



DIRECTION DES SCIENCES DE LA MATIÈRE,  
INSTITUT RAYONNEMENT MATIÈRE DE SACLAY

SERVICE DE PHYSIQUE ET DE CHIMIE DES SURFACES ET DES INTERFACES

## Thèse SPCSI

Parwana HABIBI

Le 17/10/2012 à 14h00

Amphi Bloch, Bât.774, Orme des Merisiers

### Propriétés électroniques, magnétiques et de transport de la surface de chrome Cr(001). Modélisation d'images de "STM polarisé en spin"

**Résumé :** La spintronique est une technique utilisant le spin des électrons dans des composants électroniques. Le principe est fondé sur des propriétés physiques telles que la magnétorésistance, (Prix Nobel 2007, Albert Fert), ce qui signifie que la conductivité électrique d'un système peut dépendre du champ magnétique appliqué au composant. Le microscope à effet tunnel polarisé en spin (SP-STM) en est un parfait exemple. Il implique l'utilisation d'une pointe et d'une surface magnétiques ; il est ainsi un outil essentiel à l'étude locale des propriétés électroniques et magnétiques des surfaces.

L'objectif de notre étude est de modéliser des images de microscope à effet tunnel polarisé en spin d'une surface Cr(001) en allant au-delà de l'approximation classique de Tersoff-Hamann. Nous utilisons une approche combinant les méthodes ab initio avec le code PWSCF, couplées avec une méthode de liaisons fortes (TB) correctement ajustée. Premièrement, nous avons mené une étude approfondie des propriétés électroniques et magnétiques de la surface du chrome, en insistant sur les états de surface localisés autour du niveau de Fermi. En outre, il existe une controverse au sujet de l'interprétation de spectres obtenus en STS. Nous avons clairement identifié les états de surface impliqués, et relevé que le pic en question est de symétrie  $d_z^2 - p_z$ . Nous avons analysé la décroissance dans le vide des fonctions d'onde au-dessus de la surface Cr(001) et constaté que spectre observé par SP- STS provient essentiellement d'états de surface de symétrie  $p_z$  et  $d_z^2$ .

Après avoir présenté le formalisme du transport électronique nous avons simulé un système idéal correspondant à une configuration SP-STM, à savoir deux surfaces Fe(001)-Cr(001) en vis-à-vis séparées par une couche de vide. Enfin nous présentons des calculs sur un système plus réaliste formé d'une pointe de Fer en contact tunnel avec une surface Cr(001). Le comportement général et les ordres de grandeurs des effets de TMR sont en bon accord avec l'expérience.

---

### Electronic, magnetic and transport properties of the Cr (001) surface of chromium. Modelisation of "spin polarized STM" images

**Abstract :** Spintronics is a technique that uses the spin of electrons in electronic devices. The principle is based on physical properties such as magnetoresistance, (Nobel Prize 2007, Albert Fert), meaning that the electric conductivity of a system can depend on the magnetic field applied to the device. The spin-polarized scanning tunnelling microscope (SP-STM) is a perfect example of this physics. It involves a magnetic tip and a magnetic surface; therefore is an essential tool for local analysis of electronic and magnetic properties of surfaces.

The aim of our study is to understand and simulate spin-polarized scanning tunnelling microscopy images of a Cr(001) surface going beyond the classical Tersoff-Hamann approximation. We use an ab initio method using PWSCF package, alongside a tight binding approach (TB) well fitted. First, we have performed a very detailed study of chromium electronic and magnetic properties, focusing deeply on surface states localized around the Fermi level. As a matter of fact, there is a controversy concerning the understanding of spectra obtained by STS. We have clearly identified surface states involved, and noticed that the peak in question is of  $d_z^2 - p_z$  symmetry. We have studied the decay of orbital wavefunctions above the Cr(001) surface to see that the PDOS that would be observed by STS would be a mix of  $p_z$  and  $d_z^2$  orbitals.

Finally, in order to study the ballistic electronic transport, we have simulated an ideal system corresponding to a SP-STM set-up, namely Fe(001)-Cr(001) surfaces separated by vacuum. We have also simulated a real Fe tip-Cr(001) system as a tunnelling contact. The general behaviour and the resulting TMR are in good agreement with experimental results.



Entrée sur le site du CEA de Saclay pour les séminaires SPCSI

Afin de pouvoir entrer sur le site du CEA de Saclay veuillez adresser les données personnelles suivantes par courriel à [catherine.julien@cea.fr](mailto:catherine.julien@cea.fr) (secrétariat); un avis d'entrée vous sera alors délivré:

**Nom:**

**Prénom:**

**Date et lieu de naissance:**

**Nationalité:**

**Nom de l'employeur:**

Ces informations doivent être envoyées **au mieux deux jours** avant la date du séminaire.

Lors de votre venue vous devez vous présenter avec une **carte d'identité ou un passeport** en cours de validité. L'entrée sur le site se fait par l'entrée principale ou porte Nord (suivre le lien ci-dessous), un badge vous y sera remis. Demandez à l'accueil le Bât.466, ils vous renseigneront.

Les séminaires se déroulent au Bât. 466, pièce 111 (1<sup>er</sup> étage). En cas de problème vous pouvez contacter le secrétariat au : 0169086532/4012.

---

*Formalities for entering the CEA Saclay site for SPCSI seminars*

*To enter in CEA Saclay you need to send the following personal data to [Christine PRIGIAN](#) and [Catherine Julien](#) (secretariat):*

***Informations utiles/Practical informations - Contact***

**Informations:** [Access](#)

**Contact:** [Christine Prigian](#) et [Catherine Julien](#)

**Last Name :**

**First Name :**

**Place and date of birth :**

**Nationality :**

**Employer Name :**

*These informations must be preferably sent at least **two days** before the seminar date.*

*When you come you must have a **valid ID card or passport** with you.*

*The entrance in CEA Saclay is through the main entrance or north entrance (see link below), a pass will be delivered. Ask at the "accueil" the path for the building 466. SPCSI seminars take place in room 111 (first floor).*

*Any questions/troubles do not hesitate to contact our secretariat : 33 (0)1 69 08 65 32 / 40 12.*