

Thèse de doctorat  
de l'Université Sorbonne Paris Cité  
Préparée à l'Université Paris Diderot  
**École Doctorale N°564 Physique en Île-de-France**  
*Institut de Physique Théorique du CEA Saclay*  
*Laboratoire de Physique des Solides de l'Université Paris-Sud*

# Spin polarisation and topological properties of Yu-Shiba-Rusinov states

Par Vardan Kaladzhyan

Thèse de doctorat de physique

Dirigée par Cristina Bena et Pascal Simon

Président du jury : Prof. Dr. Benoît Douçot, Université Paris Diderot  
Rapporteurs : Prof. Dr. Lars Fritz, University of Utrecht  
Prof. Dr. Felix Von Oppen, Freie Universität Berlin  
Examineurs : Prof. Dr. Vincent Repain, Université Paris Diderot  
Prof. Dr. Ramon Aguado, Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, CSIC  
Directeur de thèse : Prof. Dr. Bena, Cristina, IPhT Saclay  
Co-directeurs de thèse : Prof. Dr. Pascal Simon, Université Paris-Sud



Titre : Polarisation en spin et propriétés topologiques des états de Yu-Shiba-Rusinov

Résumé : Dans ce manuscrit de thèse, nous revisitons d'abord la physique des états de Yu-Shiba-Rusinov, en nous concentrant sur leur polarisation en spin. Nous commençons par montrer théoriquement que nous pouvons extraire beaucoup d'informations sur le supraconducteur hôte, en analysant la densité locale d'états électroniques liée à la présence d'impuretés magnétiques. Tout d'abord, nous démontrons que le couplage spin-orbite peut être lu directement et sans ambiguïté par la spectroscopie par effet tunnel résolu en spin dans les systèmes bidimensionnels et unidimensionnels, qu'ils soient supraconducteurs ou métalliques. Nous analysons les oscillations induites par les impuretés dans la densité d'états électroniques. En particulier, nous nous concentrons sur la transformation de Fourier (TF) des oscillations de Friedel et nous notons que les caractéristiques à haute intensité apparaissent pour un vecteur d'onde donné par deux fois la longueur inverse du spin-orbite. Ensuite, nous montrons qu'il est possible de déterminer le mécanisme d'appariement dominant, qu'il soit en ondes s ou en ondes p, dans les supraconducteurs non conventionnels en analysant la structure spectrale résolue en spin des états liés de Yu-Shiba-Rusinov. De manière frappante, nous démontrons qu'une analyse minutieuse de la densité d'états électroniques polarisée en spin ne permet pas seulement de caractériser sans équivoque le degré d'appariement de type triplet, mais également son orientation, a.k.a. le vecteur  $\mathbf{d}$ .

Enfin, nous proposons et discutons deux approches différentes d'ingénierie et de contrôle des phases topologiques à l'aide d'impuretés scalaires et magnétiques. Nous commençons par fournir une théorie microscopique des réseaux d'impuretés scalaires sur les supraconducteurs chiraux. Nous montrons que pour un supraconducteur topologique de type chiral, les impuretés scalaires donnent lieu à une hiérarchie complexe de phases non triviales distinctes avec des nombres de Chern élevés. Deuxièmement, nous proposons et étudions théoriquement une nouvelle plate-forme prometteuse que nous appelons «la chaîne dynamique de Shiba», c'est-à-dire une chaîne d'impuretés magnétiques classiques dans un supraconducteur en ondes s avec des spins qui précèdent. Nous montrons que cette approche peut être utilisée non seulement pour créer une phase supraconductrice topologique, mais surtout pour contrôler les transitions de phase topologiques au moyen de la dynamique de la texture de la magnétisation.

Ce manuscrit est organisé comme suit. Dans la première partie, les informations d'introduction essentielles sur la supraconductivité, les oscillations de Friedel et les états de Yu-Shiba-Rusinov sont fournies. La deuxième partie est consacrée à la polarisation en spin des états Yu-Shiba-Rusinov et aux propriétés qui pourraient être extraites au moyen de la microscopie par effet tunnel résolu en spin. Dans la dernière partie, deux configurations proposées pour l'ingénierie de phases topologiques, basées sur les états induits par les impuretés, sont présentées, suivies de conclusions, d'un bref résumé des réalisations de cette thèse et enfin d'une discussion de possibles directions futures.

Mots clefs : physique de la matière condensée, physique des solides, supraconductivité, impuretés, états liés

Title: Spin polarisation and topological properties of Yu-Shiba-Rusinov states

Abstract: In this manuscript we first revisit the physics of Yu-Shiba-Rusinov subgap states, focusing on their spin polarisation. We start by showing theoretically that we can extract a considerable amount of information about the host superconductor, by analysing spin-polarised local density of states related to the presence of magnetic impurities. First, we demonstrate that the spin-orbit coupling in two-dimensional and one-dimensional systems, both superconducting and metallic, can be read-off directly and unambiguously via spin-resolved STM. We analyse the impurity-induced oscillations in the local density of states. In particular, we focus on the Fourier transform (FT) of the Friedel oscillations and we note that high-intensity FT features appear at a wave vector given by twice the inverse spin-orbit length. Second, in unconventional superconductors with both s-wave and p-wave pairing, by analysing the spin-resolved spectral structure of the Yu-Shiba-Rusinov states it is possible to determine the dominating pairing mechanism. Most strikingly, we demonstrate that a careful analysis of spin-polarised density of states allows not only to unambiguously characterise the degree of triplet pairing, but also to define the orientation of the triplet pairing vector, also known as the  $\mathbf{d}$ -vector.

Finally, we discuss two different ways of engineering and controlling topological phases with both scalar and magnetic impurities. We start with providing a microscopic theory of scalar impurity structures on chiral superconductors. We show that given a non-trivial chiral superconductor, the scalar impurities give rise to a complex hierarchy of distinct non-trivial phases with high Chern numbers. Second, we propose and study theoretically a new promising platform that we call 'dynamical Shiba chain', i.e. a chain of classical magnetic impurities in an s-wave superconductor with precessing spins. We have shown that it can be employed not only for engineering a topological superconducting phase, but most remarkably for *controlling* topological phase transitions by means of magnetisation texture dynamics.

This manuscript is organised as follows. In the first part, the essential introductory information on superconductivity, Friedel oscillations and Yu-Shiba-Rusinov states is provided. The second part is dedicated to spin polarisation of Yu-Shiba-Rusinov states and the properties that could be extracted by means of spin-resolved STM measurements. In the last part, two setups proposed for topological phase engineering based on impurity-induced states are presented, followed by conclusions with a brief summary of the thesis achievements and further directions to pursue.

Keywords: condensed matter physics, solid state physics, superconductivity, impurities, bound states