

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE MOULOU D MAMMERI DE TIZI-OUZOU



Faculté des Sciences

Département de physique

Mémoire de Master

Magnétisme chirale d'adatomes créé par un gaz d'électrons de Rashba

Promoteurs : *Dr.Samir Lounis et Dr.Abdelhamid Ziane*

Soutenu le : 09/09/2013

Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou (Algérie)
en collaboration avec le Centre de Recherche de Jülich (Allemagne)

Magnétisme chirale d'adatoms créé par un gaz d'électrons de Rashba

Mémoire de Master présenté par

Juba Bouaziz

Promoteurs : Dr. Samir Lounis & Dr. Abdelhamid Ziane

Table des matières

| | |
|---|-----------|
| 1. Introduction | 7 |
| 1.1. Origine et définition des Skyrmions | 7 |
| 1.2. Observation expérimentale d'un réseau de Skyrmions | 9 |
| 1.3. Skyrmions dans les films minces | 10 |
| 1.4. Application des Skyrmions | 11 |
| 1.5. Textures Skyrmioniques dans l'aimantation induite | 11 |
| 1.6. Object du mémoire | 12 |
| 2. Effet Rashba | 15 |
| 2.1. Introduction historique | 15 |
| 2.2. Dérivation de l'Hamiltonien de Rashba | 15 |
| 2.3. Diagonalisation de l'Hamiltonien de Rashba | 17 |
| 3. Dérivation de la fonction de Green | 19 |
| 3.1. Introduction | 19 |
| 3.2. Dérivation de la fonction de Green pour le gaz de Rashba | 20 |
| 3.2.1. Dérivation de la partie diagonale G_D | 25 |
| 3.2.2. Dérivation de la partie non diagonale G_{ND} | 27 |
| 3.3. Forme finale de la fonction de Green | 29 |
| 3.3.1. Calcul de la densité d'états | 29 |
| 4. Problème à une Impureté | 33 |
| 4.1. Introduction | 33 |
| 4.2. Equation de Dyson pour une impureté | 34 |
| 4.3. Approximation 'S wave' | 34 |
| 4.4. Densité d'états locale induite | 35 |
| 4.5. Aimantation induite | 37 |
| 4.6. Structures skyrmioniques dans l'aimantation induite | 40 |
| 5. Interactions d'échange | 45 |
| 5.1. Introduction | 45 |
| 5.2. Dérivation du tenseur d'interactions d'échange | 46 |
| 5.2.1. Calcul de J | 52 |
| 5.2.2. Calcul de D_y | 53 |
| 5.2.3. Calcul de I | 54 |
| 5.3. Évaluation numérique des interactions d'échange | 55 |

| | |
|---|-----------|
| 6. Minimisation du modèle de Heisenberg généralisé | 59 |
| 6.1. Introduction | 59 |
| 6.2. Dimer | 59 |
| 6.2.1. Phase non colinéaire | 60 |
| 6.2.2. Phase colinéaire | 61 |
| 6.3. Chaines linéaires | 63 |
| 6.4. Structures compactes | 63 |
| 6.4.1. Trimer | 64 |
| 6.4.2. Structure hexagonale à six atomes | 67 |
| 6.4.3. Structure hexagonale à sept atomes | 68 |
| 7. Conclusion | 73 |
| A. Appendice 1 | 75 |
| B. Appendice 2 | 77 |

Remerciements

Je tiens à remercier le Dr. Samir Lounis pour avoir supervisé ce travail, pour m'avoir accueilli dans son équipe le 'Funsilab' et financé mon séjour à Jülich, qui m'a fait découvrir d'autres horizons inaccessibles pour moi jusqu'à lors.

Je tiens également à remercier le Pr. Stefan Blügel pour m'avoir invité à faire mon stage de master ici à Jülich et pour toutes les discussions enrichissantes que nous avons tenu à propos de ce travail.

Mes remerciements vont également au Pr. Abdelhamid Ziane pour avoir coencadré ce travail, pour tout l'intérêt qu'il y a apporté, et pour tout ses cours de mécanique quantique qui m'ont été utiles pour mener à bien ce travail de recherche.

Aussi, je tiens à remercier le Pr. Mouloud Benakki pour ses cours en magnétisme, un sujet passionnant sur lequel je compte travailler durant les prochaines années.

Je remercie mon collègue de bureau, le Dr. Manuel dos Santos Dias, pour les discussions captivantes que nous avons eu sur le magnétisme et sur la recherche en générale. L'ambiance apportée par les autres membres du groupe était très agréable, de ce fait je remercie le Dr. Mohammed Bouhassoune, Benedikt Schweffinghaus et Elias Rabel.

Finalement, je remercie ma famille pour son soutien durant toutes ces années et qui m'a permis d'avancer dans le domaine de la science et de la recherche.

1

Introduction

1.1. Origine et définition des Skyrmions

Le nom Skyrmion vient de 'Tony Skyrme' physicien nucléaire, qui a développé dans les années 1960 une théorie des champs non linéaires pour des pions en interaction. Skyrme a montré que les défauts topologiquement protégés dans les champs continus, qui sont appelés aujourd'hui Skyrmions, se comportent comme des particules. Ils sont localisés dans l'espace, ils possèdent aussi une charge topologique quantifiée, et sont sujets à des interactions répulsives ou attractives. De nos jours, le mot skyrmion est employé pour désigner un objet mathématique en physiques des particules, condensats de Bose-Einstein et systèmes à effet Hall quantique.

Les Skyrmions en magnétisme désignent des structures chirales de spin (le sens de la rotation est défini) où l'aimantation effectue une rotation continue, un exemple est montré avec la Fig. 1.1. On y voit un type de Skyrmions où l'aimantation tourne de manière continue à partir du centre vers l'extrémité. Le reste du matériaux est ferromagnétique. Ils peuvent apparaître sous l'influence d'un champ magnétique externe, ou de façon spontanée dans un matériau magnétique. Contrairement à d'autres structures magnétiques, on ne peut pas les décomposer en sous-réseaux ferromagnétiques, ou autres configurations magnétiques. On dit qu'ils sont topologiquement protégés car la répartition spatiale des moments magnétiques les rend résistants à un champ magnétique externe (fini).

U. K. Röbner et al. (1) ont montré que des textures Skyrmioniques, peuvent être trouvées comme état fondamental dans les matériaux magnétiques, même en absence de champs magnétiques externes. En utilisant un modèle phénoménologique continu, basé sur des paramètres mesurable expérimentalement. Ce modèle accorde à la magnétisation des petites variations d'amplitude (carctéristique du magnétisme dans les métaux). Ils ont prédit l'apparition de réseaux Skyrmioniques pour un grande variété de matériaux, aussi bien en volume qu'en surface mais également sur des films minces, où l'ingrédient clé pour l'apparition de ces textures est la brisure de symétrie d'inversion par rapport à l'espace, donnant naissance aux interactions chirales.

L'origine des textures skyrmioniques provient de l'interaction de Dzyaloshinskii-

1. Introduction

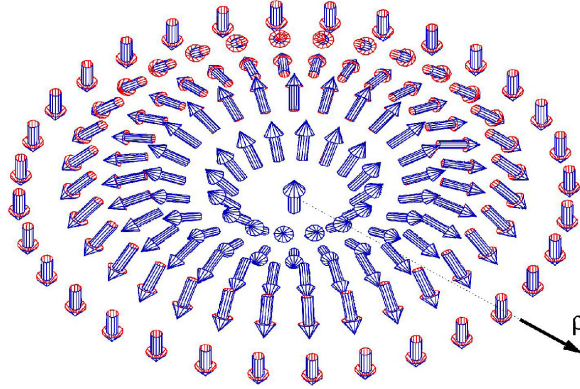


Figure 1.1.: Skyrmion constitué de moments magnétiques qui tournent de façon continue du centre vers l'extrémité avec une symétrie cylindrique.

Moriya(DM) ((2)). Cette interaction est induite par la brisure de symétrie d'inversion par rapport à l'espace. La brisure de symétrie peut se produire en volume ou à l'interface des films minces. Dans le modèle de Heisenberg, l'interaction magnétique entre deux spins \vec{S}_1 et \vec{S}_2 du type DM vaut : $H_{DM} = \vec{D}_{ij} \cdot (\vec{S}_1 \times \vec{S}_2)$. Où $(\vec{S}_1 \times \vec{S}_2)$ désigne la chiralité. Lorsque $\vec{D} \perp (\vec{S}_1 \times \vec{S}_2)$ cette interaction permet de lever la dégénérescence entre les deux configurations montrées en Fig. 1.2.

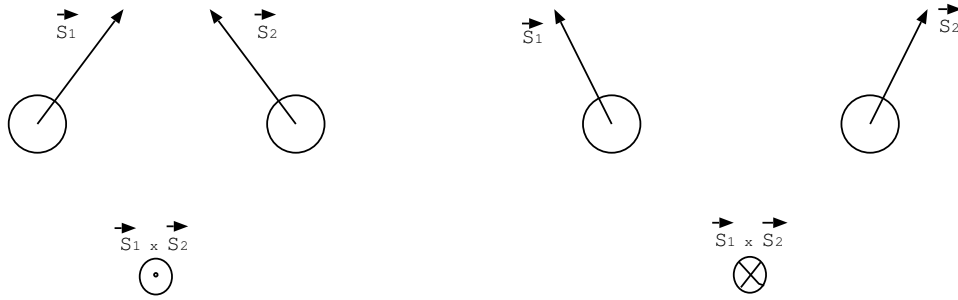


Figure 1.2.: Configurations de spin dégénérées en absence de l'interaction de Dzyaloshinskii-Moriya.

Fert et Levy (3) ont proposé le mécanisme suivant pour l'apparition des interactions de DM : Deux sites sont occupés par deux atomes magnétiques, et le troisième site est occupé par un atome non magnétique. Cet atome a un couplage spin orbite fort et va médier l'interaction de DM entre les deux atomes magnétiques (voir Fig. 1.3). Le vecteur de DM sera alors perpendiculaire au plan défini par les deux vecteurs qui connectent les deux atomes magnétiques aux troisième atome non magnétique. Ce vecteur obéit à des règles de symétrie appelées de Moriya que l'on énonce ici :

Soit \vec{R}_1 et \vec{R}_2 les vecteurs position des atomes 1 et 2 , $\vec{R}_3 = \frac{\vec{R}_1 + \vec{R}_2}{2}$ désigne un vecteur qui pointe au milieu des atomes 1 et 2 alors :

1.2. Observation expérimentale d'un réseau de Skyrmions

Si un centre d'inversion est situé en \vec{R}_3 alors : $\vec{D} = 0$.

Si un miroir est perpendiculaire à $\vec{R}_1 - \vec{R}_2$ et contient \vec{R}_3 alors : $\vec{D} \perp \vec{R}_1 - \vec{R}_2$.

Si un miroir contient \vec{R}_1 et \vec{R}_2 alors : $\vec{D} \perp$ à ce miroir.

Si un axe de rotation d'ordre deux est perpendiculaire à $\vec{R}_1 - \vec{R}_2$ et contient \vec{R}_3 alors : $\vec{D} \perp$ à l'axe de rotation d'ordre deux.

Si un axe de rotation d'ordre n ($n \geq 2$) inclut \vec{R}_1 et \vec{R}_2 alors : $\vec{D} \parallel (\vec{R}_1 - \vec{R}_2)$.

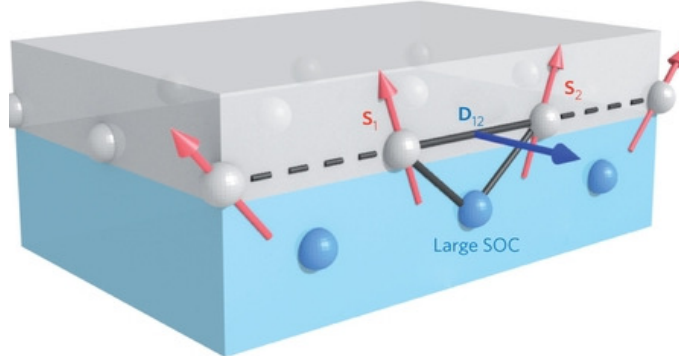


Figure 1.3.: Interaction de DM à l'interface d'un métal ferromagnétique (Gris) et d'un métal non magnétique (bleu) avec un couplage de spin-orbite fort. Les atomes non magnétique servent à médier l'interaction.

1.2. Observation expérimentale d'un réseau de Skyrmions

Le réseau de Skyrmions a été observé la première fois dans un matériau magnétique à l'état massif en 2009 par Mühlbauer et al. (4). Ils ont utilisé la diffusion de Neutrons sur des échantillons de MnSi (Réseau cubique, structure B20) en présence d'un champ magnétique externe.

Dans le diagramme de phase (B,T)(Fig. 1.4), la phase A désigne la phase Skyrmionique. On l'appelle phase A par rapport à Anti-Skyrmion car le moment magnétique centrale du skyrmion pointe dans la direction opposée au champ magnétique appliqué. Cette phase est formée d'un réseau hexagonal bidimensionnel d'Anti-Skyrmions qui sont orientés perpendiculairement par rapport au champ magnétique externe (voir Fig. 1.5), elle apparaît pour des températures légèrement en dessous de la température de Curie, et pour une valeur finie du champ magnétique. La transition de la phase skyrmion à la phase conique est du premier ordre. Le réseau de skyrmions est indépendant du réseau cristallin (structure incommensurable).

1. Introduction

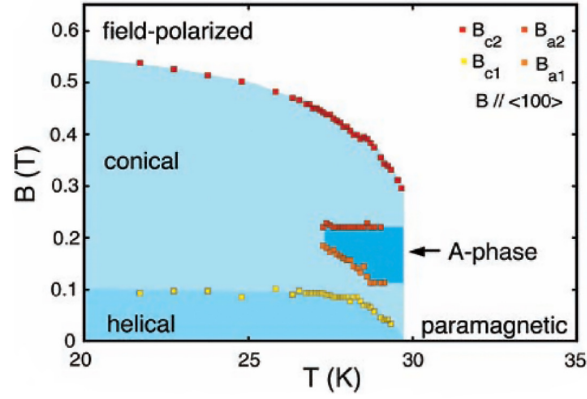


Figure 1.4.: Diagramme de Phase (B,T) du MnSi montrant la présence de la phase Skyrmionique (phase A).

1.3. Skyrmions dans les films minces

Les textures Skyrmioniques ont été récemment découvertes expérimentalement dans les films minces de Fe/Ir(111)(réseau hexagonale). Le système a été initialement étudié par von Bergmann et al. (5) en utilisant la microscopie à effet tunnel polarisée en spin (SP-STM). Contrairement à la STM standard qui utilise une pointe non magnétique, la SP-STM utilise des pointes polarisées en spin, pour obtenir une information sur l'orientation des moments magnétiques à la surface. Les mesures sont faites à basses températures ($T = 11 \text{ K} \pm 2\text{K}$) à l'aide d'une pointe de W recouverte de Fe. L'aimantation de la pointe est perpendiculaire à l'axe de la pointe. Il est possible de l'alligner le long de l'axe à l'aide d'un champ magnétique externe. Le courant tunnel est proportionnel au cosinus de l'angle entre l'aimantation de la pointe, et celle de la surface. Ainsi sans champ magnétique appliqué on observera la projection de l'aimantation dans le plan alors qu'en présence d'un champ on verra la projection de l'aimantation sur l'axe perpendiculaire au plan.

La SP-STM a permis d'observer un réseau de nanoskyrmions, prédit théoriquement par Heinze et al. (6) . À l'aide de calculs Ab initio (simulation de SP-STM), ils ont su faire correspondre les observations expérimentales avec un réseau bidimensionnel carré de nanoskyrmions (voir Fig. 1.6.a). Les images produites par simulation de la SP-STM montrent que selon l'aimantation de la pointe on obtient différents contrastes (voir Fig. 1.6.b). L'ensemble de ces images indiquent l'apparition d'un réseau de nanoskyrmions comme état fondamental d'une monocouche de Fe sur Ir (111) et cela sans application d'un champ magnétique externe appliqué à la surface. L'accord entre les observations et les simulations de la SP-STM est satisfaisant (voir Fig. 1.6.c). Les zones claires indiquent une aimantation parallèle à celle de la pointe, les zones sombres indiquent une orientation anti-parallèle. La maille magnétique ne s'accorde pas avec le réseau (structure magnétique incommensurable).

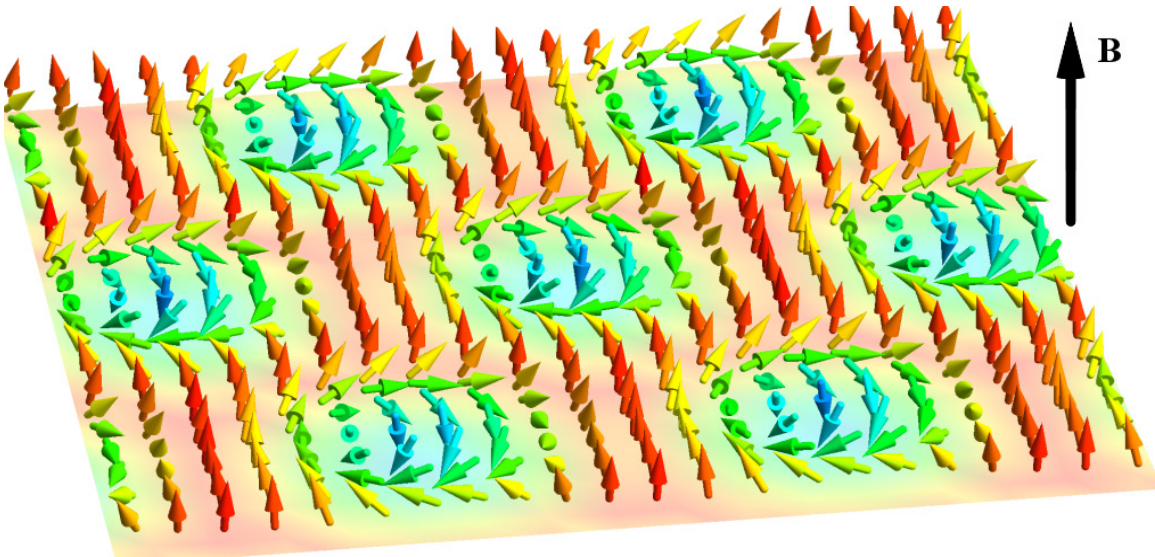


Figure 1.5.: Réseaux bidimensionnel hexagonal d'Anti-Skyrmion dans MnSi en présence d'un champ magnétique externe perpendiculaire.

1.4. Application des Skyrmions

Depuis leur découverte, les Skyrmions ont été intensément étudiés afin de comprendre les mécanismes de leur création et la richesse de leur diagramme de phase. Récemment Fert et al. (7) ont proposés des applications potentielles en stockage de l'information. En effet, des skyrmions peuvent se former avec une dizaine d'atomes seulement, que l'on pourrait utiliser pour stocker des bits d'informations. Il faut environ un million d'atomes orientés magnétiquement dans le même sens pour stocker un bit sur un disque dur. Maîtriser l'écriture et la lecture de données à l'aide de cristaux de skyrmions magnétiques est une nouvelle voie de recherche, qui pourra réduire considérablement la taille des mémoires magnétiques.

Schulz et al. (8) ont montré qu'à des températures très basses, des densités de courant électrique, 100.000 fois plus faibles que celles utilisées pour manipuler des bits magnétiques dans les mémoires standards, suffisent pour manipuler les skyrmions. En théorie, cela signifie donc qu'il est possible de stocker, et de manipuler de l'information sur des supports magnétiques de plus petite taille pour un coût énergétique plus faible.

1.5. Textures Skyrmioniques dans l'aimantation induite

Lounis et al. (9) ont calculés l'aimantation induite par un adatome magnétique dans un gaz d'électrons bidimensionnel avec couplage spin-orbite (modèle de Rashba (11)).

1. Introduction

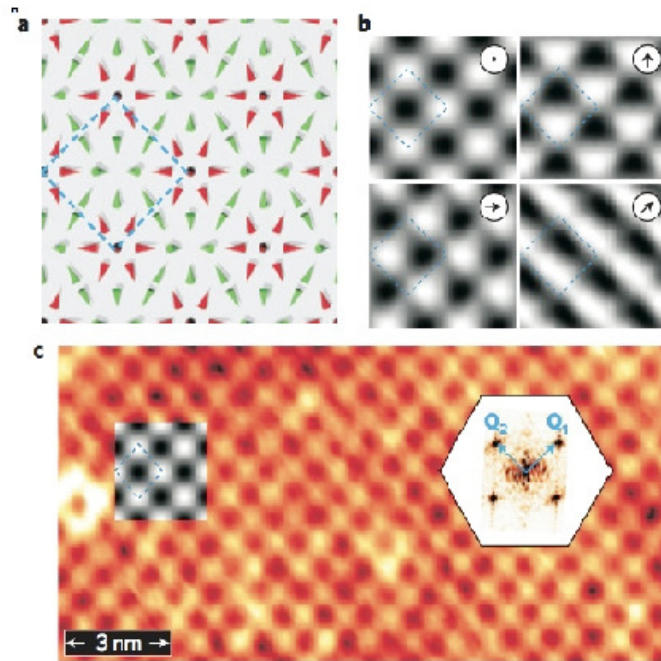


Figure 1.6.: a) Schéma d'un réseau de nanoskymions à deux dimensions. b) Images simulées de SP-STM du Fe/Ir(111) pour différentes orientations de l'aimantation de la pointe. c) Images obtenues par SP-STM avec une aimantation de la pointe orientée selon son axe pour Fe/Ir(111).

Ce gaz d'électrons correspond à un état électronique de surface. Le comportement de l'aimantation en fonction de la distance par rapport à l'atome rappelle celui des textures skyrmioniques. En effet ils ont trouvé que l'aimantation induite pouvait être décomposée en une superposition de deux ondes de spin effectuant des rotations continues dans deux sens opposés.

1.6. Object du mémoire

Beaucoup de travaux de recherche portent sur les skyrmions magnétiques et comme nous l'avons précisé plus haut, le nombre de matériaux découverts présentant des structures magnétiques de type chirale augmente. Il est intéressant de noter que même si des règles de symétrie ont été établies par Moriya afin d'expliquer la direction des vecteurs de DM, il n'est pas facile de comprendre et de prédire leur présence, leurs portées et leurs directions dans des systèmes réels. Bien des calculs ab-initio ont été

fait, en particulier dans notre département de recherche à Jülich, mais l'interprétation des résultats n'est pas toujours simple.

Le but de ce travail de recherche est d'étudier la création des interactions DM à partir d'un modèle simple, en commençant par un gaz d'électrons libres à deux dimensions soumis à un couplage spin-orbite de type Rashba (Voir chapitre 2). Ce gaz est considéré pour simuler des états électroniques de surface observés expérimentalement. Lorsqu'on dépose des atomes magnétiques sur des surfaces métalliques, les interactions magnétiques entre ces adatoms peuvent être de longue portée. Aussi il est important de préciser qu'on a récemment mesuré ce type d'interactions en utilisant la SP-STM et la comparaison avec les calculs ab-initio est très satisfaisante (10).

Le fait que ces interactions soient relativement faible permet d'appliquer un champ magnétique faible et de suivre la réponse des atomes magnétiques. Si les atomes sont premiers voisins, les interactions magnétiques seront trop élevées pour être affectées par les champs magnétiques disponibles expérimentalement. Le travail présenté dans ce mémoire est donc très important pour la communauté travaillant avec la STM et les prédictions qui en découlent sont vérifiables. Aussi il est important de préciser que de nos jours, le design et la construction des nanostructures atome par atome est faisable par STM.

Ce modèle de gaz d'électrons libres a été étudié maintes fois, mais nous avons jugé important de reprendre sa dérivation dans ce mémoire car bien que ses propriétés sont bien connues, les outils théoriques suivis lors de sa dérivation ne sont pas entièrement disponibles dans la littérature. L'outil le plus important dans ce modèle est la fonction de Green de ce gaz d'électrons libres, elle est essentielle pour considérer l'interaction entre deux atomes magnétiques médiée par les électrons de ce gaz. Nous allons par la suite dériver le tenseur d'interactions d'échange entre deux atomes magnétiques, en premier lieu en utilisant certaines approximations on obtiendra des formules analytiques pour ces interactions d'échange puis nous les estimerons numériquement. Cette partie du travail est originale et démontre que les interactions d'échange obtenues sont le résultat d'une sorte de superposition d'ondes skyrmioniques induites par les atomes magnétiques dans le gaz d'électrons libres. Aussi nous avons découvert qu'en plus de l'interaction DM, un terme anisotropique additionnel apparaît, un terme d'Ising qui peut être aussi important que les termes DM, à longue distance il peut même se comparer aux interactions d'échange isotropiques.

Dans le prochain chapitre, l'Hamiltonien de Rashba est dérivé, puis diagonalisé et la levée de dégénérescence de spin dans les courbes de dispersions est montrée ce qui donne naissance à deux courbes de dispersions. Dans le chapitre 3 la fonction de Green est rigoureusement dérivée pour le gaz de Rashba en partant des vecteurs propres et des valeurs propres de l'Hamiltonien de Rashba où il est nécessaire d'utiliser l'intégration complexe pour avoir la forme finale de la fonction de Green que nous avons utilisé pour le calcul de la structure électronique.

Au niveau du chapitre 4, la densité d'états et l'aimantation induites dans un gaz

1. Introduction

d'électrons libres ont été évaluées afin de mettre en évidence l'existence d'ondes Skyrmioniques.

Dans le chapitre 5 la méthode des rotations infinitésimales a été utilisée afin de dériver une forme analytique pour le tenseur d'interactions d'échange, reliant ce dernier à la fonction de Green, puis en considérant certaines approximations pour les fonctions de Green une formule analytique pour le tenseur d'interactions d'échange a pu être dérivée. Ensuite la comparaison entre les résultats obtenus à partir de cette approximation et ceux obtenus avec un calcul numérique est présentée.

Enfin dans chapitre 6, une fois le tenseur d'interactions d'échange calculé l'Hamiltonien de Heisenberg est minimisé numériquement dans le but de trouver les états magnétiques les plus stables: pour un système de deux atomes, puis pour une chaîne linéaire et à la fin pour des nanostructures compactes. Comme adatome, nous avons considéré les paramètres reproduisant ceux du Fe sur la surface Au(111).

2

Effet Rashba

2.1. Introduction historique

L'effet Rashba a été introduit dans les années 1960 pour décrire l'absorption des ondes radio par les semi-conducteurs avec un réseau Wurtzite. Le terme supplémentaire issu du couplage spin-orbite, donne naissance à des transitions qui inverse le spin. Les résultats expérimentaux recueillis par la résonance cyclotron, pour un gaz d'électrons à deux dimensions confiné à l'interface d'hétérojonctions de GaAs-Al_xGa_{1-x}As, ont montré que la dégénérescence de spin à été levée. Rashba a développé un modèle théorique pour interpréter les données expérimentales en terme d'interaction de spin-orbite (11).

L'effet Rashba à été également observé sur des surfaces métalliques; pour la surface Au(111) il a été observé pour la première fois par Lashell et al. (12). Ce qui a permis d'étendre le modèle de Rashba à la physique des surfaces métalliques. Depuis, plusieurs systèmes à effet Rashba ont été découvert.

2.2. Dérivation de l'Hamiltonien de Rashba

Dans un gaz d'électrons libres à deux dimensions, qui apparaît dans les dépôts épitaxiaux d'hétérojonctions. Le gaz d'électrons est soumis à un potentiel constant. En absence de champ magnétique externe, l'Hamiltonien d'un électron est donné par $H_k = \frac{P^2}{2m^*}$, où m^* est la masse effective de l'électron. L'énergie par électron est donnée par $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$, qui correspond à une onde plane $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{A}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ (A est la surface du gaz d'électrons). Chaque état propre est deux fois dégénéré pour les deux orientations de spin up et down. Ceci découle premièrement de la symétrie d'inversion par rapport à l'espace qui implique $E_{\sigma}(-\vec{k}) = E_{\sigma}(\vec{k})$ et de la symétrie de renversement du temps qui fait que $E_{\downarrow}(-\vec{k}) = E_{\uparrow}(\vec{k})$ (dégénérescence de Kramers). Les deux effets combinés font que $E_{\uparrow}(\vec{k}) = E_{\downarrow}(\vec{k})$.

Si la symétrie d'inversion par rapport à l'espace est brisée (à la surface). Alors l'interaction de spin-orbite n'est plus nulle à la surface. Cette dernière donne naissance

2. Effet Rashba

à un potentiel $V(\vec{r})$ qui n'est pas symétrique par rapport à l'inversion de l'espace. La présence d'un gradient de potentiel induit un champ électrique, lequel agit sur l'électron qui se meut avec une vitesse $\vec{v} = \frac{dE}{d\vec{p}} = \frac{\hbar\vec{k}}{m^*}$, via la transformation de Lorentz. Ce champ électrique donnera naissance à un champ magnétique effectif $\vec{B} = \frac{\vec{v} \times \vec{E}}{c^2}$ (voir Fig. 2.1). Ce dernier lèvera la dégénérescence de spin même en absence de champ magnétique externe grâce à l'interaction du moment de spin de l'électron $\vec{\mu} = \frac{-g_e\mu_B\vec{s}}{\hbar}$, où μ_B est le magnéton de Bohr et $g_e \simeq 2$ (facteur de Landé de l'électron), avec le champ magnétique effectif voir (14). On obtient l'Hamiltonien de Rashba, qui peut être exprimé de différentes manières :

$$H_R = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} \quad (2.1)$$

ou

$$H_R = \frac{\mu_B}{m_e c^2} \vec{\sigma} (\vec{p} \times \vec{E}) \quad (2.2)$$

ou

$$H = \alpha(|\vec{E}|) \vec{\sigma} (\vec{k} \times \vec{e}) \quad (2.3)$$

α est le paramètre de Rashba caractéristique du matériau étudié. En pratique il peut être extrait des calculs Ab initio . En générale la relation entre α et $|\vec{E}|$ n'est pas linéaire. $\vec{\sigma}$ représente le vecteur contenant les matrices de Pauli. Une fois cet Hamiltonien rajouté à H_k , l'interaction de spin-orbite lèvera la dégénérescence de spin.

Pour des électrons se propageant à deux dimensions soumis à un potentiel $V(\vec{r})$ planaire. Le champ électrique ($\vec{E} = -\vec{\nabla}V(\vec{r})$) sera perpendiculaire au plan (xoy) et l'Hamiltonien devient :

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m^*} + \frac{\alpha}{\hbar} (\vec{\sigma} \times \vec{P})_z \quad (2.4)$$

$$H = \frac{P_x^2 + P_y^2}{2m^*} + \frac{\alpha}{\hbar} (\sigma_x P_y - \sigma_y P_x) \quad (2.5)$$

$\{\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z\}$ désignent les matrices de Pauli.

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.6)$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.8)$$

2.3. Diagonalisation de l'Hamiltonien de Rashba

L'Hamiltonien de Rashba décrit un gaz d'électrons libres à deux dimensions qui tient compte de l'interaction de spin-orbite. Il est commode de le représenter dans la base suivante :

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2A}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} |+\rangle \quad (2.9)$$

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2A}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} |-\rangle \quad (2.10)$$

avec $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ les vecteurs propres de l'opérateur S_z . À deux dimensions le vecteur d'onde est défini par : $\vec{k} = k_x \vec{e}_x + k_y \vec{e}_y$. Dans la base $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle\}$ l'Hamiltonien de l'éq (1.5) s'écrit :

$$H = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} & \alpha (k_y + ik_x) \\ \alpha (k_y - ik_x) & \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \end{pmatrix}$$

qui une fois diagonalisé : $\det|H - \lambda I| = 0$

$$\begin{vmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - \lambda & \alpha (k_y + ik_x) \\ \alpha (k_y - ik_x) & \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (2.11)$$

donne les vecteurs propres suivants :

$$|\psi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2S}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} [|+\rangle + ie^{i\theta} |-\rangle] \quad (2.12)$$

$$|\psi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2S}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} [|+\rangle - ie^{i\theta} |-\rangle] \quad (2.13)$$

avec les énergies propres correspondantes :

$$E_+ = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \alpha k \quad (2.14)$$

2. Effet Rashba

$$E_- = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - \alpha k \quad (2.15)$$

L'apparition de deux relations de dispersions montre que la dégénérescence de spin a été levée (voir Fig. 2.2). Ces courbes de dispersion sont de forme paraboloides. Leur base forme un cercle, elles montrent que la surface de Fermi est circulaire. Le champ magnétique effectif créé par l'interaction de spin-orbite est dans le plan et toujours tangent à la surface de Fermi. Les électrons selon la nature de leurs spins sont parallèle ou anti-parallèle à ce champ magnétique ce qui induit une levée de dégénérescence.

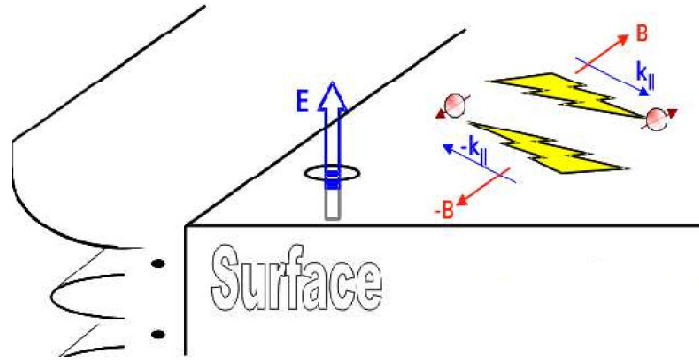


Figure 2.1.: Electrons qui se propagent à la surface avec des vecteurs d'ondes \vec{k} et $-\vec{k}$ en présence d'un champ électrique. Ce champ est perpendiculaire à la surface et donne naissance à un champ magnétique dans le plan de la surface, avec lequel interagissent les moments de spin des électrons.

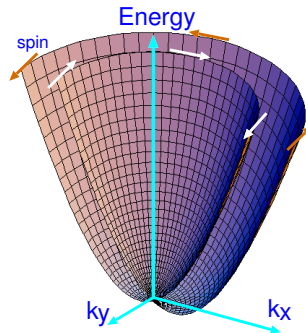


Figure 2.2.: Courbe de dispersion $E(\vec{k})$ dans le gaz d'électrons à deux dimensions avec couplage spin-orbite de type Rashba.

3

Dérivation de la fonction de Green

3.1. Introduction

Dans ce chapitre nous allons dériver la fonction de green d'un gaz d'électrons libres à deux dimensions, en incluant le couplage spin-orbite via l'Hamiltonien de Rashba. Pour la dériver, nous avons utilisé le théorème des résidus et certaines formes intégrales connues des fonctions spéciales de Bessel et de Hankel (15). Nous utiliserons par la suite cette fonction de Green pour évaluer la densité d'états électronique.

La fonction de Green est un outil mathématique puissant utilisé en mécanique quantique pour résoudre les problèmes de diffusion par potentiel. Elle permet de calculer des grandeurs physiques comme la densité d'états et l'aimantation.

La fonction de Green est définie comme étant la résolvante de l'équation de Schrödinger :

$$\mathbf{G}_0(E + i\epsilon) = \frac{1}{E + i\epsilon - \mathbf{H}} \quad (3.1)$$

H étant l'Hamiltonien du système. Il est possible de l'exprimer en représentation spectrale, à l'aide des vecteurs propres de H :

$$\mathbf{G}_0(\vec{r}, \vec{r}', E + i\epsilon) = \sum_{n, \vec{k}} \frac{\psi_{n, \vec{k}}(\vec{r}) \psi_{n, \vec{k}}^*(\vec{r}')}{E + i\epsilon - E_n(\vec{k})} \quad (3.2)$$

où la somme sur \vec{k} désigne la somme sur tous les états \vec{k} , qui ont la même énergie. La somme sur n nous permet de tenir compte de toutes les énergies propres.

On peut montrer que la fonction de Green est reliée à la valeur moyenne de n'importe quel opérateur par la relation suivante :

$$\langle \mathbf{A} \rangle = -\frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \text{Im} \int_{-\infty}^{E_F} \text{Tr} [\mathbf{A} \mathbf{G}_0(\vec{r}, \vec{r}', E + i\epsilon)] dE \quad (3.3)$$

3. Dérivation de la fonction de Green

En particulier si \mathbf{A} est l'opérateur position $\hat{\mathbf{r}} = |r\rangle \delta(\vec{r} - \vec{r}') \langle r'|$ alors :

$$\langle \hat{\mathbf{r}} \rangle = \rho(\vec{r}) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \text{Im} \int_{-\infty}^{E_F} \text{Tr} [\hat{\mathbf{r}} \mathbf{G}_0(\vec{r}, \vec{r}', E + i\epsilon)] dE \quad (3.4)$$

où $\rho(\vec{r})$ est la densité électronique.

Lorsqu'on perturbe le système avec un potentiel externe $\Delta \mathbf{V}$, la nouvelle fonction de Green est alors définie par $\mathbf{G}(E + i\epsilon) = \frac{1}{E + i\epsilon - \mathbf{H} - \Delta \mathbf{V}}$, elle est reliée à la fonction de Green non perturbée $\mathbf{G}_0(E + i\epsilon)$ par l'équation de Dyson :

$$\mathbf{G}(E + i\epsilon) = \mathbf{G}_0(E + i\epsilon) + \mathbf{G}_0(E + i\epsilon) \Delta \mathbf{V} \mathbf{G}(E + i\epsilon) \quad (3.5)$$

et

$$\mathbf{G}(E + i\epsilon) = \mathbf{G}_0(E + i\epsilon) + \mathbf{G}_0(E + i\epsilon) \left[\Delta \mathbf{V} + \Delta \mathbf{V} \mathbf{G}_0(E + i\epsilon) \Delta \mathbf{V} + \dots \right] \mathbf{G}_0(E + i\epsilon) \quad (3.6)$$

Si on définit l'opérateur $\mathbf{T}(E + i\epsilon)$ (opérateur de diffusion) comme étant la série entre crochets, l'équation de Dyson s'écrira en fonction de celui-ci :

$$\mathbf{G}(E + i\epsilon) = \mathbf{G}_0(E + i\epsilon) + \mathbf{G}_0(E + i\epsilon) \mathbf{T}(E + i\epsilon) \mathbf{G}_0(E + i\epsilon) \quad (3.7)$$

3.2. Dérivation de la fonction de Green pour le gaz de Rashba

Les vecteurs propres et les énergies propres ont été dérivées dans le chapitre précédent. Nous allons reprendre leurs expressions ici pour faciliter la lecture :

$$|\psi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2A}} e^{i\vec{k}\vec{r}} [|+\rangle + ie^{i\theta} |-\rangle] \quad (3.8)$$

$$|\psi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2A}} e^{i\vec{k}\vec{r}} [|+\rangle - ie^{i\theta} |-\rangle] \quad (3.9)$$

$$E_+ = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \alpha k \quad (3.10)$$

$$E_- = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - \alpha k \quad (3.11)$$

3.2. Dérivation de la fonction de Green pour le gaz de Rashba

La fonction de Green retardée en représentation spectrale est définie par :

$$\mathbf{G}_0(\vec{r}, \vec{r}', E + i\epsilon) = \sum_k \frac{\psi_{+, \vec{k}}(\vec{r}) \psi_{+, \vec{k}}^*(\vec{r}')}{E + i\epsilon - E_+} + \sum_k \frac{\psi_{-, \vec{k}}(\vec{r}) \psi_{-, \vec{k}}^*(\vec{r}')}{E + i\epsilon - E_-} \quad (3.12)$$

Les produits dans les numérateurs sont définis par :

$$\psi_{+, \vec{k}}(\vec{r}) \psi_{+, \vec{k}}^*(\vec{r}') = \frac{e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}')}}{2A} \begin{pmatrix} 1 & -ie^{-i\theta} \\ ie^{i\theta} & 1 \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

$$\psi_{-, \vec{k}}(\vec{r}) \psi_{-, \vec{k}}^*(\vec{r}') = \frac{e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}')}}{2A} \begin{pmatrix} 1 & ie^{-i\theta} \\ -ie^{i\theta} & 1 \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

Où θ désigne l'angle entre \vec{k} et l'axe (ox).

Pour des raisons de commodité nous omettrons le préfacteur $\frac{\hbar^2}{m^*}$, la fonction de Green s'écrit alors :

$$\mathbf{G}_0(\vec{R}, E + i\epsilon) = \sum_k \left[\frac{\begin{pmatrix} 1 & -ie^{-i\theta} \\ ie^{i\theta} & 1 \end{pmatrix}}{E + i\epsilon - \frac{k^2}{2} - \alpha k} + \frac{\begin{pmatrix} 1 & ie^{i\theta} \\ -ie^{-i\theta} & 1 \end{pmatrix}}{E + i\epsilon - \frac{k^2}{2} + \alpha k} \right] \frac{e^{i\vec{k}\vec{R}}}{2A} \quad (3.15)$$

avec $\vec{R} = \vec{r} - \vec{r}'$.

Or sachant que la somme discrète \sum_k peut être remplacée par une intégrale en coordonnées polaires :

$$\sum_k = \frac{A}{(2\pi)^2} \int d^2k = \frac{A}{(2\pi)^2} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} k dk d\theta \quad (3.16)$$

nous obtenons

$$\mathbf{G}_0(\vec{R}, E + i\epsilon) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} k dk d\theta \left[\frac{\begin{pmatrix} 1 & -ie^{-i\theta} \\ ie^{i\theta} & 1 \end{pmatrix}}{2E + 2i\epsilon - k^2 - 2\alpha k} + \frac{\begin{pmatrix} 1 & ie^{-i\theta} \\ -ie^{i\theta} & 1 \end{pmatrix}}{2E + 2i\epsilon - k^2 + 2\alpha k} \right] e^{ikR\cos\varphi} \quad (3.17)$$

3. Dérivation de la fonction de Green

On introduit les angles β et φ qui sont reliés à θ par : $\theta = \varphi + \beta$, β étant l'angle entre le vecteur \vec{R} et l'axe (ox) (voir Fig. 3.1), quand β est constante $d\theta = d\varphi$. la fonction de Green peut alors être réécrite :

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_0(\vec{R}, E + i\epsilon) = & \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} k dk d\varphi \left[\frac{\begin{pmatrix} 1 & -ie^{-i(\varphi+\beta)} \\ ie^{i(\varphi+\beta)} & 1 \end{pmatrix}}{2E + 2i\epsilon - k^2 - 2\alpha k} \right. \\ & \left. + \frac{\begin{pmatrix} 1 & ie^{-i(\varphi+\beta)} \\ -ie^{i(\varphi+\beta)} & 1 \end{pmatrix}}{2E + 2i\epsilon - k^2 + 2\alpha k} \right] e^{ikR\cos\varphi} \end{aligned} \quad (3.18)$$

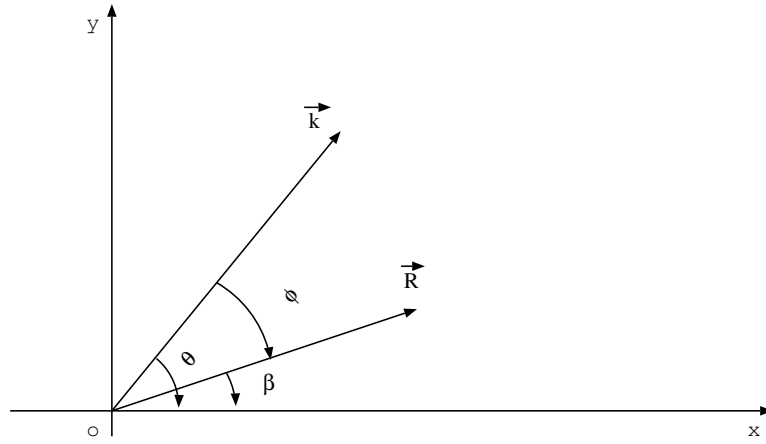


Figure 3.1.: Représentation des vecteurs \vec{k}, \vec{R} dans le plan (xoy)

On sait que par définition :

$$J_0(kR) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi e^{ikR\cos\varphi}, \quad (3.19)$$

$$J_1(kR) = \frac{1}{2\pi i} \int_0^{2\pi} d\varphi e^{ikR\cos\varphi} e^{i\varphi}, \quad (3.20)$$

$$J_{-1}(kR) = \frac{1}{2\pi i} \int_0^{2\pi} d\varphi e^{ikR\cos\varphi} e^{-i\varphi}. \quad (3.21)$$

Il est également possible de relier les fonctions de Bessel de première espèce entre elles par la relation suivante :

$$J_{-1}(kR) = -J_1(kR) \quad (3.22)$$

3.2. Dérivation de la fonction de Green pour le gaz de Rashba

ce qui nous amène à cette forme de la fonction de Green :

$$\mathbf{G}_0(\vec{R}, E + i\epsilon) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty k dk \left[\frac{\begin{pmatrix} J_0(kR) & J_1(kR)e^{-i\beta} \\ -J_1(kR)e^{i\beta} & J_0(kR) \end{pmatrix}}{2E + 2i\epsilon - k^2 - 2\alpha k} + \frac{\begin{pmatrix} J_0(kR) & -J_1(kR)e^{-i\beta} \\ J_1(kR)e^{i\beta} & J_0(kR) \end{pmatrix}}{2E + 2i\epsilon - k^2 + 2\alpha k} \right]. \quad (3.23)$$

On peut alors remarquer que la fonction de Green a la structure suivante :

$$\mathbf{G}_0(\vec{R}, E + i\epsilon) = \begin{pmatrix} G_D(\vec{R}, E + i\epsilon) & -G_{ND}(\vec{R}, E + i\epsilon)e^{-i\beta} \\ G_{ND}(\vec{R}, E + i\epsilon)e^{i\beta} & G_D(\vec{R}, E + i\epsilon) \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

où la partie diagonale est donnée par

$$G_D(\vec{R}, E + i\epsilon) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty k dk J_0(kR) \left[\frac{1}{2E + 2i\epsilon - k^2 + 2\alpha k} + \frac{1}{2E + 2i\epsilon - k^2 - 2\alpha k} \right] \quad (3.25)$$

ainsi que la partie non diagonale

$$G_{ND}(\vec{R}, E + i\epsilon) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty k dk J_1(kR) \left[\frac{1}{2E + 2i\epsilon - k^2 + 2\alpha k} - \frac{1}{2E + 2i\epsilon - k^2 - 2\alpha k} \right] \quad (3.26)$$

Il est intéressant de noter que si α , constante du couplage spin-orbite, tend vers zéro alors la partie non diagonale de la fonction de Green (G_{ND}) disparaît, tandis que la partie diagonale (G_D) correspondra à la fonction de Green classique du gaz d'électrons à deux dimensions. Dans ce qui suit on dérivera les pôles de la fonction de Green en annulant les dénominateurs :

$$2E + 2i\epsilon - k^2 - 2\alpha k = 0 \quad (3.27)$$

3. Dérivation de la fonction de Green

$$2E + 2i\epsilon - k^2 + 2\alpha k = 0 \quad (3.28)$$

Les solutions pour ces deux équations du second ordre sont :

$$k_a = \alpha + \sqrt{\alpha^2 + 2E} + i\epsilon \quad (3.29)$$

$$k_b = -\alpha + \sqrt{\alpha^2 + 2E} + i\epsilon \quad (3.30)$$

$$k_c = \alpha - \sqrt{\alpha^2 + 2E} - i\epsilon \quad (3.31)$$

$$k_d = -\alpha - \sqrt{\alpha^2 + 2E} - i\epsilon \quad (3.32)$$

La position des pôles de la fonction de Green pour une valeur de α inférieure à $\sqrt{\alpha^2 + 2E}$ est donnée en Fig. 3.2.

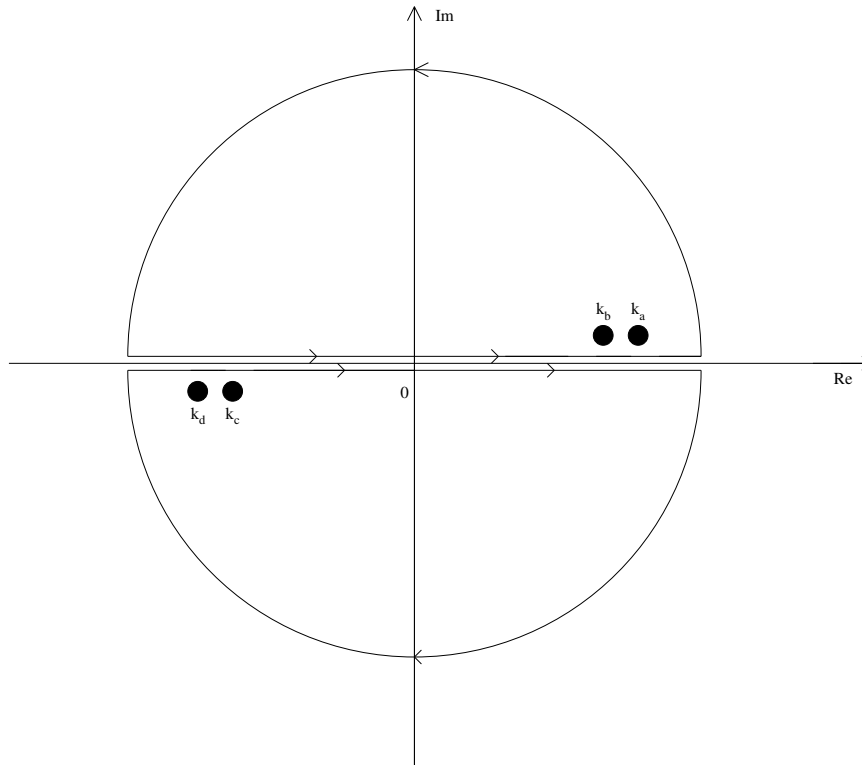


Figure 3.2.: Les position des pôles de la fonction de Green et les contours d'intégration utilisés.

3.2.1. Dérivation de la partie diagonale G_D

$$G_D(\vec{R}, E + i\epsilon) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty k dk J_0(kR) \left[\frac{1}{2E + 2i\epsilon - k^2 + 2\alpha k} + \frac{1}{2E + 2i\epsilon - k^2 - 2\alpha k} \right] \quad (3.33)$$

Généralement, Afin d'évaluer ce type d'intégrale le théorème des résidus est utilisé. Cela est fait, par exemple dans le cas d'un gaz d'électrons libres à trois dimensions, pour étendre l'intégrale de $-\infty$ à $+\infty$. Ce qui ne peut être fait dans notre cas car l'intégrand est une fonction impaire. Nous avons alors choisi d'évaluer cette intégrale de la manière suivante. La fonction de Bessel peut être écrite sous forme intégrale (u est une variable d'intégration) :

$$J_0(kR) = \frac{2}{\pi} \int_0^1 du \frac{\sin(kRu)}{\sqrt{u^2 - 1}} \quad (3.34)$$

et

$$G_D(\vec{R}, E + i\epsilon) = -\frac{1}{\pi^2} \int_0^\pi \frac{du}{\sqrt{u^2 - 1}} \int_0^{+\infty} k dk \sin(kRu) \left[\frac{1}{(k - k_a)(k - k_c)} + \frac{1}{(k - k_b)(k - k_d)} \right] \quad (3.35)$$

$G_D(\vec{R}, E + i\epsilon)$ est donné sous forme compacte comme :

$$G_D(\vec{R}, E + i\epsilon) = -\frac{1}{\pi^2} \int_0^\pi \frac{du}{\sqrt{u^2 - 1}} S(u) \quad (3.36)$$

où $S(u)$ est l'intégrale que l'on évaluera par le théorème des résidus.

$$S(u) = \int_0^{+\infty} k dk \sin(kRu) \left[\frac{1}{(k - k_a)(k - k_c)} + \frac{1}{(k - k_b)(k - k_d)} \right] \quad (3.37)$$

comme

$$\sin(kru) = \frac{e^{ikru} - e^{-ikru}}{2i} \quad (3.38)$$

on obtient :

$$S(u) = \int_0^{+\infty} k dk \frac{e^{ikRu} - e^{-ikRu}}{2i} \left[\frac{1}{(k - k_a)(k - k_c)} + \frac{1}{(k - k_b)(k - k_d)} \right] \quad (3.39)$$

3. Dérivation de la fonction de Green

Dans ce cas il est possible d'étendre l'intégrale de $-\infty$ à $+\infty$ car l'intégrand est une fonction paire. On obtient ceci :

$$S(u) = \frac{1}{4i} \int_{-\infty}^{+\infty} k dk \frac{e^{ikRu} - e^{-ikRu}}{2i} \left[\frac{1}{(k - k_a)(k - k_c)} + \frac{1}{(k - k_b)(k - k_d)} \right] \quad (3.40)$$

où on retrouve les pôles donnés dans les éqs 3.29 à 3.32. $S(u)$ peut être réécrite comme somme de deux termes :

$$S(u) = S_1(u) + S_2(u) \quad (3.41)$$

$S_1(u)$ étant la contribution des pôles de la partie supérieure du plan complexe (la partie imaginaire de l'énergie est positive) alors que $S_2(u)$ correspond à la contribution des pôles de la partie inférieure du plan complexe (la partie imaginaire de l'énergie est négative)

$$S_1(u) = \frac{2\pi i}{4i} \left[k_a e^{ik_a Ru} \left(\frac{1}{(k_a - k_c)} + \frac{1}{(k_a - k_b)(k_a - k_d)} \right) + k_b e^{ik_b Ru} \left(\frac{1}{(k_b - k_a)(k_b - k_c)} + \frac{1}{(k_b - k_d)} \right) \right] \quad (3.42)$$

$$S_2(u) = \frac{2\pi i}{4i} \left[k_c e^{ik_c Ru} \left(\frac{1}{(k_c - k_a)} + \frac{1}{(k_c - k_b)(k_c - k_d)} \right) + k_d e^{ik_d Ru} \left(\frac{1}{(k_d - k_a)(k_d - k_c)} + \frac{1}{(k_d - k_b)} \right) \right] \quad (3.43)$$

Au final on obtient :

$$S(u) = \pi \left[\frac{k_a}{k_a + k_b} e^{ik_a Ru} + \frac{k_b}{k_a + k_b} e^{ik_b Ru} \right] \quad (3.44)$$

Afin d'évaluer G_D , il nous reste à calculer l'intégrale en du :

$$G_D(\vec{R}, E + i\epsilon) = -\frac{1}{\pi} \left[\frac{k_a}{k_a + k_b} \int_1^\infty du \frac{e^{ik_a Ru}}{\sqrt{u^2 - 1}} + \frac{k_b}{k_a + k_b} \int_1^\infty du \frac{e^{ik_b Ru}}{\sqrt{u^2 - 1}} \right] \quad (3.45)$$

où on peut reconnaître les fonctions de Hankel. Celle d'ordre zéro est :

$$H_0(x) = -\frac{2i}{\pi} \int_1^\infty du \frac{e^{xu}}{\sqrt{u^2 - 1}} \quad (3.46)$$

ce qui permet de réécrire G_D :

$$G_D(\vec{R}, E + i\epsilon) = -\frac{i}{2(k_1 + k_2)} \left[k_1 H_0(k_1 R) + k_2 H_0(k_2 R) \right] \quad (3.47)$$

3.2.2. Dérivation de la partie non diagonale G_{ND}

La partie non diagonale de la fonction de Green est donnée par l'intégrale suivante :

$$G_{ND}(\vec{R}, E + i\epsilon) = -\frac{1}{2\pi} \int_0^{+\infty} dk \frac{d}{dR} J_0(kR) \left[\frac{1}{k^2 + 2\alpha k - 2E - 2i\epsilon} - \frac{1}{k^2 - 2\alpha k - 2E - 2i\epsilon} \right] \quad (3.48)$$

or :

$$\frac{d}{dR} J_0(kR) = \frac{d}{dR} \frac{2}{\pi} \int_0^1 du \frac{\sin(kRu)}{\sqrt{u^2 - 1}} \quad (3.49)$$

$$= \frac{2}{\pi} \int_0^1 du \frac{ku \cos(kRu)}{\sqrt{u^2 - 1}} \quad (3.50)$$

donc :

$$G_{ND}(\vec{R}, E + i\epsilon) = -\frac{1}{\pi^2} \int_1^{+\infty} du \frac{u}{\sqrt{u^2 - 1}} \int_0^{+\infty} kdk \cos(kRu) \left[\frac{1}{(k - k_b)(k - k_d)} - \frac{1}{(k - k_a)(k - k_a)} \right] \quad (3.51)$$

$$G_{ND}(\vec{R}, E + i\epsilon) = -\frac{1}{\pi^2} \int_1^{+\infty} du \frac{u}{\sqrt{u^2 - 1}} C(u) \quad (3.52)$$

où

3. Dérivation de la fonction de Green

$$C(u) = \int_0^{+\infty} k dk \cos(kRu) \left[\frac{1}{(k - k_b)(k - k_d)} - \frac{1}{(k - k_a)(k - k_c)} \right] \quad (3.53)$$

Comme

$$\cos(kRu) = \frac{e^{ikRu} + e^{-ikRu}}{2} \quad (3.54)$$

on obtient :

$$C(u) = \int_0^{+\infty} k dk \frac{e^{ikRu} + e^{-ikRu}}{2} \left[\frac{1}{(k - k_b)(k - k_d)} - \frac{1}{(k - k_a)(k - k_c)} \right] \quad (3.55)$$

Une intégration similaire à celle de S(u) pour la partie diagonale donne :

$$C(u) = -i\pi \left[\frac{k_a}{k_a + k_b} e^{ik_a Ru} - \frac{k_b}{k_a + k_b} e^{ik_b Ru} \right] \quad (3.56)$$

$$G_{ND}(\vec{R}, E + i\epsilon) = \frac{i}{\pi} \int_1^{+\infty} du \frac{u}{\sqrt{u^2 - 1}} \left[\frac{k_a}{k_a + k_b} e^{ik_a Ru} - \frac{k_b}{k_a + k_b} e^{ik_b Ru} \right] \quad (3.57)$$

$$G_{ND}(\vec{R}, E + i\epsilon) = \frac{1}{\pi(k_a + k_b)} \int_1^{+\infty} \frac{du}{\sqrt{u^2 - 1}} \left[\frac{d}{dR} e^{ik_a Ru} - \frac{d}{dR} e^{ik_b Ru} \right] \quad (3.58)$$

Et sachant que les fonctions de Hankel sont reliées entre elles par la relation de récurrence suivante :

$$\frac{d}{dz} [z^{-n} H_n(z)] = -z^{-n} H_{n+1}(z) \quad (3.59)$$

En combinant la définition de la fonction de Hankel d'ordre zéro (éq. 3.46) et la relation de récurrence définie ci-dessus G_{ND} peut être réécrite en fonction de $H_1(kR)$:

$$G_{ND}(\vec{R}, E + i\epsilon) = -\frac{i}{2(k_a + k_b)} \left[k_a H_1(k_a R) - k_b H_1(k_b R) \right] \quad (3.60)$$

au

3.3. Forme finale de la fonction de Green

Pour récapituler, la fonction de Green est exprimée en fonction de G_D et de G_{ND} :

$$\mathbf{G}_0(\vec{R}, E + i\epsilon) = \begin{pmatrix} G_D & -G_{ND}e^{-i\beta} \\ G_{ND}e^{i\beta} & G_D \end{pmatrix} \quad (3.61)$$

G_D et G_{ND} sont donnés par :

$$G_D(\vec{R}, E + i\epsilon) = -\frac{im^*}{2\hbar^2(k_1 + k_2)} \left[k_1 H_0(k_1 R + i\epsilon) + k_2 H_0(k_2 R + i\epsilon) \right] \quad (3.62)$$

$$G_{ND}(\vec{R}, E + i\epsilon) = -\frac{im^*}{2\hbar^2(k_1 + k_2)} \left[k_1 H_1(k_1 R + i\epsilon) - k_2 H_1(k_2 R + i\epsilon) \right] \quad (3.63)$$

où on a réintroduit les préfacteurs $\frac{m^*}{\hbar^2}$

Les vecteurs d'ondes $\{k_1, k_2\}$ sont reliés à $\{k_a, k_b\}$ par : $k_a = k_1 + i\epsilon$ et $k_b = k_2 + i\epsilon$.

$\{k_1, k_2\}$ peuvent être exprimés en fonction de l'énergie :

$$k_1 = k_{so} + \sqrt{k_{so}^2 + \frac{2m^*E}{\hbar^2}} \quad (3.64)$$

$$k_2 = -k_{so} + \sqrt{k_{so}^2 + \frac{2m^*E}{\hbar^2}} \quad (3.65)$$

avec

$$k_{so} = \frac{m^*\alpha}{\hbar^2} \quad (3.66)$$

3.3.1. Calcul de la densité d'états

La densité de charge à un point \vec{r} (i.e $\vec{R} = 0$) et pour une énergie E (densité d'états) est reliée à la partie imaginaire de la fonction de Green :

$$n(E) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \text{Im Tr } \mathbf{G}_0(\vec{R}, E + i\epsilon) \quad (3.67)$$

ou

3. Dérivation de la fonction de Green

$$n(E) = -\frac{2}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \text{Im} G_D(\vec{R} = 0, E + i\epsilon) \quad (3.68)$$

Cependant il faut garder à l'esprit que la partie imaginaire des vecteurs d'onde dans l'argument des fonctions de Hankel jouera un rôle important, vu que ces fonctions ont une Branch-cut le long de l'axe réel négatif dont il faudra tenir compte, si k_2 est négatif (i.e énergie négative) on a les relations suivantes entre les fonctions de Hankel :

$$H_0(k_2 + i\epsilon) = -H_0^*(|k_2| + i\epsilon) \quad (3.69)$$

et

$$H_1(k_2 + i\epsilon) = H_1^*(|k_2| + i\epsilon) \quad (3.70)$$

La fonction de Green est alors définie pour deux régions :

Région 1 $\{E_R \leq E \leq 0\}$:

$$\begin{cases} G_D(\vec{R}, E + i\epsilon) = -\frac{im^*}{2\hbar^2(k_1+k_2)} [k_1 H_0(k_1 R + i\epsilon) - k_2 H_0^*(|k_2| R + i\epsilon)] \\ G_{ND}(\vec{R}, E + i\epsilon) = -\frac{im^*}{2\hbar^2(k_1+k_2)} [k_1 H_1(k_1 R + i\epsilon) - k_2 H_1^*(|k_2| R + i\epsilon)] \end{cases} \quad (3.71)$$

et la région 2 $\{0 \leq E < E_F\}$:

$$\begin{cases} G_D(\vec{R}, E + i\epsilon) = -\frac{im^*}{2\hbar^2(k_1+k_2)} [k_1 H_0(k_1 R + i\epsilon) + k_2 H_0(k_2 R + i\epsilon)] \\ G_{ND}(\vec{R}, E + i\epsilon) = -\frac{im^*}{2\hbar^2(k_1+k_2)} [k_1 H_1(k_1 R + i\epsilon) - k_2 H_1(k_2 R + i\epsilon)] \end{cases} \quad (3.72)$$

La densité d'états est donnée par :

$$\begin{cases} n(E) = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} & E_R \leq E \leq 0 \\ n(E) = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} & 0 \leq E < E_F \end{cases} \quad (3.73)$$

Qui est exprimée en fonction de l'énergie par :

$$\begin{cases} n(E) = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} \sqrt{\frac{\alpha k_{so}}{\alpha k_{so} + 2E}} & E_R \leq E \leq 0 \\ n(E) = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} & 0 \leq E < E_F \end{cases} \quad (3.74)$$

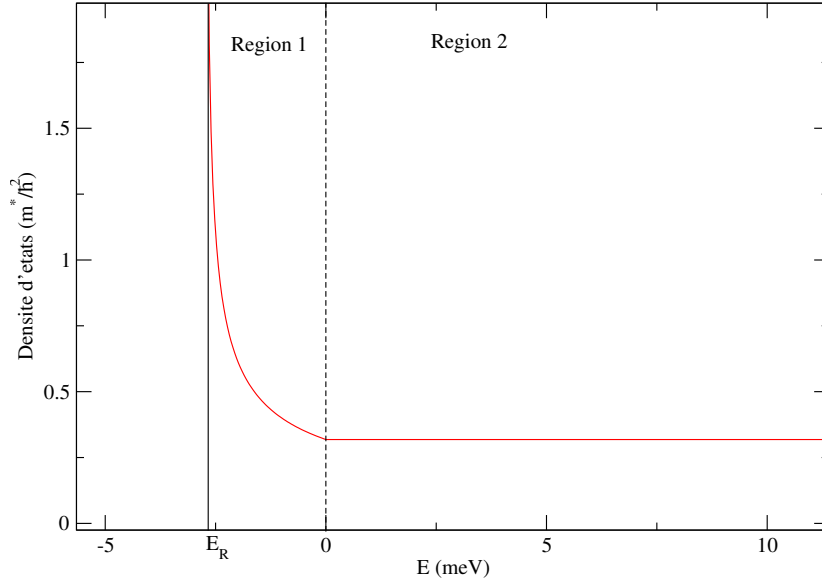


Figure 3.3.: Densité d'états d'un gaz d'électrons bidimensionnel en présence de l'interaction de spin-orbite (La valeur de α est de 0.4 eV et $m^* = 0.26m_0$, correspondant aux états de surface l'Au(111)). Deux régions sont obtenues: région 1 où le comportement de la densité d'états rappelle celui d'un système unidimensionnel et la région 2 où la densité d'états est constante.

La densité d'états présente deux régimes (voir Fig .3.3). La région 1 a une divergence en $\frac{1}{\sqrt{E}}$ qui rappelle les systèmes unidimensionnels. Cette région est issue de l'interaction de spin-orbite. En effet l'interaction de spin-orbite fait apparaître deux vecteurs d'ondes k_1 et k_2 . k_2 peut être négatif et induire une modification du comportement des fonctions de Green donc de la densité d'états. Dans la région 2, la densité d'états est une constante comme celle d'un gaz d'électrons bidimensionnel classique.

4

Problème à une Impureté

4.1. Introduction

Les surfaces des métaux nobles, Cu, Ag et Au considérées selon la direction (111) représentent des exemples de matériaux où des états électroniques de surface sont créés par confinement des électrons par à un potentiel de surface. Les courbes de dispersion de ces états sont similaires à celles d'un gaz d'électrons libres à deux dimensions. Récemment, Lashell et al. (12) ont mesuré la dispersion de ces états de type *sp* dans le cas de Au(111) en utilisant la spectroscopie à photoémission en résolution angulaire. La surprise fût de découvrir deux courbes de dispersion au lieu d'une seule. Un splitting de l'état de surface a été découvert dont l'origine est la brisure de la symétrie d'inversion par rapport à l'espace. Le mécanisme qui induit cet effet est l'interaction de spin-orbite et peut être expliqué en utilisant le modèle de Rashba introduit dans le chapitre 2. Ces splitting peuvent être simple comme dans le cas de la surface de l'Au(111) mais aussi très complexes comme dans le cas de la surface de Bi(111) (16).

Après cette découverte plusieurs travaux ont été entamés afin de trouver d'autres systèmes montrant un effet similaire, mais aussi afin de comprendre les implications physiques de leurs présences. Ces états sont topologiquement triviales mais peuvent aussi être topologiquement protégés comme dans les isolants topologiques (13). Durant quelques années, la communauté scientifique travaillant avec la STM s'est demandée si l'ont pouvait utiliser cet outil afin d'observer le splitting de type Rashba. Pour observer ce splitting avec la STM on mesure les oscillations de Friedel après diffusion des états de surfaces sur des adatoms présents sur la surface. Petersen et Hedegaard (17) ont toutefois démontrés en utilisant un modèle basé sur la méthode des liaisons fortes que cela est impossible si on essayait de mesurer les oscillations induites de charge. Une alternative a été proposée pour apercevoir les effets du spin-orbite en utilisant des mécanismes de diffusion multiples produit par la présence d'un corrale d'atomes sur une surface (18). Dans ce cas, les états de surface sont confinés dans le corrale d'atomes et une différence entre les oscillations de charge avec ou sans spin-orbite est claire. Ceci dit, ce mécanisme est bien difficile à prouver en pratique. Lounis et al. (9) ont proposé d'utiliser un seul adatome sur la surface à condition que celui-ci soit magnétique. L'idée est alors d'étudier les oscillations magnétiques de

4. Problème à une Impureté

Friedel, *i.e.* l'aimantation induite dans le gaz d'électrons, qui présente des structures magnétiques complexes. Ici nous reprenons cette étude car elle est importante pour construire le modèle décrivant les interactions magnétiques entre deux adatoms ou plus. En effet, ces interactions sont produites par l'interférence des ondes magnétiques induites par les impuretés.

On découvre une étrange texture de spin dans le gas d'électrons libres entourant l'adatom. Ce nouvel ordre magnétique est similaire aux Skyrmions présentés dans le chapitre 1.

Nous allons utiliser toutes les quantités dérivées dans les chapitres précédents, et plus particulièrement la fonction de Green, et nous appliquerons ce modèle au cas d'adatoms de Fe déposés sur la surface de l'Au(111).

4.2. Equation de Dyson pour une impureté

Après avoir déposé l'adatom magnétique sur la surface, il provoquera un réarrangement des charges (densité de charge induite autour de l'adatom) et induira une aimantation. La fonction de Green qui correspondra à ce système est celle de Rashba modifiée ou normalisée par le potentiel induit par la présence de l'impureté. Nous avons déjà défini l'équation de Dyson décrivant ce mécanisme de renormalisation:

$$\mathbf{G}(\vec{r}, \vec{r}', E+i\varepsilon) = \mathbf{G}_0(\vec{r}, \vec{r}', E+i\varepsilon) + \mathbf{G}_0(\vec{r}, \vec{r}', E+i\varepsilon) \mathbf{t}(E+i\varepsilon) \mathbf{G}_0(\vec{r}', \vec{r}, E+i\varepsilon) \quad (4.1)$$

Ici t est une matrice de diffusion décrivant la manière avec laquelle le potentiel de l'impureté diffuse les électrons. Dans le cas d'une seule impureté $\mathbf{t} = \mathbf{T}$. \mathbf{t} contient toute l'information sur les propriétés électroniques de l'impureté.

4.3. Approximation 'S wave'

En pratique, nous allons simplifier la forme de la matrice \mathbf{t} qui est originellement une matrice en σ (spin) et en lm (orbitale) et peut être reliée aux angles de déphasages qui décrivent, comme le nom l'indique, le déphasage des ondes électroniques après le processus de diffusion. Toutefois, les états électroniques de surface qui nous intéressent sont caractérisés par des longueurs d'ondes plus grandes que la dimension de l'impureté. Nous pouvons alors considérer que lors du processus de diffusion les états de surfaces ne "voient" pas les détails électroniques de l'adatom. Nous définissons alors les éléments de la matrice \mathbf{t} par :

$$t_{\sigma\sigma'}(E + i\varepsilon) = \frac{i\hbar^2}{m^*} (e^{2i\delta_{\sigma\sigma'}(E+i\varepsilon)} - 1) \quad (4.2)$$

Dans le cas du Fe/Au(111), nous savons que l'anisotropie magnétocristalline favorise une orientation perpendiculaire à la surface du moment magnétique. Aussi la densité d'états est caractérisée par une résonance au niveau des états de spin minoritaires autour de l'énergie de Fermi alors que les états de spin majoritaires sont quasiment inexistantes dans cette région. Aussi, nous négligerons les éléments non-diagonaux en spin. Nous pouvons modéliser ce type de comportement par des fonctions de Green de forme Lorentzienne, *i.e.*

$$g_{\sigma}(E + i\varepsilon) = \frac{1}{E - E_{\sigma} + i\Gamma} \quad (4.3)$$

où E_{σ} définit la position de la résonance pour chaque spin et Γ la largeur de la résonance. Nous allons considérer par la suite cette forme de la fonction de Green pour déterminer la matrice t . Afin d'avoir une forme analytique simple nous allons aussi négliger la dépendance énergétique. Cela facilitera notre discussion. Dans le cas d'une densité d'états Lorentzienne, le déphasage est donné par:

$$\delta_{\sigma}(E + i\varepsilon) = \frac{\pi}{2} + \text{atan} \left(\frac{E - E_{\sigma}}{\Gamma} \right) \quad (4.4)$$

4.4. Densité d'états locale induite

La densité d'état locale (LDOS) induite exprime le réarrangement de la charge électronique autour de l'impureté suite à l'effet d'écran. Elle est définie comme étant la différence entre la LDOS en présence de l'impureté et la LDOS du gaz d'électrons de Rashba. À longue distance, on s'attend à voir des oscillations de charge (Friedel).

La LDOS induite à un point \vec{R} distant de l'impureté situé à l'origine est donnée par :

$$\Delta n(\vec{R}, E) = n(\vec{R}, E) - n_0(\vec{R}, E) \quad (4.5)$$

que l'on peut obtenir à partir du changement de la fonction de Green renormalisée par l'impureté :

$$\Delta n(\vec{R}, E) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \text{Im Tr} (\mathbf{G}(\vec{R}, E + i\varepsilon) - \mathbf{G}_0(\vec{R}, E + i\varepsilon)) \quad (4.6)$$

elle peut être calculée à partir de l'équation de Dyson :

4. Problème à une Impureté

$$\Delta n(\vec{R}, E) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \text{Im Tr } \mathbf{G}_0(\vec{R}, E + i\epsilon) \mathbf{t}(E + i\epsilon) \mathbf{G}_0(-\vec{R}, E + i\epsilon) \quad (4.7)$$

sachant que :

$$\mathbf{G}(\vec{R}, E + i\epsilon) = \begin{pmatrix} G_D & -G_{ND}e^{-i\beta} \\ G_{ND}e^{i\beta} & G_D \end{pmatrix}, \quad (4.8)$$

$$\mathbf{G}(-\vec{R}, E + i\epsilon) = \begin{pmatrix} G_D & G_{ND}e^{-i\beta} \\ -G_{ND}e^{i\beta} & G_D \end{pmatrix} \quad (4.9)$$

et

$$\mathbf{t}(E + i\epsilon) = \begin{pmatrix} t_{\uparrow\uparrow} & 0 \\ 0 & t_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} \quad (4.10)$$

on trouve :

$$\Delta n(\vec{R}, E) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \text{Im} [(G_D^2 + G_{ND}^2) (t_{\uparrow\uparrow} + t_{\downarrow\downarrow})] \quad (4.11)$$

où nous avons omis d'inclure explicitement la dépendance énergétique de G_D , G_{ND} et t . Les éléments de la fonction de Green G_D , G_{ND} se comportent de manières différentes dans les deux régions définissant le comportement énergétique du gaz d'électrons de type Rashba. Comme nous nous intéressons aux oscillations de Friedel induite à des distances relativement grandes, il est intéressant d'essayer de déterminer un comportement asymptotique des fonctions de Green. Cela est possible en utilisant le développement asymptotique des fonctions de Hankel. Les détails de la dérivation sont données en appendice 1. Nous obtenons pour la densité induite :

Région 1 :

$$G_D^2 + G_{ND}^2 = -\frac{2}{\pi(k_1 + k_2)^2 R} \sqrt{k_1|k_2|} e^{i(k_1 - |k_2|)R} \quad (4.12)$$

et la région 2 :

$$G_D^2 + G_{ND}^2 = \frac{2i}{\pi(k_1 + k_2)^2 R} \sqrt{k_1 k_2} e^{i(k_1 + k_2)R} \quad (4.13)$$

On obtient alors pour la densité locale induite ceci :

Région 1 :

$$\Delta n(R, E) = \frac{2\sqrt{k_1|k_2|}}{(k_1 + k_2)^2 R} \left(\frac{m^*}{\pi\hbar^2}\right)^2 [\cos[(k_1 - |k_2|)R] \operatorname{Im}(t_{\uparrow\uparrow} + t_{\downarrow\downarrow}) + \sin[(k_1 - |k_2|)R] \operatorname{Re}(t_{\uparrow\uparrow} + t_{\downarrow\downarrow})] \quad (4.14)$$

et la région 2 :

$$\Delta n(R, E) = -\frac{2\sqrt{k_1 k_2}}{(k_1 + k_2)^2 R} \left(\frac{m^*}{\pi\hbar^2}\right)^2 [\cos[(k_1 + k_2)R] \operatorname{Re}(t_{\uparrow\uparrow} + t_{\downarrow\downarrow}) - \sin[(k_1 + k_2)R] \operatorname{Im}(t_{\uparrow\uparrow} + t_{\downarrow\downarrow})] \quad (4.15)$$

En absence de couplage spin-orbite, $k_1 = k_2 = k$, on retrouve le comportement habituel des oscillations de charge de Friedel défini par un vecteur d'onde $2k$. Ceci dit, même si ce couplage est présent, le vecteur d'onde décrivant ces oscillations ne change pas car $k_1 + k_2 = 2k$. En d'autres termes, il n'y a pas de signature du couplage spin-orbite dans les oscillations de charge, ce qui confirme les prédictions de Petersen et Hedegaard (17).

4.5. Aimantation induite

Il y a lieu de s'intéresser à l'aimantation induite car l'adatom est considéré magnétique ce qui brise la symétrie de renversement par rapport au temps. Comme nous allons le montrer, l'aimantation induite est caractérisée par des structures magnétiques complexes. Il y aura une composante perpendiculaire à la surface et deux composantes parallèles à la surface, qui seront modulées par le couplage de spin-orbite. Le vecteur d'aimantation peut être calculé à partir de la fonction de Green:

$$\vec{M}(\vec{R}, E) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \operatorname{Im} \operatorname{Tr} (\mathbf{G}(\vec{R}, E + i\epsilon) - \mathbf{G}_0(\vec{R}, E + i\epsilon)) \vec{\sigma} \quad (4.16)$$

d'où on déduit l'aimantation induite :

$$\vec{M}(\vec{R}, E) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \operatorname{Im} \operatorname{Tr} \mathbf{G}_0(\vec{R}, E + i\epsilon) \mathbf{t}(E + i\epsilon) \mathbf{G}_0(-\vec{R}, E + i\epsilon) \vec{\sigma} \quad (4.17)$$

Le résultat précédent est général mais comme on s'intéresse au un cas particulier d'adatoms, i.e. Fe sur Au(111), la matrice \mathbf{t} comme précisé auparavant sera considérée comme diagonale dans l'espace des spins. Toutefois, nous pouvons procéder à une rotation de la matrice \mathbf{t} si le moment magnétique n'est pas orienté le long de l'axe

4. Problème à une Impureté

(oz). Dans ce qui suit, nous considérerons donc le cas simple où l'aimantation est perpendiculaire à la surface.

Analysons les composantes de l'aimantation. D'après la relation précédente la composante selon l'axe (oz) est donnée par :

$$M_z(\vec{R}, E) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \text{Im Tr } \mathbf{G}_0(\vec{R}, E + i\epsilon) \mathbf{t}(E + i\epsilon) \mathbf{G}_0(-\vec{R}, E + i\epsilon) \boldsymbol{\sigma}_z \quad (4.18)$$

Pour la forme choisie de notre matrice t , M_z se réduit à :

$$M_z(R, E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} (G_D^2 - G_{ND}^2) \Delta t \quad (4.19)$$

où $\Delta t = t_{\uparrow\uparrow}(E) - t_{\downarrow\downarrow}(E)$. L'équation précédente montre que dans le cas d'un atome ayant un moment magnétique selon (oz), l'aimantation induite forme des cercles concentriques (sa valeur est la même pour R constant). Cela sera plus claire en procédant à l'expansion asymptotique à longue distance. On obtient alors pour la région 1:

$$M_z(R, E) \simeq -\frac{m^{*2}}{\pi^2 \hbar^4 (k_1 + k_2)^2 R} [\Delta t^{Re} (k_1 \cos(2k_1 R) - |k_2| \cos(2|k_2| R)) - \Delta t^{Im} (k_1 \sin(2k_1 R) + |k_2| \sin(2|k_2| R))] \quad (4.20)$$

et pour la région 2:

$$M_z(R, E) \simeq -\frac{m^{*2}}{\pi^2 \hbar^4 (k_1 + k_2)^2 R} [\Delta t^{Re} (k_1 \cos(2k_1 R) + k_2 \cos(2k_2 R)) - \Delta t^{Im} (k_1 \sin(2k_1 R) + k_2 \sin(2k_2 R))] \quad (4.21)$$

Ces deux derniers résultats sont très intéressants, car on y voit que la dépendance en k_1 et k_2 n'est pas aussi triviale que celle obtenue dans les oscillations de charge. Nous nous attendons alors à des effets d'interférences que l'on discutera ultérieurement. Aussi, on peut vérifier que le fait d'annuler la contribution du couplage spin-orbite mènera au résultat classique d'un gaz d'électrons libres.

L'aimantation dans le plan de la surface est donnée par :

$$M_x(R, E) = -\frac{2}{\pi} \text{Im } G_D G_{ND} \Delta t \cos \beta \quad (4.22)$$

et

$$M_y(R, E) = -\frac{2}{\pi} \text{Im } G_D G_{ND} \Delta t \sin \beta \quad (4.23)$$

que nous avons obtenus en utilisant l'éq. 4.18 où nous avons remplacé σ_z par σ_x et σ_y respectivement. Dans le cas que nous considérons (symétrie cylindrique), il est possible de suivre l'évolution spatiale de M_x et M_y en utilisant M_R (aimantation radiale) :

$$M_x(R, E) = M_R(R, E) \cos \beta \quad (4.24)$$

$$M_y(R, E) = M_R(R, E) \sin \beta \quad (4.25)$$

À longue distance, nous obtenons dans la région 1 :

$$M_R(R, E) \simeq -\frac{m^{*2}}{\pi^2 \hbar^4 (k_1 + k_2)^2 R} [\Delta t^{Re} (k_1 \sin(2k_1 R) - |k_2| \sin(2|k_2| R)) + \Delta t^{Im} (k_1 \cos(2k_1 R) + |k_2| \cos(2|k_2| R))] \quad (4.26)$$

alors que dans la deuxième région :

$$M_R(R, E) \simeq -\frac{m^{*2}}{\pi^2 \hbar^4 (k_1 + k_2)^2 R} [\Delta t^{Re} (k_1 \sin(2k_1 R) - k_2 \sin(2k_2 R)) + \Delta t^{Im} (k_1 \cos(2k_1 R) - k_2 \cos(2k_2 R))] \quad (4.27)$$

Comme pour M_z , M_R dépend d'une manière non-triviale des vecteurs d'ondes k_1 et k_2 , ce qui indique la possibilité d'obtenir des effets d'interférences. Toutefois son unique présence est le résultat du couplage spin-orbite car si $k_1 = k_2$, M_R s'annule. En d'autres termes, la présence d'une aimantation non-colinéaire est le produit de l'effet Rashba (spin-orbite).

À partir de ces observations, une proposition peut être faite aux expérimentateurs utilisant la SP-STM. Un système fait d'un adatome de Fe déposé sur une surface de Au(111) mesuré avec une pointe magnétisée selon le plan (xoy) devrait être sensible à l'aimantation M_R . Donc tout contrast magnétique sera induit par l'effet Rashba. Alors qu'une pointe magnétisée selon (oz) détectera l'aimantation M_z . Il faudra alors savoir où les effets d'interférences devraient se produire. Dans ce qui suit nous analyserons un exemple concret et discuterons les textures de l'aimantation que l'on peut obtenir.

4.6. Structures skyrmioniques dans l'aimantation induite

Afin de simplifier notre discussion, nous considérons un adatome de Fe qui présente une densité d'états très faible pour les spins majoritaires (bande pleine) ce qui permet de faire l'approximation suivante $\delta_{\uparrow\uparrow} = 0$ par contre pour les spins minoritaires elle présente une résonance au niveau de Fermi alors le déphasage pour les spins minoritaires est approximé par $\delta_{\downarrow\downarrow} = \frac{\pi}{2}$, la matrice \mathbf{t} est alors purement imaginaire, ce qui nous permettra d'étudier une partie de la somme donnant \vec{M} . Nous obtenons alors la structure montrée dans la Fig. 4.1(a) pour l'énergie de Fermi (E_F). La texture magnétique obtenue est assez complexe bien qu'elle rappelle une structure skyrmionique comme celle montrée dans le premier chapitre. Toutefois, lorsqu'on la regarde de plus près, on voit que les rotations de l'aimantation ne sont pas continues. Afin d'analyser ce comportement, la densité de charge, l'aimantation selon (oz) et l'aimantation dans le plan de la surface sont montrées dans la Fig. 4.2. On note que les oscillations en M_R et M_z sont du même de grandeur mais sont déphasées. Ce déphasage dépend de la valeur du couplage spin-orbite décrit par la constante α . Cela peut être compris en analysant le comportement asymptotique. En effet, M_Z peut être alors réécrit en fonction de k_{so} et k comme $\frac{m^*}{\pi^2 \hbar^2 k^2 R} (k \sin(2kR) \cos(2k_{so}R) + k_{so} \sin(2k_{so}R) \cos(2kR))$. Au niveau de Fermi E_F , k_{so} devrait être très faible en comparaison avec k . En d'autres termes la longueur d'onde, λ_{so} , correspondant à k_{so} et supérieure à la longueur d'onde, λ_F correspondant à k . Pour des distances inférieures à λ_{so} mais suffisamment large pour pouvoir appliquer l'approximation asymptotique présentée précédemment, M_Z se simplifie en $\frac{m^*}{\pi^2 \hbar^2 k^2 R} \sin(2kR)$ sans signature du spin-orbite. Cela explique le fait que les longueurs d'ondes obtenues pour les oscillations initiales soient deux fois plus large que celle à E_F . En fait, on doit s'éloigner de l'impureté afin de voir un surprenant changement de phase autour de 60 Å qui est induit par l'effet spin-orbite car comme λ_{so} (115 Å), son effet dans les oscillations de Friedel devrait avoir lieu à $\lambda_{so}/2$. Un substrat différent de l'or avec un paramètre de Rashba plus élevé devrait réduire la distance sur laquelle se produit ce changement de phase. M_R qui est proportionnel à $-\frac{m^*}{\pi^2 \hbar^2 k^2 R} (k_{so} \cos(2kR) \cos(2k_{so}R) - k \sin(2k_{so}R) \sin(2kR))$ pourrait être simplifiée pour des distances relativement courtes à $\frac{m^* k_{so}}{\pi^2 \hbar^2 k} \sin(2kR)$ conformément au comportement sinusoidal caractérisant M_R .

Bien que à première vue la texture de spin obtenue est très complexe, on peut la décomposer en une combinaison linéaire de deux ondes skyrmioniques, $\vec{M} = \vec{M}_{k_1} + \vec{M}_{k_2}$, avec $\vec{M}_{k_1}(R) \propto k_1(\sin(2k_1R), -\cos(2k_1R))$ et $\vec{M}_{k_2}(R) \propto k_2(\sin(2k_2R), \cos(2k_2R))$ caractérisé par des vecteurs de chiralité de sense opposé définit comme $\vec{c} = \vec{M}(R) \times \vec{M}(R + dR)$. La chiralité $\vec{c}_{k_2} = \cos(2k_2 dR) \vec{e}_\phi$ pointe dans la direction ϕ et forme avec les vecteurs \vec{e}_z et \vec{e}_r un système référentiel avec la main droite alors que $\vec{c}_{k_1} = -\cos(2k_1 dR) \vec{e}_\phi$ pointe dans la direction $-\phi$ et forme avec \vec{e}_z et \vec{e}_r un système référentiel avec la main gauche. Il en découle que \vec{M}_{k_1} et \vec{M}_{k_2} sont des ondes

de spin avec un sens rotation à gauche ou à droite (Fig. 4.1(b)). Ici notre définition du skyrmion suit celle de Rössler et al. (21) et désigne des ondes de spin bien définies qui sont (i) centrées autour des atomes et (ii) ayant un sens de rotation fixe. Notons que le sens de rotation de ces ondes dépendra de la valeur et du signe de la matrice que nous avons considéré en premier lieu comme purement imaginaire. Par la suite nous généraliserons ce résultat pour une forme générale de la matrice \mathbf{t} .

Ces ondes de spin multi-skyrmioniques peuvent être détruites ou manipulées avec l'interaction spin-orbite. En l'annulant, seule la magnétisation selon (oz) subsistera. Une manière de contrôler l'effet Rashba est de changer la nature du substrat d'une façon graduelle (19; 20). Ce genre d'expériences est difficile à réaliser c'est pour cela que nous proposons une autre méthode : Au lieu de mesurer la densité d'état au niveau de Fermi, on mesurera la densité pour différentes énergies. Par exemple, en diminuant l'énergie à laquelle les mesures sont faites, la longueur d'onde correspondant à $\frac{2\pi}{k}$ augmente ce qui est accompagné d'une diminution du nombre d'oscillations. Cela est observable dans les deux exemples montrés dans la Fig. 4.2 calculés à 140 meV et 20 meV. Les ondes skyrmioniques finales ont des textures différentes mais partagent le même comportement à 60 Å, i.e. il y a un déphasage induit par l'effet Rashba. Cela peut être constaté dans la Fig. 4.3.

Nous pouvons maintenant généraliser l'observation précédente obtenue pour une certaine forme de \mathbf{t} (purement imaginaire). On peut dire que la texture skyrmionique qui sera obtenue peut aussi être décomposée en différentes ondes de spin, ayant des sens de rotation différents. La combinaison linéaire de ces ondes sera toutefois déterminée par différents facteurs: k_1, k_2 ainsi que par les parties imaginaires et réelles de \mathbf{t} .

4. Problème à une Impureté

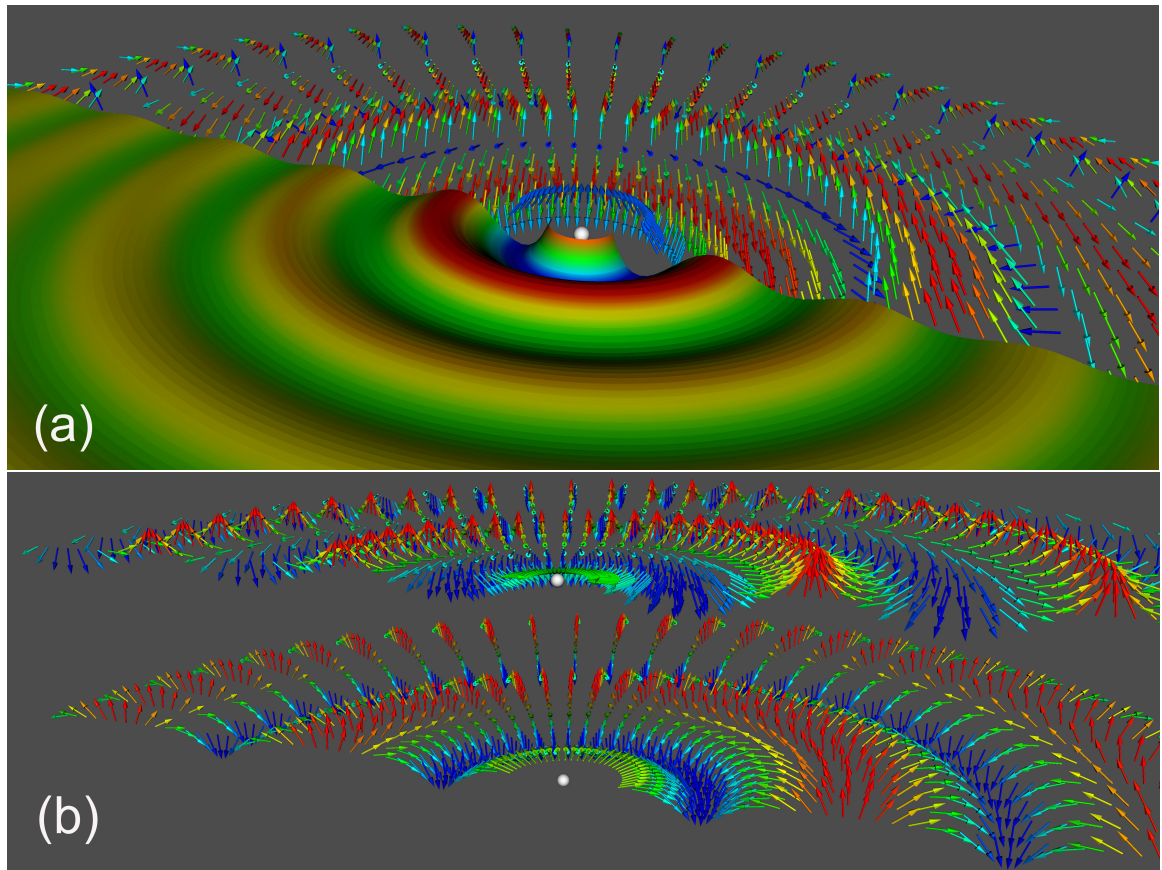


Figure 4.1.: Texture des spin de type skyrmionique au niveau de E_F de la surface Au(111) induite par la présence d'un atome magnétique. (a) Visualisation de la charge induite ainsi que des vecteur de l'aimantation induite dans les électrons de l'état de surface de l'or. La texture de spin trouvée en (a) peut être décomposée en une combinaison linéaire de deux ondes magnétiques et skyrmioniques ayant des vecteurs de chiralité opposés et sont montrées en (b). Les longueurs d'ondes des oscillations de charge induite, des ondes skyrmioniques à rotation gauche et droite sont respectivement égales à $\sim 18.7 \text{ \AA}$, $\sim 17.3 \text{ \AA}$ and 20.3 \AA .

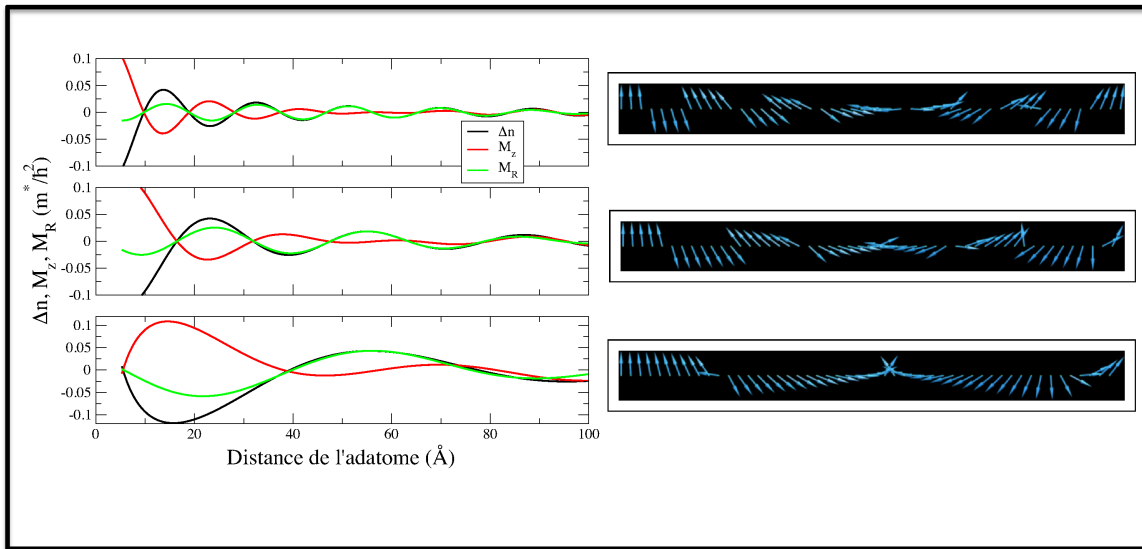


Figure 4.2.: Comparaison des charges et des composantes de l'aimantation induites. En raison de l'effet Rashba, les adatoms magnétiques de Fe induisent des interférences de spin non-triviales: Dans les panels de gauche sont montrés la dépendance radiale de la charge ainsi que l'aimantation pour différentes énergies sur la droite on montre les vecteurs unités de l'aimantation.

4. Problème à une Impureté

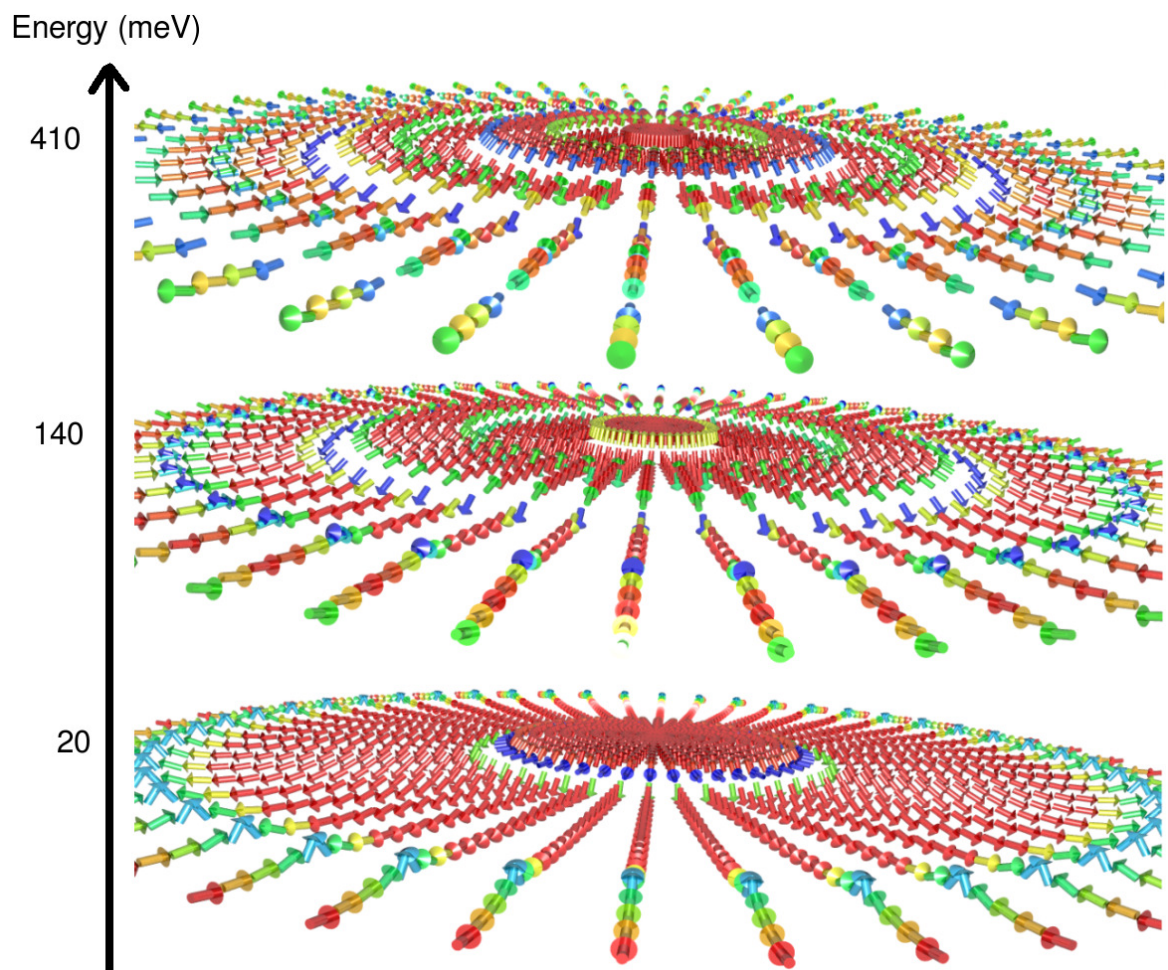


Figure 4.3.: Configurations de spin non-colinéaires du gaz d'électrons. Textures de spin de type skyrmionique de l'aimantation induite autour des adatoms à différentes énergies (410 meV, 140 meV and 20 meV). Le nombre d'oscillations diminue lorsque l'énergie diminue, menant à une rotation des moments de spins plus harmonieuse.

5

Interactions d'échange

5.1. Introduction

Les interactions d'échange sont à l'origine de l'ordre magnétique à longue distance. Elles permettent d'expliquer les propriétés magnétiques des matériaux. Elles naissent de l'interaction coulombienne combinée avec l'anti-symétrie de la fonction d'onde (Principe de Pauli).

Dans un modèle simple à deux électrons, elle est définie comme étant la différence d'énergie entre l'état singulet et l'état triplet en spin. Dans un modèle semi-classique on peut exprimer l'Hamiltonien du système par $H = J \vec{e}_i \cdot \vec{e}_j$ appelé Hamiltonien de Heisenberg où J désigne l'intégrale d'échange entre deux spins \vec{S}_i et \vec{S}_j qui ont pour vecteurs unitaires \vec{e}_i et \vec{e}_j respectivement. En présence de l'interaction de spin-orbite l'intégrale d'échange se transforme en tenseur d'interaction d'échange et l'Hamiltonien d'interaction est donné par : $H = \vec{e}_i \mathbf{J}_{ij} \vec{e}_j$, où \mathbf{J}_{ij} est tenseur d'interaction d'échange.

Dans les matériaux magnétiques on dénombre plusieurs types d'échanges. Le premier type est le plus simple c'est l'interaction d'échange directe. Cette interaction apparaît entre deux atomes voisins via le recouvrement des fonctions d'ondes. Cependant dans les terres rares (4f) ce mécanisme est trop faible pour créer un ordre magnétique, car les fonctions d'ondes sont localisées autour du noyau. Il existe également des mécanismes d'interaction d'échanges indirectes. On les retrouve dans les solides ioniques (super-échange) ou encore dans les métaux. C'est à ce dernier type que l'on s'intéresse dans ce chapitre. Dans les métaux cette interaction est appelée interaction de RKKY du nom de ces découvreurs (Ruderman, Kittel, Kasuya et Yosida) (22). Elle se fait via la polarisation du gaz d'électrons (échange itinérant). La forme générale de ces interactions dans un gaz d'électrons libres est donnée par $J = \frac{\cos(2k_F R)}{R^d}$ (R est la distance entre deux atomes et d la dimensionalité du système). Elles ont une portée plus longue dans les systèmes de basse dimensionalité comparée aux systèmes tridimensionnels.

Dans ce chapitre, premièrement nous utiliserons la méthode des rotations infinitésimales, pour dériver une formule idéale qui permet d'extraire le tenseur d'interactions d'échange. Elle permet de relier les composantes du tenseur d'interaction d'échange à la trace

5. Interactions d'échange

du produit des fonctions de Green (connectant les sites i et j), et des variations des matrices t définies au chapitre 3. Notre but est de modéliser l'interaction magnétique entre deux atomes magnétiques interagissant par l'intermédiaire d'électrons formant des états de surface. Ces états de surface représentent un gaz d'électrons à deux dimensions. Comme exemple d'application, nous considérons deux atomes de Fe déposés sur la surface Au(111). En faisant une approximation dans les fonctions de Green, nous dérivons analytiquement le tenseur d'interactions d'échange. La présence de l'interaction de spin-orbite induit un terme d'échange anisotropique connu sous le nom d'interaction de Dzyaloshinskii-Moriya, mais on a trouvé également un terme supplémentaire, appelé dans la littérature terme d'Ising.

5.2. Dérivation du tenseur d'interactions d'échange

Afin de calculer le tenseur d'interactions d'échange, nous utiliserons la formule de Lloyd qui permettra de calculer la variation de l'énergie due à la rotation des moments magnétiques à partir d'un état magnétique colinéaire. Cette idée a été utilisée par Liechtenstein et al. (23) afin de dériver une formule simple pour le calcul de l'interaction d'échange entre deux spins. Cette méthode a été généralisée pour l'évaluation du tenseur d'interactions d'échange par Udvardi et al. (24) et Ebert et al. (25).

La variation de l'énergie totale du système due à un changement du potentiel peut être approximée en premier ordre par la variation de l'énergie à une particule (26). L'énergie à une particule est définie par :

$$E_{sp} = \int_{E_R}^{E_F} dE (E - E_F)n(E) \quad (5.1)$$

La formule de Lloyd (27) permet de relier la densité d'état du système à l'opérateur de diffusion (Les caractères gras soulignés désignent des matrices en blocs (\mathbf{n}, \mathbf{s}) ou n désigne la position des atomes et s indique le spin), E_{sp} devient alors :

$$E_{sp} = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int_{E_R}^{E_F} dE \ln \det \underline{\mathbf{T}}(E) \quad (5.2)$$

$$E_{sp} = \frac{1}{\pi} \text{Im} \int_{E_R}^{E_F} dE \ln \det \underline{\mathbf{T}}(E)^{-1} \quad (5.3)$$

Une fois cette variation de l'énergie établit, un tenseur d'interactions d'échange sera déduit par une identification terme à terme pour une même variation en énergie dans le modèle de Heisenberg généralisé : $H = \vec{e}_i \mathbf{J}_{ij} \vec{e}_j$. Comme les éléments du tenseur

5.2. Dérivation du tenseur d'interactions d'échange

J_{ij} sont donnés par la différentiation de H par rapport aux vecteurs unitaires e_i et e_j , nous appliquerons la même différentiation à l'éq. 5.3

$$\mathbf{J}_{ij}^{\alpha\beta} = \frac{\partial^2 H}{\partial e_i^\alpha \partial e_j^\beta} \quad (5.4)$$

où α et β désignent les différentes composantes du tenseur d'interaction d'échange. Il est généralement décomposé en trois parties :

$$\mathbf{J}_{ij} = \frac{1}{3} \text{Tr } \mathbf{J}_{ij} \mathbf{1} + \mathbf{J}_{ij}^A + \mathbf{J}_{ij}^S \quad (5.5)$$

$$\mathbf{J}_{ij}^A = \frac{\mathbf{J}_{ij} - \mathbf{J}_{ij}^T}{2} \quad (5.6)$$

$$\mathbf{J}_{ij}^S = \frac{\mathbf{J}_{ij} + \mathbf{J}_{ij}^T}{2} - \frac{1}{3} \text{Tr } \mathbf{J}_{ij} \mathbf{1} \quad (5.7)$$

Le premier terme désigne la partie isotropique du tenseur (intégrale d'échange), \mathbf{J}_{ij}^A représente la partie anti-symétrique qui est reliée au vecteur de Dzyaloshinskii-Moriya par :

$$\mathbf{J}_{ij}^A = \begin{pmatrix} 0 & D_{ij}^z & -D_{ij}^y \\ D_{ij}^z & 0 & D_{ij}^x \\ D_{ij}^y & D_{ij}^x & 0 \end{pmatrix} \quad (5.8)$$

Le dernier terme, \mathbf{J}_{ij}^S représente la partie symétrique du tenseur qui inclut d'autres types d'anisotropies.

Revenons à l'éq. 5.3. L'opérateur $\underline{\mathbf{T}}(E)$ à été déterminé par l'éq. 3.7 et vaut :

$$\underline{\mathbf{T}}(E) = \frac{1}{1 - \underline{\mathbf{V}}\underline{\mathbf{G}}_0(E)} \underline{\mathbf{V}} \quad (5.9)$$

Pour un système à deux impuretés, l'opérateur de diffusion vaut :

$$\underline{\mathbf{T}}(E) = \begin{pmatrix} \mathbf{1} - \mathbf{V}_1 \mathbf{G}_0(1,1) & -\mathbf{V}_1 \mathbf{G}_0(1,2) \\ -\mathbf{V}_2 \mathbf{G}_0(2,1) & \mathbf{1} - \mathbf{V}_2 \mathbf{G}_0(2,2) \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \mathbf{V}_1 & 0 \\ 0 & \mathbf{V}_2 \end{pmatrix} \quad (5.10)$$

Si on définit la matrice \mathbf{t} par :

$$\mathbf{t}_i = [\mathbf{1} - \mathbf{G}_0(i,i)\mathbf{V}_i]^{-1} \mathbf{V}_i \quad (5.11)$$

5. Interactions d'échange

on obtient

$$\underline{\mathbf{T}} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & -\mathbf{t}_1 \mathbf{G}_0(1, 2) \\ -\mathbf{t}_2 \mathbf{G}_0(2, 1) & \mathbf{1} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \mathbf{t}_1 & 0 \\ 0 & \mathbf{t}_2 \end{pmatrix} \quad (5.12)$$

et en forme compacte :

$$\underline{\mathbf{T}} = \begin{pmatrix} \mathbf{t}_1^{-1} & -\mathbf{G}_0(1, 2) \\ -\mathbf{G}_0(2, 1) & \mathbf{t}_2^{-1} \end{pmatrix}^{-1} \quad (5.13)$$

Donc $\underline{\mathbf{T}}(E) = [\underline{\mathbf{m}}(E) - \underline{\mathbf{G}}_0(E)]^{-1}$, où $\underline{\mathbf{m}}(E) = \underline{\mathbf{t}}(E)^{-1}$, et la fonction de Green, $\underline{\mathbf{G}}_0(E)$, n'a pas d'éléments diagonaux car ils sont inclus dans les matrices \mathbf{t} . En utilisant $\ln \det \underline{\mathbf{T}}(E) = \text{Tr} \ln \underline{\mathbf{T}}(E)$, E_{sp} est alors donné par :

$$E_{sp} = \frac{1}{\pi} \text{Im} \int_{E_R}^{E_F} dE \text{Tr} \ln \underline{\mathbf{T}}(E)^{-1} \quad (5.14)$$

Nous voulons réévaluer la variation de l'énergie apres rotation des moments magnétiques afin d'identifier les termes apparaissant dans l'Hamiltonien de Heisenberg. La rotation infinitésimale du moment magnétique de l'impureté i correspond à une variation de l'énergie E_{sp} :

$$E_i^\alpha = \frac{\partial E_{sp}}{\partial e_i^\alpha} = \frac{1}{\pi} \text{Im} \int_{E_R}^{E_F} dE \text{Tr} \frac{\partial \ln \underline{\mathbf{T}}(E)^{-1}}{\partial e_i^\alpha} \quad (5.15)$$

Le changement de l'opérateur de diffusion par rapport à la variation de la composante α du moment i qui a pour vecteur unitaire \vec{e}_i (la fonction de Green du gaz d'électrons sans l'impureté est indépendante de l'orientation du moment magnétique), vaut :

$$\frac{\partial \underline{\mathbf{T}}(E)^{-1}}{\partial e_i^\alpha} = \frac{\partial}{\partial e_i^\alpha} [\underline{\mathbf{m}}(E) - \underline{\mathbf{G}}(E)]^{-1} = \underline{\mathbf{m}}_i^\alpha \quad (5.16)$$

ce qui donne :

$$E_i^\alpha = \frac{\partial E_{sp}}{\partial e_i^\alpha} = \frac{1}{\pi} \text{Im} \int_{E_R}^{E_F} dE \text{Tr}(\underline{\mathbf{T}}(E) \underline{\mathbf{m}}_i^\alpha) \quad (5.17)$$

Une deuxième différentiation par rapport à e_j^β avec $j \neq i$ donne l'équivalent de l'éq 5.4:

$$E_{ij}^{\alpha\beta} = \frac{\partial}{\partial e_i^\alpha} \frac{\partial E_{sp}}{\partial e_j^\beta} = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int_{E_R}^{E_F} dE \text{Tr}(\underline{\mathbf{T}}(E) \underline{\mathbf{m}}_i^\alpha \underline{\mathbf{T}}(E) \underline{\mathbf{m}}_j^\beta) \quad (5.18)$$

5.2. Dérivation du tenseur d'interactions d'échange

d'où on déduit les éléments du tenseur J_{ij} . En introduisant la définition de la fonction de Green qui connecte les sites i et j . $\underline{\mathbf{T}}$ est donnée par $\underline{\mathbf{T}} = \underline{\mathbf{t}}_i \underline{\mathbf{G}}_{ij} \underline{\mathbf{t}}_j$, on peut exprimer $E_{ij}^{\alpha\beta}$ en fonction de $\underline{\mathbf{G}}_{ij}$ et des matrices $\underline{\mathbf{t}}_i$:

$$E_{ij}^{\alpha\beta} = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int_{E_R}^{E_F} dE \text{Tr}(\underline{\mathbf{t}}_i^\alpha \underline{\mathbf{G}}_{ij} \underline{\mathbf{t}}_j^\beta \underline{\mathbf{G}}_{ji}) \quad (5.19)$$

La fonction de Green $\underline{\mathbf{G}}_{ij}$ est reliée à $\underline{\mathbf{G}}_{ij}^0$ (fonction de Green du gaz de Rashba) via l'équation de Dyson :

$$\underline{\mathbf{G}}_{ij} = \underline{\mathbf{G}}_{ij}^0 + \sum_{n \neq i, m \neq j} \underline{\mathbf{G}}_{in}^0 \underline{\mathbf{T}}_{nm}(E) \underline{\mathbf{G}}_{mj}^0 \quad (5.20)$$

où $\underline{\mathbf{t}}_i^\alpha = \frac{\partial \underline{\mathbf{t}}}{\partial e_i^\alpha}$, Sachant que la matrice $\underline{\mathbf{t}}$ s'écrit :

$$\underline{\mathbf{t}} = \frac{t_\uparrow + t_\downarrow}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{t_\uparrow - t_\downarrow}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{e} \quad (5.21)$$

Ce qui implique que :

$$\underline{\mathbf{t}}_i^\alpha = \frac{t_\uparrow^i - t_\downarrow^i}{2} \sigma^\alpha = \Delta_i \sigma^\alpha \quad (5.22)$$

comme $J_{ij}^{\alpha\beta} = E_{ij}^{\alpha\beta}$, les éléments du tenseur peuvent être calculés à partir de :

$$\mathbf{J}_{ij}^{\alpha\beta} = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int_{E_R}^{E_F} dE \Delta_i \Delta_j \text{Tr}(\sigma^\alpha \underline{\mathbf{G}}_{ij} \sigma^\beta \underline{\mathbf{G}}_{ji}) \quad (5.23)$$

Dans le prochain chapitre nous évaluerons numériquement le tenseur d'interactions d'échange pour des nanostructures. Il est toutefois intéressant d'établir une forme analytique afin d'étudier ces propriétés. Cela est possible si on considère les fonctions de Green originales, G_0 , sans tenir compte de la renormalisation de fonctions de Green induite par la présence d'impuretés. Cette approximation nous mènera à un Hamiltonien de type RKKY analogue à celui utilisé par Imamura et al. (28) en utilisant la théorie des perturbations au second ordre. La perturbation est représentée par un Hamiltonien de type s-d : $H = A \sum_{i=1,2} \delta(\vec{r} - \vec{R}_i) \vec{\mathbf{S}}_i \cdot \vec{\sigma}$.

Au lieu de l'éq 5.23 nous considérons donc :

$$\mathbf{J}_{ij}^{\alpha\beta} = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int_{E_R}^{E_F} dE \Delta_i \Delta_j \text{Tr}(\sigma^\alpha \underline{\mathbf{G}}_{ij}^0 \sigma^\beta \underline{\mathbf{G}}_{ji}^0) \quad (5.24)$$

5. Interactions d'échange

Les intégrants des différentes composantes du tenseur sont donnés dans la liste suivante, où G_D et G_{ND} sont donnés par les éqs 3.62 et 3.63 pour alléger la notation et sachant que $G_{D(ND)}^{ij} = G_{D(ND)}^{ji}$ on omet les indices i et j de ces deux termes :

$$\mathbf{J}_{ij}^{xx'} = -\frac{2}{\pi} \text{Im} \Delta_i \Delta_j [G_D^2 - G_{ND}^2 \cos 2\beta] \quad (5.25)$$

$$\mathbf{J}_{ij}^{yy'} = -\frac{2}{\pi} \text{Im} \Delta_i \Delta_j [G_D^2 + G_{ND}^2 \cos 2\beta] \quad (5.26)$$

$$\mathbf{J}_{ij}^{zz'} = -\frac{2}{\pi} \text{Im} \Delta_i \Delta_j [G_D^2 - G_{ND}^2] \quad (5.27)$$

$$\mathbf{J}_{ij}^{xy'} = \frac{2}{\pi} \text{Im} \Delta_i \Delta_j G_D G_{ND} \sin 2\beta \quad (5.28)$$

$$\mathbf{J}_{ij}^{xz'} = -\frac{4}{\pi} \text{Im} \Delta_i \Delta_j G_D G_{ND} \cos \beta \quad (5.29)$$

$$\mathbf{J}_{ij}^{yx'} = \frac{4}{\pi} \text{Im} \Delta_i \Delta_j G_D G_{ND} \sin 2\beta \quad (5.30)$$

$$\mathbf{J}_{ij}^{zx'} = \frac{4}{\pi} \text{Im} \Delta_i \Delta_j G_D G_{ND} \cos \beta \quad (5.31)$$

$$\mathbf{J}_{ij}^{yz'} = -\frac{4}{\pi} \text{Im} \Delta_i \Delta_j G_D G_{ND} \sin \beta \quad (5.32)$$

$$\mathbf{J}_{ij}^{zy'} = \frac{4}{\pi} \text{Im} \Delta_i \Delta_j G_D G_{ND} \sin \beta \quad (5.33)$$

Dans notre cas particulier, la symétrie de la fonction de Green fait que la composante D_{ij}^z du vecteur de Dzyaloshinskii-Moriya, donnée par $\frac{\mathbf{J}_{ij}^{xy} - \mathbf{J}_{ij}^{yx}}{2}$ est constamment égale à zéro, et la partie symétrique du tenseur \mathbf{J}_{ij}^S est non nulle, ce qui a pour effet de créer des anisotropies dans la partie diagonale tenseur \mathbf{J}_{ij} . Il est intéressant de noter que cette anisotropie est généralement négligée dans la littérature. Afin de déterminer sa signification physique, son origine dans l'Hamiltonien de Heisenberg, et sont impacte sur l'orientation des moments magnétiques, il convient de passer de l'expression du tenseur à celle de l'Hamiltonien :

$$H = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int_{E_R}^{E_F} dE \Delta_i \Delta_j \text{Tr}[(\vec{e}_i \vec{\sigma}) \mathbf{G}_{ij}^0 (\vec{e}_j \vec{\sigma}) \mathbf{G}_{ji}^0] \quad (5.34)$$

5.2. Dérivation du tenseur d'interactions d'échange

La fonction de Green peut être exprimée en fonction des matrices de Pauli :

$$G_{ij}^0 = G_D \boldsymbol{\sigma}_0 - iG_{ND}[\cos \beta \boldsymbol{\sigma}_y - \sin \beta \boldsymbol{\sigma}_x] \quad (5.35)$$

$$G_{ji}^0 = G_D \boldsymbol{\sigma}_0 + iG_{ND}[\cos \beta \boldsymbol{\sigma}_y - \sin B \boldsymbol{\sigma}_x] \quad (5.36)$$

où $\boldsymbol{\sigma}_0$ est la matrice unité.

$$H = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int_{E_R}^{E_F} dE \Delta_i \Delta_j \text{Tr}[(\vec{e}_i \cdot \vec{\boldsymbol{\sigma}})(G_D \boldsymbol{\sigma}_0 - iG_{ND}(\cos \beta \boldsymbol{\sigma}_y - \sin \beta \boldsymbol{\sigma}_x)) \\ (\vec{e}_j \cdot \vec{\boldsymbol{\sigma}})(G_D \boldsymbol{\sigma}_0 + iG_{ND}(\cos \beta \boldsymbol{\sigma}_y - \sin B \boldsymbol{\sigma}_x))] \quad (5.37)$$

Le calcul détaillé de cette trace a été fait en Appendice [1]. La forme finale de l'Hamiltonien pour des impuretés placées le long de l'axe (ox) est donnée par :

$$H = J \vec{e}_i \cdot \vec{e}_j + D_y (\vec{e}_i \times \vec{e}_j)_y + I e_i^y e_j^y \quad (5.38)$$

Les constantes d'échanges $\{ J, D_y, I \}$ sont alors reliées à la fonction de Green par :

$$J = -\frac{2}{\pi} \text{Im} \int_{E_R}^{E_F} dE \Delta_i \Delta_j (G_D^2 - G_{ND}^2) \quad (5.39)$$

$$D_y = \frac{4}{\pi} \text{Im} \int_{E_R}^{E_F} dE \Delta_i \Delta_j G_D G_{ND} \quad (5.40)$$

$$I = -\frac{4}{\pi} \text{Im} \int_{E_R}^{E_F} dE \Delta_i \Delta_j G_{ND}^2 \quad (5.41)$$

J est la constante d'échange isotropique. Elle favorisera un couplage ferromagnétique si elle est négative ou un couplage anti-ferromagnétique dans la cas contraire. La constante D_y est la composante y du vecteur de Dzyaloshinskii-Moriya qui n'a que la composante selon y à cause de la troisième règle de Moriya. Elle privilégie une rotation des moments magnétique dans le plan (xoz) et permet d'obtenir une structure non colinéaire. Le terme I est issu de la partie symétrique du tenseur d'interactions d'échange. Il est responsable des anisotropies présentes dans les composantes \mathbf{J}_{ij}^{xx} et \mathbf{J}_{ij}^{yy} du tenseur d'interactions d'échange. Dans ce cas particulier où les impuretés sont le long de l'axe (ox) il est donné par $I = \frac{\mathbf{J}_{ij}^{yy} - \mathbf{J}_{ij}^{zz}}{2}$, cette anisotropie apparaît car notre système est un gaz d'électrons bidimensionnel et les directions x et y sont

5. Interactions d'échange

inéquivalentes à la direction z . Il favorise un alignement colinéaire le long de l'axe (oy).

Il est intéressant de noter que dans cette approximation, J se comporte comme la projection de la magnétisation induite selon l'axe (oz) M_z dérivée dans le chapitre précédent, et D_y comme la composante radiale de la magnétisation induite M_R , donc si on néglige la dépendance énergétique des Δ_i alors J est proportionnel à une intégration jusqu'au niveau de Fermi (E_F) de la composante z des ondes skyrmioniques alors que D_y correspond à l'intégrale de leurs composante radial. Cela est raisonnable car dans cette approximation on considère \mathbf{G}_0 (non renormalisée par la présence de la deuxième impureté). Dans ce cas la deuxième impureté va ressentir l'interaction avec la première en interagissant avec le moment induit se trouvant en \vec{R} . Les éqs 5.40 et 5.41 montrent également que D_y est du premier ordre en spin-orbite ($G_D G_{ND}$), et I est du second ordre en spin-orbite (G_{ND}^2).

Dans ce qui suit nous estimerons ces intégrales, sachant que la fonction de Green a deux régimes. L'évaluation des intégrants a été faite en appendice [1].

5.2.1. Calcul de J

Dans le but de dériver analytiquement ces interactions d'échange, nous utilisons la même approximation sur le déphasage que celle faite dans 4.6. Une fois que les composantes de la fonction de Green G_D et G_{ND} ont été développées à longue distance en utilisant l'expansion asymptotique des fonctions de Hankel, la constante d'échange isotropique J est alors donnée par :

$$J = \frac{2}{\pi^2 R} \text{Im} \int_{E_R}^{E_F} dE \frac{i}{(k_1 + k_2)^2} (k_1 e^{2ik_1 R} + k_2 e^{2ik_2 R}) \quad (5.42)$$

$$J = \frac{2}{\pi^2 R} \int_{E_R}^{E_F} dE \frac{1}{(k_1 + k_2)^2} (k_1 \cos 2k_1 R + k_2 \cos 2k_2 R) \quad (5.43)$$

Les vecteurs k_1 et k_2 sont donnés par l'éq 3.64 et 3.64.

Il convient de faire le changement de variables $q = \sqrt{k_{so}^2 + \frac{2m^*E}{\hbar^2}}$. Les bornes d'intégration sont alors $[0, q_F]$ et $dE = \frac{\hbar^2}{m^*} q dq$ et nous obtenons :

$$J = \frac{\hbar^2}{m^* \pi^2 R} \int_0^{q_F} dq k_{so} \frac{\sin(2k_{so} R) \sin(2k_{so} R)}{q} - \frac{\hbar^2}{m^* \pi^2 R} \int_0^{q_F} dq \cos(2qR) \cos(2k_{so} R) \quad (5.44)$$

$$J = \frac{\hbar^2}{m^* \pi^2 R} \left[\frac{\sin(2q_F R) \cos(2k_{so} R)}{2R} - k_{so} \sin(2k_{so} R) SI(2q_F R) \right] \quad (5.45)$$

SI(x) est la fonction sinus intégrée de x. J est la somme de deux fonctions, l'une varie en $\frac{1}{R^2}$ et l'autre en $\frac{1}{R}$, pour R grand la fonction SI tend vers $\frac{\pi}{2}$ et J se comporte comme $\frac{\sin(2k_{so} R)}{R}$. J peut s'écrire comme une combinaison linéaire de deux ondes ayant pour vecteurs d'ondes k_1 et k_2 . Quand k_{so} tend vers zéro on retrouve la forme classique des interactions RKKY sans spin-orbite pour un gaz d'électrons à deux dimensions ($J = \frac{\sin(2q_F R)}{R^2}$).

5.2.2. Calcul de D_y

En considérant les mêmes approximations faites pour le calcul de J , la composante D_y du vecteur de DM est donnée par :

$$D_y = -\frac{4}{\pi^2 R} \text{Im} \int_{E_R}^{E_F} dE \frac{1}{2(k_1 + k_2)^2} [k_1 e^{2ik_1 R} - k_2 e^{2ik_2 R}] \quad (5.46)$$

$$D_y = -\frac{2}{\pi^2 R} \int_{E_R}^{E_F} dE \frac{1}{(k_1 + k_2)^2} [k_1 \sin 2k_1 R - k_2 \sin 2k_2 R] \quad (5.47)$$

$$D_y = -\frac{\hbar^2}{m^* \pi^2 R} \int_0^{q_F} dq k_{so} \frac{\cos(2k_{so} R) \sin(2qR)}{q} - \frac{\hbar^2}{m^* \pi^2 R} \int_0^{q_F} dq \cos(2qR) \sin(2k_{so} R) \quad (5.48)$$

$$D_y = -\frac{\hbar^2}{m^* \pi^2 R} \left[\frac{\sin(2k_{so} R) \sin(2q_F R)}{2R} + k_{so} \cos(2k_{so} R) SI(2q_F R) \right] \quad (5.49)$$

Comme pour J , D_y est la somme de deux termes, le premier varie en $\frac{1}{R^2}$ et l'autre en $\frac{1}{R}$. Un développement perturbatif en k_{so} montre qu'il est du premier ordre en spin-orbite. à longue distance D_y varie comme $\frac{\cos(2k_{so} R)}{R}$. On peut également le décomposer en une combinaison linéaire de deux ondes avec des vecteurs d'ondes k_1 et k_2 . Quand k_{so} tend vers zéro alors D_y tend vers zéro.

5.2.3. Calcul de I

Pour I l'intégrant se comporte différemment dans les régions 1 et 2 et il faudra en tenir compte, premièrement on va calculer la première intégrale dans la région 1 que l'on note ici I_1 et puis la deuxième intégrale dans la région 2 que l'on note I_2 , enfin nous allons sommer la contribution des deux régions : $I = I_1 + I_2$.

Région 1 :

$$I_1 = -\frac{4}{\pi^2 R} \text{Im} \int_{E_R}^0 dE \frac{i}{2(k_1 + k_2)^2} [k_1 e^{2ik_1 R} + k_2 e^{2ik_2 R}] - \frac{4}{\pi^2 R} \text{Im} \int_{E_R}^0 dE \frac{\sqrt{k_1 |k_2|}}{(k_1 + k_2)^2} e^{i(k_1 - |k_2|)R} \quad (5.50)$$

$$I_1 = -\frac{4}{\pi^2 R} \int_{E_R}^0 dE \frac{1}{2(k_1 + k_2)^2} [k_1 \cos(2k_1 R) + k_2 \cos(2k_2 R)] - \frac{4}{\pi^2 R} \int_{E_R}^0 dE \frac{\sqrt{k_1 |k_2|}}{(k_1 + k_2)^2} \sin[(k_1 - |k_2|)R] \quad (5.51)$$

$$I_1 = -\frac{4}{\pi^2 R} \int_0^{k_{so}} dq \cos(2qR) \cos(2k_{so}R) + \frac{4}{\pi^2 R} \int_0^{k_{so}} dq k_{so} \frac{\sin(2k_{so}R) \sin(2qR)}{q} - \frac{4}{\pi^2 R} \int_0^{k_{so}} dq \sqrt{\frac{k_{so}^2}{q^2} - 1} \sin(2qR) \quad (5.52)$$

Région 2 :

$$I_2 = -\frac{4}{\pi^2 R} \text{Im} \int_0^{E_F} dE \frac{i}{2(k_1 + k_2)^2} [k_1 e^{2ik_1 R} + k_2 e^{2ik_2 R}] - 2\sqrt{k_1 k_2} e^{i(k_1 - |k_2|)R} \quad (5.53)$$

$$I_2 = -\frac{4}{\pi^2 R} \int_0^{E_F} dE \frac{1}{2(k_1 + k_2)^2} [k_1 \cos(2k_1 R) + k_2 \cos(2k_2 R)] - 2\sqrt{k_1 k_2} \cos[(k_1 - k_2)R] \quad (5.54)$$

$$\begin{aligned}
 I_2 = & -\frac{\hbar^2}{m^*\pi^2 R} \int_{k_{so}}^{q_F} dq \cos(2qR) \cos(2k_{so}R) \\
 & + \frac{\hbar^2}{m^*\pi^2 R} \int_{k_{so}}^{q_F} dq k_{so} \frac{\sin(2qR) \sin(2k_{so}R)}{q} \\
 & + \frac{\hbar^2}{m^*\pi^2 R} \int_{k_{so}}^{q_F} dq \sqrt{1 - \frac{k_{so}^2}{q^2}} \cos(2qR)
 \end{aligned} \tag{5.55}$$

$$\begin{aligned}
 I = & \frac{\hbar^2}{m^*\pi^2 R} \left[k_{so} \sin(2k_{so}R) SI(2q_F R) - \frac{\cos(2k_{so}R) \sin(2q_F R)}{2R} \right. \\
 & \left. + \int_{k_{so}}^{q_F} dq \sqrt{1 - \frac{k_{so}^2}{q^2}} \cos(2qR) - \int_0^{k_{so}} dq \sqrt{\frac{k_{so}^2}{q^2} - 1} \sin(2qR) \right]
 \end{aligned} \tag{5.56}$$

I a une forme plus compliquée que celle de J et D_y . Il est constitué de quatre termes, la somme des deux premiers termes nous donne $-J$, auquel viennent s'ajouter deux termes sous forme intégrale, le premier terme est une intégrale en $\cos(2qR)$ qui est importante pour de courtes distances et elle est de signe opposé à $\frac{\cos(2k_{so}R) \sin(2q_F R)}{2R}$. Ceci a pour effet d'atténuer considérablement la valeur de I par rapport à celle de J à courte distance. Le deuxième terme est une intégrale en $\sin(2qR)$ qui pour des valeurs faibles de k_{so} est négligeable. Un développement perturbatif en k_{so} montre qu'il est du second ordre en spin-orbite. Si l'on fait tendre k_{so} vers zéro, I tend vers zéro.

5.3. Évaluation numérique des interactions d'échange

Dans cette partie nous avons abandonné l'étude analytique des interactions d'échange pour passer à l'évaluation numérique de J , D et I où nous avons en premier lieu calculé l'évolution de ces trois termes en fonction de la distance entre deux atomes en utilisant l'approximation qui consiste à remplacer G par G_0 dans l'éq 5.23 sans avoir recours à l'expansion asymptotique des fonctions de Hankel, de plus on a utilisé la même approximation faite dans la section. 4.6 pour les déphasages, les paramètres que nous avons utilisé sont ceux de l'or ($\alpha = 0.4\text{eV \AA}$, $m = 0.26m_e$). La Fig. 5.1 montre la compétition entre ces trois interactions pour des distances allant 6 Å à 120 Å. Le terme d'Ising négligé dans la littérature est petit mais non négligable à courte distance et devient aussi important que J et D pour des distances supérieurs à 30Å. On voit également que la signature de l'interaction de spin-orbite présente dans la composante z de l'aimantation (M_z) qui est une inversion de phase des oscillations à des distances

5. Interactions d'échange

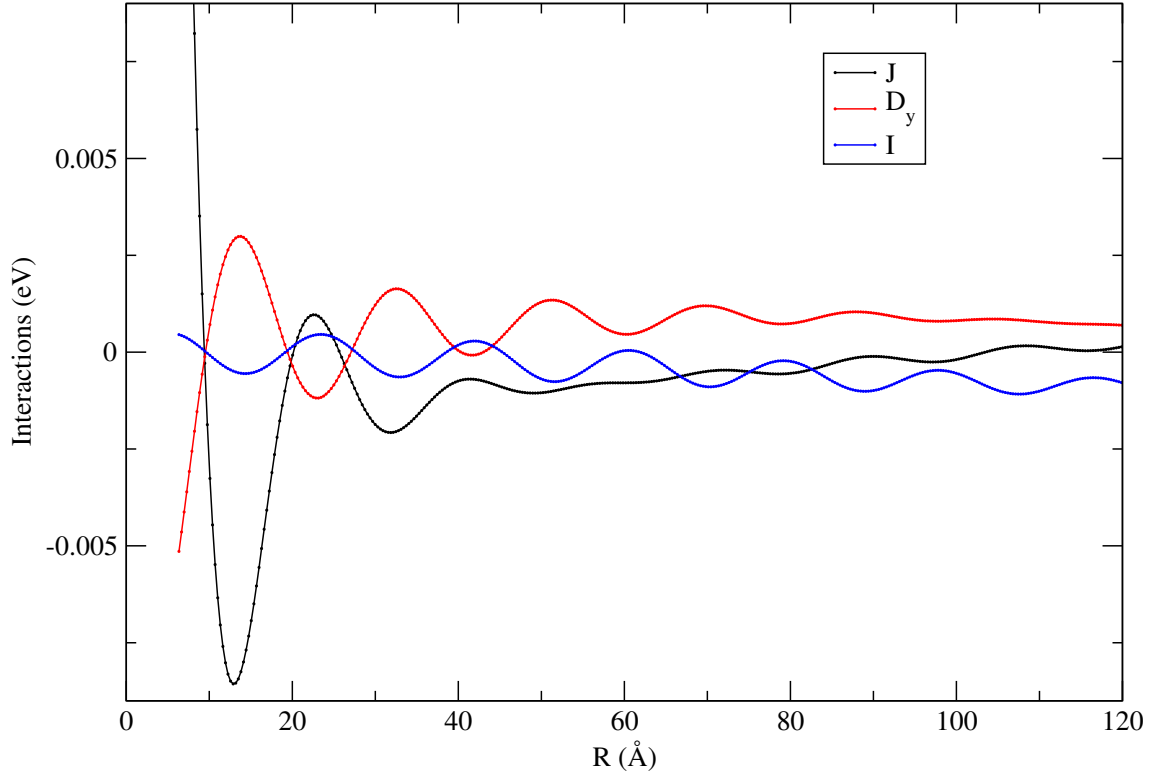


Figure 5.1.: Évolution des interaction d'échange J , D , I en fonction de la distance en considérant l'approxiamtion qui consiste à remplacer G par G_0 dans la formule donnant les interactions d'échange, pour une valeur de $\alpha = 0.4$ eV et $m^* = 0.26m_0$.

de l'ordre de 60 Å est également présente dans l'interaction d'échange isotropique J pour les mêmes distances.

La renormalisation de la fonction de Green est effectuée en utilisant l'éq. 5.20, où la forme de la matrice \mathbf{t} est donnée par l'éq. 4.2 et la dépendance énergétique du déphasage est donnée par l'éq.4.4. Nous avons utilisé les paramètres du Fe pour le calcul numérique, avec un Γ de l'ordre de 0.3 eV et une résonance positionnée au-delà du niveau de Fermi ($E_0 = 544$ meV) pour les spins minoritaires, les spins majoritaires ont été considérés avec un déphasage nul. Ces parmètres ont été choisis afin de simuler la structure électronique d'un adatome de Fe déposé sur la surface Au(111). L'évolution des trois interactions d'échange après la renormalisation est donnée en Fig. 5.2. L'effet principale de la renormalisation est de réduire l'intensité des interactions d'échange, l'inversion de phase qui apparaît dans J se trouve aux mêmes distances (~ 60 Å) que pour le J calculé avec la fonction de Green non renormalisée, preuve que même après renormalization des fonctions de Green cette caratéristique intrinsèque du gaz d'électrons de Rashba reste inchangée. A très longue distance les les intensité de J et D diminuent considérablement, tandis que le terme I oscille autour de zéro pour s'anuller à très grande distance.

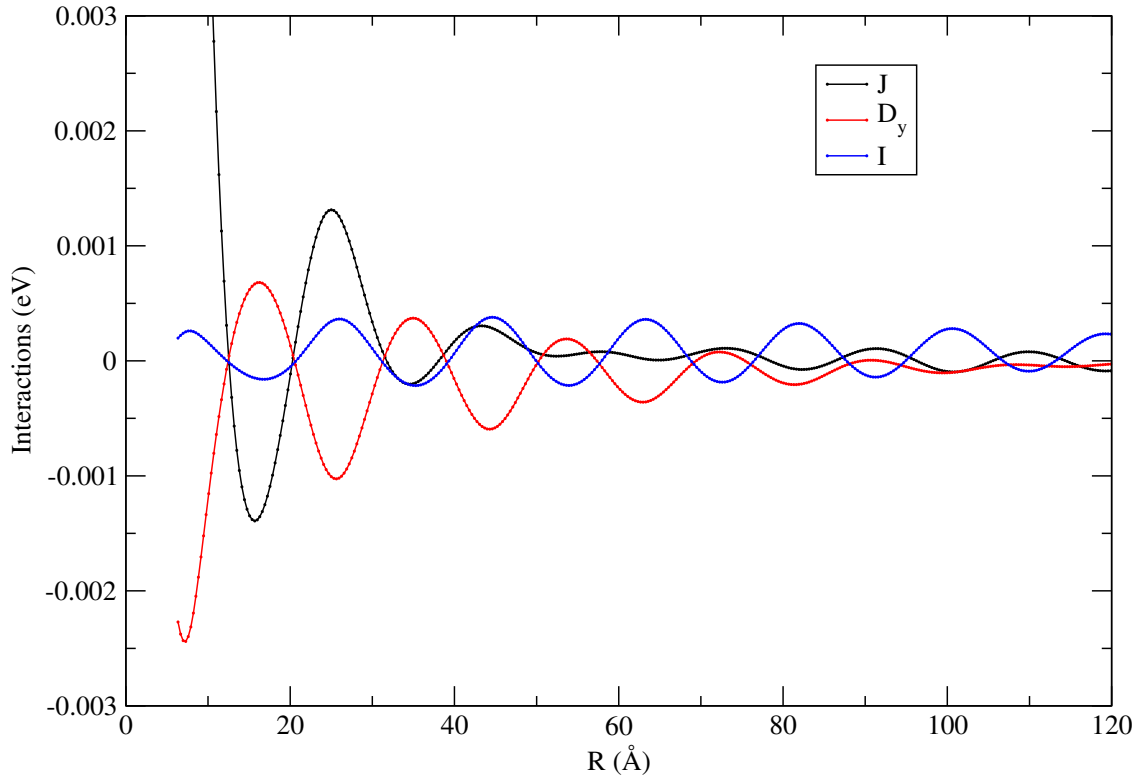


Figure 5.2.: Évolution des interaction d'échange J , D , I en fonction de la distance en considérant les fonction de Green renormalisés pour une valeur de $\alpha = 0.4$ eV et $m^* = 0.26m_0$.

6

Minimisation du modèle de Heisenberg généralisé

6.1. Introduction

Dans ce chapitre nous allons minimiser numériquement le modèle de Heisenberg généralisé du chapitre 4 pour trouver l'état fondamental d'adatoms magnétiques déposés sur une surface caractérisée par un gaz d'électrons bidimensionnel avec couplage spin-orbite (états de surface). La première étude se fera sur un système à deux atomes magnétiques (dimer). En faisant varier les paramètres (J , D , I) en fonction de la distance, puis pour chaque distance nous minimisons numériquement l'Hamiltonien du système. Les résultats de la minimisation numérique donne lieu à deux types de configurations pour les moments magnétiques. On peut alors faire une étude analytique simple pour chaque type de configuration. Puis nous étudierons des structures constituées d'adatoms déposés sur la surface (111) de l'or. Nous considérons des structures où les atomes sont sixièmes voisins sur le réseau de l'or. Nous commencerons par une chaîne linéaire puis on passera à l'étude d'un système à trois atomes magnétiques (trimer) disposés sur un triangle équilatéral. Enfin nous passons à l'étude des chaînes linéaires où les atomes sont quatrièmes voisins, enfin nous étudierons des structures hexagonales avec six et sept atomes. Pour chacune des structures étudiées on ajoute de manière phénoménologique un terme anisotropique ($-K\cos^2(\theta)$) à notre Hamiltonien. Ce terme favorise une orientation des moments magnétiques perpendiculaire au plan. Cette étude a pour but de modéliser le cas réel d'adatoms de Fe sur la surface de l'Au(111).

6.2. Dimer

Le modèle de Heisenberg généralisé dérivé dans le chapitre 4 contient trois contributions, une contribution isotropique (J), un terme (D_y) et un terme d'Ising (I). Ce qui rend la minimisation analytique de ce modèle compliquée, l'Hamiltonien peut être exprimé en fonction des angles (θ_i, φ_i) où θ_i correspond à l'angle que fait le moment i avec l'axe (oz) et φ_i est l'angle que fait la projection du moment i dans le plan (xoy) avec l'axe (ox) :

6. Minimisation du modèle de Heisenberg généralisé

$$\begin{aligned}
H_{ij} = & J [\sin(\theta_i) \sin(\theta_j) \cos(\varphi_i - \varphi_j) + \cos(\theta_i) \cos(\theta_j)] \\
& + D_y [\cos(\theta_i) \cos(\varphi_j) \sin(\theta_j) - \cos(\theta_j) \cos(\varphi_i) \sin(\theta_i)] \\
& + I \sin(\varphi_i) \sin(\varphi_j) \sin(\theta_i) \sin(\theta_j)
\end{aligned} \tag{6.1}$$

Nous avons alors opté pour une minimisation numérique. Pour cela nous utilisons un programme basé sur le calcul des forces qui agissent sur les moments magnétiques. Si ces forces ne sont pas en dessous d'un seuil prédéfini, de nouveaux angles de rotation sont choisis en tenant compte de la direction des forces calculées ultérieurement. Un mixing des angles est considéré et le processus itératif continue jusqu'à ce que les forces soient négligeables. La minimisation numérique étonnement donne lieu à deux types de configurations qui résultent d'une compétition entre les trois interactions $\{J, D_y, I\}$ qui évoluent en fonction de la distance : Une configuration non colinéaire dans le plan contenant les deux impuretés (xoz) qui est défini uniquement par J et D_y et une deuxième configuration où les moments magnétiques sont dans le plan de la surface, ils sont colinéaires et perpendiculaires au plan contenant les deux impuretés. Cette dernière configuration est défini par J et I . Nous allons alors diviser les courbes donnant l'évolution des trois interactions en fonction de la distance en deux phases, une phase colinéaire (C) dans le plan de la surface et une phase non colinéaire (N) dans le plan contenant les deux impuretés voir Fig. 6.1.

6.2.1. Phase non colinéaire

Comme nous l'avons vu ci-dessus, dans la phase non colinéaire les moments magnétiques sont dans le plan (xoz). Le terme en I ne jouera aucun rôle. Dans le cas d'un couplage anti-ferromagnétique les angles $\{\varphi_i, \varphi_j\}$ valent $\{\pi, 0\}$ pour un D_y négatif et $\{0, \pi\}$ pour un D_y positif. Si on considère un D_y négatif alors l'Hamiltonien de l'eq. 6.1 devient :

$$\begin{aligned}
H_{ij} = & J [-\sin(\theta_i) \sin(\theta_j) + \cos(\theta_i) \cos(\theta_j)] \\
& + D_y [\cos(\theta_i) \sin(\theta_j) + \cos(\theta_j) \sin(\theta_i)]
\end{aligned} \tag{6.2}$$

qui peut s'écrire comme :

$$H_{ij} = J \cos(\theta_i + \theta_j) + D_y \sin(\theta_i + \theta_j) \tag{6.3}$$

On constate alors que cette configuration est dégénérée car elle ne dépend pas des angles $\{\theta_i, \theta_j\}$ absolus mais plutôt de leurs somme. nous pouvons alors définir un angle $\theta = \frac{\theta_i + \theta_j}{2}$, H_{ij} est alors exprimé en fonction de θ :

$$H_{ij} = J \cos(2\theta) + D_y \sin(2\theta) \tag{6.4}$$

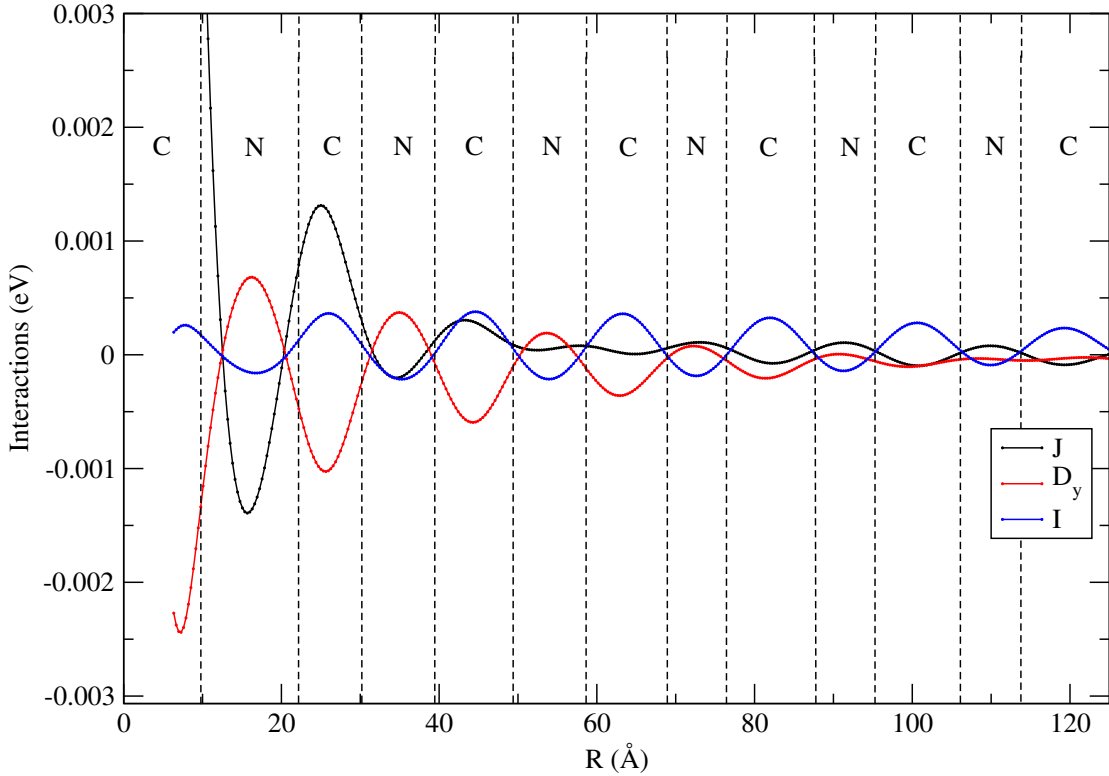


Figure 6.1.: Diagramme de phase qui indique l'orientation des moments magnétiques en fonction de la distance entre deux adatoms. La phase C désigne la phase où les moments magnétiques sont colinéaires et la phase N indique la phase où les moments magnétiques sont non colinéaires.

L'angle qui minimise cet Hamiltonien ($\frac{\partial H}{\partial \theta}|_{\theta=\theta_0} = 0$) est donné par : $\theta_0 = \frac{1}{2} \text{atan} \left(\frac{D_y}{J} \right)$. À l'exception de $D_y = 0$ toutes les configurations colinéaires dans le plan (xoz) sont moins stables que la configuration non colinéaire. Quand on introduit l'anisotropie magnétique, K , dans l'Hamiltonien l'angle qui minimise l'énergie dans cette configuration non colinéaire est donné par $\theta = \frac{1}{2} \text{atan} \left(\frac{D_y}{J+K} \right)$. Selon le signe de K par rapport à J l'anisotropie magnétique aura tendance à augmenter ou à diminuer l'angle θ_0 . Nous avons analysé numériquement l'effet du K ($K = 3$ meV) qui favorise une orientation parallèle des moments magnétiques parallèle à l'axe (oz). Pour un dimer où les atomes sont distants de $d = 10.42$ Å, J vaut 3.45 meV, D_y vaut -0.96 meV et l'angle entre les deux moments ($2\theta_0$) passe de 164° à 171° après considération de l'anisotropie magnétique.

6.2.2. Phase colinéaire

Dans la phase colinéaire les moments magnétiques sont dans la même direction, le terme D_y n'aura aucun effet et l'Hamiltonien de l'éq. 6.1 est donné par :

6. Minimisation du modèle de Heisenberg généralisé

$$H_{ij} = J [\sin(\theta_i) \sin(\theta_j) \cos(\varphi_i - \varphi_j) + \cos(\theta_i) \cos(\theta_j)] \\ + I \sin(\varphi_i) \sin(\varphi_j) \sin(\theta_i) \sin(\theta_j) \quad (6.5)$$

En minimisant cet Hamiltonien par rapport aux angles $\{\theta_i, \theta_j, \varphi_i, \varphi_j\}$ nous obtenons le système d'équation suivants :

$$\frac{\partial H}{\partial \varphi_i} = J \sin(\theta_i) \sin(\theta_j) \sin(\varphi_j - \varphi_i) + I \cos(\varphi_i) \sin(\varphi_j) \sin(\theta_i) \sin(\theta_j) \quad (6.6)$$

$$\frac{\partial H}{\partial \varphi_j} = J \sin(\theta_i) \sin(\theta_j) \sin(\varphi_i - \varphi_j) + I \sin(\varphi_i) \cos(\varphi_j) \sin(\theta_i) \sin(\theta_j) \quad (6.7)$$

$$\frac{\partial H}{\partial \theta_i} = J [\cos(\theta_i) \sin(\theta_j) \cos(\varphi_i - \varphi_j) - \sin(\theta_i) \cos(\theta_j)] \\ + I \sin(\varphi_i) \sin(\varphi_j) \cos(\theta_i) \sin(\theta_j) \quad (6.8)$$

$$\frac{\partial H}{\partial \theta_j} = J [\sin(\theta_i) \cos(\theta_j) \cos(\varphi_i - \varphi_j) - \cos(\theta_i) \sin(\theta_j)] \\ + I \sin(\varphi_i) \sin(\varphi_j) \sin(\theta_i) \cos(\theta_j) \quad (6.9)$$

Les combinaisons $\{\varphi_i, \varphi_j, \theta_i, \theta_j\}$ qui sont solutions du système d'équations précédent (extrema) sont données avec les énergies correspondantes :

$$\left\{ \frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2} \right\} \text{ avec } H = J + I$$

$$\left\{ \frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2} \right\} \text{ avec } H = -J - I$$

$$\left\{ 0, \pi, \frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2} \right\} \text{ avec } H = -J$$

$$\left\{ 0, 0, \frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2} \right\} \text{ avec } H = -J$$

Il faut noter toutefois que les deux dernières solutions, n'ont jamais lieu en tenant compte de la discussion faite dans la section précédente. Si les deux premières solutions ne sont pas vérifiées alors c'est la structure non colinéaire qui est la plus stable. Sinon il y'aura une compétition entre les deux phases magnétiques et selon l'intensité de J , D_y et I , l'état le plus stable sera C ou N (Fig. 6.1). L'effet de l'anisotropie magnétique sur le diagramme de phase de la Fig. 6.1 est de diminuer la taille des domaines de type (C).

6.3. Chaines linéaires

Nous avons considéré plusieurs chaines linéaires, elles présentent toutes les mêmes caractéristiques, ici on discute un exemple où la chaine est constituée de 14 atomes. Nous considérons comme distance entre premiers voisins $d = 10.42 \text{ \AA}$. La constante de couplage isotropique J entre deux atomes premiers voisins favorise un couplage anti-ferromagnétique et vaut en moyenne 7.25 meV , le vecteur de DM est dans le plan de la surface et pointe dans la direction perpendiculaire à la chaine (troisième règle de Moriya). son module vaut en moyenne 1.98 meV entre deux atomes voisins. Nous avons pris en compte l'interaction entre un atome et tous ces voisins de la chaine. On a trouvé alors une spirale avec un angle de rotation de 140° entre les moments premiers voisins. Cet angle est identique à celui que l'on retrouve pour des chaines de longueurs plus faibles. Ceci montre que l'effet des voisins d'ordre supérieure n'est pas tellement important. La combinaison entre J et D est à l'origine du genre de structures obtenues et le terme d'Ising n'a aucun effet apparent dans cette chaine. L'évolution de l'orientation des moments magnétiques le long de la chaine est donnée en Fig. 6.2.

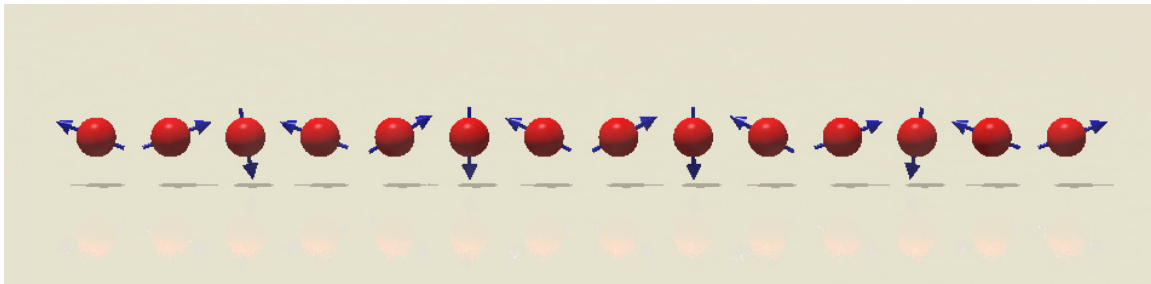


Figure 6.2.: Évolution des moments magnétiques le long d'une chaîne de 14 atomes couplés anti-ferromagnétiquement entre premiers voisins, en présence de l'interaction de DM.

L'effet de l'anisotropie magnétocristalline ($K = 3 \text{ meV}$) sur cette chaîne linéaire est de forcer les moments magnétiques à s'orienter dans la direction parallèle ou anti-parallèle à l'axe (oz), tout en conservant un angle de 140° entre les moments magnétiques.

6.4. Structures compactes

Nous étudions le cas de structures compactes où les atomes sont sixièmes voisins sur la surface (111) de l'or. On choisit la même distance interatomique que celle de la chaîne étudiée dans la section précédente. L'effet du terme d'Ising (I) pour ces structures est négligeable. Nous ajouterons également de manière phénoménologique l'anisotropie magnétocristalline K .

6.4.1. Trimer

Nous étudierons ici le cas d'une structure en forme de triangle équilatérale constituée de trois atomes. La constante d'échange isotropique J vaut 3.32 meV. En premier lieu sans l'interaction de DM vue que J favorise un couplage anti-ferromagnétique, la configuration colinéaire est frustrée et l'état fondamentale de ce trimer est non colinéaire. Les moments magnétiques sont dans le même plan et forment entre eux un angle de 120° . Dans ce plan deux configurations non colinéaires sont dégénérées (moments pointant vers l'extérieur ou vers l'intérieur) voir Fig. 6.3. Si on ajoute à l'Hamiltonien du système un terme de la forme $\text{DM } \vec{D} \cdot (\vec{S}_1 \times \vec{S}_2)$ avec un \vec{D} perpendiculaire au plan contenant les moments magnétiques on lèvera la dégénérescence. Dans notre cas, toutefois, les vecteurs de DM donnés dans le tableau 6.4 sont dans le plan. On choisit un ordre croissant pour les définir entre voisins. La Fig. 6.4.a montre que les moments magnétiques ne sont plus dans le plan alors que la Fig. 6.4.b, qui est une vue de dessus, montre par contre que la projection de ces moments magnétiques selon le plan (xoy) garde la même configuration qu'en absence de l'interaction de DM. Nous pouvons expliquer ces observations par le fait que l'interaction de DM entre les voisins est de même intensité mais de direction différente (voir Fig. 6.5). La seule façon pour le moment magnétique de l'atome 1 de satisfaire ces deux voisins à la fois est de se mettre dans un plan où il fera 120° avec chacun de ces moments magnétiques, par symétrie les moments magnétiques des atomes 2 et 3 feront de même, c'est également avec cette même configuration que l'on satisfait la minimisation de la partie isotropique J . Mais si les moments magnétiques restent dans le plan alors $(\vec{S}_1 \times \vec{S}_2)$ est perpendiculaire à ce plan et la contribution de DM à l'énergie est nulle. Le compromis sera alors de sortir du plan (xoy) pour inclure la contribution du terme DM, ceci dit l'angle entre les moments magnétiques se réduit ce qui aura pour effet de diminuer la contribution isotropique comme si il y'avait une contribution ferromagnétique dans les interactions. L'angle que feront les moments magnétiques avec le plan de la surface (identiques pour les trois moments magnétiques) dépendra du rapport $\frac{D}{J}$. Dans le cas présent J est plus grand que D ce qui fait que les moments magnétiques pointent légèrement au dessus de la surface. L'orientation des moments magnétiques dans le référentiel (oxyz) est donnée par les angles donnés dans le tableau 6.2

| composante | x | y |
|----------------|-------|-------|
| \vec{D}_{12} | 0.00 | -0.96 |
| \vec{D}_{23} | 0.83 | 0.48 |
| \vec{D}_{31} | -0.83 | 0.48 |

Table 6.1.: Composantes des vecteurs de DM pour un trimer dont les atomes sont disposés sur un triangle équilatérale (en meV).

Après avoir ajouté l'anisotropie magnétocristalline ($K = 3$ meV) de manière phénoménologique

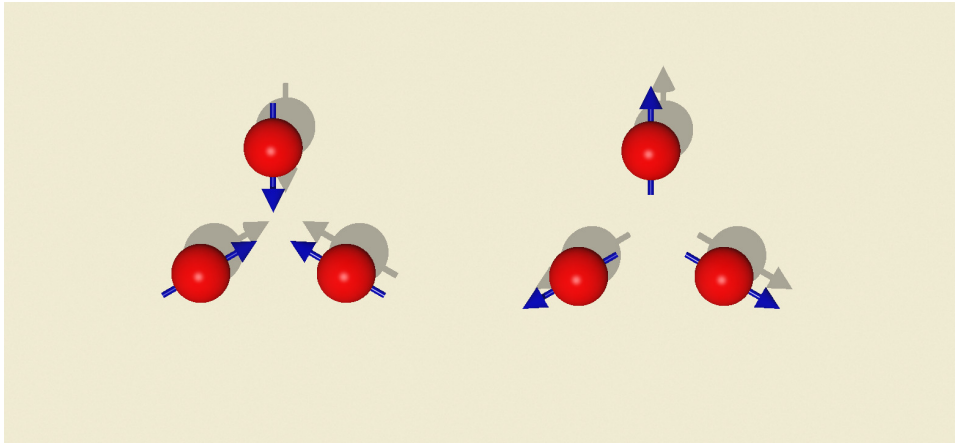


Figure 6.3.: Configurations non colinéaires des moments magnétiques d'un système de trois atomes disposés sur un triangle équilatérale en absence de l'interaction de DM.

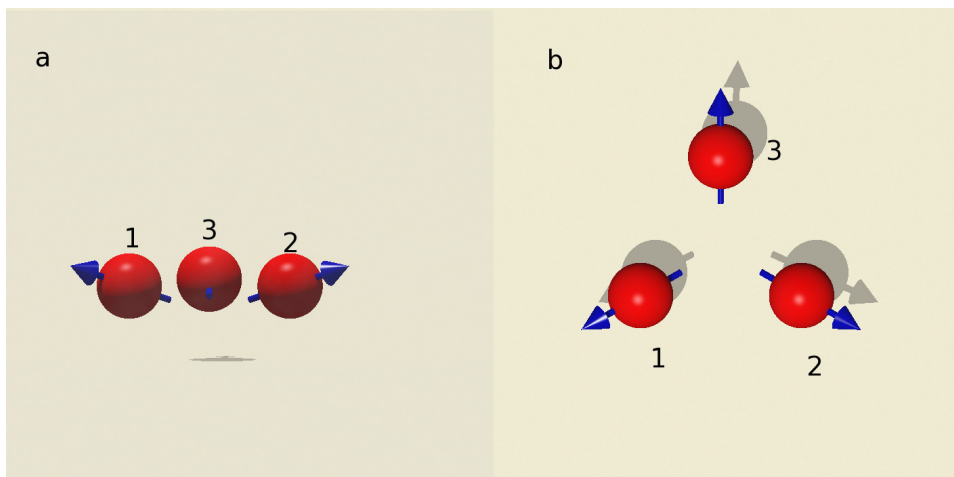


Figure 6.4.: Configuration non colinéaire des moments magnétiques d'un système de trois atomes disposés sur un triangle équilatérale en présence de l'interaction de DM. a) vue de côté du trimer . b) vue de dessus du trimer.

| Atome | θ | φ |
|-------|----------|-----------|
| 1 | 81 | 210 |
| 2 | 81 | 330 |
| 3 | 81 | 90 |

Table 6.2.: Angles (θ , φ) des moments magnétiques du trimer dans le référentiel (oxyz).

6. Minimisation du modèle de Heisenberg généralisé

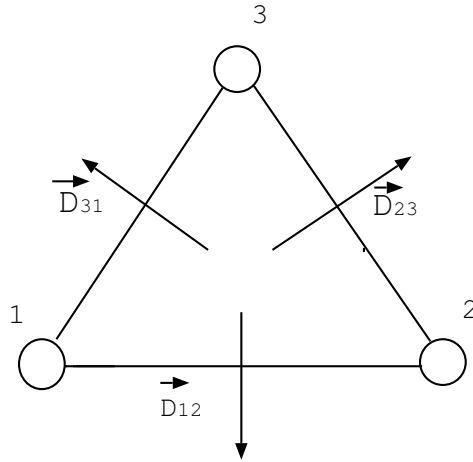


Figure 6.5.: Directions des vecteurs de DM pour un trimer où les atomes sont équidistants.

dans notre Hamiltonien, nous avons vu que les moments magnétiques avaient tendance à s'orienter selon l'axe (oz), l'effet dû à la compétition entre J et D observé dans la Fig.6.4 est dissipé à cause de ce terme supplémentaire. L'angle que font les moments magnétiques avec l'axe (oz) a considérablement diminué passant de 81° à 8° degrés pour deux moments magnétiques couplés ferromagnétiquement et à augmenté vers 172° pour le troisième couplé anti-ferromagnétiquement les deux derniers une vue dessus est montrée en Fig.6.6.

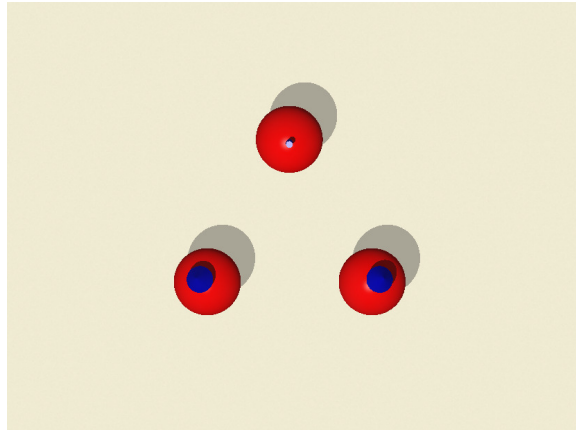


Figure 6.6.: Réorientation des moments magnétiques après avoir ajouté à l'Hamiltonien un terme supplémentaire qui tient compte de l'anisotropie magnétocristalline.

6.4.2. Structure hexagonale à six atomes

Après avoir considéré un système de trois atomes. On s'intéresse ici à un hexagone. La configuration de l'état fondamental est donnée par la Fig. 6.7. L'interaction d'échange isotropique entre premiers voisins J vaut 5.62 meV. La symétrie de l'hexagone fait que l'interaction de DM avec les seconds voisins soit nulle, quand à l'interaction au troisièmes voisins elle est négligeable ($|\vec{D}| = 0.125$ meV) devant celle des premiers voisins. La Fig. 6.8.a montre les projections des moments magnétiques sur le plan de la surface alors que la Fig. 6.8.b montre les projections des moments magnétiques sur l'axe (oz). Le couplage est anti-ferromagnétique entre premiers voisins pour les deux types de projections, mais l'orientation du moment magnétique est telle que ce dernier soit contenu dans le plan perpendiculaire à la surface et passant par le centre de l'hexagone, en effet ceci peut se comprendre en analysant les vecteurs de DM entre premiers voisins donnés en Fig. 6.8.c. Si nous prenons le moment magnétique de l'atome 1, il interagit avec les moments magnétiques des atomes 2 et 6 avec des vecteurs de DM d'intensités identiques pointant dans deux directions différentes mais pour avoir une contribution énergétique maximale de DM le moment magnétique de l'atome 6 il doit se placer dans le même plan que celui de l'atome 1, il en va de même avec le moment magnétique de l'atome 2 donc le compromis pour l'atome 1 est de se mettre dans le plan perpendiculaire à la surface et passant par le centre de l'hexagone. Puisque tous les atomes sont équivalents nous obtenons un comportement similaire pour tous les moments. Les angles des moments magnétiques par rapport au référentiel (oxy) sont donnés dans le tableau. 6.3.

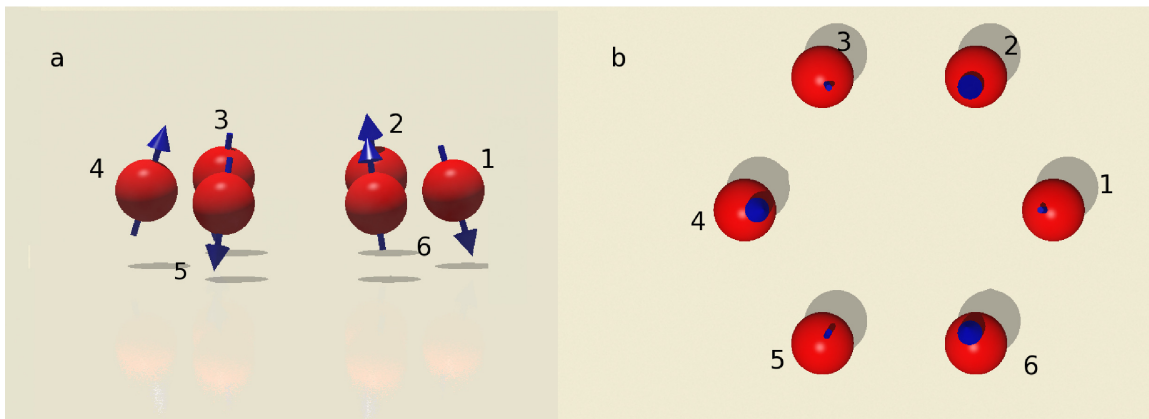


Figure 6.7.: Configuration de l'état fondamental d'un système de six atomes sur un hexagone.a) Vue de côté . b) Vue de dessus.

L'effet de l'anisotropie magnétocristalline sur cette structure est de réduire l'angle que font les moments magnétiques avec l'axe (oz) de 16° à 9° pour les moments magnétiques dont la composante est selon l'axe (oz) est positive et d'augmenter l'angle de 164° à 171° pour les moments magnétiques dont la composante selon l'axe (oz) est négative. L'effet de K comme attendu est de favoriser l'alignement des moments

6. Minimisation du modèle de Heisenberg généralisé

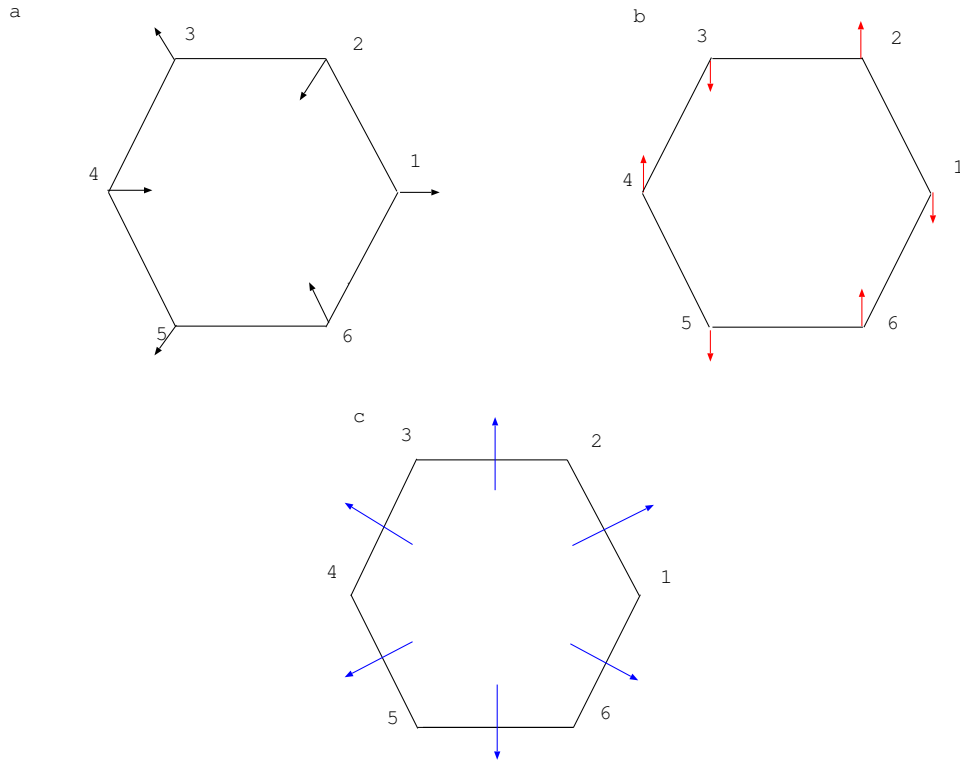


Figure 6.8.: a) Projection des moments magnétiques dans le plan de la surface .b) projections des moments magnétiques sur l'axe (oz) .c) Vecteurs de DM entre premiers voisins.

| Atome | θ | φ |
|-------|----------|-----------|
| 1 | 164 | 0 |
| 2 | 16 | 240 |
| 3 | 164 | 120 |
| 4 | 16 | 0 |
| 5 | 164 | 240 |
| 6 | 16 | 120 |

Table 6.3.: Angles (θ , φ) des moments magnétiques un système de six atomes placé sur un hexagone.

magnétiques parallèlement à l'axe (oz).

6.4.3. Structure hexagonale à sept atomes

Nous ajoutons à la structure hexagonale étudiée dans la section précédente un atome au centre, cet atome contrairement aux atomes situés sur l'hexagone à six voisins. La configuration de l'état fondamental des moments magnétiques pour cette structure est

| composante | x | y |
|----------------|-------|-------|
| \vec{D}_{12} | 1.43 | 0.82 |
| \vec{D}_{23} | 0.00 | 1.64 |
| \vec{D}_{34} | -1.43 | 0.82 |
| \vec{D}_{34} | -1.43 | -0.82 |
| \vec{D}_{34} | 0.00 | -1.64 |
| \vec{D}_{34} | 1.43 | -0.82 |

Table 6.4.: Composantes des vecteurs de DM entre premiers voisins pour un système de six atomes disposés sur un hexagone (en meV).

donnée en Fig. 6.9, la constante d'échange isotropique J entre premiers voisins est de 4.70 meV. Pour analyser cette structure une étude au premiers voisins suffit. En effet le fait de rajouter le moment centrale crée une situation de frustration forte comme celle du trimer. Il s'orientera alors dans l'un des trois plans équivalents perpendiculaires à la surface et passant par le centre de l'hexagone et contenant ces deux voisins, Il obtient alors un contribution maximale du terme DM avec les deux moments magnétiques qui sont contenus dans le même plan, les quatre autres moments n'auront que la possibilité de faire des rotations dans l'espace pour avoir une contribution plus importante de l'interaction DM avec le moment centrale donnant ainsi une structure complètement différente de celle observée avec la structure contenant 6 atomes de la section précédente. La projection des moments magnétiques dans le plan de la surface est donnée en Fig. 6.10.a, ainsi qu'une projection selon l'axe (oz) dans la Fig. 6.10.b. Les vecteurs de DM entre premiers voisins sont donnés dans la Fig. 6.10.c, alors que leurs composantes sont données dans le tableau. 6.5. Les angles des moments magnétiques dans le référentiel (oxyz) sont donnés dans le tableau. 6.6.

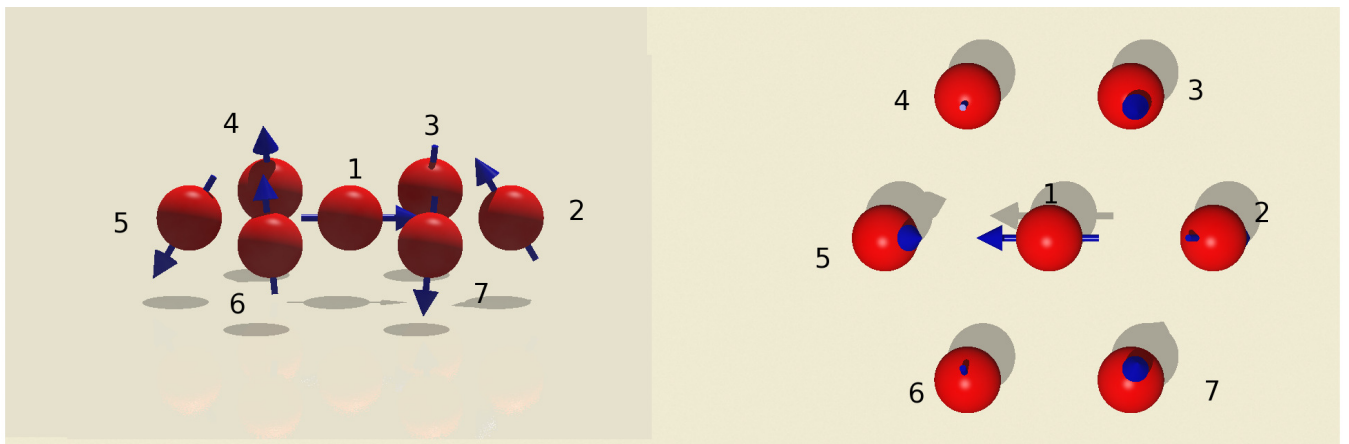


Figure 6.9.: Configuration de l'état fondamental d'un système de sept atomes disposés sur un hexagone. a) Vue de coté. b) Vue de dessus.

6. Minimisation du modèle de Heisenberg généralisé

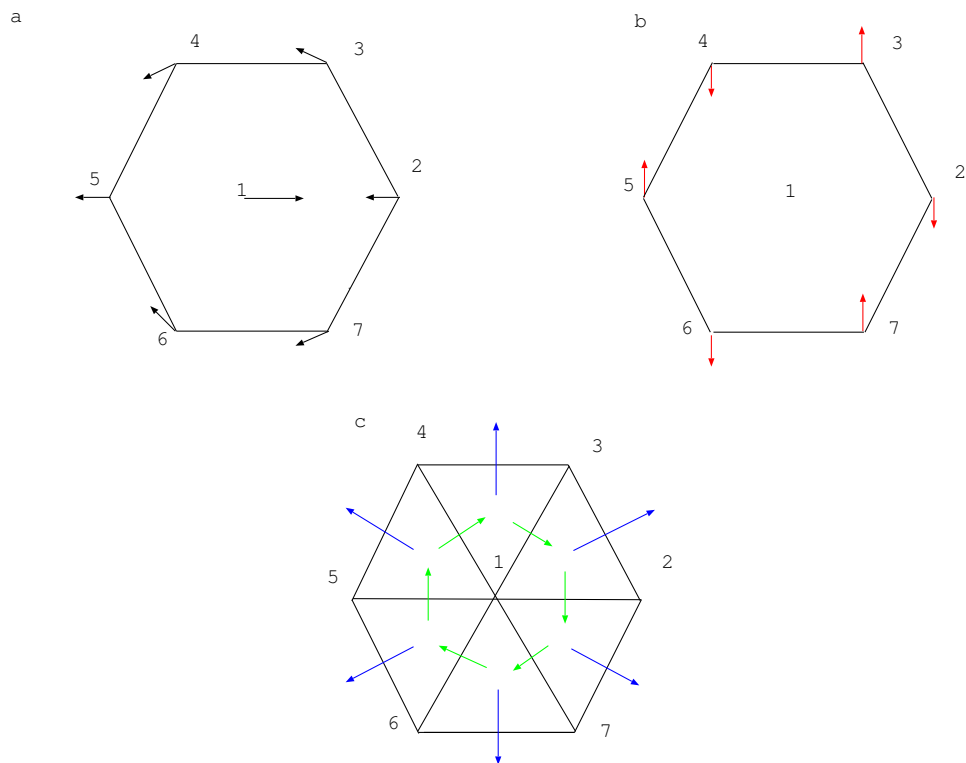


Figure 6.10.: a) Projection des moments magnétiques dans le plan de la surface. b) projections des moments magnétiques sur l'axe z. c) Vecteurs de DM entre premiers voisins.

L'effet principale de l'anisotropie magnétocristalline ($K = 3 \text{ meV}$) est de faire tourner le moment magnétique de l'atome central pour qu'il pointe dans la direction de l'axe (oz) sans pour autant affecter l'orientation des moments magnétiques des autres atomes. L'anisotropie magnétocristalline a permis au moment magnétique de sortir du plan car elle a réduit la frustration à laquelle l'atome du centre est soumis. Une vue de dessus de la structure est donnée en Fig. 6.11.

| composante | x | y |
|----------------|-------|-------|
| \vec{D}_{12} | 0.00 | -1.35 |
| \vec{D}_{13} | 1.18 | -0.69 |
| \vec{D}_{14} | 1.18 | 0.69 |
| \vec{D}_{15} | 0.00 | 1.35 |
| \vec{D}_{16} | -1.18 | 0.69 |
| \vec{D}_{17} | -1.18 | -0.69 |
| \vec{D}_{23} | 1.17 | 0.68 |
| \vec{D}_{34} | 0.00 | 1.35 |
| \vec{D}_{45} | -1.17 | 0.68 |
| \vec{D}_{56} | -1.17 | -0.68 |
| \vec{D}_{67} | 0.00 | -1.35 |
| \vec{D}_{72} | 1.17 | -1.35 |

Table 6.5.: Composantes des vecteurs de DM entre premiers voisins pour un système de sept atomes disposés sur un hexagone (en meV).

| Atome | θ | φ |
|-------|----------|-----------|
| 1 | 90 | 180 |
| 2 | 150 | 0 |
| 3 | 15 | 290 |
| 4 | 165 | 68 |
| 5 | 30 | 0 |
| 6 | 165 | 290 |
| 7 | 15 | 68 |

Table 6.6.: Angles (θ , φ) des moments magnétiques un système de sept atomes placés sur un hexagone.

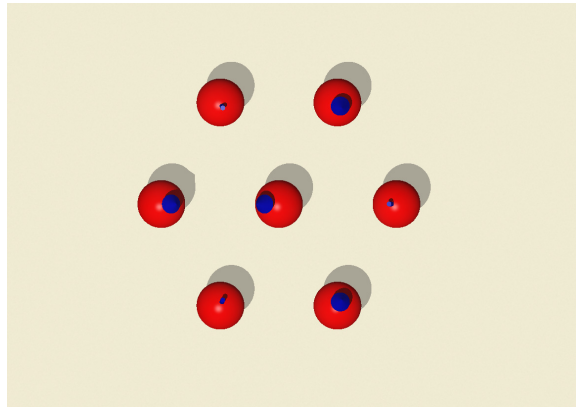


Figure 6.11.: Vue de dessus Configuration de l'état fondamental d'un système de sept atomes disposés sur un hexagone en présence d'anisotropie magnétocristalline ($K = 3$ meV).

7

Conclusion

Le but de ce mémoire a été d'étudier le tenseur d'interactions d'échange entre deux atomes magnétiques et plus précisément, les interactions de type Dzyaloshinskii-Moriya. Celles-ci sont très importantes car donnant naissance aux chiralités magnétiques, i.e. une préférence dans le sens d'orientation des moments magnétiques. Elles sont l'ingrédient principale pour la création des structures skyrmioniques qui sont énormément étudiées expérimentalement ainsi que théoriquement, notamment avec les méthodes ab-initio. Nous avons choisi d'étudier ces interactions avec un modèle simple afin de pouvoir analysé analytiquement et numériquement leurs propriétés. Le modèle consiste à déposer des atomes magnétiques sur une surface non-magnétique caractérisée par un état électronique de surface où les électrons sont confinés et se comportent comme un gaz d'électrons libres à deux dimensions mais soumis à un couplage spin-orbite. Ce gaz d'électrons, appelé gaz de Rashba, subit alors une levée de dégénérescence de spin dans sa courbe de dispersion ce qui aura un impact important sur les interactions magnétiques des adatoms. Après avoir analysé les propriétés de l'Hamiltonien de Rashba, nous avons déterminé la fonction de Green correspondante. Cette dernière permet d'étudier notre système avec de la théorie de la diffusion.

Avec l'outil des fonctions de Green nous avons évalué la charge et l'aimantation induite autour des adatoms ainsi que le tenseur d'interactions d'échange. Nous avons déterminé que l'aimantation induite est non-colinéaire et qu'elle peut être décomposée en une combinaison linéaire d'ondes skyrmioniques ayant des chiralités différentes. Les interactions d'échange sont obtenues suivant différentes approximations, en utilisant comme fonction de Green celle du gaz d'électrons libres (équivalente au modèle RKKY généralement utilisé) ou les fonctions de Green renormalisées par la présence des impuretés. Nous avons découvert un effet d'atténuation des interactions d'échange à des distances de l'ordre de la longueur d'onde caractéristique du paramètre de l'interaction de spin-orbite de la surface (dans notre cas la surface de Au(111)). Aussi, en plus de l'interaction de Dzyaloshinskii-Moriya, nous avons mis en évidence l'apparition d'un terme supplémentaire, dit d'Ising. Ces deux interactions oscillent avec la distance et peuvent être aussi importantes que l'interaction d'échange isotropique. Aussi, grâce à la forme analytique du tenseur d'interaction d'échange, nous avons relié le comportement de l'interaction isotropique à l'aimantation du gaz d'électrons selon l'axe (oz) alors que l'interaction de Dzyaloshinskii-Moriya est proportionnelle à l'aimantation

7. Conclusion

projetée sur la surface, en d'autres termes, le couple d'interactions (J, D) est relié à la combinaison linéaire des structures skyrmioniques observées dans les gaz de Rashba. Il est intéressant de noter que dans le cas des dimers, l'état le plus stable oscille avec la distance interatomique entre un état colinéaire où les deux moments sont dans le plan de la surface et un état non-colinéaire où les deux moments sont dans le plan perpendiculaire à la surface et contenant les deux adatoms. L'état le plus stable est déterminé par l'intensité des composantes du tenseur d'interactions d'échange.

Nous avons appliqué notre méthode sur des trimers, des chaînes et des structures hexagonales où nous avons mis en évidence la présence des structures magnétiques chirales où la forte compétition des interactions magnétiques donne naissance à des structures magnétiques intéressantes. Nous avons modélisé la structure électronique des adatoms en s'inspirant des résultats obtenus avec des calculs ab-initio pour le Fe/Au(111). Finalement, nous avons évalué l'impact de l'anisotropie magnétique en rajoutant un terme phénoménologique au modèle de Heisenberg qui favorise une orientation perpendiculaire à la surface (cas du Fe/Au(111)). Cette anisotropie magnétique a tendance à réduire l'angle de rotation entre les moments magnétiques des premiers voisins de telle sorte que le maximum des moments magnétiques soient orientés perpendiculairement à la surface.

Nous voulons appliquer ce modèle à des structures contenant un nombre élevé d'atomes (corrales, structure large compacte) afin d'étudier l'émergence de structures skyrmioniques. L'avantage des interactions à longue distance, est que nous pouvons passer d'une phase magnétique à une autre juste en changeant la distance interatomique. Aussi il est important de préciser qu'aujourd'hui avec la microscopie électronique à effet tunnel, on peut mesurer les interactions d'échange entre deux atomes séparés par de longues distances (et non pas lorsque les atomes sont premiers voisins) et on peut construire les nanostructures que nous avons proposé sans trop de difficultés. Nos prédictions sont donc vérifiables expérimentalement. Dans l'avenir proche, nous voulons évaluer l'impact du couplage spin-orbite sur la résistivité résiduelle de nos adatoms magnétiques.



Appendice 1

Dans cette appendice, on évalue les intégrants dans les deux régions où la fonction de Green est définie pour le calcul des interactions d'échange.

Région 1:

$$G_D^2 = -\frac{m^{*2}}{4\hbar^2(k_1 + k_2)^2} [k_1^2 H_0^2(k_1 R) + k_2^2 H_0^{*2}(|k_2| R) - 2k_1 k_2 H_0(k_1 R) H_0^*(|k_2| R)] \quad (\text{A.1})$$

$$G_{ND}^2 = -\frac{m^{*2}}{4\hbar^2(k_1 + k_2)^2} [k_1^2 H_1^2(k_1 R) + k_2^2 H_1^{*2}(|k_2| R) - 2k_1 k_2 H_1(k_1 R) H_1^*(|k_2| R)] \quad (\text{A.2})$$

$$G_D G_{ND} = -\frac{m^{*2}}{4\hbar^2(k_1 + k_2)^2} [k_1 H_0(k_1 R) H_1(k_1 R) - k_1 k_2 H_1^*(|k_2| R) H_0(k_1 R) - k_1 k_2 H_0^*(|k_2| R) H_1(k_1 R) + k_2^2 H_1^*(|k_2| R) H_0^*(|k_2| R)] \quad (\text{A.3})$$

Région 2:

$$G_D^2 = -\frac{m^{*2}}{4\hbar^2(k_1 + k_2)^2} [k_1^2 H_0^2(k_1 R) + k_2^2 H_0^2(k_2 R) + 2k_1 k_2 H_0(k_1 R) H_0(k_2 R)] \quad (\text{A.4})$$

$$G_{ND}^2 = -\frac{m^{*2}}{4\hbar^2(k_1 + k_2)^2} [k_1^2 H_1^2(k_1 R) + k_2^2 H_1^2(k_2 R) - 2k_1 k_2 H_1(k_1 R) H_1(k_2 R)] \quad (\text{A.5})$$

$$G_D G_{ND} = -\frac{m^{*2}}{4\hbar^2(k_1 + k_2)^2} [k_1^2 H_0(k_1 R) H_1(k_1 R) - k_1 k_2 H_0(k_1 R) H_1(k_2 R) + k_1 k_2 H_1(k_1 R) H_0(k_2 R) - k_2^2 H_0(k_2 R) H_1(k_2 R)] \quad (\text{A.6})$$

A. Appendice 1

En utilisant l'expansion asymptotique des fonctions de Hankel à longue distance qui sont données par :

$$H_0(x) \simeq \sqrt{\frac{2}{\pi x}} e^{i(x - \frac{\pi}{4})} \quad (\text{A.7})$$

$$H_1(x) \simeq \sqrt{\frac{2}{\pi x}} e^{i(x - \frac{3\pi}{4})} \quad (\text{A.8})$$

on obtient des expressions simplifiées pour G_D^2 et G_{ND}^2 ::

Région 1:

$$G_D^2 = \frac{im^{*2}}{2\hbar^2(k_1 + k_2)^2\pi R} [k_1 e^{2ik_1R} - |k_2| e^{-2i|k_2|R}] - \frac{m^{*2}}{2\hbar^2(k_1 + k_2)^2\pi R} \sqrt{k_1|k_2|} e^{(k_1 - |k_2|)R} \quad (\text{A.9})$$

$$G_{ND}^2 = -\frac{im^{*2}}{2\hbar^2(k_1 + k_2)^2\pi R} [k_1 e^{2ik_1R} - |k_2| e^{-2i|k_2|R}] - \frac{m^{*2}}{2\hbar^2(k_1 + k_2)^2\pi R} \sqrt{k_1|k_2|} e^{(k_1 - |k_2|)R} \quad (\text{A.10})$$

$$G_D G_{ND} = \frac{m^{*2}}{2\hbar^2(k_1 + k_2)^2\pi R} [k_1 e^{2ik_1R} + |k_2| e^{-2i|k_2|R}] \quad (\text{A.11})$$

Région 2:

$$G_D^2 = \frac{im^{*2}}{2\hbar^2(k_1 + k_2)^2\pi R} [k_1 e^{2ik_1R} + k_2 e^{2ik_2R} + 2\sqrt{k_1k_2} e^{i(k_1+k_2)R}] \quad (\text{A.12})$$

$$G_{ND}^2 = -\frac{im^{*2}}{2\hbar^2(k_1 + k_2)^2\pi R} [k_1 e^{2ik_1R} + k_2 e^{2ik_2R} - 2\sqrt{k_1k_2} e^{i(k_1+k_2)R}] \quad (\text{A.13})$$

$$G_D G_{ND} = \frac{m^{*2}}{2\hbar^2(k_1 + k_2)^2\pi R} [k_1 e^{2ik_1R} - k_2 e^{2ik_2R}] \quad (\text{A.14})$$

D'après les expressions ci-dessus la termes G_D et G_{ND} ont des comportement différents pour les deux régions 1 et 2, il en va de même pour G_D^2 et G_{ND}^2 , mais il se trouve que pour la somme ($G_D^2 + G_{ND}^2$) et le produit $G_D G_{ND}$, le comportement est le même pour les 2 régions. Cela est vérifiable en remplaçant $|k_2|$ par $-k_2$ dans la région 1, nous aurons un seul intégrant entre E_R et E_F pour les constantes d'échange J et D . I sera donné par la somme de deux intégrales ayant des intégrants différents dans les deux régions.

B

Appendice 2

Dans cette appendice, on calculera la trace qui apparaît dans l'éq. 5.37, et on prendra le cas particulier où l'angle β défini au chapitre 4 est égale à zéro. On pose :

$$\text{Tr}[\mathbf{X}] = \text{Tr}[(\vec{e}_i \cdot \vec{\sigma})(G_D \sigma_0 - iG_{ND}(\cos \beta \sigma_y - \sin \beta \sigma_x)) (\vec{e}_j \cdot \vec{\sigma})(G_D \sigma_0 + iG_{ND}(\cos \beta \sigma_y - \sin \beta \sigma_x))] \quad (\text{B.1})$$

$$\begin{aligned} \text{Tr}[\mathbf{X}] = & \text{Tr}[(\vec{e}_i \cdot \vec{\sigma})(\vec{e}_j \cdot \vec{\sigma})] G_D^2 \\ & + \text{Tr}[(\vec{e}_i \cdot \vec{\sigma})(\vec{e}_j \cdot \vec{\sigma}) \sigma_y] iG_D G_{ND} \cos \beta \\ & + \text{Tr}[(\vec{e}_i \cdot \vec{\sigma})(\vec{e}_j \cdot \vec{\sigma}) \sigma_y] iG_D G_{ND} \cos \beta \\ & + \text{Tr}[(\vec{e}_i \cdot \vec{\sigma})(\vec{e}_j \cdot \vec{\sigma}) \sigma_y] iG_D G_{ND} \cos \beta \\ & - \text{Tr}[(\vec{e}_i \cdot \vec{\sigma})(\vec{e}_j \cdot \vec{\sigma}) \sigma_x] iG_D G_{ND} \sin \beta \\ & - \text{Tr}[(\vec{e}_i \cdot \vec{\sigma}) \sigma_y (\vec{e}_j \cdot \vec{\sigma})] G_D G_{ND} \cos \beta \\ & + \text{Tr}[(\vec{e}_i \cdot \vec{\sigma}) \sigma_y (\vec{e}_j \cdot \vec{\sigma}) \sigma_y] G_{ND}^2 \cos^2 \beta \\ & - \text{Tr}[(\vec{e}_i \cdot \vec{\sigma}) \sigma_y (\vec{e}_j \cdot \vec{\sigma}) \sigma_x] G_{ND}^2 \cos \beta \sin \beta \\ & + \text{Tr}[(\vec{e}_i \cdot \vec{\sigma}) \sigma_x (\vec{e}_j \cdot \vec{\sigma})] iG_D G_{ND} \sin \beta \\ & - \text{Tr}[(\vec{e}_i \cdot \vec{\sigma}) \sigma_x (\vec{e}_j \cdot \vec{\sigma}) \sigma_y] G_{ND}^2 \cos \beta \sin \beta \\ & - \text{Tr}[(\vec{e}_i \cdot \vec{\sigma}) \sigma_x (\vec{e}_j \cdot \vec{\sigma}) \sigma_x] G_{ND}^2 \sin^2 \beta \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Pour calculer les traces qui apparaissent ci dessus, nous utiliserons certaines propriétés connues des matrices de Pauli $\{\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z\}$:

$$\text{Tr} \sigma_i = 0 \quad (\text{B.3})$$

$$(\vec{A} \cdot \vec{\sigma})(\vec{B} \cdot \vec{\sigma}) = (\vec{A} \cdot \vec{B}) \sigma_0 + i(\vec{A} \times \vec{B}) \cdot \vec{\sigma} \quad (\text{B.4})$$

\vec{A} et \vec{B} étant deux vecteurs quelconques.

B. Appendice 2

Nous obtenons alors les relations suivantes :

$$\text{Tr}[(\vec{e}_i \cdot \vec{\sigma})(\vec{e}_j \cdot \vec{\sigma})] = 2 (\vec{e}_i \cdot \vec{e}_j) \quad (\text{B.5})$$

$$\text{Tr}[(\vec{e}_i \cdot \vec{\sigma})(\vec{e}_j \cdot \vec{\sigma}) \sigma_\alpha] = 2i (\vec{e}_i \times \vec{e}_j)_\alpha \quad (\text{B.6})$$

$$\text{Tr}[(\vec{e}_i \cdot \vec{\sigma}) \sigma_\alpha (\vec{e}_j \cdot \vec{\sigma})] = -2i (\vec{e}_i \times \vec{e}_j)_\alpha \quad (\text{B.7})$$

$$\text{Tr}[(\vec{e}_i \cdot \vec{\sigma}) \sigma_\alpha (\vec{e}_j \cdot \vec{\sigma}) \sigma_\beta] = 2 [e_i^\alpha - \vec{e}_i \cdot \vec{e}_j \delta_{\alpha,\beta} + e_i^\alpha e_j^\beta] \quad (\text{B.8})$$

Alors

$$\begin{aligned} \text{Tr}[\mathbf{X}] = & 2 \vec{e}_i \cdot \vec{e}_j (G_0^2 + G_1^2) - 4 (\vec{e}_i \times \vec{e}_j)_x i G_D G_{ND} \sin \beta \\ & - 4 (\vec{e}_i \times \vec{e}_j)_y G_D G_{ND} \cos \beta + 4 e_i^y e_j^y G_{ND}^2 \cos^2 \beta \\ & + 4 e_i^x e_j^x G_{ND}^2 \sin^2 \beta - 2 (e_i^x e_j^y + e_i^y e_j^x) G_{ND}^2 \sin \beta \cos \beta \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

Si on suppose que les adatoms sont disposés selon l'axe (ox). L'angle β est alors égale à zéro et nous obtenons une forme simplifiée :

$$\text{Tr}[\mathbf{X}] = 2 \vec{e}_i \cdot \vec{e}_j (G_D^2 - G_{ND}^2) - 4 G_D G_{ND} (\vec{e}_i \times \vec{e}_j)_y + 4 G_{ND}^2 e_i^y e_j^y \quad (\text{B.10})$$

Bibliography

- [1] U. K. Rößler, A. N. Bogdanov, and C. Pfleiderer. “Spontaneous skyrmion ground-states in magnetic metals.” *Nature* **442**, 797 (2006)
- [2] I. E. Dzyaloshinskii. “Termodinamicheskaya teoriya slabogo ferromagnetizma antiferromagnetikov.” *Sov. Phys. JETP* **5**, 1259 (1957); T. Moriya. “Anisotropic superexchange and weak ferromagnetism.” *Phys. Rev.* **120**, 91 (1960)
- [3] A. Fert and P. M. Levy. “Role of Anisotropic Exchange Interactions in Determining the Properties of Spin-Glasses.” *Phys. Rev. Lett.* **44**, 1538 (1980)
- [4] S. Mhlbauer, B. Binz, F. Jonietz, C. Pfleiderer, A. Rosch, A. Neubauer, R. Georgii, P. Böni, “Skyrmion lattice in a chiral magnet.” *Science* **323**, 915 (2009)
- [5] K. von Bergmann, S. Heinze, M. Bode, E. Y. Vedmedenko, G. Bihlmayer, S. Blügel, and R. Wiesendanger. “Observation of a Complex Nanoscale Magnetic Structure in a Hexagonal Fe Monolayer.” *Phys. Rev. Lett.* **96**, 167203 (2006)
- [6] S. Heinze, K. von Bergmann, M. Menzel, J. Brede, A. Kubetzka, R. Wiesendanger, G. Bihlmayer, and S. Blügel. “Spontaneous atomic-scale magnetic skyrmion lattice in two dimensions.” *Nature Physics* **7**, 713 (2011)
- [7] A. Fert, V. Cros, J. Sampaio. “Skyrmions on the track.” *Nature Nanotechnology* **8**, 152 (2013).
- [8] T. Schulz, R. Ritz, A. Bauer, M. Halder, M. Wagner, C. Franz, and C. Peiderer. “Emergent electrodynamics of skyrmions in a chiral magnet” *Nature Physics* **8**, 301 (2012)
- [9] S. Lounis, A. Bringer, and S. Blügel. “Magnetic adatom induced skyrmion-like spin texture in surface electron waves.” *Phys. Rev. Lett.* **108**, 207202 (2012)
- [10] A. A. Khajetoorians, J. Wiebe, B. Chiliann, S. Lounis, S. Blügel, and R. Wiesendanger. “Atom-by-atom engineering and magnetometry of tailored nanomagnets.” *Nature Physics* **8**, 497 (2012)
- [11] E. I. Rashba. “Svoistva poluprovodnikov s petlei ekstremumov. I. Tsiklotronnyi i kombinirovannyi rezonans v magnitnom pole, perpendikulyarnom ploskosti petli, Fizika tverd. tela.” *Sov. Phys. Solid State* **2**, 1109 (1960)

Bibliography

- [12] S. LaShell, B. A. McDougall, and E. Jensen. “Spin Splitting of an Au(111) Surface State Band Observed with Angle Resolved Photoelectron Spectroscopy.” *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3419 (1996)
- [13] M. Hasan, C. Kane, Colloquium: “Topological insulators” . *Rev. Mod. Phys.* **82**, 3045 (2010)
- [14] M. Heide, G. Bihlmayer, Ph. Mavropoulos, A. Bringer and S. Bluegel “Spin Orbit Driven Physics at Surfaces.” *Psik-Newsletter* (2007)
- [15] M. Abramowitz and I. Stegun. “ Handbook of Mathematical Functions. ” (1964)
- [16] Yu. M. Koroteev, G. Bihlmayer, J. E. Gayone, E. V. Chulkov, S. Blügel, P. M. Echenique and Ph. Hofmann “Strong Spin-Orbit Splitting on Bi Surfaces.” *Phys. Rev. Lett.* **93**, 046403 (2004)
- [17] L. Petersen, P. Hedegård. “A simple tight-binding model of spin-orbit splitting of sp-derived surface states.” *Surf. Sci.* **459**, 49 (2000)
- [18] J. D. Walls, and E. J. Heller. “SpinOrbit Coupling Induced Interference in Quantum Corrals.” *nanoleters* **7**, 3377-3382 (2007)
- [19] H. Asonen and M. Pessa. “Observation of a Tamm-Type State on $Cu_{0.9} Al_{0.1}$ (100) Surface: Disorder Effects and Bulk Electronic Structure of an Alloy.” *Phys. Rev. Lett.* **46**, 1696 (1981)
- [20] S. A. Lindgren and L. Walldén, *Surface Science* **89**, 319 (1979)
- [21] U. K. Rößler, A. N. Bogdanov, and C. Pfleiderer, “Spontaneous skyrmion ground states in magnetic metals”. *Nature* **442**, 797-801 (2006); U. K. Rößler, U. K., Leonov, A. A., Bogdanov, A. N. Chiral Skyrmionic matter in non-centrosymmetric magnets. *Journal of Physics: Conference Series* **303**, 012105 (2011)
- [22] M. A. Ruderman, C. Kittel “Indirect exchange coupling of nuclear magnetic moments by conduction electrons.” *Phys. Rev.* **96**, 99102 (1954); T. Kasuya, *Prog. Theor. Phys.* **16**, 45 (1956); K. Yosida, *Phys. Rev.* **106**, 893 (1957)
- [23] A. Liechtenstein, M. Katsnelson, V. Antropov, and V. Gubanov. “Local spin density functional approach to the theory of exchange interactions in ferromagnetic metals and alloys.” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 67(1), **65**, 74 (1987)
- [24] L. Udvardi, L. Szunyogh, K. Palotas, and P. Weinberger. “First-principles relativistic study of spin waves in thin magnetic film.” *Phys. Rev. B* **68**, 104436 (2003)
- [25] H. Ebert and S. Mankovsky. “Anisotropic exchange coupling in diluted magnetic semiconductors: Ab initio spin-density functional theory.” *Phys. Rev. B* **79**, 045209 (2009)

- [26] A. Oswald, R. Zeller, P. J. Braspenning, and P. H. Dederichs. “Interaction of magnetic impurities in Cu and Ag.” *Journal of Physics F: Metal Physics* **15**, 193 (1985)
- [27] P. Lloyd and P. Smith. “Multiple scattering theory in condensed materials.” *Advances in Physics* **21**, 69 (1972)
- [28] H. Imamura, P. Bruno, and Y. Utsumi “Twisted exchange interaction between localized spins embedded in a one-or two-dimensional electron gas with Rashba spin-orbit coupling” *Phys. Rev. B* **69**, 121303(R) (2004)