

NNT : 2016SACLS520

THÈSE DE DOCTORAT
DE
L'UNIVERSITÉ PARIS-SACLAY
PRÉPARÉE À
L'UNIVERSITÉ PARIS-SUD

ECOLE DOCTORALE N° 564
Physique de l'Ile-de-France

Spécialité de doctorat : Physique

Par

M. Sébastien GUISSART

De l'impureté Kondo aux états liés
dans les supraconducteurs

Thèse présentée et soutenue Orsay, le 14 Décembre 2016.

Composition du Jury :

M. BOUZDINE Alexandre	Professeur à l'Université de Bordeaux	Rapporteur
M. FLORENS Serge	Chargé de Recherche à Grenoble	Rapporteur
M. GABAY Marc	Directeur de Recherche à l'Université Paris-Sud	Président
M. BRAUNECKER Bernd	Professeur à l'Université de San Andreas	Examineur
M. SACÉPÉ Benjamin	Chargé de Recherche à Grenoble	Examineur
M. SIMON Pascal	Professeur à l'Université Paris-Sud	Directeur de thèse

Titre : De l'impureté Kondo aux états liés dans les supraconducteurs

Mots clés : supraconductivité, transport quantique, impuretés magnétiques, effet Kondo, topologie

Résumé : Dans cette thèse, je me suis principalement intéressé aux effets liés aux impuretés magnétiques dans les métaux et supraconducteurs. Dans le premier chapitre je présenterai l'effet Kondo, celui-ci se produit lorsqu'une impureté magnétique présente un couplage antiferromagnétique avec le métal qu'elle pollue. Les électrons forment alors, à suffisamment basse température, un nuage écrantant le magnétisme de l'impureté. Le deuxième chapitre portera sur les états de Yu-Shiba-Rusinov produits par des impuretés magnétiques dans un supraconducteur. Dans ce cas, l'impureté brise localement l'ordre supraconducteur et un état quantique est créée à l'intérieur du gap.

Certains matériaux dits topologiques peuvent comporter des états quantiques protégés à leurs bords contre les perturbations extérieures. Dans les deux derniers chapitres, je présenterai les propriétés des supraconducteurs topologiques et leurs états de bords. Dans le troisième chapitre je présenterai les différentes phases topologiques que peut comporter un supraconducteur avec un paramètre d'ordre complexe mélangeant ondes p et s en présence d'un champ Zeeman. Dans le quatrième et dernier chapitre je présenterai une étude des états de bords que peut comporter ce type de supraconducteurs.

Title : From the Kondo impurity to bound states in superconductors

Keywords : superconductivity, quantum transport, magnetic impurities, Kondo effect, topology

Abstract : In this thesis, I was mainly interested in the effects related to magnetic impurities in metals and superconductors. In the first chapter I will present the Kondo effect, this effect occurs when a magnetic impurity exhibits an antiferromagnetic coupling with the metal that it pollutes. The electrons then form, at a sufficiently low temperature, a cloud screening the magnetism of the impurity. The second chapter will focus on the states of Yu-Shiba-Rusinov products by magnetic impurities in a superconductor. In this case, the impurity locally breaks the superconducting order and a quantum state is created inside the gap.

Some so-called topological materials may include quantum states protected at their edges against external perturbations. In the last two chapters, I will present the properties of topological superconductors and their edge states. In the third chapter I will present the different topological phases that can include a superconductor with a parameter of complex order mixing waves p and s in the presence of a Zeeman field. In the fourth and last chapter I will present a study of the states of edge that may include this type of superconductors.



Remerciement

Mes trois années de thèse au LPS furent une aventure sur les plans intellectuel et humain qui, je pense, marqueront ma mémoire. J'y ai trouvé un environnement de travail particulièrement agréable, dans lequel je me suis épanoui. Cette fin de thèse marque ainsi la fin de mon cursus universitaire, huit années pendant lesquelles ma soif de connaissance fût contentée et mon esprit scientifique aiguisé.

Je souhaite remercier en premier lieu les membres de mon jury pour avoir assisté à ma soutenance et pour l'attention qu'ils ont portée à mes travaux de thèse.

Je remercie aussi le service administratif du laboratoire et de la faculté, le service patrimoine-logistique ainsi que le service informatique, toutes ces personnes sans qui le laboratoire ne fonctionnerait pas.

Je remercie particulièrement mon directeur de thèse, Pascal Simon, je n'aurais pas pu avoir un meilleur encadrant, depuis mon stage jusqu'à ma recherche d'emplois ses conseils et son sens pratique furent toujours une aide solide. Il a su me guider tout en me laissant libre et m'a proposé un très large panel de sujet.

Je remercie l'ensemble des membres du groupe théorie pour toutes les discussions au cours des pauses THÉ, celles-ci furent nombreuses et variées, discussions de physique, informatique, cuisine, philosophique ou même politique. Toutes questions pouvaient être posées et débattues.

Je remercie aussi tous les thésards du laboratoire, beaucoup sont devenus de véritables amis, nous avons fait des soirées mémorables et un weekend en Normandie qui je l'espère se reproduira année après année.

Je remercie tous ceux qui ont pris le RER avec moi, et bien sûr en particulier Anaïs, avec qui j'ai pris le RER quasiment tous les matins pendant 1 an, nos sujets de conversation ne se sont jamais épuisés! Je ne remercie pas la RATP pour tous les retards occasionnés...

Je remercie aussi tous les collègues de bureau que j'ai eu, en particulier Mircea qui lui aussi aimait laisser l'entropie régner dans notre bureau, nous avons partagé beaucoup de discussions et de rires. Et puisque nous avons finalement été déplacé dans un *open-space*, je remercie Olesia (ma jumelle de thèse), Nicolas, Sergueï, Frédéric, Arnaud, Manali,

Oscar, YunLong et Hél  na. Ces quelques mois    se lancer des boulettes de papiers   taient plaisants ! Je n'oublie pas de remercier Jean-Ren   qui a partag   mon bureau la premi  re ann  e.

Je remercie sp  cifiquement Arnaud pour avoir corrig   la quasi-totalit   de ma th  se, je pense que les commentaires du jury sur l'aisance de lecture de mon manuscrit lui sont directement adress   !

Je tiens aussi    remercier tous ceux qui d  tournent l'utilisation de la boite mail g  n  rale « tous.lps@u-psud.fr ». Bien qu'on ne re  oive qu'un mail sur quatre d'utile, certain mails m'ont fait beaucoup rire !

Je remercie tous ceux qui ont particip      mes cadeaux de th  se, gr  ce    eux j'apprends    m'exprimer en Toki Pona : *kulupu Teo li sona e musi. kulupu ni li nasa lili. Mi olin e jan kule ni.*

Je remercie celle qui partage ma vie et qui fut    mes c  t  s tout au long de ma th  se, Charlotte, son soutien fut infaillible, et j'esp  re continuer    vivre toutes mes aventures    ses c  t  s.

Enfin je remercie mes deux familles, en effet, j'ai la chance d'en avoir deux ! Leurs soutiens furent inconditionnels.

Table des matières

Introduction	xi
1 Effet Kondo en présence de polarisation magnétique	1
1.1 Introduction à l'effet Kondo	2
1.2 Transport électronique hors-équilibre à travers des boîtes quantiques . . .	6
1.2.1 Formalisme de Keldysh	6
1.2.2 Fonctions de Green	7
1.2.3 Formalisme de Keldysh appliqué à une jonction tunnel	10
1.2.4 Formalisme de Keldysh appliqué au courant circulant à travers un microscope STM sondant un atome sur une surface	12
1.3 Calculs Numériques <i>via</i> le groupe de renormalisation	13
1.3.1 Présentation de la méthode	13
1.3.2 Discrétisation	15
1.3.3 Transformation vers une chaîne	15
1.3.4 Diagonalisation itérative	17
1.3.5 Conclusion	17
1.4 Résonance Kondo en présence de structures magnétiques	18
1.4.1 Description du système	19
1.4.2 Modélisation du système	19
1.4.3 Calcul de la densité spectrale	20
1.4.4 Ajustement des courbes de NRG sur les données expérimentales .	21
1.5 Conclusion	25
2 États de Yu-Shiba-Rusinov	27
2.1 Introduction	27
2.1.1 Supraconductivité	27
2.1.2 Théorème d'Anderson	30
2.1.3 Impuretés magnétiques	31
2.2 Résolution analytique et numérique	34
2.2.1 Interprétation	37
2.2.2 Résolution numérique	38
2.3 Cas réaliste, impuretés dans le supraconducteur 2H-NbSe ₂	40

2.3.1	Cristallographie et structure de bandes du matériau	40
2.3.2	Mesure des états de YSR	40
2.3.3	Modèle de liaisons fortes	42
2.3.4	Extension du modèle, fonctions de Wannier	43
2.4	Conclusion	45
3	Supraconducteurs en présence de structures magnétiques et propriétés topologiques	47
3.1	Introduction	47
3.2	Introduction aux supraconducteurs topologiques	48
3.2.1	Classification des supraconducteurs topologiques	48
3.2.2	Modèle de Kitaev	48
3.2.3	Supraconducteur 2D sans spin, extension du modèle de Kitaev . .	52
3.3	Topologie associée aux supraconducteurs avec une composante singulet et une composante triplet	54
3.3.1	Supraconducteur hélical	54
3.3.2	Supraconducteur chirale	55
3.4	Supraconducteur hélical en présence de champ magnétique	56
3.4.1	Fermetures de gap	57
3.4.2	Nombre de Chern	58
3.4.3	États de bord	58
3.5	Conclusion	65
4	Cluster magnétique et supraconductivité avec un paramètre d'ordre hybride singulet-triplet	67
4.1	Introduction	67
4.2	Modèle	67
4.3	Résultats	70
4.3.1	Phase hélicale	70
4.3.2	Phase chirale	73
4.4	Supraconductivité topologique dans le matériau Pb/Co/Si(111)	76
4.4.1	Modèle	77
4.5	Etude d'un vortex piégé par un cluster magnétique	80
4.5.1	Vortex dans un supraconducteur chirale	80
4.5.2	Vortex dans un supraconducteur hélical	81
4.5.3	Cas du vortex porté par la composante en onde p	83
4.6	Conclusion	86
	Conclusion	87
A	Calcul du courant à travers une impureté par le formalisme de Keldysh	91
A.1	Formule du courant	92
A.2	Fonctions de Green	92

B	Calcul des états de Shiba-Yu-Rusinov, méthode de Shiba et méthode de Rusinov	97
B.1	Méthode de Shiba	97
B.2	Méthode de Rusinov	99
B.2.1	Intégrales	100
C	Traitement numérique du modèle de liaisons fortes des états de YSR via les fonctions de Wannier	103
C.1	Méthode	104
D	Supraconductivité en présence de spin-orbite et champ Zeeman	107
D.1	1 ^{er} cas, spin-orbite dominant	108
D.1.1	Fonctions de Green anormales et symétries	110
D.2	2 ^{ème} cas, faible couplage spin-orbite	111
D.2.1	Fonctions de Green anormales et symétries	112
D.2.2	Conclusion de l'analyse par l'approche de Rashba Gorkov	113
E	États de bord d'un supraconducteur hybride en ondes p et s en présence de champ Zeeman	115
E.1	Modèle et hamiltonien	115
E.2	États de bord	116
E.2.1	le cas $V < \Delta_s$	117
E.2.2	Le cas $V > \Delta_s$	120
E.2.3	Quatre solutions z_n réelles	121
E.2.4	Deux solutions z_n réelles et deux solutions z_n complexes	121
E.2.5	Quatre solutions z_n complexes (deux inéquivalentes)	122
E.3	L'état chiral : $V > \sqrt{\Delta_s^2 + \mu^2}$	122
E.3.1	Trois solutions z_n réelles	123
E.3.2	Une solution z_n réelle et deux solutions complexes	124
E.3.3	Conclusion	124
	Codes	127

Introduction

Depuis les révolutions conceptuelles et techniques apportées par la physique quantique, les physiciens n’ont cessé d’essayer de comprendre et d’exploiter les phénomènes quantiques. La physique quantique décrit la matière à l’échelle microscopique. Ses effets ne sont en général pas présents à l’échelle humaine et les dispositifs expérimentaux faisant intervenir cette physique font la plupart du temps appel à une haute technicité.

La physique de la matière condensée correspond à l’étude de la matière en interaction et apparaît, de ce fait, comme un très bon substrat pour tester les effets liés à la physique quantique. À très basse température, les électrons de conduction présents dans certains matériaux cristallins forment un “bain”, image selon laquelle les électrons remplissent un “réservoir” jusqu’à un certain niveau d’énergie : le niveau de Fermi. Les excitations dans ce bain électronique se comportent comme des quasi-particules. Ces quasi-particules qui suivent les lois de la mécanique quantique, possèdent des propriétés variant selon les matériaux et peuvent aussi être influencées par les champs électromagnétiques extérieurs. D’autre part les électrons de conduction peuvent, dans certain cas, former un état cohérent. C’est le cas de la supraconductivité où les électrons s’apparient deux à deux et partagent une propriété quantique commune sur des longueurs pouvant être macroscopique. Ces quasi-particules peuvent être mesurées à travers des dispositifs électroniques variés, rendant l’étude de leurs propriétés quantiques plus facile. Tout ceci confie à la matière condensée un lot d’atout pour étudier et exploiter les phénomènes quantiques.

Comme le souligne le titre de ma thèse, je me suis intéressé aux effets liés aux impuretés. Bien que leur présence soit généralement vue comme néfaste, elles peuvent parfois amener de nouvelles propriétés au matériau hôte (comme c’est le cas notamment pour les semi-conducteurs). Dans les deux premiers chapitres je montrerai que le couplage entre des impuretés et des matériaux hôtes, ayant des propriétés et des degrés de liberté différents, peut faire émerger de nouveaux états dans le substrat initial. Dans le premier chapitre je présenterai l’effet Kondo, celui-ci se produit lorsqu’une impureté magnétique présente un couplage antiferromagnétique avec le métal qu’elle pollue. Les électrons forment alors, à suffisamment basse température, un nuage écrantant le magnétisme de l’impureté. Le deuxième chapitre portera sur les états de Yu-Shiba-Rusinov produits par des impuretés magnétiques dans un supraconducteur. Dans ce cas, l’impureté brise localement l’ordre

supraconducteur et un état quantique est créée à l'intérieur du gap.

Comme illustré par le dernier prix Nobel de physique attribué à David J. Thouless, F. Duncan M. Haldane et J. Michael Kosterlitz, l'application des notions de topologie constitue une avancée majeure en matière condensée. La topologie consiste en l'étude des propriétés conservées sous l'effet de déformations continues du système considéré : on parle alors d'invariants topologiques. Ainsi certains matériaux dits topologiques peuvent comporter des états quantiques protégés à leurs bords contre les perturbations extérieures. Dans les deux derniers chapitres, je présenterai les propriétés des supraconducteurs topologiques et leurs états de bords. Dans le troisième chapitre je présenterai les différentes phases topologiques que peut comporter un supraconducteur avec un paramètre d'ordre complexe mélangeant ondes p et s en présence d'un champ Zeeman. Dans le quatrième et dernier chapitre je présenterai une étude des états de bords que peut comporter ce type de supraconducteurs. Cette thèse est organisée en quatre chapitres décrits ci-dessous.

Chapitre 1 : Effet Kondo en présence de polarisation magnétique : Dans ce chapitre, nous introduirons tout d'abord l'effet Kondo en suivant une approche historique avant de présenter le groupe de renormalisation numérique, qui permet une description quasi-exacte de cet effet. L'effet Kondo est un cas unique où le couplage de deux différents degrés de liberté (celui du spin des impuretés magnétiques et celui des électrons de conduction) change les propriétés des deux protagonistes. En effet, il suffit d'une faible quantité d'impuretés magnétiques pour qu'à basse température la résistivité du matériau augmente drastiquement et, parallèlement à cela, les impuretés vont perdre leur caractère magnétique. Ensuite, afin de décrire des expériences de microscopie par effet tunnel (STM) sur des atomes magnétiques, nous nous intéresserons au calcul du courant dans ce type de géométrie. Ceci nous permettra d'analyser des mesures spectroscopiques de l'effet Kondo en présence d'une polarisation magnétique, montrant la très forte sensibilité de l'effet Kondo à cette polarisation.

Chapitre 2 : États de Yu-Shiba-Rusinov : Ce chapitre porte sur les états de Yu-Shiba-Rusinov (YSR). Ce sont des états électroniques localisés dans les supraconducteurs et dont l'énergie se trouve à l'intérieur du gap supraconducteur ; ils se forment autour d'impuretés magnétiques. Dans un premier temps, j'introduirai la supraconductivité à travers le formalisme de champ moyen de Bogoliubov-de Gennes. Je présenterai ensuite le théorème d'Anderson afin d'illustrer l'importance de la symétrie par renversement du temps dans les supraconducteurs en onde s . En effet, c'est en brisant cette symétrie que l'état de YSR peut se former. Je présenterai ensuite des techniques analytiques et numériques utiles à la résolution spatiale et énergétique des états de YSR. J'analyserai des données expérimentales mesurant ces états dans un supraconducteur à deux dimensions : le diséléniure de Niobium (NbSe_2). Je montrerai dans ce chapitre que la dimensionnalité du matériau joue un rôle important dans l'extension spatiale des états de YSR un ordre de grandeur plus grand à deux dimensions que ceux observés en trois dimensions.

Chapitre 3 : Supraconducteurs en présence de structures magnétiques et propriétés topologiques : Ce chapitre porte sur les supraconducteurs topologiques en présence de champ magnétique. Dans un premier temps, j'introduirai les notions de topologie dans les supraconducteurs à travers le modèle de Kitaev à une et deux dimensions. Je présenterai ensuite les différentes phases topologiques que peuvent présenter un supraconducteur en ondes s et en ondes p en présence d'un champ Zeeman. Nous verrons que pour un supraconducteur à dominance en ondes s (et donc trivial) le champ Zeeman peut malgré tout amener le système vers une phase hélicale faiblement topologique.

Chapitre 4 : Cluster magnétique et supraconductivité avec un paramètre d'ordre hybride de type singulet-triplet : Ce chapitre portera sur l'étude des états de bords créés par un cluster magnétique. Dans un premier temps je présenterai un modèle numérique permettant la simulation de ces états de bord dans une géométrie à symétrie circulaire. Puis, à partir de ce modèle, j'étudierai les diverses situations possibles pouvant amener des états de bord. Je finirai ce chapitre par l'analyse de données expérimentales obtenus par microscopie STM. Des signatures probantes de transitions topologiques ont été observées au voisinage d'un amas de cobalt coincé entre un film bidimensionnel de plomb et un substrat isolant de silicium (Pb/Co/Si(111)). Les simulations numériques que je présenterai ont pour but la reproduction des faits saillants de ces résultats expérimentaux.

Chapitre 1

Effet Kondo en présence de polarisation magnétique

Certains métaux dont les métaux nobles (cuivre, or) ne deviennent pas supraconducteur à basse température, mais leur résistance décroît jusqu'à une valeur finie dépendant du nombre de défauts du métal. Cependant ce comportement change de manière drastique lorsque des impuretés magnétiques polluent le matériau. Plutôt que d'arriver à saturation, la résistance électrique atteint un minimum avant d'augmenter de nouveau, la température correspondante au minimum de résistance est appelée température Kondo (Figure 1.1). Depuis les années 1930, de nombreuses mesures expérimentales mirent en évidence cette anomalie, mais ce n'est qu'en 1964 qu'une explication théorique satisfaisante a été fournie par J. Kondo [38]. Dans ce chapitre, j'introduirai l'effet Kondo à

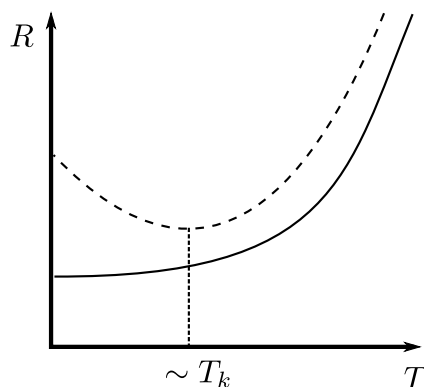


FIGURE 1.1 – Schéma de la résistance en fonction de la température. Trait plein : métal sans impuretés magnétiques, tiret : métal avec impuretés magnétiques

travers les différentes avancées historiques qui permirent sa compréhension et je présenterai ensuite le formalisme de Keldysh permettant de résoudre des systèmes hors-équilibre

[30, 35]. Ce formalisme me permettra d'interpréter les expériences effectuées à l'aide d'un microscope à effet tunnel (STM) en régime de contact sondant des impuretés magnétiques [41, 43]. Enfin je présenterai le travail réalisé en collaboration avec une équipe d'expérimentateurs basée à Strasbourg sur l'effet Kondo en présence de polarisation magnétique montrant que celui-ci est très sensible à la polarisation de spin.

1.1 Introduction à l'effet Kondo

Les premiers travaux théoriques amenant une compréhension de l'effet Kondo ont commencé en 1960 par le travail de P. W. Anderson sur les impuretés magnétiques dans les métaux [6]. Les atomes possèdent des propriétés magnétiques lorsque l'alignement des spins des électrons de valence est privilégié à l'anti-alignement. Généralement ce mécanisme se produit lorsque la répulsion coulombienne pénalise la double occupation d'une orbite, les électrons se répartissent alors sur deux orbites avec deux spins alignés. Ce mécanisme implique une forte répulsion coulombienne, c'est pourquoi il se retrouve majoritairement sur les atomes dont les électrons de valence sont portés par l'orbitale d . Pour décrire les atomes magnétiques couplés aux électrons de conduction, Anderson proposa un mécanisme simple appelé le couplage $s-d$.

Supposons un moment magnétique $1/2$ porté par une orbitale d d'une impureté, d'énergie ξ_d située en dessous du niveau de Fermi. Un niveau d'énergie électronique est souvent occupé par deux électrons de spins opposés, cependant les orbitales d sont plus localisées que les s et p et permettent une plus grande répulsion coulombienne. Ainsi la double occupation du site a un coût énergétique $\xi_d + U$ au dessus du niveau de Fermi et l'atome se voit porter un spin $1/2$, le spin de l'électron de son orbitale de valence.

Le modèle d'Anderson consiste à résoudre le hamiltonien de l'orbitale d de l'impureté magnétique en contact avec les électrons de conduction du métal $H_{\text{And}} = H_0 + H_{\text{imp}} + H_t$. Le hamiltonien des électrons de conduction H_0 s'écrit

$$H_0 = \sum_{k\sigma} \xi_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}, \quad (1.1)$$

où $c_{k\sigma}^\dagger$ ($c_{k\sigma}$) correspond à l'opérateur création (annihilation) des électrons de conduction, et ξ_k l'énergie de l'électron de conduction de moment k . Le hamiltonien de l'impureté H_{imp} s'écrit

$$H_{\text{imp}} = \sum_{\sigma} \xi_d d_{\sigma}^\dagger d_{\sigma} + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow}, \quad (1.2)$$

où l'orbitale d a pour opérateur de création (annihilation) $d_{\sigma}^\dagger$ (d_{σ}), et où U correspond à la répulsion coulombienne. Enfin le terme de couplage entre l'impureté et les électrons de conduction s'écrit :

$$H_t = \sum_{k\sigma} (V_{kd} d_{\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \text{h.c.}). \quad (1.3)$$

où V_{kd} correspond au terme de saut entre l'orbitale d et les électrons de conduction de moment k .

Ce hamiltonien n'est pas directement soluble. Dans un premier temps, il nous est possible d'utiliser l'approximation en champ moyen. Celle-ci nous permettra notamment de déterminer si l'impureté reste magnétique, même en contact avec le métal. L'approximation champ moyen consiste à approximer les opérateurs n_d par leur valeurs moyennes :

$$Un_{d\uparrow}n_{d\downarrow} \simeq U\langle n_{d\uparrow} \rangle n_{d\downarrow} + U\langle n_{d\downarrow} \rangle n_{d\uparrow} - U\langle n_{d\uparrow} \rangle \langle n_{d\downarrow} \rangle. \quad (1.4)$$

Nous pouvons maintenant résoudre les équations de mouvement du hamiltonien, nous obtenons alors la fonction de Green retardée de l'impureté

$$G_{d\uparrow}^R(\omega) = \frac{1}{\omega - \xi_d - U\langle n_{d\downarrow} \rangle - \Sigma^R(\omega)}, \quad (1.5)$$

où $\Sigma^R(\omega)$ correspond à la self-énergie :

$$\Sigma^R(\omega) = \sum_k \frac{|V_{kd}|^2}{\omega - \xi_k + i\eta}. \quad (1.6)$$

La self-énergie se calcule facilement si l'on suppose V_{kd} indépendant de k :

$$\Sigma^R(\omega) \simeq \frac{\Gamma}{\pi} \ln \left| \frac{D + \omega + \mu}{D - \omega - \mu} \right| - i\Gamma/2, \quad (1.7)$$

où $\Gamma = \pi\nu|V_d|^2$ où ν est la densité d'états à l'énergie de Fermi et où nous supposons que $\nu(E)$ est constante sur la largeur de bande D . La partie réelle de la self-énergie apporte une renormalisation du niveau d'énergie de l'impureté. Γ , appelé largeur de bande, déterminera l'élargissement des niveaux d'énergie. Il nous reste maintenant à résoudre $\langle n_{d\sigma} \rangle$, l'occupation moyenne des niveaux d'énergie up et down de l'impureté.

$$\begin{aligned} \langle n_{d\uparrow} \rangle &= \langle c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\uparrow} \rangle = -iG_{d\uparrow}^<(t=0) = -i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} G_{d\uparrow}^<(\omega) \\ &= -i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} A_{d\uparrow}(\omega) n_F(\omega), \end{aligned} \quad (1.8)$$

où $G_d^<$ est la fonction de Green lesser et où $A_d = -2 \text{Im} G_d^R$ est la fonction spectrale. Prenant la limite basse température nous trouvons :

$$\langle n_{d\uparrow} \rangle = \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \tan^{-1} \left(\frac{\xi_d + \text{Re}\Sigma^R + U\langle n_{d\downarrow} \rangle}{\Gamma} \right). \quad (1.9)$$

Nous obtenons la même équation pour $n_{d\downarrow}$, celle-ci peut se réécrire :

$$\cot(\pi\langle n_{d\sigma} \rangle) = \frac{\xi_d + \text{Re}\Sigma^R + U\langle n_{d\bar{\sigma}} \rangle}{\Gamma}. \quad (1.10)$$

Ce système à deux équations nous donne l'occupation de l'orbitale d , en particulier il nous renseigne sur la magnétisation de l'impureté, à savoir s'il existe des solutions $\langle n_{d\uparrow} \rangle - \langle n_{d\downarrow} \rangle \neq 0$, différente de la solution triviale $\langle n_{d\uparrow} \rangle = \langle n_{d\downarrow} \rangle$. Pour la limite $U \gg \Gamma$ et $\xi_d \sim -\frac{U}{2}$ nous trouvons que le système est polarisé *i.e.* $|\langle n_{d\uparrow} \rangle - \langle n_{d\downarrow} \rangle| \sim 1$.

Pour résumer, en traitant le système en champ moyen on remarque que l'impureté reste magnétique lorsque le couplage Γ reste suffisamment petit. Les états de l'orbitale d , simplement et doublement occupés, sont élargis par le couplage aux électrons de conduction et l'aimantation se retrouve atténuée quand ces élargissements recouvrent le niveau de Fermi (voir figure 1.2). Ce traitement en champ moyen nous renseigne correctement sur la magnétisation de l'impureté, mais néglige les fluctuations quantiques, ainsi il ne nous renseigne pas sur l'état fondamental du système.

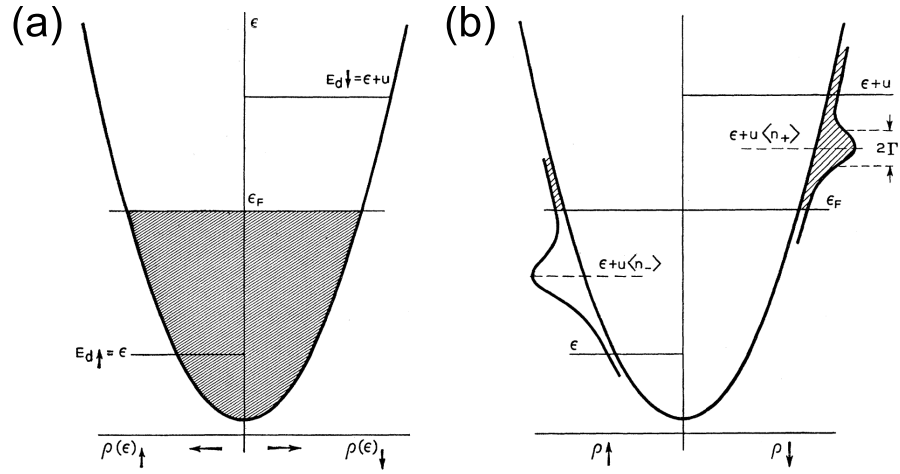


FIGURE 1.2 – (a) Schéma des électrons de conduction et des niveaux d'énergie de l'impureté sans couplage. (b) Fonction spectrale des niveaux d'énergie de l'impureté élargie par le couplage aux électrons de conduction.

En 1964 J.Kondo proposa un hamiltonien effectif couplant un spin au bain électronique [38] :

$$H = \sum_{k\sigma} \xi_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \frac{J}{2N} \sum_{k,k'} \vec{S} \cdot \vec{\sigma}_{\alpha\beta} c_{k\alpha}^\dagger c_{k'\beta}, \quad (1.11)$$

où $\vec{S}$ correspond au spin de l'impureté. Les électrons ressentent un effet Zeeman selon la direction du spin et peuvent aussi échanger leur spin avec celui de l'impureté. Résolvant le hamiltonien jusqu'au troisième ordre en théorie de perturbation, J. Kondo montra que la résistivité du modèle diverge de manière logarithmique lorsque la température tend vers zéro. D'autres calculs impliquant la théorie du groupe de renormalisation [30, 1, 7] montrent un nouvel état électronique en dessous d'une certaine température, la température Kondo. La relation entre J et T_k est alors :

$$T_K \propto \frac{E_F}{k_B} \exp -\frac{1}{J\rho_0}, \quad (1.12)$$

où E_F est l'énergie de Fermi, et où ρ_0 est la densité d'états à l'énergie de Fermi. Lorsque la température est en dessous de la température Kondo, le spin de l'impureté se trouve écranté par les électrons de conduction et forme un état singulet de spin total nul, $1/\sqrt{2}(|\downarrow, \uparrow\rangle - |\uparrow, \downarrow\rangle)$ où $\downarrow, \uparrow$ correspondent au spin total des électrons de conduction et où $\uparrow, \downarrow$ correspondent au spin de l'impureté. L'extension typique du nuage d'électrons entourant l'impureté est $\lambda_F E_F / (k_B T_K)$ avec λ_F la longueur d'onde de Fermi. Bien que ce nuage d'électrons écrantant l'impureté n'ait jamais été directement observé, il a pour effet une augmentation considérable de la diffusion des électrons de conduction autour de l'impureté ; ce qui explique l'augmentation logarithmique de la résistance en dessous de la température Kondo T_K .

En 1966, J. R. Schrieffer and P. A. Wolff donnèrent la preuve de l'équivalence entre le hamiltonien d'Anderson et celui de Kondo pour un couplage au métal faible (*i.e.* $\Gamma/U, \Gamma/|\xi_d| \ll 1$), ces deux modèles étant reliés par une transformation canonique [70]. Ils donnèrent ainsi une relation entre J/N , la force d'échange entre électrons et spin du modèle Kondo et les paramètres du hamiltonien d'Anderson :

$$\frac{J}{N} = 2 \frac{|V_d|^2 U}{\xi_d(\xi_d + U)}. \quad (1.13)$$

J est de l'ordre de l'électron-volt et a une valeur négative due au couplage antiferromagnétique entre l'impureté et les électrons de conduction. Plus tard en 1978 F.D.M. Haldane proposa un calcul analytique résolvant la température de Kondo à partir du modèle d'Anderson *via* la théorie de renormalisation [28] :

$$T_K = \sqrt{\Gamma U / 2} \exp \left[-\frac{\pi \xi_d (\xi_d + U)}{2 \Gamma U} \right]. \quad (1.14)$$

Enfin, de l'effet Kondo résulte une résonance dans la densité d'états autour de l'énergie de Fermi de largeur $k_B T_K$ nommée la résonance de Abrikosov-Suhl-Kondo (ASK) [Fig 1.3]. En effet, un processus virtuel permet à un électron de conduction situé au niveau de Fermi et à l'électron situé sur le niveau d de l'impureté, d'échanger leur position lorsqu'ils sont de spins opposés. À basse température, c'est ce processus qui crée un état cohérent : l'état singulet formé par l'électron de l'impureté et le nuage écran électronique. Cette résonance se trouve au niveau de l'énergie de Fermi et a pour largeur $k_B T_K$ car le processus a besoin d'un électron et d'un trou disponible à la même énergie. Le calcul de la distribution précise de la résonance ASK ne peut se faire que numériquement, une explication sera donnée dans la section 1.3.

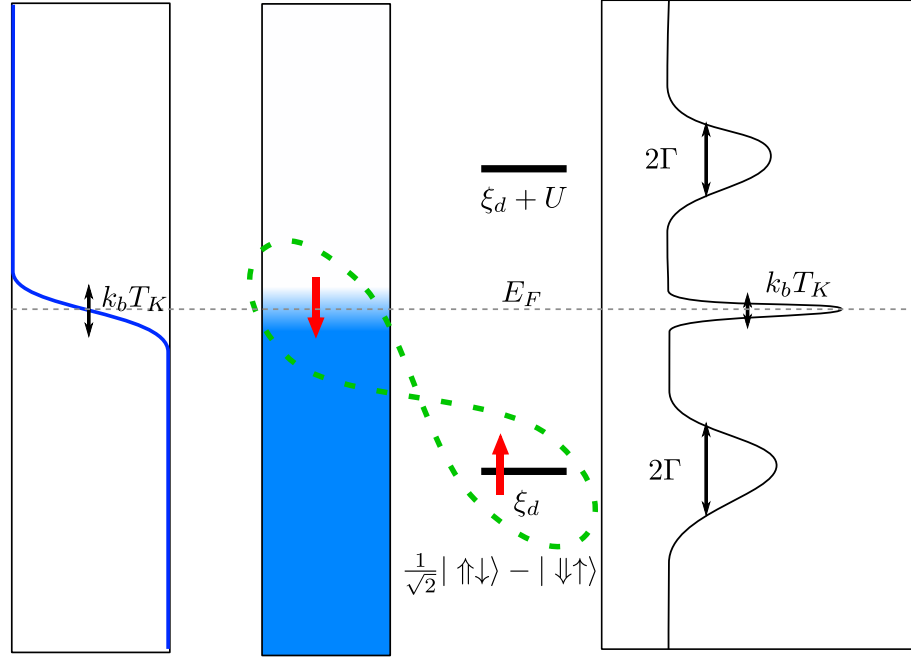


FIGURE 1.3 – Schéma des électrons de conduction en contact avec l'impureté, à droite, la densité d'états de l'impureté.

1.2 Transport électronique hors-équilibre à travers des boîtes quantiques

À travers cette section nous relierons les mesures expérimentales aux formules théoriques à travers le formalisme de Keldysh. Les fonctions de Green sont de bons outils pour traiter les problèmes à plusieurs particules avec ou sans interaction : elles permettent un traitement en perturbation des problèmes non directement solubles. Le formalisme de Keldysh quant à lui permet de traiter ces fonctions de Green dans les systèmes hors-équilibre. Nous appliquerons par la suite ce formalisme afin de calculer le courant entre deux systèmes de potentiel chimique différents.

1.2.1 Formalisme de Keldysh

Le formalisme de Keldysh est à l'origine une méthode traitant les hamiltoniens dépendants en temps, hamiltoniens dont on ne peut *a priori* calculer l'état fondamental à l'instant t . Il est aussi utilisé pour traiter les hamiltoniens décrivant les systèmes hors-équilibre, ceux-ci sont alors considérés comme à l'équilibre à l'instant $t = -\infty$ puis subissent des perturbations amenant le système à un état hors équilibre à l'instant $t = 0$.

Pour décrire notre système nous utiliserons le hamiltonien générique :

$$H = H_0 + V, \quad (1.15)$$

où H_0 est la partie soluble du hamiltonien et où V est la partie que l'on souhaite traiter en perturbation. En représentation interaction, les opérateurs dépendent du temps à travers le hamiltonien H_0 :

$$\hat{O}(t) = e^{iH_0 t} O e^{-iH_0 t}, \quad (1.16)$$

les fonctions d'onde dépendent aussi du temps, à travers l'interaction V :

$$\hat{\psi}(t) = U(t)\psi(0), \quad (1.17)$$

où nous définissons $U(t) = e^{iH_0 t} e^{-iH t}$, l'opérateur évolution. $U(t)$ a pour équation différentielle :

$$\partial_t U(t) = -i\hat{V}(t)U(t). \quad (1.18)$$

En définissant l'opérateur d'ordonnancement temporel T tel que :

$$T(A(t), B(t')) = \theta(t - t')A(t)B(t') \pm \theta(t' - t)B(t')A(t), \quad (1.19)$$

où $\pm$ équivalents à $+$ pour les opérateurs bosoniques et $-$ pour les opérateurs fermioniques, nous pouvons résoudre $U(t)$ [42]

$$\begin{aligned} U(t) &= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \dots \int_0^{t_{n-1}} dt_n T(\hat{V}(t_1)\hat{V}(t_2)\dots\hat{V}(t_n)) \\ &= T \exp[-i \int_0^t dt_1 \hat{V}(t_1)]. \end{aligned} \quad (1.20)$$

Nous pouvons définir également l'opérateur S de la sorte :

$$\hat{\psi}(t) = S(t, t')\hat{\psi}(t'). \quad (1.21)$$

On trouve facilement :

$$S(t, t') = U(t)U^\dagger(t') = T \exp[-i \int_{t'}^t dt_1 \hat{V}(t_1)]. \quad (1.22)$$

1.2.2 Fonctions de Green

Nous pouvons définir en seconde quantification la fonction de Green à température nulle :

$$G_{\alpha, \beta}(t - t') = -i \langle |T c_\alpha(t) c_\beta^\dagger(t')| \rangle, \quad (1.23)$$

où $c^\dagger(c)$ est l'opérateur de création (annihilation) d'un électron et où l'état $| \rangle$ correspond à l'état fondamental. Nous connaissons seulement l'état fondamental du hamiltonien H_0

que nous noterons $|\rangle_0$. Nous pouvons formellement relier celui-ci à l'état fondamental du système par la formule :

$$|\rangle = S(0, -\infty)|\rangle_0. \quad (1.24)$$

Nous pouvons alors réécrire la fonction de Green sous la forme :

$$G_{\alpha,\beta}(t - t') = \frac{-i {}_0\langle |T\hat{c}_\alpha(t)\hat{c}_\beta^\dagger(t')S(\infty, -\infty)|\rangle_0}{{}_0\langle |S(\infty, -\infty)|\rangle_0}. \quad (1.25)$$

Ceci est une écriture des fonctions de Green dans le formalisme de Feynman. Cette écriture permet à l'aide du théorème de Wick de résoudre en perturbation la fonction de Green ; il suffit pour cela de faire le développement de $S(\infty, -\infty)$ jusqu'à l'ordre souhaité. Dans le cas d'un hamiltonien hors-équilibre, cette écriture se trouve gênante, du fait que ${}_0\langle |S(\infty, -\infty)|\rangle_0$ soit mal défini. En effet, en $t = -\infty$ l'état fondamental est bien défini, nous supposons que l'interaction V est éteinte ce qui relie cet état à H_0 . Nous pouvons faire la même supposition en $t = +\infty$ cependant, les interactions qui ont eu lieu entre temps peuvent avoir affecté l'état fondamental.

Nous allons maintenant présenter l'écriture des fonctions de Green dans le formalisme de Keldysh. Cette méthode prend son origine dans l'article de L. V. Keldysh en 1964 [35], d'autres articles relatent des méthodes similaires, tel que l'article Konstantinov et Perel [39] et celui de Schwinger [71]. Cette méthode contourne l'utilisation du terme ${}_0\langle |S(\infty, -\infty)|\rangle_0$, elle propose que l'intégrale de temps de la matrice S se fasse de $-\infty$ jusqu'au temps souhaité avant de revenir à $-\infty$ (figure 1.4). L'avantage de cette méthode est de commencer et de finir le développement de la matrice S avec un état fondamental connu, celui de H_0 . Pour les hamiltoniens à l'équilibre cette méthode donne les mêmes résultats que la méthode de Feynman. Le désavantage de cette méthode est d'employer six fonctions de Green différentes. En effet la matrice S s'écrit maintenant :

$$S(-\infty, -\infty) = T_s \exp \left[-i \int_{\text{loop}} ds_1 \hat{V}(s_1) \right]. \quad (1.26)$$

Le chemin d'intégration suit alors celui dessiné sur figure 1.4. L'opérateur T_s est l'opérateur d'ordonnancement le long de la boucle entière. Utilisant cette matrice S la fonction de Green s'écrit maintenant simplement :

$$G_{\alpha,\beta}(s - s') = -i {}_0\langle T_s c_\alpha(s) c_\beta^\dagger(s') S(-\infty, -\infty) \rangle_0. \quad (1.27)$$

Ainsi les temps du contours s et s' peuvent prendre des valeurs situées sur la branche haute ou basse du contour, ce qui définit quatre différentes fonctions de Green pour les mêmes temps réels t et t' :

$$\begin{aligned} G_{\alpha,\beta}(t^-, t'^+) &= G_{\alpha,\beta}^>(t - t') = -i \langle c_\alpha(t) c_\beta^\dagger(t') \rangle, \\ G_{\alpha,\beta}(t^+, t'^-) &= G_{\alpha,\beta}^<(t - t') = i \langle c_\beta^\dagger(t') c_\alpha(t) \rangle, \\ G_{\alpha,\beta}(t^+, t'^+) &= G_{\alpha,\beta}^t(t - t') = \theta(t - t') G_{\alpha,\beta}^>(t - t') + \theta(t' - t) G_{\alpha,\beta}^<(t - t'), \\ G_{\alpha,\beta}(t^-, t'^-) &= G_{\alpha,\beta}^{\bar{t}}(t - t') = \theta(t' - t) G_{\alpha,\beta}^>(t - t') + \theta(t - t') G_{\alpha,\beta}^<(t - t'), \end{aligned} \quad (1.28)$$

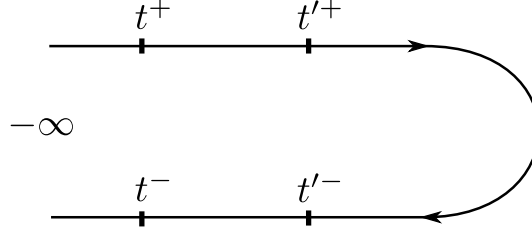


FIGURE 1.4 – la boucle de temps d'intégration de la matrice S .

nommées dans l'ordre : *greater*, *lesser*, ordonnée dans le temps et anti-ordonnée dans le temps. Nous pouvons aussi relier les fonctions de Green précédentes aux fonctions de Green retardée et avancée

$$\begin{aligned} G_{\alpha,\beta}^r(t-t') &= G_{\alpha,\beta}^t(t-t') - G_{\alpha,\beta}^<(t-t') = \theta(t-t')(G_{\alpha,\beta}^>(t-t') - G_{\alpha,\beta}^<(t-t')), \\ G_{\alpha,\beta}^a(t-t') &= G_{\alpha,\beta}^t(t-t') - G_{\alpha,\beta}^>(t-t') = \theta(t'-t)(G_{\alpha,\beta}^<(t-t') - G_{\alpha,\beta}^>(t-t')). \end{aligned} \quad (1.29)$$

C'est avec ces fonctions de Green, briques élémentaires, que nous pouvons résoudre des problèmes hors-équilibre en développant la somme suivante :

$$G_{\alpha,\beta}(s, s') = -i \sum_n \frac{(-i)^n}{n!} \int ds_1 \int ds_2 \dots \int ds_n {}_0\langle T_s \hat{V}(s_1) \dots \hat{V}(s_n) c_\alpha(s) c_\beta^\dagger(s') \rangle_0. \quad (1.30)$$

Prenons comme exemple une perturbation quadratique : $\hat{V} = \sum_{\alpha',\beta'} t_{\alpha'\beta'} c_{\alpha'}^\dagger c_{\beta'} + \text{h.c.}$, nous pouvons alors trouver l'équation de Dyson pour un tel système. En appliquant le théorème de Wick, nous pouvons séparer $\langle \rangle$ en deux à tous ordres de perturbations :

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta}(s, s') &= g_{\alpha\beta}(s, s') - i \sum_n \frac{(-i)^n}{n!} n \int ds_n \sum_{\alpha'\beta'} t_{\alpha'\beta'} {}_0\langle T_s c_\alpha(s) c_{\alpha'}^\dagger(s_n) \rangle_0 \times \\ &\quad \int ds_1 \int ds_2 \dots \int ds_{n-1} {}_0\langle T_s \hat{V}(s_1) \dots \hat{V}(s_{n-1}) c_{\beta'}(s_n) c_\beta^\dagger(s') \rangle_0 \\ &= g_{\alpha\beta}(s, s') + \sum_{\alpha'\beta'} t_{\alpha'\beta'} \int ds_1 g_{\alpha\alpha'}(s, s_1) G_{\beta'\beta}(s_1, s'), \end{aligned} \quad (1.31)$$

où $g_{\alpha\beta}$ est la fonction de Green non perturbée du système, solution de H_0 et donc connue (elle est généralement nulle pour $\alpha \neq \beta$). Nous obtenons donc une équation de Dyson pour les temps placés sur le contour. La prochaine étape est d'écrire les fonctions de Green en intégrales de temps sur l'axe réel, pour cela nous allons présenter et utiliser les règles de Langreth [29]. Reprenons l'intégrale précédente et imaginons que la fonction de Green à calculer était de type greater, nous pouvons séparer le chemin de l'intégrale en deux, la partie haute et la partie basse :

$$\begin{aligned} \int ds_1 g_{\alpha\alpha'}(t^-, s_1) G_{\beta'\beta}(s_1, t'^+) &= \int_{-\infty C+}^{\infty} dt_1 g_{\alpha\alpha'}^>(t-t_1) G_{\beta'\beta}^t(t_1-t') \\ &\quad - \int_{-\infty C-}^{\infty} dt_1 g_{\alpha\alpha'}^<(t-t_1) G_{\beta'\beta}^>(t_1-t'), \end{aligned} \quad (1.32)$$

où le signe $-$ de la seconde intégrale est dû au fait que l'on intègre de $+\infty$ à $-\infty$. Une deuxième relation existe, plus pratique et plus souvent utilisée :

$$\begin{aligned} \int ds_1 g_{\alpha\alpha'}(t^-, s_1) G_{\beta'\beta}(s_1, t'^+) &= \int_{-\infty C+}^{\infty} dt_1 g_{\alpha\alpha'}^>(t-t_1) G_{\beta'\beta}^a(t_1-t') \\ &+ \int_{-\infty C-}^{\infty} dt_1 g_{\alpha\alpha'}^r(t-t_1) G_{\beta'\beta}^>(t_1-t'). \end{aligned} \quad (1.33)$$

ainsi les fonctions de Green ordonnée et anti-ordonnée dans le temps sont peu souvent utilisées. Pour résumer les règles de Langreth, voici les relation pour $D = \int_C AB$:

$$\begin{aligned} D^< &= \int (A^r B^< + A^< B^a), \\ D^> &= \int (A^r B^> + A^> B^a), \\ D^r &= \int (A^r B^r), \\ D^a &= \int (A^a B^a). \end{aligned} \quad (1.34)$$

1.2.3 Formalisme de Keldysh appliqué à une jonction tunnel

Afin de se familiariser au formalisme, nous allons traiter un cas hors-équilibre simple, le calcul du courant entre deux électrodes par effet tunnel ; ce cas fut traité en 1970 [14]. Le hamiltonien de départ est celui des deux électrodes non couplées :

$$H_0 = \sum_k (\xi_k + eV) c_{kL}^\dagger c_{kL} + \sum_k \xi_k c_{kR}^\dagger c_{kR}, \quad (1.35)$$

et la perturbation :

$$V = \sum_{k,k'} W c_{kL}^\dagger c_{k'R} + \text{h.c.} \quad (1.36)$$

Ainsi nous voulons calculer le courant en fonction de la tension, $I_L = e\dot{N}_L$. En utilisant les équations de mouvement, nous trouvons :

$$I_L(t) = \frac{ie}{h} \sum_{k,k'} (W \langle c_{kL}^\dagger(t) c_{k'R}(t) \rangle - W^* \langle c_{kR}^\dagger(t) c_{k'L}(t) \rangle). \quad (1.37)$$

Nous pouvons faire une transformation de Fourier du système :

$$\begin{aligned} I_L &= \frac{e}{h} \sum_{k,k'} \int d\omega (W G_{kRk'L}^<(\omega) - W^* G_{k'LkR}^<(\omega)), \\ &= \frac{2e}{h} \text{Re} \left(\sum_{k,k'} \int d\omega W G_{kRk'L}^<(\omega) \right). \end{aligned} \quad (1.38)$$

Nous cherchons une expression de $G_{RL}^<(\omega)$. En appliquant les équations de Dyson nous trouvons les relations suivantes :

$$G_{kRk'L}(s, s') = \int ds_1 g_{kR}(s, s_1) W \sum_{k_1} G_{k_1 L k' L}(s_1, s') \quad (1.39)$$

$$G_{kLk'L}(s, s') = g_{kL}(s, s') + \int ds_1 g_{kL}(s, s_1) W^* \sum_{k_1} G_{k_1 R k' L}(s_1, s'). \quad (1.40)$$

Nous reconnaissons ici des convolutions en intégrales de temps réel, sachant que toutes les fonctions de Green de Keldysh peuvent s'écrire en fonction de la différence de temps réel ($t - t'$). Nous pouvons formellement écrire la transformée de Fourier des équations précédentes et nous appliquerons, par la suite, les règles de Langreth. En combinant les deux équations précédentes nous trouvons :

$$\sum_{kk'} G_{kR, k' L}^a(\omega) = \sum_{kk'} g_{kR}^a W g_{k' L}^a + \sum_{k_1 k_2 k_3 k_4} g_{k_1 R}^a W g_{k_2 L}^a W^* G_{k_3 R k_4 L}^a. \quad (1.41)$$

Nous pouvons approximer pour les fonctions de Green non perturbées :

$$\sum_k g_{kL}^a(\omega) = i\pi\nu_L \quad \text{et} \quad \sum_k g_{kL}^< = 2i\pi\nu_L f_L(\omega), \quad (1.42)$$

où $f_L(\omega)$ est la fonction de Fermi et ν_L est la densité d'états à l'énergie de Fermi pour l'électrode gauche. Posant $\xi = \sum_{kk'} g_{kR}^r W g_{k' L}^a W^* = \pi^2 |W|^2 \nu_L \nu_R$ nous trouvons la relation :

$$\sum_{kk'} G_{kR, k' L}^a(\omega) = \sum_{kk'} \frac{g_{kR}^a W g_{k' L}^a}{1 + \xi}. \quad (1.43)$$

Nous pouvons aussi résoudre la fonction de Green lesser :

$$G_{RL}^< = (g_R^< W g_L^a + g_R^r W g_L^<)(1 + W^* G_{RL}^a) + g_R^r W g_L^a W^* G_{RL}^< \quad (1.44)$$

où nous choisissons la notation $G_{RL} = \sum_{kk'} G_{kRk'L}(\omega)$. Après simplification :

$$G_{RL}^< = (g_R^< W g_L^a + g_R^r W g_L^<) \frac{1}{(1 + \xi)^2}. \quad (1.45)$$

Finalement, nous obtenons la formule de courant tunnel pour un canal :

$$I_L = \frac{2e}{h} \int d\omega (f_L(\omega) - f_R(\omega)) \frac{4\xi}{(1 + \xi)^2}. \quad (1.46)$$

Nous obtenons la relation entre le courant et terme de saut direct entre les deux électrodes.

1.2.4 Formalisme de Keldysh appliqué au courant circulant à travers un microscope STM sondant un atome sur une surface

Nous allons maintenant présenter le calcul de Keldysh, ayant pour but de relier la formule de courant à la fonction de Green retardée. Ce cas fut traité dans de nombreux articles et à travers de nombreuses approximations [57, 77, 68]. Nous pouvons considérer que le hamiltonien $H_0 = H_{\text{Tip}} + H_{\text{Sub}} + H_{\text{dot}}$ est à l'équilibre avec :

$$\begin{aligned} H_{\text{Tip}} &= \sum_k (\xi_k - \mu_T) c_{kT}^\dagger c_{kT}, \\ H_{\text{Sub}} &= \sum_k (\xi_k - \mu_S) c_{kS}^\dagger c_{kS}, \\ H_{\text{dot}} &= \xi_d c_d^\dagger c_d + H_{\text{int}}(n_{d\uparrow}, n_{d\downarrow}). \end{aligned} \quad (1.47)$$

La partie hors-équilibre vient à travers les couplages entre ces trois parties. Nous considérons, dans un premier temps, que le microscope STM est loin du régime de contact. Dans ce cas nous pouvons approximer le couplage direct pointe surface par un couplage ponctuel [57]. La perturbation que nous allons traiter, celle qui rend le système hors-équilibre s'écrit alors :

$$H_{\text{tunnel}} = (W c_T^\dagger(R_t) c_S(R_0) + \text{h.c.}) + (t c_T^\dagger(R_t) c_d + \text{h.c.}) + (V c_S^\dagger(R_{\text{imp}}) c_d + \text{h.c.}). \quad (1.48)$$

Après transformation de Fourier nous obtenons :

$$H_{\text{tunnel}} = \sum_{kT k'S} (W c_{kT}^\dagger c_{k'S} + \text{h.c.}) + \sum_{kT} (t c_{kT}^\dagger c_d + \text{h.c.}) + \sum_{kS} (V c_{kS}^\dagger c_d + \text{h.c.}). \quad (1.49)$$

Après calculs, [voir Appendice A] nous pouvons relier le courant à la fonction de Green de l'atome aux différents couplages tunnels. Sachant que le courant sortant de la pointe ($I_T = -e\langle \dot{N}_T \rangle$) est égal au courant arrivant à la surface ($-I_S = e\langle \dot{N}_S \rangle$), nous pouvons utiliser cette propriété pour éliminer les fonctions de Green $G_d^<(\omega)$.

La formule finale obtenue, qui rejoint le calcul de Ueda et Eto [76] se basant sur le même modèle, mais pour un autre système, s'écrit :

$$I = \frac{2e}{h} \int d\omega [f_T(\omega) - f_S(\omega)] \times \left\{ T_r + \frac{T_r(\Gamma_S + \Gamma_T)}{(1 + \xi)} 2q \text{Re } G_d^r(\omega) + \frac{T_r(\Gamma_S + \Gamma_T)}{(1 + \xi)} (1 - q^2) \text{Im } G_d^r(\omega) \right\} \quad (1.50)$$

où T_r est le coefficient de transmission direct $T_r = \frac{4\xi}{(1+\xi)^2}$, $\Gamma_{T(S)}$ est l'élargissement dû à la pointe (à la surface) $\Gamma_T = \pi\nu_T t^2$, $\Gamma_S = \pi\nu_T V^2$ et q est le facteur de Fano,

$$q = \frac{tV}{W} \frac{(1 - \xi)}{\Gamma_S + \Gamma_T}. \quad (1.51)$$

Le facteur de Fano q traduit l'interférence produit par les deux chemins ayant pour résultat une asymétrie sur la résonance produite par l'impureté. Cette formule du courant est exacte pour le hamiltonien décrit ci-dessus. Lorsque le couplage direct tend vers 0, $W \sim 0$, $q \gg 1$ et nous retrouvons la formule de Meir-Weingreen [47] :

$$I = \frac{2e}{h} \int d\omega [f_T(\omega) - f_S(\omega)] \frac{2\Gamma_S \Gamma_T}{\Gamma_S + \Gamma_T} \text{Im } G_d^r(\omega) \}. \quad (1.52)$$

Nous pouvons réécrire le facteur de Fano :

$$q = 2 \frac{1 - (W\pi\nu)^2}{W\pi\nu} \frac{t/V}{1 + t^2/V^2}. \quad (1.53)$$

Nous pouvons constater que pour t/V très grand ou très petit, q tend vers 0. De manière générale, tout ce qui tend à privilégier un des deux chemins d'interférences éloigne q de la valeur 1.

1.3 Calculs Numériques *via* le groupe de renormalisation

Ici nous détaillerons la méthode numérique développée par Kenneth G. Wilson [79] afin de résoudre le hamiltonien d'Anderson via le groupe de renormalisation.

1.3.1 Présentation de la méthode

Nous considérons le hamiltonien $H = H_{\text{bath}} + H_{\text{Imp}} + H_t$ où H_{bath} correspond au bain électronique, H_{Imp} à l'impureté et H_t l'interaction entre l'impureté et les électrons de conduction :

$$H_{\text{bath}} = \sum_{k\sigma} \xi_{k\sigma} c_k^\dagger c_{k\sigma}, \quad (1.54)$$

$$H_{\text{Imp}} = \sum_{\sigma} \xi_d d_{\sigma}^\dagger d_{\sigma} + U d_{\uparrow}^\dagger d_{\uparrow} d_{\downarrow}^\dagger d_{\downarrow}, \quad (1.55)$$

$$H_t = \sum_{k\sigma} V_k (d_{\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + c_{k\sigma}^\dagger d_{\sigma}). \quad (1.56)$$

Trouver l'état fondamental d'un tel système pour les paramètres ($\xi_0 < \xi_F$ et $\xi + U > \xi_F$) est une chose difficile. En effet, les électrons de conduction autour de l'énergie de Fermi peuvent échanger leur spin avec l'électron porté par l'orbitale d , *via* un processus virtuel impliquant la double occupation de l'orbitale. De plus, nous ne pouvons pas projeter le système autour des basses énergies. En effet deux échelles d'énergie entrent en jeu $|\xi_k|, |\xi_k + U| \gg k_B T_K$. C'est pour relier ces deux échelles d'énergie que la résolution par méthode de renormalisation fût développée. Ici, nous détaillerons la méthode numérique dans le cas le plus simple afin de comprendre la physique sous-jacente à la méthode en nous basant sur la revue de Bulla *et al* [13].

L'influence du bain électronique sur l'impureté est déterminée par la fonction de couplage $\Delta(\omega)$:

$$\Delta(\omega) = \pi \sum_k V_k^2 \delta(\omega - \xi_k). \quad (1.57)$$

Nous avons donc intérêt à réécrire le hamiltonien en terme des énergies. Par la suite, pour simplifier la compréhension de la méthode, nous approximerons le terme de saut comme étant indépendant du vecteur d'onde ($V_k = V_0$) mais aussi la densité électronique comme étant constante sur la largeur de bande. Nous trouvons alors $\Delta(\omega) = \Delta_0 = \pi V_0^2$ et nous pouvons réécrire le hamiltonien :

$$H = H_{\text{Imp}} + \sum_{\sigma} \int_{-1}^1 d\varepsilon (\varepsilon a_{\varepsilon\sigma}^{\dagger} a_{\varepsilon\sigma} + V_0 (f_{\sigma}^{\dagger} a_{\varepsilon\sigma} + a_{\varepsilon\sigma}^{\dagger} f_{\sigma})), \quad (1.58)$$

où nous avons supposé que le couplage V_k était établi pour des énergies situées dans une largeur de bande D , $\xi_k \in [-D, D]$, le paramètre ε étant l'énergie normalisée $\varepsilon = \xi_k/D$.

La technique numérique de groupe renormalisation a pour stratégie les différentes étapes représentées figure 1.5. Voici les 3 étapes représentées :

- a) la division des énergies du bain électronique selon un intervalle logarithmique ;
- b) la réduction du spectre continu vers un ensemble d'états discrets ;
- c) la transformation du hamiltonien discret en celui d'une chaîne semi-infinie.

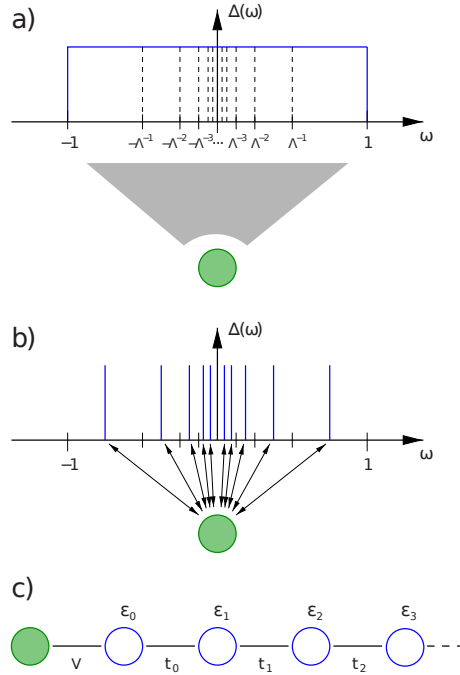


FIGURE 1.5 – Schéma des étapes de la méthode numérique de renormalisation.

1.3.2 Discrétisation

Nous souhaitons discrétiser le hamiltonien de manière logarithmique sur la variable énergie autour de l'énergie de Fermi. Nous prendrons comme paramètre $\Lambda > 1$ et découperons les régions selon les points d'énergies :

$$x_n = \pm \Lambda^{-n}, \quad (1.59)$$

où n est un entier positif. Une base complète de fonctions d'onde sur une région $x_{n+1} < \xi < x_n$ peut s'écrire :

$$\psi_{np}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{d_n}} e^{\pm i 2\pi p \xi / d_n}, \quad (1.60)$$

où $d_n = \Lambda^{-n}(1 - \Lambda^{-1})$ est la longueur en énergie de la région et où p prend toutes les valeurs entières. Dans la suite nous considérerons seulement les fonctions d'onde à $p = 0$, cette approximation étant valable pour une discrétisation avec un pas faible ($d_n \ll 1$). Nous nommerons $a_{n\sigma}$ les opérateurs création de fonctions d'onde $\psi_{n0}(\xi)$ et $b_{n\sigma}$ les opérateurs de création de fonctions d'onde $\psi_{n0}(-\xi)$ (dans la zone d'énergie négative).

Nous pouvons ainsi trouver le hamiltonien discrétisé :

$$\begin{aligned} H = & H_{\text{imp}} + \sum_{n\sigma} (\xi_n^+ a_{n\sigma}^\dagger a_{n\sigma} + \xi_n^- b_{n\sigma}^\dagger b_{n\sigma}) \\ & + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{\sigma} f_{\sigma}^\dagger \sum_n (\gamma_n^+ a_{n\sigma} + \gamma_n^- b_{n\sigma}) + \text{h.c.} \end{aligned} \quad (1.61)$$

Dans le cas $\Delta(\omega)$ constant nous trouvons $\xi_n^+ = -\xi_n^- = \frac{\Lambda^{-n} + \Lambda^{-n-1}}{2}$ soit l'énergie moyenne du pas et $\gamma_n^+ = \gamma_n^- = \sqrt{d_n \Delta_0}$.

1.3.3 Transformation vers une chaîne

Enfin nous souhaitons transformer le hamiltonien vers une chaîne où seul le premier site est connecté à l'impureté.

$$H = H_{\text{imp}} + V \sum_{\sigma} (f_{\sigma}^\dagger c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^\dagger f_{\sigma}) + \sum_{n\sigma} [\xi_n c_{n\sigma}^\dagger c_{n\sigma} + (t_n c_{n\sigma}^\dagger c_{n+1\sigma} + \text{h.c.})] \quad (1.62)$$

Cherchant une base orthogonale nous pouvons écrire formellement :

$$\begin{aligned} a_{n\sigma} &= \sum_m u_{mn} c_{m\sigma} \quad , \quad b_{n\sigma} = \sum_m v_{mn} c_{m\sigma}, \\ c_{m\sigma} &= \sum_n (u_{mn} a_{n\sigma} + v_{mn} b_{n\sigma}). \end{aligned} \quad (1.63)$$

où nous pouvons choisir les coefficients u_{mn}, v_{mn} réels.

Nous pouvons identifier :

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{\sigma} f_{\sigma}^{\dagger} \sum_n (\gamma_n^{+} a_{n\sigma} + \gamma_n^{-} b_{n\sigma}) + \text{h.c.} = V \sum_{\sigma} (f_{\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^{\dagger} f_{\sigma}), \quad (1.64)$$

ainsi que :

$$\sum_{n\sigma} (\xi_n^{+} a_{n\sigma}^{\dagger} a_{n\sigma} + \xi_n^{-} b_{n\sigma}^{\dagger} b_{n\sigma}) = \sum_{n\sigma} [\varepsilon_n c_{n\sigma}^{\dagger} c_{n\sigma} + (t_n c_{n\sigma}^{\dagger} c_{n+1\sigma} + \text{h.c.})]. \quad (1.65)$$

L'équation (1.64) nous donne une relation directe pour les opérateurs $c_{0\sigma}$. En rajoutant la condition de normalisation, nous trouvons :

$$V^2 \pi = \sum_n (\gamma_n^{+})^2 + (\gamma_n^{-})^2, \quad (1.66)$$

Ce qui nous amène à $V = V_0$. Nous en déduisons la relation :

$$u_{0m} = \frac{\gamma_m^{+}}{V\sqrt{\pi}} = \sqrt{d_m} \quad ; \quad v_{0m} = \frac{\gamma_m^{-}}{V\sqrt{\pi}} = \sqrt{d_m}. \quad (1.67)$$

Cherchant ε_0 nous pouvons remplacer dans la partie gauche de l'équation (1.65) les opérateurs $a_{n\sigma}$ et $b_{n\sigma}$ par les opérateurs c_n et identifier la partie $\varepsilon_0 c_{0\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma}$. Cela nous donne :

$$\varepsilon_0 = \sum_n \xi_n^{+} u_{0m}^2 + \xi_n^{-} v_{0m}^2 = 0. \quad (1.68)$$

Cherchant les valeurs t_0, u_{1m} et v_{1m} nous identifions les termes facteurs de $c_{0\sigma}$ des deux parties de l'équation (1.65) :

$$t_0 c_1^{\dagger} = \sum_n (\xi_n^{+} - \varepsilon_0) u_{0n} a_n^{\dagger} + (\xi_n^{-} - \varepsilon_0) v_{0n} b_n^{\dagger}. \quad (1.69)$$

Ainsi

$$\begin{aligned} t_0^2 &= \sum_n (\xi_n^{+} - \varepsilon_0)^2 u_{0m}^2 + (\xi_n^{-} - \varepsilon_0)^2 v_{0m}^2 = \frac{1}{2}, \\ u_{1m} &= \frac{1}{t_0} (\xi_n^{+} - \varepsilon_0) u_{0m} = \frac{\xi_n^{+} \sqrt{d_n}}{\sqrt{2}}, \\ v_{1m} &= \frac{1}{t_0} (\xi_n^{-} - \varepsilon_0) v_{0m} = \frac{\xi_n^{-} \sqrt{d_n}}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \quad (1.70)$$

Par le même procédé, nous pouvons construire entièrement notre chaîne semi-infinie. Dans le cas du terme constant $\Delta(\omega) = \Delta_0$, par symétrie, tous les termes ε_n sont nuls, aussi dans la limite du nombre n large, le terme de saut t_n prend la forme simple $t_n = \frac{1}{2}(1 + \Lambda^{-1})\Lambda^{-n/2}$, il décroît exponentiellement en n .

1.3.4 Diagonalisation itérative

Le hamiltonien étant réduit à celui d'une chaîne semi-infinie, nous pouvons maintenant le diagonaliser. À chaque maillon de chaîne ajouté, le nombre de degrés de liberté est multiplié par 4. La diagonalisation se fait de manière itérative afin de garder un nombre de degrés de liberté (N_s) calculable par ordinateur. Nous pouvons écrire le hamiltonien de départ :

$$H_0 = H_{\text{imp}} + \sum_{\sigma} \varepsilon_0 c_{0\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} + V \sum_{\sigma} (f_{\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^{\dagger} f_{\sigma}) \quad (1.71)$$

et le hamiltonien H_N où N est le nombre de sites pris en compte :

$$H_N = H_{N-1} + \sum_{\sigma} \varepsilon_N c_{N\sigma}^{\dagger} c_{N\sigma} + t_N (c_{N-1\sigma}^{\dagger} c_{N\sigma} + \text{h.c.}) . \quad (1.72)$$

La procédure de diagonalisations successives représentée figure 1.6 consiste à diagonaliser le hamiltonien H_N , garder seulement les N_s états les plus proches du niveau de Fermi, et, enfin, ajouter les couplages du précédent hamiltonien avec le site $N+1$. La réussite de cette méthode de calcul repose sur le fait que le terme de saut entre chaque site décroît exponentiellement, et ainsi couple faiblement les plus hautes énergies aux basses énergies. Ainsi la troncation des hautes énergies ne gêne pas le calcul des basses énergies tant que l'énergie maximale est bien inférieure au terme de saut ($\max(E_n) \ll t_n$). La projection sur une chaîne semi-infinie nous permet donc de séparer le couplage direct entre hautes énergies et basse énergies et à chaque itération. Les états propres du système sont calculés dans la bonne gamme d'énergie. Il est alors possible de trouver l'état fondamental du système de manière numérique, mais aussi la fonction spectrale, ainsi que toutes les propriétés du système à l'équilibre.

1.3.5 Conclusion

Dans cette section, nous avons présenté brièvement le calcul numérique de la résonance Kondo par groupe de renormalisation. Afin de conserver le but pédagogique de cette présentation, les détails techniques ont été écourtés. On peut remarquer que la majeure partie de la méthode est indépendante du hamiltonien de l'impureté et il est alors facile de prendre en compte une structure magnétique et d'adapter cette procédure à différents hamiltoniens. Par la suite pour effectuer tout calcul numérique par groupe de renormalisation nous nous sommes basés sur les codes développés par Rok Zitko (voir le site [www.http://nrgljubljana.ijs.si/](http://nrgljubljana.ijs.si/)).

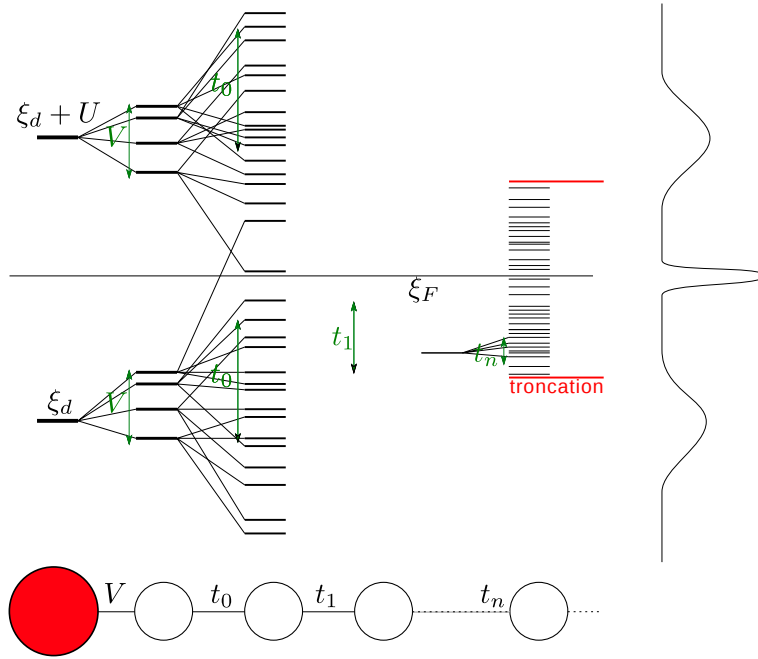


FIGURE 1.6 – Schéma représentant la diagonalisation itérative de la chaîne semi-infinie

1.4 Résonance Kondo en présence de structures magnétiques

Dans cette section, nous présenterons l'étude de l'effet Kondo en présence d'une polarisation de spin *via* un microscope STM [41, 43]. Une résonance Kondo se produit lorsque les électrons de conduction proches de la surface de Fermi écrantent le spin porté par une impureté ou par une boîte quantique. Cet écrantage est dû à un échange de spins entre l'impureté et les électrons de conduction d'énergies de l'ordre de $k_B T_K$ autour de l'énergie de Fermi. En effet, le processus de *spin-flip* ne se produit seulement s'il y a présence d'électrons et de trous de spins opposés à la même énergie. Une polarisation en spin implique une différence de densité d'électrons de spin opposé autour de l'énergie de Fermi. On comprend donc que l'effet Kondo soit très sensible à la polarisation de spin, car celle-ci affecte directement les processus de *spin-flip*.

Je présente ici un travail réalisé en collaboration avec l'équipe expérimentale de Laurent Limot de l'IPCMS à Strasbourg. Cette équipe a étudié *via* un microscope STM l'effet Kondo d'un atome de cobalt adsorbé sur une surface de cuivre en présence d'une polarisation de spin amenée par la pointe de leur microscope. Notre collaboration a montré une concordance quantitative entre les mesures et les simulations numériques.

1.4.1 Description du système

Le système étudié est composé d'une impureté adsorbée par un métal et d'une pointe polarisée. L'impureté adsorbée par le système peut être décrite par le modèle d'Anderson. L'expérience consiste en un atome de cobalt adsorbé sur une surface de cuivre (Cu100). De récents calculs par théorie de la fonction densité (DFT) ont montré que l'aimantation de l'atome de cobalt était dominée par deux orbitales atomiques d [9]. Il a été ensuite montré par des calculs de groupe de renormalisation numérique (NRG) combiné à ces résultats de DFT, que retenir seulement l'orbitale d_z^2 est suffisant pour capturer l'essentiel du comportement physique [34, 55]. Nous considérerons alors le hamiltonien d'Anderson à une seule orbitale. Le hamiltonien de ce système complet s'écrit $H = H_{\text{And}} + H_{\text{tip}} + H_{\text{tun}}$, où :

$$H_{\text{And}} = \varepsilon_d \sum_{\sigma} n_d + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} + \sum_{k,\sigma} \xi_k c_{k,\sigma}^{\dagger} c_{k,\sigma} + \sum_{k,\sigma} v_k (d_{\sigma}^{\dagger} c_{k,\sigma} + \text{h.c.}), \quad (1.73)$$

est le hamiltonien d'Anderson de spin $\frac{1}{2}$. La pointe est décrite par le hamiltonien suivant :

$$H_{\text{tip}} = \sum_{k,\sigma} \xi'_{k,\sigma} a_{k,\sigma}^{\dagger} a_{k,\sigma}, \quad (1.74)$$

où $\xi'_{k,\sigma}$ correspond à la bande d'énergie des électrons de la pointe participant au transport. Cette bande d'énergie a pour potentiel chimique $\mu_S + eV$ et peut avoir une dépendance en spin du fait du caractère magnétique de la pointe. Enfin H_{tun} décrit le couplage tunnel entre la pointe et la surface :

$$H_{\text{tun}} = \sum_{k,\sigma} (t_{k\sigma} a_{k,\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + \text{h.c.}) + \sum_{k,k',\sigma} (w_{k,k',\sigma} a_{k,\sigma}^{\dagger} c_{k',\sigma} + \text{h.c.}), \quad (1.75)$$

où $t_{k\sigma}$ est le couplage entre la pointe et l'atome de cobalt et où $w_{k,k',\sigma}$ est le couplage direct entre la pointe et la surface.

1.4.2 Modélisation du système

Afin d'effectuer le calcul NRG de ce système, il est possible de lui appliquer une transformation unitaire et de se rapporter à un système à une seule électrode [24]. Nous définissons une nouvelle base orthogonale :

$$\alpha_{k,\sigma} = \frac{t_{k,\sigma} a_{k,\sigma} + v_k c_{k,\sigma}}{V_{k,\sigma}} \quad ; \quad \beta_{k,\sigma} = \frac{t_{k,\sigma} c_{k,\sigma} - v_k a_{k,\sigma}}{V_{k,\sigma}}, \quad (1.76)$$

où $V_{k,\sigma} = \sqrt{t_{k,\sigma}^2 + v_k^2}$. Le nouvel hamiltonien s'écrit alors :

$$\begin{aligned} H = \varepsilon_d \sum_{\sigma} n_d + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} + \sum_{k,\sigma} \xi_{\alpha k \sigma} \alpha_{k,\sigma}^{\dagger} \alpha_{k,\sigma} + \sum_{k,\sigma} (V_{k,\sigma} \alpha_{k,\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + \text{h.c.}) \\ + \sum_{k,\sigma} \xi_{\beta k \sigma} \beta_{k,\sigma}^{\dagger} \beta_{k,\sigma} + \sum_{k,k',\sigma} (W_{k,k',\sigma} \alpha_{k,\sigma}^{\dagger} \beta_{k',\sigma} + \text{h.c.}), \end{aligned} \quad (1.77)$$

où $\xi_{\alpha k\sigma} = (\xi_k t_{k,\sigma}^2 + \xi'_{k,\sigma} v_k^2)/V_{k,\sigma}^2$ et $\xi_{\beta k\sigma} = (\xi_k v_k^2 + \xi'_{k,\sigma} t_{k,\sigma}^2)/V_{k,\sigma}^2$. Nous remarquons que les opérateurs $\beta_{k,\sigma}$ ne sont pas couplés directement à l'impureté. Nous les négligerons dans notre calcul NRG des fonctions de Green de l'impureté, en gardant seulement la première ligne de l'équation (1.77). Remarquons que les électrons de conduction de la pointe et de la surface participent à l'effet Kondo de manière proportionnelle à leur couplage à l'impureté.

Enfin, nous savons que toute l'information de l'électrode est contenue dans la fonction

$$\Gamma_\sigma(\omega) = \pi \sum_k V_{k,\sigma}^2 \delta(\omega - \xi_{\alpha,k,\sigma}). \quad (1.78)$$

Si on suppose le couplage indépendant de k , $V_{k,\sigma} = V_\sigma$, et la densité d'états constante autour de l'énergie de Fermi $\rho_{\alpha,\sigma}$ nous pouvons écrire :

$$\Gamma_\sigma(\omega) = \pi \rho_{\alpha,\sigma} V_\sigma^2 = \Gamma_{t\sigma} + \Gamma_s, \quad (1.79)$$

où $\Gamma_{t\sigma} = \pi \rho_{t\sigma} t_\sigma^2$ et $\Gamma_s = \pi \rho_s v^2$. Nous pouvons définir la polarisation totale ressentie par l'impureté $P = (\Gamma_\uparrow - \Gamma_\downarrow)/(\Gamma_\uparrow + \Gamma_\downarrow)$. Ainsi la polarisation totale dépend de la polarisation de la pointe *via* l'équation

$$P = P_t \frac{\Gamma_{t\uparrow} + \Gamma_{t\downarrow}}{\Gamma_{t\uparrow} + \Gamma_{t\downarrow} + 2\Gamma_s}. \quad (1.80)$$

On remarque ici que pour que la polarisation de la pointe affecte l'impureté, il faut un couplage fort entre la pointe et l'impureté. C'est pour cette raison que l'expérience est réalisée en régime de contact. En effet il fut montré que le couplage Γ_t variait en fonction de la distance pointe-atome et était visible sur la résonance Kondo en régime de contact [16].

En résumé, nous avons simplifié le calcul NRG du système d'une part *via* une transformation unitaire réduisant les deux électrodes à une seule et d'autre part en regroupant toutes les variables dépendantes de spins en une seule : la polarisation totale des électrodes P ressentie par l'impureté. Cette transformation représentée figure 1.7 nous donne le hamiltonien à résoudre suivant :

$$H = \sum_{k,\sigma} \xi_k c_{k,\sigma}^\dagger c'_{k,\sigma} + \varepsilon_d \sum_\sigma n_d + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} + \sum_{k,\sigma} \sqrt{\Gamma(1 + \sigma P)/(\pi\rho)} (d_\sigma^\dagger c'_{k\sigma} + \text{h.c.}), \quad (1.81)$$

où Γ est la fonction de couplage totale $\Gamma = \Gamma_s + (\Gamma_{t\uparrow} + \Gamma_{t\downarrow})/2$.

1.4.3 Calcul de la densité spectrale

Afin de calculer la densité spectrale, nous devons fixer certains paramètres. Des calculs *ab-initio* ont estimé les paramètres de demi-largeur de bande D et de couplage de Coulomb U fixes de valeur approximative $D = 7eV$ et $U = 2.1eV$.

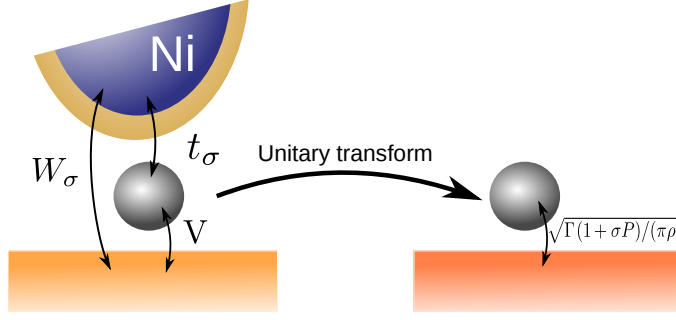


FIGURE 1.7 – Schéma représentant la transformation unitaire vers un système à une électrode.

À partir du hamiltonien précédent, nous pouvons définir la température de Kondo [30] pour une polarisation nulle comme :

$$\begin{aligned} k_B T_K &= \sqrt{\frac{\Gamma U}{2}} \exp\left(-\frac{|\varepsilon_d|(\varepsilon_d + U)}{2\Gamma U}\right) \\ &= \sqrt{\frac{\Gamma U}{2}} \exp\left(\frac{-|\delta_d^2 - \frac{U^2}{4}|}{2\Gamma U}\right), \end{aligned} \quad (1.82)$$

où nous avons introduit la variable d'asymétrie énergétique particule-trou $\delta_d = \xi_d + U/2$. Lorsque qu'il y a symétrie particule-trou ($\delta_d = 0$) le champ magnétique induit par la polarisation de spin est nul [45]. Cela implique que pour $\delta_d = 0$ aucun dédoublement de la résonance Kondo n'est attendu. Si δ_d est trop grand, le système devient trop éloigné de la symétrie particule-trou et n'est plus dans le régime Kondo. En effet, une contrainte importante est imposée à δ_d par la formule $\delta_d/U = 1 - n_d$. L'occupation du niveau d doit être proche de 1 pour que le système soit en régime Kondo [84]. Par la suite nous garderons pour ce rapport une valeur constante de $\delta_d/U = 0.15$, en accord avec les données expérimentales.

Ainsi, les deux paramètres restants sont le couplage total de l'impureté aux électrodes Γ ainsi que la polarisation totale P . Nous prendrons ces deux paramètres Γ et P comme paramètres d'ajustement afin de faire coïncider données expérimentales et théoriques. Le couplage Γ , ayant un lien direct avec la température Kondo, agira sur la largeur de la résonance Kondo ; la polarisation agit sur le dédoublement de la résonance [40, 44, 45] par un facteur proportionnel $\Delta \propto P\Gamma$. Sur la figure 1.8 nous pouvons voir le dédoublement progressif du pic Kondo en fonction de la polarisation.

1.4.4 Ajustement des courbes de NRG sur les données expérimentales

Suivant les résultats obtenus dans la section 1.2.4, reliant le courant à la fonction de Green retardée de l'impureté et aux paramètres de saut, nous pouvons écrire la conduc-

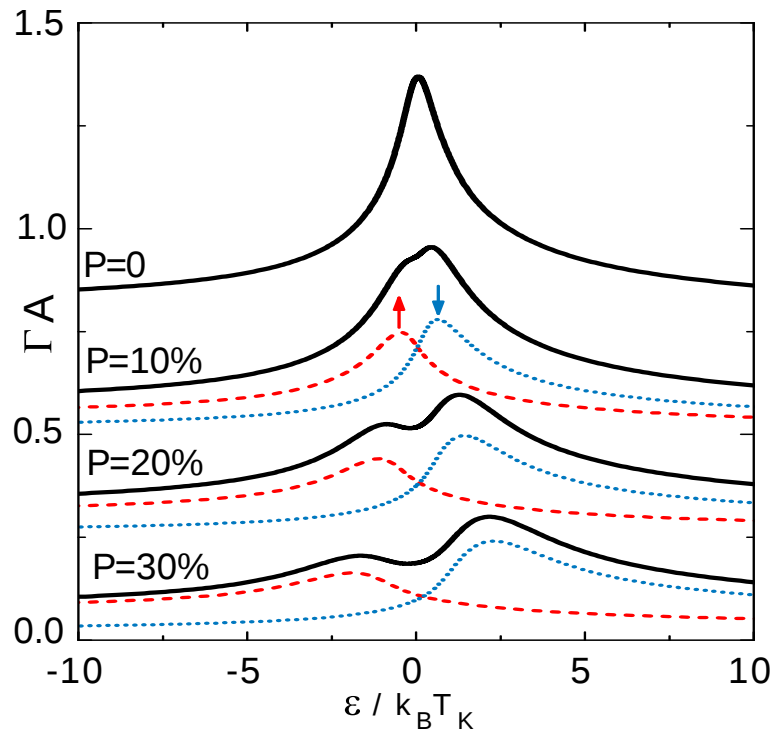


FIGURE 1.8 – Résonance Kondo en présence de polarisation. **Ligne noire** : densité spectrale totale. **Tirets rouges** : densité spectrale des électrons up. **Pointillés bleus** : densité spectrale des électron down.

tance différentielle comme :

$$dI/dV = \sum_{\sigma} \phi_{\sigma} [(q^2 - 1) \text{Im } G_{\sigma}(eV) + 2q \text{Re } G_{\sigma}(eV)] + T_r, \quad (1.83)$$

où $G_{\sigma}(eV)$ est la fonction de Green retardée de l'impureté donnée par le calcul NRG, ϕ_{σ} l'amplitude de la densité spectrale, q le facteur de Fano et T_r la conductance directe. Ce sont les paramètres d'ajustement en lien avec les paramètres microscopiques.

— le terme de couplage direct s'écrit :

$$T_r = \frac{4\xi}{(1 + \xi)^2}, \quad (1.84)$$

où $\xi = \pi^2 \nu^2 w$ où ν est la densité d'états et où $w = w_k$ est le terme de couplage direct entre la pointe et la surface, supposé constant. Dans l'expérience, ce terme augmente en fonction de la distance entre pointe et surface, deux régimes sont possibles : le régime tunnel et le régime de contact. Dans la suite, le point d'origine de la distance entre la pointe et la surface sera défini au point de transition entre le régime de contact et le régime tunnel.

— L'amplitude de la densité spectrale s'écrit :

$$\phi_{\sigma} = \frac{(1 - \xi)^2}{(1 + \xi)^2} \frac{2\Gamma_s \Gamma_{t,\sigma}}{\Gamma(1 + \sigma P)} = \phi \frac{1 + \sigma P_t}{1 + \sigma P}. \quad (1.85)$$

— Le facteur de Fano s'écrit :

$$q = \frac{w}{2t_{\sigma}v} \frac{\Gamma(1 + \sigma P)}{(1 - \xi)}. \quad (1.86)$$

La définition du facteur de Fano est prise ici comme l'inverse de celle définie dans la section 1.2.4, ce qui rend la formule plus facile à interpréter, le régime de contact correspondant alors à $q \sim 0$.

À travers cette formule, suivant la méthode développé par R. Zitko [83], nous avons ajusté les courbes des fonctions de Green obtenues par NRG sur les données expérimentales. Les données expérimentales correspondent à la conductance obtenue avec deux sortes de pointes, magnétiques et non magnétiques. L'ensemble des résultats est résumé dans les graphiques figure 1.9. Les deux pointes sont recouvertes d'une couche de cuivre de quelques nanomètres, ainsi le magnétisme de la pointe n'affecte pas directement l'impureté par effet Zeeman et les termes de couplage sont de la même amplitude. La pointe non-magnétique est constituée de tungstène et la pointe magnétique de nickel. Nous pouvons remarquer que dans les deux cas, la largeur de la résonance Kondo est du même ordre de grandeur. Celle-ci varie en fonction de la distance à la surface : en se rapprochant de l'atome le couplage pointe atome devient plus important ce qui augmente la

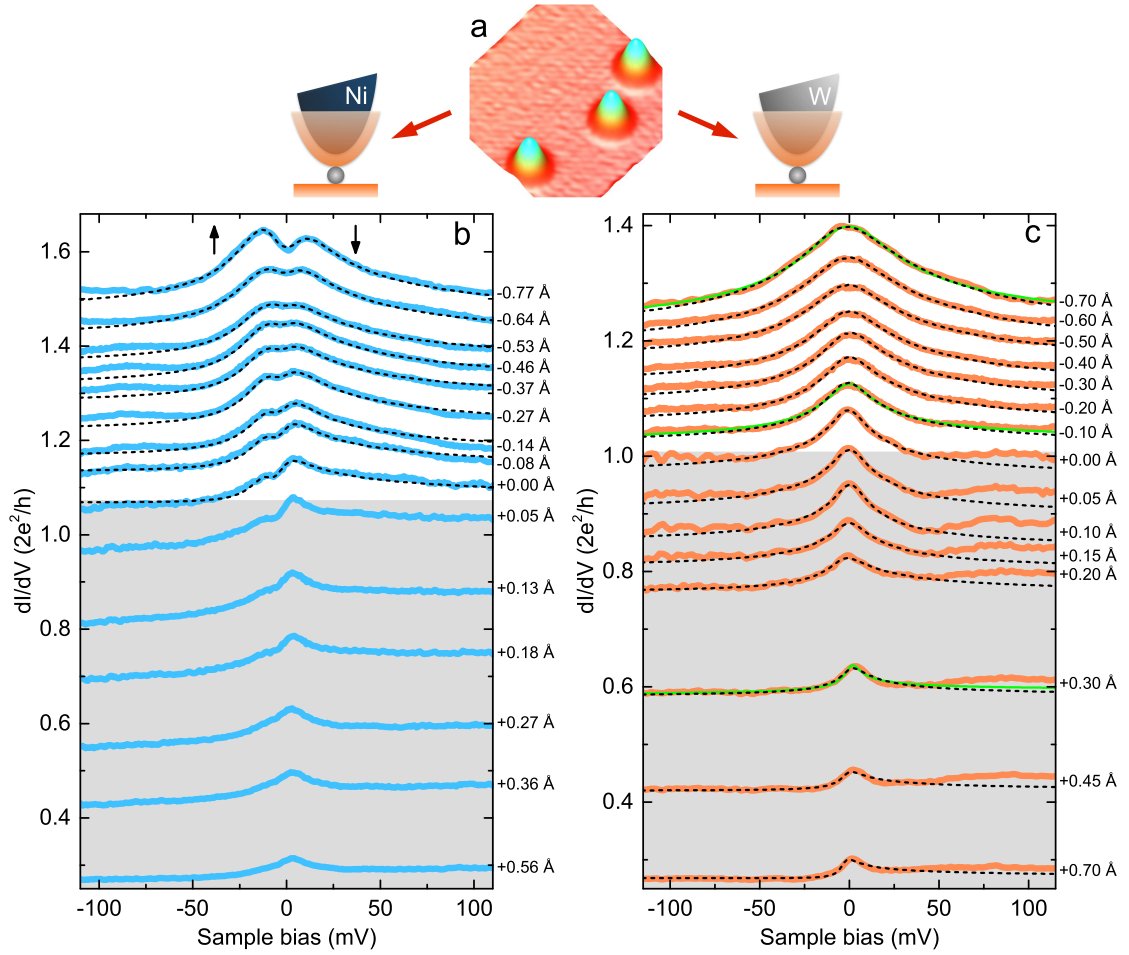


FIGURE 1.9 – Résonance Kondo en présence (ou non) d'une pointe polarisée. **À gauche** Conductance mesurée avec une pointe de nickel recouverte de cuivre (couleur de fond grise : régime tunnel; couleur de fond blanche contact régime). Chaque courbe a été mesurée à différentes hauteurs de points indiquées sur le coté droit, les pointillés correspondent aux courbes NRG ajustées. **À droite** Conductance mesurée avec une pointe de tungstène recouverte de cuivre, les pointillés correspondent aux courbes NRG ajustées.

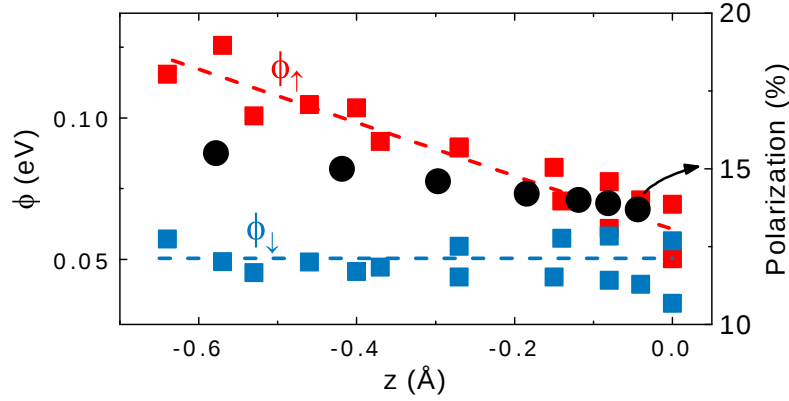


FIGURE 1.10 – Évolution de la polarisation et des amplitudes $\phi_{\uparrow}$ et $\phi_{\downarrow}$ en fonction de la distance pointe-surface.

température Kondo. Nous remarquons aussi que le dédoublement varie en fonction de la distance à la surface.

L'ajustement des courbes NRG sur les données expérimentales se fait en laissant les paramètres ϕ_{σ} , T_r q libres, et en minimisant l'écart quadratique entre les deux courbes pour diverses valeurs de polarisation P et de couplage total Γ . Les polarisations obtenues sont répertoriées dans le graphique figure 1.10. La polarisation moyenne calculée par notre méthode est de 15%, reliant ce résultat à la formule de l'amplitude (équation (1.85)) nous obtenons une polarisation approximative de la pointe de l'ordre de 50% ce qui est proche de la polarisation du matériau.

1.5 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons présenté l'effet Kondo dans sa globalité et montré à travers divers modèles ses propriétés. Nous avons détaillé la méthode de calcul numérique par groupe de renormalisation du modèle Anderson, ceci nous a permis de prendre en compte les effets de polarisation de spin du bain électronique. Nous avons ensuite établi le modèle de notre système (un microscope STM sondant un atome magnétique avec une pointe polarisée en spin). Nous avons montré que considérer seulement une orbitale de spin 1/2 portée par l'atome suffisait capturer la physique. Enfin nous avons montré qu'il était possible de regrouper l'ensemble des polarisations du système en un seul paramètre afin d'effectuer le calcul NRG de la fonction de Green de l'impureté. À travers le formalisme de Keldysh nous avons exprimé le courant d'un microscope STM à partir de cette fonction de Green, ceci nous a permis d'ajuster les courbes numériques données par le calcul NRG aux données expérimentales. Ainsi pour une expérience réalisée avec une pointe STM magnétique au-dessus d'un atome de cobalt, nous avons pu déterminer la polarisation ressentie par l'impureté ainsi que la polarisation de la pointe.

Chapitre 2

États de Yu-Shiba-Rusinov

2.1 Introduction

Coupler des degrés de liberté d'objets classiques à un système quantique peut donner lieu à de nouvelles fonctionnalités non présentes dans les deux systèmes pris séparément. L'état de Yu-Shiba-Rusinov (YSR) en est une parfaite illustration. Les états de YSR sont des états électroniques localisés dans les supraconducteurs et dont l'énergie se trouve à l'intérieur du gap supraconducteur ; ceux-ci se forment autour d'impuretés magnétiques. Le traitement classique du spin de l'impureté revient à remplacer ce dernier par un champ magnétique local qui brise donc l'invariance par renversement du temps. Ce champ donne donc lieu à une excitation à l'intérieur du gap car il devient plus facile de casser une paire de Cooper. Ces états liés de YSR peuvent par ailleurs servir de brique élémentaire pour émuler de la supraconductivité topologique [12, 53, 56].

2.1.1 Supraconductivité

La supraconductivité fut découverte en 1911 par Kamerlingh-Onnes à travers la disparition de la résistance électrique mesurée sur du mercure en dessous d'une température critique $T_c = 4.2\text{K}$. En 1933, Meissner et Ochsenfeld ont observé que les supraconducteurs étaient des matériaux diamagnétiques parfaits [48], repoussant complètement le champ magnétique. Au cours l'année suivante, Gorter et Casimir postulèrent que la supraconductivité était due à un état superfluide des électrons de conduction [26]. La théorie de Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) fut en 1957, le premier modèle microscopique qui décrivit avec succès la supraconductivité [8]. Je donnerai dans cette section une brève introduction à cette théorie.

La théorie BCS commence en 1956 par les travaux de Cooper [19]. Il remarqua qu'une faible interaction attractive entre électrons suffisait à rendre les états électroniques

proches de l'énergie de Fermi instables. Cette théorie peut s'exprimer à travers le hamiltonien suivant [11] :

$$H = \sum_k \xi_k c_k^\dagger c_k - V_0 \sum_{k, k' > k_F} c_{k'\uparrow}^\dagger c_{-k'\downarrow}^\dagger c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow}, \quad (2.1)$$

où ξ_k est la bande électronique du métal et où $V_0 > 0$ est l'interaction attractive entre électrons. Notre objectif est de trouver l'énergie d'une paire d'électrons que l'on ajoute au dessus du niveau de Fermi. C'est pourquoi nous ne considérons ici que l'attraction entre électrons au-dessus du niveau de Fermi. Nous pouvons chercher une solution sous la forme de l'ansatz suivant :

$$|\psi\rangle = \sum_k \alpha_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger |FS\rangle, \quad (2.2)$$

où $|FS\rangle$ dénote les états de la mer de Fermi. Le calcul de $\langle FS | c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} H | \psi \rangle$ obéit à l'équation :

$$2\alpha_k \xi_k - V_0 \sum_{k' > k_F} \alpha_{k'} = E \alpha_k. \quad (2.3)$$

Cette équation nous donne une relation pour l'énergie (appliquant une somme sur les α_k) :

$$1 = V_0 \sum_{k > k_F} \frac{1}{2\xi_k - E}. \quad (2.4)$$

Afin de résoudre cette équation, nous incluons un certain *cut-off* ω_D dans l'interaction attractive, respectant l'échelle d'énergie $E \ll \omega_D \ll E_F$, nous trouvons :

$$E = -2\hbar\omega_D \exp\left(-\frac{1}{V_0\nu_0}\right), \quad (2.5)$$

où ν_0 est la densité d'états au niveau de Fermi. Cette énergie étant négative, ce modèle nous montre qu'une petite attraction entre électrons est suffisante pour que la création d'une paire de Cooper diminue l'énergie totale. Cette attraction entre électrons est due à l'interaction électron-phonon dans la plupart des supraconducteurs et l'explication intuitive est la suivante : lorsqu'un électron se propage dans un cristal, il attire les ions positifs. Cela crée un champ électrique positif dans son sillage attirant les autres électrons. On comprend aussi, par cette explication, que les paires formées respectant la symétrie par renversement du temps soient privilégiées, les deux électrons pouvant profiter de leurs sillages respectifs.

Nous allons maintenant considérer le système dans l'état supraconducteur, la formation de paires de Cooper nous suggère un état fondamental de la forme suivante :

$$|\psi_{\text{BCS}}\rangle = \prod_k (u_k + v_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger) |0\rangle. \quad (2.6)$$

Cette écriture permet ainsi de supposer qu'autour de l'énergie de Fermi la condensation des paires de Cooper donne lieu à une superposition d'états remplis et vides. Nous cherchons à déterminer les coefficients u_k et v_k qui résolvent le hamiltonien :

$$H_{\text{BCS}} = \sum_{k\sigma} \xi_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} - V_0 \sum_{kk'} c_{k'\uparrow}^\dagger c_{-k'\downarrow}^\dagger c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow}. \quad (2.7)$$

Souhaitant le résoudre par une approximation de champ moyen, nous supposons que la fluctuation du nombre de paires de Cooper est assez faible ce qui nous permet d'écrire :

$$c_{k'\uparrow}^\dagger c_{-k'\downarrow}^\dagger c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} = \langle c_{k'\uparrow}^\dagger c_{-k'\downarrow}^\dagger \rangle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} + \langle c_{k'\uparrow}^\dagger c_{-k'\downarrow}^\dagger \rangle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} + \text{cst.} \quad (2.8)$$

Nous pouvons alors écrire le hamiltonien comme :

$$H_{\text{BCS}} = \sum_{k\sigma} \xi_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} - \sum_l \Delta c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger - \Delta^* c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow}, \quad (2.9)$$

où Δ sera le paramètre d'ordre supraconducteur, donné par l'équation :

$$\Delta = \sum_k V_0 \langle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \rangle. \quad (2.10)$$

Bien que ce ne soit pas nécessaire, il est commode d'écrire ce hamiltonien à l'aide de spineur $A_k = (c_{k\uparrow}, c_{-k\downarrow}^\dagger)^T$:

$$H_{\text{BCS}} = \sum_{k\sigma} A_k^\dagger (\xi_k \tau_z + \Delta \tau_x) A_k, \quad (2.11)$$

où les matrices τ sont les matrices de Pauli et où nous avons choisi arbitrairement la phase du paramètre complexe Δ comme étant nulle. La résolution d'un tel hamiltonien est directe,

$$E_k = \sqrt{\Delta^2 + \xi_k^2} \quad ; \quad \psi_{k-} = \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} \quad ; \quad \psi_{k+} = \begin{pmatrix} v_k \\ -u_k \end{pmatrix}, \quad (2.12)$$

où $\psi_{k\pm}$ correspondent aux vecteurs propres d'énergies $\pm E_k$ avec u_k et v_k ayant pour expression :

$$u_k = \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{\xi_k}{2E_k}} \quad ; \quad v_k = \sqrt{\frac{1}{2} - \frac{\xi_k}{2E_k}}. \quad (2.13)$$

Cherchant à construire l'état fondamental, nous réécrivons le hamiltonien dans la base diagonale, *i.e.* la base de Bogoliubov $\gamma_{k+} = \psi_{k+}^T \cdot A_k$ et $\gamma_{k-}^\dagger = \psi_{k-}^T \cdot A_k$. Dans cette base :

$$H_{\text{BCS}} = \sum_{k\pm} E_k \gamma_{k\pm}^\dagger \gamma_{k\pm}. \quad (2.14)$$

Les opérateurs γ sont des opérateurs fermioniques, l'état fondamental à température nulle correspond à l'occupation de tous les états d'énergie inférieure à zéro. Nous pouvons construire cet état en multipliant tous les opérateurs correspondants.

$$\prod_k \gamma_{k+} \gamma_{k-} = \prod_k v_k \prod_k (u_k + v_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger) |0\rangle. \quad (2.15)$$

Nous retrouvons la même formule de l'état fondamental écrite plus haut à un facteur près. Nous pouvons remarquer que loin de l'énergie de Fermi, le système se comporte de manière métallique, $E_k \sim |\xi_k|$, pour des énergies positives : $u_k \sim 1$; $v_k \sim 0$ et inversement pour des énergies négatives : $u_k \sim 0$; $v_k \sim 1$. Nous pouvons résoudre l'équation du gap (2.10),

$$\Delta = \sum_k V_0 \langle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \rangle = \sum_k V_0 u_k v_k (\langle \gamma_{-k\downarrow} \gamma_{-k\downarrow}^\dagger \rangle - (\langle \gamma_{k\uparrow}^\dagger \gamma_{k\uparrow} \rangle)). \quad (2.16)$$

Les opérateurs γ étant fermioniques, ils répondent à la statistique de Fermi

$$\Delta = \sum_k V_0 u_k v_k [1 - 2n_F(E_k)] = \sum_k V_0 \frac{\Delta}{2E_k} [1 - 2n_F(E_k)]. \quad (2.17)$$

Dans la limite $T = 0$, $E_k > 0$ implique $n_F(E_k) = 0$, l'équation auto-cohérente se simplifie en

$$1 = V_0 \nu_0 \int_0^{\omega_D} \frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} = V_0 \nu_0 \sinh^{-1} \left(\frac{\omega_D}{\Delta} \right). \quad (2.18)$$

Dans cette section, nous avons introduit la théorie BCS, déterminé son état fondamental et résolu l'équation du gap. Par la suite, nous montrerons comment les propriétés supraconductrices sont altérées par les impuretés magnétiques.

2.1.2 Théorème d'Anderson

Le théorème d'Anderson [5] stipule que les perturbations symétriques par renversement du temps ne peuvent pas altérer un supraconducteur en onde s , en d'autres termes seules les perturbations magnétiques peuvent briser la supraconductivité singulet. Nous présenterons ici ce théorème en résolvant un système supraconducteur en présence d'un potentiel scalaire aléatoire et nous montrerons que ce potentiel n'altère pas le gap supraconducteur.

Nous pouvons écrire le hamiltonien de la partie métallique en présence d'un potentiel aléatoire comme :

$$H_0 = \sum_{\sigma} \left[\sum_k \xi_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \int dr V(r) \psi_\sigma^\dagger(r) \psi_\sigma(r) \right], \quad (2.19)$$

où $\psi_\sigma(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k c_{k\sigma} e^{ik \cdot r}$. La résolution de ce hamiltonien est complexe mais nous pouvons toujours écrire formellement la solution comme $H_0 = \sum_{\alpha,\sigma} \xi_\alpha c_{\alpha\sigma}^\dagger c_{\alpha\sigma}$ où ξ_α ne dépend pas du spin. Pour un potentiel aléatoire dont la variation reste faible comparée à la largeur de bande, nous savons que chaque vecteur propre est un état électronique étendu sur plusieurs longueurs de Fermi. Le terme supraconducteur dans l'espace réel s'écrit :

$$H_S = \int dr (\Delta(r) \psi_\uparrow^\dagger(r) \psi_\downarrow(r) + \Delta^*(r) \psi_\downarrow(r) \psi_\uparrow(r)), \quad (2.20)$$

avec la relation,

$$\Delta(r) = V_0 \langle \psi_{\downarrow}(r) \psi_{\uparrow}(r) \rangle. \quad (2.21)$$

Le changement de base entre les $\psi(r)$ et les c_{α} s'écrit :

$$\psi_{\sigma}(r) = \sum_{\alpha} \phi_{\alpha}(r) c_{\alpha, \sigma}, \quad (2.22)$$

et nous savons que les fonctions $\phi_{\alpha}(r)$ sont étendues. Ceci produit un effet de moyenne qui nous permet de supposer le paramètre supraconducteur $\Delta(r)$ indépendant de la position et de le substituer à sa moyenne spatiale,

$$\Delta = \frac{1}{\Omega} \int dr \Delta(r) = \frac{1}{V} \int dr V_0 \sum_{\alpha, \beta} \phi_{\alpha}(r) \phi_{\beta}(r) \langle c_{\alpha \downarrow} c_{\beta \uparrow} \rangle, \quad (2.23)$$

avec Ω le volume du système. Cependant la base c_{α} est orthogonale cela implique $\int dr \phi_{\alpha}(r) \phi_{\beta}(r) = \delta_{\alpha \beta}$ ce qui donne directement :

$$\Delta = V_0 \sum_{\alpha} \langle c_{\alpha \downarrow} c_{\alpha \uparrow} \rangle. \quad (2.24)$$

Le hamiltonien total étant

$$H = \sum_{\alpha, \sigma} \xi_{\alpha} c_{\alpha \sigma}^{\dagger} c_{\alpha \sigma} - \sum_{\alpha} (\Delta c_{\alpha \uparrow}^{\dagger} c_{\alpha \downarrow}^{\dagger} + \text{h.c.}), \quad (2.25)$$

nous retrouvons le hamiltonien BCS avec les mêmes paramètres : la supraconductivité n'est pas affectée par les potentiels ne brisant pas l'invariance par renversement du temps. Cependant, une perturbation dépendant du spin ne permettrait pas de retrouver le hamiltonien BCS, les fonctions $\phi_{\alpha \uparrow}(r)$ et $\phi_{\beta \downarrow}(r)$ ne seraient plus orthogonales. Nous pouvons conclure que seuls les structures magnétiques peuvent changer les propriétés d'un supraconducteur de type *s-wave*.

2.1.3 Impuretés magnétiques

Il fut montré assez tôt après la découverte de la supraconductivité qu'une faible densité d'impuretés magnétiques suffisait à modifier de manière drastique les propriétés du supraconducteur. Ceci entraîna le travail théorique de Abrikosov et Gor'kov [2] qui montrèrent une réduction du gap BCS en fonction de la densité d'impuretés. Plus tard, les trois chercheurs L. Yu, H. Shiba et A. I. Rusinov [81, 72, 63] montrèrent indépendamment que des états électroniques locaux se forment à l'intérieur du gap, autour des impuretés dont le spin est traité comme « classique ». Plusieurs hypothèses peuvent amener à considérer un spin comme étant classique. La première hypothèse est de considérer un grand nombre quantique associé au spin de l'impureté. Ainsi le processus entraînant la *spin-flip* des électrons *via* le spin de l'impureté ne change que faiblement la direction de ce dernier, ce qui permet par effet de moyenne de négliger ces fluctuations. La deuxième

hypothèse est de considérer le spin comme étant situé dans une zone anisotrope (comme par exemple à la surface du métal), où une certaine direction du spin sera privilégiée. Les résolutions analytiques faites par Yu, Shiba et Rusinov amènent au même résultat. H. Shiba utilisa le formalisme des fonctions de Green traitant l'impureté par développement en matrices T tandis que Rusinov et Yu utilisèrent les équations de Bogoliubov de Gennes (voir Annexe B).

La première mise en évidence expérimentale de tels états fut faite par Ali Yazdani *et al.* [80]. Dans cette expérience, des atomes magnétiques furent déposés sur la surface d'un supraconducteur, et des états de YSR furent observés à l'aide d'un microscope STM. Les impuretés étant déposées sur le substrat, le couplage entre impuretés et supraconducteur est, dans cette expérience, très faible. Ceci amène des états dont l'énergie est très proche du bord du gap. Les résultats de cette expérience sont présentés en figure 2.1.

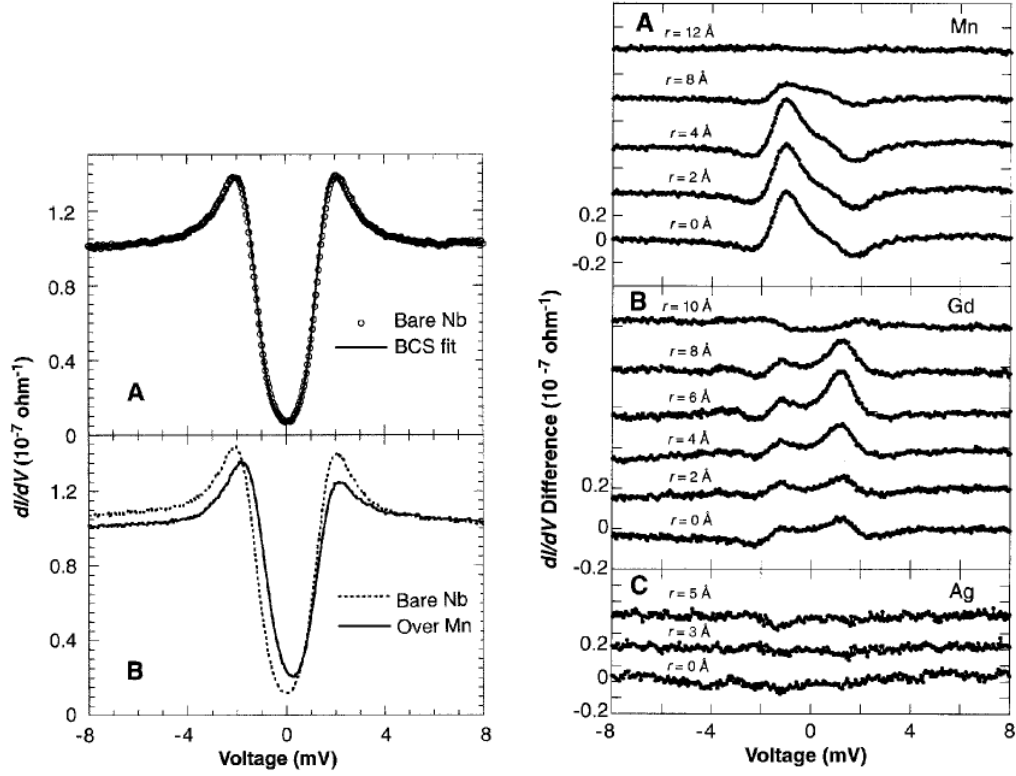


FIGURE 2.1 – Figure tirée de [80]. **À gauche, A** La conductance (dI/dV) en fonction de la tension prise *via* microscope STM au dessus d'une surface de Nb(110) supraconducteur. **B** en trait plein, la conductance mesurée au dessus d'un atome de magnésium magnétique, en pointillés, la conductance mesurée sur une surface propre.

À droite, A, B et C correspondent à la différence de conductance mesurée près d'atomes de magnésium, gadolinium et argent. La différence de conductance correspond à la différence entre la présence et non présence de l'atome. Dans le spectre obtenu, nous pouvons voir la présence de pics dans le cas des atomes magnétiques, ceux-ci sont dus aux états de YSR dont l'énergie est comprise dans le gap.

2.2 Résolution analytique et numérique

Ici nous suivrons la méthode présentée par Pientka *et al.* [56]. Nous considérons un supraconducteur de type BCS décrit par le hamiltonien de Bogoliubov-de Gennes [21],

$$H_{\text{BdG}} = \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} (c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} + c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow}) + \Delta (c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}), \quad (2.26)$$

où $\xi_{\mathbf{k}}$ correspond à l'énergie de bande électronique du métal et où Δ est le paramètre supraconducteur. Nous considérons que l'impureté produit un champ d'échange ponctuel,

$$H_{\text{Imp}} = (K - J) c_{\uparrow}^\dagger(\mathbf{r}_{\text{Imp}}) c_{\uparrow}(\mathbf{r}_{\text{Imp}}) + (K + J) c_{\downarrow}^\dagger(\mathbf{r}_{\text{Imp}}) c_{\downarrow}(\mathbf{r}_{\text{Imp}}), \quad (2.27)$$

où $K(J)$ est le champ scalaire (Zeeman) produit par l'impureté, et où $c(\mathbf{r}_{\text{Imp}})$ est l'opérateur annihilation électronique à la position $\mathbf{r}_{\text{Imp}}$ de l'impureté. Nous remarquons que la partie du hamiltonien H_{BdG} est diagonale dans l'espace des impulsions et que la partie H_{Imp} est diagonale dans l'espace réel. Nous pouvons définir les spineurs de Nambu dans ces deux espaces. Dans l'espace des impulsions le spineur s'écrit $\Psi(\mathbf{k}) = (u_{\uparrow\mathbf{k}}, u_{\downarrow\mathbf{k}}, v_{\downarrow-\mathbf{k}}, -v_{\uparrow-\mathbf{k}})^T$ et dans cette base H_{BdG} s'écrit :

$$H_{\text{BdG}} = \xi_{\mathbf{k}} \tau_z + \Delta \tau_x. \quad (2.28)$$

Dans l'espace position le spineur s'écrit $\Psi(\mathbf{r}) = (u_{\uparrow\mathbf{r}}, u_{\downarrow\mathbf{r}}, v_{\downarrow\mathbf{r}}, -v_{\uparrow\mathbf{r}})^T$, dans cette base H_{Imp} s'écrit :

$$H_{\text{Imp}} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\text{Imp}}) (K \tau_z - J \sigma_z). \quad (2.29)$$

Nous définissons la transformée de Fourier par

$$\Psi(\mathbf{r}) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \Psi(\mathbf{k}). \quad (2.30)$$

Nous remarquons que le hamiltonien est diagonal dans l'espace de spin (pas de terme en σ_x et σ_y) ainsi nous pouvons résoudre le système dans les sous-blocs définis par les spineurs $\phi_+(\mathbf{k}) = (u_{\uparrow\mathbf{k}}, v_{\downarrow-\mathbf{k}})^T$ et $\phi_-(\mathbf{k}) = (u_{\downarrow\mathbf{k}}, -v_{\uparrow-\mathbf{k}})^T$. De plus le hamiltonien possède la symétrie particule-trou définie par l'opérateur $\Xi = \sigma_y \tau_y K$ où K est l'opérateur complexe conjugué *via* $\{H, \Xi\} = 0$. Pour chaque solution $H\Psi = E\Psi$ nous avons la solution symétrique $H\Xi\Psi = -E\Xi\Psi$, ainsi pour chaque vecteur propre $\phi_+(\mathbf{k}) = (u_{\uparrow\mathbf{k}}, v_{\downarrow-\mathbf{k}})^T$ de valeur propre E nous avons la solution $\phi_-(\mathbf{k}) = (v_{\downarrow-\mathbf{k}}^*, -u_{\uparrow\mathbf{k}}^*)^T$ de valeur propre $-E$.

Nous pouvons écrire l'équation aux valeurs propres dans le sous-espace :

$$\begin{aligned} (\xi_{\mathbf{k}} \tau_z + \Delta \tau_x - E) \phi_+(\mathbf{k}) &= -(K \tau_z - J) \phi_+(\mathbf{r}_{\text{Imp}}), \\ \phi_+(\mathbf{k}) &= -\frac{E + \xi_{\mathbf{k}} \tau_z + \Delta \tau_x}{E^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2 - \Delta^2} (K \tau_z - J) \phi_+(\mathbf{r}_{\text{Imp}}). \end{aligned} \quad (2.31)$$

Sans perdre en généralités nous pouvons choisir $\mathbf{r}_{\text{Imp}} = \mathbf{0}$, ainsi $\phi_+(\mathbf{0}) = \int d\mathbf{k}/(2\pi)^d \phi_+(\mathbf{k})$ nous pouvons alors intégrer l'équation (2.31) afin d'obtenir une équation auto-cohérente :

$$\phi_+(\mathbf{0}) = - \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \frac{E + \xi_k \tau_z + \Delta \tau_x}{E^2 - \xi_k^2 - \Delta^2} (K \tau_z - J) \phi_+(\mathbf{0}). \quad (2.32)$$

Supposant la densité d'états constante autour de l'énergie de Fermi sur des énergies de l'ordre de celle du gap supraconducteur, nous pouvons simplifier l'équation [56, 63] :

$$\begin{aligned} \phi_+(\mathbf{0}) &= -\nu_0 \int d\xi \frac{E + \xi \tau_z + \Delta \tau_x}{E^2 - \xi^2 - \Delta^2} (K \tau_z - J) \phi_+(\mathbf{0}) \\ &= \nu_0 \pi \frac{E + \Delta \tau_x}{\sqrt{\Delta^2 - E^2}} (K \tau_z - J) \phi_+(\mathbf{0}). \end{aligned} \quad (2.33)$$

Nous cherchons les états à l'intérieur du gap ($-\Delta < E < \Delta$). Les états à l'extérieur étant directement couplés au continuum, nous pouvons déterminer l'énergie de l'état lié sachant que la matrice suivante doit avoir un déterminant nul

$$\det(\mathbb{1} - \frac{E + \Delta \tau_x}{\sqrt{\Delta^2 - E^2}} (\beta \tau_z - \alpha)) = 1 + \alpha^2 - \beta^2 + 2\alpha \frac{E}{\sqrt{\Delta^2 - E^2}} = 0, \quad (2.34)$$

où $\alpha = \nu_0 \pi J$ et $\beta = \nu_0 \pi K$. Cette équation a pour solution

$$E_S = \Delta \frac{1 - \alpha^2 + \beta^2}{\sqrt{4\alpha^2 + (1 - \alpha^2 + \beta^2)^2}}. \quad (2.35)$$

Nous cherchons ensuite à obtenir le vecteur $\phi_+(\mathbf{0}) = (\phi_{e0}, \phi_{h0})$. En résolvant l'équation (2.33) nous obtenons :

$$\frac{\phi_{e0}}{\phi_{h0}} = \frac{1 + (\alpha - \beta)^2}{\sqrt{4\alpha^2 + (1 - \alpha^2 + \beta^2)^2}}. \quad (2.36)$$

Enfin, grâce à la condition de normalisation dans l'espace des impulsion

$$\int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \phi_+(\mathbf{k})^T \cdot \phi_+(\mathbf{k}) = 1 \quad (2.37)$$

appliquée à la formule (2.31) nous trouvons les coefficients normalisés :

$$\begin{aligned} \phi_{e0} &= \frac{\sqrt{2\pi\nu_0\Delta\alpha}}{\sqrt{1 + (\alpha - \beta)^2 [4\alpha^2 + (1 - \alpha^2 + \beta^2)^2]^{\frac{1}{4}}}}, \\ \phi_{h0} &= \frac{\sqrt{2\pi\nu_0\Delta\alpha}}{\sqrt{1 + (\alpha + \beta)^2 [4\alpha^2 + (1 - \alpha^2 + \beta^2)^2]^{\frac{1}{4}}}}. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Inspiré par l'article original de Rusinov [63] nous cherchons à simplifier ces résultats en appliquant le paramétrage

$$\tan(\delta^\pm) = \beta \pm \alpha, \quad (2.39)$$

ainsi nous obtenons les expressions suivantes :

$$\begin{aligned} E_S &= \Delta \cos(\delta^+ - \delta^-), \\ \phi_+(\mathbf{0}) &= \begin{pmatrix} \cos \delta^- \\ \cos \delta^+ \end{pmatrix} \sqrt{2\pi\nu\Delta\alpha \cos \delta^- \cos \delta^+}. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Cherchons maintenant à trouver la forme complète de la fonction d'onde, la transformation de Fourier de $\phi_+(\mathbf{k})$ nous donne l'expression :

$$\phi_+(\mathbf{r}) = - \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \frac{E_S + \xi_k \tau_z + \Delta \tau_x}{E_S^2 - \xi_k^2 - \Delta^2} [K \tau_z - J] \phi_+(\mathbf{0}). \quad (2.41)$$

Afin de résoudre cette équation nous avons besoin de calculer les deux intégrales suivantes

$$f_0 = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{E_S^2 - \xi_k^2 - \Delta^2}, \quad (2.42)$$

et

$$f_1 = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \frac{\xi_k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{E_S^2 - \xi_k^2 - \Delta^2}. \quad (2.43)$$

La résolution de ces intégrales dépendent de la dimension. Analytiquement nous ne pouvons que donner la solution asymptotique en faisant l'approximation isotrope et en linéarisant le spectre. Les intégrales sont calculées dans l'Annexe B (section B.2), dont voici le résultat en 3D,

$$f_0(r) = - \frac{\pi\nu_0}{\sqrt{\Delta^2 - E_S^2}} \frac{e^{-k_S r} \sin k_F r}{k_F r} \quad ; \quad f_1(r) = \pi\nu_0 e^{-k_S r} \frac{\cos k_F r}{k_F r}, \quad (2.44)$$

et en 2D,

$$\begin{aligned} f_0(r) &= - \frac{\pi\nu_0}{\sqrt{\Delta^2 - E_S^2}} \sqrt{\frac{2}{\pi k_F r}} \cos(k_F r - \frac{\pi}{4}) e^{-k_S r}, \\ f_1(r) &= \pi\nu_0 \sqrt{\frac{2}{\pi k_F r}} \sin(k_F r - \frac{\pi}{4}) e^{-k_S r}, \end{aligned} \quad (2.45)$$

où $k_S = \sqrt{\Delta^2 - E^2}/\hbar v_F = \Delta \sin(\delta^+ - \delta^-)/\hbar v_F$. En insérant ces intégrales dans l'équation nous obtenons directement en 3D

$$\phi_{+3D}(r) = \begin{pmatrix} \sin(k_F r + \delta^-) \\ \sin(k_F r + \delta^+) \end{pmatrix} \frac{\sqrt{2\pi\nu\Delta\alpha \cos \delta^- \cos \delta^+}}{k_F r} e^{-\Delta \sin(\delta^+ - \delta^-) r / \hbar v_F}, \quad (2.46)$$

et en 2D

$$\phi_{+2D}(r) = \begin{pmatrix} \sin(k_F r + \frac{\pi}{4} - \delta^-) \\ \sin(k_F r + \frac{\pi}{4} - \delta^+) \end{pmatrix} \sqrt{\frac{4\nu\Delta\alpha \cos \delta^- \cos \delta^+}{k_F r}} e^{-\Delta \sin(\delta^+ - \delta^-) r / \hbar v_F}. \quad (2.47)$$

Ces résultats en 2D ne furent pas résolu par Rusinov ni par Pientka et présente un travail original. Nous remarquons que les fonctions d'onde ont une décroissance en $\frac{1}{r}$ ($\frac{1}{\sqrt{r}}$) en 3D (2D). Les fonctions d'onde des parties électroniques et trou oscillent et sont déphasées de $(\delta^+ - \delta^-)$

2.2.1 Interprétation

Il existe un état de YSR à l'intérieur du gap pour toutes valeurs non nulles de α . Pour l'état de YSR $\phi_+ = (\phi_{e\uparrow}, 0, \phi_{h\downarrow}, 0)^T$ d'énergie E_S il existe un état symétrique particule-trou $\phi_- = (0, \phi_{h\downarrow}^*, 0, -\phi_{e\uparrow}^*)^T$ d'énergie $-E_S$. Nous remarquons aussi que l'énergie de l'état lié s'annule lorsque $\alpha = \sqrt{1-\beta^2}$. À ce point précis se produit une transition magnétique. En effet, comme présenté dans la figure 2.2, à la transition un état électronique de spin down passe sous l'énergie de Fermi remplacé par un électron de spin up, la différence de spin total du système est alors de -1 ,

$$S_{\alpha > \sqrt{1-\beta^2}} - S_{\alpha < \sqrt{1-\beta^2}} = -1. \quad (2.48)$$

Étant donné que le système ne produit aucune autre transition pour $\alpha < \sqrt{1-\beta^2}$ et que pour $\alpha = \beta = 0$ nous savons que le système n'est pas polarisé, nous en déduisons $S_{\alpha < \sqrt{1-\beta^2}} = 0$ et $S_{\alpha > \sqrt{1-\beta^2}} = -1$ comme l'illustre la figure 2.2. La transition magnétique se produit car un état électronique occupé de spin up se retrouve arraché au *bulk* et envoyé au dessus de l'énergie de Fermi, remplacé par l'état de spin down. Le spin total du système est alors à moitié porté par le *bulk* et à moitié porté par l'état de YSR [64].

Sachant qu'un état lié apparaît à l'intérieur du gap dès lors que le potentiel magnétique est non nul, nous pouvons nous questionner sur l'évolution de son extension. En effet pour un couplage Zeeman très faible nous nous attendons à un état très étendu et proche des états du *bulk*. La formule analytique suit cette logique, l'amplitude au centre tend vers 0, $(\phi_+(\mathbf{0}) \rightarrow 0)$ tout comme la forme asymptotique. Ce même comportement se retrouve dans la limite opposée ($\alpha \gg 1$), dans ce cas $E_S \sim -\Delta$ et $\phi_+(\mathbf{r}) \sim 0$. Pour un potentiel scalaire nul ($\beta = 0$) la densité sera la plus forte au centre pour une valeur du potentiel Zeeman donnant $\alpha = 1/\sqrt{3}$ (voir figure 2.2). Lorsque l'énergie de YSR est proche de zéro les formules asymptotiques équations (2.46) et (2.47) s'appliquent, nous remarquons alors que la fonction d'onde de YSR décroît en $1/r$ en 3D et $1/\sqrt{r}$ en 2D. Cette différence est notable surtout si l'on observe la densité d'états. Les deux fonctions d'onde des parties électron et trou oscillent et sont déphasées de $\cos^{-1}(E_S/\Delta)$ et leurs densités d'états sont déphasées de $2\cos^{-1}(E_S/\Delta)$. Nous en déduisons que ces densités d'états sont en opposition de phase pour $E_S = 0$ et que leurs deux phases se rapprochent progressivement jusqu'à ce que les fonctions d'onde soit en phase pour $|E_S| \sim \Delta$.

Enfin, nous pouvons remarquer que le potentiel scalaire de l'impureté agit sur la symétrie particule-trou, en effet pour un potentiel scalaire négligeable ($\beta = 0$) les deux amplitudes trou et particule sont égales, un potentiel scalaire positif donnera une amplitude de trou plus forte, rapprochant δ^- de 0 et inversement un potentiel scalaire négatif favorisera la partie électronique.

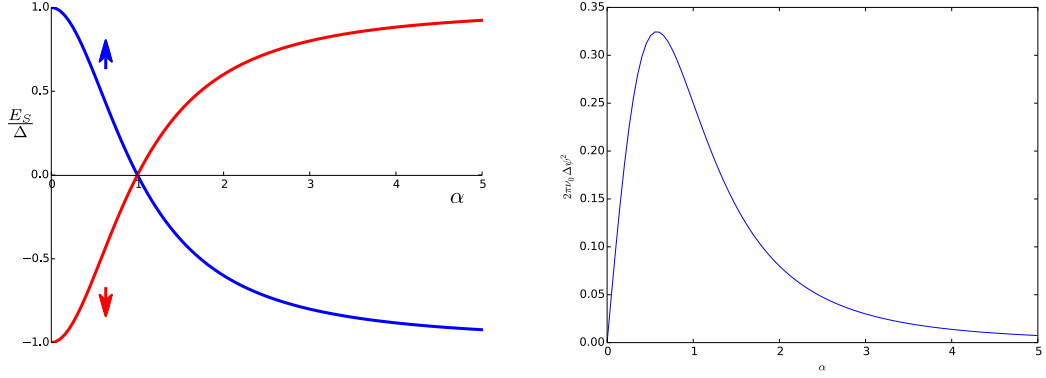


FIGURE 2.2 – À gauche, l'énergie de l'état de YSR en fonction du coefficient α pour une valeur $\beta = 0$. À droite la densité électronique de l'état lié en fonction du coefficient α pour une valeur $\beta = 0$.

2.2.2 Résolution numérique

La résolution analytique précédente comporte quelques lacunes : D'abord nous avons pris en compte une bande électronique isotrope ; de plus notre méthode permet la résolution de la fonction d'onde de l'état lié seulement au centre de l'impureté et sur sa partie asymptotique. Nous proposons ici une résolution numérique prenant en compte la bande électronique du système à travers un modèle de liaisons fortes. Ne considérant qu'un site par cellule dans un réseau de Bravais $\mathbf{R}$, nous pouvons écrire le hamiltonien dans l'espace réel comme :

$$H = \sum_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} t_{\mathbf{R}-\mathbf{R}'} A_{\mathbf{R}}^{\dagger} \tau_z A_{\mathbf{R}'} + \sum_{\mathbf{R}} \Delta A_{\mathbf{R}}^{\dagger} \tau_x A_{\mathbf{R}} + A_{\mathbf{R}_I}^{\dagger} (K \tau_z + J \sigma_z) A_{\mathbf{R}_I}, \quad (2.49)$$

où nous utilisons le spineur de Nambu $A_{\mathbf{R}} = (c_{\mathbf{R}\uparrow}, c_{\mathbf{R}\downarrow}, c_{\mathbf{R}\downarrow}^{\dagger}, -c_{\mathbf{R}\uparrow}^{\dagger})^T$ avec $\mathbf{R}_I$ la position du site de l'impureté et où les termes de sauts $t_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}$ ont les propriétés suivantes,

$$t_{\mathbf{0}} = \mu \quad ; \quad t_{\mathbf{R}-\mathbf{R}'} = t_{\mathbf{R}'-\mathbf{R}}^*. \quad (2.50)$$

Ces termes de saut sont reliés à la bande électronique par la relation :

$$\sum_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} t_{\mathbf{R}-\mathbf{R}'} A_{\mathbf{R}}^{\dagger} \tau_z A_{\mathbf{R}'} = \sum_{\mathbf{K}} \xi_{\mathbf{K}} A_{\mathbf{K}}^{\dagger} \tau_z A_{\mathbf{K}}, \quad (2.51)$$

où $\mathbf{K}$ est un vecteur du réseau, $\xi_{\mathbf{K}}$ est à la bande d'énergie électronique et $A_{\mathbf{K}} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}} A_{\mathbf{R}}$ avec N le nombre de sites de Bravais.

Ce hamiltonien est directement soluble, il est toujours possible de diagonaliser une matrice de taille $2N \times 2N$. Cependant la taille du système est un facteur limitant, il ne suffit pas seulement que le réseau de Bravais recouvre l'espace couvert par l'état de

YSR, il faut aussi que l'écart énergétique minimal entre deux énergies de bande autour de l'énergie de Fermi soit bien plus petit que le gap, *i.e.* $|\xi_{\mathbf{K}_F} - \xi_{\mathbf{K}_F + \delta}| \ll \Delta$. Pour des systèmes à deux ou trois dimensions cette limite est très rapidement atteinte. Exploitant les symétries du système de la même manière que le calcul analytique, nous avons trouvé une méthode pour résoudre ce hamiltonien de manière exacte avec un temps de calcul minime.

Appliquant le hamiltonien au spineur de Nambu défini précédemment $\psi_{\mathbf{K}} = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{K}\uparrow} & v_{\mathbf{K}\downarrow} \end{pmatrix}$, nous trouvons la relation.

$$[E - \xi_{\mathbf{K}}\tau_z - \Delta\tau_x]\psi_{\mathbf{K}} = \frac{1}{N}(K\tau_z - J)\psi(\mathbf{R}_I)e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}_I}, \quad (2.52)$$

où $\psi(\mathbf{R}_I)$ est la valeur du spineur sur le site de l'impureté. Après transformation de Fourier,

$$\psi(\mathbf{R}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{K}} \frac{[E + \xi_{\mathbf{K}}\tau_z + \Delta\tau_x]e^{i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}_I)}}{E^2 - \xi_{\mathbf{K}}^2 - \Delta^2} (K\tau_z - J)\psi(\mathbf{R}_I). \quad (2.53)$$

Cette équation permet la résolution numérique complète des états de YSR. En choisissant $\mathbf{R} = \mathbf{R}_I$ nous obtenons une équation auto-cohérente permettant de trouver l'énergie de YSR ainsi que l'amplitude sur le site de l'impureté. Nous cherchons les états à l'intérieur du gap, il suffit donc de trouver par dichotomie (ou autre méthodes plus élaborées) l'énergie satisfaisant :

$$\det \left[1 - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{K}} \frac{E_S + \xi_{\mathbf{K}}\tau_z + \Delta\tau_x}{E_S^2 - \xi_{\mathbf{K}}^2 - \Delta^2} (K\tau_z - J) \right] = 0. \quad (2.54)$$

Une fois cette énergie déterminée nous trouvons aisément le vecteur $\psi(\mathbf{R}_I)$ à un facteur de normalisation près. Enfin nous pouvons obtenir $\psi(\mathbf{K})$ avec l'équation :

$$\psi(\mathbf{K}) = \frac{[E + \xi_{\mathbf{K}}\tau_z + \Delta\tau_x]e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}_I}}{E^2 - \xi_{\mathbf{K}}^2 - \Delta^2} (K\tau_z - J)\psi(\mathbf{R}_I). \quad (2.55)$$

Il nous suffit de normaliser ce spineur et d'en prendre sa transformée de Fourier pour obtenir $\psi(\mathbf{R})$. Cette méthode est facilement généralisable à plusieurs impuretés, l'équation maîtresse devient alors :

$$\psi(\mathbf{R}) = \sum_I \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{K}} \frac{[E + \xi_{\mathbf{K}}\tau_z + \Delta\tau_x]e^{i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}_I)}}{E^2 - \xi_{\mathbf{K}}^2 - \Delta^2} (K_I\tau_z - J_I)\psi(\mathbf{R}_I), \quad (2.56)$$

où I désigne les différentes impuretés de positions $\mathbf{R}_I$ et de potentiels K_I et J_I . S'il est alors plus difficile de recouvrir le spectre entier car les états liés sont multiples et peuvent être dégénérés, cette méthode n'en reste pas moins efficace.

2.3 Cas réaliste, impuretés dans le supraconducteur 2H-NbSe₂

Comme vu précédemment avec l'expérience réalisée par A. Yazdani et al. [80], les états de YSR mesurés dans le passé avaient une extension spatiale limitée à quelques angströms. Ici nous allons montrer que en choisissant un supraconducteur 2D, les états de YSR présentent alors une extension spatiale d'un ordre de grandeur plus grand. De tels états de YSR étendus permettront la mesure de plus de propriétés, comme l'oscillation de la densité d'états locale (LDOS) de l'ordre de la longueur d'onde de Fermi, ainsi que le déphasage entre la partie électron et trou sur ces oscillations.

Je présenterai ici le travail effectué en collaboration avec l'équipe expérimentale de l'Institut de Nanosciences de Paris dirigé par Tristan Cren et Dimitri Roditchev [49]. Ce travail visait à l'étude expérimentale d'un supraconducteur mono-couche de 2H-NbSe₂ contenant des impuretés magnétiques et comportant des états de YSR de très longue portée comparée aux expériences précédentes.

2.3.1 Cristallographie et structure de bandes du matériau

2H-NbSe₂ est un matériau tridimensionnel constitué d'empilements de cristaux à deux dimensions dont la maille élémentaire est triangulaire. Les plans d'atomes de deux dimensions étant faiblement couplés, la surface de Fermi de ce matériau est constituée de deux bandes faiblement dispersives selon l'axe orthogonal (voir figure 2.3 a et b). Nous pouvons approximer le système par un modèle effectif 2D [62] comme présenté figure 2.3 en accord avec les données ARPES recueillies. Le matériau 2H-NbSe₂ devient supraconducteur à la température de 7 K.

2.3.2 Mesure des états de YSR

L'étude par microscopie STM fut réalisée à 320 mK et montre des états liés de YSR autour des impuretés magnétiques de fer aléatoirement dispersées dans le matériau. Ces états sont caractérisés par une forme d'étoile à six branches étendue jusqu'à 10 nm autour de l'impureté comme présenté figure 2.4. Cette extension est plus que 10 fois supérieure à celle observée dans les expériences précédentes, elle est due à la nature bidimensionnelle du matériau. Elle est aussi amplifiée par le fait que les impuretés de fer sont enterrées dans le matériau ce qui donne un couplage au supraconducteur bien plus important, et autorise un état de YSR dont l'énergie se rapproche de l'intérieur du gap.

Les branches de l'état de YSR sont tournées de 30° par rapport aux axes cristallographiques, cela s'explique par l'anisotropie de la surface de Fermi mise en évidence par les simulations numériques. La conductance mesurée sur une impureté montre un état de YSR constitué de deux pics aux énergies positives et négatives (voir figure 2.4 b). Nous

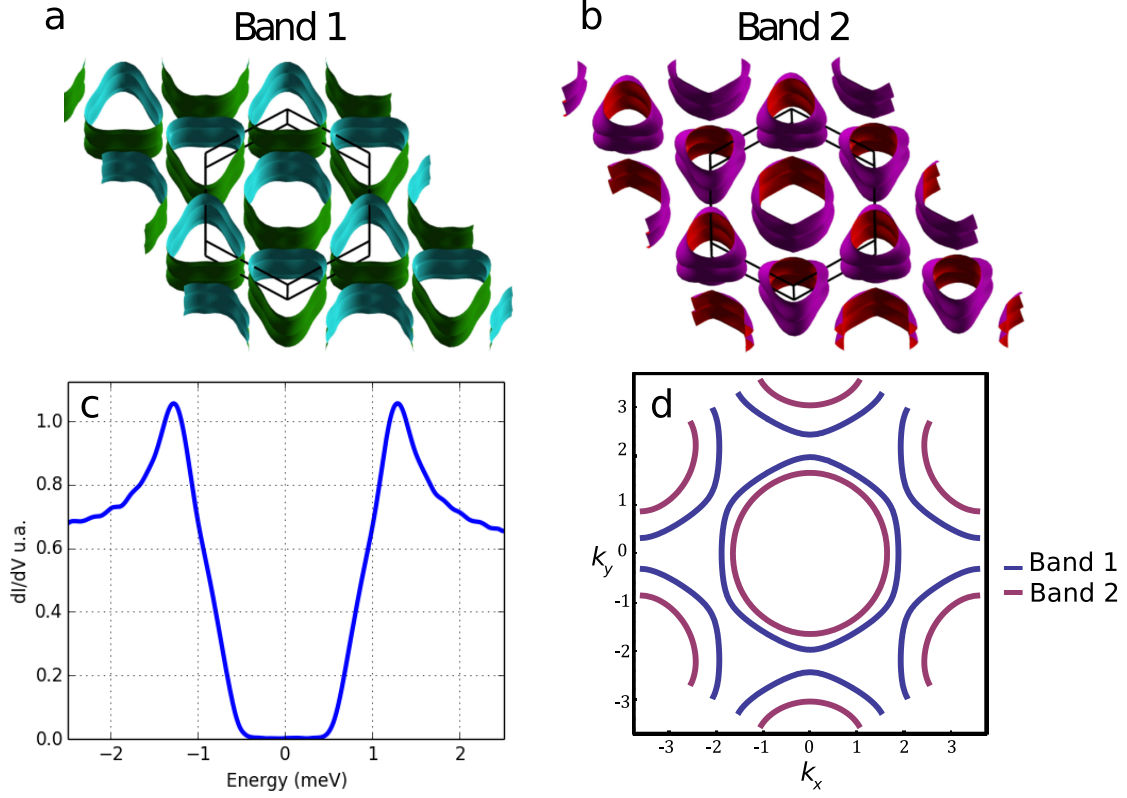


FIGURE 2.3 – **a-b** Structure de la surface de Fermi dans l'espace réciproque pour les deux bandes. **c** Conductance du matériau 2H-NbSe₂ obtenue à 300 mK par microscope STM. **d** Surface de Fermi des bandes 1 et 2 dans le modèle à deux dimensions.

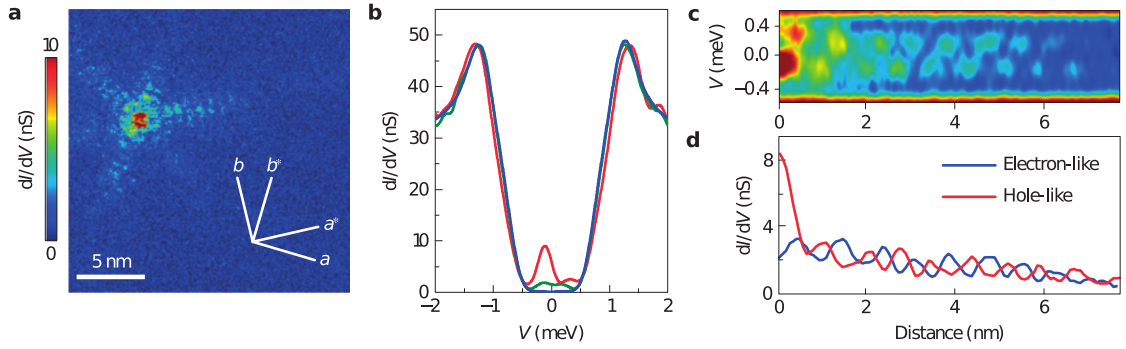


FIGURE 2.4 – **a** Carte de conductance expérimentale prise à 0.13 meV. Les lignes a et b correspondent aux axes de cristallographie. **b** Conductance expérimentale typique prise au dessus de l'impureté (rouge), sur une branche, à 4nm du centre (vert), et loin de l'impureté (bleu). **c** Variation spatiale et énergétique de la conductance le long d'une branche de l'étoile, la partie gauche de la figure correspond au centre de l'étoile. **d** Variation spatiale de la conductance le long d'une branche de l'étoile pour des énergie centrées sur les parties électron et trou de l'état de YSR.

remarquons que le gap supraconducteur n'est pas affecté par l'impureté et que les deux pics sont asymétriques en amplitude ce qui indique une forte asymétrie particule-trou. Si nous avons vu dans la section précédente que cette asymétrie peut témoigner d'un potentiel scalaire dû à l'impureté, les simulations numériques que je détaillerai dans la prochaine section montrent que l'asymétrie de la bande électronique autour de l'énergie de Fermi joue elle aussi un rôle dans l'asymétrie des pics.

La présence d'une seule paire de pics dans le gap autour de l'impureté semble indiquer un état de YSR unique ; nous pouvons supposer que cet état est de moment angulaire nul et que les états de moment angulaire supérieurs sont absents. Comme il a été montré par I. Rusinov [63] (voir Annexe B) supposer l'impureté comme étant ponctuelle est alors suffisant pour capturer la physique du système. Enfin, figure 2.4 **c** et **d** nous remarquons des interférences dans les branches de l'étoile, les parties particule et trou semblent en opposition de phase. Les calculs effectués précédemment montrent que pour une énergie de Shiba proche du centre du gap le déphasage des fonctions d'onde est de $(\delta^+ - \delta^-) \simeq \pi/2$. La densité d'état correspondant au carré de la valeur absolue des fonctions d'onde, la différence de phase est doublée. Ceci explique pourquoi les oscillations dans la densité d'états sont en opposition de phase.

2.3.3 Modèle de liaisons fortes

Le modèle analytique que nous avons développé section 2.2 ne permet pas la compréhension de l'anisotropie des états de YSR observés car il suppose une bande d'énergie électronique isotrope. Nous allons présenter ici les résultats de la résolution numérique appliqués au modèle de liaisons fortes du matériau 2H-NbSe₂.

Afin d'opérer la simulation numérique, nous devons utiliser un jeu de paramètres de liaisons fortes correspondant au matériau. Les mesures ARPES les plus précises [58, 74, 61, 32, 31] permettent d'obtenir la structure de bandes du matériau 2D. Pour chacune des deux bandes, il est possible d'ajuster les paramètres de liaisons fortes sur un réseau triangulaire afin de reconstruire la structure de bandes la plus proche. Nous limitant aux cinq premiers voisins sur le réseau, les paramètres de liaisons fortes trouvés sont (en meV) :

	ξ_0	t_1	t_2	t_3	t_4	t_5
band 1	10.9	86.8	139.9	29.6	3.5	3.3
band 2	203.0	46.0	257.5	4.4	-15.0	6.0

où la structure de bandes dans l'espace réciproque s'écrit :

$$\begin{aligned} \xi(k) = & \xi_0 + t_1(2 \cos \xi \cos \eta + \cos 2\xi) \\ & + t_2(2 \cos 3\xi \cos \eta + \cos 2\eta) + t_3(2 \cos 2\xi \cos 2\eta + \cos 4\xi) \\ & + t_4(\cos \xi \cos 3\eta + \cos 5\xi \cos \eta + \cos 4\xi \cos 2\eta) + t_5(2 \cos 3\eta \cos 3\xi + \cos 6\xi), \end{aligned} \quad (2.57)$$

avec $\xi = k_x a$ et $\eta = \frac{\sqrt{3}}{2} k_y a$ où a est le pas du réseau. Appliquant les formules de la section 2.2.2, nous pouvons obtenir les états propres du système pour différentes valeurs de potentiel Zeeman et de potentiel scalaire. À l'aide d'un script réalisé en Python (voir E.3.3) nous obtenons les énergies et densités d'états locales associées aux états de YSR (figure 2.5 pour la bande 2 et figure 2.6 pour la bande 1). Nous pouvons directement comparer les densités d'états locales mesurées et simulées et remarquons que dans certains cas, nous retrouvons la forme d'étoile à six branches tournées de 30° par rapport aux axes cristallographiques. En particulier les figures 2.5 **a** et **b**, pour les paramètres $J = 120$ meV et $K = 180$ meV nous trouvons la forme d'étoile pour les énergies positives et négatives. Nous remarquons *a contrario* que les résultats obtenus avec la bande 1 sont d'une forme différente et dont l'extension est plus réduite, nous privilégions donc la bande 2 pour expliquer les états de YSR observés et supposons que le couplage entre l'impureté et les électrons de conduction de la bande 1 est plus faible.

2.3.4 Extension du modèle, fonctions de Wannier

Les calculs numériques sont en accord qualitatifs avec les résultats expérimentaux (forme étoilée), mais quelques points sont discordants. Premièrement le modèle de liaisons fortes ne permet pas d'observer de déphasage dans les franges d'interférences de la LDOS (comme vu dans la figure 2.4 **c**, **d**). En effet, nous avons vu analytiquement que les états de YSR oscillent sur une période d'une longueur d'onde de Fermi. Leur LDOS oscillent donc sur $\lambda_F/2$, cette longueur est de l'ordre du pas du réseau et n'est pas forcément commensurable avec celui-ci. Deuxièmement, nous remarquons que les états de YSR obtenus analytiquement sont de faibles extensions comparés aux mesures expérimentales.

Nous avons traité les deux bandes électroniques du système de manière indépendante ajustant les paramètres de liaisons fortes sur chaque bande. Cependant, le matériau

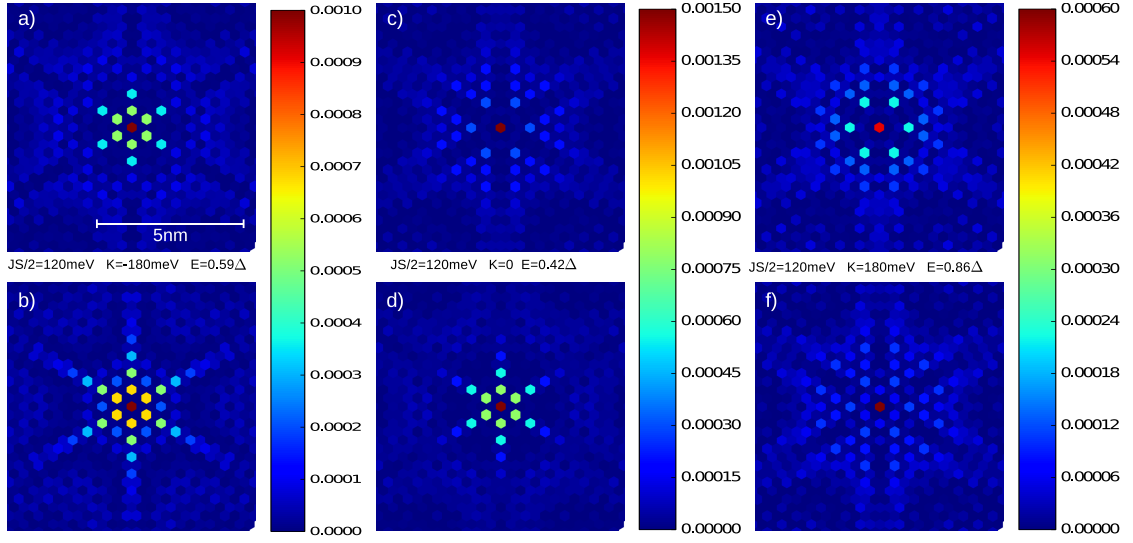


FIGURE 2.5 – LDOS aux énergies de YSR autour des impuretés magnétiques calculées par résolution numérique de l'équation de YSR avec la bande 2. Les figures du haut représentent les parties électroniques (énergies positives), les figures du bas représentent les parties trous. Les figures **a** et **b** sont calculées avec les paramètres $J = 120$ meV et $K = -180$ meV, Les figures **c** et **d** sont calculées avec les paramètres $J = 120$ meV et $K = 0$, Les figures **e** et **f** sont calculées avec les paramètres $J = 120$ meV et $K = 180$ meV. La barre de couleur donne la densité d'états de chaque site $|\psi(\mathbf{R})|^2$ normalisée tel que $\sum_{\mathbf{K}} |\psi(\mathbf{K})|^2 = 1$.

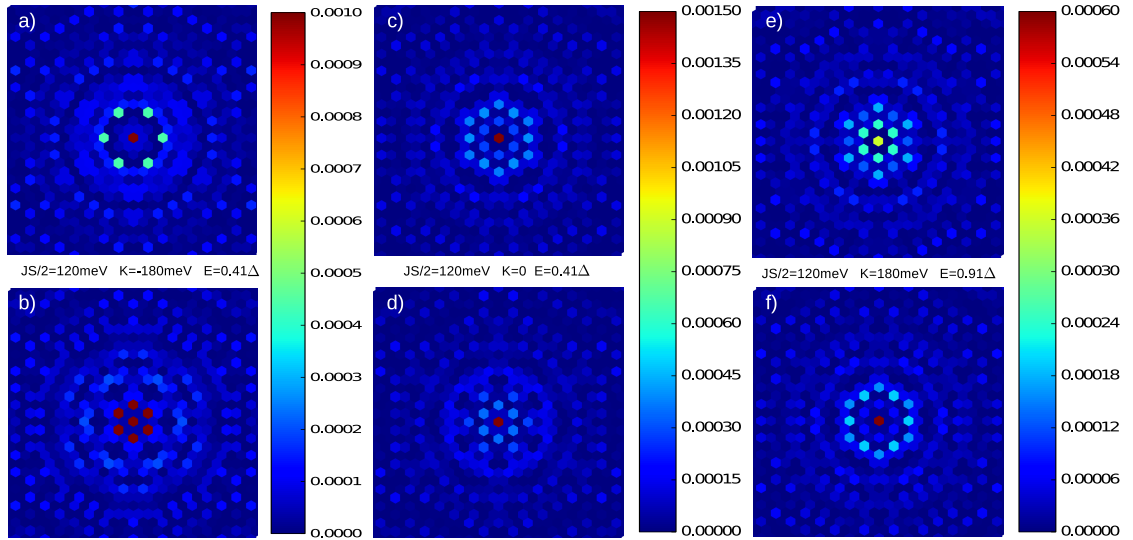


FIGURE 2.6 – Même résultats que dans la figure 2.5, pour la bande 1.

ayant plus d'un atome par site, nous pouvons nous attendre à ce que ces paramètres de liaisons fortes diagonales correspondent à des fonctions de Wannier très étendues, peu compatible avec l'aspect ponctuel donné aux impuretés. Il est possible d'acquérir numériquement les paramètres de liaisons fortes associés aux fonctions de Wannier les plus localisées par des techniques *ab initio* [46], ainsi après résolution du système de liaisons fortes, il est possible de récupérer la LDOS via la formule

$$\rho_{\sigma}(r) = \sum_{\mathbf{R}} \psi_{\alpha\sigma}(\mathbf{R}) \psi_{\alpha\sigma}^*(\mathbf{R}) w_{\alpha\sigma\mathbf{R}}(r) w_{\alpha\sigma\mathbf{R}}^*(r), \quad (2.58)$$

où $w_{\alpha\sigma\mathbf{R}}(r)$ est la fonction de Wannier dans l'espace réel associée à l'état $|\alpha\mathbf{R}\sigma\rangle$ et où $\psi_{\alpha\sigma}(\mathbf{R})$ est le vecteur d'onde propre du modèle de liaisons fortes. Voir l'Annexe C pour le détail technique du calcul des états de YSR par cette méthode.

2.4 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons présenté les propriétés des états de YSR à travers l'exposé des calculs analytiques et numériques ainsi que des mesures effectuées *via* microscopie STM. Dans un premier temps, nous avons présenté brièvement la théorie BCS des supraconducteurs, ce qui nous a permis d'énoncer le théorème d'Anderson montrant que seul les perturbations brisant la symétrie par renversement du temps (dont les structures magnétiques) sont susceptibles d'altérer les propriétés supraconductrices. Nous avons exposé les différents calculs analytiques résolvant l'énergie et l'extension spatiale des états de YSR dans le cas d'une bande électronique isotrope. Nous avons aussi proposé une résolution numérique pour ces états à travers les modèles de liaisons fortes permettant de prendre en considération des structures de bandes plus complexes, comportant des anisotropies. Enfin présentant des résultats expérimentaux observant des états de YSR étendus dans le supraconducteur 2H-NbSe₂, nous avons à travers des calculs analytiques et numériques, donné une explication sur l'extension spatiale, la structure et le déphasage de ces états. Ce travail a permis de mettre en évidence l'influence de la dimensionnalité sur ces états liés, expliquant pourquoi dans ce supraconducteur à deux dimensions, l'extension spatiale de l'état de YSR était vingt fois supérieure aux extensions spatiales observées auparavant dans les supraconducteurs 3D.

Chapitre 3

Supraconducteurs en présence de structures magnétiques et propriétés topologiques

3.1 Introduction

Comme nous l'avons vu dans le chapitre précédent à travers l'étude des états de YSR, les structures magnétiques (qui ont pour propriété de briser l'invariance par renversement du temps) peuvent créer de nouveaux états non conventionnels dans les supraconducteurs [53, 51]. Les états de YSR possèdent (spécialement en 2D) une extension spatiale excédant typiquement la distance entre les deux impuretés : deux états de YSR voisins peuvent donc avoir un recouvrement de fonction d'onde. Placer sur un réseau, les impuretés induisent des états de YSR protégés par le gap, formant ainsi une plateforme pouvant accueillir de nouveaux états électroniques [18, 54, 52].

Il a été montré [12, 56, 60] que de tels réseaux peuvent émuler de la supraconductivité de type triplet. Une autre limite peut être prise en compte lorsque un matériau ferromagnétique est déposé sur un supraconducteur : on peut alors naïvement le considérer comme un réseau dense d'états de YSR. Il a été montré là encore [3, 66] qu'un supraconducteur recouvert d'une structure magnétique (en l'occurrence des semi-conducteurs avec une forte interaction spin-orbite en présence de champ magnétique) peut émuler de la supraconductivité de type triplet. Enfin, il a été montré que qu'un supraconducteur avec une forte interaction spin-orbite suffisait à provoquer l'émergence d'un paramètre d'ordre de type triplet [25], le paramètre d'ordre supraconducteur formant alors un mélange en ondes s et en ondes p .

Classe	Θ^2	$d = 1$	$d = 2$	$d = 3$
BDI	+1	$\mathbb{Z}$	0	0
D	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0
DIII	-1	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$

TABLE 3.1 – Tableau des différentes classes topologiques des supraconducteurs en fonctions de leur propriété de TRS, d désigne la dimension du système.

3.2 Introduction aux supraconducteurs topologiques

Dans cette section, nous présenterons le modèle de Kitaev [36] et son extension à deux dimensions ainsi que leurs propriétés topologiques et leurs états de bord.

3.2.1 Classification des supraconducteurs topologiques

Les propriétés topologiques d'un matériau dépendent fortement de ses symétries. Par symétrie, on entend ici les symétries fondamentales du système et non pas les symétries cristallines. Selon la dimensionnalité et les symétries du système, il sera susceptible ou non d'avoir des propriétés topologiques caractérisées soit par un entier soit par un invariant de type $\mathbb{Z}_2$.

Puisque nous nous intéressons à des supraconducteurs, les systèmes que nous étudions possèdent la symétrie particule-trou, donc obéissent à l'équation :

$$\Xi H(\mathbf{k}) \Xi^{-1} = -H(-\mathbf{k}). \quad (3.1)$$

où Ξ est l'opérateur symétrie particule-trou. Nous considérerons aussi la symétrie par renversement du temps (TRS) d'opérateur Θ :

$$\Theta H(\mathbf{k}) \Theta^{-1} = H(-\mathbf{k}). \quad (3.2)$$

Si le système agit sur des particules sans spin ou de spin 1/2 l'opérateur aura pour propriété $\Theta^2 = \pm 1$. La propriété fermionique des particules de spin 1/2 donne $\Theta^2 = -1$. Le tableau 3.1 [69, 37] présente les trois différentes classes de symétrie respectant la symétrie particule-trou que nous étudierons ici. La classe BDI correspond aux systèmes sans spin invariant par renversement du temps, la classe D correspond aux systèmes brisant la symétrie par renversement du temps et la classe DIII correspond aux systèmes de spin 1/2 respectant la TRS.

3.2.2 Modèle de Kitaev

Dans un premier temps nous allons présenter les propriétés des supraconducteurs de type triplet et leurs états de bord à travers le modèle "jouet" de Kitaev [36].

Le modèle de Kitaev est un modèle minimaliste de liaison forte d'un supraconducteur sans spin. Dans l'espace réel son hamiltonien s'écrit :

$$H = \sum_x (tc_x^\dagger c_{x+1} + \text{h.c.}) - \mu c_x^\dagger c_x + (\Delta c_x c_{x+1} + \text{h.c.}), \quad (3.3)$$

où t est le terme de saut entre deux voisins, μ est le potentiel chimique et Δ est le gap supraconducteur. Le principe de Pauli exclut la possibilité de sites doublement occupés et donc le couplage électron trou $c_x c_x$. Pour cette raison, le couplage supraconducteur s'effectue entre sites voisins.

Il est intéressant tout d'abord de comprendre les propriétés d'une chaîne de Kitaev infinie. Nous pouvons écrire le hamiltonien de la chaîne dans l'espace des impulsions à l'aide de spineurs $A_k^\dagger = (c_k^\dagger, c_{-k})$. Le hamiltonien se réécrit :

$$H = \sum_{k \in \text{BZ}} A_k^\dagger H_k A_k, \quad H_k = \begin{pmatrix} \varepsilon_k & \Delta_k^* \\ \Delta_k & -\varepsilon_k \end{pmatrix}, \quad (3.4)$$

où $\varepsilon_k = -2t \cos k - \mu$ et $\Delta_k = -i2\Delta \sin k$. Nous retrouvons ici la même équation que dans le cas BCS, mais avec un supraconducteur en onde p . Celui-ci n'est pas indépendant de l'impulsion électronique et respecte les règles de symétrie : $\Delta_k = -\Delta_{-k}$ et $\Delta_0 = \Delta_\pi = 0$. La diagonalisation du hamiltonien donne comme solution :

$$H = \sum_{k \in \text{BZ}} E_k a_k^\dagger a_k, \quad (3.5)$$

où l'énergie propre E_k s'écrit :

$$E_k = \sqrt{\varepsilon_k^2 + |\Delta_k|^2}, \quad (3.6)$$

et où l'opérateur de création de quasi-particules a_k correspond à la base diagonale

$$a_k = u_k c_k + v_k c_{-k}^\dagger, \quad (3.7)$$

avec

$$u_k = \sqrt{\frac{E_k + \varepsilon_k}{2E_k}}, \quad v_k = \frac{E_k - \varepsilon_k}{\Delta_k} u_k. \quad (3.8)$$

H_k peut s'exprimer en terme de matrices de Pauli, ceci afin de respecter la symétrie particule-trou [4],

$$H_k = \mathbf{h}(k) \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (3.9)$$

Invariant topologique

Nous souhaitons maintenant déterminer un invariant topologique afin de caractériser les hamiltoniens de la forme (3.9).

Si le système est invariant par renversement du temps, il appartient à la classe BDI dans le tableau 3.1 et respecte la condition :

$$\Theta\Psi(k)\Theta^{-1} = e^{i\phi}\Psi(-k), \quad (3.10)$$

où ϕ est la phase globale du supraconducteur et $\Psi(k)$ est un vecteur propre du hamiltonien. Cette phase dépend du choix de jauge et fixe l'angle du supraconducteur dans le plan xOy des matrices de Pauli. Il est donc toujours possible, lorsque le système est invariant par renversement du temps, de trouver un plan sur lequel évolue $\mathbf{h}(k)$. Supposant que $\mathbf{h}(k)$ ne s'annule pas, nous pouvons alors définir le nombre d'enroulement dans ce plan. Il existe toujours dans la classe de symétrie BDI à une dimension un choix de jauge où le hamiltonien est réel. Dans ce cas $\mathbf{h}(k)$ est contenu par le plan xOy , et nous pouvons définir un nombre d'enroulement :

$$w_Z = \int_{k \in BZ} \frac{dk}{2\pi} \arctan \frac{h_x(k)}{h_z(k)}. \quad (3.11)$$

où w_Z est (comme attendu) un invariant topologique de type $\mathbb{Z}$ qui dénombre les paires d'états de Majorana d'un système ouvert.

Si le système brise l'invariance par renversement du temps, le système est alors de classe D, $\mathbf{h}(k)$ n'est pas contenu par un plan, cependant la symétrie particule-trou implique une contrainte sur ce vecteur, en effet $(A_{-k}^\dagger)^T = \sigma_x A_k$ ce qui implique $h_{x,y}(k) = -h_{x,y}(-k)$. En particulier, le vecteur $\mathbf{h}(k)$ doit être aligné avec l'axe z pour les valeurs $k = 0, \pi$. Nous pouvons alors définir un invariant topologique associé à ce système :

$$w_{Z_2} = \frac{h_z(0)h_z(\pi)}{|h_z(0)h_z(\pi)|}. \quad (3.12)$$

où w_{Z_2} est un invariant topologique de type Z_2 . Il est égal à -1 pour lorsque le système est topologique et possède une paire de fermions de Majorana, et $+1$ lorsque le système est trivial.

États de bord

Nous nous intéressons maintenant à une chaîne finie. Nous pouvons plus facilement comprendre la physique associée à ces états de bord en décomposant nos opérateurs fermioniques en deux fermions de Majorana de la manière suivante :

$$c_x = \frac{1}{2}(\gamma_{B,x} + i\gamma_{A,x}), \quad (3.13)$$

où les opérateurs de Majorana obéissent aux relations canoniques :

$$\gamma_{\alpha,x} = \gamma_{\alpha,x}^\dagger, \quad \{\gamma_{\alpha,x}, \gamma_{\alpha',x'}\} = 2\delta_{\alpha\alpha'}\delta_{xx'}. \quad (3.14)$$

Ces opérateurs représentent les deux constructions orthogonales de fermions de Majorana locales et sont créés par paires,

$$\gamma_A = i(c_x^\dagger - c_x), \quad \gamma_B = c_x + c_x^\dagger. \quad (3.15)$$

Dans cette base, le hamiltonien s'écrit,

$$H = -\frac{\mu}{2} \sum_x (1 + i\gamma_{B,x}\gamma_{A,x}) - \frac{i}{2} \sum_x [(\Delta + t)\gamma_{B,x}\gamma_{A,x+1} + (\Delta - t)\gamma_{A,x}\gamma_{B,x+1}]. \quad (3.16)$$

Nous allons maintenant considérer deux cas limites :

Le premier cas correspond à $t = \Delta = 0$, dans ce cas la chaîne est dans un état trivial où chaque site fermionique est isolé avec pour énergie $-\mu$. Seul le premier terme du hamiltonien est non nul, le seul couplage existant est celui des fermions de Majorana sur le même site comme l'illustre la figure 3.1 (a). Aucun état de bord n'est permis et l'état fondamental correspond dans le cas $\mu < 0$ au vide des fermions c_x et au remplissage total sinon.

Le deuxième cas trivial correspond à $t = \Delta \neq 0$ et $\mu = 0$. Le système est alors dans une phase topologique, le hamiltonien s'écrit en opérateurs de Majorana :

$$H = -it \sum_x \gamma_{B,x}\gamma_{A,x+1}. \quad (3.17)$$

Ce hamiltonien ne couple que les fermions de Majorana adjacents, voir figure 3.1 (b). Le système dans l'espace de Fourier a pour solutions deux bandes plates,

$$E_k = \sqrt{4t^2 \cos^2 k + 4t^2 \sin^2 k} = 2|t|, \quad (3.18)$$

ce qui indique que le système est constitué d'états localisés. Les solutions peuvent s'écrire en termes d'opérateurs fermioniques $d_x = \frac{1}{2}(\gamma_{A,x+1} + i\gamma_{B,x})$, et le hamiltonien s'écrit alors dans cette base :

$$H = 2t \sum_x \left(d_x^\dagger d_x - \frac{1}{2} \right). \quad (3.19)$$

Nous retrouvons ici le même type de hamiltonien que précédemment, mis à part que l'opérateur fermionique correspond à un état localisé sur deux sites voisins. Cependant, comme l'illustre la figure 3.1 (b), les fermions de Majorana $\gamma_{A,1}$ et $\gamma_{B,N}$, situés aux extrémités, sont découplés du système. Ils peuvent être combinés pour former un fermion :

$$f = \frac{1}{2}(\gamma_{A,1} + i\gamma_{B,N}) \quad (3.20)$$

qui a une énergie propre nulle. Nous pouvons alors remarquer que l'état fondamental est dégénéré, puisque cet état peut être rempli ou vide sans que cela ne change l'énergie du système. Ce fermion est délocalisé sur les deux bouts de la chaîne, ce qui rend la paire de Majorana intriquée.

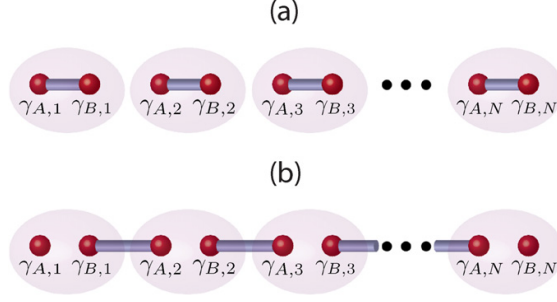


FIGURE 3.1 – Shema illustrant le hamiltonien de Kitaev dans deux cas limites, (a) $\mu \neq 0$, $\Delta = t = 0$ et (b) $\mu = 0$ et $t = \Delta \neq 0$. Figure provenant de la revue de Jason Alicea [4]

Ces états de bord, où états de Majorana, sont présents pour toutes valeurs non nulles de Δ et lorsque $|\mu| < 2t$, ils sont cependant délocalisés à l'intérieur de la chaîne et peuvent se coupler entre eux, levant la dégénérescence de l'état fondamental. Les états de bord topologiques se forment aux bords séparant les phases triviales des phases topologiques ou séparant deux phases topologiques distinctes. Nous avons donc une correspondance entre les propriétés topologiques du bulk caractérisées par un invariant topologique et l'existence d'états de bord pour un système fini.

3.2.3 Supraconducteur 2D sans spin, extension du modèle de Kitaev

Nous pouvons étendre le modèle de supraconductivité sans spin en onde p à deux dimensions. Dans ce cas, le modèle de liaisons fortes devient :

$$H = \sum_{\mathbf{r}} t(c_{\mathbf{r}}^{\dagger} c_{\mathbf{r}+\hat{x}} + c_{\mathbf{r}}^{\dagger} c_{\mathbf{r}+\hat{y}} + \text{h.c.}) - \mu c_{\mathbf{r}}^{\dagger} c_{\mathbf{r}} + \Delta(c_{\mathbf{r}} c_{\mathbf{r}+\hat{x}} + i c_{\mathbf{r}} c_{\mathbf{r}+\hat{y}} + \text{h.c.}), \quad (3.21)$$

où $\hat{x}$ et $\hat{y}$ désignent un pas de réseau dans la direction x et y . Ce hamiltonien décrit la supraconductivité chirale, le choix de la différence de phase supraconductrice de $\pm i$ entre la direction x et y permet l'invariance par rotation du système. Il n'est pas possible de conserver la symétrie de rotation et la symétrie par renversement du temps dans le cas sans spin. Le système est de classe D, à deux dimension, sa classe topologique sera défini par un invariant de type $\mathbb{Z}$.

Dans l'espace des impulsions ce hamiltonien s'écrit comme précédemment :

$$H = \sum_{k \in BZ} A_k^{\dagger} H_k A_k, \quad H_k = \begin{pmatrix} \varepsilon_k & \Delta_k^* \\ \Delta_k & -\varepsilon_k \end{pmatrix}, \quad (3.22)$$

où $\varepsilon_k = -2t(\cos k_x + \cos k_y) - \mu$ et où $\Delta_k = -i2\Delta(\sin k_x + i \sin k_y)$. La résolution du système est donc analogue :

$$E_k = \sqrt{\varepsilon_k^2 + |\Delta_k|^2}. \quad (3.23)$$

Nous remarquons, qu'il n'est plus possible d'obtenir une bande plate lorsque t et Δ ne sont pas nuls. Pour définir les invariants topologiques associés à ce système nous remarquons là encore que le hamiltonien peut s'écrire en terme de matrices de Pauli,

$$H_k = \mathbf{h}(k) \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (3.24)$$

Cependant le système est à présent 2D et la zone de Brillouin forme un tore. Le nombre de fois que $\mathbf{h}(k)/|\mathbf{h}(k)|$ enveloppe la sphère unité est définie par le nombre de Chern :

$$C = \int \frac{d^2\mathbf{k}}{4\pi} \frac{\mathbf{h}(k) \cdot (\partial_{k_x} \mathbf{h}(k) \times \partial_{k_y} \mathbf{h}(k))}{|\mathbf{h}(k)|^3}. \quad (3.25)$$

Les supraconducteurs en onde p brisant l'invariance par renversement du temps sont de classe D et à deux dimensions ont un invariant de type $\mathbb{Z}$. Le nombre de Chern est l'invariant topologique du système, $|C|$ dénombre les états de bord, le système est trivial lorsque $C = 0$.

États de bord

Nous cherchons maintenant à trouver les états de bord d'un système fini. En exploitant la symétrie de translation dans la direction y nous étudierons le hamiltonien pour un bord dans la direction x . Ceci revient à étudier le hamiltonien sur un ruban infini :

$$H = \sum_{k_y, x} t(c_{k_y, x}^\dagger c_{k_y, x+1} + \text{h.c.}) - (\mu + 2t \cos k_y) c_{k_y, x}^\dagger c_{k_y, x} + 2\Delta \sin k_y (c_{-k_y, x} c_{k_y, x} + \text{h.c.}) + \Delta (c_{\mathbf{r}} c_{\mathbf{r}+\hat{x}} + \text{h.c.}). \quad (3.26)$$

Une solution topologique triviale existe en $k_y = 0$ pour les paramètres $\mu = -2t$ et enfin $\Delta = t$. Nous retrouvons alors le hamiltonien de Kitaev 1D dans le cas topologique trivial avec pour solution un état de Majorana d'énergie nulle localisé aux deux extrémités. De manière générale, en $k_y = 0$ le hamiltonien est identique au hamiltonien 1D avec le potentiel chimique normalisé à $\tilde{\mu} = \mu + 2t$.

Qu'en est-il alors pour $k_y \neq 0$? Un couplage supraconducteur se crée entre les électrons d'impulsion k_y et les trous d'impulsion $-k_y$, les fermions de Majorana situés sur chacun des deux bords se trouvent couplés deux à deux. En effet nous remarquons que :

$$2\Delta \sin k_y (c_{-k_y, x} c_{k_y, x} + \text{h.c.}) = \Delta \sin k_y (\gamma_{A, k_y, x} \gamma_{A, -k_y, x} - \gamma_{B, k_y, x} \gamma_{B, -k_y, x}). \quad (3.27)$$

Ceci produit une levée de dégénérescence proportionnelle à $\pm 2\Delta \sin k_y$. Pour mieux comprendre nous pouvons reprendre le cas trivial où les deux Majorana $\gamma_{A,0}$ et $\gamma_{B,N}$ étaient totalement découplés et d'énergie nulle. Le couplage (3.27) agit sur les deux fermions $d_0 = (\gamma_{A, k_y, 0} + \gamma_{A, -k_y, 0})$ et $d_N = (\gamma_{B, k_y, N} - \gamma_{B, -k_y, N})$ qui forment des fermions d'énergies respectives $2\Delta \sin k_y$ et $-2\Delta \sin k_y$. Ainsi un état de bord est associé à chaque nombre quantique k_y et l'état de bord $k_y = 0$ partage les mêmes propriétés que l'état de Majorana de la chaîne 1D. La figure 3.2 présente les états de bord dans le modèle de Kitaev 2D et la dispersion associée à ces états de bord, chacune des deux branches de la dispersion en X est associée à un des deux états de bord.

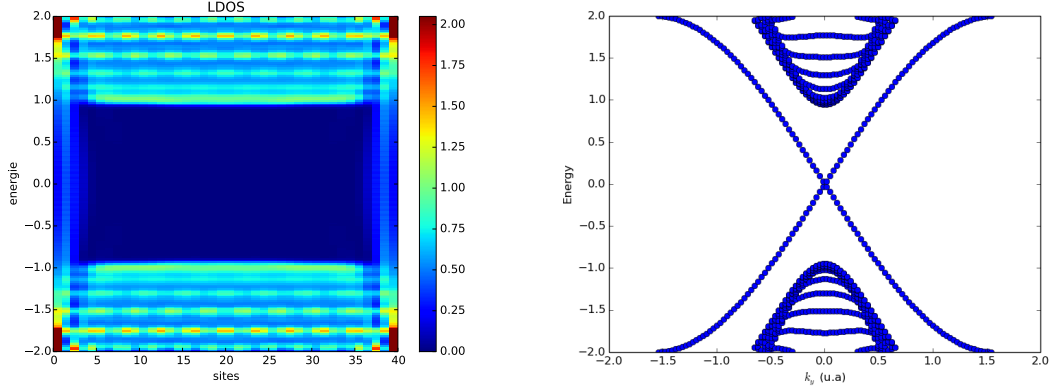


FIGURE 3.2 – À gauche : LDOS en fonction de l'énergie et de la position x pour les paramètres $\Delta = 1$, $t = 3$, $\mu = -1$ pour une largeur de 40 sites. À droite : dispersion de ces mêmes états en fonction de l'impulsion k_y .

3.3 Topologie associée aux supraconducteurs avec une composante singulet et une composante triplet

Nous allons maintenant étudier des systèmes supraconducteurs susceptibles de présenter une transition de phase topologique.

3.3.1 Supraconducteur hélicale

Le système supraconducteur sans spin en onde p à deux dimensions présenté plus tôt ne possède pas la symétrie par renversement du temps. Un système composé de deux copies, de chiralités et de spins opposés, possède par construction cette symétrie. Dans la base de Nambu définie par l'opérateur $A_k = (c_{\uparrow k}, c_{\downarrow k}, c_{\downarrow -k}^\dagger, -c_{\uparrow -k}^\dagger)^T$ et dans la limite continue, le hamiltonien s'écrit :

$$H = \xi_k \tau_z + \frac{\Delta_R}{k_F} (\sigma_x k_y - \sigma_y k_x) \tau_x, \quad (3.28)$$

où $\xi_k = \frac{k^2}{2m} - \mu$ et où k_F est défini $k_F = \sqrt{2m\mu}$. Les matrices τ (σ) représentent les matrices de Pauli dans le sous-espace particule-trou (de spin). Ce hamiltonien est, par construction, diagonal par blocs. Chacun des deux blocs possédant un nombre de Chern opposé, la somme des nombre de Chern est donc toujours nulle. Le système étant invariant par renversement du temps, il est de classe DIII dans le tableau 3.1. Il est donc caractérisé par un invariant topologique de type $\mathbb{Z}_2$ que l'on peut écrire à l'aide du pfaffien. Le nombre d'états de bord total du système est le double du nombre d'états de bord d'un sous-bloc, cependant ces états de bord ne sont pas toujours protégés par les symétries du système. Si le système contient plusieurs états de bord, une impureté scalaire

respectant la symétrie par renversement du temps peut ouvrir un gap. En conséquence le système n'est topologique que lorsque le nombre de Chern du sous-bloc est impair. Ici le pfaffien est nul si le nombre de Chern de l'un des blocs est nul.

Comme il fut montré par Gorkov et Rashba [25], un fort couplage spin-orbite de type Rashba peut produire de la supraconductivité en onde p comme évoqué précédemment. Le hamiltonien ce système s'écrit alors :

$$H = \xi_k \tau_z + \Delta_S \tau_x + \left(\alpha \tau_z + \frac{\Delta_T}{k_F} \tau_x \right) (\sigma_x k_y - \sigma_y k_x), \quad (3.29)$$

et a quatre énergies propres données par :

$$\begin{aligned} E^2 &= \xi_k^2 + k^2(\alpha^2 + \Delta_T^2) + \Delta_S \pm 2k|\xi_k \alpha + \Delta_S \Delta_T| \\ E^2 &= (\xi_k \pm k\alpha)^2 + \left(k \frac{\Delta_T}{k_F} \pm \Delta_S \right)^2, \end{aligned} \quad (3.30)$$

où $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ et où les deux opérateurs $\pm$ de la deuxième ligne sont du même signe si $\xi_k \alpha > -\Delta_S \Delta_T$ et de signes opposés sinon. La transition topologique se produit lorsqu'il y a fermeture de gap, *i.e.* lorsqu'il existe des solutions satisfaisant $E = 0$. Dans notre cas, le gap se ferme à

$$k^* = \frac{k_F}{1 - \frac{k_F \alpha}{\mu}} \quad \text{et} \quad \Delta_T = \Delta_S \frac{k_F}{k^*}. \quad (3.31)$$

Le système devient topologique lorsque $\Delta_T > \Delta_S \frac{k_F}{k^*}$ et comporte alors deux états de bord contra-propagatifs. Nous remarquons que lorsque $\alpha = 0$, $k^* = k_F$. Le gap se ferme alors lorsque $\Delta_T = \Delta_S$: une augmentation du spin-orbite pousse le système vers la transition topologique.

3.3.2 Supraconducteur chiral

Comme il fut montré dans les récents travaux de Sau *et al.* [66] et d'autres travaux plus anciens [22], il est possible d'obtenir de la supraconductivité sans spin de manière effective sans avoir à l'origine de couplage supraconducteur en onde p . Trois ingrédients suffisent à la produire : un couplage spin-orbite, un champ Zeeman et un couplage supraconducteur en onde s . Le champ Zeeman ayant pour effet de lever la dégénérescence de spin, nous pouvons supposer que l'une des deux bandes de spin soit poussée au-dessus du niveau de Fermi. Le système serait alors contraint au même spin et donc sans spin de manière effective. Le terme de supraconductivité n'étant pas en mesure de coupler électrons et trous de même spin, c'est là qu'intervient le spin-orbite. Considérons le hamiltonien suivant (où nous avons pris $\Delta_S = 0$) :

$$H = \xi_k \tau_z + \alpha(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x) \tau_z + \Delta_S \tau_x + V_z \sigma_z, \quad (3.32)$$

où $\xi_k = \frac{k^2}{2m} - \mu$. La figure 3.3 représente la structure de bandes de ce hamiltonien sans le terme de supraconductivité. Nous remarquons que le champ Zeeman ouvre un

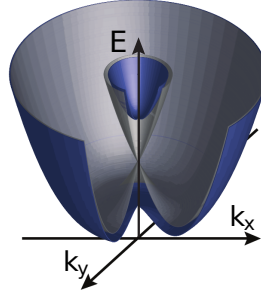


FIGURE 3.3 – Structure de bandes en présence de spin-orbite : en gris (en bleu) sans champ Zeeman (avec champ Zeeman). Figure tirée de la revue de J. Alicea [4]

gap en $k = 0$. De plus, comme détaillé en annexe E, sans champ Zeeman, les électrons de moments opposés sont aussi de spins opposés avec une direction dans le plan. Si on considère maintenant le champ Zeeman, celui-ci apporte une composante en spin orientée selon l'axe z mais ne retire pas la composante dans le plan de spin opposé. Ce système peut alors se comporter comme un supraconducteur sans spin lorsque l'on place le potentiel chimique au niveau de l'ouverture de gap créé par le champ Zeeman. Ceci car la supraconductivité en onde s étant en mesure de coupler les électrons aux trous de la bande restante. Le champ Zeeman brise l'invariance par renversement du temps, le système est alors de classe topologique $\mathbb{Z}$ caractérisée par le nombre de Chern. Les énergies propres du système sont définies par l'équation :

$$E^2 = \xi_k^2 + k^2 \alpha^2 + \Delta_S^2 + V_z^2 \pm \sqrt{V_z^2(\xi_k^2 + \Delta_S^2) + k^2 \xi_k^2 \alpha^2}. \quad (3.33)$$

Nous remarquons qu'une fermeture de gap a lieu en $k = 0$,

$$E^2(k = 0) = (V_z \pm \sqrt{\Delta_S^2 + \mu^2})^2. \quad (3.34)$$

Le système est alors topologique lorsque $V_z > \sqrt{\Delta_S^2 + \mu^2}$ et trivial sinon.

3.4 Supraconducteur hélical en présence de champ magnétique

Sachant que, dans le cas précédent, le champ Zeeman peut permettre de passer d'une phase triviale à une phase topologique, il est naturel de se demander quelles transitions de phase peuvent se produire dans un supraconducteur hélical. Nous savons que le champ Zeeman brise l'invariance par renversement du temps, l'ajout de celui-ci change la classe de symétrie du système de DIII à D. L'invariant topologique passe donc de $\mathbb{Z}_2$ à $\mathbb{Z}$.

Pour un faible champ Zeeman qui ne produit pas de transition topologique, le système devient trivial car les deux états de bord du système ne sont plus protégés par la symétrie par renversement du temps l'un par rapport à l'autre. C'est le cas avec le hamiltonien en onde p suivant :

$$H = \xi_k \tau_z + \frac{\Delta_R}{k_F} (\sigma_x k_y - \sigma_y k_x) \tau_x + V_z \sigma_z. \quad (3.35)$$

Ce hamiltonien est diagonal par blocs, chaque bloc se comportant comme un supraconducteur sans spin où le potentiel chimique est renormalisé en fonction du spin, $\mu_\sigma = \mu + \sigma V_z$ avec $\sigma = \pm$. Une transition topologique se produit lorsque μ_σ s'annule, une des deux bandes du système est isolée et le nombre de Chern total devient 1. L'état de bord restant, de type chiral, est alors topologiquement protégé.

Dans cette section, nous allons étudier un supraconducteur avec une forte interaction spin-orbite, donc avec un paramètre d'ordre mélangeant composantes singulet et triplet, en présence d'un champ magnétique. L'introduction et l'étude originale de ce type de modèles ont été motivées par des considérations expérimentales qui seront présentées dans le prochain chapitre. Nous allons établir le diagramme de phase associé à ce modèle, discuter les invariants topologiques, et surtout fournir une étude détaillée des états de bord.

3.4.1 Fermetures de gap

Nous pouvons maintenant considérer le hamiltonien complet qui contient l'ensemble des ingrédients introduits jusqu'à maintenant [75] :

$$H = \xi_k \tau_z + \Delta_S \tau_x + V_z \sigma_z + \left(\alpha \tau_z + \frac{\Delta_T}{k_F} \tau_x \right) (\sigma_x k_y - \sigma_y k_x). \quad (3.36)$$

Ses énergies propres sont données par l'équation :

$$E_\pm^2(k) = V_z^2 + (\alpha k)^2 + \Delta_S^2 + \Delta_T^2 \frac{k^2}{k_F^2} + \xi_k^2 \pm 2 \sqrt{V_z^2 (\Delta_S^2 + \xi_k^2) + \frac{k^2}{k_F^2} (\Delta_S \Delta_T + \alpha k_F \xi_k)^2}. \quad (3.37)$$

Nous remarquons ici encore que la même transition de phase se produit en $k = 0$: tout comme le terme de spin-orbite α , le terme de supraconductivité Δ_T est linéaire en k , il en résulte des équations identiques pour $k = 0$. Nous savons donc que le gap se ferme pour $V_z = \sqrt{\Delta_S^2 + \mu^2}$.

Nous avons vu précédemment que pour le cas d'un supraconducteur hélical une fermeture de gap se produisait en $k = k_F$. L'ajout du champ Zeeman changeant la classe topologique, nous devons vérifier si cette fermeture est toujours présente. Il n'est pas possible de trouver de solution analytique de la fermeture de gap pour des valeurs de spin-orbite non nulles. Nous nous contenterons d'étudier analytiquement le cas sans spin-orbite ($\alpha = 0$), nous montrerons l'existence d'une fermeture pour $\alpha \neq 0$ à l'aide d'une

approche numérique. Dans le cas $\alpha = 0$:

$$E_{\pm}^2(k = k_F) = (\Delta_S \pm \sqrt{V_z^2 + \Delta_T^2})^2. \quad (3.38)$$

Le gap effectif en fonction du paramètre supraconducteur en onde s et du champ Zeeman pour une valeur de spin-orbite nulle et non nulle est présenté figure 3.4. Bien que le système soit dans une phase topologique triviale pour les paramètres $V_z < \sqrt{\Delta^2 + \mu^2}$ la fermeture de gap vers la phase hélicale survit au champ Zeeman. Il s'agit d'un premier résultat surprenant. Pour mieux cerner cette phase, nous allons maintenant calculer un invariant topologique associé à cette phase.

3.4.2 Nombre de Chern

Afin de caractériser les phases topologiques de ce système de classe D, nous allons calculer le nombre de Chern. Celui-ci se calcule *via* l'intégrale de la courbure de Berry des bandes remplies (et l'équation 3.25 en découle) :

$$C = \sum_n \frac{1}{2\pi i} \int_{BZ} d^2k F_n(k), \quad (3.39)$$

$$F_n(k) = \frac{\partial A_{ny}(k)}{\partial x} - \frac{\partial A_{nx}(k)}{\partial y}, \quad (3.40)$$

$$A_{n\mu}(k) = \langle u_n(k) | \partial_{\mu} u_n(k) \rangle, \quad (3.41)$$

où $F_n(k)$ et $A_{n\mu}(k)$, avec $\mu = x, y$, sont respectivement la courbure et la connexion de Berry de la bande n . Nous pouvons les évaluer numériquement [23] en utilisant les fonctions et valeurs propres du hamiltonien (3.36). Comme présenté en figure 3.4, nous obtenons que $C = 0$ pour $V_z < \sqrt{\Delta_S^2 + \mu^2}$ et que $C = 1$ sinon. Nous avons alors la vérification que même si la fermeture de gap de la phase hélicale survit au champ Zeeman, cette phase n'est pas protégée topologiquement. On peut parler de phase topologique faible.

3.4.3 États de bord

La phase hélicale n'est plus protégée par la symétrie par renversement du temps, cependant, une fermeture de gap continue de la caractériser. Une question naturelle est de savoir si des états de bord sont toujours présents dans cette phase, nous pourrions nous attendre à ce que le champ Zeeman ouvre un gap dans ces états de bord.

Via des calculs analytiques présentées en annexe E ainsi que des simulations numériques, nous pouvons dénombrer les états de bord que présente ce modèle. Le système se découpe en trois zones présentées figure 3.5 :

1. Zone triviale définie par la condition $\Delta_S < \sqrt{V_z^2 + \Delta_T^2}$. Pas d'états de bord.

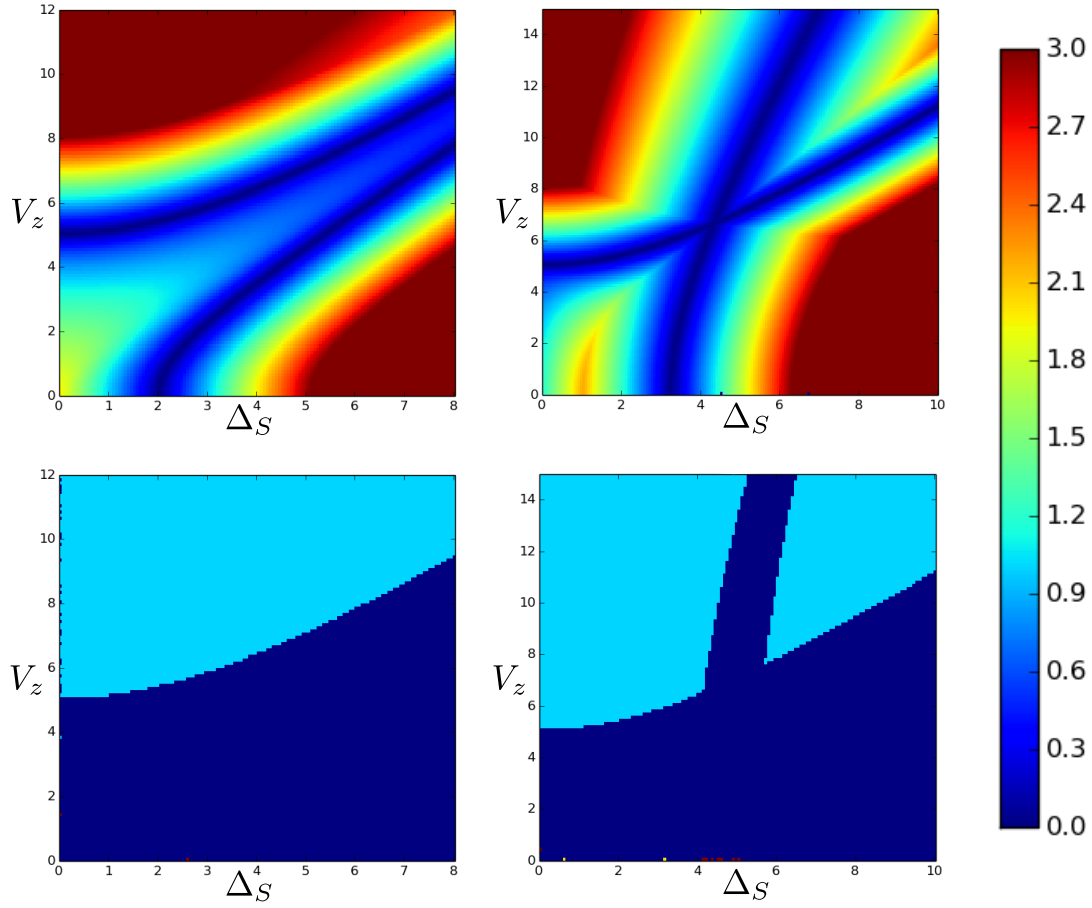


FIGURE 3.4 – Gap effectif (en haut) et nombre de Chern (en bas) en fonction de la supraconductivité s-wave Δ et du champ Zeeman V_z pour les valeurs de liaisons fortes $t = 10$, $\mu = 5$ et $\Delta_T = 2$. Figures de gauche : $\alpha = 0$, figures de droite $\alpha = 8/k_F$.

2. Zone hélicale vérifiant les conditions $\Delta_S > \sqrt{V_z^2 + \Delta_T^2}$ et $V_z < \sqrt{\Delta_S^2 + \mu^2}$. Cette zone est définie par le nombre de Chern $C = 0$.
3. Zone topologique de type chirale vérifiant la condition $V_z > \sqrt{\Delta_S^2 + \mu^2}$ possédant un état de bord. Dans cette zone, le nombre de Chern est $C = 1$, l'état de bord est donc protégé.

Afin de résoudre le système nous considérons le système infini dans la direction y , le vecteur d'onde k_y est alors un bon nombre quantique. Le hamiltonien s'écrit alors :

$$H_{tot}(k_y) = \left(\frac{k_y^2}{2m} - \frac{1}{2m} \partial_x^2 - \mu \right) \tau_z + \Delta_s \tau_x + V_z \sigma_z + \left(\alpha \tau_z + \frac{\Delta_R}{k_F} \tau_x \right) (k_y \sigma_x + i \sigma_y \partial_x) . \quad (3.42)$$

À partir de cet hamiltonien nous allons calculer les états de bord de manière analytique et numérique.

Résolution analytique

Le calcul analytique des états de bord est effectué en Annexe E pour le cas $\alpha = 0$. Considérant le bord situé en $x = 0$ les solutions à énergie nulle sont cherchées à travers l'ansatz suivant :

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^4 a_n e^{-z_n x} \rho_n , \quad (3.43)$$

où ρ_n est un spineur dans l'espace de Nambu et où les a_n sont de simples coefficients complexes. À énergie nulle le spineur peut être réduit de quatre composantes à deux composantes par la symétrie particule-trou. Ces calculs permettent de dénombrer les solutions dans les différentes phases. Ces calculs montrent que dans la phase hélicale les deux états de bord d'énergie nulle sont toujours présents, ils ne sont donc pas directement affectés par le champ Zeeman. La phase chirale comporte un seul état de bord comme attendu.

La structure des coefficients z_n permet une compréhension de ces états de bord ainsi que de leur dépendance spatiale. Le nombre de solution z_n permet de déterminer le nombre d'états de bord. Les conditions aux limites imposent $\rho(0) = 0$, ce qui donne deux contraintes pour les coefficient a_n . La condition de normalisation en donne une de plus. Un degré de liberté permet le choix de deux vecteurs d'onde orthogonaux, il y aura alors deux états de bord si le système comporte quatre solutions z_n et un état de bord si le système n'en comporte que trois.

Les états de bord ont une composante qui oscille seulement si z_n admet des solutions imaginaires. De plus nous pouvons nous attendre à ce que les états de bord aient autant de coefficients de décroissance que de solutions z_n . Le tableau 3.2 récapitule les résultats analytiques obtenus. Nous remarquons que différents types de solutions pour les états de bord sont possibles pour une même phase, les z_n sont parfois purement réels ce qui implique que les états sont décroissants sans oscillation.

Topologique	Conditions			z_n
Triviale $V < \sqrt{\Delta_S^2 - \Delta_R^2}$				0 solution
Hélicale $V > \sqrt{\Delta_S^2 - \Delta_R^2}$	$V < \Delta_S$			4 complexes
	$V > \Delta_S$	$V < \sqrt{(\mu - \Delta_R^2/4\mu)^2 + \Delta_S^2}$	$\Delta_R > 2\mu$	4 réelles
		$V > \sqrt{(\mu - \Delta_R^2/4\mu)^2 + \Delta_S^2}$	$\Delta_R < 2\mu$	4 complexes
Chirale $V > \sqrt{\Delta_S^2 + \mu^2}$	$V < \sqrt{(\mu - \Delta_R^2/4\mu)^2 + \Delta_S^2}$		$\Delta_R < 2\sqrt{2}\mu$	2 réelles, 2 complexes
	$V > \sqrt{(\mu - \Delta_R^2/4\mu)^2 + \Delta_S^2}$		$\Delta_R > 2\sqrt{2}\mu$	3 réelles
				1 réelle, 2 complexes

TABLE 3.2 – Tableau des différentes phases topologiques et des différents états de bord obtenus par résolution analytique dans le cas d'un supraconducteur avec un paramètre d'ordre triplet et singulet en présence de champ Zeeman [27].

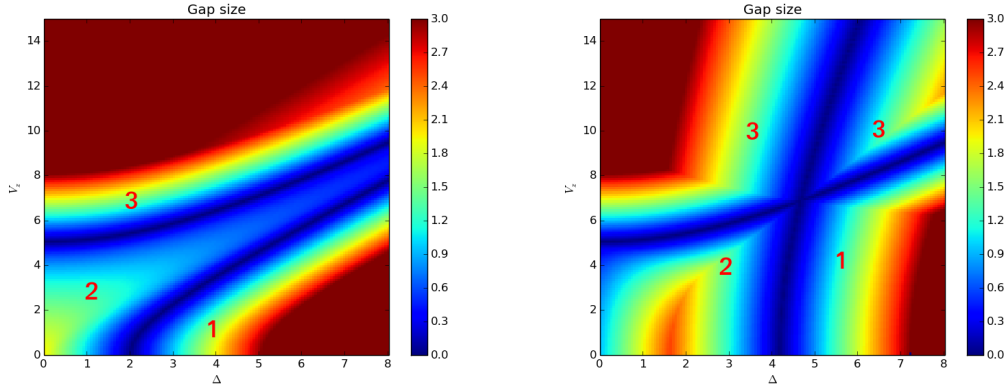


FIGURE 3.5 – Gap effectif en fonction de la supraconductivité s-wave Δ et du champ Zeeman V_z pour les valeurs de liaisons fortes $t = 100$, $\mu = 5$, $\Delta_T = 2$ et $\alpha * k_F = 0$ ($\alpha k_F = 8$) à gauche (à droite). Les trois zones topologiques sont désigné par les chiffres en rouge, **1** désigne la zone topologique triviale, **2** désigne la zone topologique hélicale, **3** désigne la zone topologique chirale.

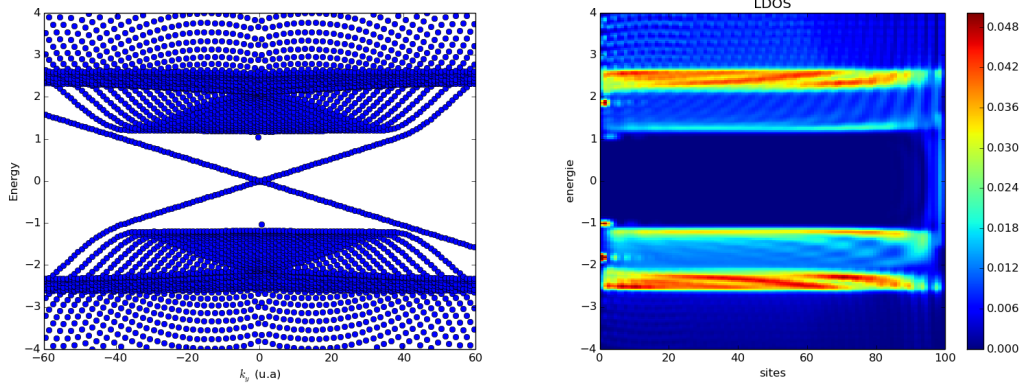
Simulation numérique

Les calculs numériques, quant à eux, permettent de vérifier et d'étendre les résultats analytiques au spectre entier, et également de prendre en compte le couplage spin-orbite. Nous pouvons ainsi établir la dispersion des états en fonction du vecteurs d'onde k_y .

Sur la figure 3.6 sont présentés les états de bord dans une phase hélicale. Nous remarquons que le champ Zeeman seul joue peu de rôle dans l'asymétrie de la dispersion des états de bord contrairement à l'ajout du spin-orbite qui modifie les deux vitesses de Fermi. En effet, le potentiel Zeeman ne fait que changer (de manière effective) le potentiel chimique, ce qui, pour une bande parabolique, ne change que faiblement la vitesse de Fermi. Figure 3.7 sont présentés les états de bord dans une phase chirale.

Nous pouvons conclure des calculs analytiques et des simulations numériques que le système comporte dans sa phase hélicale deux états de bord contra-propagatifs. Ces états de bord sont toujours présents pour un champ Zeeman non nul. Nous savons sous champ Zeeman le système est de classe D et que la phase hélicale est faiblement topologique. Bien que les états de bord ne soit pas protégés, le champ Zeeman seul ne suffit pas à les altérer, les solutions d'énergie nulle étant toujours présentes. Nous pouvons cependant les supposer sensibles au désordre.

$$\Delta = 1, V_z = 3, \alpha = 0$$



$$\Delta = 1, V_z = 3, \alpha k_F = 4$$

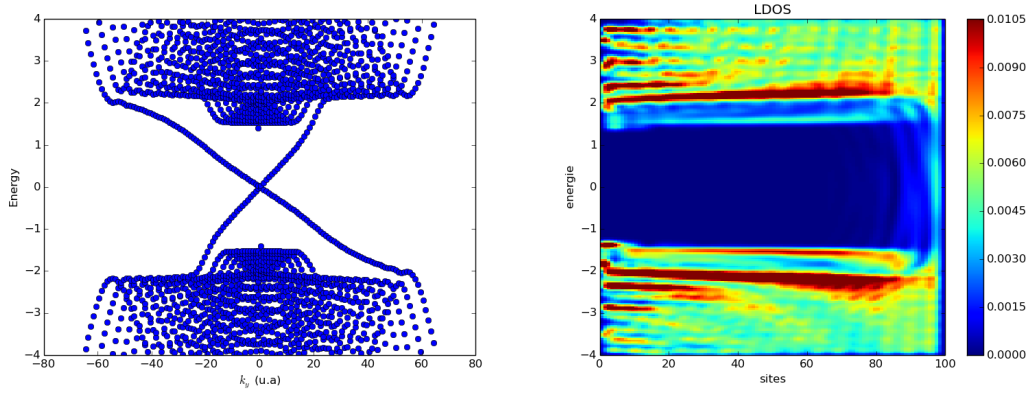
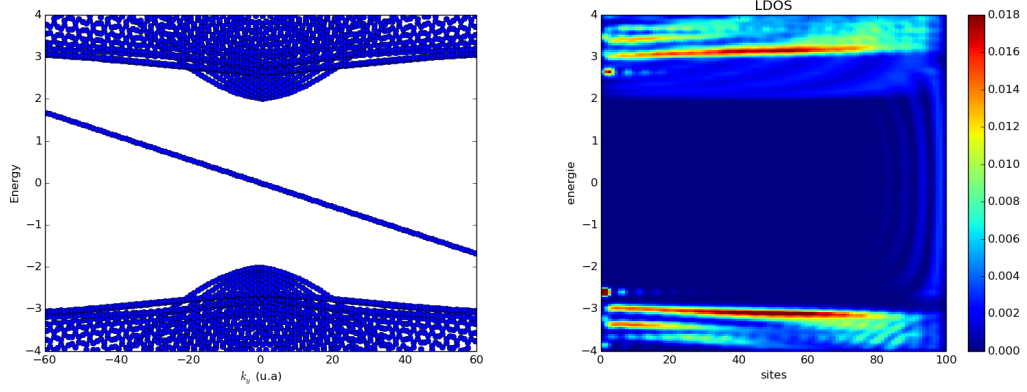


FIGURE 3.6 – Phase hélicale. Dispersion en k_y et LDOS pour les paramètres $\mu = 5$, $t = 20$ $\Delta_R = 2$.

$$\Delta = 0, V_z = 7$$



$$\Delta = 3, V_z = 7$$

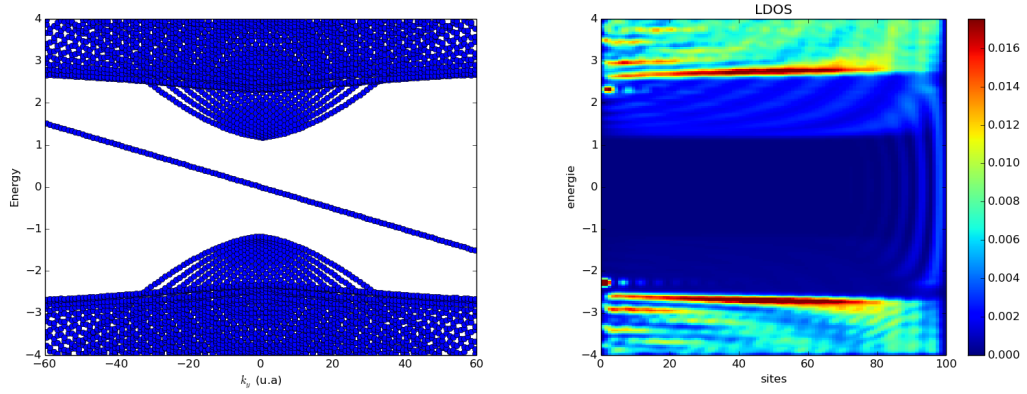


FIGURE 3.7 – Phase chirale. Dispersion en k_y et LDOS pour les paramètres $\mu = 5$, $t = 20$ $\Delta_R = 2$.

3.5 Conclusion

Nous avons étudié dans ce chapitre les propriétés topologiques des supraconducteurs en ondes p et pourquoi ce type de supraconductivité était susceptible d'amener des états de bord de type fermions de Majorana. Nous avons évoqué deux pistes possibles pour obtenir ce type de supraconductivité. La supraconductivité en onde p peut se retrouver de manière effective dans des matériaux possédant un couplage spin-orbite et un couplage Zeeman. Le terme de supraconductivité en onde p peut aussi directement être présent notamment quand le système possède un fort couplage spin-orbite.

Nous avons ensuite étudié les différentes phases topologiques que peuvent amener l'ensemble de ces ingrédients. Lorsqu'un supraconducteur mélangeant des composantes singulet et triplet est en présence de champ Zeeman, deux phases topologiques sont possibles : la phase hélicale composée de deux états de bord contra-propagatifs et la phase chirale composée d'un seul état de bord. Nous avons étudié dans ces différentes phases topologiques les états de bord à l'interface supraconductivité/vide à l'aide de calculs analytiques et numériques. Nous avons ainsi montré qu'en présence de champ Zeeman, la phase topologique hélicale n'est plus protégée. En effet le champ Zeeman brisant l'invariance par renversement du temps, le supraconducteur passe de la classe de symétrie DIII à D et d'un invariant topologique $\mathbb{Z}_2$ à $\mathbb{Z}$. Quand bien même les états de bord ne sont plus conjugués par la symétrie par renversement du temps, néanmoins, ils demeurent. Il s'agit de ce fait d'une phase supraconductrice hélicale faiblement protégée. Dans le prochain chapitre, nous allons étendre l'étude de ce modèle au cas inhomogène où le champ Zeeman peut maintenant varier spatialement. Nous étudierons les états de bord pouvant être générés par cette variation spatiale du champ Zeeman.

Chapitre 4

Cluster magnétique et supraconductivité avec un paramètre d'ordre hybride singulet-triplet

4.1 Introduction

Dans le chapitre précédent nous avons vu qu'une variation du champ Zeeman suffisait à produire une transition topologique dans un supraconducteur avec un paramètre d'ordre hybride de type singulet-triplet. Or un tel fort champ Zeeman peut être produit par le champ d'échange d'atomes magnétiques. Cela implique qu'une phase topologique peut donc apparaître dans un matériau autour d'un cluster magnétique. Nous allons étudier dans ce chapitre les états de bord produits par une variation spatiale du champ Zeeman.

4.2 Modèle

Considérons un supraconducteur avec un paramètre d'ordre hybride mélangeant composante singulet et composantes triplet à deux dimensions. Nous supposons qu'en l'absence du cluster, ce supraconducteur est dans une phase topologique triviale. Nous considérons qu'une structure magnétique crée un champ Zeeman local, dont l'extension est bien supérieure à la longueur de Fermi. Par commodité, nous traiterons le cas où le champ Zeeman a une symétrie circulaire, nous pourrions ainsi choisir les états propres du système comme étant états propres de l'opérateur de rotation.

Le hamiltonien dans la base de Nambu $\Psi(\mathbf{r}) = (u_\uparrow(\mathbf{r}), u_\downarrow(\mathbf{r}), v_\downarrow(\mathbf{r}), -v_\uparrow(\mathbf{r}))^T$ s'écrit :

$$H = \left(-\eta \nabla^2 - \mu \right) \tau_z + V_z(r) \sigma_z + \Delta_S \tau_x + \left(\alpha \tau_z + \frac{\Delta_T}{k_F} \tau_x \right) (\sigma_x \hat{p}_y - \sigma_y \hat{p}_x). \quad (4.1)$$

Afin d'exploiter la symétrie circulaire du potentiel Zeeman, il est judicieux d'écrire le hamiltonien en coordonnées polaires :

$$H = \left[-\eta \left(\partial_r^2 + \frac{1}{r} \partial_r - \frac{L_z^2}{r^2} \right) - \mu \right] \tau_z + V_z(r) \sigma_z + \Delta_S \tau_x + \left(\alpha \tau_z + \frac{\Delta_T}{k_F} \tau_x \right) \begin{pmatrix} 0 & i e^{-i\theta} (-i \partial_r - \frac{1}{r} \partial_\theta) \\ -i e^{i\theta} (-i \partial_r + \frac{1}{r} \partial_\theta) & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.2)$$

où $L_z = -i \partial_\theta$ correspond à l'opérateur de moment cinétique selon l'axe z . $L_z = -i \partial_\theta$. La deuxième ligne de l'équation 4.2 ne commute pas avec l'opérateur L_z seul. En effet le couplage spin-orbite et la supraconductivité hélicale impliquent à la fois une rotation dans l'espace réel et dans l'espace de spin. L'opérateur de rotation associé s'écrit :

$$J_z = L_z + \frac{1}{2} \sigma_z. \quad (4.3)$$

Le hamiltonien commute avec cet opérateur, nous pouvons donc choisir ses vecteurs propres comme étant aussi vecteurs propres de J_z de valeurs propres m_J . Nous pouvons écrire la forme générale du spineur vecteur propre de J_z :

$$\Psi_{m_J}(\mathbf{r}) = e^{i(m_J - \sigma_z/2)\theta} \Psi_{m_J}(r) = \begin{pmatrix} u_{\uparrow m_J}(r) e^{i(m_J - 1/2)\theta} \\ u_{\downarrow m_J}(r) e^{i(m_J + 1/2)\theta} \\ v_{\downarrow m_J}(r) e^{i(m_J - 1/2)\theta} \\ -v_{\uparrow m_J}(r) e^{i(m_J + 1/2)\theta} \end{pmatrix}, \quad (4.4)$$

et remarquer que cette écriture peut former une base. La décomposition dans cette base s'écrit :

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{m_J} e^{i(m_J - \sigma_z/2)\theta} \psi_{m_J}(r) \quad \text{où} \quad \psi_{m_J}(r) = \int \frac{d\theta}{2\pi} e^{-i(m_J - \sigma_z/2)\theta} \psi(\mathbf{r}). \quad (4.5)$$

Choisissant les vecteurs propres de la forme $\Psi_{m_J}(\mathbf{r})$, nous pouvons écrire le hamiltonien dans la base des m_J :

$$H \Psi_{m_J}(\mathbf{r}) = H e^{i(m_J - \sigma_z/2)\theta} \Psi_{m_J}(r) = E_{m_J} e^{i(m_J - \sigma_z/2)\theta} \Psi_{m_J}(r). \quad (4.6)$$

Nous pouvons alors identifier le hamiltonien $\tilde{H}_{m_J}$ dans la base des $\Psi_{m_J}(r)$ comme étant :

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{m_J} &= e^{-i(m_J - \sigma_z/2)\theta} H e^{i(m_J - \sigma_z/2)\theta} \\ &= \left[-\eta \left(\partial_r^2 + \frac{1}{r} \partial_r - \frac{(2m_J - \sigma_z)^2}{4r^2} \right) - \mu \right] \tau_z + V_z(r) \sigma_z + \Delta_S \tau_x \\ &\quad + \left(\alpha \tau_z + \frac{\Delta_T}{k_F} \tau_x \right) \left[\left(\partial_r + \frac{1}{2r} \right) i \sigma_y + \frac{m_J}{r} \sigma_x \right]. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Cette transformation a permis de remplacer la variable continue θ par la variable discrète m_J sur laquelle le hamiltonien est diagonal. Définissant $\hat{k}_\theta = -\frac{i}{r}\partial_\theta$ nous remarquons que pour de grands r , $\hat{k}_\theta\Psi_{m_J}(R) \simeq \frac{m_J}{R}\Psi(R)$. Le hamiltonien se trouve simplifié :

$$\begin{aligned}\tilde{H}_{m_J}(r \rightarrow R) = & \left[-\eta \left(\partial_r^2 - \frac{m_J^2}{R^2} \right) - \mu \right] \tau_z + V_z(r)\sigma_z + \Delta_S \tau_x \\ & + \left(\alpha \tau_z + \frac{\Delta_T}{k_F} \tau_x \right) \left[\partial_r i \sigma_y + \frac{m_J}{R} \sigma_x \right].\end{aligned}\quad (4.8)$$

Ce hamiltonien est équivalent à celui d'un bord droit infini et invariant par translation dans la direction y .

Nous souhaitons discrétiser le système afin d'effectuer des calculs numériques, cependant en l'état le hamiltonien n'est pas auto-adjoint, du fait de l'écriture en coordonnée polaire. Afin de corriger cela, nous devons absorber le paramètre r du produit scalaire entre deux spineurs $\int \psi_{m_J}^*(r)\phi_{m_J}(r)rdr$. Nous renormalisons le spineur comme suit : $\hat{\Psi}_{m_J} = \sqrt{r}\Psi_{m_J}$. Le hamiltonien s'écrit alors :

$$\begin{aligned}\hat{H}_{m_J} = & \left[-\eta \left(\partial_r^2 - \frac{m_J^2 - m_J \sigma_z}{r^2} \right) - \mu \right] \tau_z + V_z(r)\sigma_z + \Delta_S \tau_x \\ & + \left(\alpha \tau_z + \frac{\Delta_T}{k_F} \tau_x \right) \left(i \sigma_y \partial_r + \frac{1}{r} m_J \sigma_x \right).\end{aligned}\quad (4.9)$$

Ce hamiltonien est facilement discrétisable et fournit un système effectif 1D pour chaque valeur m_J . En prenant un pas de discrétisation a tel que $r = a \times m$ où m prend des valeurs entières, nous définissons l'opérateur de création dans la base de Nambu $A_m^\dagger$ tel que :

$$A_m^\dagger = (c_{m_J\uparrow}^\dagger(am), c_{m_J\downarrow}^\dagger(am), c_{m_J\downarrow}(am), -c_{m_J\uparrow}(am)). \quad (4.10)$$

Définissant les paramètres de liaisons fortes : $t = \frac{\eta}{a^2}$ et $\alpha_p = \frac{\alpha}{a}$, nous pouvons écrire le hamiltonien comme une matrice :

$$\begin{aligned}\hat{H}_{m_J} = & \sum_m A_m^\dagger \left\{ t \left(2 + \frac{m_J^2 - m_J \sigma_z}{m^2} \right) \tau_z - \mu \tau_z - V_z(am) \sigma_z \right. \\ & \left. + \Delta_S \tau_x + \left(\alpha_p \tau_z + \frac{\Delta_T}{ak_F} \right) \frac{m_J}{m} \sigma_x \right\} A_m \\ & + \sum_m A_m^\dagger \left\{ -t \tau_z + \left(\alpha_p \tau_z + \frac{\Delta_T}{ak_F} \right) \frac{i \sigma_y}{2} \right\} A_{m+1} + \text{h.c.}.\end{aligned}\quad (4.11)$$

Cette résolution numérique possède deux avantages majeurs : Premièrement, à travers un modèle standard de liaisons fortes à 2D, nous aurions perdu la symétrie circulaire du système. Deuxièmement, la diagonalisation effective par bloc en θ conduisant aux valeurs propres m_J , permet une réduction de temps de calcul drastique. Ainsi, nous pouvons nous intéresser à des systèmes bien plus grands.

4.3 Résultats

Grâce au modèle établi précédemment, nous pouvons étudier plusieurs cas de transition de phase. Dans cette section, nous nous intéresserons aux différents états de bord que l'on peut obtenir à travers une variation du champ Zeeman, cette variation de champ Zeeman pouvant amener le système dans une phase hélicale ou chirale.

4.3.1 Phase hélicale

Dans un premiers temps, nous allons étudier l'effet d'une marche de potentiel. Nous considérons d'abord un système sans couplage spin-orbite dont la phase est triviale sans champ Zeeman ($\Delta_S > \Delta_T$). Nous avons vu précédemment que la phase hélicale est faiblement topologique, néanmoins ses états de bord subsistent. Nous rappelons le hamiltonien initial :

$$H = \left(\frac{\mathbf{k}^2}{2m} - \mu \right) \tau_z + \Delta_S \tau_x + \frac{\Delta_T}{k_F} \tau_x (\sigma_x k_y - \sigma_y k_x) + V_z(r) \sigma_z, \quad (4.12)$$

où le champ Zeeman est tel que :

$$V_z(r) = \begin{cases} V_{z,\max} & \text{si } r < R_c \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}. \quad (4.13)$$

La figure 4.1 présente le résultat d'une marche de potentiel Zeeman amenant le système dans une phase hélicale. Nous remarquons que les états de bord ne sont pas semblables à ceux obtenus dans le cas d'un bord avec le vide. Un entassement d'énergies proche de zéro ($|E| \ll \Delta$) se produit pour des valeurs de m_J tel que $|m_J| < R_c k_F$. Les états de bord croisent l'énergie de Fermi quatre fois : deux fois en $m_J \sim 0$, et en $m_J \sim \pm R_c k_F$. Nous savons que la fermeture de gap pour cette transition s'effectue à $|\mathbf{k}| = k_F$. Il semblerait que contrairement au bord avec le vide, toutes les valeurs de k donnant l'énergie de Fermi produisent un état de bord d'énergie proche de zéro. Nous remarquons que les dispersions sont différentes en fonction de la forme du champ Zeeman. Pour des valeurs proches de la transition hélicale/triviale, les états de bord sont quasi-dégénérés dans la zone $m_J R_c \in [-k_F, k_F]$. Lorsque le champ Zeeman est plus important et se rapproche de la transition hélicale/chirale, la dégénérescence est levée et les deux états ont des dispersions distinctes en $k = 0$.

Spin-orbite

Il est possible d'ajouter le terme de spin-orbite, qui peut prendre des valeurs positives ou négatives. La ligne de transition de phase est modifiée selon ses valeurs, voir figure 4.2. Comme nous l'avons vu précédemment, le couplage spin-orbite modifie les points de fermeture de gap dans l'espace des impulsions. Une valeur positive (respectivement

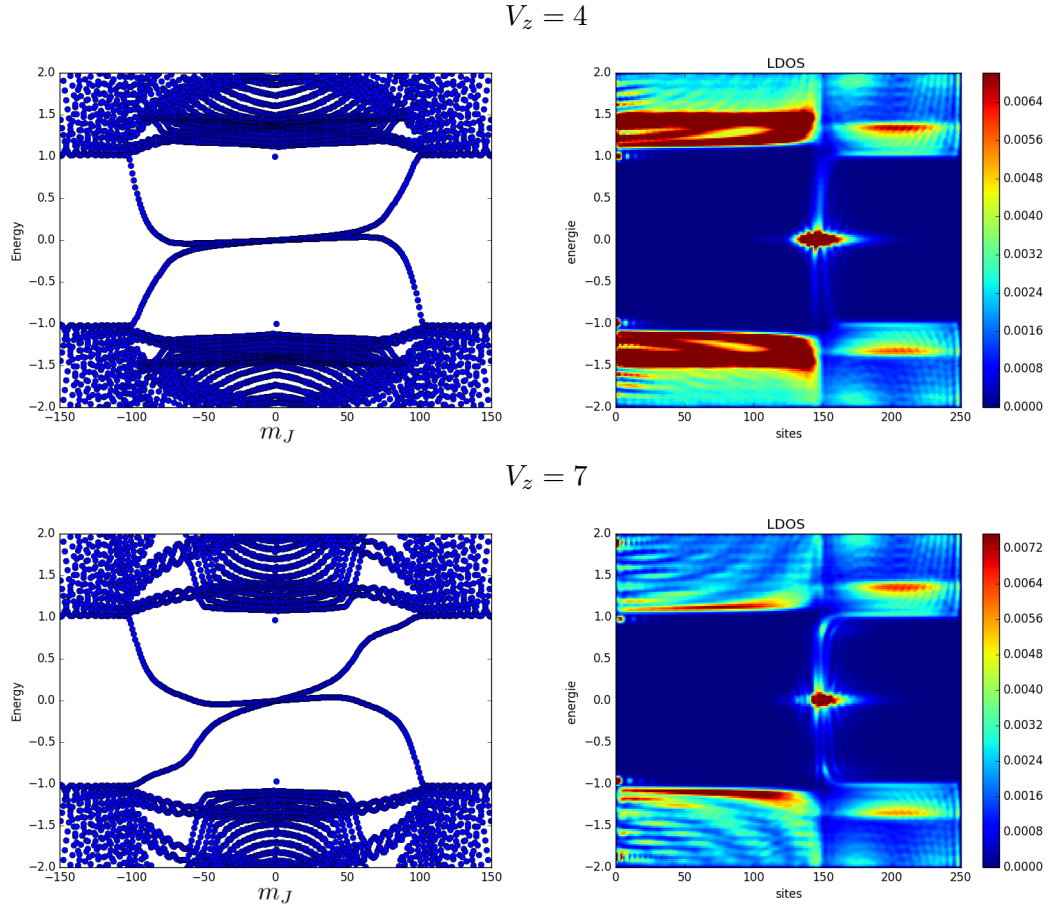


FIGURE 4.1 – Phase hélicale. Dispersion en m_J et densité locale d'états pour les paramètres $\mu = 10$, $t = 25$, $\Delta_S = 3$, $\Delta_R = 2$.

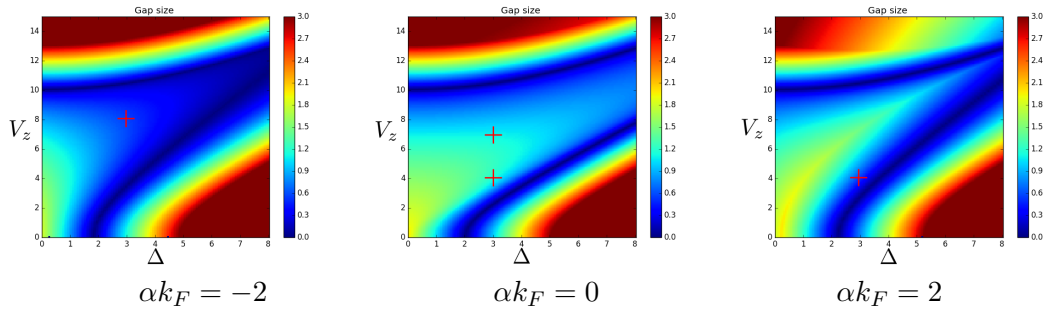


FIGURE 4.2 – Gaps effectifs en fonction du champ Zeeman et de la supraconductivité en onde s pour les paramètres de liaisons fortes $t = 25$, $\mu = 10$, $\Delta_S = 3$, $\Delta_R = 2$, et de gauche à droite, $\alpha k_F = -2, 0, 2$. Les croix rouges désignent les paramètres utilisés pour la simulation des dispersions et des LDOS des figures 4.1 et 4.3

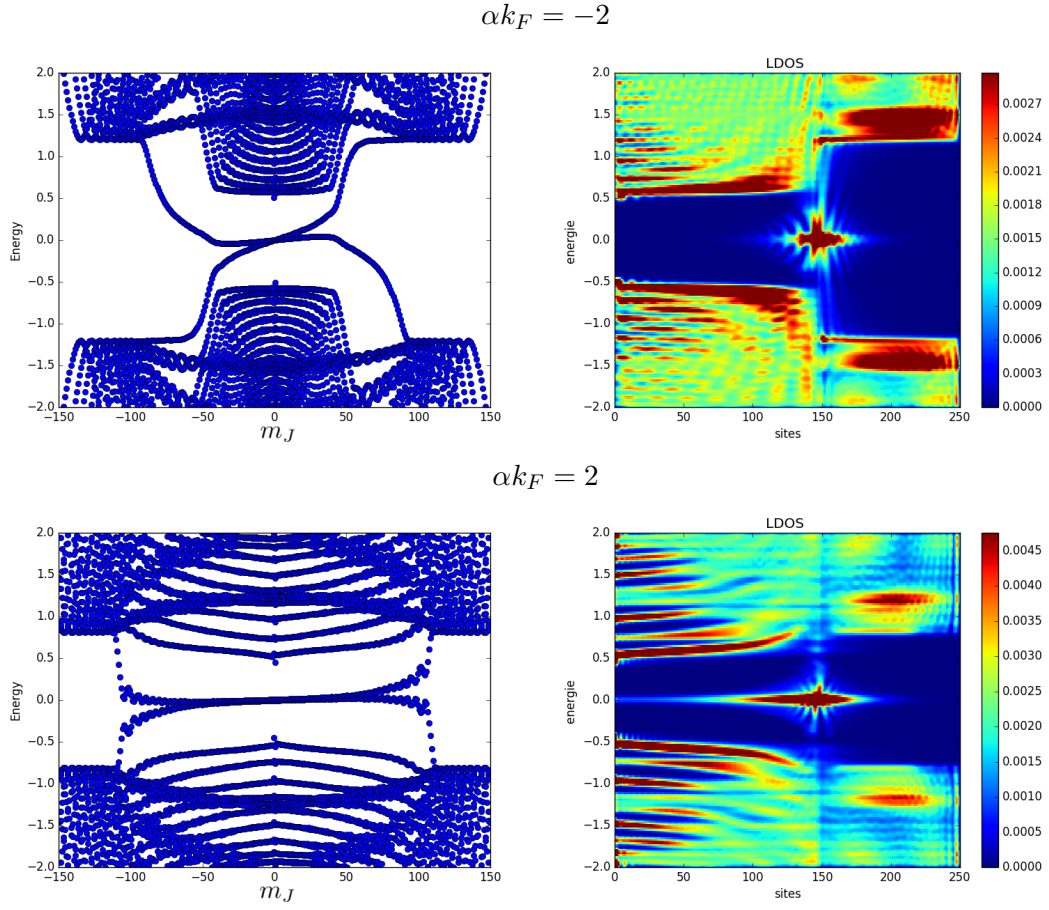


FIGURE 4.3 – Phase hélicale. Dispersion en m_J et LDOS pour les paramètres $\mu = 10$, $t = 25$, $\Delta_S = 3$, $\Delta_R = 2$.

négative) produira une fermeture de gap pour une valeur de k supérieure (respectivement, inférieure).

La figure 4.3 présente les résultats en fonction du spin-orbite. Ceux-ci ne présentent pas de différence frappante avec le cas précédent mis à part les points de croisement des états de bord avec l'énergie de Fermi. Les états de bord croisent quatre fois l'énergie de Fermi dont deux fois en $m_J \sim 0$ comme précédemment, et en $m_J \sim \pm R_c k^*$ avec $k^* \leq k_F$ le point de fermeture de gap.

Potentiel doux

Nous pouvons maintenant considérer le cas d'une marche de potentiel doux. Par commodité nous utiliserons la fonction de Fermi pour décrire le potentiel,

$$V_z(r) = \frac{V_{z,\max}}{\exp((r - R_c)/\lambda) + 1}, \quad (4.14)$$

où λ est la longueur de décroissance. Nous observons que dans le cas d'un potentiel doux, les états deviennent dégénérés pour tous les paramètres affichés précédemment (voir figure 4.4). Nous rappelons qu'en $k = 0$, les dispersions des deux états de bord sont identiques ; elles brisent donc l'invariance par renversement du temps. Nous pouvons supposer qu'il existe un hamiltonien effectif du système pour $|m_J| < R_c k_F$ qui s'écrit comme deux copies du même hamiltonien chirale. Le "lissage" du potentiel Zeeman jouant un rôle dans la dégénérescence des états de bord, nous pouvons supposer que les termes du hamiltonien contenant des dérivées ∂_r en sont affectées. Reprenant l'équation (4.9), nous supposons que pour les états de bord, le terme suivant s'annule :

$$-\eta \left(\partial_r^2 - \frac{m_J^2}{r^2} \right) - \mu = 0. \quad (4.15)$$

Le hamiltonien effectif des états de bord serait alors :

$$\hat{H}_{m_J,\text{eff}} = -\eta \frac{m_J}{r^2} \sigma_z \tau_z + V_z(r) \sigma_z + \Delta_S \tau_x + \frac{\Delta_T}{k_F} \tau_x \left(i \sigma_y \partial_r + \frac{1}{r} m_J \sigma_x \right). \quad (4.16)$$

Cet hamiltonien effectif est diagonal par bloc si l'on exclut le terme de supraconductivité en onde s , les deux blocs donnant des états de bord co-propagatifs.

Nous remarquons aussi que dans le cas d'un potentiel doux, les états de bord ne comportent quasiment pas d'oscillations (voir figure 4.4).

4.3.2 Phase chirale

Nous pouvons aussi supposer que le système soit directement amené de la phase triviale à la phase chirale, *i.e.* que $V_{z,\max} > \sqrt{\Delta_S^2 + \mu^2}$. La figure 4.5 présente les résultats obtenus pour différentes formes de potentiel Zeeman.

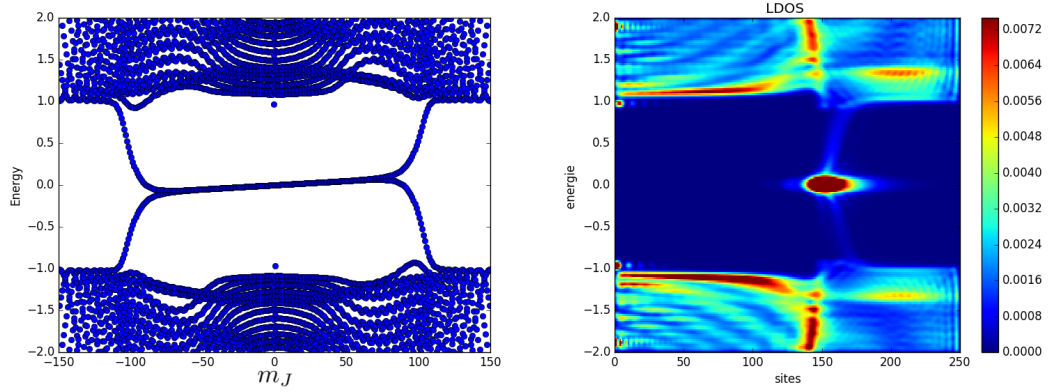


FIGURE 4.4 – Dispersion en m_J et LDOS pour les paramètres $\mu = 10$, $t = 25$, $\Delta_S = 3$, $\Delta_R = 2$, $V_{z,\max} = 7$ et $\lambda = 20$.

Potentiel Zeeman sous forme de marche : Un seul état de bord chiral apparaît, celui-ci comporte un aplatissement pour les valeurs $|m_J| < R_c k_F$. Il croise l'énergie de Fermi en un seul point, $m_J \sim 0$.

Potentiel Zeeman en fonction de Fermi, $\lambda = 5$: Nous remarquons des réminiscences des états hélicaux à travers deux états de bord gappés. L'état chiral en est altéré et croise l'énergie de Fermi en trois points : $m_J \sim 0$ et $m_J \sim \pm R_c k_F$. Nous remarquons par ailleurs que la dispersion en $k = 0$ est opposée au cas précédent.

Potentiel Zeeman en fonction de Fermi, $\lambda = 30$: Dans le cas d'un potentiel étendu à une trentaine de sites, la zone de phase hélicale est assez grande pour que les états hélicaux et l'état chiral apparaissent. Ceux-ci sont faiblement couplés, mais leurs dégénérescence est levée en $k = 0$. Nous remarquons que le gap s'abaisse dans cette zone, sa taille correspond naturellement à la taille du gap de la phase hélicale. Pour une même forme de potentiel Zeeman produisant une transition topologique seulement hélicale ou seulement chirale, la variation du gap est négligeable. Il semblerait que les transitions topologiques protègent aussi les états de bulk dans la phase hélicale.

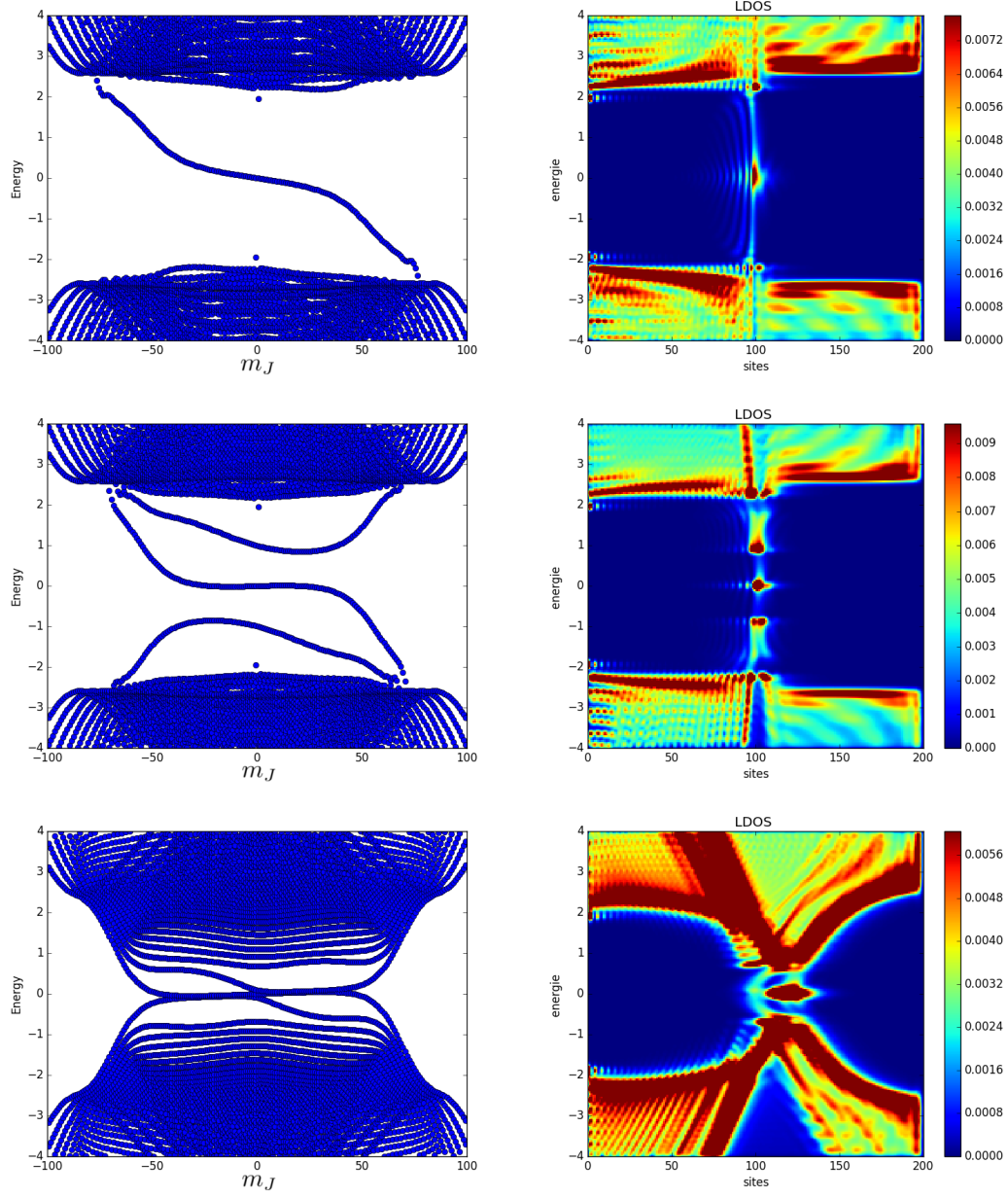


FIGURE 4.5 – Dispersion en m_J et LDOS pour les paramètres $\mu = 5$, $t = 25$, $\Delta_S = 4$, $\Delta_R = 1.4$, $V_{z,\max} = 12$ et de haut en bas $\lambda = 0.01, 5, 30$.

4.4 Supraconductivité topologique dans le matériau Pb/-Co/Si(111)

Je présente ici un travail réalisé en collaboration avec l'équipe expérimentale de Dimitri Roditchev et Tristan Cren de L'INSP de Jussieu [50]. Cette équipe a étudié *via* un microscope STM les propriétés topologiques du matériau Pb/Si(111) en présence d'atomes de cobalt enterrés. Le matériau monocouche Pb/Si(111) présente une phase supraconductrice et ce système est aussi réputé pour présenter un fort couplage spin-orbite [10]. Cela, comme le montre l'annexe D, peut amener à un mélange de supraconductivité en ondes *s* et *p*. Nous savons cependant que ce matériau n'est pas topologique, aucun état de bord n'ayant été observé [15]. Il manque alors un ingrédient additionnel pour que le système entre dans un régime topologique, et parmi toutes les possibilités le magnétisme local semble être le plus prometteur.

Ce travail porte sur l'étude de clusters de cobalt enterrés dans le matériau monocouche Pb/Si(111) comme le montre le schéma figure 4.6. Le matériau est obtenu par une croissance en auto-assemblage à travers une évaporation séquentielle d'atomes de cobalt et de plomb sur la surface de silicium, suivie d'un recuit (voir méthode de l'article [50]). Le résultat final est l'obtention d'une monocouche de plomb recouvrant des clusters de cobalt de 5 à 10 nm de rayon distribués aléatoirement. La phase supraconductrice du plomb a une température critique de 1.8 K et un gap de $\Delta = 0.35$ meV [82]. Afin de caractériser l'état supraconducteur et la transition topologique des mesures par microscope STM furent effectuées à l'aide d'une pointe supraconductrice à une température de 300 mK.

Les données obtenues sont exposées sur la figure 4.7. Nous observons dans la LDOS des cercles au-dessus des clusters magnétiques de la même échelle que ceux-ci. Le bord de ces cercles mesurés à l'énergie de Fermi est approximativement de 0.7 nm, ce qui est comparable aux distances atomiques et à la longueur d'onde de Fermi du système [17]. Cette extension est bien plus petite que la longueur de cohérence ξ ($\simeq 50$ nm) et que la longueur de libre parcours moyen l ($\simeq 4$ nm) dans ce système [10]. Ceci est remarquable car pour les supraconducteurs dans la limite diffusive $l \ll \xi$, l'échelle de longueur typique des variations supraconductrices est donnée par ξ . Ce fait suggère que pour ces états à l'intérieur du gap, leur propagation à l'intérieur où à l'extérieur du cluster est contrainte de la même manière que les états de surface sont confinés dans le cas des isolants topologiques. Ceci nous laisse à penser que ces cercles peuvent être reliés à des états de bord de Majorana entourant un domaine topologique.

Nous remarquons figure 4.7 g. que ces supposés états de bord ont une dispersion dans l'espace réel en forme de X. Ceux-ci forment deux cercles distincts se rejoignant à l'énergie de Fermi (figure d.-f.). Nous ne remarquons pas de levée de dégénérescence à l'énergie de Fermi ce qui appuie l'hypothèse de la nature topologique des états de bord.

Ces résultats expérimentaux suggèrent que les états de bord combinent des propriétés chirales et hélicales. D'une part le champ magnétique devrait favoriser des états de bord

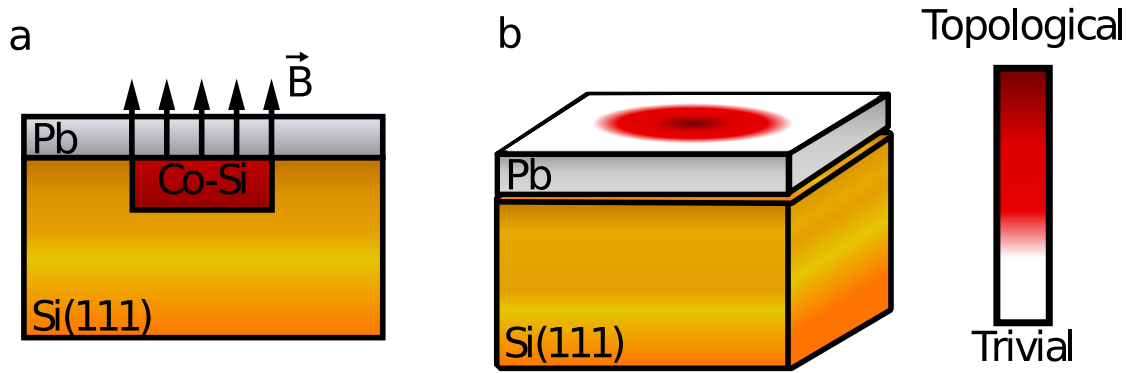


FIGURE 4.6 – Schéma du système Pb/Co/Si(111) : a. Vue de coté du système montrant l'inclusion du cluster de cobalt dans le substrat de silicium. Par dessus cela, le plomb monocouche n'est pas modifié dans sa structure mais ressent toujours l'effet du champ magnétique créé par le cluster. b. Schéma de la phase topologique du système, nous supposons que le supraconducteur entre dans un phase topologique au dessus du cluster par l'action du champ magnétique.

chiraux et d'autre part la forme en X suggère que deux états de bord sont présents et donc qu'ils sont hélicaux. Une séparation spatiale des états de bord hélicaux ne peut se produire que en brisant la TRS, ce que produit par ailleurs le champ magnétique.

4.4.1 Modèle

Le modèle le plus simple pouvant décrire le système est donc celui évoqué au début du chapitre, représenté par le hamiltonien :

$$H = \left(-\eta \nabla^2 - \mu \right) \tau_z + V_z(r) \sigma_z + \Delta_S \tau_x + \left(\alpha \tau_z + \frac{\Delta_T}{k_F} \tau_x \right) (\sigma_x \hat{p}_y - \sigma_y \hat{p}_x). \quad (4.17)$$

Nous considérons que le couplage spin-orbite de type Rashba crée un supraconducteur de paramètre d'ordre hybride de type triplet/singulet. En l'absence de cluster, le système est visiblement dans la phase triviale, ce qui implique $\Delta_S > \Delta_T$. Nous supposons que le cluster crée un champ magnétique d'échange qui se manifeste dans le système en un champ Zeeman d'orientation constante.

Comme nous l'avons vu dans le chapitre précédent, ce système peut présenter deux phases topologiques, une phase topologique hélicale faiblement protégée comportant deux états de bord contra-propagatifs et une phase chirale comportant un unique état de bord.

Nous savons qu'un état de bord chiral ne permet pas de reproduire la dispersion dans l'espace réel. En effet, un état de bord chiral produit une forme en croissant dans la dispersion (et non en X). La figure 4.8 présente une dispersion d'un état chiral obtenu sans supraconductivité en onde p . Les états hélicaux simulés n'affichent pas eux non plus

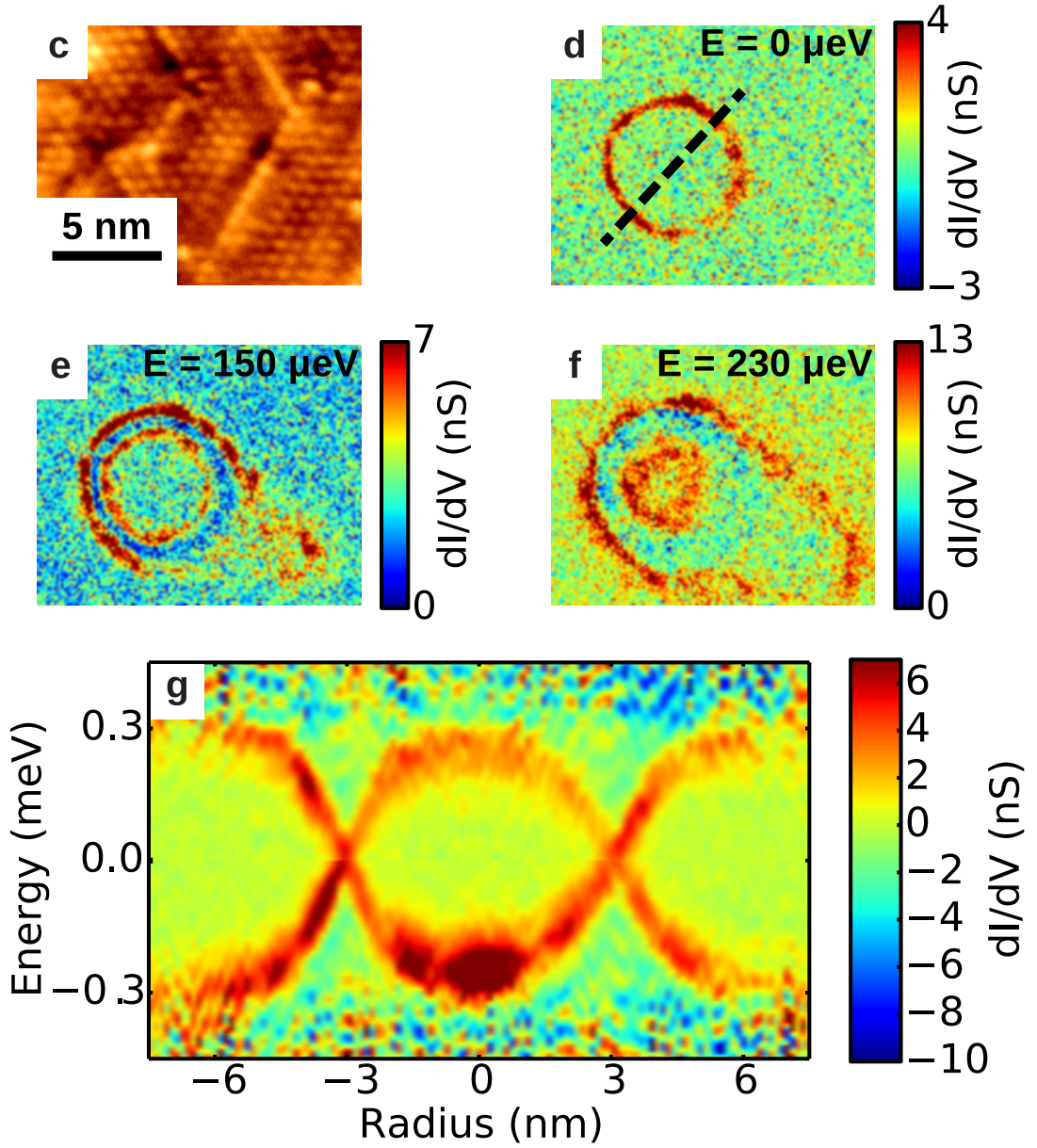


FIGURE 4.7 – États de bord au-dessus d'un cluster de cobalt enterré : a. Topographie d'une aire de 16×13 nm². b.-d. Carte de conductance à 0 meV, 0.1 meV et 0.2 meV respectivement. e. Coupe d'une largeur de 10 nm passant à travers le centre du cercle montré figure b. donnant la densité d'états en fonction de l'énergie et du rayon. Le spectre moyen a été retranché des données brutes afin de mieux montrer la dispersion des états de bord.

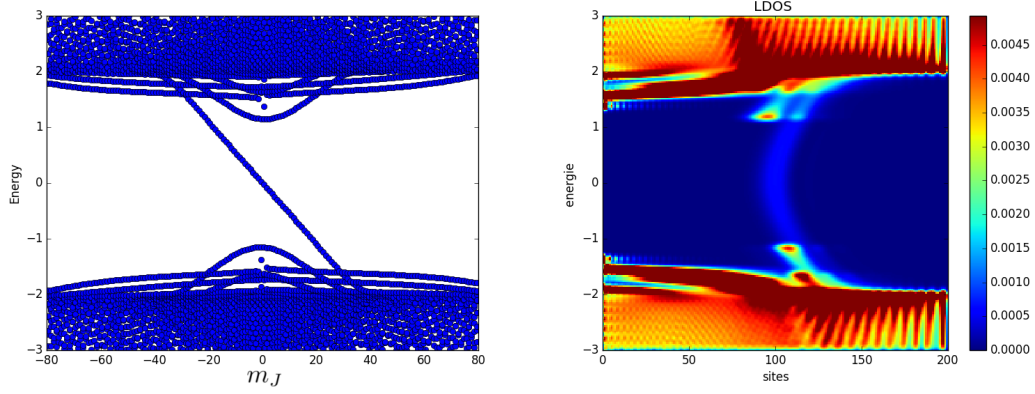


FIGURE 4.8 – Dispersion en m_J et LDOS pour les paramètres $\mu = 5$, $t = 25$, $\Delta_S = 2$, $\alpha = 6k_F$, $V_{z,\max} = 10$ et $\lambda = 20$.

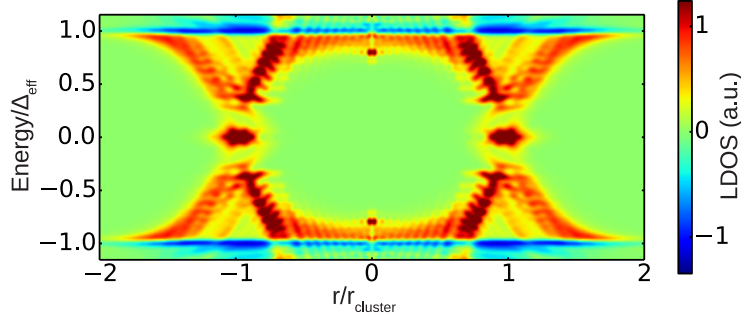


FIGURE 4.9 – LDOS pour les paramètres $\mu = 5$, $t = 25$, $\Delta_S = 4$, $\Delta_R = 1.4$, $V_{z,\max} = 12$ et $\lambda = 30$. La figure est symétrisée et le gap moyen est soustrait du spectre afin montrer au mieux la correspondance possible avec la figure expérimentale.

de dispersion sous forme de X. La figure 4.4 présente les dispersions typiques obtenues dans l'espace réel et réciproque; les deux états de bords se confondent en une même dispersion réelle. Cependant cette dispersion est obtenue pour un modèle où aucun défaut ou potentiel aléatoire n'est présent, contrairement au cas expérimental qui se trouve dans un régime de dispersion. Nous pouvons alors nous attendre à ce que l'entassement des états autour de l'énergie de Fermi soit fortement sensible au désordre.

Une dernière possibilité pour obtenir cette dispersion est qu'elle soit produite par une fermeture ou quasi-fermeture de gap. La figure 4.9 présente une fermeture de gap par une variation du champ Zeeman douce à travers la phase hélicale puis chirale. Cette figure présente le meilleur accord avec l'expérience pour le modèle utilisé.

4.5 Etude d'un vortex piégé par un cluster magnétique

Dans cette section nous présenterons une étude numérique du cas où un vortex est induit par la présence du cluster. Cette partie est encore prospective et demande de plus amples développements aussi bien dans une approche microscopique que numérique plus phénoménologique. Nous ne fournirons pas, par exemple, d'explications pour lesquelles un vortex est susceptible d'apparaître autour d'un cluster magnétique. Il s'agit plus d'un fait expérimental que nous prendrons comme hypothèse de travail.

Plusieurs cas de figure sont possibles selon que le vortex est porté par les deux types de supraconductivité ou seulement par la supraconductivité en ondes p . Dans un premier temps nous reviendrons sur les résultats de l'article de J. D. Sau *et al.* [67] traitant des vortex dans un supraconducteur chiral (en ondes p) avant de nous intéresser au cas hélical.

4.5.1 Vortex dans un supraconducteur chiral

Comme nous l'avons vu précédemment, nous pouvons obtenir une phase topologique de type chirale à travers un supraconducteur en ondes s à l'aide d'un couplage spin-orbite et d'un champ Zeeman sous la condition $V_z > \sqrt{\Delta_S^2 + \mu^2}$. Un vortex se caractérise par une variation de la phase supraconductrice le long d'un chemin qui entoure le vortex.

$$H = \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \mu\right)\tau_z + V_z(r)\sigma_z + \alpha(\sigma_x p_y - \sigma_y p_x)\tau_z + \Delta_S(\tau_x \cos \theta + \tau_y \sin \theta). \quad (4.18)$$

Cette variation de la phase brise l'invariance de rotation précédemment utilisée. De fait, $J_z = L_z + \frac{1}{2}\sigma_z$ n'est plus une quantité conservée ; cependant nous pouvons facilement trouver un nouvel opérateur commutant avec le hamiltonien, à savoir

$$J'_z = L_z + \frac{1}{2}\sigma_z + \frac{1}{2}\tau_z. \quad (4.19)$$

Comme l'ont montré Read et Green [59] (voir aussi [78]) les vortex dans les supraconducteurs topologiques peuvent porter des états liés de Majorana. Un de ces états liés de Majorana est notamment localisé au centre du vortex. Une condition d'obtention de ces états est donc la possibilité de trouver des états non-dégénérés à énergie nulle dans le spectre des états reliés au vortex. Notons que les opérations d'échange de deux vortex permettraient de réaliser des opérations de tressage de fermions de Majorana, ce qui serait un moyen de tester leur statistique non-Abélienne [33]. Nous pouvons comme précédemment choisir les états propres du hamiltonien comme états propres de J_z :

$$\psi_{m_J}(\mathbf{r}) = e^{i(m_J - \sigma_z/2 - \tau_z/2)\theta} \psi_{m_J}(r), \quad (4.20)$$

où $\psi_{m_J}(r)$ a pour hamiltonien :

$$\begin{aligned}\tilde{H}_{m_J} &= e^{-i(m_J - \sigma_z/2 - \tau_z/2)\theta} H e^{i(m_J - \sigma_z/2 - \tau_z/2)\theta} \\ &= \left[-\eta \left(\partial_r^2 + \frac{1}{r} \partial_r - \frac{(2m_J - \sigma_z - \tau_z)^2}{4r^2} \right) - \mu \right] \tau_z + V_z(r) \sigma_z + \Delta_S \tau_x \\ &\quad + \alpha \tau_z \left[\left(\partial_r + \frac{1}{2r} \right) i \sigma_y + (2m_J - \tau_z) \frac{\sigma_x}{2r} \right].\end{aligned}\quad (4.21)$$

Il est intéressant de noter que sous l'opérateur de transformation particule-trou $\Xi = \sigma_y \tau_y K$, un état propre d'énergie E de moment m_J se transforme en un état propre d'énergie $-E$ et de moment $-m_J$ sous l'action de Ξ . Nous en déduisons qu'une condition nécessaire à l'obtention d'un état non-dégénéré d'énergie nulle est $m_J = 0$. L_z donnant des valeurs propres entières, nous en déduisons qu'il n'est pas possible d'obtenir des états de Majorana non dégénérés dans une symétrie circulaire en l'absence d'un vortex.

La figure 4.10 présente un système chiral en présence de vortex. Nous remarquons que nous avons cette fois un état à énergie nulle réparti entre le centre du vortex et le bord de la zone topologique. Au centre du vortex, aucun autre état n'est présent à énergie nulle contrairement au bord de la zone topologique où cet état se mêle aux autres états de bords dispersif. Il est possible de construire une paire de fermions de Majorana à partir de cet état d'énergie nulle, ces deux fermions se construisent par des combinaisons linéaires des fonctions d'onde particule et trou :

$$\begin{aligned}\gamma_c &= \psi + \psi^\dagger, \\ \gamma_b &= \frac{\psi - \psi^\dagger}{-i}.\end{aligned}\quad (4.22)$$

Comme le montre la figure 4.10 les deux fermions de Majorana sont respectivement localisés au centre et au bord du cluster.

4.5.2 Vortex dans un supraconducteur hélical

Nous pouvons aussi imaginer un vortex dans une phase supraconductrice hélicale. Dans un premier temps, nous considérons le cas où la même phase est partagée par les deux supraconducteurs :

$$\begin{aligned}H &= \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \mu \right) \tau_z + V_z(r) \sigma_z + \alpha (\sigma_x p_y - \sigma_y p_x) \tau_z + \Delta_S (\tau_x \cos \theta + \tau_y \sin \theta) \\ &\quad + \frac{\Delta_T}{2k_F} \{ \tau_x \cos \theta + \tau_y \sin \theta, \sigma_x p_y + \sigma_y p_x \},\end{aligned}\quad (4.23)$$

où nous avons pris l'anti-commutateur entre la phase du vortex et le terme de couplage triplet afin de préserver le caractère hermitien du hamiltonien. Comme précédemment, le hamiltonien commute avec l'opérateur $J'_z = L_z + \frac{1}{2} \sigma_z + \frac{1}{2} \tau_z$.

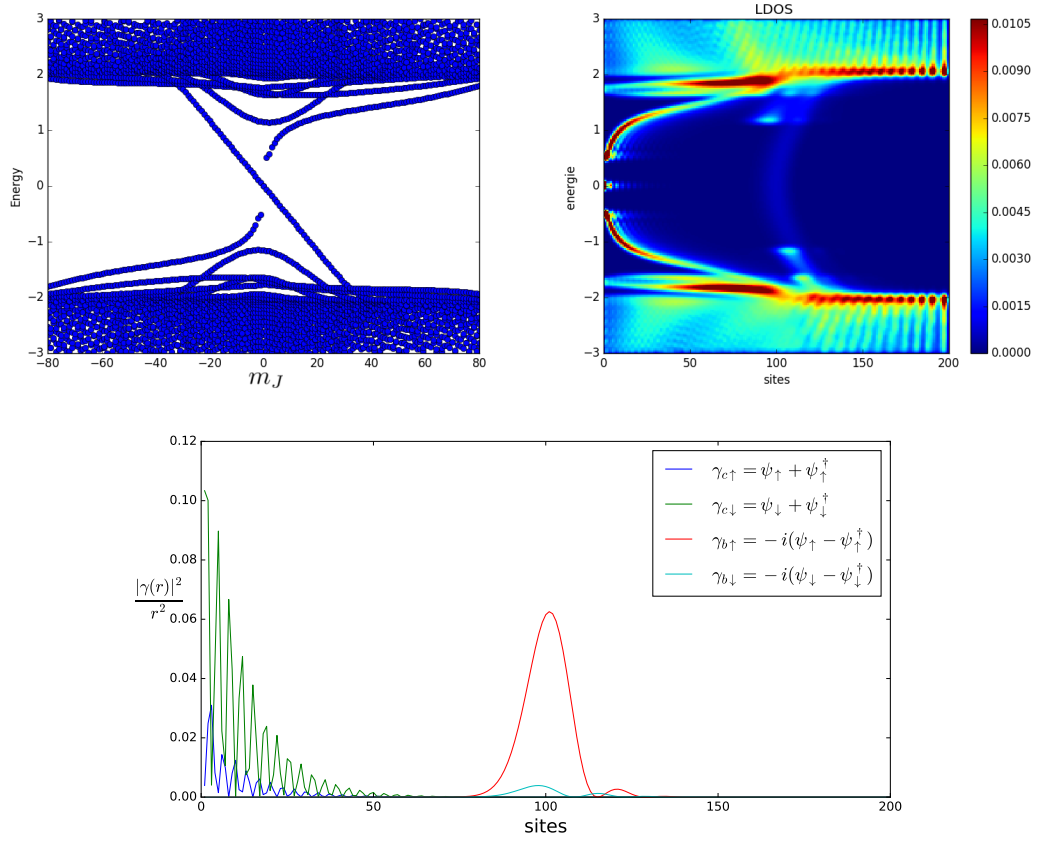


FIGURE 4.10 – Phase chiral en présence de vortex. En haut : dispersion en m_J et densité locale d'états pour les paramètres $\mu = 5$, $t = 25$, $\Delta_S = 2$, $\alpha = 6k_F$ et $\lambda = 20$. En bas : densités des parties up et down de chaque fermions de Majorana.

De la même manière, nous pouvons simuler la densité d'états dans la phase hélicale en présence de vortex. La figure 4.11 présente les résultats de cette simulation. Nous remarquons que pour une phase hélicale deux états électroniques sont présents proche de $E = 0$ pour la valeur propre $m_J = 0$. Ces états fermions de Majorana ne sont pas séparés en énergie des autres états au centre du vortex. Leurs énergies sont bien moins proches de zéro que dans le cas précédent, $E = 0.003$ et $E = 0.005$ contre $E = 2 \cdot 10^{-5}$ pour le cas chirale. Ceci indique que ces deux états se couplent faiblement. Ceci rejoint notre conclusion précédente que les états de Majorana sont beaucoup moins protégés dans cette phase hélicale à cause du champ magnétique.

4.5.3 Cas du vortex porté par la composante en onde p

Nous pouvons imaginer que la minimisation de l'énergie libre amène le système à comporter un vortex seulement sur l'une des deux phases de la supraconductivité (onde s ou onde p). Dans ce cas le système brise l'invariance par rotation. En effet, le hamiltonien s'écrit maintenant :

$$H = \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \mu \right) \tau_z + V_z(r) \sigma_z + \alpha (\sigma_x p_y - \sigma_y p_x) \tau_z + \Delta_S \tau_x + \frac{\Delta_T}{2k_F} \{ \tau_x \cos \theta + \tau_y \sin \theta, \sigma_x p_y + \sigma_y p_x \} . \quad (4.24)$$

Nous remarquons que la première ligne du hamiltonien commute avec l'opérateur $J_z = L_z + \frac{1}{2} \sigma_z$ alors que la deuxième ligne commute avec l'opérateur $J'_z = L_z + \frac{1}{2} \tau_z$. Il n'est donc pas possible de trouver une base commune. Nous pouvons cependant choisir d'écrire le système dans la base propre de l'opérateur J_z . La décomposition dans cette base, déjà citée précédemment (équation (4.5)), s'écrit :

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{m_J} e^{i(m_J - \sigma_z/2)\theta} \psi_{m_J}(r) \quad \text{où} \quad \psi_{m_J}(r) = \int \frac{d\theta}{2\pi} e^{-i(m_J - \sigma_z/2)\theta} \psi(\mathbf{r}) . \quad (4.25)$$

Nous pouvons facilement effectuer cette transformation sur un état propre du hamiltonien :

$$H\Psi(\mathbf{r}) = H \sum_{m_J} e^{i(m_J - \sigma_z/2)\theta} \psi_{m_J}(r) = E \sum_{m_J} e^{i(m_J - \sigma_z/2)\theta} \psi_{m_J}(r) \sum_{m'_J} \int \frac{d\theta}{2\pi} e^{-i(m'_J - \sigma_z/2)\theta} H e^{i(m_J - \sigma_z/2)\theta} \psi_{m_J}(r) = E \psi_{m'_J}(r) . \quad (4.26)$$

Nous identifions l'élément de matrice H_{m_J, m'_J} écrit dans la base $\psi_{m_J}(r)$ comme :

$$H_{m_J, m'_J} = \int \frac{d\theta}{2\pi} e^{-i(m'_J - \sigma_z/2)\theta} H e^{i(m_J - \sigma_z/2)\theta} . \quad (4.27)$$

Les éléments de matrice se calculent facilement ; la première ligne du hamiltonien dans l'équation (4.24) est diagonale et a été calculée dans la section précédente. Nous pouvons

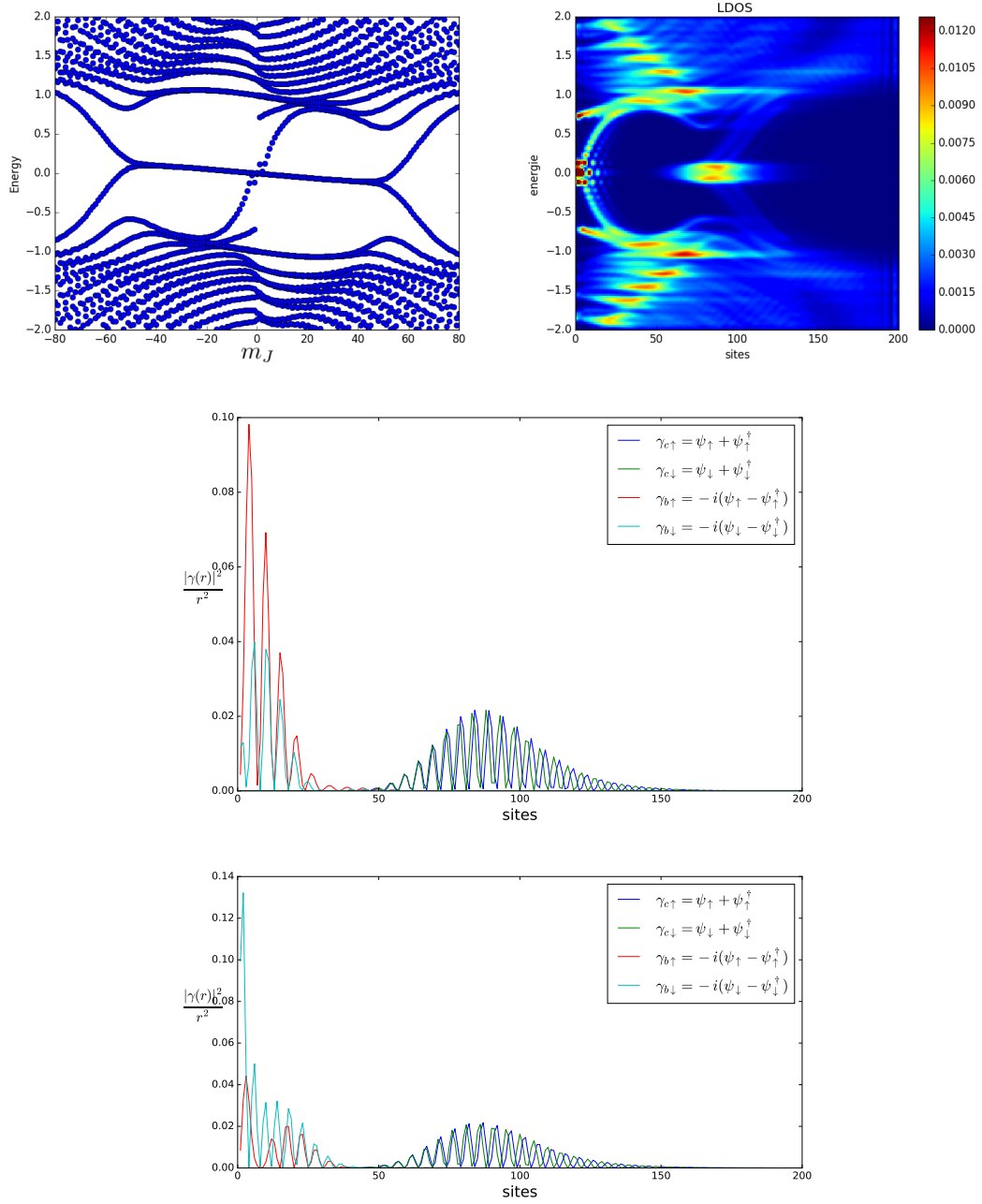


FIGURE 4.11 – Phase hélicale en présence de vortex. En haut : dispersion en m_J et densité locale d'états pour les paramètres $\mu = 10$, $t = 25$, $\Delta_S = 3$, $\Delta_T = 2$, $\alpha = 0$ et $\lambda = 20$. Au milieu : densités des parties up et down de chaque fermions de Majorana d'énergie $E = 0.003$. En bas : même chose avec $E = 0.005$

séparer le hamiltonien en trois termes :

$$H_{m_J, m'_J} = H_{m_J}^0 \delta(m_J - m'_J) + H_{m_J}^- \delta(m_J - m'_J - 1) + H_{m_J}^+ \delta(m_J - m'_J + 1), \quad (4.28)$$

où :

$$\begin{aligned} H_{m_J}^0 = & -\left\{ \eta \left[\partial r^2 + \frac{1}{r} \partial r - \frac{(2m_J - \sigma_z)^2}{4r^2} \right] + \mu \right\} \tau_z + V_z(r) \sigma_z \\ & + \left(\frac{\Delta_T}{k_F} \tau_x + \alpha \tau_z \right) (i \sigma_y (\partial r + \frac{1}{2r}) + \sigma_x \frac{m_J}{r}) + \Delta(r) \tau_x, \end{aligned} \quad (4.29)$$

et

$$\begin{aligned} H_{m_J}^+ &= \frac{\Delta_T}{k_F} \tau_+ (-i(\partial r + \frac{1}{2r}) \sigma_x + \sigma_y \frac{2m_J - n}{2r}), \\ H_{m_J}^- &= \frac{\Delta_T}{k_F} \tau_- (-i(\partial r + \frac{1}{2r}) \sigma_x + \sigma_y \frac{2m_J + n}{2r}). \end{aligned} \quad (4.30)$$

Contrairement au cas précédent, le hamiltonien n'est plus diagonal par bloc dans la base de J_z . Nous pouvons définir le spineur état propre du hamiltonien comme :

$$\Psi(r) = \begin{pmatrix} \vdots \\ \Psi_{m_J-1}(r) \\ \Psi_{m_J}(r) \\ \Psi_{m_J+1}(r) \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (4.31)$$

Ceci revient toujours à diagonaliser un système à deux dimensions, r et m_J . Cependant dans cette base, le terme du hamiltonien $\eta \frac{m_J^2}{r^2}$ deviendra rapidement dominant ; de plus le hamiltonien couple les différents indices m_J seulement de proche en proche à travers le terme de supraconductivité Δ_T bien plus petit que l'énergie de Fermi. Nous pouvons alors tronquer le spineur $\Psi(r)$ ainsi que le hamiltonien aux petites valeurs de m_J .

La figure 4.12 présente une simulation réalisé avec ce modèle. Nous avons représenté ici la moyenne angulaire de la densité. Ceci correspond à l'approximation d'une phase aléatoire. En effet, nous pouvons supposer que la phase supraconductrice en onde p ne soit pas constante dans le temps, ainsi une mesure par microscopie STM aurait pour résultat une densité d'états moyennée par rapport à cette phase, restituant ainsi l'invariance par rotation. La densité d'état dans cette approximation s'écrit :

$$\rho_{RPA}(E, r) = \frac{1}{2\pi} \int d\theta \rho(E, \theta, r) = \sum_{m_J} |\psi_{n, m_J}(r)|^2 \delta(E - E_n). \quad (4.32)$$

Nous remarquons que sous cette hypothèse, le vortex peut également porter un état de majorana. Ces résultats sont encore très préliminaires [27] ; de nombreux autres scenari doivent encore être explorés.

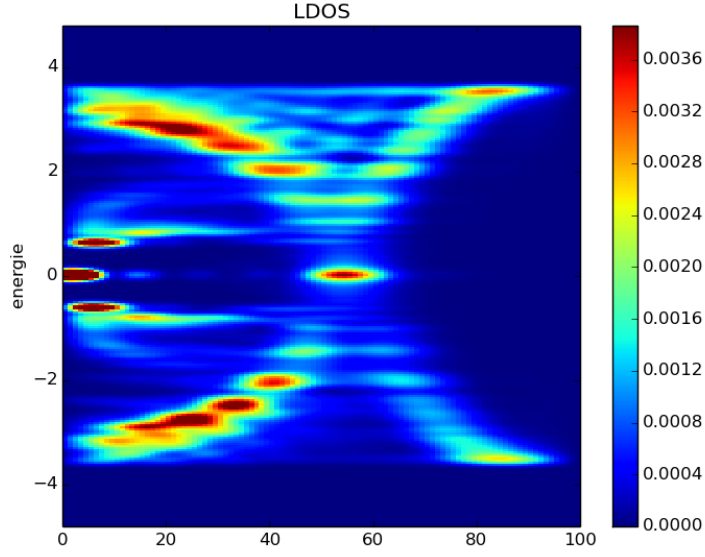


FIGURE 4.12 – LDOS d'un cluster comportant un vortex sur la phase supraconductrice en onde p pour les paramètres : $\mu = 10$, $t = 100$, $\Delta_S = 4$, $\Delta_T = 2$, $\alpha = 0$ et $\lambda = 20$.

4.6 Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre un modèle numérique permettant la simulation de système de cluster magnétique dans des supraconducteurs de paramètre d'ordre hybride en onde s et en onde p . Cette méthode permet l'étude des états de bords dans un système de petite taille tout en préservant l'isotropie de la géométrie circulaire. Celle-ci permet aussi une diagonalisation à travers des systèmes effectifs à une dimension, ce qui donne la possibilité de simuler des systèmes de grande taille.

À l'aide de ce modèle, nous avons étudié diverses transitions topologiques produites par une variation de champ Zeeman local. Nous avons constaté dans le cas d'une transition topologique hélicale, que les états de bords étaient différents des états de bords avec le vide.

Nous avons enfin considéré une expérience de microscopie STM observant des états de bords autour de clusters magnétiques. Ces états de bords se comportent dans la densité d'état à l'intérieur du gap comme deux cercles concentriques se confondant à l'énergie de Fermi. Les simulations numériques ont permis de montrer que cette dispersion caractéristique dans l'espace réel ne pouvait pas être reproduite par des états de bord chiraux. Les simulations reproduisant au mieux les données expérimentales suggèrent une quasi-fermeture de gap produite par un champ Zeeman local dont la décroissance lente crée deux domaines topologiques.

Conclusion et perspectives

Dans cette thèse nous avons principalement étudié l'effet d'impuretés magnétiques dans des systèmes sous régime quantique. Nous avons plus précisément exploré comment des structures locales ou ponctuelles pouvaient modifier les propriétés du matériau les accueillant en brisant certaines symétries telles que la symétrie de translation ou la symétrie par renversement du temps.

Nous avons étudié dans un premier temps l'effet Kondo en présence d'une polarisation magnétique. L'effet Kondo est très sensible à l'environnement magnétique car le mécanisme d'écrantage du spin de l'impureté, à savoir la formation d'un singulet, implique des électrons de spin opposé à celui de l'impureté au niveau de Fermi. Nous avons montré par des calculs numériques utilisant le groupe de renormalisation qu'il est possible de remonter à la polarisation en spin du système à travers la densité d'états mesurée au dessus d'une impureté magnétique en résonance Kondo. Dans cette thèse, nous avons traité des données expérimentales de microscopie STM en régime de contact. Ce régime de contact rend *a priori* le système hors équilibre, l'effet Kondo étant mesuré à travers une pointe fortement couplée. Nous avons cependant supposé le système proche de l'équilibre afin de calculer la résonance Kondo. Il serait intéressant d'inclure la différence de potentiel de la pointe en fonction du voltage et d'étudier comment les effets hors équilibre influent sur la forme de la résonance Kondo mesuré par STM. A très forte tension, en régime de contact, nous pouvons nous attendre, comme pour une boîte quantique couplée à deux électrodes, à observer une scission de la résonance ainsi qu'à une forte réduction de l'amplitude de la résonance à cause des effets de décohérence [20].

Nous avons ensuite étudié l'effet des impuretés magnétiques dans des supraconducteurs en traitant l'impureté classiquement. Dans ce cas, l'impureté brise localement la symétrie par renversement du temps. Cela crée un état lié localisé autour de l'impureté. Ces états, dits de Yu-Shiba-Rusinov, ont une énergie à l'intérieur du gap supraconducteur. Nous avons, à travers des calculs analytiques et numériques, donné une explication sur l'extension, la structure, et le déphasage de ces états. Ce travail a permis de mettre en évidence l'influence de la dimensionnalité dans ces états liés, expliquant pourquoi dans un supraconducteur à deux dimensions, l'extension spatiale de l'état de YSR était d'une magnitude supérieure aux extensions spatiales observées auparavant dans les supraconducteurs à trois dimensions. Nous avons vu qu'il était possible de retrouver qualitat-

vement la structure spatiale de l'état de YSR, sa forme et sa dimension, à travers la résolution d'un modèle de liaison forte décrivant quantitativement la structure de bande du supraconducteur. L'utilisation des fonctions de Wannier et la considération d'un modèle de liaisons fortes correspondant aux multiples orbitales du système permettrait sans doute une meilleure résolution spatiale ne se limitant pas au réseau triangulaire, ce qui pourrait peut-être donner lieu à un accord quantitatif avec les données expérimentales. Les états de YSR sont présents dans de nombreuses propositions de systèmes accueillant des états de Majorana. En effet, la présence d'un réseau dense d'impuretés magnétiques peut créer une bande d'états liés de type YSR dans le gap supraconducteur. Cette bande peut, sous certaines conditions, émuler un supraconducteur topologique. En ce sens, l'état de YSR peut servir de brique élémentaire pour cette supraconductivité exotique induite par les impuretés. Une approximation couramment utilisée consiste à écrire un modèle de liaisons fortes à partir de ces états de YSR dans la limite où la largeur de la bande de Shiba est très petite devant le gap. La méthode numérique que j'ai développée afin de calculer les états propres de Shiba peut facilement se généraliser à une chaîne ou un réseau plus complexe. Nous pourrions grâce à cette méthode calculer la dépendance spatiale de ces états de Majorana en allant au delà de l'approximation de faible largeur de la bande de Shiba habituellement utilisée.

Enfin, nous avons étudié l'influence du champ magnétique sur des supraconducteurs avec un fort couplage spin-orbite. Nous avons étudié comment le champ magnétique est susceptible d'induire des transitions de phase topologiques dans ces systèmes. Les supraconducteurs de type triplet peuvent porter des états de bords de type fermions de Majorana, des invariants topologiques permettant de les caractériser. Nous avons ensuite étudié des supraconducteurs ayant un paramètre d'ordre mélangeant ondes s et ondes p en présence d'un champ Zeeman. Le champ Zeeman réduit la composante en onde s et permet alors une transition topologique vers une phase hélicale pour un supraconducteur étant à l'origine dans une phase triviale. Cette phase hélicale est cependant faiblement protégée dans la mesure où le champ Zeeman brise la symétrie par renversement du temps. Comme il fut montré par une approche microscopique en annexe, un des autres effets du champ Zeeman est de produire une renormalisation des paramètres du supraconducteur. Nous avons effectué ce calcul dans deux différentes limites, l'une où le champ Zeeman était dominant, l'autre où le couplage spin orbite était dominant. Il serait intéressant de généraliser ce calcul microscopique au cas général. Par ailleurs, il serait probablement utile de prendre en compte ces renormalisations des gaps supraconducteurs en ondes s et p pour établir plus précisément le diagramme de phase de ce type de modèles.

Nous avons enfin étudié les supraconducteurs présentant un paramètre d'ordre hybride mélangeant ondes s et p , en présence de clusters magnétiques. En faisant l'hypothèse que le principal effet du cluster était de créer un fort champ local d'échange, notre objectif était de trouver quels types d'états de bords pouvaient générer ce champ local. Nous avons constaté dans le cas d'une transition topologique hélicale, que les états de bord ainsi générés étaient différents des états de bord avec le vide. Nous avons enfin considéré

une expérience de microscopie STM observant des états de bord autour de clusters magnétiques. Ces états de bord dans la densité d'états à l'intérieur du gap forment dans l'espace réel deux cercles concentriques se confondant à l'énergie de Fermi. Les simulations numériques ont permis de montrer que cette dispersion caractéristique dans l'espace réel ne pouvait pas être reproduite par des états de bord chiraux. Les simulations reproduisant au mieux les données expérimentales suggèrent que cette dispersion spatiale intra-gap est due à une quasi-fermeture de gap produite par un champ Zeeman local dont la décroissance crée deux domaines topologiques distincts. Nous avons étudié, à la fin de cette thèse, des états liés créés par un vortex piégé autour d'un cluster magnétique. Les résultats préliminaires que nous avons obtenus suggèrent qu'un fermion de Majorana est piégé au coeur de ce vortex, son partenaire étant délocalisé autour du cluster. Ces résultats ont été obtenus par une approche phénoménologique ; nous avons supposé la forme et le type de vortex (vortex porté par la partie en ondes p ou s du paramètre d'ordre ou bien par les deux). Des calculs de minimisation d'énergie libre se basant sur la théorie de Ginzburg-Landau permettraient de définir quels types de vortex serait susceptible d'apparaître en fonction du champ Zeeman appliqué.

Annexe A

Calcul du courant à travers une impureté par le formalisme de Keldysh

Cette annexe détaille le calcul du courant mesuré par spectroscopie STM passant à travers une impureté en régime de contact. Dans le régime de contact, nous pouvons nous attendre à ce que plus d'un canal participe au courant. De ce fait, les calculs sont faits dans le cas de plusieurs canaux.

Notre modèle est celui décrit dans la section 1.2.4, nous nous contentons juste de rajouter un indice de canal α au hamiltonien :

$$\begin{aligned} H_{Tip} &= \sum_k (\xi_k - \mu_T) c_{kT}^\dagger c_{kT}, \\ H_{Sub} &= \sum_{k\alpha} (\xi_k - \mu_S) c_{kS\alpha}^\dagger c_{kS\alpha}, \\ H_{dot} &= c_d^\dagger c_d + H_{int}(n_{d\uparrow}, n_{d\downarrow}), \end{aligned} \tag{A.1}$$

$$H_{tunnel} = \sum_{kTk'S\alpha} (W_\alpha c_{kT}^\dagger c_{k'S\alpha} + \text{h.c.}) + \sum_{kT} (t c_{kT}^\dagger c_d + \text{h.c.}) + \sum_{kS} (V_\alpha c_{kS}^\dagger c_d + \text{h.c.}). \tag{A.2}$$

Rappelons quelques sommes utiles sur nos fonctions de Green non-perturbées de la pointe et de la surface,

$$\sum_k g_T^a(\omega) = -\sum_k g_T^r(\omega) = i\pi\nu \quad ; \quad \sum_k g_{S\alpha}^a(\omega) = -\sum_k g_{S\alpha}^r(\omega) = i\pi\nu_\alpha, \tag{A.3}$$

$$\sum_k g_T^<(\omega) = 2i\pi\nu f_T(\omega) \quad \sum_k g_{S\alpha}^<(\omega) = 2i\pi\nu_\alpha f_S(\omega), \tag{A.4}$$

où ν (ν_α) représente la densité d'états à l'énergie de Fermi pour la pointe (pour le canal α de la surface). Nous définissons $\Gamma_{T(S)}$ l'élargissement du niveau de l'impureté dû à la

pointe (surface),

$$\Gamma_T = 2\pi\nu t^2 = -2it^2 \sum_k g_T^a(\omega) \quad ; \quad \Gamma_S = \sum_\alpha 2\pi\nu_\alpha V_\alpha^2 = -2i \sum_{k\alpha} V_\alpha^2 g_{S\alpha}^a(\omega). \quad (\text{A.5})$$

Enfin, nous utiliserons par la suite l'abréviation suivante

$$G_{dT} = \sum_k G_{dkT}(\omega). \quad (\text{A.6})$$

A.1 Formule du courant

La formule du courant s'obtient par les équations du mouvement. Nous avons donc deux équations, l'une pour le courant dans la pointe et l'autre pour le courant dans la surface,

$$I_T = -e\langle \dot{N}_T \rangle \quad ; \quad I_S = \sum_\alpha -e\langle \dot{N}_{S\alpha} \rangle, \quad (\text{A.7})$$

$$I_T = \frac{4e}{h} \text{Re} \int d\omega (tG_{dT}^< + \sum_\alpha W_\alpha^* G_{S\alpha T}^<), \quad (\text{A.8})$$

$$I_S = \frac{4e}{h} \text{Re} \int d\omega (-\sum_\alpha V_\alpha G_{dS\alpha}^< + \sum_\alpha W_\alpha^* G_{S\alpha T}^<). \quad (\text{A.9})$$

Nous utilisons par la suite $I_S = I_T$.

$$\hat{I}_T = tG_{dT}^< + \sum_\alpha W_\alpha^* G_{S\alpha T}^<, \quad (\text{A.10})$$

$$\hat{I}_S = \sum_\alpha -V_\alpha G_{dS}^< + W_\alpha^* G_{S\alpha T}^<. \quad (\text{A.11})$$

A.2 Fonctions de Green

Nous développons les fonctions de Green en fréquence, utilisons les équations de Dyson pour écrire

$$G_{S\alpha T} = g_{S\alpha} V_\alpha G_{dT} + g_{S\alpha} W_\alpha G_{TT}, \quad (\text{A.12})$$

$$G_{TT} = g_T + g_T t G_{dT} + \sum_\alpha g_T W_\alpha^* g_S V_\alpha G_{dT} + \sum_\alpha g_T W_\alpha^* g_S W_\alpha G_{TT}, \quad (\text{A.13})$$

$$G_{dT} = G_d t g_T + \sum_\alpha G_d V_\alpha g_S W_\alpha g_T + \sum_\alpha G_{dT} W_\alpha^* g_S W_\alpha g_T, \quad (\text{A.14})$$

$$G_{S\alpha d} = g_{S\alpha} V_\alpha G_d + g_{S\alpha} W_\alpha G_{Td}. \quad (\text{A.15})$$

Grâce à la supposition que les termes de saut sont indépendants du vecteur d'onde, nous pouvons résoudre ces équations de manière auto-cohérente. Nous obtenons les relations

entre les fonctions de Green intervenant dans le courant et les fonctions de Green de l'impureté en appliquant les règles de Langreth [29]

$$tG_{dT}^< = \frac{1}{1+\xi} \left(\left[\frac{G_d^<}{2} + G_d^r f_T \right] i\Gamma_T - G_d^< \Omega \right) + \frac{1}{(1+\xi)^2} G_d^r (f_T - f_S) [2\Omega - i\xi\Gamma_T] \quad (\text{A.16})$$

où $\xi = g_T^r \sum_{\alpha} W_{\alpha} g_{S\alpha}^a W_{\alpha}^*$ et $\Omega = t g_T^r \sum_{\alpha} W_{\alpha} g_{S\alpha}^a V_{\alpha}$. Pour obtenir les mêmes équations auto-cohérentes concernant les fonctions de Green de la surface, nous devons sommer sur les canaux,

$$\sum_{\alpha} W_{\alpha}^* G_{S\alpha T}^< = \sum_{\alpha} (W_{\alpha}^* g_S^< V_{\alpha} G_{dT}^a + W_{\alpha}^* g_S^r V_{\alpha} G_{dT}^< + W_{\alpha}^* g_S^< W_{\alpha} G_{TT}^a + W_{\alpha}^* g_S^r W_{\alpha} G_{TT}^<). \quad (\text{A.17})$$

Nous notons (A) les deux premiers terme de l'équation,

$$(A) = \sum_{\alpha} W_{\alpha}^* g_S^< V_{\alpha} G_{dT}^a + W_{\alpha}^* g_S^r V_{\alpha} G_{dT}^< = \frac{1}{1+\xi} \left[2G_d^r (\Omega^* f_T - \Omega f_S) + G_d^< \Omega^* + [G_d^r f_S + \frac{G_d^<}{2}] i\widetilde{\xi\Gamma_S} \right] + (f_T - f_S) \frac{G_d^r}{(1+\xi)^2} (-i\widetilde{\xi\Gamma_S} - \xi\Omega^*), \quad (\text{A.18})$$

où $\widetilde{\xi\Gamma_S} = (\sum_{\alpha} W_{\alpha}^* g_S^r V_{\alpha}) (\sum_{\alpha'} V_{\alpha'} g_S^a W_{\alpha'})$. Développant $G_{TT}^<$ nous identifions (A)

$$G_{TT}^< = 2f_T G_{TT}^a + \frac{1}{1+\xi} [-(f_T - f_S) 2\xi G_{TT}^a + g_T^r t G_{dT}^< + \sum_{\alpha} g_T^r (W_{\alpha}^* g_S^< V_{\alpha} G_{dT}^a + W_{\alpha}^* g_S^r V_{\alpha} G_{dT}^<)], \quad (\text{A.19})$$

ceci nous permet de simplifier l'expression $\sum_{\alpha} W_{\alpha}^* G_{S\alpha T}^<$.

$$\sum_{\alpha} W_{\alpha}^* G_{S\alpha T}^< = \frac{1}{1+\xi} [(A) - 2(f_T - f_S) \sum_{\alpha} W_{\alpha}^* g_S^a W_{\alpha} G_{TT}^a - \xi t G_{dT}^<], \quad (\text{A.20})$$

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha} W_{\alpha}^* G_{S\alpha T}^< &= (f_T - f_S) \frac{2\xi}{(1+\xi)^2} - \frac{\xi}{1+\xi} t G_{dT}^< \\ &+ \frac{1}{(1+\xi)^2} \left[2G_d^r (\Omega^* f_T - \Omega f_S) + G_d^< \Omega^* + [G_d^r f_S + \frac{G_d^<}{2}] i\widetilde{\xi\Gamma_S} \right] \\ &+ \frac{(f_T - f_S)}{(1+\xi)^3} G_d^r [i\widetilde{\xi\Gamma_S} (\xi - 1) - i\xi\Gamma_T - 2\xi(\Omega + 2\Omega^*)]. \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

Nous trouvons aussi l'expression

$$\begin{aligned}
-\sum_{\alpha} V_{\alpha} G_{dS}^{<} &= \left[\frac{G_d^{<}}{2} + f_S G_d^r \right] (-i\Gamma_S + \frac{i\widetilde{\xi\Gamma_S}}{1+\xi}) + G_d^{<} \frac{\Omega^*}{1+\xi} \\
&+ \frac{(f_T - f_S)}{(1+\xi)^2} G_d^r [2\Omega^* - i\widetilde{\xi\Gamma_S}]
\end{aligned} \tag{A.22}$$

Ayant obtenu tous les termes en fonction des fonctions de Green G_d^r , $G_d^{<}$ nous pouvons calculer les courants

$$\begin{aligned}
\hat{I}_T &= \frac{1}{(1+\xi)^2} \left(\left[\frac{G_d^{<}}{2} + f_T G_d^r \right] (i\Gamma_T + 2\Omega^*) + \left[\frac{G_d^{<}}{2} + f_S G_d^r \right] (i\widetilde{\xi\Gamma_S} - 2\Omega) \right) \\
&+ G_d^r \frac{(f_T - f_S)}{(1+\xi)^3} [i\widetilde{\xi\Gamma_S}(\xi - 1) - 2i\xi\Gamma_T + 2\Omega(1+\xi) - 4\xi(\Omega + \Omega^*)] \\
&+ (f_T - f_S) \frac{2\xi}{(1+\xi)^2}
\end{aligned} \tag{A.23}$$

$$\begin{aligned}
\hat{I}_S &= \frac{1}{(1+\xi)^2} \left(\left[\frac{G_d^{<}}{2} + f_T G_d^r \right] (-\xi i\Gamma_T + 2\Omega^*) \right. \\
&+ \left. \left[\frac{G_d^{<}}{2} + f_S G_d^r \right] (-i\Gamma_S(1+\xi)^2 + i\widetilde{\xi\Gamma_S}(2+\xi) - 2\Omega) \right) \\
&+ G_d^r \frac{(f_T - f_S)}{(1+\xi)^3} [i\xi\Gamma_T(\xi - 1) - 2i\widetilde{\xi\Gamma_S} + 2\Omega^*(1+\xi) - 4\xi(\Omega + \Omega^*)] \\
&+ (f_T - f_S) \frac{2\xi}{(1+\xi)^2}
\end{aligned} \tag{A.24}$$

Nous remarquons que tous les termes ont pour facteurs $\left[\frac{G_d^{<}}{2} + f_{T(S)} G_d^r \right]$ ou $(f_T - f_S)$. Nous cherchons désormais à utiliser la relation $I_T = I_S$ afin de soustraire les termes $G_d^{<}$. Nous pouvons réécrire les courants :

$$\hat{I}_T = (i \frac{G_d^{<}}{2(1+\xi)^2} + F_T) A_T + (i \frac{G_d^{<}}{2(1+\xi)^2} + F_S) B_T + (F_S - F_T) C_T + D, \tag{A.25}$$

$$\hat{I}_S = (i \frac{G_d^{<}}{2(1+\xi)^2} + F_T) A_S + (i \frac{G_d^{<}}{2(1+\xi)^2} + F_S) B_S + (F_S - F_T) C_S + D. \tag{A.26}$$

Avec les relations suivantes :

$$F_{T/S} = i G_d^r \frac{f_{T/S}}{(1+\xi)^2}, \tag{A.27}$$

$$A_T = \Gamma_T - 2i\Omega^* \quad ; \quad B_T = \widetilde{\xi\Gamma_S} + 2i\Omega \quad ; \quad C_T = \frac{\xi\widetilde{\xi\Gamma_S} - \xi\Gamma_T}{1+\xi} - 2i\Omega, \tag{A.28}$$

$$\begin{aligned}
A_S &= -\xi\Gamma_T - 2i\Omega^* \quad ; \quad B_S = -\Gamma_S(1+\xi)^2 + \xi\widetilde{\Gamma_S}(2+\xi) + 2i\Omega, \\
C_S &= \frac{\xi^2\Gamma_T - \xi\widetilde{\Gamma_S}}{1+\xi} - 2i\Omega^*,
\end{aligned} \tag{A.29}$$

$$D = [-\xi\widetilde{\Gamma_S} - \xi\Gamma_T + 4i\xi(\Omega + \Omega^*)] \frac{F_T - F_S}{1+\xi} + \frac{2\xi}{(1+\xi)^2} (f_T - f_S). \tag{A.30}$$

Ainsi nous pouvons réécrire le courant sans fonction de Green $G_d^<$

$$\begin{aligned}
\hat{I} &= \frac{\hat{I}_T(A_S + B_S) - \hat{I}_S(A_T + B_T)}{A_S + B_S - A_T - B_T} \\
&= (F_T - F_S) \frac{A_TB_S - A_SB_T + C_T(A_S + B_S) - C_S(A_T + B_T)}{A_S + B_S - A_T - B_T} + D
\end{aligned} \tag{A.31}$$

$$\begin{aligned}
\hat{I} &= \\
(F_T - F_S) &\frac{\Gamma_T\widetilde{\xi\Gamma_S}(3-\xi) + (1+\xi)(-\Gamma_T\Gamma_S - \xi\Gamma_S\widetilde{\xi\Gamma_S} + (\xi\widetilde{\Gamma_S})^2) + 4(\Omega^* - \Omega)^2}{A_S + B_S - A_T - B_T} \\
&- 2i(\Omega^* + \Omega)(F_T - F_S) + D
\end{aligned} \tag{A.32}$$

Pour simplifier nous remarquons que :

$$4\Omega\Omega^* = \Gamma_T\widetilde{\xi\Gamma_S} \text{ et } 4(\Omega^* - \Omega)^2 = 4(\Omega^* + \Omega) - 4\Gamma_T\widetilde{\xi\Gamma_S}$$

$$\begin{aligned}
\hat{I} &= (F_T - F_S) \frac{\Gamma_T\widetilde{\xi\Gamma_S} + \Gamma_T\Gamma_S + \xi\Gamma_S\widetilde{\xi\Gamma_S} - (\xi\widetilde{\Gamma_S})^2 - 4(\Omega^* + \Omega)^2/(1+\xi)}{\Gamma_T + \Gamma_S(1+\xi) - \xi\widetilde{\Gamma_S}} \\
&- 2i(\Omega^* + \Omega)(F_T - F_S) + D.
\end{aligned} \tag{A.33}$$

Nous pouvons maintenant intégrer et prendre la partie réelle de la formule.

$$\begin{aligned}
I &= 2 \operatorname{Re} \hat{I} = \frac{2e}{h} \int d\omega [f_T - f_S] \\
&\times \left\{ \frac{4\xi}{(1+\xi)^2} + 4 \operatorname{Re} G_d^r(\omega) \frac{(1-\xi)}{(1+\xi)^3} \sqrt{\Gamma_T\widetilde{\xi\Gamma_S}} \cos \varphi - 2 \operatorname{Im} G_d^r(\omega) \frac{1}{(1+\xi)^2} \right. \\
&\times \left[\frac{\Gamma_T\widetilde{\xi\Gamma_S} + \Gamma_T\Gamma_S + \xi\Gamma_S\widetilde{\xi\Gamma_S} - \xi\widetilde{\Gamma_S}^2 - 4\frac{\Gamma_T\widetilde{\xi\Gamma_S}}{1+\xi} \cos^2 \varphi}{\Gamma_T + \Gamma_S(1+\xi) - \xi\widetilde{\Gamma_S}} - \frac{\xi\widetilde{\Gamma_S} + \xi\Gamma_T}{(1+\xi)} \right] \Big\}
\end{aligned} \tag{A.34}$$

Nous pouvons retrouver l'équation mono-canal (équation 1.50) en remarquant que dans ce cas $\xi\widetilde{\Gamma_S} = \xi\Gamma_S$. Le cas mono-canal fut calculé dans l'article de Akiko Ueda et Mikio Eto [76]. Nous remarquons que dans le cas multi-canaux, les interférences menant à l'effet Fano sont multiples et il n'est pas possible d'écrire le résultat sous la forme :

$$I = \frac{2e}{h} \int d\omega [f_T - f_S] (a + b(2q \operatorname{Re} G_d^r + (1 - q^2) \operatorname{Im} G_d^r)). \tag{A.35}$$

Annexe B

Calcul des états de Shiba-Yu-Rusinov, méthode de Shiba et méthode de Rusinov

Dans cette annexe nous présenterons la procédure de calcul des états de YSR effectuée par deux méthodes historiques développées par H. Shiba et A. I. Rusinov. La méthode de Shiba se fait à l'aide de la méthode T-matrix *via* le formalisme des fonctions de Green, sa généralisation permet le calcul des propriétés du matériaux en présence d'impuretés dissolues. La méthode de Rusinov correspond à celle développé dans la section 2.2 sa généralisation prend en compte l'extension spatiale de l'impureté produisant plusieurs états liés.

Nous partons du hamiltonien générale écrit dans la base de Nambu

$$\Psi = \begin{pmatrix} u_{\uparrow}, & u_{\downarrow}, & v_{\downarrow}, & -v_{\uparrow} \end{pmatrix}^T :$$

$$H = (\xi_k \tau_z + \Delta \tau_x) + (K(|\mathbf{r}|) \tau_z - \sigma_z J(|\mathbf{r}|)), \quad (\text{B.1})$$

où ξ_k la bande d'énergie du matériau *bulk* agissant dans l'espace des impulsions et où $K(|\mathbf{r}|)$ et $J(|\mathbf{r}|)$ sont les potentiels scalaire et magnétique produit par l'impureté par champ d'échange.

B.1 Méthode de Shiba

Nous définissons la fonction de Green non perturbé du système comme

$$(G_{\mathbf{k}}^0)^{-1}(\omega) = \omega - H_0(\mathbf{k}), \quad (\text{B.2})$$

où $H_0(\mathbf{k}) = \xi_k \tau_z + \Delta \tau_x$. Cela donne comme fonction de Green :

$$G_{\mathbf{k}}^0(\omega) = \frac{\omega + \xi_k \tau_z + \Delta \tau_x}{\omega^2 - \xi_k^2 - \Delta^2}. \quad (\text{B.3})$$

Nous supposons le potentiel de l'impureté comme étant local :

$$H_{\text{Imp}} = A^\dagger(\mathbf{r} = \mathbf{0})(K\tau_z - \sigma_z J)A(\mathbf{r} = \mathbf{0}), \quad (\text{B.4})$$

où $A(\mathbf{0}) = (c_\uparrow(\mathbf{0}), c_\downarrow(\mathbf{0}), c_\downarrow^\dagger(\mathbf{0}), -c_\uparrow^\dagger(\mathbf{0}))$ l'opérateur matriciel de création dans l'espace de Nambu défini plus haut. Après transformée de Fourier nous obtenons :

$$H_{\text{Imp}} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} A^\dagger(\mathbf{k})(K\tau_z - \sigma_z J)A(\mathbf{k}'). \quad (\text{B.5})$$

Traitant ce potentiel en perturbation, nous obtenons pour la fonction de Green générale du système l'équation de Dyson suivante :

$$G_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}(\omega) = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')G_{\mathbf{k}}^0(\omega) + G_{\mathbf{k}}^0(\omega) \cdot (K\tau_z - \sigma_z J) \sum_{\mathbf{k}_1} G_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}'} \quad (\text{B.6})$$

Nous pouvons remarquer que pour ce système

$$G_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}(\omega) = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')G_{\mathbf{k}}^0(\omega) + G_{\mathbf{k}}^0(\omega)T(\omega), G_{\mathbf{k}'}^0(\omega) \quad (\text{B.7})$$

où $T(\omega)$ est la matrice T définie comme

$$\begin{aligned} T(\omega) &= (K\tau_z - \sigma_z J) \sum_n [\sum_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}}^0(\omega)(K\tau_z - \sigma_z J)]^n \\ &= \frac{K\tau_z - \sigma_z J}{\mathbb{1} - \sum_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}}^0(\omega)(K\tau_z - \sigma_z J)}. \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

Nous cherchons les pôles de la fonction de Green pour $|\omega| < \Delta$ ceux-ci correspondant aux états excités à l'intérieur du gap. Les pôles de la fonction de Green totale correspondant aux pôles de $T(\omega)$, nous cherchons donc ω pour l'équation suivante :

$$\begin{aligned} \det[\mathbb{1} - \sum_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}}^0(\omega)(K\tau_z - \sigma_z J)] &= 0 \\ \det[\mathbb{1} + \pi\nu_0 \frac{\omega + \Delta\tau_x}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}}(K\tau_z - \sigma_z J)] &= 0. \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

Cette équation a pour solution

$$\omega_S = \pm \Delta \frac{1 - \alpha^2 + \beta^2}{\sqrt{4\alpha^2 + (1 - \alpha^2 + \beta^2)^2}}. \quad (\text{B.10})$$

Cette méthode donne le même résultat que nous avons vu dans le texte principal. Cependant, elle peut être facilement généralisée pour prendre en compte un système dense d'impuretés. Elle permet alors de calculer la réduction du gap du système.

B.2 Méthode de Rusinov

Dans ses développements, Rusinov a pris en compte l'extension des états de YSR au premier ordre.

Nous supposons que l'impureté produit un champ isotrope scalaire et magnétique. Nous pouvons formellement écrire dans la sous base de Nambu $\phi = \begin{pmatrix} u_\uparrow & v_\downarrow \end{pmatrix}^T$:

$$(E - \xi_k \tau_z - \Delta \tau_x) \phi(\mathbf{r}) = [K(|\mathbf{r}|) \tau_z - J(|\mathbf{r}|)] \phi(\mathbf{r}). \quad (\text{B.11})$$

Après transformation de Fourier nous obtenons :

$$(E - \xi_k \tau_z - \Delta \tau_x) \phi(\mathbf{k}) = \int d\mathbf{k}' [K(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) \tau_z - J(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|)] \phi(\mathbf{k}'). \quad (\text{B.12})$$

Supposant le potentiel suffisamment local (extension plus faible que λ_F) nous pouvons approximer le potentiel de l'impureté $V(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|)$ par sa dépendance angulaire $V(\theta_k - \theta'_k)$ en deux dimensions ou $V(\theta_k - \theta'_k, \varphi_k - \varphi'_k)$ en dimension 3. Nous pouvons alors développer le potentiel en série :

$$V(\theta) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} V_l e^{il\theta} \quad ; \quad V(\theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{+\infty} \sum_{m=-l}^{+l} V_{lm} Y_{l,m}(\theta, \varphi), \quad (\text{B.13})$$

où $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ est la fonction harmonique sphérique définie :

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = (-1)^{\frac{1}{2}(m+|m|)} \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}} P_{l,|m|}(\cos \theta) e^{im\varphi}. \quad (\text{B.14})$$

Après transformation nous obtenons pour l'équation B.12 en 2D :

$$\phi(\mathbf{k}) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} e^{i\theta_k l} \frac{E + \xi_k \tau_z + \Delta \tau_x}{E^2 - \xi_k^2 - \Delta^2} [K_l \tau_z - J_l] \phi_l, \quad (\text{B.15})$$

où nous définissons $\phi_l = \int d\mathbf{k} / (2\pi)^2 e^{-i\theta_k l} \phi(\mathbf{k})$. Enfin supposant ξ_k isotrope, nous pouvons utiliser l'orthogonalité des fonctions harmoniques et intégrer l'équation par $\int d\mathbf{k} / (2\pi)^2 e^{-i\theta_k l}$:

$$\begin{aligned} \phi_l &= \int \frac{k dk}{(2\pi)^2} \frac{E_l + \xi_k \tau_z + \Delta \tau_x}{E_l^2 - \xi_k^2 - \Delta^2} [K_l \tau_z - J_l] \phi_l \\ &= -\pi \nu_0 \frac{E_l + \Delta \tau_x}{\sqrt{\Delta^2 - E_l^2}} [K_l \tau_z - J_l] \phi_l. \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

Nous pouvons obtenir la même équation en 3D en définissant $\phi_{lm} = \int d\mathbf{k} / (2\pi)^3 Y_{lm}(\theta_k, \varphi_k) \phi(\mathbf{k})$:

$$\phi_{lm} = -\pi \nu_0 \frac{E_{lm} + \Delta \tau_x}{\sqrt{\Delta^2 - E_{lm}^2}} [K_{lm} \tau_z - J_{lm}] \phi_{lm} \quad (\text{B.17})$$

Les équations (B.16) et (B.16) sont les mêmes que dans la section 2.2. Définissant,

$$\tan(\delta_j^\pm) = \beta_j \pm \alpha_j, \quad (\text{B.18})$$

où $\beta_j(\alpha_j)$ désigne $\pi\nu K_l(\pi\nu V_l)$ ou $\pi\nu K_{lm}(\pi\nu V_{lm})$ selon que l'on considère le système à 2D ou 3D. Ainsi nous obtenons les expressions suivantes :

$$\begin{aligned} E_j &= \Delta \cos(\delta_j^+ - \delta_j^-), \\ \phi_j &= \begin{pmatrix} \cos \delta_j^- \\ \cos \delta_j^+ \end{pmatrix} \sqrt{2\pi\nu\Delta\alpha_j \cos \delta_j^- \cos \delta_j^+}. \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

Ces différentes solutions sont toutes orthogonales. Ainsi pour chacune de ces solutions correspond un vecteur d'onde total :

$$\begin{aligned} \phi_l(\mathbf{k}) &= e^{i\theta_{kl}} \frac{E_l + \xi_k \tau_z + \Delta \tau_x}{E_l^2 - \xi_k - \Delta^2} [K_l \tau_z - J_l] \phi_l \\ \phi_{lm}(\mathbf{k}) &= Y_{ml}(\theta_k, \varphi_k) \frac{E_{lm} + \xi_k \tau_z + \Delta \tau_x}{E_{lm}^2 - \xi_k - \Delta^2} [K_l \tau_z - J_l] \phi_{lm} \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

Afin de trouver la structure spatiale des états de YSR nous devons effectuer la transformée de Fourier de ces vecteurs d'onde. Dans la suite nous nous limiterons au cas où l'impureté est scalaire, cas traité dans la section 2.2. Je présenterai donc dans la suite le calcul des intégrales utiles à cette transformation.

B.2.1 Intégrales

$$f_0 = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{E_S^2 - \xi_k^2 - \Delta^2}, \quad (\text{B.21})$$

et

$$f_1 = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \frac{\xi_k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{E_S^2 - \xi_k^2 - \Delta^2}, \quad (\text{B.22})$$

Intégrale en 3 dimensions : Nous effectuons un changement de variable vers ξ_k et $x = \cos \theta_k$ où l'angle polaire θ est l'angle relatif entre $\mathbf{k}$ et $\mathbf{r}$.

$$f_0(r) = \frac{\nu_0}{2} \int d\xi_k \int_{-1}^1 dx \frac{e^{ikrx}}{E^2 - \xi_k^2 - \Delta^2}, \quad (\text{B.23})$$

Nous effectuons d'abord l'intégrale sur la variable ξ_k en linéarisant l'impulsion par la formule $k(\xi) = k_F + \xi/\hbar v_F$,

$$f_0(r) = -\frac{\nu_0\pi}{2\sqrt{\Delta^2 - E^2}} \int_{-1}^1 dx e^{ik_F r x} e^{-k_S r |x|}, \quad (\text{B.24})$$

où $k_S = \sqrt{\Delta^2 - E^2}/\hbar v_F$. Cela nous donne :

$$f_0(r) = -\frac{\nu_0 \pi}{\sqrt{\Delta^2 - E^2}} \frac{e^{-k_S r} (k_F r \sin k_F r - k_S r \cos k_S r) - k_S r}{(k_F r)^2 + (k_S r)^2}. \quad (\text{B.25})$$

Finalement en approximant $k_F \gg k_S$ nous trouvons :

$$f_0(r) = -\frac{\nu_0 \pi}{\sqrt{\Delta^2 - E^2}} \frac{e^{-k_S r} \sin k_F r}{k_F r}. \quad (\text{B.26})$$

La deuxième intégrale paramétré comme la première s'écrit :

$$f_1(r) = \frac{\nu_0}{2} \int d\xi_k \int_{-1}^1 dx \frac{\xi_k e^{ikr x}}{E^2 - \xi_k^2 - \Delta^2} \frac{\omega_D^2}{\omega_D^2 + \xi_k^2}. \quad (\text{B.27})$$

où nous avons rajouté la fréquence de Debye ω_D comme un *cut-off* UV pour s'assurer de la convergence de cette intégrale [56]. De la même manière nous intégrons d'abord sur ξ_k ,

$$f_1(r) = i \frac{\pi \nu_0}{2} \frac{\omega_D^2}{\Delta^2 - E^2 - \omega_D^2} \int_{-1}^1 dx \frac{x}{|x|} e^{ik_F r x} (e^{-k_S r |x|} - e^{r|x|\omega_D/\hbar v_F}), \quad (\text{B.28})$$

puis sur θ :

$$f_1(r) = \pi \nu_0 \Re \left[\frac{e^{ik_F r} e^{-k_S r} (-ik_F r + \frac{\omega_D r}{\hbar v_F}) + i e^{ik_F r} e^{-\omega_D r/\hbar v_F} (k_F r + ik_S r) + (k_S - \frac{\omega_D r}{\hbar v_F})}{(k_F r + i \frac{\omega_D r}{\hbar v_F}) (-ik_F r + k_S r)} \right]. \quad (\text{B.29})$$

Enfin dans la limite asymptotique et en supposant $k_F r \gg \frac{\omega_D r}{\hbar v_F} \gg 1$ mais aussi $k_F \gg k_S$, nous trouvons :

$$f_1(r) \approx \pi \nu_0 e^{-k_S r} \frac{\cos k_F r}{k_F r}. \quad (\text{B.30})$$

Intégrale en 2 dimensions Nous procédons de la même manière pour le cas 2D

$$f_0(r) = \frac{\nu_0}{2\pi} \int d\xi_k \int_0^{2\pi} d\theta \frac{e^{ikr \cos \theta}}{E^2 - \xi_k^2 - \Delta^2}, \quad (\text{B.31})$$

$$f_1(r) = \frac{\nu_0}{2\pi} \int d\xi_k \int_0^{2\pi} d\theta \frac{\xi_k e^{ikr \cos \theta}}{E^2 - \xi_k^2 - \Delta^2}, \quad (\text{B.32})$$

Nous intégrons d'abord sur ξ_k puis sur θ :

$$f_0(r) = -\frac{\pi \nu_0}{\sqrt{\Delta^2 - E^2}} \Re [J_0(k_F r + ik_S r) + i H_0(k_F r + ik_S r)], \quad (\text{B.33})$$

$$f_1(r) = \pi \nu_0 \Im [J_0(k_F r + ik_S r) + i H_0(k_F r + ik_S r)], \quad (\text{B.34})$$

où $J_0(r)$ et $H_0(r)$ sont les fonctions de Bessel et de Struve de l'ordre 0. Ces résultats sont en accord avec [12]. Ici encore nous calculons la limite asymptotique, supposant $k_F \gg k_S$, nous obtenons :

$$f_0(r) \approx -\frac{\pi\nu_0}{\sqrt{\Delta^2 - E^2}} \sqrt{\frac{2}{\pi k_F r}} \cos(k_F r - \frac{\pi}{4}) e^{-k_S r}, \quad (\text{B.35})$$

$$f_1(r) \approx \pi\nu_0 \sqrt{\frac{2}{\pi k_F r}} \sin(k_F r - \frac{\pi}{4}) e^{-k_S r} + \frac{2\nu_0}{k_F r}. \quad (\text{B.36})$$

Dans le régime où nous pouvons négliger le dernier terme de $f_1(r)$,

$$f_1(r) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi k_F r}} \sin(k_F r - \frac{\pi}{4}) e^{-k_S r}. \quad (\text{B.37})$$

Annexe C

Traitement numérique du modèle de liaisons fortes des états de YSR via les fonctions de Wannier

Nous développerons ici une méthode numérique traitant les états de YSR dans les modèles de liaisons fortes à plusieurs atomes par maille. Nous noterons le hamiltonien du système métallique :

$$H = \sum_{\mathbf{R}, \alpha} \xi_{\alpha} |\alpha \mathbf{R}\rangle \langle \alpha \mathbf{R}| + \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}', \alpha, \beta} t_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'}^{\alpha, \beta} |\alpha \mathbf{R}\rangle \langle \beta \mathbf{R}'|, \quad (\text{C.1})$$

où $|\alpha \mathbf{R}\rangle$ correspond à la fonction de Wannier α et où $\mathbf{R}$ correspond à la position sur le réseau de Bravais.

Le système étant invariant par translation nous utilisons les conditions périodiques aux bords de Born-von Karman et appliquons un changement de base : $|\alpha \mathbf{R}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}} |\alpha \mathbf{k}\rangle$, où $\mathbf{k}$ est la position sur le réseau réciproque et où N est le nombre de sites total du système. Dans cette base, le hamiltonien s'écrit :

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha, \beta} \gamma_{\alpha, \beta}(\mathbf{k}) |\alpha \mathbf{k}\rangle \langle \beta \mathbf{k}|. \quad (\text{C.2})$$

La structure de bandes du système se résout par la diagonalisation de la matrice $\gamma_{\alpha, \beta}(\mathbf{k})$, dans la base diagonale le hamiltonien s'écrit :

$$H = \sum_{\mathbf{k}n} \xi_{\mathbf{k}n} |n \mathbf{k}\rangle \langle n \mathbf{k}|, \quad (\text{C.3})$$

où ξ_{kn} sont les énergies propres et où $|n\mathbf{k}\rangle = \sum_n a_{n\alpha}(\mathbf{k})|\alpha\mathbf{k}\rangle$ sont les vecteurs propres. Aussi nous pouvons effectuer la transformée de Fourier et trouver les fonctions de Wannier associées aux vecteurs $|n\mathbf{k}\rangle$:

$$|n\mathbf{R}\rangle = \sum_{\alpha\mathbf{R}'} a_{n\alpha}(\mathbf{R}')|\alpha\mathbf{R} - \mathbf{R}'\rangle. \quad (\text{C.4})$$

Précédemment, nous utilisons cette base diagonale en modèle de liaisons fortes et supposons que le couplage de l'impureté à cette bases était ponctuel et diagonal mais comme le souligne l'équation (C.4) ces fonctions de Wannier sont sûrement étendues. Nous pouvons aller au-delà de cette approximation traitant le hamiltonien dans la base des fonctions de Wannier localisées.

C.1 Méthode

Afin de prendre en compte la supraconductivité, nous traitons le système à l'aide des équations de Bogoliubov de Gennes et utiliserons la base de Nambu, où le spineur est défini comme :

$$|\mathbf{k}\rangle = \begin{pmatrix} |1, \mathbf{k}e\rangle \\ \vdots \\ |\alpha, \mathbf{k}e\rangle \\ \vdots \\ |1, -\mathbf{k}h\rangle \\ \vdots \\ |\alpha, -\mathbf{k}h\rangle \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad (\text{C.5})$$

où e et h dénote la partie électronique de spin up et la partie trou de spin down respectivement, α dénote la fonction de Wannier. Nous pouvons écrire le hamiltonien prenant compte de la supraconductivité :

$$H_{\text{BdG}} = \sum_{\mathbf{k}} \{\gamma_{\mathbf{k}}\tau_z + \Delta\mathbb{1}\tau_x\} |\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}|, \quad (\text{C.6})$$

où $\gamma_{\mathbf{k}}$ est la matrice avec les valeurs $\gamma_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ définies précédemment et où Δ est le paramètre d'ordre supraconducteur, τ_i dénote les matrices de Pauli agissant dans l'espace particule-trou. Nous supposons que l'impureté agit seulement sur sa position, son couplage s'écrit alors :

$$H_{\text{Imp}} = \sum_{\mathbf{R}} (K\tau_z + J\tau_0)\delta(\mathbf{R} = \mathbf{R}_{\text{imp}})|\mathbf{R}\rangle\langle\mathbf{R}|, \quad (\text{C.7})$$

où $|\alpha\mathbf{R}_{\text{imp}}\sigma\rangle$ est la transformée de Fourier du spineur $|\mathbf{k}\rangle$, $|\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}}|\mathbf{R}\rangle$. J représente le potentiel Zeeman alors que K représente le potentiel scalaire, ce sont des matrices dans l'espace de Wannier elle ne sont pas forcément diagonales.

Nous souhaitons résoudre les états propres à l'intérieur du gap. Nous notons $\psi(\mathbf{R})$ le spineur vecteur propre écrit dans la base $|\mathbf{R}\rangle$. L'équation de Bogoliubov de Gennes s'écrit :

$$[E - H_{\text{BdG}}]\psi(\mathbf{R}) = V\delta(\mathbf{R} = \mathbf{R}_{\text{imp}})\psi(\mathbf{R}_{\text{imp}}). \quad (\text{C.8})$$

Par commodité nous choisissons de placer le site de l'impureté à l'origine $\mathbf{R}_{\text{imp}} = 0$. Après transformation de Fourier nous obtenons :

$$\psi(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{N}}[E - H_{\text{BdG}}]_{\mathbf{k}}^{-1}V\psi(0). \quad (\text{C.9})$$

En revenant dans l'espace réel nous obtenons l'équation maîtresse :

$$\psi(\mathbf{R}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} [E - H_{\text{BdG}}]_{\mathbf{k}}^{-1} V\psi(0) \quad (\text{C.10})$$

Cette équation permet de résoudre les énergies des états de YSR en posant $\mathbf{R} = \mathbf{R}_{\text{imp}}$ puis de calculer la fonction d'onde totale. Nous pouvons enfin obtenir la densité d'états dans l'espace réel :

$$\rho_{\sigma}(r) = \sum_{\mathbf{R}} \psi_{\alpha\sigma}(\mathbf{R}) \psi_{\alpha\sigma}^*(\mathbf{R}) w_{\alpha\sigma\mathbf{R}}(r) w_{\alpha\sigma\mathbf{R}}^*(r), \quad (\text{C.11})$$

où $w_{\alpha\sigma\mathbf{R}}(r)$ est la fonction de Wannier dans l'espace réel attachée à l'état $|\alpha\mathbf{R}\sigma\rangle$

Annexe D

Supraconductivité en présence de spin-orbite et champ Zeeman

Cette Annexe est hautement inspiré du papier de Gor'kov et Rashba (PRL 87.037004) [25].

L'objectif de cette Annexe est d'étudier les propriétés des phases supraconductrices d'un matériau 2D sous spin-orbite de type Rashba et potentiel Zeeman. Nous savons que l'interaction spin-orbite brise la symétrie par renversement du temps tout comme l'effet Zeeman ce qui est susceptible d'affecter la supraconductivité. Aussi nous savons qu'un supraconducteur de type s-wave en présence de ces deux autres ingrédients peut directement émuler un supraconducteur chiral de type p-wave, nous pouvons donc nous demandé si mêmes ingrédients ne peuvent pas agir de manière intrinsèque sur l'interaction entre électrons pour donner directement un couplage de type p-wave. Notre approche visera à résoudre le hamiltonien en interaction par champ moyen.

Nous écrivons le hamiltonien sans interaction

$$H_0 = \xi_p - V_z \sigma_z + \alpha(\sigma_x p_y - \sigma_y p_x), \quad (\text{D.1})$$

où $\xi_p = \mathbf{p}^2/2m - \mu$ avec μ le potentiel chimique, V_z le potentiel Zeeman et α le couplage spin-orbite. Ce hamiltonien se diagonalise facilement, nous noterons $\eta_\lambda(\mathbf{p})$ les vecteurs propres et $\xi_{p\lambda}$ ses valeurs propres.

$$\begin{aligned} \left(\eta_+(\mathbf{p}), \quad \eta_-(\mathbf{p}) \right) &= \left(c_\uparrow(\mathbf{p}), \quad c_\downarrow(\mathbf{p}) \right) P, \\ P &= \begin{pmatrix} \cos(\gamma/2) & \sin(\gamma/2) \\ ie^{i\phi_p} \sin(\gamma/2) & -ie^{i\phi_p} \cos(\gamma/2) \end{pmatrix} \quad ; \quad \tan(\gamma) = \frac{\alpha|\mathbf{p}|}{V_z} \end{aligned} \quad (\text{D.2})$$

$$\xi_{p\lambda} = \xi_p - \lambda \sqrt{V_z^2 + \alpha^2 \mathbf{p}^2} \quad (\text{D.3})$$

Nous prenons le terme d'attraction électronique sans retournement de spin :

$$H_{int} = \frac{1}{2} \sum_{\lambda, \mu} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} U(|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|) c_{\lambda, \mathbf{k}}^\dagger c_{\mu, -\mathbf{p}}^\dagger c_{\mu, -\mathbf{p}'} c_{\lambda, \mathbf{p}'}. \quad (\text{D.4})$$

Dans la base diagonale η , le hamiltonien s'écrit

$$H_{int} = \frac{1}{2} \sum_{\lambda, \mu, \nu, \rho} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} U_{\lambda\mu\nu\rho}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \eta_{\lambda, \mathbf{p}}^\dagger \eta_{\mu, -\mathbf{p}}^\dagger \eta_{\nu, -\mathbf{p}'} \eta_{\rho, \mathbf{p}'}, \quad (\text{D.5})$$

avec

$$U_{\lambda\mu\nu\rho}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = U(|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|) [\eta_{\lambda, \mathbf{p}}, \eta_{\rho, \mathbf{p}'}] [\eta_{\mu, -\mathbf{p}}, \eta_{\nu, -\mathbf{p}'}], \quad (\text{D.6})$$

où $[\eta_{\mu, -\mathbf{k}}, \eta_{\nu, -\mathbf{k}'}]$ correspond au produit scalaire. Notons que le potentiel d'interaction $U_{\lambda\mu\nu\rho}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ possède les symétries suivantes :

$$U_{\lambda\mu\nu\rho}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -U_{\mu\lambda\nu\rho}(-\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -U_{\lambda\mu\rho\nu}(\mathbf{k}, -\mathbf{k}'). \quad (\text{D.7})$$

Les produits scalaires sont définis comme :

$$\begin{aligned} [\eta_{+, \mathbf{p}}, \eta_{+, \mathbf{p}'}] &= \cos(\gamma/2) \cos(\gamma'/2) + e^{-i(\phi_p - \phi_{p'})} \sin(\gamma/2) \sin(\gamma'/2), \\ [\eta_{-, \mathbf{p}}, \eta_{-, \mathbf{p}'}] &= \sin(\gamma/2) \sin(\gamma'/2) + e^{-i(\phi_p - \phi_{p'})} \cos(\gamma/2) \cos(\gamma'/2), \\ [\eta_{+, \mathbf{p}}, \eta_{-, \mathbf{p}'}] &= \cos(\gamma/2) \sin(\gamma'/2) - e^{-i(\phi_p - \phi_{p'})} \sin(\gamma/2) \cos(\gamma'/2), \\ [\eta_{-, \mathbf{p}}, \eta_{+, \mathbf{p}'}] &= \sin(\gamma/2) \cos(\gamma'/2) - e^{-i(\phi_p - \phi_{p'})} \cos(\gamma/2) \sin(\gamma'/2). \end{aligned} \quad (\text{D.8})$$

En symétrisant les solutions, nous trouvons les relations suivantes

$$\begin{aligned} U_{\lambda\lambda\mu\mu}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') &\simeq \frac{1}{2} \lambda \mu \sin(\gamma) \sin(\gamma') e^{-i(\phi_p - \phi_{p'})} U_0, \\ U_{\lambda\lambda\lambda\bar{\lambda}}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') &\simeq -\frac{1}{2} \lambda \sin(\gamma) \cos(\gamma') e^{-i(\phi_p - \phi_{p'})} U_0, \\ U_{\lambda\bar{\lambda}\bar{\lambda}\lambda}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') &\simeq \frac{1}{2} \cos(\gamma) \cos(\gamma') e^{-i(\phi_p - \phi_{p'})} U_0. \end{aligned} \quad (\text{D.9})$$

Par la suite nous allons étudier les deux cas $\frac{\alpha|\mathbf{p}_F|}{V_z} \gg 1$ et $\frac{\alpha|\mathbf{p}_F|}{V_z} \ll 1$ correspondant au premier et au dernier terme dominant.

D.1 1^{er} cas, spin-orbite dominant

Dans le cas $\frac{\alpha|\mathbf{p}_F|}{V_z} \gg 1$, $\cos \gamma \sim 0$, le premier terme de l'équation D.9 domine. En négligeant les autres nous pouvons établir l'équation de mouvement suivante

$$\begin{aligned} [\partial_\tau + \xi_{p\lambda}] g_\lambda(\mathbf{p}, \tau - \tau') - \lambda \sum_{\mu \mathbf{p}'} \mu U_{\lambda\lambda\mu\mu}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') f_\mu(-\mathbf{p}') f_{\lambda\lambda}^\dagger(-\mathbf{p}, \tau - \tau') &= -\delta(\tau - \tau') \\ \lambda \sum_{\mu \mathbf{p}'} \mu U_{\mu\mu\lambda\lambda}(\mathbf{p}', \mathbf{p}) f_\mu^\dagger(\mathbf{p}') g_\lambda(\mathbf{p}, \tau - \tau') + [\partial_\tau - \xi_{p\lambda}] f_{\lambda\lambda}^\dagger(-\mathbf{p}, \tau - \tau') &= 0, \end{aligned} \quad (\text{D.10})$$

où nous définissons

$$\begin{aligned} g_\lambda(k, \tau) &= -\langle T_\tau \eta_{k,\lambda}(\tau) \eta_{k,\lambda}^\dagger(0) \rangle \\ f_{\lambda\lambda}(k, \tau) &= \lambda \langle T_\tau \eta_{-k,\bar{\lambda}}(\tau) \eta_{k,\lambda}(0) \rangle. \end{aligned} \quad (\text{D.11})$$

En appliquant la transformée de Fourier aux fréquences de Matsubara $i\omega_n$ nous obtenons l'équation de Gorkov

$$\begin{aligned} [i\omega_n - \xi_{p\lambda}]g_\lambda(\mathbf{p}, \omega_n) + \Delta_{\mathbf{p}} f_{\lambda\lambda}^\dagger(-\mathbf{p}, \omega_n) &= 1, \\ \Delta_{\mathbf{p}}^\dagger g_\lambda(\mathbf{p}, \omega_n) + [i\omega_n + \xi_{p\lambda}]f_{\lambda\lambda}^\dagger(-\mathbf{p}, \omega_n) &= 0, \end{aligned} \quad (\text{D.12})$$

où nous définissons le gap supraconducteur :

$$\lambda \Delta_{\mathbf{p}} = \sum_{\mathbf{p}'\mu} U_{\lambda\lambda\mu\mu}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') f_{\mu\mu}(\mathbf{p}'). \quad (\text{D.13})$$

Dans notre cas, ce gap ne dépend pas de λ ,

$$\Delta_{\mathbf{p}} = e^{-i\phi_p} \sin(\gamma_p) \Delta = e^{-i\phi_p} \sin(\gamma_p) \frac{1}{2} U_0 \sum_{\mu, \mathbf{p}'} e^{i\phi_p'} \sin(\gamma_p') f_{\mu\mu}(\mathbf{p}'). \quad (\text{D.14})$$

Les fonctions de Green s'écrivent alors,

$$\begin{aligned} g_\lambda(\mathbf{p}, \omega_n) &= -\frac{i\omega_n + \xi_\lambda(\mathbf{p})}{\omega_n^2 + \xi_{p\lambda}^2 + |\Delta_{\mathbf{p}}|^2}, \\ f_{\lambda\lambda}^\dagger(\mathbf{p}, \omega_n) &= \frac{\Delta_{\mathbf{p}}^\dagger}{\omega_n^2 + \xi_{p\lambda}^2 + |\Delta_{\mathbf{p}}|^2}. \end{aligned} \quad (\text{D.15})$$

Nous pouvons résoudre l'équation du gap de manière auto-cohérente, appliquant la somme de Matsubara,

$$\begin{aligned} \Delta &= \frac{1}{2} U_0 \sum_{\lambda, \mathbf{p}} \frac{1}{\beta} \sum_n \frac{\sin^2(\gamma_p) \Delta}{\omega_n^2 + \xi_{p\lambda}^2 + \Delta^2 \sin^2(\gamma_p)} \\ &= \sum_\lambda \frac{U}{2} \sum_{\mathbf{p}}^{\xi_{\mathbf{p}} < \omega_D} \Delta \sin^2(\gamma_p) \left(\frac{n_F(E_{\lambda\mathbf{p}})}{2E_{\lambda\mathbf{p}}} + \frac{n_F(-E_{\lambda\mathbf{p}})}{-2E_{\lambda\mathbf{p}}} \right), \end{aligned} \quad (\text{D.16})$$

où nous notons,

$$\begin{aligned} E_{\lambda\mathbf{p}} &= \sqrt{\xi_{\lambda\mathbf{p}}^2 + \Delta^2 \sin^2(\gamma_p)} \\ &= \sqrt{\xi_p^2 + V_z^2 + \alpha^2 p^2 - 2\lambda \xi_p \sqrt{V_z^2 + \alpha^2 p^2} + \Delta^2 \sin^2(\gamma_p)}. \end{aligned} \quad (\text{D.17})$$

À température nulle nous obtenons l'équation auto-cohérente suivante,

$$\begin{aligned} 1 &= \sum_\lambda \frac{U}{2} \sin^2(\gamma_{p_F}) d(\xi_F) \\ &\times \int_0^{\omega_D} \frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2 + V_z^2 + \alpha^2 p_F^2 - 2\lambda \xi \sqrt{V_z^2 + \alpha^2 p_F^2} + \Delta^2 \sin^2(\gamma_p)}} \end{aligned} \quad (\text{D.18})$$

en notant $\delta = \sqrt{V_z^2 + \alpha^2 p_F^2}$ celle-ci se résout

$$\exp \frac{2}{U \sin^2(\gamma_p) d(\xi_F)} = \frac{\delta + \omega_D + \sqrt{(\delta + \omega_D)^2 + \Delta^2 \sin^2(\gamma_p)}}{\delta - \omega_D + \sqrt{(\delta - \omega_D)^2 + \Delta^2 \sin^2(\gamma_p)}} \quad (\text{D.19})$$

Pour les limites $\delta \ll \omega_D$ et $\Delta \ll \omega_D$ nous trouvons

$$\Delta \sin \gamma_p = 2\omega_D \exp \frac{-1}{U \sin^2(\gamma_p) d(\xi_F)} \quad (\text{D.20})$$

Nous retrouvons l'équation BCS standard si $V_z \ll \alpha p_F$, en effet, dans ce cas $\sin \gamma_p \simeq 1$. Nous remarquons que le champ Zeeman diminue le gap sans qu'il n'y ait de champ critique où le gap se ferme. Cependant nous sommes dans le régime où le spin-orbite domine.

D.1.1 Fonctions de Green anormales et symétries

Après résolution des équations dans la base des valeurs propres du hamiltonien H_0 , nous souhaitons désormais analyser les symétries de la phase supraconductrice. Pour ce faire, nous allons réécrire nos fonctions de Green dans la base de spin en tant que matrices $\hat{G}$ et $\hat{F}$.

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta}(\mathbf{p}, \omega_n) &= \sum_{\lambda} \eta_{\lambda}^{\alpha}(\mathbf{p}) g_{\lambda}(\mathbf{p}, \omega_n) \eta_{\lambda}^{\beta}(\mathbf{p})^*, \\ F_{\alpha\beta}(\mathbf{p}, \omega_n) &= \sum_{\lambda} \lambda \eta_{\lambda}^{\alpha}(\mathbf{p}) f_{\lambda}(\mathbf{p}, \omega_n) \eta_{\lambda}^{\beta}(-\mathbf{p}). \end{aligned} \quad (\text{D.21})$$

Aussi nous allons séparer nos fonctions de Green en leurs parties symétriques et anti-symétriques en spin, la partie anti-symétrique étant engendré *a priori* par le couplage Zeeman et spin-orbite,

$$g_{\lambda} = g_s + \lambda g_{as} \quad ; \quad f_{\lambda\lambda} = f_s + \lambda f_{as}. \quad (\text{D.22})$$

Après calculs, nous obtenons :

$$\hat{G} = g_s \sigma_0 + g_{as} \cos(\gamma) \sigma_z + g_{as} \sin(\gamma) \frac{1}{p_F} (\sigma_y p_x - \sigma_x p_y), \quad (\text{D.23})$$

$$\hat{F} = f_{as} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i2\phi_p} \end{pmatrix} + f_s \cos(\gamma) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -e^{i2\phi_p} \end{pmatrix} + f_s e^{i\phi_p} \sin(\gamma) \sigma_y. \quad (\text{D.24})$$

la fonction f_{λ} a la même phase que $\Delta_{\mathbf{p}} = e^{-i\phi_p} \sin(\gamma_p) \Delta$ aussi, la phase de Δ n'est pas fixé, or sans champ Zeeman le gap triplet doit respecter les conditions de symétries suivantes [73] :

$$\hat{\Delta}_{\mathbf{p}} = i(\mathbf{d}(\mathbf{p}) \cdot \hat{\sigma}) \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} -d_x(p) + i d_y(p) & d_z(p) \\ d_z(p) & d_x(p) + i d_y(p) \end{pmatrix} \quad (\text{D.25})$$

Nous choisissons donc : $f_s = |f_s|ie^{-i\phi_p}$, $f_{as} = |f_{as}|ie^{-i\phi_p}$ afin de respecter ces symétries,

$$\hat{F} = |f_{as}| \begin{pmatrix} ie^{-i\phi_p} & 0 \\ 0 & ie^{i\phi_p} \end{pmatrix} + |f_s| \cos(\gamma) \begin{pmatrix} ie^{-i\phi_p} & 0 \\ 0 & -ie^{i\phi_p} \end{pmatrix} + |f_s| \sin(\gamma) i\sigma_y, \quad (D.26)$$

$$\hat{F} = |f_{as}|(p_y\sigma_x - p_x\sigma_y)i\sigma_y + |f_s| \cos(\gamma)(i\sigma_x p_x + i\sigma_y p_y)i\sigma_y + |f_s| \sin(\gamma)i\sigma_y. \quad (D.27)$$

En supposant que les fonctions de Green anormales soient proportionnelles au gap supraconducteur, nous obtenons pour le gap :

$$\hat{\Delta}_p = \frac{\Delta_R}{p_F}(p_y\sigma_x - p_x\sigma_y)i\sigma_y + \frac{\Delta_{ZR}(r)}{p_F}(i\sigma_x p_x + i\sigma_y p_y)i\sigma_y + \Delta i\sigma_y \quad (D.28)$$

avec les vecteurs $\mathbf{d}$ correspondant :

$$\Delta_R \quad : \quad \mathbf{d}_R = \begin{pmatrix} p_y \\ -p_x \\ 0 \end{pmatrix} \quad (D.29)$$

$$\Delta_{ZR} \quad : \quad \mathbf{d}_{ZR} = \begin{pmatrix} ip_x \\ ip_y \\ 0 \end{pmatrix} \quad (D.30)$$

Nous remarquons que le terme de supraconductivité Δ_{ZR} est complexe, en effet il brise l'invariance par renversement du temps.

D.2 2^{ème} cas, faible couplage spin-orbite

Dans le cas $\frac{\alpha|p_F|}{V_z} \ll 1$, $\sin \gamma \sim 0$, le dernier terme de l'équation D.9 domine, en négligeant les autres termes nous pouvons établir l'équation de Gorkov suivante :

$$\begin{aligned} [i\omega_n - \xi_{p\lambda}]g_\lambda(\mathbf{p}, \omega_n) + \Delta_p f_{\bar{\lambda}\lambda}^\dagger(\mathbf{p}, \omega_n) &= 1, \\ \Delta_p^\dagger g_\lambda(\mathbf{p}, \omega_n) + [i\omega_n + \xi_{p\bar{\lambda}}]f_{\lambda\bar{\lambda}}^\dagger(\mathbf{p}, \omega_n) &= 0, \end{aligned} \quad (D.31)$$

où nous définissons les fonctions de Green,

$$\begin{aligned} g_\lambda(\mathbf{p}, \tau) &= -\langle T_\tau \eta_{p,\lambda}(\tau) \eta_{p,\lambda}^\dagger(0) \rangle, \\ f_{\bar{\lambda},\lambda}(\mathbf{p}, \tau) &= -\langle T_\tau \eta_{-p,\bar{\lambda}}(\tau) \eta_{p,\lambda}(0) \rangle, \end{aligned} \quad (D.32)$$

et l'équation du gap,

$$\begin{aligned} \Delta_p &= 2 \sum_{\mathbf{p}'} U_{+--+}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') f_{-+}(\mathbf{p}') \\ &= e^{-i\phi_p} \cos(\gamma_p) U_0 \sum_{\mathbf{p}'} e^{i\phi_p'} \cos(\gamma_p') f_{-+}(\mathbf{p}') \\ &= e^{-i\phi_p} \cos(\gamma_p) \Delta. \end{aligned} \quad (D.33)$$

Après calculs nos fonctions de Green s'écrivent :

$$g_{\lambda}(k, i\omega_n) = (-i\omega_n - \xi_{\mathbf{p}, \bar{\lambda}})/D_{n\lambda\mathbf{p}}, \quad (\text{D.34})$$

$$f_{\bar{\lambda}, \lambda}^{\dagger}(\mathbf{p}, i\omega_n) = \Delta_{\mathbf{p}}^*/D_{n\lambda\mathbf{p}}, \quad (\text{D.35})$$

$$D_{n\lambda\mathbf{p}} = \omega_n^2 + \xi_{\mathbf{p}}^2 + \Delta^2 \cos^2(\gamma_p) - (V_z^2 + p^2 \alpha^2) + 2i\omega_n \lambda \sqrt{V_z^2 + p^2 \alpha^2}. \quad (\text{D.36})$$

Ce qui nous donne la relation suivante pour l'équation du gap,

$$1 = U_0 \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{\beta} \sum_n \frac{\cos(\gamma_p)}{D_{n\lambda\mathbf{p}}} \quad (\text{D.37})$$

En faisant l'approximation $\alpha p \sim \alpha p_F$, nous remarquons que le spin-orbite ne produit qu'une renormalisation du champ Zeeman nous noterons encore $\delta = \sqrt{V_z^2 + \alpha^2 p_F^2}$. Cette somme de Matsubara se résout en utilisant le théorème du résidu,

$$1 = U_0 \sum_{\mathbf{p}}^{\xi_{\mathbf{p}} < \omega_D} \frac{\cos^2(\gamma_p)}{2E_{\mathbf{p}}} (n_F(\delta - E_{\mathbf{p}}) - n_F(\delta + E_{\mathbf{p}})), \quad (\text{D.38})$$

où $E_{\mathbf{p}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{p}}^2 + \Delta^2 \cos^2(\gamma_p)}$. La résolution complète de ce système est connu (ref [65]) ; nous nous contenterons donc d'évoquer les résultats.

En fonction du paramètre δ , une transition de phase entre l'état supraconducteur et l'état de métal normal paramagnétique se produit lorsque $\delta = \omega_D \sqrt{2}/\alpha$, où $\alpha = \exp(1/d(\xi_F)U_0)$.

Dans la phase supraconductrice, le gap a pour énergie : $\Delta \simeq \frac{2}{\alpha} \sqrt{\omega_D(\alpha\delta - \omega_D)}$ lorsque $h > \omega/\alpha$ et $\Delta = 2\omega/\alpha$ sinon, *i.e.* la phase supraconductrice BCS.

D.2.1 Fonctions de Green anormales et symétries

Nous pouvons de nouveau analyser les symétries de la phase supraconductrice. En revenant de nouveau dans l'espace de spin, nous écrivons le changement de base :

$$F_{\alpha\beta}(p, i\omega_n) = \sum_{\lambda} \eta_{\lambda}^{\alpha}(-p)^* f_{\bar{\lambda}\lambda}(p, \omega_n) \eta_{\lambda}^{\beta}(p)^*. \quad (\text{D.39})$$

Là encore, nous pouvons séparer les fonctions de Green anormales en leurs parties symétriques et anti-symétriques :

$$f_{\bar{\lambda}\lambda} = f_s + \lambda f_{as}. \quad (\text{D.40})$$

Avec la propriété $f_{\bar{\lambda}\lambda}(p, i\omega_n) = f_{\lambda\bar{\lambda}}(-p, -i\omega_n)$ nous trouvons :

$$\hat{F} = f_s \sin(\gamma) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -e^{i2\phi_p} \end{pmatrix} + f_s e^{i\phi_p} \cos(\gamma) \sigma_y + f_{as} i e^{i\phi_p} \sigma_x. \quad (\text{D.41})$$

Ici aussi nous pouvons choisir la phase globale afin de préserver la symétrie du gap $f_s = i|f_s|e^{-i\phi_p}$; $f_{as} = i|f_{as}|e^{-i\phi_p}$

$$\hat{F} = |f_s| \sin(\gamma) \begin{pmatrix} ie^{-i\phi_p} & 0 \\ 0 & -ie^{i\phi_p} \end{pmatrix} + |f_s| \cos(\gamma) i\sigma_y - f_{as} \sigma_x \quad (\text{D.42})$$

Nous remarquons que le terme asymétrique ne préserve pas la symétrie du gap, cependant f_{as} est impair en $i\omega_n$,

$$f_{as} = \frac{\Delta_p}{D_{+,p}D_{-,p}} 4ip_n \sqrt{V_z^2 + p^2\alpha^2}, \quad (\text{D.43})$$

ce terme s'annule lorsque l'on somme sur les fréquences. Nous pouvons en conclure que si le gap supraconducteur est proportionnel aux fonctions de Green anormales, nous pouvons écrire le terme de supraconductivité,

$$\hat{\Delta}_p = \frac{\Delta_{ZR}(r)}{p_F} (i\sigma_x p_x + i\sigma_y p_y) i\sigma_y + \Delta i\sigma_y \quad (\text{D.44})$$

D.2.2 Conclusion de l'analyse par l'approche de Rashba Gorkov

Dans les deux limites extrêmes $V_z \gg \alpha p_F$ et $V_z \ll \alpha p_F$, nous avons obtenu par une approche microscopique des termes portant la signature de phase supraconductrice de type triplet. Ceci nous laisse penser que le cas intermédiaire doit lui aussi porter un mélange de supraconductivité de type singulet et triplet.

Annexe E

États de bord d'un supraconducteur hybride en ondes p et s en présence de champ Zeeman

Dans cette annexe nous décrirons analytiquement les états de bord provenant d'un système contenant de la supraconductivité en ondes s et en ondes p en présence de champ Zeeman. Nous commencerons cette analyse par les solutions à énergie nulle.

E.1 Modèle et hamiltonien

L'hamiltonien total du système s'écrit :

$$H_{tot} = H_0 + H_s + H_p + H_{SO} + H_Z, \quad (\text{E.1})$$

$$H_0 = \xi_k \tau_z, \quad (\text{E.2})$$

$$H_s = \Delta_s \tau_x, \quad (\text{E.3})$$

$$H_p = \frac{\Delta_p}{k_F} (k_x \sigma_y - k_y \sigma_x) \tau_x, \quad (\text{E.4})$$

$$H_{SO} = \alpha (k_x \sigma_y - k_y \sigma_x) \tau_z, \quad (\text{E.5})$$

$$H_Z = \mathbf{V} \boldsymbol{\sigma} \equiv V_x \sigma_x + V_z \sigma_z, \quad (\text{E.6})$$

où $\xi_k = p^2/2m - \mu$, avec μ le potentiel chimique.

E.2 États de bord

Nous considérons le système comme étant infini sur la direction y et de taille semi-infinie selon la direction x , possédant avec le vide un bord en $x = 0$. Le vecteur d'onde k_y est un bon nombre quantique et nous pouvons écrire l'hamiltonien dans la forme suivante :

$$H_{tot}(k_y) = \left(\frac{k_y^2}{2m} - \frac{1}{2m} \partial_x^2 - \mu \right) \tau_z + \Delta_s \tau_x + \mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \left(\alpha \tau_z + \frac{\Delta_R}{k_F} \tau_x \right) (k_y \sigma_x + i \sigma_y \partial_x) , \quad (\text{E.7})$$

Si ce hamiltonien contient des états de bord en $x = 0$, il est sensé avoir des solutions à énergie nulle pour une ou plusieurs valeurs de k_y , tel que :

$$H_{tot}(k_y^*) \psi = 0 \psi \equiv 0 . \quad (\text{E.8})$$

Parmi ces solutions, nous pouvons toujours trouver un ensemble de combinaisons linéaires qui forment des fermions de Majorana, donc vérifiant $\psi^\dagger = \psi$. À l'aide de l'opérateur symétrie particule-trou $\Xi = \sigma_y \tau_y K$ où K est l'opérateur complexe conjugué, nous pouvons écrire la contrainte suivante pour les solutions de type fermions de Majorana,

$$\psi = \psi^\dagger = \sigma_y \tau_y K \psi . \quad (\text{E.9})$$

Nous pouvons ainsi réduire les composantes du spineur à deux variables complexes indépendantes $\psi = (u, i \sigma_y u^*)$ avec $u = (u_\uparrow, u_\downarrow)^T$. Le hamiltonien appliqué au vecteur u donne deux équations totalement équivalentes car reliées par la symétrie particule-trou. Nous ne garderons que la première équation,

$$\begin{aligned} & \left(\frac{k_y^2}{2m} - \frac{1}{2m} \partial_x^2 - \mu \right) u(x) + (i \sigma_y) \Delta_s u^*(x) + \mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\sigma} u(x) \\ & + \alpha (k_y \sigma_x + i \sigma_y \partial_x) u(x) + \frac{\Delta_R}{k_F} (k_y \sigma_x + i \sigma_y \partial_x) (i \sigma_y) u^*(x) = 0 \end{aligned} \quad (\text{E.10})$$

Nous pouvons maintenant séparer les deux équations en leurs parties réelles et imaginaires $u(x) = u_R(x) + i u_I(x)$ ce qui donne les deux équations :

$$\begin{aligned} & \left[\left(\frac{k_y^2}{2m} - \frac{1}{2m} \partial_x^2 - \mu \right) + (i \sigma_y) \Delta_s + \mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right. \\ & \left. + \alpha (k_y \sigma_x + i \sigma_y \partial_x) - \frac{\Delta_R}{k_F} (k_y \sigma_z + \partial_x) \right] u_R(x) = 0 , \end{aligned} \quad (\text{E.11})$$

$$\begin{aligned} & \left[\left(\frac{k_y^2}{2m} - \frac{1}{2m} \partial_x^2 - \mu \right) - (i \sigma_y) \Delta_s + \mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right. \\ & \left. + \alpha (k_y \sigma_x + i \sigma_y \partial_x) + \frac{\Delta_R}{k_F} (k_y \sigma_z + \partial_x) \right] u_I(x) = 0 , \end{aligned} \quad (\text{E.12})$$

Nous pouvons réécrire ces équations de manière matricielle en supposant de plus que les états d'énergie nulle ont un vecteur d'onde nul, *i.e.* $k_y = 0$:

$$\begin{pmatrix} -(1/2m)\partial_x^2 - \mu + V_z - \lambda(\Delta_R/k_F)\partial_x & \lambda\Delta_s + \alpha\partial_x + V_x \\ -\lambda\Delta_s - \alpha\partial_x + V_x & -(1/2m)\partial_x^2 - \mu - V_z - \lambda(\Delta_R/k_F)\partial_x \end{pmatrix} u(x) = 0. \quad (\text{E.13})$$

Nous avons supposé que le champ magnétique ne possède que des composantes selon z et x , et où $\lambda = \pm 1$ prend en compte les équations réelles et imaginaires. Nous cherchons des solutions évanescentes de la forme :

$$u(x) = \sum_{n=1}^4 a_n e^{-z_n x} \rho_n, \quad (\text{E.14})$$

où a_n sont les coefficients et ρ_n sont les spineurs. Utilisant cet ansatz, nous obtenons l'équation suivante :

$$\begin{pmatrix} -(1/2m)z_n^2 - \mu + V_z + \lambda(\Delta_R/k_F)z_n & \lambda\Delta_s - \alpha z_n + V_x \\ -\lambda\Delta_s + \alpha z_n + V_x & -(1/2m)z_n^2 - \mu - V_z + \lambda(\Delta_R/k_F)z_n \end{pmatrix} \rho_n = 0. \quad (\text{E.15})$$

Nous cherchons les solutions non-triviales. Nous savons alors que le déterminant de l'équation doit être nul,

$$\begin{vmatrix} -(1/2m)z_n^2 - \mu + V_z + \lambda(\Delta_R/k_F)z_n & \lambda\Delta_s - \alpha z_n + V_x \\ -\lambda\Delta_s + \alpha z_n + V_x & -(1/2m)z_n^2 - \mu - V_z + \lambda(\Delta_R/k_F)z_n \end{vmatrix} = 0 \quad (\text{E.16})$$

ce qui donne l'équation suivante :

$$\left[(1/2m)z_n^2 + \mu - \lambda(\Delta_R/k_F)z_n \right]^2 - \underbrace{(V_z^2 + V_x^2)}_{V^2} + (\lambda\Delta_s - \alpha z_n)^2 = 0 \Leftrightarrow \quad (\text{E.17})$$

$$z_n^2 + 2m\mu - \lambda(2m\Delta_R/k_F)z_n = \pm 2m\sqrt{V^2 - \Delta_s^2}, \quad (\text{E.18})$$

où nous avons considéré que le terme de spin-orbite est nul et ainsi conservé une équation quadratique et non quartique. Plusieurs cas sont à discuter pour résoudre cette équation.

E.2.1 le cas $V < \Delta_s$

Dans ce cas, la quantité à l'intérieur de la racine est négative. Nous devons garder seulement les solutions qui donnent $\Re[z_n] > 0$, les autres solutions n'étant pas physiques. l'équation s'écrit :

$$z_n^2 + 2m\mu - \lambda(2m\Delta_R/k_F)z_n = \pm 2im\sqrt{\Delta_s^2 - V^2} \quad (\text{E.19})$$

Nous utiliserons l'ansatz suivant :

$$z_n - \lambda(m\Delta_R/k_F) = \alpha + i\beta. \quad (\text{E.20})$$

Nous pouvons séparer l'équation en sa partie réelle et imaginaire, cela donne les deux équations suivantes :

$$\alpha^2 - \beta^2 = (m\Delta_R/k_F)^2 - 2m\mu \quad (\text{E.21})$$

$$\alpha\beta = \pm m\sqrt{\Delta_s^2 - V^2}, \quad (\text{E.22})$$

qui se résolvent en :

$$\beta = \pm \frac{m\sqrt{\Delta_s^2 - V^2}}{\alpha}, \quad (\text{E.23})$$

$$\alpha^4 - [(m\Delta_R/k_F)^2 - 2m\mu] \alpha^2 - m^2(\Delta_s^2 - V^2) = 0 \Leftrightarrow \quad (\text{E.24})$$

$$\alpha = \pm \sqrt{\frac{(m\Delta_R/k_F)^2 - 2m\mu \pm \sqrt{[(m\Delta_R/k_F)^2 - 2m\mu]^2 + 4m^2(\Delta_s^2 - V^2)}}{2}} \quad (\text{E.25})$$

Enfin nous pouvons écrire la partie réelle de z_n comme :

$$\Re[z_n] = \lambda(m\Delta_R/k_F) \pm \sqrt{\frac{(m\Delta_R/k_F)^2 - 2m\mu \pm \sqrt{[(m\Delta_R/k_F)^2 - 2m\mu]^2 + 4m^2(\Delta_s^2 - V^2)}}{2}} \quad (\text{E.26})$$

Notons que dans cette solution le deuxième signe $\pm$ se doit d'être positif afin que $\Re[z_n]$ reste réelle. Avant de rentrer dans les détails, il est instructif de trouver les conditions pour lesquels $\Re[z_n] = 0$, celle-ci nous donne une indication sur les points de transition des phases topologiques. Ce n'est pas trivial à voir mais nous trouvons que cette condition implique :

$$\Delta_s = \sqrt{V^2 + \Delta_R^2}, \quad (\text{E.27})$$

où nous avons utilisé $k_F = \sqrt{2m\mu}$. Regardons dans un premier temps ce qu'il se passe avant cette transition. Le deuxième signe étant fixé positif nous pouvons écrire :

$$\Re[z_n] = \lambda(m\Delta_R/k_F) \pm \sqrt{\frac{(m\Delta_R/k_F)^2 - 2m\mu + \sqrt{[(m\Delta_R/k_F)^2 - 2m\mu]^2 + 4m^2(\Delta_s^2 - V^2)}}{2}}. \quad (\text{E.28})$$

Pour $\lambda = 1$, nous obtenons deux solutions si

$$(m\Delta_R/k_F) > \sqrt{\frac{(m\Delta_R/k_F)^2 - 2m\mu + \sqrt{[(m\Delta_R/k_F)^2 - 2m\mu]^2 + 4m^2(\Delta_s^2 - V^2)}}{2}}, \quad (\text{E.29})$$

ce qui implique

$$\sqrt{\Delta_s^2 - \Delta_R^2} < V < \Delta_s. \quad (\text{E.30})$$

Si $0 < V < \sqrt{\Delta_s^2 - \Delta_p^2}$, il n'y a qu'une solution possible. Notons qu'il n'existe qu'une solution pour $\lambda = -1$ pour laquelle $\Re[z_n] > 0$ mais seulement si :

$$0 < V < \sqrt{\Delta_s^2 - \Delta_p^2}, \quad (\text{E.31})$$

en supposant que V n'ait que des valeurs positives. Sinon il n'y a pas de solution pour la partie imaginaire.

Discutons de la première limite, lorsque deux solutions réelles sont possibles mais pas de solutions imaginaires. Dans ce cas, nous devons aussi résoudre le vecteur propre suivant $\rho_n^\dagger = (u_{n\uparrow}, u_{n\downarrow})$:

$$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2m}z_n^2 - \mu + V_z + \lambda\frac{\Delta_R}{k_F}z_n & -\lambda\Delta_s + V_x \\ \lambda\Delta_s + V_x & -\frac{1}{2m}z_n^2 - \mu - V_z + \lambda\frac{\Delta_R}{k_F}z_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{n,\uparrow} \\ u_{n,\downarrow} \end{pmatrix} = 0 \quad (\text{E.32})$$

une solution pour les vecteurs propres est donc alors :

$$u_{n,\uparrow} = -\lambda\Delta_s + V_x \quad (\text{E.33})$$

$$u_{n,\downarrow} = (1/2m)z_n^2 + \mu - V_z - \lambda(\Delta_R/k_F)z_n, \quad (\text{E.34})$$

cependant ici, nous savons que le vecteur u est réel, seule la solution $\lambda = 1$ compte. Nous pouvons écrire la solution réelle comme suit :

$$u(x) = ae^{-z_1x} \begin{pmatrix} u_{1,\uparrow} \\ u_{1,\downarrow} \end{pmatrix} + a^*e^{-z_1^*x} \begin{pmatrix} u_{1,\uparrow} \\ u_{1,\downarrow} \end{pmatrix} + be^{-z_2x} \begin{pmatrix} u_{2,\uparrow} \\ u_{2,\downarrow} \end{pmatrix} + b^*e^{-z_2^*x} \begin{pmatrix} u_{2,\uparrow} \\ u_{2,\downarrow} \end{pmatrix}. \quad (\text{E.35})$$

Nous cherchons maintenant les coefficients complexes a et b en imposant $u(0) = 0$. Nous obtenons les équations suivantes :

$$a + a^* + b + b^* = 0 \quad (\text{E.36})$$

$$\begin{aligned} & (a + a^*)\Re[(1/2m)z_1^2 - (\Delta_R/k_F)z_1] + (b + b^*)\Re[(1/2m)z_2^2 - (\Delta_R/k_F)z_2] \\ & + i(a - a^*)\Im[(1/2m)z_1^2 - (\Delta_R/k_F)z_1] + i(b - b^*)\Im[(1/2m)z_2^2 - (\Delta_R/k_F)z_2] \\ & + (a + a^* + b + b^*)(\mu - V_z) = 0. \end{aligned} \quad (\text{E.37})$$

Nous avons maintenant 2 équations (3 si nous comptons les conditions de normalisation) et 4 coefficients. Nous pouvons à présent nous questionner sur le nombre d'états de bord solutions de ces équations, considérons l'ansatz suivant :

$$u_{M1}(x) = a\Re[e^{-z_1x}\rho_1] + b\Im[e^{-z_1x}\rho_1] + c\Re[e^{-z_2x}\rho_2] + d\Im[e^{-z_2x}\rho_2] \quad (\text{E.38})$$

$$u_{M2}(x) = a\Re[e^{-z_1x}\rho_1] + b\Im[e^{-z_1x}\rho_1] + c\Re[e^{-z_2x}\rho_2] + f\Im[e^{-z_2x}\rho_2], \quad (\text{E.39})$$

ces deux solutions sont bonnes puisque d et f peuvent prendre toutes les valeurs. Cependant, nous pouvons fixer le coefficient d et chercher une solution orthogonale via le coefficient f *i.e.* :

$$\int_{-\infty}^0 dx u_{M1}(x) u_{M2}(x) = 0, \quad (\text{E.40})$$

Ce qui résulte en une nouvelle équation sur f . Cela a du sens, du fait de la dégénérescence nous pouvons définir différentes combinaisons linéaires.

Pour la solution n'ayant qu'une composante réelle nous trouvons :

$$u(x) = a e^{-z_1 x} \begin{pmatrix} u_{1,\uparrow} \\ u_{1,\downarrow} \end{pmatrix} + a^* e^{-z_1^* x} \begin{pmatrix} u_{1,\uparrow}^* \\ u_{1,\downarrow}^* \end{pmatrix}, \quad (\text{E.41})$$

en imposant $u(0) = 0$ nous trouvons alors :

$$a + a^* = 0 \quad (\text{E.42})$$

$$(a + a^*)(\mu - V_z) + (a + a^*)\Re[(1/2m)z_1^2 - (\Delta_R/k_F)z_1] + i(a - a^*)\Im[(1/2m)z_1^2 - (\Delta_R/k_F)z_1] = 0, \quad (\text{E.43})$$

ce qui a pour solution seulement $a = a^* = 0$. Nous pouvons en conclure qu'il n'y a pas d'états de bord dans ce cas.

E.2.2 Le cas $V > \Delta_s$

Dans ce cas, nous devons résoudre l'équation suivante :

$$z_n^2 + 2m\mu - \lambda(2m\Delta_R/k_F)z_n = \pm 2m\sqrt{V^2 - \Delta_s^2}, \quad (\text{E.44})$$

qui a pour solution :

$$z_n = \lambda(m\Delta_R/k_F) \pm \sqrt{(m\Delta_R/k_F)^2 - 2m(\mu \mp \sqrt{V^2 - \Delta_s^2})}. \quad (\text{E.45})$$

Nous devons ne garder que les solutions positives. Avant cela, nous pouvons dans un premiers temps déterminer les paramètres satisfaisant la condition $\Re[z_n] = 0$, condition pour laquelle il peut y avoir une transition topologique. Cette condition implique :

$$V = \sqrt{\Delta_s^2 + \mu^2}, \quad (\text{E.46})$$

Ceci correspond à la deuxième transition de phase topologique. Afin d'obtenir deux solutions de type fermions de Majorana, nous avons besoin de quatre bonnes solutions : soit quatre solutions purement réelles, soit deux solutions réelles et deux complexes (toutes ces solutions doivent avoir une partie réelle positive). Nous remarquons que dans le cas où $V = \sqrt{\Delta_s^2 + \mu^2}$, il n'est pas possible d'avoir de solution u réelle, *i.e.* $\lambda = -1$ ne donne pas de solution z_n positives.

E.2.3 Quatre solutions z_n réelles

Dans ce cas l'équation nous donne les conditions suivantes :

$$0 < m(\Delta_R/k_F)^2 - 2(\mu + \sqrt{V^2 - \Delta_s^2}) < m(\Delta_R/k_F)^2, \quad (\text{E.47})$$

Nous avons aussi besoin d'évaluer les limites où la valeur sous la racine carrée est réelle. Ici deux limites sont à prendre en compte en fonction du signe.

$$\Delta_R^2/2\mu - 2\mu > 2\sqrt{V^2 - \Delta_s^2} \Rightarrow \quad (\text{E.48})$$

$$\Delta_R > 2\mu, \quad (\text{E.49})$$

$$0 < V < \min\{\sqrt{(\Delta_R^2/4\mu - \mu)^2 + \Delta_s^2}, \sqrt{\Delta_s^2 + \mu^2}\}, \quad (\text{E.50})$$

ce qui implique aussi que :

$$\Delta_R > 2\mu. \quad (\text{E.51})$$

Nous obtenons alors une solution de type :

$$u(x) = ae^{-z_1 x} \begin{pmatrix} u_{1,\uparrow} \\ u_{1,\downarrow} \end{pmatrix} + be^{-z_2 x} \begin{pmatrix} u_{2,\uparrow} \\ u_{2,\downarrow} \end{pmatrix} + ce^{-z_3 x} \begin{pmatrix} u_{3,\uparrow} \\ u_{3,\downarrow} \end{pmatrix} + de^{-z_4 x} \begin{pmatrix} u_{4,\uparrow} \\ u_{4,\downarrow} \end{pmatrix}, \quad (\text{E.52})$$

où a , b , c et d sont des coefficients réels. Comme précédemment, nous pouvons utiliser les conditions de bord et de normalisation ainsi que les conditions d'orthogonalité, afin de trouver les deux fonctions d'onde de Majorana. Nous constatons qu'ici la solution comporte quatre longueurs de décroissance à l'opposé des deux trouvées dans le cas précédent.

E.2.4 Deux solutions z_n réelles et deux solutions z_n complexes

Dans ce cas nous avons les inégalités suivantes :

$$0 < (\Delta_R/k_F)^2 - 2(\mu - \sqrt{V^2 - \Delta_s^2}) < (\Delta_R/k_F)^2 \quad (\text{E.53})$$

$$(\Delta_R/k_F)^2 - 2(\mu + \sqrt{V^2 - \Delta_s^2}) < 0, \quad (\text{E.54})$$

ce qui donne les relations suivantes :

$$\sqrt{(\mu - \Delta_R^2/4\mu)^2 + \Delta_s^2} < V < \sqrt{\Delta_s^2 + \mu^2}, \quad (\text{E.55})$$

ce qui implique aussi que $\Delta_R < 2\sqrt{2}\mu$. Ceci nous indique que dans l'intervalle $2\mu < \Delta_R < 2\sqrt{2}\Delta_R$ il y a des valeurs de V pour lesquels il peut y avoir des solutions d'un autre type.

Dans ce cas la fonction d'onde s'écrit :

$$u(x) = ae^{-z_1 x} \begin{pmatrix} u_{1,\uparrow} \\ u_{1,\downarrow} \end{pmatrix} + a^* e^{-z_1^* x} \begin{pmatrix} u_{1,\uparrow}^* \\ u_{1,\downarrow}^* \end{pmatrix} + be^{-z_2 x} \begin{pmatrix} u_{2,\uparrow} \\ u_{2,\downarrow} \end{pmatrix} + ce^{-z_3 x} \begin{pmatrix} u_{3,\uparrow} \\ u_{3,\downarrow} \end{pmatrix}, \quad (\text{E.56})$$

où b et c sont des coefficients réels. Il y a dans ce cas trois longueurs de décroissance, contrairement aux quatre longueurs du cas précédent.

E.2.5 Quatre solutions z_n complexes (deux inéquivalentes)

Dans ce cas nous considérons la condition :

$$(\Delta_R/k_F)^2 - 2(\mu - \sqrt{V^2 - \Delta_s^2}) < 0 \quad (\text{E.57})$$

ce qui donne :

$$2\mu > \Delta_R, \quad (\text{E.58})$$

$$0 < V < \sqrt{(\mu - \Delta_R^2/4\mu)^2 + \Delta_s^2}. \quad (\text{E.59})$$

Dans ce cas la fonction d'onde s'écrit :

$$u(x) = ae^{-z_1 x} \begin{pmatrix} u_{1,\uparrow} \\ u_{1,\downarrow} \end{pmatrix} + a^* e^{-z_1^* x} \begin{pmatrix} u_{1,\uparrow}^* \\ u_{1,\downarrow}^* \end{pmatrix} + be^{-z_2 x} \begin{pmatrix} u_{2,\uparrow} \\ u_{2,\downarrow} \end{pmatrix} + b^* e^{-z_2^* x} \begin{pmatrix} u_{2,\uparrow}^* \\ u_{2,\downarrow}^* \end{pmatrix}. \quad (\text{E.60})$$

La partie réelle s'écrit alors :

$$\Re[z_{1,2}] = \frac{m\Delta_R}{\sqrt{2\mu}} \quad (\text{E.61})$$

Dans ce cas, il y a une seule longueur de décroissance et deux périodes pour la composante oscillante.

E.3 L'état chiral : $V > \sqrt{\Delta_s^2 + \mu^2}$

Dans ce cas, nous nous attendons à deux types de solutions pouvant donner un seul état de bord : 3 solutions z_n réelles ou 1 solution z_n réelle et deux solutions complexes. Tout d'abord, nous devons prouver qu'il n'est pas possible d'avoir quatre solutions dans le cas où $V > \sqrt{\Delta_s^2 + \mu^2}$. Pour cela nous devons identifier la solution avec la plus grande partie réelle sous la racine carrée. D'autre part il existe plusieurs types de solutions à quatre composantes : quatre solutions réelles, deux réelles et deux complexes où deux complexes. Nous devons analyser tous ces cas encore une fois. Nous commençons avec le cas à quatre solutions réelles. Nous devons respecter la condition :

$$0 < (m\Delta_R/k_F)^2 - 2m(\mu \mp \sqrt{V^2 - \Delta_s^2}) < (m\Delta_R/k_F)^2, \quad (\text{E.62})$$

Ce qui implique alors :

$$V < \sqrt{\Delta_s^2 + \mu^2}, \quad (\text{E.63})$$

$$\Delta_R > 2\mu, \quad (\text{E.64})$$

$$\sqrt{\Delta_s^2 + \mu^2} < V < \sqrt{(\Delta_R^2/4\mu - \mu)^2 + \Delta_s^2}, \quad (\text{E.65})$$

les deux dernières conditions sont équivalentes. Cependant, à partir de la première condition nous voyons que pour le signe $-$ la seconde inégalité ne peut pas être satisfaite, il est alors impossible d'avoir quatre solutions réelles. Pour avoir deux solutions réelles et deux solutions complexes, nous devons encore une fois respecter la conditions $V < \sqrt{\Delta_s^2 + \mu^2}$, qui est là encore en contradiction avec le cas exploré. Dans le cas des deux solutions complexes nous devons satisfaire la condition :

$$(m\Delta_R/k_F)^2 - 2m(\mu - \sqrt{V^2 - \Delta_s^2}) < 0, \quad (\text{E.66})$$

ce qui amène ces autres conditions :

$$\Delta_R < 2\mu \quad (\text{E.67})$$

$$\sqrt{\Delta_s^2 + \mu^2} < V < \sqrt{(\Delta_R^2/4\mu - \mu)^2 + \Delta_s^2}, \quad (\text{E.68})$$

Ce qui crée encore une contradiction. Nous en concluons qu'après la seconde transition topologique, il n'y a pas d'états hélicaux possibles (à énergie nulle). Nous pouvons aussi mentionner qu'il n'y a pas de solution pour $\lambda = -1$ car, dans ce cas, seulement deux types de solutions sont possible pour z_n (soit deux solutions réelles soit deux solutions complexes), ce qui produit des coefficient nuls (puisque nous avons alors trois conditions pour seulement deux coefficients).

E.3.1 Trois solutions z_n réelles

Dans ce cas, nous devons respecter les inégalités suivantes :

$$0 < (m\Delta_R/k_F)^2 - 2m(\mu + \sqrt{V^2 - \Delta_s^2}) < (m\Delta_R/k_F)^2 \quad (\text{E.69})$$

$$(m\Delta_R/k_F)^2 - 2m(\mu - \sqrt{V^2 - \Delta_s^2}) > (m\Delta_R/k_F)^2, \quad (\text{E.70})$$

qui sont équivalent aux conditions suivantes :

$$\Delta_R > 2\mu, \quad (\text{E.71})$$

$$\sqrt{\mu^2 + \Delta_s^2} < V < \sqrt{(\Delta_R^2/4\mu - \mu)^2 + \Delta_s^2}, \quad (\text{E.72})$$

Ce qui équivaut à cette unique condition

$$\Delta_R > 2\sqrt{2}\mu, \quad (\text{E.73})$$

Dans ce cas, la solution d'énergie nulle s'écrit :

$$u(x) = ae^{-z_1 x} \begin{pmatrix} u_{1,\uparrow} \\ u_{1,\downarrow} \end{pmatrix} + be^{-z_2 x} \begin{pmatrix} u_{2,\uparrow} \\ u_{2,\downarrow} \end{pmatrix} + ce^{-z_3 x} \begin{pmatrix} u_{3,\uparrow} \\ u_{3,\downarrow} \end{pmatrix} \quad (\text{E.74})$$

où a , b et c sont des coefficients réels qui doivent être trouvés en appliquant la condition aux bord et la condition de normalisation.

E.3.2 Une solution z_n réelle et deux solutions complexes

Pour produire ce type de solutions, les paramètres doivent respecter les inégalités suivantes :

$$(m\Delta_R/k_F)^2 - 2m(\mu + \sqrt{V^2 - \Delta_s^2}) < 0 \quad (\text{E.75})$$

$$(m\Delta_R/k_F)^2 - 2m(\mu - \sqrt{V^2 - \Delta_s^2}) > (m\Delta_R/k_F)^2, \quad (\text{E.76})$$

ce qui équivaut à respecter les deux inégalités suivantes :

$$V > \sqrt{(\Delta_R^2/4\mu - \mu)^2 + \Delta_s^2} \quad (\text{E.77})$$

$$V > \sqrt{\Delta_s^2 + \mu^2}, \quad (\text{E.78})$$

Dans ce cas, la solution à énergie nulle s'écrit :

$$u(x) = ae^{-z_1 x} \begin{pmatrix} u_{1,\uparrow} \\ u_{1,\downarrow} \end{pmatrix} + a^* e^{-z_1^* x} \begin{pmatrix} u_{1,\uparrow}^* \\ u_{1,\downarrow}^* \end{pmatrix} + be^{-z_2 x} \begin{pmatrix} u_{2,\uparrow} \\ u_{2,\downarrow} \end{pmatrix}, \quad (\text{E.79})$$

où a et b sont des coefficients respectivement complexe et réel qui doivent être déterminés par la condition de bord $u(0) = 0$ ainsi que par la condition de normalisation. Notons que pour $\Delta_R < 2\sqrt{2}\mu$ seulement cette solution survie dans toute la région chirale.

E.3.3 Conclusion

Nous remarquons qu'il y a de nombreux cas différents en dehors des deux transitions topologiques, ceux-ci sont résumés dans le tableau ci dessous. Lorsque z_n est complexe, l'état de bord comprend des oscillations contrairement au cas non complexe. L'état possède généralement autant de longueur de décroissances que de solutions z_n . Dans tout les cas ci-dessous le vecteur d'onde de l'état de bord est purement réel.

Topologique	Conditions			z_n
Triviale $V < \sqrt{\Delta_S^2 - \Delta_R^2}$				0 solution
Hélicale	$V < \Delta_S$			4 complexes
$V > \sqrt{\Delta_S^2 - \Delta_R^2}$	$V > \Delta_S$	$V < \sqrt{(\mu - \Delta_R^2/4\mu)^2 + \Delta_S^2}$	$\Delta_R > 2\mu$	4 complexes
			$\Delta_R < 2\mu$	4 réelles
		$V > \sqrt{(\mu - \Delta_R^2/4\mu)^2 + \Delta_S^2}$	$\Delta_R > 2\sqrt{2}\mu$	2 Re. 2 Co.
Chirale	$V < \sqrt{(\mu - \Delta_R^2/4\mu)^2 + \Delta_S^2}$		$\Delta_R > 2\sqrt{2}\mu$	3 Réel
$V > \sqrt{\Delta_S^2 + \mu^2}$	$V > \sqrt{(\mu - \Delta_R^2/4\mu)^2 + \Delta_S^2}$			1 Re. 2 Co.

Codes

Script Python calcul de densité d'états locale dans l'espace réel

```

#!/usr/bin/python
# -*- coding: utf-8 -*-
import numpy as np
import scipy.optimize as so
import pickle
import pylab as plt

tau_x=np.array([[0,1],[1,0]])
tau_z=np.array([[1,0],[0,-1]])
tau_0=np.array([[1,0],[0,1]])
one_2=np.ones((2,2))

##=====Parametres=====
#all energy are in meV
#potentiel scalaire
K=0.
#potentiel Zeeman
J=200.

#superconductivité
Delta=10.
#nombre de site total dans une direction N_tot=M**2
M=200
#nombre de site autour de l'impurete a afficher
N=40

#parametre de la bande
t0=203.0;t1=46.0;t2=257.5;t3=4.46;t4=-15.0;t5=6.0
#t0=10.9;t1=86.8;t2=139.9;t3=29.6;t4=3.5;t5=3.3 band1
##=====Main=====

#bande d'energie electronique  $k=l*2*\pi/(a*M) \backslash \text{vect}\{a_1\}$ 
#  $+m*2*\pi/(a*M) \backslash \text{vect}\{a_2\}$ 
def xi1hop(l,m):
    return np.cos(l*2*np.pi/M)+np.cos(m*2*np.pi/M)+np.cos((l-m)*2*np.pi/M)
def xi2hop(l,m):
    return np.cos((l+m)*2*np.pi/M)+np.cos((-l+2*m)*2*np.pi/M)\
    +np.cos((-2*l+m)*2*np.pi/M)
def xi3hop(l,m):
    return np.cos(l*4*np.pi/M)+np.cos(m*4*np.pi/M)+np.cos((l-m)*4*np.pi/M)

```

```

def xi4hop(l,m):
    return 0.5*(np.cos((2*l+m)*2*np.pi/M)+np.cos((l+2*m)*2*np.pi/M)\
        +np.cos((3*l-m)*2*np.pi/M)+np.cos((-l+3*m)*2*np.pi/M)\
        +np.cos((-2*l+3*m)*2*np.pi/M)+np.cos((-3*l+2*m)*2*np.pi/M))
def xi5hop(l,m):
    return np.cos(l*6*np.pi/M)+np.cos(m*6*np.pi/M)+np.cos((l-m)*6*np.pi/M)
def xi(l,m):
    return t0+t1*xi1hop(l,m)+t2*xi2hop(l,m)+t3*xi3hop(l,m)\
        +t4*xi4hop(l,m)+t5*xi5hop(l,m)

Txi=np.array([[xi(l,m) for l in range(M)] for m in range(M)])

Mn=np.array([1,1,2,2])
Mk=np.array([M,M,1,1])
def DetE(E,K,J):

    Ik=np.ones((M,M,1,1))
    S=np.sum((E*Ik*tau_0.reshape(Mn)+Txi.reshape(Mk)*tau_z.reshape(Mn)\
        +Delta*Ik*tau_x.reshape(Mn))\
        /(E**2*Ik*one_2.reshape(Mn)-(Txi**2).reshape(Mk)*one_2.reshape(Mn)-\
        Delta**2*Ik*one_2.reshape(Mn)),axis=(0,1))/M**2
    return np.linalg.det(np.eye(2)-np.dot(S,K*tau_z-J*tau_0))

def Pe_s_Ph(E,K,J):

    Ik=np.ones((M,M,1,1))
    S=np.sum((E*Ik*tau_0.reshape(Mn)+Txi.reshape(Mk)*tau_z.reshape(Mn)\
        +Delta*Ik*tau_x.reshape(Mn))\
        /(E**2*Ik*one_2.reshape(Mn)-(Txi**2).reshape(Mk)*one_2.reshape(Mn)-\
        Delta**2*Ik*one_2.reshape(Mn)),axis=(0,1))/M**2
    h=np.dot(S,K*tau_z-J*tau_0)
    return h[0,1]/(1.-h[0,0])

def psi_k(E,K,J,Psi_0):
    Ik=np.ones((M,M,1,1))
    return np.dot((E*Ik*tau_0.reshape(Mn)+Txi.reshape(Mk)*tau_z.reshape(Mn)\
        +Delta*Ik*tau_x.reshape(Mn))\
        /(E**2*Ik*one_2.reshape(Mn)-(Txi**2).reshape(Mk)*one_2.reshape(Mn)-\
        Delta**2*Ik*one_2.reshape(Mn))/M**2,Psi_0)

def Plot(Psi_R,size=60,contrast=0.5):
    """

```

```

Psi_R: le spineur a afficher
size: la largeur du system a afficher
contrast: une troncation sera effectuee selon ldos_max*contrast
"""
X=[]
Y=[]
LDOSup=[]
LDOSdo=[]
for x in range(size):
    for y in range(size):
        #print x+y*0.5,y*sqrt(3)*0.5
        X.append(x+y*0.5)
        Y.append(y*np.sqrt(3)*0.5)
        LDOSup.append((Psi_R[x-size//2,y-size//2,0]**2).real)
        LDOSdo.append((Psi_R[x-size//2,y-size//2,1]**2).real)
    vmax=max(np.max(LDOSup),np.max(LDOSdo))
figure1=plt.figure(num=None, figsize=(30, 13.5), dpi=10,
                    facecolor='w', edgecolor='k')

plt.hexbin(X, Y, LDOSup, gridsize = (size*3//2-1,size//2),
           bins = None,extent=(-0.5,X[-1]+0.5,0,np.sqrt(3)*(size//2)),
           vmax=vmax*contrast)
plt.colorbar()
plt.savefig("etoile_up.png")
plt.show()
figure2=plt.figure(num=None, figsize=(30, 13.5), dpi=10,
                    facecolor='w', edgecolor='k')
plt.hexbin(X, Y, LDOSdo, gridsize = (size*3//2-1,size//2),
           bins = None,extent=(-0.5,X[-1]+0.5,0,np.sqrt(3)*(size//2)),
           vmax=vmax*contrast)
plt.colorbar()
plt.savefig("etoile_do.png")
plt.show()

def main():
    Norm_psiK=0.    #Inititilisation norme dans l'espace k
    Norm_psi_plot=0. #dans l'espace afficher

    #Recherche de l'énergie de Shiba, nous savons que cette énergie est unique
    #dans l'intervale -[Delta Delta]. la méthode brentq prend une fonction en
    #entré et donne sont minimum.
    E0=so.brentq(DetE,-Delta*0.95,Delta*0.95,xtol=1e-7,args=(K,J))

```

```

Psi_0=np.array([Pe_s_Ph(E0,K,J),1.])
print("E=",E0,"Psie/Psih=", Psi_0[0]/Psi_0[1])
print("Psie correspond au vecteur d'onde avec l'energie",E0)
print("Psih correspond au vecteur d'onde avec l'energie",-E0)

#spineur dans l'espace impulsion
Psi_K=np.zeros((M,M,2),dtype=float)

Psi_K=psi_k(E0,K,J,Psi_0)

#spineur dans l'espace réel, nous prenons simplement la transformé de fourier
Psi_R=np.fft.fft2(Psi_K,axes=(0,1))
#Normalisation
Psi_R=Psi_R/np.sqrt(np.sum(Psi_R**2))

Plot(Psi_R)

if __name__ == '__main__':
    main()

```


Bibliographie

- [1] A. A. Abrikosov. Electron scattering on magnetic impurities in metals and anomalous resistivity effects. *Physics*, 2(1) :5–20, 1965.
- [2] A. A. Abrikosov and L. P. Gor’kov. Contribution to the theory of superconducting alloys with paramagnetic impurities. *Zhur. Eksptl’. i Teoret. Fiz.*, 39, 1960.
- [3] J. Alicea. Majorana fermions in a tunable semiconductor device. *Physical Review B*, 81(12) :125318, 2010.
- [4] J. Alicea. New directions in the pursuit of majorana fermions in solid state systems. *Reports on Progress in Physics*, 75(7) :076501, 2012.
- [5] P. W. Anderson. Theory of dirty superconductors. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 11(1-2) :26–30, 1959.
- [6] P. W. Anderson. Localized magnetic states in metals. *Phys. Rev.*, 124 :41–53, Oct 1961.
- [7] P. W. Anderson. A poor man’s derivation of scaling laws for the kondo problem. *Journal of Physics C : Solid State Physics*, 3(12) :2436, 1970.
- [8] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer. Theory of superconductivity. *Physical Review*, 108(5) :1175, 1957.
- [9] P. P. Baruselli, R. Requist, A. Smogunov, M. Fabrizio, and E. Tosatti. Co adatoms on Cu surfaces : Ballistic conductance and Kondo temperature. *Physical Review B*, 92(4) :045119, 2015.
- [10] C. Brun, T. Cren, V. Cherkez, F. Debontridder, S. Pons, D. Fokin, M. C. Tringides, S. Bozhko, L. B. Ioffe, B. L. Altshuler, et al. Remarkable effects of disorder on superconductivity of single atomic layers of lead on silicon. *Nature Physics*, 10(6) :444–450, 2014.
- [11] H. Bruus and K. Flensberg. *Many-body quantum theory in condensed matter physics : an introduction*. Oxford University Press, 2004.
- [12] P. M. R. Brydon, S. Das Sarma, H.-Y. Hui, and J. D. Sau. Topological yu-shiba-rusinov chain from spin-orbit coupling. *Physical Review B*, 91(6) :064505, 2015.
- [13] R. Bulla, T. A. Costi, and T. Pruschke. Numerical renormalization group method for quantum impurity systems. *Reviews of Modern Physics*, 80(2) :395–450, 2008.

- [14] C. Caroli, R. Combescot, P. Nozieres, and D. Saint-James. Direct calculation of the tunneling current. *Journal of Physics C : Solid State Physics*, 4(8) :916, 1971.
- [15] V. Cherkez, J. C. Cuevas, C. Brun, T. Cren, G. Ménard, F. Debontridder, V. S. Stolyarov, and D. Roditchev. Proximity effect between two superconductors spatially resolved by scanning tunneling spectroscopy. *Physical Review X*, 4(1) :011033, 2014.
- [16] D.-J. Choi, M. V. Rastei, P. Simon, and L. Limot. Conductance-driven change of the kondo effect in a single cobalt atom. *Physical review letters*, 108(26) :266803, 2012.
- [17] W. H. Choi, H. Koh, E. Rotenberg, and H. W. Yeom. Electronic structure of dense pb overlayers on si (111) investigated using angle-resolved photoemission. *Physical Review B*, 75(7) :075329, 2007.
- [18] T.-P. Choy, J. M. Edge, A. R. Akhmerov, and C. W. J. Beenakker. Majorana fermions emerging from magnetic nanoparticles on a superconductor without spin-orbit coupling. *Physical Review B*, 84(19) :195442, 2011.
- [19] L. N. Cooper. Bound electron pairs in a degenerate fermi gas. *Physical Review*, 104(4) :1189, 1956.
- [20] R Delagrangé. Josephson effect and high frequency emission in a carbon nanotube in the kondo regime. *Thèse de doctorat de l'université Paris Saclay*, 2016.
- [21] M. E. Flatte and D. E. Reynolds. The local spectrum of a superconductor as a probe of interactions between magnetic impurities. *Physical Review B*, 61(21) :8, 1999.
- [22] S. Fujimoto. Topological order and non-abelian statistics in noncentrosymmetric s-wave superconductors. *Physical Review B*, 77(22) :220501, 2008.
- [23] T. Fukui, Y. Hatsugai, and H. Suzuki. Chern numbers in discretized brillouin zone : efficient method of computing (spin) hall conductances. *Journal of the Physical Society of Japan*, 74(6) :1674–1677, 2005.
- [24] L. I. Glazman and M. E. Raikh. Jetp lett. 47 452 ng tk and lee pa 1988. *Phys. Rev. Lett*, 61 :1768, 1988.
- [25] L. P. Gor'kov and E. I. Rashba. Superconducting 2d system with lifted spin degeneracy : Mixed singlet-triplet state. *Phys. Rev. Lett.*, 87 :037004, Jul 2001.
- [26] C. J. Gorter and H. B. G. Casimir. The thermodynamics of the superconducting state. *Z. tech. Phys*, 15 :539–42, 1934.
- [27] S. Guissart, M. Trif, and P. Simon. Quasi-helicals states in topological 2d superconductors. *En préparation*.
- [28] F. D. M. Haldane. Scaling theory of the asymmetric anderson model. *Physical Review Letters*, 40(6) :416, 1978.
- [29] H. Haug, A.-P. Jauho, and M. Cardona. *Quantum kinetics in transport and optics of semiconductors*, volume 2. Springer, 2008.

- [30] A. C. Hewson. *The Kondo problem to heavy fermions*, volume 2. Cambridge university press, 1997.
- [31] D. S. Inosov, D. V. Evtushinsky, V. B. Zabolotnyy, A. A. Kordyuk, B. Büchner, R. Follath, H. Berger, and S. V. Borisenko. Temperature-dependent fermi surface of 2 h-tase 2 driven by competing density wave order fluctuations. *Physical Review B*, 79(12) :125112, 2009.
- [32] D. S. Inosov, V. B. Zabolotnyy, D. V. Evtushinsky, A. A. Kordyuk, B. Büchner, R. Follath, H. Berger, and S. V. Borisenko. Fermi surface nesting in several transition metal dichalcogenides. *New Journal of Physics*, 10(12) :125027, 2008.
- [33] D. A. Ivanov. Non-abelian statistics of half-quantum vortices in p -wave superconductors. *Phys. Rev. Lett.*, 86 :268–271, Jan 2001.
- [34] D. Jacob. Towards a full ab initio theory of strong electronic correlations in nanoscale devices. *Journal of Physics : Condensed Matter*, 27(24) :245606, 2015.
- [35] L. V. Keldysh. Ionization in the field of a strong electromagnetic wave. *Zh. Eksperim. i Teor. Fiz.*, 47, 1964.
- [36] A. Kitaev. Unpaired majorana fermions in quantum wires. *Physics-Uspekhi*, 44(10S) :131, 2001.
- [37] A. Kitaev. Periodic table for topological insulators and superconductors. *arXiv preprint arXiv :0901.2686*, 2009.
- [38] J. Kondo. Resistance Minimum in Dilute Magnetic Alloys. *Progress of Theoretical Physics*, 32(1) :37–49, 1964.
- [39] O. V. Konstantinov and V. I. Perel. A graphical technique for computation of kinetic quantities. *Zhur. Eksptl'. i Teoret. Fiz.*, 39, 1960.
- [40] R. López and D. Sánchez. Nonequilibrium spintronic transport through an artificial kondo impurity : Conductance, magnetoresistance, and shot noise. *Phys. Rev. Lett.*, 90 :116602, Mar 2003.
- [41] V Madhavan, W Chen, T Jamneala, MF Crommie, and NS Wingreen. Tunneling into a single magnetic atom : spectroscopic evidence of the kondo resonance. *Science*, 280(5363) :567–569, 1998.
- [42] G. D. Mahan. *Many-particle physics*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [43] H. C. Manoharan, C. P. Lutz, and D. M. Eigler. Quantum mirages formed by coherent projection of electronic structure. *Nature*, 403(6769) :512–515, 2000.
- [44] J. Martinek, M. Sindel, L. Borda, J. Barnaś, J. König, G. Schön, and J. Von Delft. Kondo effect in the presence of itinerant-electron ferromagnetism studied with the numerical renormalization group method. *Physical review letters*, 91(24) :247202, 2003.
- [45] J. Martinek, Y. Utsumi, H. Imamura, J. Barnaś, S. Maekawa, J. König, and G. Schön. Kondo effect in quantum dots coupled to ferromagnetic leads. *Physical review letters*, 91(12) :127203, 2003.

- [46] N. Marzari, A. A. Mostofi, J. R. Yates, I. Souza, and D. Vanderbilt. Maximally localized wannier functions : Theory and applications. *Reviews of Modern Physics*, 84(4) :1419, 2012.
- [47] Y. Meir and N. S. Wingreen. Landauer formula for the current through an interacting electron region. *Physical review letters*, 68(16) :2512, 1992.
- [48] W. Meissner and R. Ochsenfeld. Ein neuer effekt bei eintritt der supraleitfähigkeit. *Naturwissenschaften*, 21(44) :787–788, 1933.
- [49] G. C. Ménard, S. Guissart, C. Brun, S. Pons, V. S. Stolyarov, F. Debontridder, M. V. Leclerc, E. Janod, L. Cario, and D. Roditchev. Coherent long-range magnetic bound states in a superconductor. *Nature Physics*, 11(12) :1013–1016, 2015.
- [50] G. C. Ménard, S. Guissart, C. Brun, M. Trif, F. Debontridder, R. T Leriche, D. Demaille, D. Roditchev, P. Simon, and T. Cren. Two-dimensional topological superconductivity in pb/co/si (111). *arXiv preprint arXiv :1607.06353*, 2016.
- [51] V. Mourik, K. Zuo, S. M Frolov, S. R. Plissard, E. P. Bakkers, and L. P. Kouwenhoven. Signatures of majorana fermions in hybrid superconductor-semiconductor nanowire devices. *Science*, 336(6084) :1003–1007, 2012.
- [52] S. Nadj-Perge, I. K. Drozdov, B. A. Bernevig, and A. Yazdani. Proposal for realizing majorana fermions in chains of magnetic atoms on a superconductor. *Physical Review B*, 88(2) :020407, 2013.
- [53] S. Nadj-Perge, I. K. Drozdov, J. Li, H. Chen, S. Jeon, J. Seo, A. H. MacDonald, B. A. Bernevig, and A. Yazdani. Observation of majorana fermions in ferromagnetic atomic chains on a superconductor. *Science*, 346(6209) :602–607, 2014.
- [54] S. Nakosai, Y. Tanaka, and N. Nagaosa. Two-dimensional p-wave superconducting states with magnetic moments on a conventional s-wave superconductor. *Physical Review B*, 88(18) :180503, 2013.
- [55] N. Néel, J. Kröger, and R. Berndt. Quantized conductance of a single magnetic atom. *Physical review letters*, 102(8) :086805, 2009.
- [56] F. Pientka, L. I. Glazman, and F. von Oppen. Topological superconducting phase in helical shiba chains. *Phys. Rev. B*, 88 :155420, Oct 2013.
- [57] M. Plihal and J. W. Gadzuk. Nonequilibrium theory of scanning tunneling spectroscopy via adsorbate resonances : Nonmagnetic and kondo impurities. *Phys. Rev. B*, 63 :085404, Feb 2001.
- [58] D. J. Rahn, S. Hellmann, M. Kalläne, C. Sohrt, T. K. Kim, L. Kipp, and K. Rossnagel. Gaps and kinks in the electronic structure of the superconductor 2 h-nbse 2 from angle-resolved photoemission at 1 k. *Physical Review B*, 85(22) :224532, 2012.
- [59] N. Read and D. Green. Paired states of fermions in two dimensions with breaking of parity and time-reversal symmetries and the fractional quantum hall effect. *Phys. Rev. B*, 61 :10267–10297, Apr 2000.
- [60] J. Röntynen and T. Ojanen. Topological superconductivity and high chern numbers in 2d ferromagnetic shiba lattices. *Physical review letters*, 114(23) :236803, 2015.

- [61] K. Rossnagel, E. Rotenberg, H. Koh, N. V. Smith, and L. Kipp. Fermi surface, charge-density-wave gap, and kinks in 2 h- tase 2. *Physical Review B*, 72(12) :121103, 2005.
- [62] K. Rossnagel, O. Seifarth, L. Kipp, M. Skibowski, D. Voß, P. Krüger, A. Mazur, and J. Pollmann. Fermi surface of 2 h- nbse 2 and its implications on the charge-density-wave mechanism. *Physical Review B*, 64(23) :235119, 2001.
- [63] A. I. Rusinov. Superconductivity near a paramagnetic impurity. *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*, 9 :85, 1969.
- [64] A. Sakurai. Comments on superconductors with magnetic impurities. *Progress of Theoretical Physics*, 44(6) :1472–1476, 1970.
- [65] G. Sarma. On the influence of a uniform exchange field acting on the spins of the conduction electrons in a superconductor. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 24(8) :1029 – 1032, 1963.
- [66] J. D. Sau, R. M. Lutchyn, S. Tewari, and S. Das Sarma. Generic new platform for topological quantum computation using semiconductor heterostructures. *Physical review letters*, 104(4) :040502, 2010.
- [67] J. D. Sau, S. Tewari, R. M. Lutchyn, T. D. Stanescu, and S. Das Sarma. Non-abelian quantum order in spin-orbit-coupled semiconductors : Search for topological majorana particles in solid-state systems. *Phys. Rev. B*, 82 :214509, Dec 2010.
- [68] A. Schiller and S. Hershfield. Theory of scanning tunneling spectroscopy of a magnetic adatom on a metallic surface. *Phys. Rev. B*, 61 :9036–9046, Apr 2000.
- [69] A. P. Schnyder, S. Ryu, A. Furusaki, and A. W. W. Ludwig. Classification of topological insulators and superconductors in three spatial dimensions. *Phys. Rev. B*, 78 :195125, Nov 2008.
- [70] J. R. Schrieffer and P. A. Wolff. Relation between the anderson and kondo hamiltonians. *Physical Review*, 149(2) :491, 1966.
- [71] J. Schwinger. Brownian motion of a quantum oscillator. *Journal of Mathematical Physics*, 2(3) :407–432, 1961.
- [72] H. Shiba. Classical Spins in Superconductors. 40(3), 1968.
- [73] M. Sigrist and K. Ueda. Phenomenological theory of unconventional superconductivity. *Rev. Mod. Phys.*, 63 :239–311, Apr 1991.
- [74] N. V. Smith, S. D. Kevan, and F. J. DiSalvo. Band structures of the layer compounds 1t-tas2 and 2h-tase2 in the presence of commensurate charge-density waves. *Journal of Physics C : Solid State Physics*, 18(16) :3175, 1985.
- [75] Y. Tanaka, M. Sato, and N. Nagaosa. Symmetry and topology in superconductors—odd-frequency pairing and edge states—. *Journal of the Physical Society of Japan*, 81(1) :011013, 2011.
- [76] A. Ueda and M. Eto. Resonant tunneling and fano resonance in quantum dots with electron-phonon interaction. *Phys. Rev. B*, 73 :235353, Jun 2006.

- [77] O. Újsághy, J. Kroha, L. Szunyogh, and A. Zawadowski. Theory of the fano resonance in the stm tunneling density of states due to a single kondo impurity. *Physical review letters*, 85(12) :2557, 2000.
- [78] G. E. Volovik and V. P. Mineev. [*JETP Lett.* 24, 561 (1976), 24 :561, 1976.
- [79] K. G. Wilson. The renormalization group : Critical phenomena and the Kondo problem. *Reviews of Modern Physics*, 47(4) :773–840, 1975.
- [80] A. Yazdani, B. A. Jones, C. P. Lutz, M. F. Crommie, and D. M. Eigler. Probing the local effects of magnetic impurities on superconductivity. *Science*, 275(5307) :1767–1770, 1997.
- [81] L. Yu. Bound state in superconductors with paramagnetic impurities. *Acta Phys. Sin*, 21 :75–91, 1965.
- [82] T. Zhang, P. Cheng, W.-J. Li, Y.-J. Sun, G. Wang, X.-G. Zhu, K. He, L. Wang, X. Ma, X. Chen, et al. Superconductivity in one-atomic-layer metal films grown on si (111). *Nature Physics*, 6(2) :104–108, 2010.
- [83] R. Žitko. Kondo resonance lineshape of magnetic adatoms on decoupling layers. *Physical Review B*, 84(19) :195116, 2011.
- [84] V. Zlatić, B. Horvatić, and D. Šokčević. Density of states for intermediate valence and kondo systems. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 59(2) :151–157, 1985.