

SYNTHÈSE de DOCTORAT de l'UNIVERSITÉ PARIS-SUD XI

ÉCOLE DOCTORALE : Physique de la région parisienne Laboratoire de Physique Théorie et Modèle Statistique

DISCIPLINE : Physique

par Tianyou YI

Modélisation des états dynamiques de vortex dans des ondes de densité de charge

Septembre 2012

Orsay

France

tel-00768237, version 1 - 21 Dec 2012

Table des matières

1	Modélisation de reconstruction d'état de vortex d'ODC				
	1.1	Introd	uction	5	
	1.2	Modèl	e	7	
	1.3	Résultats et discussion			
		1.3.1	Description de la géométrie du problème	10	
		1.3.2	Résultats pour la géométrie rectangulaire	11	
		1.3.3	Résultats de la géométrie réelle	15	
2	Cor	nclusio	n	21	
Bibliography					

TABLE DES MATIÈRES

Chapitre 1

Modélisation de reconstruction d'état de vortex de la densité de charge d'onde dans la géométrie restreinte

1.1 Introduction

L'Onde de Densité de Charge (ODC) est la forme la plus accessible de cristaux électroniques [1, 2]; il est formé spontanément par électrons - phonon interactions à travers la brisure de symétrie de transition de phase de Peierls-Fröhlich. Particulièrement intéressants sont incommensurable ODC (IODC, qui est un ODC avec un nombre d'onde arbitraire Q correspondant à une bande de remplissage fractionnaire) - comme les supraconducteurs qu'ils possèdent une dégénérescence continue du paramètre d'ordre - un champ complexe $\Psi = A \exp(i\varphi)$. Le quel donne lieu à un état instable qui peut être localement affectés par le champ électrique ou l'injection d'électrons. Un champ électrique, associé à l'énergie microscopique du gap 2Δ dans le spectre électronique, peut déformer le état fondamental du ODC. L'état du mouvement collectif du ODC glissant est en définitive lié à l'apparition de superstructures inhomogènes sous contraintes. Contrairement à cristaux habituels, dans l'ODC le nombre de cellules unitaires n'est pas fixé, il peut être réajusté à un nouvel état fondamental prolongée en absorbant (ou émettant) de paires d'électrons normaux. Localement, il se passe par les déformations topologiquement non triviales : des dislocations - les vortex d'ODC, les solitons [3, 4].

Dernières accès expérimental aux états proviennent d'études de "mésa-

CHAPITRE 1. MODÉLISATION DE RECONSTRUCTION D'ÉTAT DE VORTEX D'ODC

jonctions" fabriqué par nano techniques [5, 6], du microscope à effet tunnel [7]et de la microdiffraction de rayons X [8]. Spectres tunnel de mesa-jonctions en NbSe₃ et $o - TaS_3$ démontrent [6] un seuil net à une très basse tension $V_t \approx 0.2\Delta$ (figure 1.1), qui peut être donné que par le canal de phase à basse énergie. L'expérience indique également que la tension, qui est appliqué à la jonction ensemble empilé avec N = 20 à 30 couches, chute essentiellement à une seule couche élémentaire - contraste avec jonctions similaires pour semiconducteurs cuprate, où la tension de seuil est proportionnelle les couches Nde l'échantillon soit $V_t \sim N$ [9]. Le caractéristique de tunnel apparaître, par hypothèse, lorsque le champ électrique dans cette jonction dépasse une valeur critique pour le découplage de phase entre les chaînes voisines d'ODC. Ce découplage est prévu de procéder via le développement de lignes de dislocation qui entrent dans la zone de jonction à une séquence de tensions critiques, comme on le voit dans l'expérience. Le cœur des dislocations pourrait fonctionner comme une jonction auto-réglé et microscopique concentrant la chute de tension.



FIGURE 1.1 – La conductivité différentielle dI/dV (à gauche) et son dérivé dI^2/dV^2 (à droite) en fonction de la tension V normalisée à le gap du ODC, à T = 130K. dI/dV a une augmentation soudaine au seuil $V \approx 0.2\Delta$ [6].

Ci-dessous nous présentons une étude théorique de la reconstruction de la jonction interne. Nous prenons en compte plusieurs champs en interactions non linéaires : la phase φ et l'amplitude A du paramètre d'ordre d'ODC, les distributions de champ électrique, de la densité et le courant de transporteurs normales. Les équations d'évolution en temps ont été résolues numériquement pour une géométrie restreint à deux dimensions spatiales. Le travail numérique a été réalisé pour les paramètres proches de l'expérience sur NbSe₃ [6]. Ici, nous avons réussi à étendre la modélisation à une géométrie réaliste de réel dispositif expérimental fabriqué par le technique de faisceau d'ions focalisé. Les simulations ont été réalisées par la méthode des éléments finis mis en œuvre par l'intermédiaire du programme de COMSOL Multiphysics.

Les simulations donnent accès au comportement dynamique des vortex qui pénètrent dans l'ODC et d'illustrer leur formation de configuration final. Les vortex sont créés dans la jonction lorsque la tension aux bords ou le courant à travers, dépasse un seuil. Le nombre final de vortex dans l'état fondamental reconstruite augmente progressive - en accord avec les expériences. Le cœur du vortex se concentre la chute de tension à travers la jonction qui peut donner lieu à des pics observés du tunnel à inter-couches.

1.2 Modèle

Un point de vue traditionnel sur l'origine des dislocations dans l'ODC est que la conversion du courant normale au collectives glissants se produit via la formation de nouvelles périodes près du contact de source et l'élimination des périodes supplémentaires à proximité du contact de drain, (voir [10, 11] pour des expériences). Une autre raison de formation de lignes de dislocation dans l'ODC est liée à des structures d'équilibre statique en raison d'applications de tension transversale ou de courant ([12]). Le potentiel électrique exerce une contrainte de cisaillement sur l'ODC, qui après passage d'une tension de seuil brise le couplage d'inter-chaîne d'ODC, et alors le champ électrique est écranté par les chaînes découplés.

Il existe deux types de transporteurs normales. L'un est appelé transporteur intrinsèque en provenance de l'excitation des électrons à partir de gap. L'autre est appelé transporteur extrinsèque provenant d'autres bandes conductrices.

La modélisation devrait inclure des distributions du paramètre d'ordre, le potentiel électrique Φ , La densité de charge normale n et le courant normal \vec{j} .

Nous utilisons l'approche de Ginsburg-Landau dissipatif dépendant du temps pour décrire la dynamique du système d'ODC. L'état statique est déterminé par un minimum de la fonctionnelle d'énergie totale $H_{tot} = H_{ODC}(\Psi) + H_{el}(\Phi, \Psi, n)$.

L'énergie libre peut être écrite comme

$$H_{ODC} = \int dr^3 \left\{ \frac{\Delta\xi}{4\pi s} \left(|\partial_x \Psi|^2 + \beta^2 |\partial_y \Psi|^2 \right) + \frac{\Delta}{2\xi s} |\Psi|^2 \ln\left(\frac{|\Psi|^2}{e}\right) \right\}.$$
 (1.1)

 $\Psi = A \exp(i\varphi)$ est le paramètre d'ordre complexe d'ODC. et son amplitude A est normalisé à 1 à l'équilibre, c'est à dire $A = \Delta(T)/\Delta(T = 0)$. Voici 2Δ est le gap d'énergie d'ODC en équilibre à T = 0; ξ est la longueur de cohérence $\xi = \hbar v_F / \Delta$, avec v_F la vitesse de Fermi, et s = dydz est la surface par chaîne. Les deux premiers termes donner l'énergie de déformation élastique : compression et cisaillement ; le paramètre de l'anisotropie $\beta \sim 0.1$ caractérise l'anisotropie élastique d'ODC. Le troisième terme est l'énergie d'état fondamental d'ODC, avec un minimum à $|\Psi| = 1$ voir figure 1.2.



FIGURE 1.2 – L'énergie de l'état fondamental d'ODC en fonction de A avec un minimum à A = 1, ce qui stabilise l'état fondamental d'ODC.

Le modèle prend également en compte les interactions coulombiennes, qui deviennent très importantes puisque les déformations d'ODC sont chargées et particulièrement les charges sont concentrées près des cœurs de vortex. H_{el} décrit l'effet du champ électrique local et des transporteurs libres :

$$H_{el} = \int dr^3 \left(\frac{1}{s\pi} \Phi A^2 \partial_x \varphi + \Phi \frac{n(\zeta) - \bar{n}}{d_z} - \frac{\varepsilon}{8\pi} \left| \nabla \Phi \right|^2 + F(n) \right)$$
(1.2)

où le potentiel est censé pour incorporer la charge d'un électron e > 0. dzest que la distance entre deux successive planes. $\epsilon \sim 10$ est la constante diélectrique. $n(\zeta, T)$ est la densité de transporteurs normales locaux par surface dans le plan x,y; $\bar{n}(T) = n(0,T)$ est son moyen, et $n_0 = n(0)$ est estimée à T = 0. La première et la deuxième termes dans équation 1.2 donne l'interaction entre les charges collectif et les charges normales et le champ électrique, et le troisième terme est l'énergie du champ électrique. Le dernier terme F(n) est la densité d'énergie libre des transporteurs normales donnant la définition du potentiel chimique local $\zeta = \partial F/\partial n$. Nous allons supposer, de la spécificité de NbSe₃, que transporteurs normales proviennent d'une poche de petits électrons avec une dispersion elliptique 2D dans le plan x,y, puis

$$n(\zeta) = n_0 \frac{T}{\varepsilon_F} \ln\left(1 + \exp\left(\frac{\varepsilon_F + \zeta}{T}\right)\right)$$
(1.3)

où ε_F est l'énergie de Fermi.

L'évolution du système est régie par des équations dissipatives :

$$-\gamma_A \frac{\partial A}{\partial t} = \frac{\delta H_{tot}}{\delta A}, \qquad (1.4a)$$

$$-\gamma_{\varphi}A^{2}\frac{\partial\varphi}{\partial t} = \frac{\delta H_{tot}}{\delta\varphi}, \qquad (1.4b)$$

$$\frac{\delta H_{tot}}{\delta \Phi} = 0. \tag{1.4c}$$

Voici $\gamma_{A,\varphi}$ sont les coefficients d'amortissement. γ_{φ} peut être liée à la valeur expérimentale de la conductivité collective σ_{ODC} :

$$\gamma_{\varphi} = \frac{\Delta \xi}{4\pi s r_0^2} \frac{1}{\sigma_{ODC}},\tag{1.5}$$

et $\sigma_{ODC} \sim 1000\Omega^{-1}m^{-1}$ (ou $10^{13}s^{-1}$ utilisé dans nos équations) à partir de résultats expérimentaux. A partir des équations (1.4a, 1.4b), on peut montrer que le temps de relaxation de l'amplitude A est $t_A = \left(\frac{\xi}{r_0}\right)^2 \frac{1}{\sigma_{CDW}} \sim 2.10^{-11}s$ - une échelle de temps, qui est à la marge de la crédibilité de la théorie de dissipation de Ginzburg-Landau. Le temps de relaxation de la phase est toujours plus longue que celle pour l'amplitude, de telle sorte que $t_{\varphi} = \left(\frac{L_x, L_y/\beta}{r_0}\right)^2 t_A \sim$ $10^1 t_A$ to $10^6 t_A \sim 10^{-10}$ to $10^{-5}s$, en fonction des régions à l'étude, (L_x et L_y sont les longueurs caractéristiques du processus, variant de la taille de vortex à la taille de l'échantillon). Pour cette raison, on peut mettre à peu près $A \approx 0$, de sorte que l'énergie est localement et instantanément minime par rapport à A. L'argument ci-dessus peut également justifier notre choix de temps final $t_f = 10^8 \times 1/\sigma_{ODC} = 10^{-5}s$ comme un temps fixe pour toutes les variables.

Les équations (1.4) peuvent être développées sous les formes suivantes,

$$-\gamma_A \frac{\partial A}{\partial t} = \frac{\Delta \xi}{2\pi s} \left(-\hat{\nabla}^2 A + A \left(\nabla \varphi \right)^2 \right) + \frac{\Delta}{\xi s} A \ln \left(A^2 \right) + \frac{2\Phi A}{s\pi} \frac{\partial \varphi}{\partial x}, \quad (1.6a)$$

$$-\gamma_{\varphi}A^{2}\frac{\partial\varphi}{\partial t} = \frac{\Delta\xi}{2\pi s}\hat{\nabla}\cdot\left(A^{2}\hat{\nabla}\varphi\right) + \frac{1}{s\pi}\frac{\partial}{\partial x}\left(A^{2}\Phi\right),\quad(1.6b)$$

et l'équation de Poisson pour Φ ,

$$\frac{\varepsilon}{4\pi}\nabla^2 \Phi = -\frac{A^2}{\pi s}\frac{\partial\varphi}{\partial x} - \frac{1}{d_z}\left(n(\zeta) - \bar{n}\right). \tag{1.6c}$$

Les équations (1.4) sont complétées par l'équation de diffusion pour les transporteurs normales :

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla j = \frac{\partial n}{\partial t} - \nabla (\hat{\sigma} \nabla (\zeta + \Phi)) = 0, \qquad (1.7)$$

Ici, $\hat{\nabla} = \partial_x + \beta^2 \partial_y$ est l'opérateur différentiel anisotrope. $\hat{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ s'agit de la conductivité anisotrope, elle sera considérée comme proportionnelle à la concentration des transporteurs, qui est donnée par les mobilités dans chaque direction.

Les conditions aux bords reflètent les propriétés suivantes :

1. Les contraintes normales disparaissent à toutes les bords

$$\left(\frac{\Delta\xi}{2}A^2\hat{\nabla}\varphi - A^2\Phi\vec{x}\right)\cdot\vec{\nu} = 0; \ \hat{\nabla}A\cdot\vec{\nu} = 0.$$
(1.8)

2. Le composant normale du champ électrique est nul à toutes les bords qui signifie que la neutralité électrique totale et le confinement du champ électrique dans l'échantillon :

$$\nabla \Phi \cdot \vec{\nu} = 0. \tag{1.9}$$

3. Pas de flux de courant normal à travers les bords : $-\hat{\sigma} \frac{n}{n_0} \nabla (\zeta + \Phi) = 0$, à l'exception des deux bords source/drain laissés pour les tensions appliquées $\pm V$, où on fixe les potentiels électro-chimiques : $\mu = \zeta + \Phi = \pm V$.

Dans les équations ci-dessus \vec{x} est le vecteur unitaire le long de l'axe de la chaîne, $\vec{\nu}$ est le vecteur unitaire normale sur le domaine vers l'extérieur.

Nous utilisons les paramètres déterminés expérimentalement de la matière et de son état d'ODC. Quand ils ne sont pas bien connus, les relations de type BCS de la théorie de Peierls-Fröhlish sont employés. Le tableau suivant répertorie les paramètres utilisés dans les simulations.

$\varepsilon_F = 6meV$	$\Delta = 25 meV$	T = 5meV
$\xi = 8nm$	$r_0 = 0.6nm$	$d_z = 1.5nm$
$l_{scr} = 1.62nm$	$n_0 = 3.4 \cdot 10^{-3} nm^{-2}$	$\varepsilon \sim 10$
$\sigma_{ODC} = 1000\Omega^{-1}m^{-1} \text{ or} 10^{13}s^{-1}$	$\sigma_x = 1\sigma_{ODC}$	$\sigma_y = 0.01 \sigma_{ODC}$

TABLE 1.1 – Les paramètres utilisés dans la simulation.

Dans ce qui suit, l'unité de temps sera en $1/\sigma_{ODC} = 10^{-13}$ seconde et la taille sera donné en nm.

1.3 Résultats et discussion

1.3.1 Description de la géométrie du problème

La géométrie réelle de la jonction utilisé dans l'expérience [6] est donnée à la figure 1.3, qui est caractérisé par deux fentes se chevauchent à travers l'échantillon (expérimentalement qu'ils sont les coupes faites par la technique de faisceau d'ions focalisé). Les bords à gauche et à droite sont les terminaux où la tension est appliquée. La jonction a été faite avec un matériau d'ODC possédant une conductivité fortement anisotrope, de sorte que le courant passe normalement le long de la grande conductivité direction X. Cependant, les deux fentes force le courant à s'écarter de la direction transversale Y de résistivité élevée, provenant du forte chute de tension à la région centrale rectangulaire. Deux résultats seront présentés ici avec deux géométries différentes. D'abord les résultats de la simpliste géométrie rectangulaire représentant la région active de la géométrie réelle sont donnés, qui ont un sens intuitif. Après nous allons donner ceux-là pour la géométrie réelle.



FIGURE 1.3 - La géométrie réelle de la jonction, et sa partie centrale rectangulaire actif, où les vortex stationnaires reste. Les flèches vertes indiquent le sens du courant.

1.3.2 Résultats pour la géométrie rectangulaire

Nous présentons ici les premiers résultats pour la géométrie rectangulaire. Celui-ci joue un rôle important à affiner la méthode et de comprendre le modèle de la géométrie réelle. Une introduction descriptive du cas rectangulaire sera donnée, tandis que des discussions plus détaillées sont réservés à la géométrie réelle.

Deux régimes de la formation de vortex d'ODC ont été observées lors de la simulation. Le régime transitoire commence à 10^{-11} secondes à 10^{-8} secondes, et le régime de quasi-stable de 10^{-8} à 10^{-7} secondes, lorsque le système se détend dans l'équilibre et un vrai état d'ODC stationnaire est réalisé.

Deux types de dislocations ont été révélés par la simulation : le vortex dynamique et celui stationnaire. Les vortex dynamiques apparaissent en grand nombre dans les bords supérieure et inférieure de l'échantillon au début, voir la figure 1.4, et pendant le régime transitoire, ils créent des turbulences dans le fond d'ODC. La plupart d'entre eux annihilent avec des partenaires de signes opposés ou qu'ils disparaissent sur les bords. Les vortex quasi-stationnaires



FIGURE 1.4 – Instantané d'amplitude à $t = 3 * 10^{-11}$ secondes. Illustration d'apparition de vortex dynamiques. Ils donneront lieu à des turbulences dans le régime transitoire, puis évoluer vers un petit nombre de tourbillons stationnaires à l'étape final. La variation de la couleur du rouge au bleu correspond à la plage d'amplitude de 1 à 0.

sont ceux restant après le régime transitoire dynamique, elles se déplacent lentement à trouver leur position d'équilibre. Pour le modèle de la géométrie rectangulaire et les paramètres réels, nous avons obtenu que le premier vortex stationnaire apparaît à $V = 0.308\Delta(7.7meV)$. Le second vortex stationnaire apparaît à $V = 0.328\Delta(8.2meV)$, le troisième à $V = 0.376\Delta$, et la quatrième à $V = 0.568\Delta$, voir figure 1.5. Le nombre de vortex stationnaires augmente avec la tension appliquée. L'amplitude CDW tend vers zéro au centre du vor-



FIGURE 1.5 – Formation de vortex stationnaires dans la géométrie rectangulaire. Le nombre de vortex augmente avec la tension appliquée. : $V = 0.308\Delta(i), 0.328\Delta(ii), 0.376\Delta(iii), 0.568\Delta(iv), respectivement.$

tex, comme indiqué par la couleur bleue dans figure 1.5. La figure 1.6 montre que la phase circule de 2π autour du point zéro de l'amplitude ce qui prouve que c'est le centre du vortex.

La distribution du potentiel électrique à la présence d'une vortex est représentée sur la figure 1.7. Une forte baisse du potentiel est observée au



FIGURE 1.6 – Phase du paramètre d'ordre complexe au centre du vortex. La circulation de la phase de 2π va autour du centre du vortex. La couleur dans le figure passe de π en rouge à $-\pi$ en bleu.

cœur du vortex, et cela devrait augmenter la probabilité de tunnel d'électron près de le cœur, ce qui peut expliquer les pics dans les spectres tunnel expérimental. Même au-delà de l'effet tunnel, la présence de vortex affecte le



FIGURE 1.7 – Le potentiel électrique Φ pour l'état de seule vortex.

courant normal. Les I-V caractéristiques correspondantes de la jonction sont présentés dans la figure 1.8.

CHAPITRE 1. MODÉLISATION DE RECONSTRUCTION D'ÉTAT DE VORTEX D'ODC



FIGURE 1.8 – Le courant I et le conductivité différentiel dI/dV en fonction de la tension appliquée.

On peut obtenir des configurations différentes pour les vortex (figures 1.9 et 1.10) en faisant varier la valeur du paramètre d'anisotropie β de 0.1 à 0.01. Les seuils trouvés dans ces situations sont du même ordre $\sim 10 meV$, mais les configurations finales sont différentes, ce qui signifie une interaction différente entre les vortex.



FIGURE 1.9 – Paire de vortex est créé avec $\beta = 0.01$ à V = 10 meV.



FIGURE 1.10 – Formation de configuration triangulaire de vortex avec $\beta = 0.01$ à V = 15 meV.

1.3.3 Résultats de la géométrie réelle

Maintenant, nous sommes armés pour aller à des études beaucoup plus difficiles dans la géométrie réelle. Dans la majeure partie de la matière d'ODC nous utilisons le même ensemble d'équation. À l'intérieur des fentes, seulement le champ électrique est présent, qui obéit à l'équation de Laplace. L'ancien stress-libre conditions et les nouveaux conditions aux bords pour les potentiels doivent être définies avec soin dans toute les bords d'échantillon.

La figure 1.11 montre la distribution du potentiel qui aurait lieu s'il n'y a pas de déformation d'ODC, c'est à dire la matière est une simple conducteur avec le conductivité des électrons normaux.



FIGURE 1.11 – La distribution du potentiel électrique en l'absence de déformation d'ODC. Le potentiel chimique est presque identiquement nul, donc il n'y a pas de variations de charge dans l'échantillon. Le profil du potentiel est créé par les charges accumulées aux frontières.

Deux régimes de la formation de vortex d'OCD ont été observées dans les simulations. Le régime initial avec le temps caractéristique de 10^{-11} secondes, (ce qui est à la limite de notre rapprochement dissipative) est le transitoire et turbulent. Pendant ce temps, les éclairs de l'amplitude nulle d'ODC apparaissent aux frontières partout dans les échantillons et à des pointes les fentes, en évoluant vers les vortex bien structurés, comme indiqué dans les figures 1.12. Les phénomènes de l'annihilation entre deux vortex de signes opposés et de la destruction des vortex près des limites sont observées. Le nombre de vortex qui participent au processus transitoire est beaucoup plus

CHAPITRE 1. MODÉLISATION DE RECONSTRUCTION D'ÉTAT DE VORTEX D'ODC

grande que celle (une ou deux) reste à l'état stationnaire. Dans le régime quasi-stationnaire, le vortex ou les vortex restes se déplacent plus lentement pour trouver les positions d'équilibre. Enfin de 10^{-6} seconde à 10^{-5} seconde le système relaxe vers l'équilibre stationnaire. Le temps d'évolution est deux ordre plus long dans le modèle géométrique réelle que dans le modèle de géométrie rectangulaire, qui peut être provoquée par l'effet de la taille et de la complexité de la géométrie. Toute l'évolution du système peut être vu dans les films disponibles sur le site [13].



FIGURE 1.12 – Traces de suppression d'amplitude afficher un état transitoire pendant la formation de vortex dans la jonction. La variation de la couleur du rouge au bleu correspond à l'échelle d'amplitude de 1 à 0.

Il est à souligner que l'origine fondamentale de l'énergie de seuil peut être liée à la brisure de la cohérence entre chaînes dans les ODC. Pour ce faire, il faut une différence de tension critique $\delta V_{cr} \sim \sqrt{J_y} \sim \beta$, qui dépend de l'énergie de couplage entre chaînes J_y . Pour la géométrie réelle, nous avons obtenu que le premier vortex stationnaire apparaît à $V = 0.27\Delta(6.7meV)$, le second entre à $V = 0.32\Delta(8meV)$, voir figure 1.13. Dans cette figure, l'amplitude d'ODC disparaît en continu à des noyaux de vortex (montré dans la couleur bleue), alors qu'il reste presque imperturbable et proche de sa valeur normalisée 1 (en rouge) pour la majeure partie de la jonction.

Si le glissement général d'ODC a été autorisée, la conversion entre le condensat d'OCD et les électrons normaux qui pourrait arriver à ces noyaux de vortex, où l'état d'OCD est détruit [14]. Cependant, dans nos simulations, nous avons utilisé les conditions aux bords, qui ne permettent pas le glissement global. C'est la demande expérimentale que : le courant longitudinale normale a été maintenue en dessous du seuil de désancrage, également une injection latérale a été utilisé dans des expériences plus sophistiquées.

La phase passe par 2π autour du cœur de vortex comme on le voit sur la figure 1.14. En outre, il existe les rotations de 2π pour la phase sur les bords des fentes montrant qu'il existe aussi des vortex virtuels cachés dans le vide des fentes. La déformation élastique de la phase donne le gradient de phase au niveau des parties gauche et droite de la jonction, et des lignes sur lesquelles la phase passe de $-\pi$ à π sont liés à la trace des processus de



FIGURE 1.13 – Finale état stationnaire de vortex. Formation de vortex stationnaires dans la géométrie réelle. Le nombre de vortex augmente avec la tension appliquée. : $V = 0.27\Delta$ (i), 0.32Δ (ii), respectivement.

glissement de phase (voir la figure 1.12), qui ont été fournies par les passages de vortex à travers la jonction.



FIGURE 1.14 – La phase du paramètre d'ordre complexe à l'état final. La phase tourne par 2π contournant les vortex et aussi des centres de vortex virtuels cachés dans les fentes. Dans la carte des couleurs, la phase passe de $-\pi$ à π en rouge en bleu.

Les distributions du potentiel électrique de l'état d'un seul vortex stationnaire est donnée dans la figure 1.15 (a). La charge électrique totale sur le cœur de vortex est égal à zéro, mais le fort moment dipolaire électrique est intégré, induisant ainsi le champ électrique qui lui donne une forte baisse du potentiel Φ autour du cœur de vortex. Cela devrait accroître la probabilité d'effet tunnel de paires électron-trou près du cœur qui peut expliquer les pics observés dans les spectres tunnel expérimental. La figure 1.15 montre les distributions du potentiel électrique Φ (a), et une variation encore plus forte est observée pour le potentiel chimique ζ (b), et donc pour la concentration normale $n(\zeta)$. Mais pour le potentiel électro-chimique, la somme de Φ et μ , les variations presque se compensent mutuellement, donc μ , et plus le courant, sont insensibles à la présence de vortex qui n'était pas facile à prédire. Les courbes de μ , ζ , and Φ à travers le centre du vortex est donnée dans la

CHAPITRE 1. MODÉLISATION DE RECONSTRUCTION D'ÉTAT DE VORTEX D'ODC

figure 1.16. Il montre que Φ et ζ connaître des chutes fortes dans le noyau et que les deux sont non-monotone. En outre, le potentiel Φ a son signe inversé au centre du vortex - qui n'était pas prévu par les théories analytiques et en régime statique. L'effet apparaît seulement si les courants normaux sont autorisés.



FIGURE 1.15 – Les distributions de potentiel électrique Φ (a) et du potentiel chimique ζ (b) de l'état stationnaire d'un seul vortex. Les fortes variations sont confinés dans le cœur du vortex. Constater l'inversion de signe de la potentiel à travers du noyau de vortex.



FIGURE 1.16 – Les courbes de μ , ζ , and Φ traversant verticalement le cœur du vortex. Notez le comportement non monotone de ζ et l'inversion de signe pour le potentiel.

Même au-delà des effets de vortex, il est instructif de comparer la tendance générale du potentiel électrique dans l'état reconstruit d'ODC (figure 1.15 a) avec celle sans les déformations d'ODC (figure 1.11). Pour le second cas,

nous avons constaté que la densité de trans normaux est imperturbable, $\zeta \equiv 0$ dans le volume, à l'exception de quelques variations de charges ~ 10% concentrées le long des bords dans une bande étroite, apparemment invisible de l'ordre de la longueur de écrantage $l_{scr} \approx 1.62nm$. Le rôle de avoir les charges dans les bords est de créer le potentiel électrique dans la figure 1.11 qui conduit le courant normal. Il s'agit d'un régime totalement dominée par le champ électrique. Dans le cas actuel des déformations d'ODC existant, le charge collective apparaît, qui neutralise, localement et presque exactement, les charges normales, permettant ainsi des variations de leur concentration dans le volume. Figure 1.15 et figure 1.16 montrent que maintenant les deux Φ et ζ contribuer à μ , et de plus ζ domine sur Φ inversant ainsi une image naïve d'un conducteur passif. Dans ce régime réel, le courant est dominé par la diffusion entraîné par le gradient de potentiel chimique. On peut interpréter le création de grand nombre de vortex et les processus de glissement de phase qui se déroulent au-delà de la jonction intérieure comme le passage entre les deux régimes de courants normaux dominés soit par champ électrique ou la diffusion.

Les caractéristiques I-V de la jonction dans la zone de V à l'apparition de première vortex sont représentées sur la figure 1.17. La conductivité non linéaire est observée lorsque le vortex stationnaire s'installe à la jonction, et le pic de la conductivité différentielle dI/dV correspond qualitativement à celle de l'expérience [6]. L'augmentation de courant est plutôt petit, et nous sommes enclins à penser qu'une contribution plus forte provient de l'effet tunnel dans les vortex.

Nous avons élargi la zone de tension V d'études à des valeurs aussi élevées que 2Δ pour couvrir tout l'intervalle accessible expérimentalement. Pour la géométrie rectangulaire le nombre de vortex n'augmente pas au-dessus de 5. Pour la géométrie réelle de fentes, le nombre de vortex stationnaires atteint 2, puis à une tension plus élevée de nouveaux vortex stationnaires apparaissent, mais au-delà de la zone de jonction centrale. Nous pouvons deviner que le pic expérimental solide à 2Δ ne correspondent à la création de tunnels des paires e - h (électron - trou) qui se déroulent que dans les cœurs de vortex formant les jonctions auto-accordées de taille atomique.



FIGURE 1.17 – La courant I et la conductivité dI/dV différentielle par rapport à la tension appliquée.

Chapitre 2

Conclusion

Dans cette thèse, nous avons effectué un programme de modélisation des états hétérogènes et stationnaires, et leur dynamique transitoire pour l'ODC dans des géométries réglementés sous la tension appliquée et les courants passantes. Le but était de voir la reconstruction de l'état d'ODC par la prolifération des lignes de dislocation - les vortex d'ODC.

Les modèles prenant en compte de multiples champs en interactions mutuelles et non linéaires : les deux composantes du paramètre d'ordre complexe d'ODC, et les distributions du potentiel électrique, des densités et des courants de deux types de porteurs normaux. Les études les plus détaillées ont été basées sur l'équation de type Ginzburg-Landau dissipatif pour le paramètre d'ordre, elle a été complétée par des équations de diffusion non linéaire des porteurs normales et pour le potentiel électrique.

Les résultats obtenus élucident les observations expérimentales. Nous avons confirmé l'existence de tensions de seuil au-dessus duquel les vortex sont créés à l'intérieur de la jonction. Nous avons constaté que le nombre de vortex augmente progressivement avec la tension appliquée. Les simulations récupèrent une caractéristique importante que la chute de tension se concentre sur les cœurs des turbulences, qui fonctionnent comme de l'autoréglé tunnel micro-jonctions, et ce phénomène explique les pics observés expérimentalement dans les courbes de I-V. La dynamique transitoire est très riche illustrant la création, de l'annihilation et de balayage de vortex multiples.

Les méthodes peuvent être étendues à d'autres types d'organisation de charge connue sous le nom général du cristal électronique. Elle prend des formes de cristaux de Wigner à hétéro-jonctions et en nano-fils, d'ODC dans les composés de la chaîne, des ondes de densité de charge dans les conducteurs organiques, et des bandes d'oxydes dopés. La reconstruction en étude dans les jonctions d'ODC peut être reliée aussi aux efforts modernes des transformations à effet de champ dans les matériaux fortement corrélés avec une brisure de symétrie spontanée.

La plupart des résultats présentés ont été publiés brièvement dans [15, 16]. Les films après la modélisation sont disponibles sur le site Web [13].

Bibliographie

- In S. Brazovskii, N. Kirova, and P. Monceau, editors, *Proceedings of the International Workshops on Electronic Crystal-ECRYS 2008*, volume 404. Physica B, 2008.
- [2] In S. Brazovskii, N. Kirova, and P. Monceau, editors, International Research School and Workshop on Electronic Crystals ECRYS 2011, volume 407. Physica B, 2011.
- [3] S. Brazovskii. J Supercond Nov Magn, 20:489–493, 2007.
- [4] S. Brazovskii. In S. Brazovskii, N. Kirova, and P. Monceau, editors, Proceedings of the International Workshops on Electronic Crystal-ECRYS 2008, volume 404, pages 482–486, 2009.
- [5] Yu. I. Latyshev, P. Monceau, S. Brazovskii, A. P. Orlov, and T. Fournier. *Phys. Rev. Lett.*, 95 :266402, 2005.
- [6] Yu. I. Latyshev, P. Monceau, S. Brazovskii, A. P. Orlov, and T. Fournier. *Phys. Rev. Lett.*, 96 :116402, 2006.
- [7] Serguei Brazovskii, Christophe Brun, Zhao-Zhong Wang, and Pierre Monceau. Phys. Rev. Lett., 108 :096801, 2012.
- [8] D. Le Bolloc'h, V. L. R. Jacques, N. Kirova, J. Dumas, S. Ravy, J. Marcus, and F. Livet. *Phys. Rev. Lett.*, 100 :096403, 2008.
- [9] Yu. I. Latyshev, P. Monceau, S. A. Brazovskii, T A. P. Orlov, Yamashita, and L. N. Bulaevskii. *Phys. Stat. Sol.* (c), 3:3110, September 2006.
- [10] S. Brazovskii, N. Kirova, H. Requardt, F. Ya. Nad, P. Monceau, R. Currat, J. E. Lorenzo, G. Grübel, and Ch. Vettier. *Phys. Rev. B*, 61 :10640– 10650, 2000.
- [11] H. Requardt, F. Ya. Nad, P. Monceau, R. Currat, J. E. Lorenzo, S. Brazovskii, N. Kirova, G. Grübel, and Ch. Vettier. *Phys. Rev. Lett.*, 80 :5631–5634, 1998.
- [12] S. Brazovskii and S. I. Matveenko. Sov. Phys. JETP, 74:864, May 1992.
- [13] http://lptms.u-psud.fr/membres/brazov/Slit1.mpg, and http:// lptms.u-psud.fr/membres/brazov/Slit2.mpg.

- [14] Denis Feinberg and Jacques Friedel. Imperfection of charge density waves in blue bronzes. Low-dimensional electronic properties of molybdenum bronzes and oxides. Kluwer Academic Publishers, 1989.
- [15] T. Yi, Y. Luo, A. Rojo-Bravo, and S. Brazovskii. *Physica B*, 407 :1839– 1844, 2012.
- [16] T. Yi, Y. Luo, A. Rojo-Bravo, N. Kirova, and S. Brazovskii. J. Supercond. Nov. Magn., 25 :1323–1327, 2012.