

## Contexte et motivation

- Fonctionnaliser la surface libre de l'Au(111)
  - Utilisé la reconstruction comme motif pour l'auto-organisation de molécules ou nanoparticules [1,2]

- Conférer de nouvelles propriétés
  - En contrôlant la reconstruction [3]
  - En modifiant les structures de surface telles que les surfaces vicinales [4]

Explorer de nouvelles voies de nanostructuration de surface à l'échelle atomique

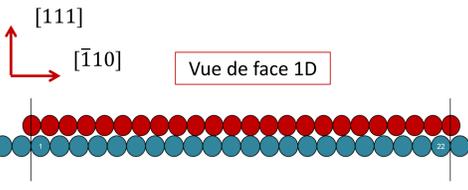
Étude *in situ* par UHV STM sous contrainte/déformation

Calculs atomistiques en Dynamique Moléculaire

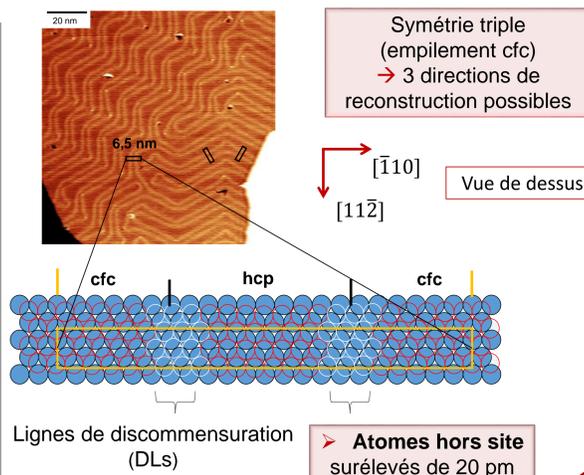
## Reconstruction de la Surface Au(111)

### Reconstruction $22 \times \sqrt{3}$ , d'herringbone ou en chevrons

- Différence de coordination entre les atomes de surface et ceux du massif
  - Contraintes de surface



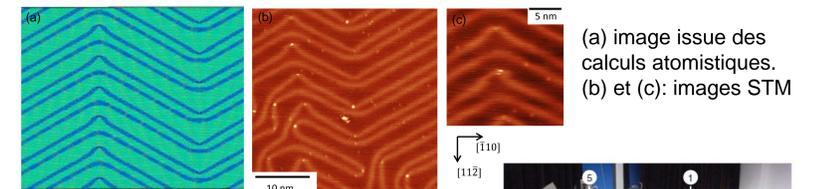
23 atomes de surface siègent sur 22 atomes du massif selon  $\langle 110 \rangle$



## Simulations atomistique en Dynamique Moléculaire

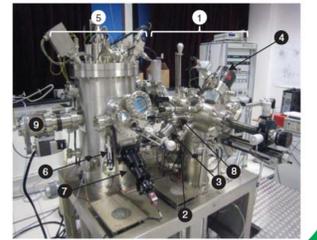
- Potentiel 2nn MEAM [5]
- Code LAMMPS [6]

Développement d'un potentiel pour modéliser la reconstruction  $22 \times \sqrt{3}$



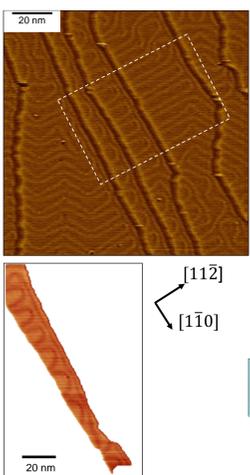
## Dispositif expérimental Nanoplast

- STM/AFM sous UHV
- Chambre de préparation UHV
- Dispositif de déformation (en compression)
- Déformation en T de 90K à 650K
- In situ*



## Effet de contraintes et relaxation

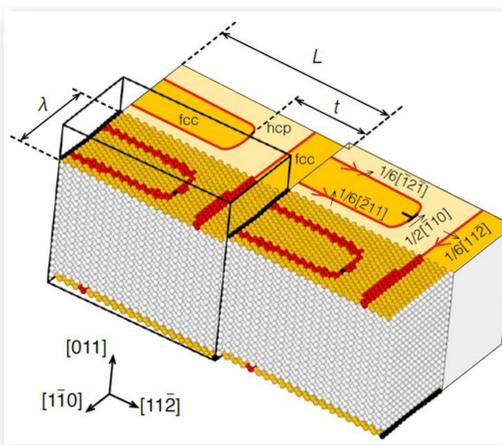
### 1. Analyses STM



- Observations de marches vicinales, principalement orientées selon  $[1\bar{1}0]$ , de hauteur d'un plan atomique ( $\approx 240$  pm)
- Pour des largeurs de terrasses faibles → une seule orientation des DLs (carré blanc)
- Proche du bord de marche → organisation des DLs plus complexe (Chevrons en U)
- DL parallèle au bord de marche

Périodicité des DLs **dépend** de la largeur des terrasses vicinales

### 2. Approche « dislocationnelle » en DM

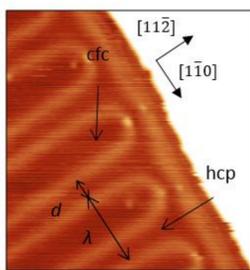


- Deux partielles de Shockley de  $\vec{b} = \frac{1}{6}[\bar{2}11]$  et  $\vec{b} = \frac{1}{6}[\bar{1}2\bar{1}]$  connectées par une dislocation coin parfaite
- Dislocation coin de longueur de ligne égale à l'épaisseur du plan atomique
- Pour la DL parallèle au bord de marche : une partielle de Shockley de  $\vec{b} = \frac{1}{6}[11\bar{2}]$

Ci-contre :

- Cellule de simulation triclinique (→ conditions aux limites)
- Configuration relaxée de la surface reconstruite et description en terme de « misfit dislocations »
- Les atomes sont colorés en fonction de leurs coordinences
- Marches monoatomiques orientées le long de la direction  $[1\bar{1}0]$

### 3. Confrontation des calculs atomistiques aux résultats expérimentaux

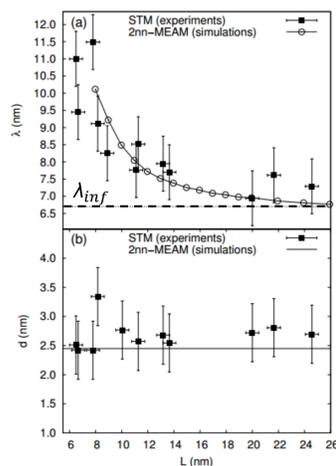


- Mesure de  $\lambda$ , période de la reconstruction (a)
  - Mesure de  $d$ , largeur de la zone hcp (b)
- en fonction de la largeur des terrasses vicinales,  $L$

Largeur de la zone hcp,  $d$ , **indépendante** de la largeur de terrasse  $L$  → évolution de la périodicité à travers la zone cfc

$L > 15$  nm : effet des marches vicinales **négligeable** ( $\lambda_{inf} = 6,7$  nm  $\approx 6,5$  nm)

Accord entre données expérimentales et calculs atomistiques → **fiabilité du Potentiel**

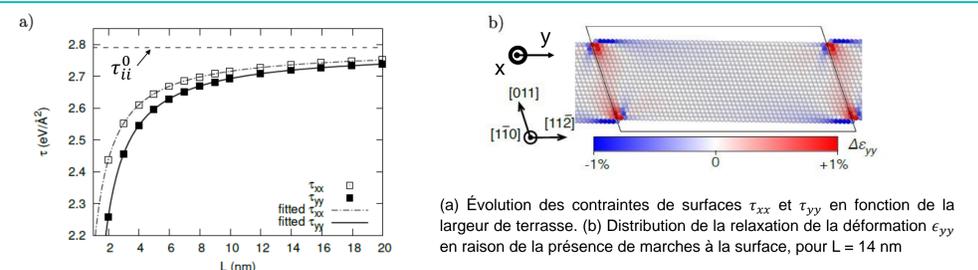


### 4. Contraintes de surface et relaxation

$$\text{Contraintes de surface } \bar{\tau} : \tau_{ii} = \tau_{ii}^0 + \frac{\tau_{ii}^{step}}{L_y^0} + \Gamma_{ii} \frac{h^2}{L_y^2} \quad [7]$$

$$i = x \text{ ou } y$$

- $\tau_{ii}^0 \geq 0$  contrainte de surface sans marche (tension)
- $\tau_{ii}^{step} \leq 0$  contrainte due à la marche (compression)
- $\Gamma_{ii}$  contrainte due à l'interaction entre marches
- $L_y^0 = L - a_0\sqrt{6}/12$ ;  $a_0$  paramètre de maille
- $h$  hauteur de la marche



- Relaxation inversement proportionnel à la largeur des terrasses  $L$
- $\Delta\epsilon_{yy}$  **minimum** (compression) au bord supérieur de la marche, en bleu (b)
- Relaxation des contraintes de surface **principalement** au bord supérieur de la marche ( $\parallel$  et  $\perp$  marche vicinale)
- Interactions entre marches **négligeables** ( $|\Gamma_{ii}| \ll |\tau_{ii}^0|$  et  $|\tau_{ii}^{step}|$ )

Périodicité  $\lambda$  de la reconstruction, observée expérimentalement, pilotée par  $\frac{\tau_{ii}^{step}}{L_y^0}$ , la relaxation de contraintes due aux marches

## Conclusion

- Influence** de la largeur des terrasses sur la périodicité de la reconstruction
- Relaxation** par les marches vicinales des contraintes de tension de surface

## Perspectives

- Explorer *in situ* la réorganisation de la reconstruction **lors de l'apparition** d'une trace de glissement de dislocation
- Étudier **l'influence de la température** sur cette réorganisation
- Poursuivre** les calculs atomistiques et les **confronter** aux résultats expérimentaux

## References

- M. Corso, L. Fernandez, F. Schiller, E. Ortega, *ACS nano*, 4(3), 1603, 2010
- L. Grill, M. Dyer, L. Lafferentz, M. Persson, M. V. Peters and S. Hecht, *Nature Nanotechnology*, 2 (11), 687, 2007
- O. Schaff, A. K. Schmid, N. C. Bartelt, J. de la Figuera and R. Q. Hwang, *Mater. Sci. Eng.*, A 319–321, 914, 2001
- C. Coupeau, O. Camara, M. Drouet, J. Durinck, J. Bonneville, J. Colin, and J. Grillé, *PRB*, 93, 041405(R), 2016
- M. I. Baskes. Modified embedded-atom potentials for cubic materials and impurities, *PRB*, 46(5), 2727, 1992
- S. Plimpton. Computational limits of classical molecular dynamics simulations, *Comp. Mat. Sci.*, 4(4), 361, 1995
- B. Salanon, P. Hecquet, *Surf. Sci.* 412, 639, 1998