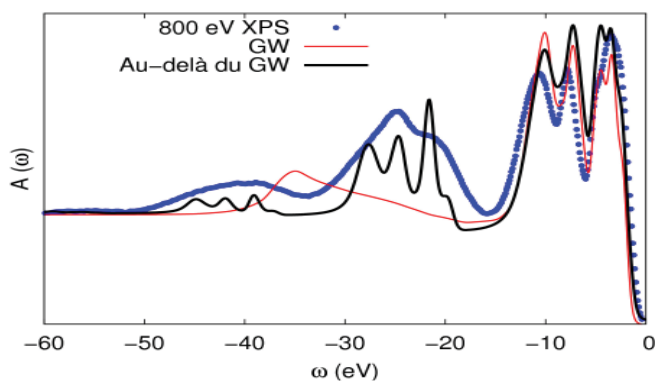




Modélisation des effets de corrélation dans les semiconducteurs "simples"

La photoémission est une méthode de choix pour étudier la structure électronique des matériaux. Dans une image naïve, un photon est absorbé par un électron qui est éjecté de l'échantillon, et l'énergie cinétique mesurée permet de retrouver les niveaux énergétiques des électrons dans le matériau. Cependant, les électrons interagissent et on ne peut pas leur attribuer des niveaux énergétiques individuels. Quand un électron est éjecté, il laisse un trou derrière lui, qui perturbe la structure électronique en induisant par exemple des oscillations collectives (plasmons), et l'électron éjecté a moins d'énergie. Sur le spectre apparaît un pic à plus basse énergie, appelé "satellite". De par sa nature, une telle structure ne pourra jamais être décrite à l'aide d'une approche à particules indépendantes. Même l'approche la plus avancée (dite «GW») est insuffisante, ce qui constitue un grand défi pour la théorie. Partant d'un développement plus vaste pour décrire les effets de corrélation dans les fonctions de Green à plusieurs corps, nous avons introduit une approximation qui découple les différents niveaux de quasi-particule mais garde le couplage avec les plasmons. Nous obtenons ainsi une très bonne description des satellites plasmoniques, comme le montre la figure qui représente le spectre de photo émission du silicium en volume, intégré sur toute la zone de Brillouin (collaboration avec SOLEIL – ligne TEMPO). Ce développement qui ne demande pas plus d'efforts qu'un calcul GW permet une interprétation plus fine des données de photoémission et constitue la base pour aborder des matériaux plus complexes.

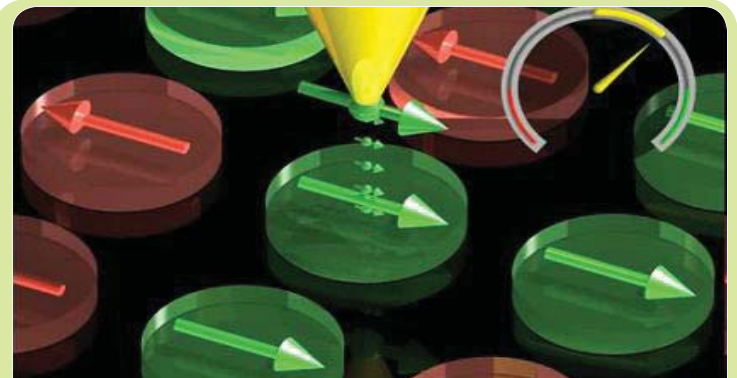


Le silicium n'est certainement pas considéré comme un matériau à forte corrélation – cependant, on peut noter qu'au-delà des bandes de valence (entre le niveau de Fermi et -12 eV) le spectre expérimental (en bleu) est dominé par une série de structures, espacées par environ 17 eV, l'énergie de plasmon dans le silicium. Le calcul GW (en rouge) reproduit très bien les bandes de valence, mais ne montre qu'un seul satellite, à une position erronée. Le calcul complet sur la base de nos développements (en noir) est par contre en excellent accord avec les données expérimentales.

M. Guzzo et
L. Reining. Tél : 01.69.33.45.53
<http://www.etsf.eu>



Nano-architectures magnétiques hybrides modulables pour le stockage de l'information haute densité



Microscopie et spectroscopie tunnel polarisée en spin (SP-STM). Illustration de Stefan Krause, Hambourg.

Contrôler la formation de nanostructures magnétiques sur des surfaces est crucial pour développer la prochaine génération de composants de stockage d'information haute densité. L'objectif de ce projet soutenu par une bourse de l'ERC consiste à faire croître des nano-cristaux de forme, structure, et composition chimique différentes pour ajuster et optimiser leurs propriétés magnétiques. L'agencement de ces nano-cristaux sur des surfaces atomiquement planes se fera au moyen d'un film organique de structure ajustable. La première étape de ce projet consistera donc à synthétiser des molécules qui par auto-assemblage formeront un réseau bidimensionnel poreux à cavités modulables qui servira de gabarit pour contrôler la nucléation de nano-cristaux magnétiques et permettra d'accéder à une nano-architecture magnétique haute densité. La croissance des nano-cristaux magnétiques se fera sous ultra vide (UHV). Leur forme étant intimement liée à l'énergie d'interface entre le nano-cristal et la surface du substrat, il sera ainsi possible de créer des nano-cristaux ayant des formes variables (hexagones, pyramides etc.). La morphologie des nano-cristaux sera caractérisée par microscopie à effet tunnel (STM) et leurs propriétés électroniques et magnétiques seront sondées localement par microscopie et spectroscopie tunnel polarisée en spin (SP-STM). Cette technique nous permettra d'élucider le lien entre leur forme, leur taille et leurs propriétés magnétiques (axe d'aimantation, champ coercitif, énergie de renversement magnétique, ainsi que leur stabilité en température). Ces mesures expérimentales seront complétées par des calculs ab-initio afin d'élucider les nouveaux phénomènes magnétiques apparaissant à l'échelle nanométrique. Des physiciens expérimentateurs et théoriciens ainsi que des chimistes seront impliqués dans ce projet multidisciplinaire. Un microscope à effet tunnel sous ultra vide à basse température (1 K) avec champ magnétique (3 Teslas) sera acquis dans le cadre de ce projet.

F. Silly
01.69.08 / 2 80 19

