



Soutenance de thèse

Mercredi 22 novembre 2017

14 h – C2N, Site de Marcoussis , salle Planet

Khalifa BADIANE

« Etude par STM des états d'hybridation pd induits par un atome de Cr inséré dans la surface de GaAs(110) »

Composition du jury proposé

M. Bruno GRANDIDIER (Chargé de recherche, IEMN)	Rapporteur
M. Laurent Limot (Chargé de recherche, IPCMS)	Rapporteur
M. Vincent REPAIN (Professeur, Université Paris Diderot)	Examinateur
M. Damien RIEDEL (Chargé de recherche, ISMO)	Examinateur
Mme. Muriel SICOT (Chargée de recherche, Institut Jean Lamour)	Examinatrice
M. Jean-Christophe GIRARD (Chargé de recherche, C2N)	Membre invité
M. Guillemin RODARY (Chargé de recherche, C2N)	Directeur de thèse

Résumé

Dans cette thèse nous explorons, par microscopie par effet tunnel (STM), les effets de surface et du nombre de coordination sur les propriétés électroniques d'un atome de métal de transition occupant un site cationique dans la surface de GaAs(110).

Par une méthode de dépôt in situ, nous avons déposé des adatoms de Cr sur des faces clivées de GaAs(110) avec des taux de couvertures très inférieurs à une monocouche. Et en appliquant des rampes de tensions proches de quelques adatoms magnétiques cibles à l'aide de la pointe du STM, nous les avons manipulés et substitués par des atomes de Ga dans les deux premières couches de la surface de GaAs(110). Obtenant ainsi des atomes magnétiques ayant des environnements atomiques différents, c'est-à-dire des adatoms de Cr, des atomes de Cr formant trois liaisons avec trois atomes d'As voisins (Cr en première couche) et des atomes de Cr formant quatre liaisons avec quatre atomes d'As voisins (Cr en deuxième couche).

Pour étudier les propriétés électroniques de ces atomes de transition en fonction de leur position dans la surface de GaAs(110), nous avons réalisé sur eux des imageries STM à différents signes de tension ainsi que des mesures de spectroscopie par effet tunnel (STS). Ils ont montré des formes topographiques ayant des symétries miroirs différentes et ont révélé des nombres de pics de STS différents dans le gap de la surface de GaAs(110) selon leur site atomique.

Des calculs de densité d'états électroniques et des simulations d'images STM ont été effectués, en collaboration avec Michele AMATO, chercheur au C2N, sur des atomes de Cr occupant des sites cationiques dans le GaAs massif et dans les cinq premières couches de la surface de GaAs(110) en utilisant la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Des accords entre les calculs théoriques et nos résultats expérimentaux nous ont permis de montrer (i) que les pics de STS mesurés sur les atomes de Cr correspondent à des pics de densité d'états électroniques provenant d'une hybridation entre les états à caractères d'orbitales d du Cr et les états à caractères d'orbitales p de leurs voisins d'atomes d'As et de Ga ; (ii) que nos mesures de STS sur les atomes de Cr dans les deux premières couches de surface sont affectés par la brisure de symétrie à la surface de GaAs(110); (iii) qu'il se produit une levée de dégénérescence de certains états induits dans le gap de GaAs(110) lorsqu'un atome de Cr passe de la première vers la deuxième couche de surface ; (iv) et que les images STM topographiques réalisées à différents signes de tension sur des atomes de Cr insérés dans les deux premières couches de la surface correspondent à des fonctions d'ondes d'états d'hybridations pd spécifiques.