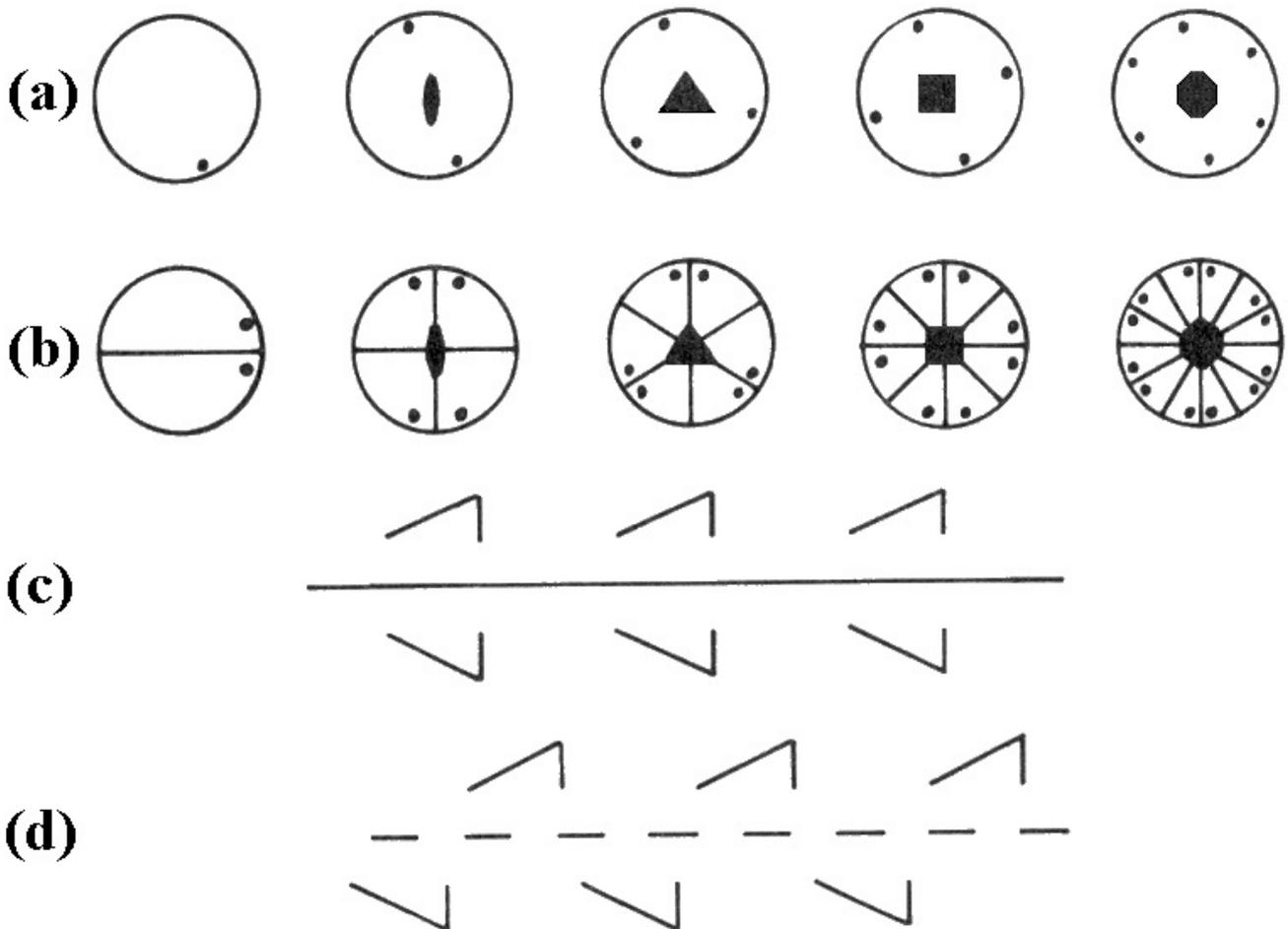
3). Les opérations de symétrie combinées, produits d'une transformation ponctuelle et d'une translation.

.En deux dimensions, seul le plan de glissement, combinaison d'une réflexion miroir et d'une translation parallèle au plan, est à considérer. Un plan de glissement est noté g « glide ».

Diffraction d'électrons lents - Cristallographie de surface.

.Groupe ponctuel. *International Tables for X-Ray Crystallography*,
ed. K. Lonsdale, Kynoch Press Birmingham, England.

L'ensemble des opérations de symétrie d'un **motif fini** porte le nom de *groupe ponctuel*. Les éléments de symétrie relatifs à ces opérations se coupent en un point.



(a) Rotations d'ordre n avec $n = \{1, 2, 3, 4, 6\}$,

(b) Rotations d'ordre n avec plans de symétrie,

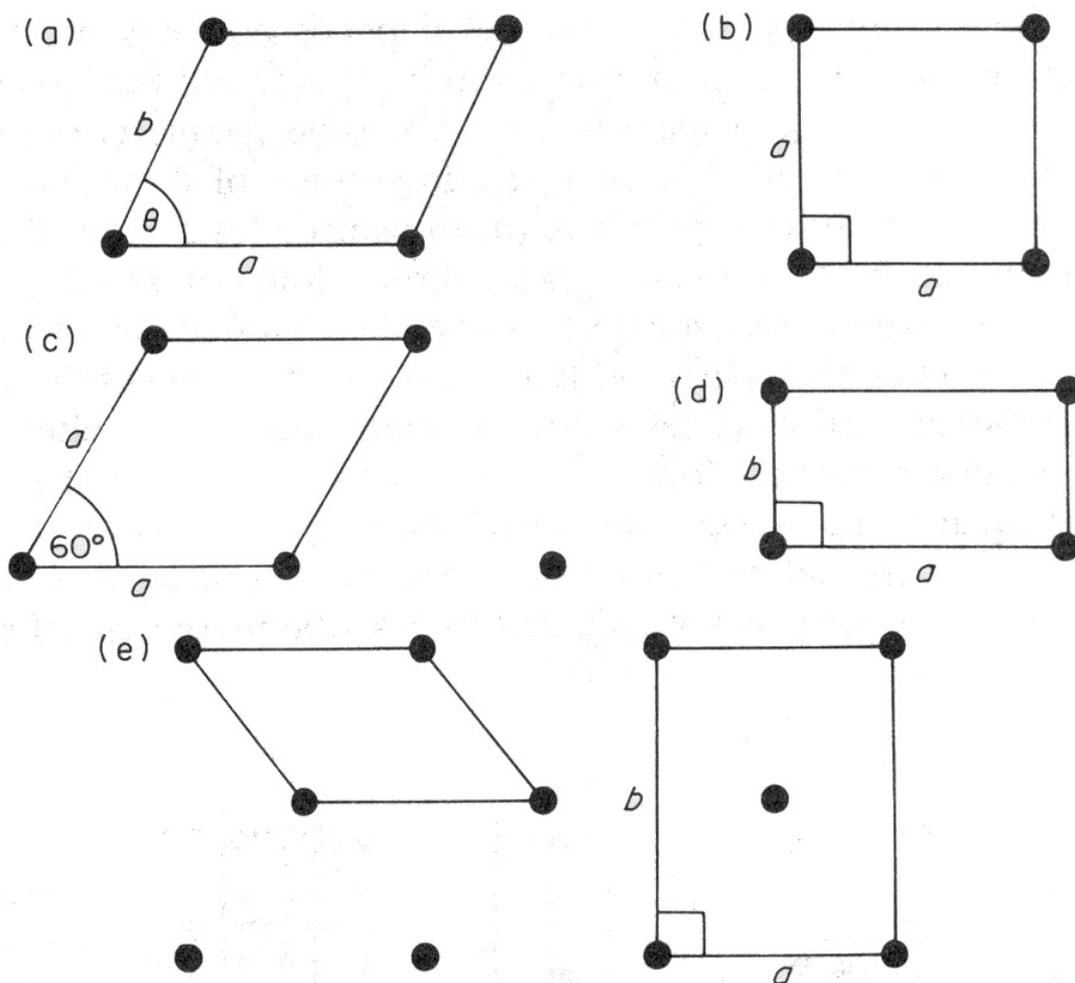
(c) Symétrie par rapport à un plan,

(d) Symétrie par rapport à un plan de glissement.

Diffraction d'électrons lents - Cristallographie de surface.

.Réseaux de Bravais. *International Tables for X-Ray Crystallography*, ed. K. Lonsdale, Kynoch Press Birmingham, England.

Il existe 5 réseaux périodiques infinis à deux dimensions compatibles avec les opérations du groupe ponctuel. Ces systèmes réticulaires fondamentaux portent le nom de *réseaux de Bravais* (Auguste Bravais 1811 - 1863).



- (a) Réseau oblique $a \neq b$, $\theta \neq \{60^\circ, 30^\circ\}$ - 2,
- (b) Réseau carré $a = b$, $\theta = 90^\circ$ - 4mm,
- (c) Réseau hexagonal $a = b$, $\theta = 60^\circ$ - 6mm,
- (d) Réseau rectangulaire $a \neq b$, $\theta = 90^\circ$ (mode p) - 2mm,
- (e) Réseau rectangulaire centré $a \neq b$, $\theta = 90^\circ$ (mode c) - 2mm,

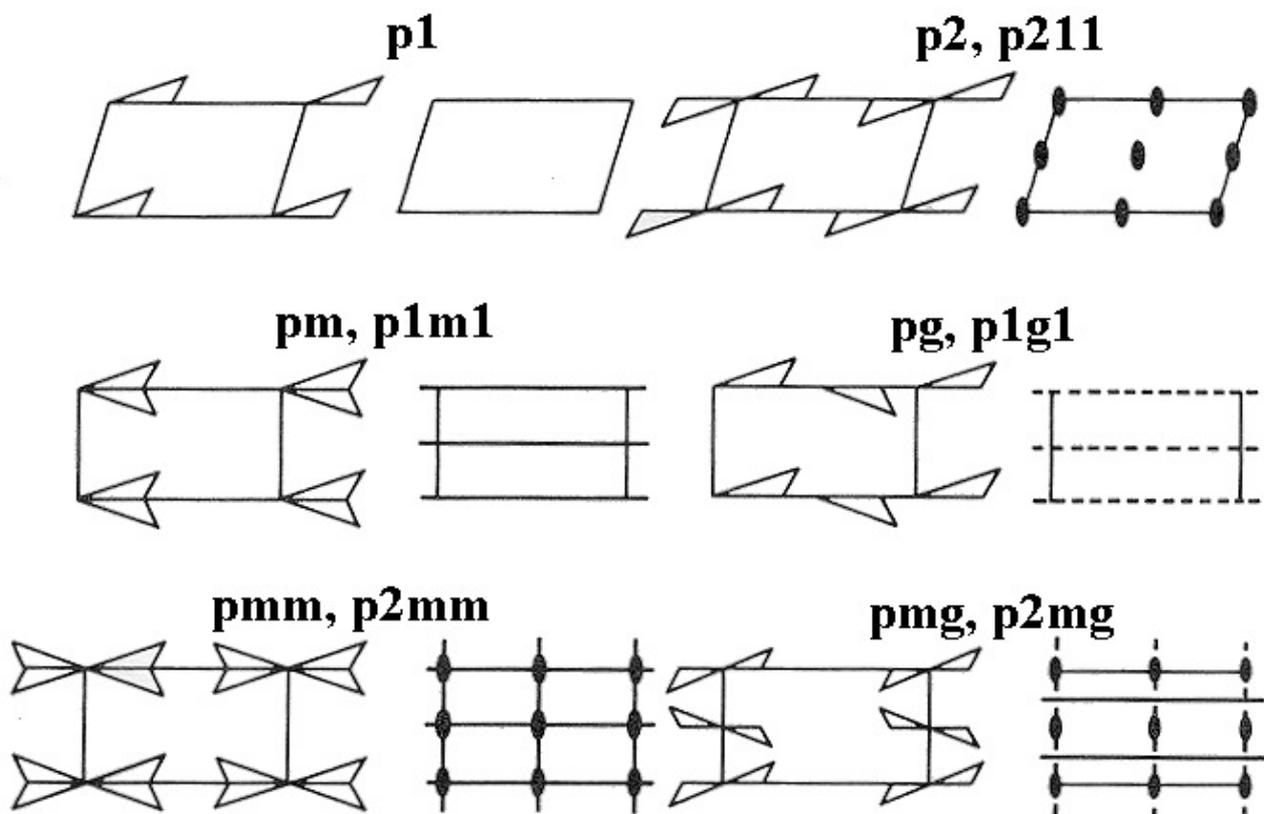
Diffraction d'électrons lents - Cristallographie de surface.

➤ **Symétries d'une surface cristalline.** *International Tables for X-Ray Crystallography*, ed. K. Lonsdale, Kynoch Press Birmingham, England.

.Groupes d'espace (Groupes spatiaux).

L'ensemble des opérations de symétrie d'une **figure infinie** porte le nom de *groupe d'espace*. Elles forment un groupe, avec comme sous groupe, un groupe de translation.

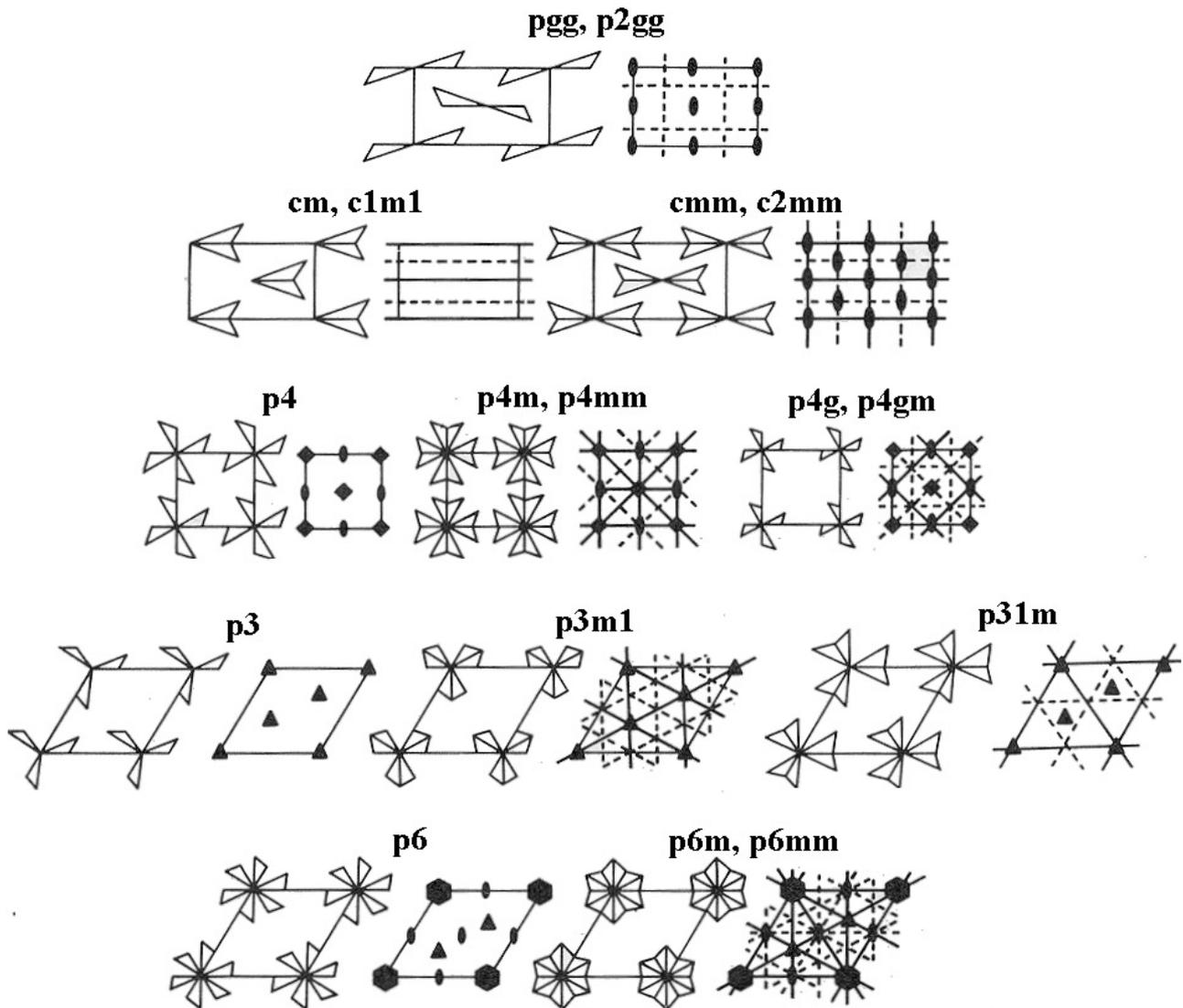
Pour une surface à deux dimensions, les différentes combinaisons entre réseaux de Bravais (groupe de translation) et opérations de symétrie ponctuelles donnent naissance à 17 groupes d'espace.



Diffraction d'électrons lents - Cristallographie de surface.

➤ **Symétries d'une surface cristalline.** *International Tables for X-Ray Crystallography*, ed. K. Lonsdale, Kynoch Press Birmingham, England.

.Groupes d'espace suite...



Notations des groupes d'espace :

- | | |
|--|--------|
| 1). Maille primitive p ou centrée c | p, c |
| 2). Rotation de plus grand ordre n | n |
| 3). Miroir plan m ou de glissement g | m, g |

Diffraction d'électrons lents - Cristallographie de surface.

➤ Symétries et diagramme de diffraction.

Les opérations de translation déterminent les positions des spots de diffraction (les directions de diffraction en phase).

Les opérations de symétrie, autres que les translations (rotation, miroir...), influent sur les intensités des spots de diffraction.

Sous incidence normale (faisceau e^- perpendiculaire à la surface), la symétrie des spots du diagramme de diffraction en positions & intensités, correspond à la symétrie de la surface cristalline.

D'un point de vue général, l'occurrence d'une reconstruction se traduit par une *décroissance, au mieux un maintien, de l'ordre de symétrie* de la surface avant reconstruction.

.Plans de glissement et diagramme de diffraction.

Sous incidence normale et pour une reconstruction monodomaine, la présence d'un plan de glissement dans une maille de surface se traduit par des extinctions systématiques de spots de diffraction et ce, quelle que soit l'énergie des électrons.

Les groupes d'espace de surface possédant un plan de glissement sont au nombre de 4, à savoir $p1g1$, $p2mg$, $p2gg$ et $p4gm$.

Diffraction d'électrons lents - Cristallographie de surface.

➤ Plans de glissement et diagramme de diffraction.

En présence d'un plan de glissement, les spots de la ligne parallèle au plan de symétrie et contenant le spot spéculaire (00) sont alternativement allumés (0, 2n) ou éteints (0, 2n+1) avec n entier.

Dans l'espace réciproque (\mathbf{b}_1^* , \mathbf{b}_2^*) de la maille reconstruite,

.un plan de glissement perpendiculaire à l'axe Ox (\mathbf{b}_1^*) de la reconstruction autorise uniquement les spots (0, k) vérifiant $k = 2n$

.un plan de glissement perpendiculaire à l'axe Oy (\mathbf{b}_2^*) de la reconstruction autorise uniquement les spots (h, 0) vérifiant $h = 2n$

Exemple: Reconstruction Ni(001) - p(2x2) - 4C - p4g.

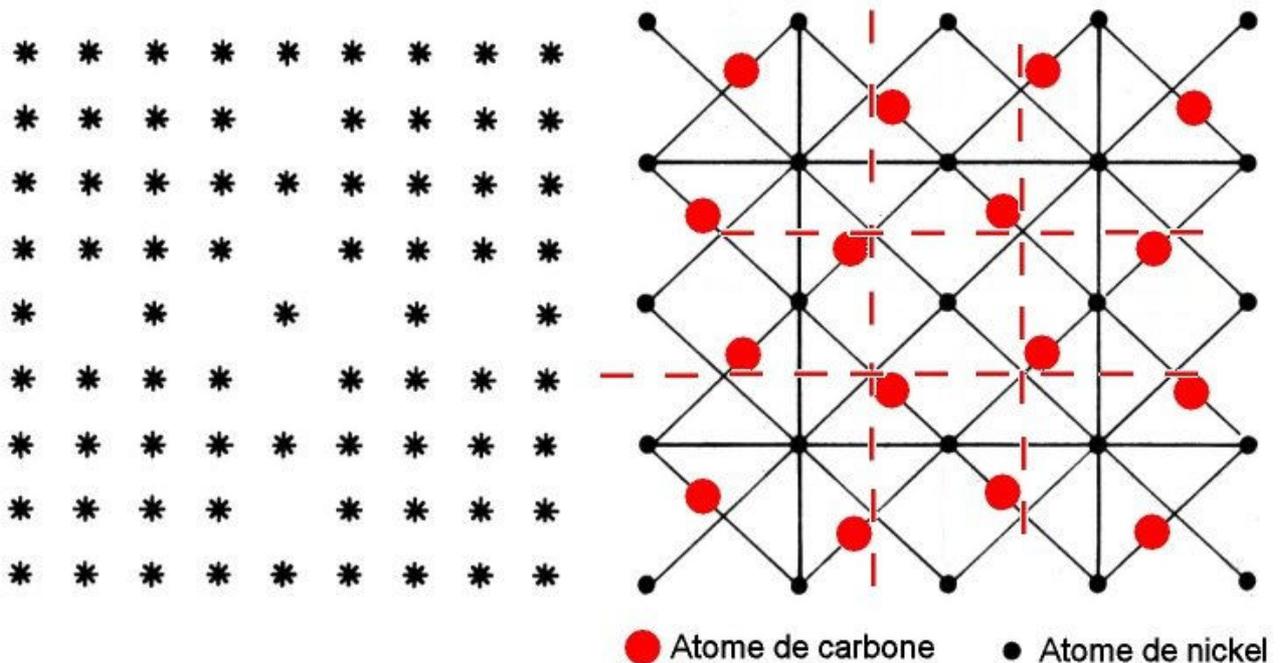


Diagramme de diffraction

Reconstruction
Ni(001) - p(2x2) - 4C - p4g

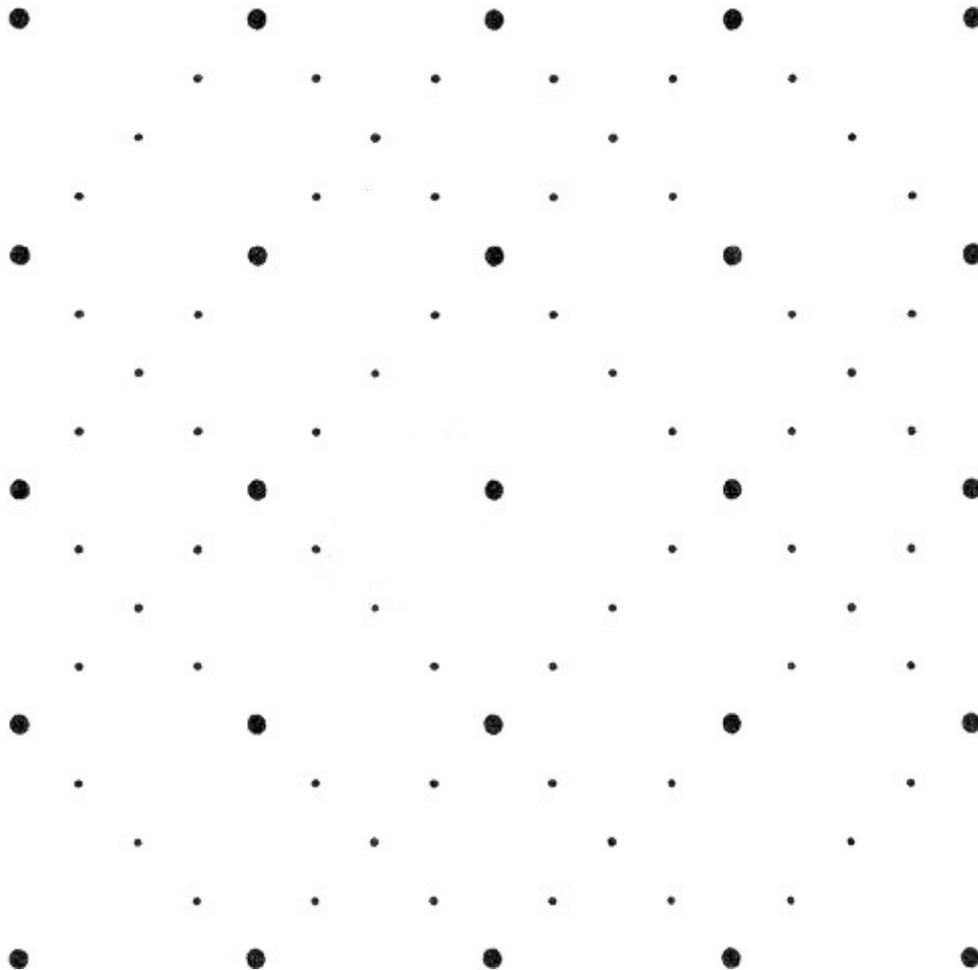
Diffraction d'électrons lents - Cristallographie de surface.

➤ Exemple & Exercice.

L'adsorption non dissociative d'une demi-monocouche de CO sur une surface Pd(001) donne lieu à une reconstruction extrinsèque.

Pour de grandes énergies, le diagramme de diffraction se présente comme ci-dessous.

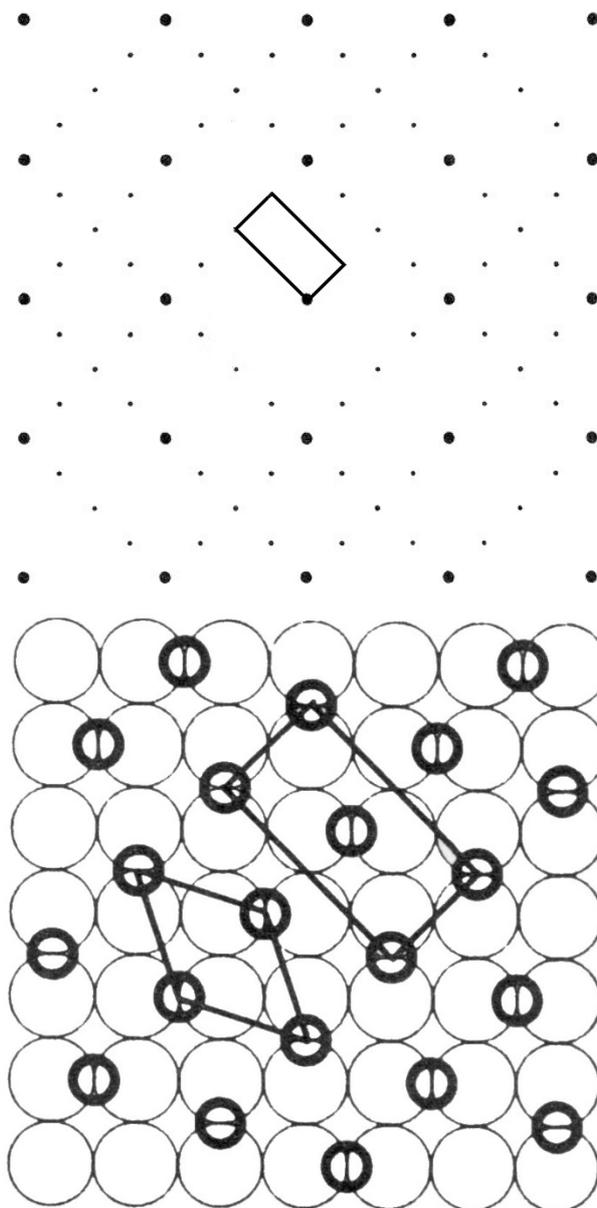
Quelle type de reconstruction pouvez -vous envisager?



Points de grand diamètre = spots de substrat.

Diffraction d'électrons lents - Cristallographie de surface.

➤ Exemple & Exercice.



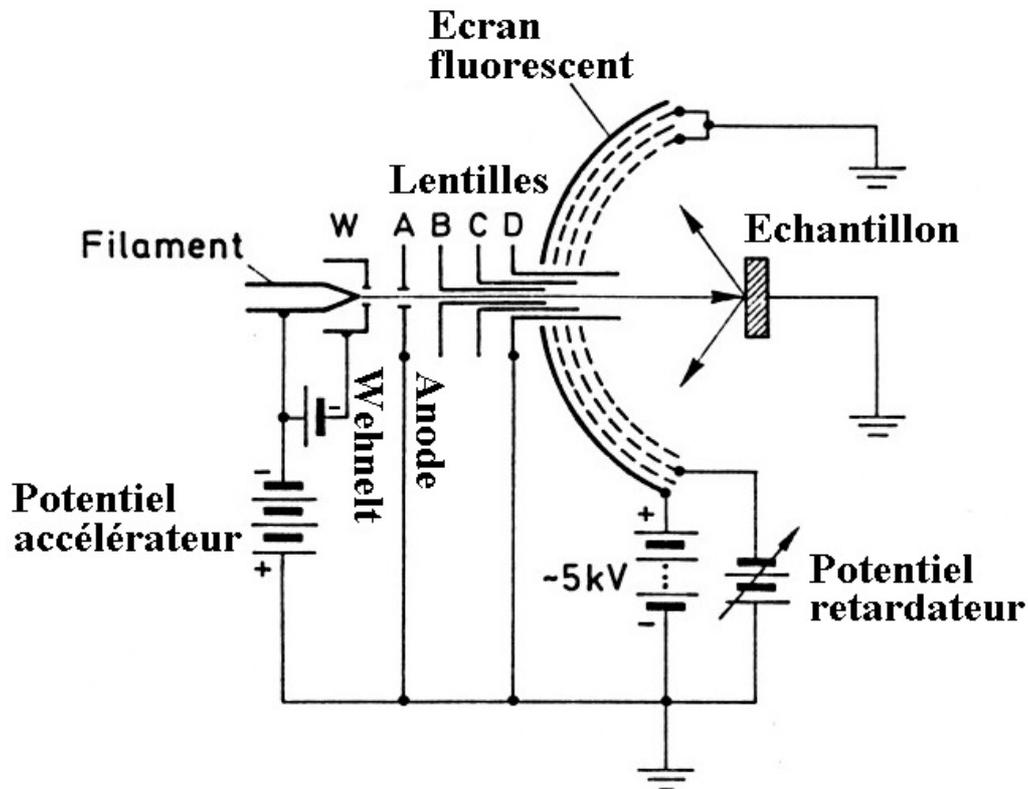
Pd(001) $c(2\sqrt{2} \times \sqrt{2})R45^\circ - 2\text{CO}$

.2 Plans de glissement. Pour toute incidence autre que normale, des points complémentaires $(1/4, 1/4)$, $(3/4, 3/4)$ apparaissent,

.2 molécules de CO de même environnement par maille reconstruite.

Diffraction d'électrons lents - Mise en oeuvre.

➤ Mise en œuvre de la diffraction d'électrons lents.



.Système ultra-vide (Ultra-High Vacuum UHV).

Pression $\sim 1 \cdot 10^{-10}$ mb, (1 MC toutes les 3 heures à $1 \cdot 10^{-9}$ mb)

.Source d'électrons lents - Energie $e \cdot \Delta V < 500$ eV.

Canon à émission thermoionique, $I_{\text{canon}} \approx 1 \mu\text{A}$ - $\varnothing_{\text{faisceau}} \approx 1$ mm - $\Delta E \approx 3/2 kT$, soit 0.27 eV pour W 2800 °C,

.Analyseur - Sélection des e^- diffractés élastiquement.

Ensemble de deux, trois voire quatre grilles métalliques hémisphériques concentriques polarisées suivant la séquence (masse, - $(\Delta V - \delta V)_{\text{retard.}}$, masse) : *analyseur à potentiel retardateur*.

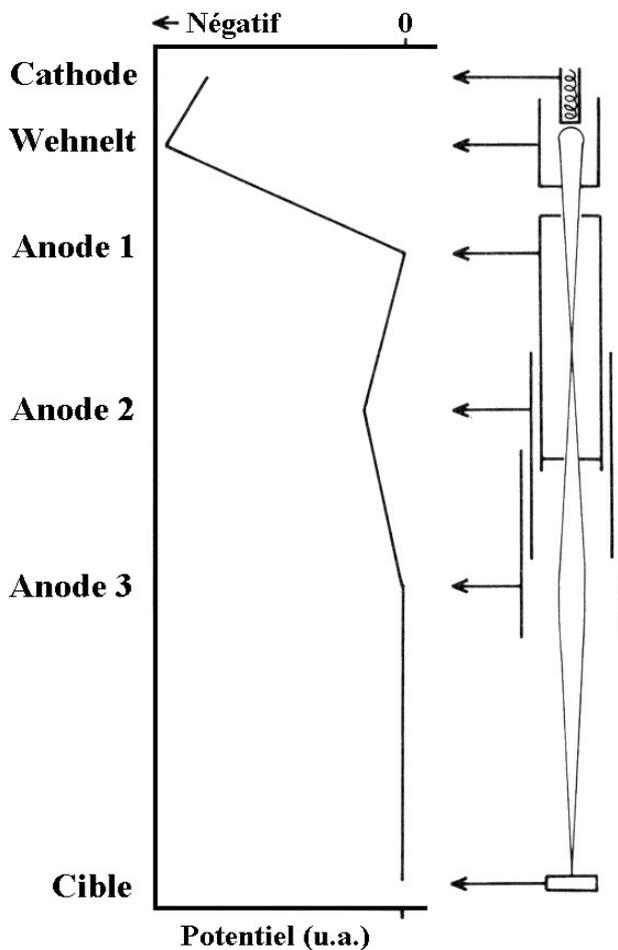
.Détecteur - Collecteur d'électrons.

Écran fluorescent hémisphérique polarisé (+ quelques kV) → Diagramme de diffraction,

Caméra CCD → Courbes $I_{\text{LEED}} = F(E_{e^-})$.

Diffraction d'électrons lents - Canon à électrons.

➤ **Canon à électrons** L. DeBersuder *Rev. Sci. Instrum.* **45** (1974) 1569



Courant d'électrons I_{canon} :
 $0.01 \mu\text{A} < I < 0.1 \text{ mA},$

Energie E des électrons :
 $15 \text{ eV} < E_0 = e \cdot \Delta V < 500 \text{ eV},$
 $\Delta E \approx 0.27 \text{ eV} (3/2 kT),$

Diamètre du faisceau d'électrons :
 $\varnothing_{\text{faisceau}} \propto 1/\sqrt{\Delta V}$, soit 0.25, 0.5, 1.0 mm à respectivement 500, 100 et 15 eV.

.Source d'électrons - Filament

W, W-Th 5%, LaB₆

Cathode chaude à émission thermoïonique,

$$J = A_0 T^2 \exp(-\Phi / kT) \quad \text{éq. de Richardson-Dushman}$$

J densité d'émission thermoïonique (A/m²), T température (K), Φ travail de sortie du métal (eV), k constante de Boltzmann, $A_0 = 1.2 \text{ A/m}^2 \cdot \text{K}^2$

Dispersion en énergie $\Delta E = 3/2 kT$, 0.27 eV pour W 2800°C

.Anode accélératrice (anode 1)

Accélération des électrons à une énergie $E_0 = e\Delta V$ via l'action d'un potentiel positif par rapport à la cathode $\Delta V = V_{\text{anode1}} - V_{\text{cathode}}$

Optique électronique (wehnelt...)

Wehnelt : optique de focalisation des électrons sur l'anode 1, Dispositifs de focalisation des électrons émis (anode 2...).

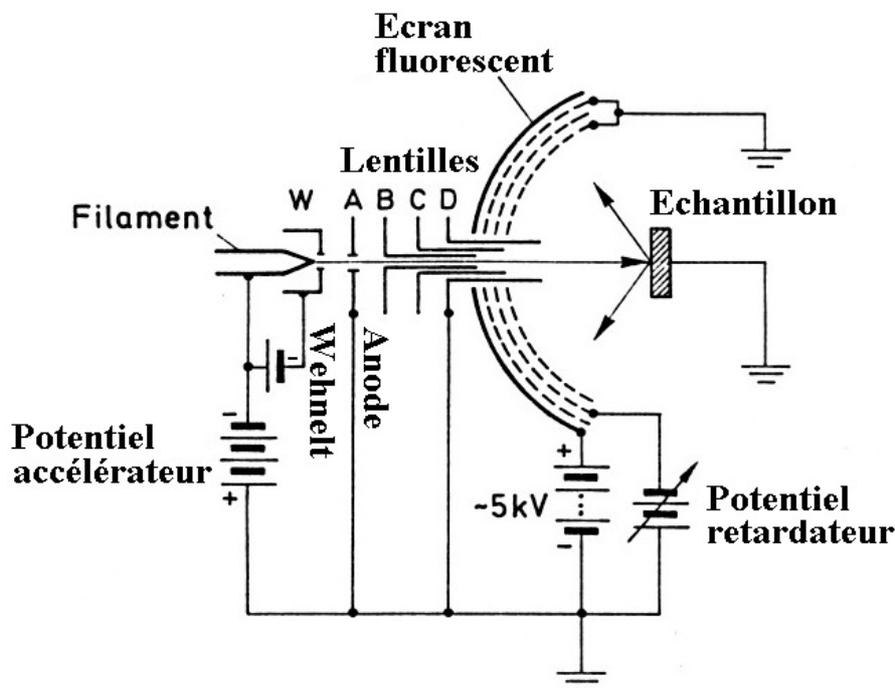
Diffraction d'électrons lents - Analyseur.

➤ Analyseur - Sélection des e⁻ diffractés élastiquement.

L'obtention d'un diagramme de diffraction nécessite la prise en compte des seuls électrons diffractés élastiquement.

Un analyseur d'électrons fréquemment employé est *l'analyseur à potentiel retardateur*.

Un analyseur à potentiel retardateur est constitué d'un ensemble de deux, trois voire quatre grilles métalliques hémisphériques concentriques polarisées suivant la séquence (masse, $-(\Delta V - \delta V)_{\text{retard.}}$, masse).



Grille n°	Polarisation	Fonction
1	0 V (masse)	Assure l'absence de champ électrostatique entre échantillon et analyseur,
2, 3	$-(\Delta V - \delta V)_{\text{retard.}}$	Transmission des seuls électrons d'énergie cinétique $E > e.(\Delta V - \delta V)_{\text{retard.}}$,
4	0 V (masse)	Assure l'isolement électrostatique entre l'analyseur et le détecteur.

Diffraction d'électrons lents - Collecteur d'électrons.

➤ Détecteur - Collecteur d'électrons.

Le type de collecteur d'électrons est fonction de la mesure à réaliser.

Sur les montages commerciaux standards fonctionnant à forts courants $I_{\text{canon}} \sim 1 \mu\text{A}$, le collecteur d'électrons est un ***écran fluorescent hémisphérique polarisé*** positivement à plusieurs kiloVolts (3 - 6 kV),

Sur les montages faibles courants $I_{\text{canon}} \sim 0.1 \text{ nA}$ (dépôts d'adsorbats organiques), le collecteur d'électrons est ***une paire de galettes de microcanaux*** (« *microchannelplates* »), i.e. un assemblage 2D de multiplicateurs tubulaires d'électrons de facteur d'amplification $\sim 1. 10^7$,

Sur les montages de type DATALEED où SPA-LEED (*spot profile analysis LEED*), le collecteur d'électrons est ***une caméra video CCD*** (*charge coupled device*, dispositif à transfert de charges). Ce type de montage donne accès aux profils en énergie des spots de diffraction,

→ Courbes $I_{\text{LEED}} = F(E_{e-})$,

Acquisition dynamique, soit une mesure d'intensité en 20 ms, un balayage en énergie complet d'un diagramme de diffraction en 10 s.

Diffraction d'électrons lents - Longueur de cohérence.

➤ Longueur de cohérence d'un électron w .

Expérimentalement, la taille d'un spot de diffraction est finie (non ponctuelle), et ce par suite:

1. de distorsions expérimentales (instrument de mesure),
2. d'imperfections physiques de la surface (désordre, température).

Pour une surface parfaite infinie, de signal de diffraction $I(\vec{k})$, les élargissements de spots mesurés sur le signal expérimental $J(\vec{k})$ définissent la *fonction de réponse du diffractomètre* $T(\vec{k})$

$$J(\vec{k}) = I(\vec{k}) * T(\vec{k}) \text{ (produit de convolution),}$$

$$TF(J(\vec{k})) = TF(I(\vec{k}) * T(\vec{k})) \Leftrightarrow TF(J(\vec{k})) = \Phi(\vec{r}).t(\vec{r})$$

La fonction d'autocorrélation $\Phi(\vec{r})$ dénombre le nombre de paires de centres diffuseurs éloignés de \vec{r} ,

La fonction de transfert $t(\vec{r})$ est une gaussienne de largeur à mi-hauteur w (« FWHM » *Full Width at Half Maximum*). w est appelée *longueur de cohérence* ou *largeur de transfert* du faisceau d'électrons.

La fonction de transfert $t(\vec{r})$ limite le domaine des corrélations \vec{r} accessibles expérimentalement.

Pour un faisceau d'électrons d'énergie E , de dispersion ΔE , de longueur d'onde λ , d'angle d'incidence θ_i , d'émergence θ_f , et d'ouverture angulaire $\Delta\theta$, la longueur de cohérence w est définie par :

G. Comsa *Surf. Sci.* **81** (1979) 57

$$w = \lambda / ((\Delta\theta \theta_f)^2 \cos^2 \theta_f + (\sin \theta_i - \sin \theta_f)^2 (\Delta E)^2 / E^2)^{1/2}$$

Expérimentalement, w varie de 20 Å à 120 Å, $\langle w \rangle \approx 100$ Å.

Diffraction d'électrons lents – Applications.

➤ Applications.

.Informations structurales qualitatives déduites de l'examen de diagrammes de diffraction DEL/LEED (*théorie cinématique - diffraction simple*) :

.Détermination de *reconstructions* de surface

Reconstructions intrinsèques:

Ir(001) - (1x2), Si(100) - (2x1), Si(111) - (7x7)...

Reconstructions extrinsèques:

Adsorption d'atomes H, C, O, N, Na, K, Cl, I, S, Te, Se

Ag(111)($\sqrt{3}\times\sqrt{3}$)R30° - I, Ni(100) c(2x2) - Na...

Adsorption de molécules CO, C₂H₂, C₆H₆...

Cu(100) c(2x2) - CO, Rh(111) (2x2) - C₂H₃...

.***Qualité cristallographique*** de la surface. Un bon rapport signal/bruit renseigne sur la qualité cristallographique de la reconstruction sur une échelle spatiale de l'ordre de la longueur de cohérence d'un électron w , soit environ 10 nm = 100 Å,

.Présence de défauts de surfaces périodiques : surfaces vicinales à marches...

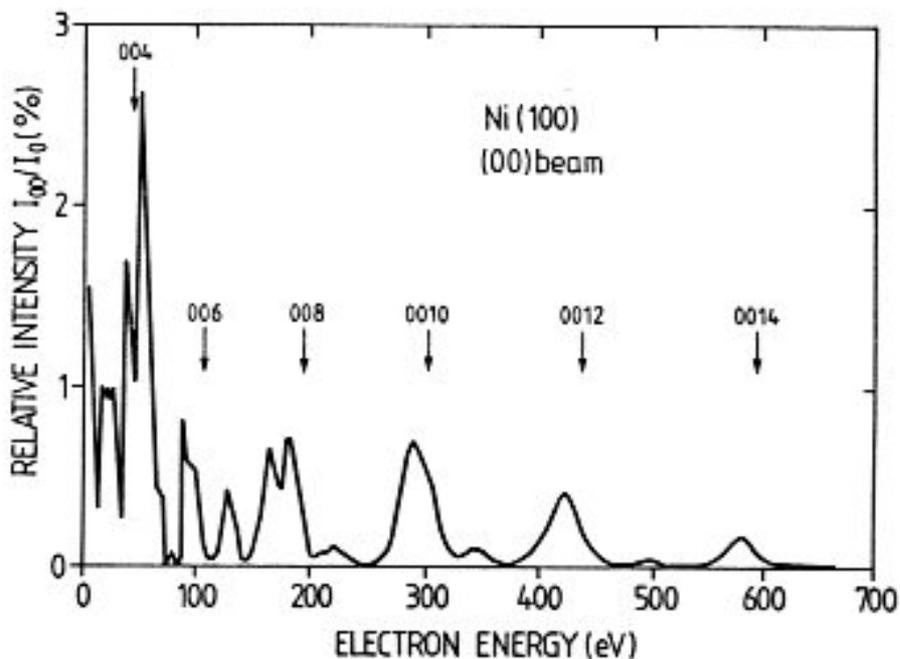
Diffraction d'électrons lents - Applications.

➤ Applications.

.Informations structurales quantitatives déduites de l'examen des intensités des spots de diagrammes de diffraction (LEED dynamique):

Détermination de la structure de la surface par modélisation des courbes d'intensité $I_{LEED} = F(E_e(V))$ dans le cadre de la *théorie dynamique - diffraction multiple* (cf. cours diffraction de photoélectrons),

Réactions de surface, transitions de phases via l'acquisition des profils $I_{LEED} = F(E, T)...$



Méthodes DATALEED, SPA-LEED (*spot profile analysis LEED*). Courbe (I - V) obtenue sur une surface propre Ni(100) K. Christmann *et al.* *Surf. Sci.* **40** (1973) 61.

Diffraction d'électrons lents - Applications.

.Imagerie directe – Low Energy Electron Microscope LEEM.

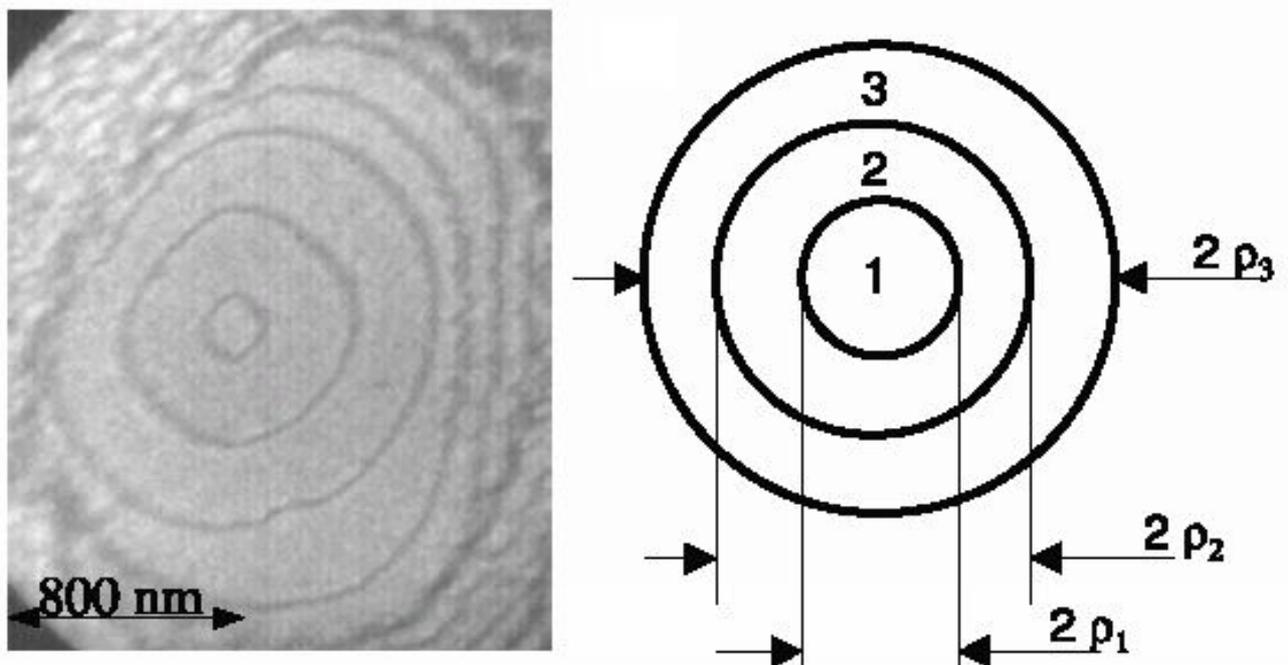
.Principe : Construction d'une image réelle de la surface par *Transformée de Fourier inverse* du diagramme de diffraction DEL/LEED (en amplitude et en phase). En pratique, *Transformée de Fourier inverse* du spot spéculaire (00)

.Imagerie en temps réel,

.résolution latérale $\Delta x \approx 3$ nm (aberration lentilles),

.résolution verticale $\Delta z \approx$ marche atomique ≈ 0.1 nm.

.Etudes de cinétique de croissance, transformations de phase, réactions de surface...



Etude de la croissance Cu/Cu(001) par LEEM. R. Gerlach, L. Douillard, T. Maroutian, D. Martinotti, H.-J. Ernst, *Surface Science* **480** (2001), vidéo disponible à l'adresse <http://www.LEEM-user.com>

Diffraction d'électrons lents - Références.

➤ Références bibliographiques.

Les Surfaces solides : concepts et méthodes - Stéphane Andrieu, Pierre Müller
EDP Sciences (2005) ISBN 2759802930, 9782759802937,

Analyse structurale et chimie des matériaux - J. P. Eberhart - Bordas Paris
(1989) ISBN 2 040 18797 9,

Introduction à la Cristallographie et à la Chimie structurale - M. Van Meerssche,
J. Feneau-Dupont - Leuven, Louvain-la-Neuve, Paris - Editions Peeters (1984) – ISBN
90-6831-006-2 - SISO 542.3,

Low-Energy Electron Diffraction - Experiment, Theory and Surface Structure
Determination - M. A. Van Hove, W. H. Weinberg, C. M. Chan - Springer Series in
Surface Sciences 6 (1986) Springer-Verlag Berlin Heidelberg - ISBN 3 540 16262 3,

Surface Crystallography - An Introduction to Low Energy Electron Diffraction.
L. J. Clarke - A Wiley Interscience Publication (1985) John Wiley & Sons Ltd - ISBN
0 471 90513 5.

➤ Ressources internet académiques & commerciales.

LEED Data Repository <http://www.matscieng.sunysb.edu/ivdata/>

City University of Hong Kong

http://www.icts.hkbu.edu.hk/vanhove/#Download_software ***

Michigan State University CEM924 <http://www.cem.msu.edu/~cem924sg/>

Southern Illinois University <http://engineering.siu.edu/frictioncenter/cafs-courses/surface-contact-mechanics/lecture-7.php>

Université de Londres Queen Mary,

http://www.chem.qmul.ac.uk/surfaces/scc/scat6_2.htm

CEA IRAMIS <http://iramis.cea.fr/Pisp/ludovic.douillard/>

FOCUS GmbH <http://www.focus-gmbh.com/>

LK Technologies Inc. <http://www.lktech.com/>

NIST Surface Structure Database <http://www.nist.gov/srd/nist42.htm>

Princeton Research Instruments, Inc. <http://www.pri-leeduhv.com/>

OCI Vacuum Microengineering Inc. <http://www.ocivm.com/>

OMICRON Vakuumphysik GmbH <http://www.omicron.de/>

SPECS USA Inc. <http://www.specsinstruments.com/>

STAIB Instruments GmbH <http://www.staibinstruments.com/>

LEEM/PEEM user-community <http://www.LEEM-user.com/>

ELMITEC Elektronenmikroskopie GmbH <http://www.elmitec-gmbh.com/>

SPECS LEEM P90 www.specs.de

Algorithmes de diffraction & Bases de données

http://www.icts.hkbu.edu.hk/vanhove/#Download_software

Diffraction d'électrons lents - Sommaire.

- Principe.
- Surface cristalline - Aspects cristallographiques.
 - .Réseau cristallin.
 - .Motif atomique.
- Généralités sur la diffraction - Condition de Laüe.
 - .Condition de diffraction de Laüe d'une réseau linéaire.
 - .Espace réciproque d'une surface cristalline.
 - .Conditions de Laüe d'une surface cristalline.
 - .Sphère d'Ewald.
- Généralités sur les surfaces propres & reconstructions.
 - .Etudes structurales des surfaces reconstruites.
 - .Exemple.
 - .Notation de Wood.
 - .Définition de domaines - Occurrence de domaines.
 - .Diffraction multiple par plusieurs plans atomiques.
 - .Surface non reconstruite et diffraction multiple.
 - .Reconstructions commensurables et diffraction multiple.
 - .Exemples.
 - .Reconstructions incommensurables et diffraction multiple.
 - .Exemple - système Ar/graphite.
 - .Symétries d'une surface cristalline.
 - .Groupe ponctuel.
 - .Réseaux de Bravais.
 - .Groupe d'espace.
- Symétries et diagramme de diffraction.
 - .Plans de glissement et diagramme de diffraction.
- Exemples & Exercices.
- Mise en œuvre de la diffraction d'électrons lents.
 - Canon à électrons.

Diffraction d'électrons lents - Sommaire.

- Analyseur - Sélection des e^- diffractés élastiquement.
- Détecteur - Collecteur d'électrons.
- Longueur de cohérence d'un électron.
- Applications.
 - .Informations structurales qualitatives.
 - .Informations structurales quantitatives.
 - .Imagerie directe – Low Energy Electron Microscope LEEM.
- Références bibliographiques.
- Ressources internet académiques & commerciales.

Reconstruction CFC (001) p(3x1)

LEEDpat version 3.0

File Options Help

Basic 2D lattice

2D lattice/group = [11] Square p4mm (p4m)

a = 1,0000

Superlattice

Matrix

3	0
0	1

[1] Reduce

8 domain(s), select: [3, 0 | 0, 1] [1]

Common name: p(3x1)

p-rect.: a = 3,0000 b = 1,0000 phi = 90,0

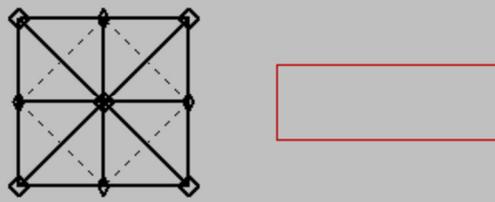
Symmetry [constrained]

/1/2/3/6/3/

[1] Oblique p1

Symmetry / Domains

Basic lattice [11] Superlattice [1]



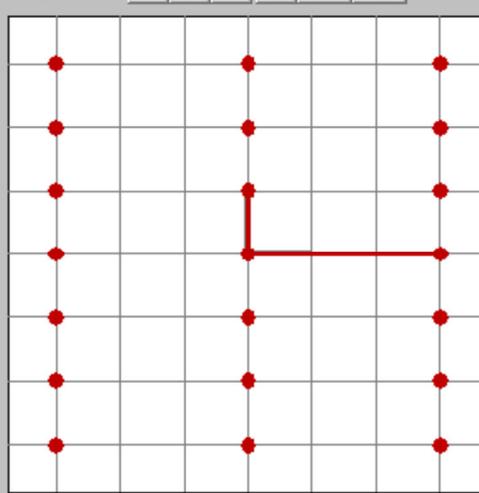
Include domains Include 1x1

Paint domains Include bases

8 domain(s), 2 unique subpattern(s)

Lattice

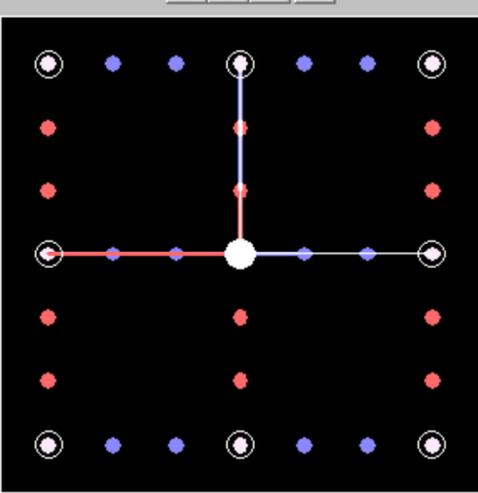
+ 1 - sl cntr def



Magn. = 3,000 (L) / 1,000 (P) ; Angle = 0,00

Pattern

+ 1 - sl



Distortion = 0,0000

Domain colors :



Stack

Load (0/0)

up down

Save Clear

Refresh

Exit

Reconstruction CFC (001) – p(2x3)

LEEDpat version 4.2 by K.E. Hermann and M.A. Van Hove

File Options Help

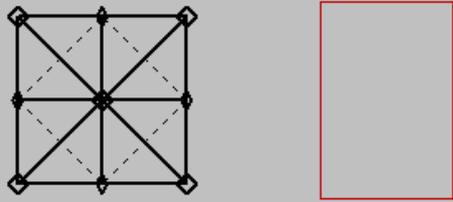
Basic 2D lattice

2D lattice/group = [11] Square p4mm (p4m)

a = 1,0000

Symmetry / Domains

Basic lattice [11] Superlattice [1]



Include domains Include 1x1
 Paint domains Include bases

8 domain(s), 2 unique subpattern(s)

Select domain(s): [2, 0 | 0, 3] [1]

Superlattice

comm. incomm. hoc

Matrix (M), integer Common name

2	0
0	3

None

p-rect.: a = 2,0000 b = 3,0000 phi = 90,00

Symmetry [constrained]

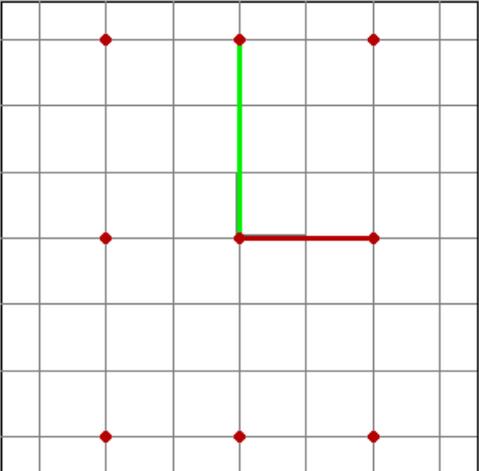
/1/2/3/4/6/7/3/

[1x1] Red. Swap [1] Oblique p1

Auto on

Lattice

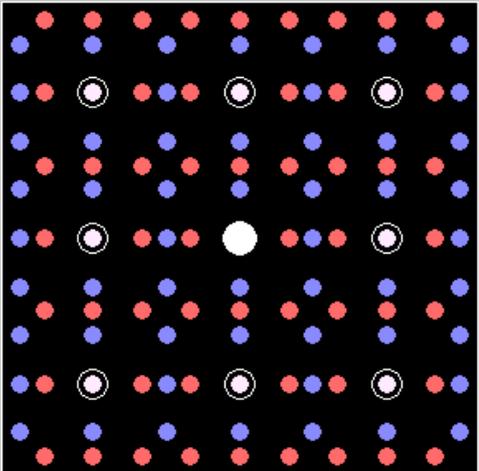
+ - Sub Ovl Cntr Dflt



Magn. = 0,350 (L) / 0,769 (P) ; Angle = 0,00

Pattern

+ - Sub Ovl



Distortion = 0,0000

Domain colors :



Stack

Load (0/0)

up down

Save Clear

Refresh

Exit

Reconstruction $((3\sqrt{2} \times \sqrt{2})R45)$

LEEDpat version 3.0

File Options Help

Basic 2D lattice

2D lattice/group = [11] Square p4mm (p4m)

a = 1,0000

Superlattice

Matrix

2	1
1	2

[1] Reduce

8 domain(s), select:
[2, 1 | 1, 2] [1]

Common name: None

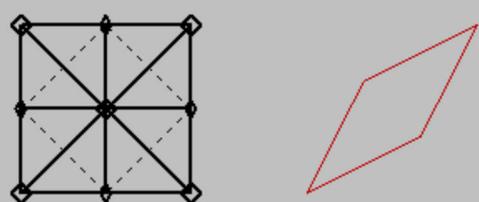
c-rect.: a = 2,2361 b = 2,2361 phi = 36,9

Symmetry [constrained]
/1/2/5/9/5/

[1] Oblique p1

Symmetry / Domains

Basic lattice [11] Superlattice [1]

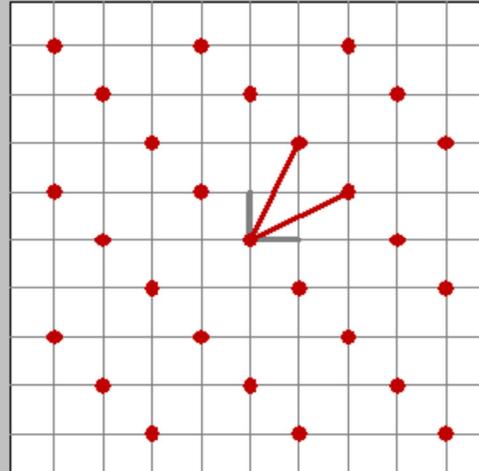


Include domains Include 1x1
 Paint domains Include bases

8 domain(s), 2 unique subpattern(s)

Lattice

+ 1 - sl cntr def



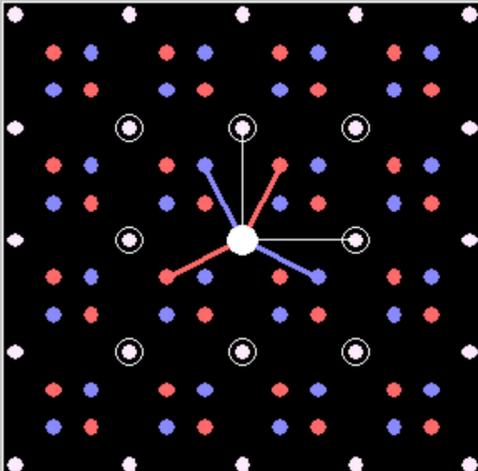
Magn. = 3,913 (L) / 1,690 (P) ; Angle = 0,00

-90
< rot
0
rot >
+90

d

Pattern

+ 1 - sl



Distortion = 0,0000

Domain colors : 

Stack

Load (0/0)
up down
Save Clear

Refresh

Exit

Reconstruction Mo(100) c(2x2) – S, (r2xr2)R45 - S

LEEDpat version 3.0

File Options Help

Basic 2D lattice

2D lattice/group = [11] Square p4mm (p4m)

a = 1,0000

c- Superlattice

Matrix

1	-1
1	1

(1) Reduce

8 domain(s), select:

[1, -1 | 1, 1] [1]

Common name: None

square : a = 1,4142 b = 1,4142 phi = 90,0

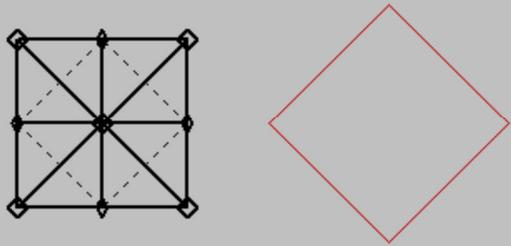
Symmetry [constrained]

/1/2/3/4/5/6/7/8/9/10/11/12/3/4/5/7/

[1] Oblique p1

Symmetry / Domains

Basic lattice [11] Superlattice [1]



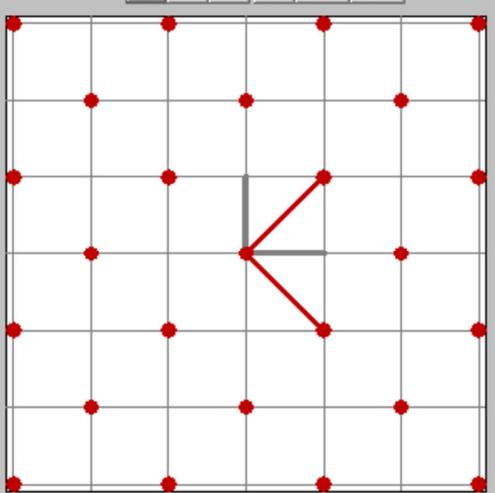
Include domains Include 1x1

Paint domains Include bases

8 domain(s), 1 unique subpattern(s)

Lattice

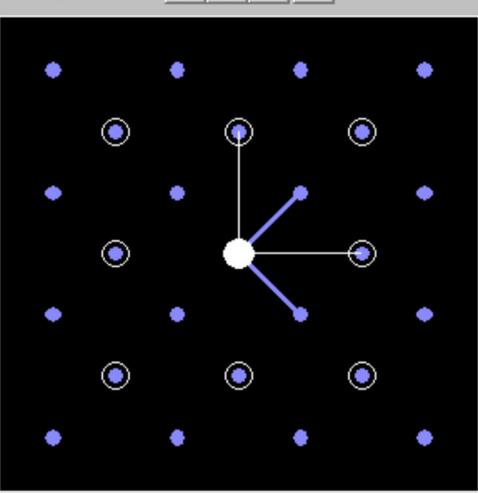
1 - sl cntr def



Magn. = 2,475 (L) / 1,554 (P) ; Angle = 0,00

Pattern

+ 1 - sl



Distortion = 0,0000

Domain colors :

Stack

Load (0/0)

up down

Save Clear

Refresh

Exit

Reconstruction CFC(100) (2r2xr2)R45

LEEDpat version 4.2 by K.E. Hermann and M.A. Van Hove

File Options Help

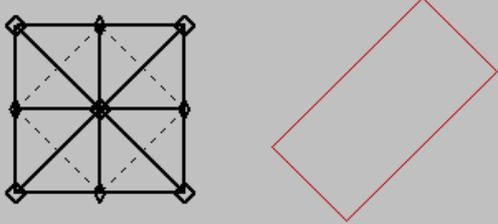
Basic 2D lattice

2D lattice/group = [11] Square p4mm (p4m)

a = 1,0000

Symmetry / Domains

Basic lattice [11] Superlattice [1]



Include domains Include 1x1
 Paint domains Include bases

8 domain(s), 2 unique subpattern(s)

Select domain(s): [2, 2 | -1, 1] [1]

Superlattice

comm. incomm. hoc

Matrix (M), integer

2	2
-1	1

Common name: [2r2xr2]R45 {square only}

p-rect.: a = 2,8284 b = 1,4142 phi = 90,00

Symmetry [constrained]

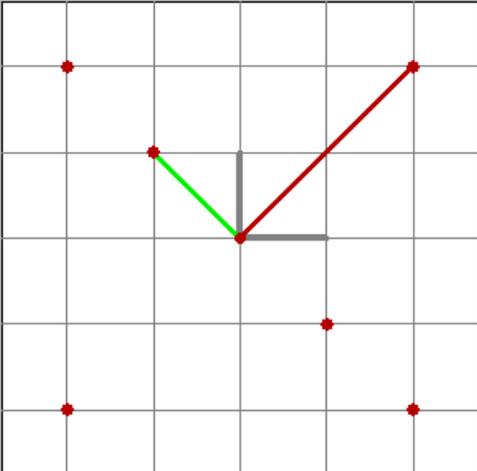
1/2/3/4/6/7/8/3/4/7/1

[1x1] Red. Swap [1] Oblique p1

Auto on

Lattice

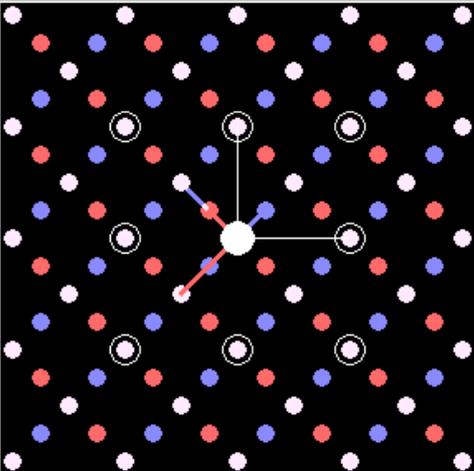
+ - Sub Ovl Cntr Dflt



Magn. = 0,455 (L) / 0,592 (P) ; Angle = 0,00

Pattern

+ - Sub Ovl



Distortion = 0,0000

Domain colors:



Stack

Load (0/0)

up down

Save Clear

Refresh

Exit

Reconstruction CFC(100) c(4x2)

LEEDpat version 3.0

File Options Help

Basic 2D lattice

2D lattice/group = [11] Square p4mm (p4m)

a = 1,0000

c- Superlattice

Common name: c(4x2) (square only)

c-rect.: a = 2,2361 b = 2,2361 phi = 53,1

Symmetry [constrained]

/1/2/5/9/5/

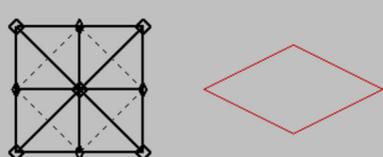
[1] Oblique p1

Matrix: $\begin{pmatrix} 2 & -1 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$

[1] Reduce

Symmetry / Domains

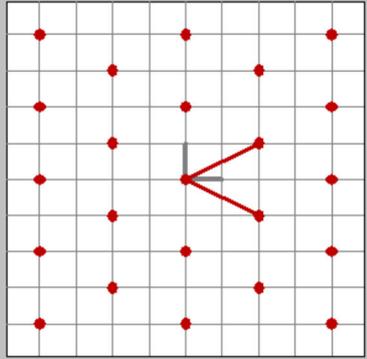
Basic lattice [11] Superlattice [1]



Include domains Include 1x1

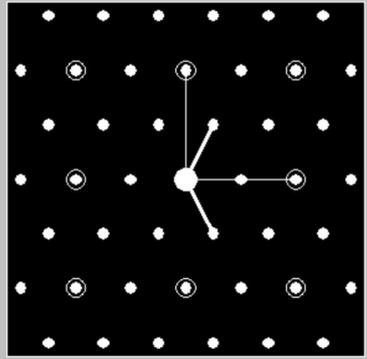
Include bases

Lattice + 1 - sl cntr def



Magn. = 3,913 (L) / 1,300 (P) ; Angle = 0,00

Pattern + 1 - sl



Distortion = 0,0000

Stack

Load (0/0)

up down

Save Clear

Refresh

Exit

LEEDpat version 3.0

File Options Help

Basic 2D lattice

2D lattice/group = [11] Square p4mm (p4m)

a = 1,0000

c- Superlattice

Common name: c(4x2) (square only)

c-rect.: a = 2,2361 b = 2,2361 phi = 53,1

Symmetry [constrained]

/1/2/5/9/5/

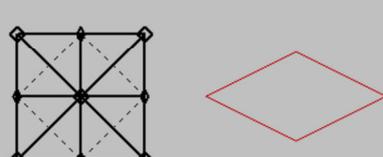
[1] Oblique p1

8 domain(s). select:

[2. -1 | 2. 1] [1]

Symmetry / Domains

Basic lattice [11] Superlattice [1]

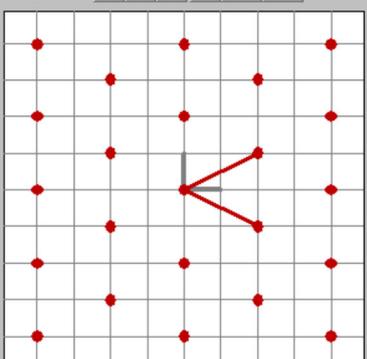


Include domains Include 1x1

Paint domains Include bases

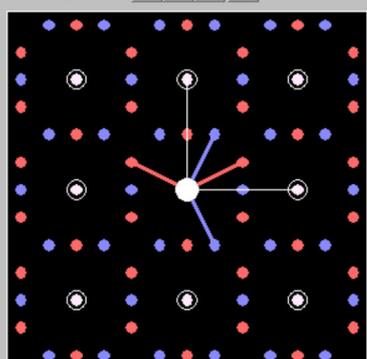
8 domain(s). 2 unique subpattern(s)

Lattice + 1 - sl cntr def



Magn. = 3,913 (L) / 1,300 (P) ; Angle = 0,00

Pattern + 1 - sl



Distortion = 0,0000

Domain colors:



Stack

Load (0/0)

up down

Save Clear

Refresh

Exit

Reconstruction Mo(001) $p(\sqrt{5} \times \sqrt{5})R26^\circ - O$

LEEDpat version 3.0

File Options Help

Basic 2D lattice

2D lattice/group = [11] Square p4mm (p4m)

a = 1,0000

Superlattice

Matrix

2	-1
1	2

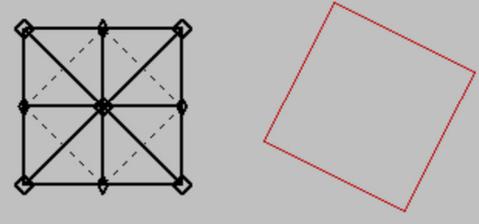
(1) Reduce

8 domain(s), select:

[2, -1 | 1, 2] [1]

Symmetry / Domains

Basic lattice [11] Superlattice [1]



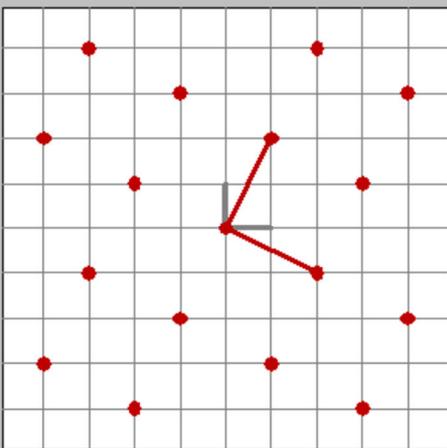
Include domains Include 1x1

Paint domains Include bases

8 domain(s), 2 unique subpattern(s)

Lattice

+ 1 - sl cntr def



Magn. = 3,913 (L) / 1,300 (P) ; Angle = 0,00

-90

< rot

0

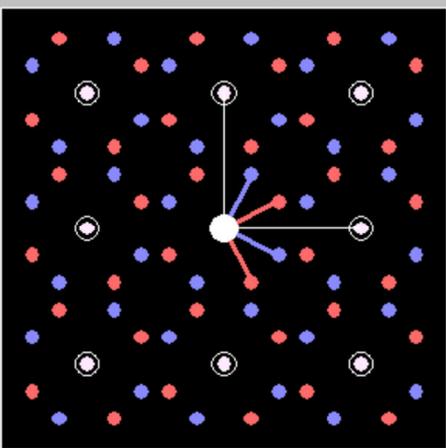
rot >

+90

d

Pattern

+ 1 - sl



Distortion = 0,0000

Domain colors :



Stack

Load (0/0)

up down

Save Clear

Refresh

Exit

Reconstruction carrée sur plan hexagonal

Pas de notation de Wood

LEEDpat version 3.0

File Options Help

Basic 2D lattice

2D lattice/group = [17] Hexagonal p6mm (p6m)

a = 1,0000 obtuse $\alpha = 60,0$
 acute

Superlattice

Matrix: $\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}$

Common name: None

p-rect.: a = 2,0000 b = 1,7321 phi = 90,0

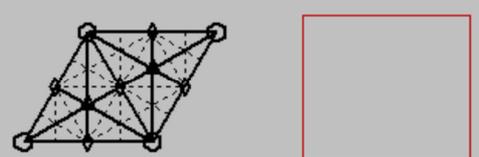
Symmetry [constrained]
/1/2/3/4/6/7/8/3/4/7/

[1] Oblique p1

12 domain(s), select:
[2, 0 | -1, 2] [1]

Symmetry / Domains

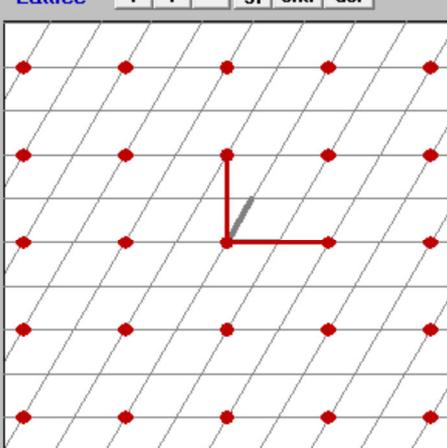
Basic lattice [17] Superlattice [1]



Include domains Include 1x1
 Paint domains Include bases

12 domain(s), 3 unique subpattern(s)

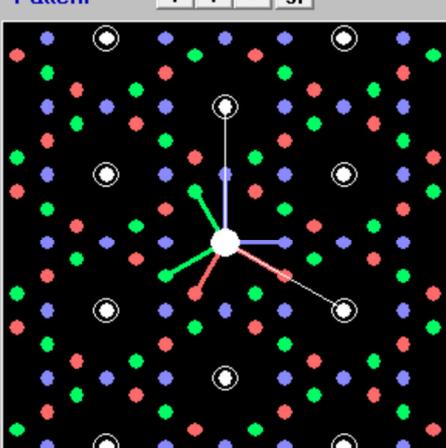
Lattice + 1 - sl cntr def



Magn. = 3,500 (L) / 1,300 (P) ; Angle = 0,00

-90
< rot
0
rot >
+90
d

Pattern + 1 - sl



Distortion = 0,0000

Domain colors :


Stack

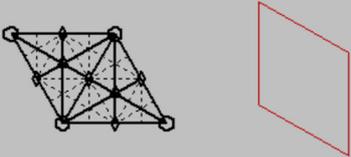
Reconstruction $((2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3})R30$

LEEDpat version 3.0

File Options Help

Basic 2D lattice
 2D lattice/group = [17] Hexagonal p6mm (p6m)
 a = 1,0000 obtuse $\alpha = 120,0$
 acute

c- Superlattice
 Matrix: $\begin{pmatrix} 2 & -2 \\ 2 & 4 \end{pmatrix}$ Common name: [2r3x2r3]R30 (hexagonal only)
 hexag. : a = 3,4641 b = 3,4641 phi = 120,0
 Symmetry [constrained]
 /1/2/5/9/13/14/15/16/17/5/
 [1] Reduce [1] Oblique p1
 12 domain(s). select: [2, -2 | 2, 4] [1]

Symmetry / Domains
 Basic lattice [17] Superlattice [1]

 Include domains Include 1x1
 Paint domains Include bases
 12 domain(s). 1 unique subpattern(s)

Lattice + 1 - sl cntr def **Pattern** + 1 - sl

Magn. = 6,062 (L) / 1,300 (P) ; Angle = 0,00 Distortion = 0,0000

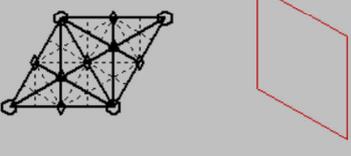
Domain colors : 
 Stack: Load [0/0] up down Save Clear Refresh Exit

LEEDpat version 3.0

File Options Help

Basic 2D lattice
 2D lattice/group = [17] Hexagonal p6mm (p6m)
 a = 1,0000 obtuse $\alpha = 60,0$
 acute

c- Superlattice
 Matrix: $\begin{pmatrix} 4 & -2 \\ -2 & 4 \end{pmatrix}$ Common name: [2r3x2r3]R30 (hexagonal only)
 hexag. : a = 3,4641 b = 3,4641 phi = 120,0
 Symmetry [constrained]
 /1/2/5/9/13/14/15/16/17/5/
 [1] Reduce [1] Oblique p1
 12 domain(s). select: [4, -2 | -2, 4] [1]

Symmetry / Domains
 Basic lattice [17] Superlattice [1]

 Include domains Include 1x1
 Paint domains Include bases
 12 domain(s). 1 unique subpattern(s)

Lattice + 1 - sl cntr def **Pattern** + 1 - sl

Magn. = 6,062 (L) / 1,000 (P) ; Angle = 0,00 Distortion = 0,0000

Domain colors : 
 Stack: Load [0/0] up down Save Clear Refresh Exit

Reconstruction $((2\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30$

LEEDpat version 3.0

File Options Help

Basic 2D lattice
 2D lattice/group = [17] Hexagonal p6mm (p6m)
 a = 1,0000
 obtuse acute $\alpha = 120,0$

c- Superlattice
 Matrix $\begin{pmatrix} 4 & 2 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$
 Common name: None
 oblique: a = 3,4641 b = 1,7321 phi = 120,0
 Symmetry [constrained] /1/2/
 Reduce [1] Oblique p1
 12 domain(s), select: [4, 2 | -1, 1] [1]

Symmetry / Domains
 Basic lattice [17] Superlattice [1]
 Include domains Include 1x1
 Paint domains Include bases
 12 domain(s), 3 unique subpattern(s)

Lattice + 1 - sl cntr def

 Magn. = 3,464 (L) / 1,268 (P) ; Angle = 0,00

Pattern + 1 - sl

 Distortion = 0,0000

Domain colors:

Stack
 Load (0/0)
 up down
 Save Clear
 Refresh
 Exit

LEEDpat version 4.2 by K.E. Hermann and M.A. Van Hove

File Options Help

Basic 2D lattice
 2D lattice/group = [17] Hexagonal p6mm (p6m)
 a = 1,0000
 obtuse acute $\alpha = 60,00$

Superlattice comm. incomm. hoc
 Matrix (M), integer $\begin{pmatrix} 2 & 2 \\ -2 & 1 \end{pmatrix}$
 Common name: None
 oblique: a = 3,4641 b = 1,7321 phi = 120,00
 Symmetry [constrained] /1/2/
 Red. Swap [1] Oblique p1
 Auto on

Symmetry / Domains
 Basic lattice [17] Superlattice [1]
 Include domains Include 1x1
 Paint domains Include bases
 12 domain(s), 3 unique subpattern(s)
 Select domain(s): [2, 2 | -2, 1] [1]

Lattice + - Sub Ovl Cntr Dflt

 Magn. = 0,269 (L) / 1,000 (P) ; Angle = 0,00

Pattern + - Sub Ovl

 Distortion = 0,0000

Domain colors:

Stack
 Load (0/0)
 up down
 Save Clear
 Refresh
 Exit

Reconstruction CFC (111) p(2x1)

LEEDpat version 4.2 by K.E. Hermann and M.A. Van Hove

File Options Help

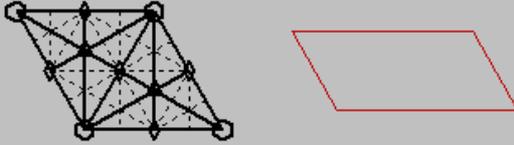
Basic 2D lattice

2D lattice/group = [17] Hexagonal p6mm (p6m)

a = 1,0000 obtuse $\alpha = 120,00$
 acute

Symmetry / Domains

Basic lattice [17] Superlattice [1]



Include domains Include 1x1
 Paint domains Include bases

12 domain(s), 3 unique subpattern(s)

Select domain(s):
[2, 0 | 0, 1] [1]

Auto on

Superlattice

comm. incomm. hoc

Matrix (M), integer Common name

2	0
0	1

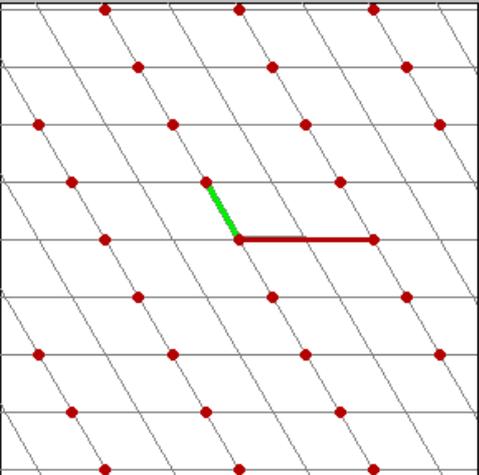
oblique: a = 2,0000 b = 1,0000 phi = 120,00

Symmetry [constrained] /1/2/

[1x1] Red. Swap [1] Oblique p1

Lattice

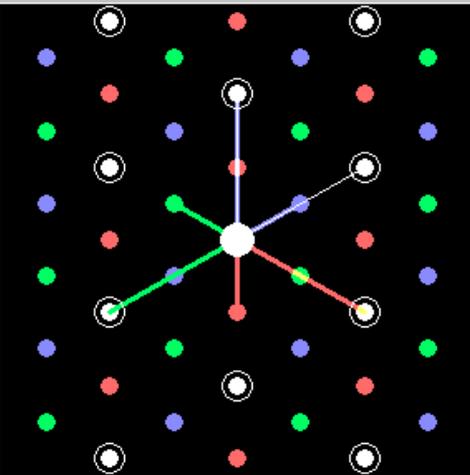
+ - Sub Ovl Cntr Dflt



Magn. = 0,350 (L) / 0,769 (P) ; Angle = 0,00

Pattern

+ - Sub Ovl



Distortion = 0,0000

Domain colors:



Stack

Load (0/0)
up down
Save Clear

Refresh

Exit

Reconstruction CFC (111) p(3x1)

LEEDpat version 4.2 by K.E. Hermann and M.A. Van Hove

File Options Help

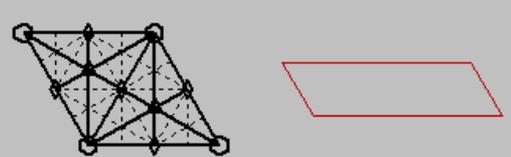
Basic 2D lattice

2D lattice/group = [17] Hexagonal p6mm (p6m)

a = 1,0000 obtuse $\alpha = 120,00$
 acute

Symmetry / Domains

Basic lattice [17] Superlattice [1]



Include domains Include 1x1
 Paint domains Include bases

12 domain(s). 3 unique subpattern(s)

Select domain(s): [2, -2 | 2, 2] [1]

Superlattice

comm. incomm. hoc

Matrix (M), integer Common name

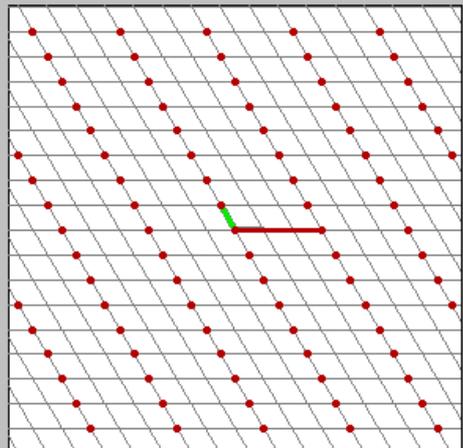
3	0
0	1

p(3x1)
 oblique: a = 3,0000 b = 1,0000 phi = 120,00
 Symmetry [constrained] /1/2/
 [1] Oblique p1

Auto on

Lattice

+ - Sub Ovl Cntr Dfft



Magn. = 0,159 (L) / 0,769 (P) ; Angle = 0,00

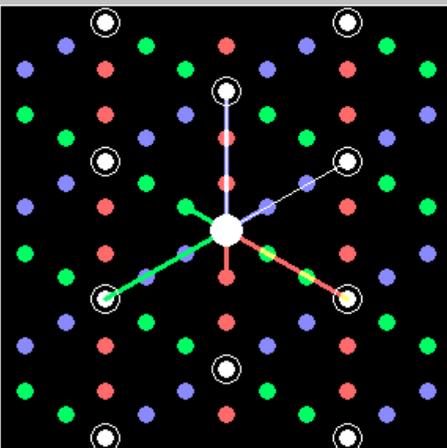
Pattern

+ - Sub Ovl

-90 < rot 0 rot > +90

d

Cell Dots



Distortion = 0,0000

Domain colors :



Stack

Load (0/0)

up down

Save Clear

Refresh

Exit

Reconstruction CFC (111) p(3x2)

LEEDpat version 4.2 by K.E. Hermann and M.A. Van Hove

File Options Help

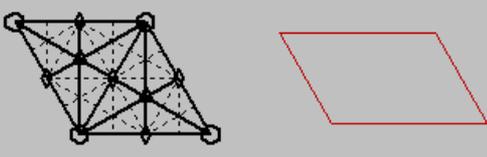
Basic 2D lattice

2D lattice/group = [17] Hexagonal p6mm (p6m)

a = 1,0000 obtuse α = 120,00
 acute

Symmetry / Domains

Basic lattice [17] Superlattice [1]



Include domains Include 1x1
 Paint domains Include bases

12 domain(s). 6 unique subpattern(s)

Select domain(s): [2, -2 | 2, 2] [1]

Superlattice

comm. incomm. hoc

Matrix (M), integer Common name

3	0
0	2

p(3x2)
 oblique: a = 3,0000 b = 2,0000 phi = 120,00

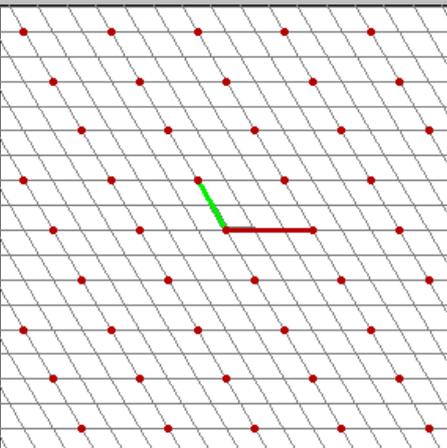
Symmetry [constrained] /1/2/

[1x1] Red. Swap [1] Oblique p1

Auto on

Lattice

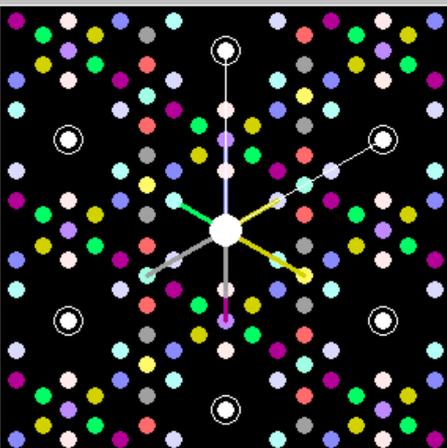
+ - Sub Ovl Cntr Dflt



Magn. = 0,159 (L) / 1,000 (P) ; Angle = 0,00

Pattern

[-] Sub Ovl



Distortion = 0,0000

Domain colors :



Stack

Load (0/0)

up down

Save Clear

Refresh

Exit

Reconstruction CFC(111) c(4x2)

LEEDpat version 4.2 by K.E. Hermann and M.A. Van Hove

File Options Help

Basic 2D lattice

2D lattice/group = [16] Hexagonal p6

a = 1,0000 obtuse acute $\alpha = 60,00$

Superlattice

comm. incomm. hoc

Matrix (M), integer $\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -2 & 2 \end{pmatrix}$ Common name: c(4x2) (hexagonal only)

prect.: a = 1,7321 b = 2,0000 phi = 90,00

Symmetry [constrained] /1/2

[1x1] Red. Swap [1] Oblique p1

Auto on

Symmetry / Domains

Basic lattice [16] Superlattice [1]

Include domains Include 1x1
 Paint domains Include bases

6 domain(s). 3 unique subpattern(s)

Select domain(s): [1. 1 | -2. 2] [1]

Lattice

+ - Sub Ovl Cntr Dflt

Magn. = 0,269 (L) / 1,000 (P) : Angle = 0,00

Pattern

+ - Sub Ovl

Distortion = 0,0000

Domain colors:

Stack

Load [0/0]

up down

Save Clear

Refresh

Exit

File Options Help

Basic 2D lattice

2D lattice/group = [16] Hexagonal p6

a = 1,0000 obtuse $\alpha = 120,00$
 acute

Superlattice comm. incomm. hoc

Matrix (M), integer Common name

2	1
0	2

c(4x2) (hexagonal only)

p-rect.: a = 1,7321 b = 2,0000 phi = 90,00

Symmetry [constrained]

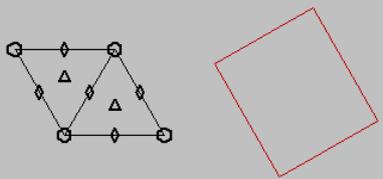
$1/2$

[1x1] Red. Swap [1] Oblique p1

Auto on

Symmetry / Domains

Basic lattice [16] Superlattice [1]

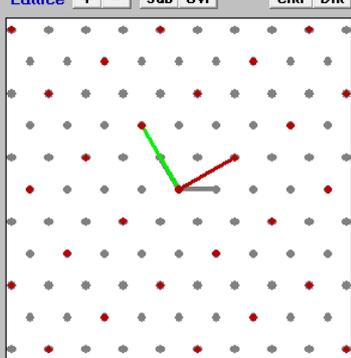


include domains Include 1x1
 Paint domains Include bases

6 domain(s). 3 unique subpattern(s)

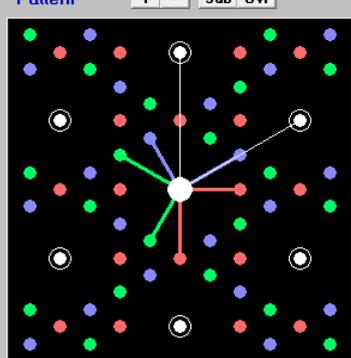
Select domain(s): [2, 1 | 0, 2] [1]

Lattice + - Sub Ovl Cntr Dflt



Magn. = 0,269 (L) / 1,000 (P) : Angle = 0,00

Pattern + - Sub Ovl



Distortion = 0,0000

Domain colors:

Stack

Load (0/0)
up down
Save Clear

Refresh

Exit