

PROPOSITION DE THESE

Sujet : Structure électronique de systèmes de basse dimensionnalité à fort couplage spin-orbite et aux propriétés topologiques remarquables

Laboratoire : Institut Jean Lamour- Département Physique de la Matière et des Matériaux

Institut Jean Lamour - UMR 7198 - Université de Lorraine- Nancy (France)

Site web : <https://ijl.univ-lorraine.fr/>

Directeurs de thèse : D. Malterre/G. Kremer

Date limite de candidature : 15/04/24

Date début du contrat : 01/10/24 (financement contrat doctoral)

Contexte

Des propriétés exotiques de plusieurs familles de matériaux (supraconducteurs à haut T_c , fermions lourds, multiferroïques) trouvent leur origine dans les interactions électroniques, le couplage des différents degrés de liberté (orbitale, spin) et les effets relativistes. Ces nouveaux états de la matière constituent un sujet d'étude fondamentale, mais sont également très prometteurs pour des applications en électronique, spintronique, optronique ou encore spin-orbitronique. Depuis, une vingtaine d'années un nouveau concept a émergé en physique de la matière condensée, celui de matériau topologique dont les propriétés (effet Hall quantique ou effet Hall quantique de spin) sont associées à la variation de la phase des fonctions d'onde dans la zone de Brillouin. Un exemple emblématique est les isolants topologiques qui présentent des états de bord métalliques dont la direction de propagation dépend du spin d'où leur intérêt en spintronique. Dans ce travail de thèse dirigé par Daniel Malterre et Geoffroy Kremer (équipe « Surfaces Spectroscopies et Modélisations » du département Physique de la matière et des Matériaux de l'institut Jean Lamour), le doctorant étudiera des matériaux de basse dimensionnalité à fort couplage spin-orbite présentant des propriétés topologiques non-triviales (isolants topologiques, semi-métaux de Dirac, de Weyl...) par spectroscopies d'électrons (ARPES, spin-ARPES, STM/STS...) au laboratoire et/ou sur des lignes synchrotron (notamment pour le spin-ARPES). Des calculs de structures électroniques (DFT) combinés à des calculs du poids spectral pourront être développées en collaboration avec des spécialistes du domaine pour analyser les résultats expérimentaux.

Mots clés

Matériaux topologiques, fermions de Weyl et de Dirac, propriétés électroniques, simulation de la structure de bande et du poids spectral en ARPES, photoémission résolue en angle et en spin, couplage spin-orbite

Keywords

Topological materials, Dirac and Weyl fermions, electronic properties, simulation of band structure and spectral weight in ARPES, angle- and spin-resolved photoemission, spin-orbit coupling

Détail de l'offre

L'existence d'un fort couplage spin-orbite dans des matériaux 2D ou 3D permet l'inversion de bande conduisant à la formation d'une structure de bande topologiquement non-triviale [1-4]. Le caractère non trivial de la structure de bande dans un isolant (i.e. isolant topologique) induit des états de bord métalliques, robustes sous l'effet du désordre structural car protégés par la topologie ou la symétrie [5]. De plus ces états de bord présentent une texture de spin singulière (souvent chirale) que l'on peut mettre directement en évidence par la spectroscopie de photoémission résolue en spin (Spin-ARPES) [6-9]. Une autre famille de matériaux à fort couplage spin-orbite présente des propriétés remarquables, les dichalcogénures de métaux de transition. Ce sont des solides lamellaires, constitués d'un empilement de monocouches liées entre elles par des liaisons faibles de type Van der Waals. Le couplage spin-orbite important induit un couplage spin-vallée qui confère à ces matériaux des propriétés électroniques et optiques remarquables [10,11]. Plus récemment il a été montré que des propriétés topologiques se manifestent également dans des semi-métaux (semi-métaux de Dirac et de Weyl) où la signature topologique est présente sur les états de volume et les états de bord [12,13]. La photoémission est la technique la plus adaptée pour mettre en évidence ce type de propriétés. Le sujet que nous proposons s'inscrit dans l'étude par spectroscopie d'électrons de ces matériaux aux propriétés électroniques remarquables.

Dans ce projet de thèse, le doctorant étudiera les propriétés électroniques de matériaux à fort couplage spin orbite (matériaux topologiques et/ou dichalcogénures de métaux de transition), élaborés in situ dans le tube Davm de l'institut Jean Lamour ou ex-situ, par les techniques spectroscopiques dont l'équipe est spécialiste (ARPES, STM/STS). Des mesures complémentaires notamment de photoémission résolue en spin seront effectuées sur des lignes synchrotron. Le doctorant devra mettre en œuvre ces mesures d'ARPES et de STM/STS sur les dispositifs de l'équipe et sur synchrotron (notamment sur les lignes du synchrotron SOLEIL). Une partie plus théorique est également prévue. Le doctorant devra simuler les spectres de photoémission obtenus expérimentalement en combinant des calculs DFT à des calculs de poids spectral [14].

Detailed subject

The existence of a strong spin-orbit coupling in 2D or 3D materials allows band inversion leading to the formation of a topologically non-trivial band structure [1-4]. The non-trivial character of the band structure in an insulator (i.e. topological insulator) induces robust metallic edge states under the effect of structural disorder because they are protected by topology or symmetry [5]. In addition, these edge states exhibit a singular spin texture (often chiral) that can be directly demonstrated by spin resolved photoemission spectroscopy (spin-ARPES) [6-9]. Another family of materials with strong spin-orbit coupling exhibits remarkable properties: transition metal dichalcogenides. These are lamellar solids made up of a stack of monolayers linked together by weak Van der Waals-type bonds. The strong spin-

orbit coupling induces spin-valley coupling, which gives remarkable electronic and optical properties [10,11]. More recently, it has been shown that topological properties also occur in semi-metals (Dirac and Weyl semi-metals) where the topological signature is present in both bulk and edge states [12,13]. Photoemission is the most suitable technique for highlighting this type of property. The subject we are proposing is part of the electron spectroscopy study of these materials with remarkable electronic properties. In this thesis project, the PhD student will study the electronic properties of materials with strong spin-orbit coupling (topological materials and/or transition metal dichalcogenides), produced in situ in the Davm tube at the Institut Jean Lamour or ex-situ, by using spectroscopic techniques (ARPES, STM/STS). Additional measurements, in particular spin resolved photoemission, will be carried out on synchrotron beamlines. The PhD student will have to implement ARPES and STM/STS measurements on the team's devices and on synchrotron (in particular on the SOLEIL synchrotron beamlines). A more theoretical part is also planned. The PhD student will have to simulate the photoemission spectra obtained experimentally by combining DFT calculations with spectral weight calculations [14].

Profil du candidat

Les candidats doivent être titulaires d'un Master 2 en physique de la matière condensée, ou équivalent, avec une solide expérience en physique du solide, en particulier dans l'étude des propriétés structurales et électroniques des solides, et avec une appétence pour le travail expérimental. L'enthousiasme, la curiosité, l'esprit d'initiative, la capacité à travailler en équipe et la rigueur seraient des qualités appréciées. Des compétences en programmation ou un goût pour l'analyse de données sont un plus.

Bibliographie

- [1] Kane, C. L., and Mele, E. J., Phys. Rev. Lett. 95, 146802 (2005).
- [2] Fu, L., Kane, C. L., and Mele, E. J., Phys. Rev. Lett. 98, 106803 (2007).
- [3] D. Xiao, Rev. Mod. Phys. 82, 1959 (2010).
- [4] M.Z. Hasan, M. Z., and Kane, Rev. Mod. Phys. 82, 3045 (2010).
- [5] Y.L. Chen et al., Science 329, 659 (2010)
- [6] S. Souma et al. Phys. Rev. Lett. 106, 216803 (2011)
- [7] Oleg V. Yazyev, Joel E. Moore, and Steven G. Louie, Phys. Rev. Lett. 105, 266806 (2010)
- [8] Y. H. Wang et al., Phys. Rev. Lett. 107, 207602 (2011).
- [9] D. Hsieh et al., Nature 460, 1101 (2009).
- [10] G. Sallen et al., Phys. Rev. B 86 (2012) 081301.
- [11] G. Wang et al., Phys. Rev. Lett. 114 (2015) 097403.
- [12] Su-Yang Xu et al., Nature Physics, 11, 748 (2015)
- [13] B. Q. Lv, et al., Nature Physics, 11, 724 (2015).
- [14] Day, R.P. et al., npj Quantum Mater. 4, 54 (2019).

