

MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE



UNIVERSITÉ MOULOUD MAMMARI DE TIZI-OUZOU  
FACULTE DES SCIENCES  
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE



LABORATOIRE DE PHYSIQUE ET CHIMIE QUANTIQUE

## MEMOIRE DE MASTER

Filière : Physique  
Option : Nanophysique

Présenté par :  
**Louifi Sarah**

Thème

*Etude théorique d'une jonction de Josephson à base du  
supraconducteur  $MgB_2$*

Devant le jury d'examen composé de :

LOUNIS	Amel	Maître de Conférences A	U.M.M.T.O.	Président
ZENIA	Hand	Maître de Conférences A	U.M.M.T.O.	Rapporteur
MEGCHICHE	El Hocine	Professeur	U.M.M.T.O.	Examineur

Soutenue publiquement le : 16/07/2022

# Résumé

*Nous proposons dans ce travail d'étudier un modèle théorique d'une jonction de Josephson à base du supraconducteur  $MgB_2$  en se basant sur la théorie BSC qui rend bien compte de la supraconductivité de  $MgB_2$ . L'interaction attractive entre les électrons est modélisée par un terme coulombien de contact avec une valeur appropriée. La jonction/partie centrale (normale) est modélisée par l'ajout d'un terme de corrélation/interaction électronique donnant le modèle de Falikov- Kimbel. Ce dernier est traité dans la théorie du champ moyen dynamique (DMFT) qui donne une solution analytique pour la self-energie due aux interactions coulombiennes. Nos résultats seront ensuite confrontés aux résultats expérimentaux et théoriques disponibles.*

**Mots-clés :** *Jonction de Josephson,  $MgB_2$ , BCS, DMFT.*

# Abstract

*We propose in this work to study a theoretical model of a Josephson junction based on the  $MgB_2$  superconductor, using the BSC theory which gives a good account of the the superconductivity of  $MgB_2$  . The attractive interaction between the electrons is modeled by a coulombic contact term with an appropriate value. The junction/central (normal) part is modeled by the addition of a correlation/electronic interaction term giving the Falikov-Kimbel model . The latter is treated in the dynamic mean field theory (DMFT) which gives an analytical solution for the analytical solution for the self-energy due to coulombic interactions. Our results will then be compared with the available experimental and theoretical results .*

**Key words :** *Josephson Junction,  $MgB_2$ , BCS, DMFT.*

*Je dédie ce travail  
à mes Parents  
à mes Sœurs*

*Sarah Louifi*

# Remerciements

*Ce travail d'initiation à la recherche a été réalisé au sein du Laboratoire de Physique et Chimie Quantique (LPCQ) de l'Université Mouloud MAMMERI de Tizi Ouzou .*

*Mes premiers remerciements vont à Mr ZENIA Hand, mon promoteur , j'ai bien eu de la chance d'initier au travail de la recherche avec lui ,je ne m'attendais vraiment pas du tout à rencontrer une personne aux qualités humaines extraordinaires, à la bienveillance naturelle et à la gentillesse inégalée , je vous en serai à jamais reconnaissant à votre patience envers mes vastes lacunes d'études.Merci.*

*Avant d'entamer la présentation du travail en question, je tiens à remercier le Professeur BOUZAR Hamid, directeur du laboratoire LPCQ pour son accueil,au sein du Laboratoire (LPCQ) .*

*Je remercie également l'ensemble des enseignants de l'UMMTO qui ont contribué à ma formation au long de mon cursus au sein de cette université.*

*Je suis honoré et je remercie Mme LOUNIS Amel d'avoir accepté de présider le jury, et le Professeur MEGCHICHE El Hocine d'examiner ce travail. Merci pour votre disponibilité.*

*Je remercie l'ensemble de mes amies de la promotion, pour vos agréables souvenirs*

*Je remercie mes ami(e)s, Wafa,Kenza,Katia, Romeissa, sans oublier les doctarants Cylia Bensaid,Nait Djoudi Abdelkarim, Hara Menad pour vos conseils et votre disponibilité à tout moment et tous les autres dont je ne peux pas citer les noms.*

*Mes derniers remerciement et non des moindres, sont adressés à mes parents et sans lesquels je n'aurais pu faire ce travail.*

# Table des matières

Table des matières . . . . .	i
Table des figures . . . . .	iii
Liste des tableaux . . . . .	iv
<b>Introduction générale</b>	<b>1</b>
<b>Introduction Générale</b>	<b>1</b>
<b>1 Supraconductivité : Historique et Applications</b>	<b>3</b>
1.1 Découverte et Premières Tentatives d'Explication . . . . .	3
1.1.1 Théories phénoménologiques . . . . .	4
1.2 La théorie BCS . . . . .	5
1.3 Effet Josephson . . . . .	7
1.3.1 Les équation de Josephson . . . . .	7
1.3.2 Les applications de l'effet Josephson . . . . .	7
1.4 Les supraconducteurs à haute température critique . . . . .	8
1.5 Conclusion . . . . .	9
<b>2 Modélisation Théorique de la Supraconductivité, des Effets de Défauts, et de la Jonction de Josephson</b>	<b>10</b>
2.1 Introduction . . . . .	10
2.2 Seconde Quantification . . . . .	10
2.3 Hamiltonien en Liaisons fortes . . . . .	11
2.4 Nombre/densité de paires de Cooper . . . . .	11
2.5 Fonction de Green de Matsubara . . . . .	11
2.6 Etude dans le Massif . . . . .	12
2.6.1 Le Modèle de Hubbard Attractif . . . . .	12
2.6.2 Équation de Mouvement de G et Fonctions F . . . . .	12
2.6.3 Calcul du Gap . . . . .	15
2.6.4 Calcul du Supercourant et du Courant Critique . . . . .	16
2.7 Effets de Défauts . . . . .	17
2.7.1 Le modèle de Falicov-Kimball . . . . .	17
2.7.2 La théorie du champ moyen dynamique . . . . .	18
2.7.3 Algorithme de la DMFT . . . . .	18
2.8 Modélisation d'une Jonction de Josephson . . . . .	19

<b>3</b>	<b>MgB<sub>2</sub></b>	<b>20</b>
3.1	Introduction . . . . .	20
3.2	Données Expérimentales . . . . .	20
3.3	Structure Electronique . . . . .	21
3.4	Nos Calculs Théoriques . . . . .	22
3.4.1	Paramétrisation en Liaisons Fortes . . . . .	22
3.4.2	Deux Bandes Effectives et Interactions . . . . .	22
3.4.3	Calcul des Gaps et Comparaison à l'Expérience . . . . .	23
3.4.4	Courant Critique en Fonction de la Temperature et Comparaison . . . . .	24
3.4.5	Effets des Défauts : Gap et Courant et Critique . . . . .	27
3.4.6	Jonction de Josephson : Travail Préliminaire . . . . .	29
	<b>Conclusion générale</b>	<b>30</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>30</b>

# Table des figures

1.1	Comparaison de la courbe de dispersion pour un métal normal avec un métal supraconducteur . . . . .	6
1.2	schéma représentant une Jonction Josephson [2] . . . . .	7
1.3	Evolution des températures critique $T_c$ les plus élevés en fonction de l'année de leurs découverte [3] . . . . .	8
2.1	jonction de josephson . . . . .	19
3.1	Bandes d'énergie de $MgB_2$ calculés par TB-LMTO(rouge) et en liaisons fortes(noir) le long des directions de haute symétrie de la première zone de Brillouin . . . . .	22
3.2	Densités d'états partielles 2D pour le modèle à deux bandes effectives de $MgB_2$ . . . . .	24
3.3	Comparaison entre les gaps de $MgB_2$ calculés dans le présent modèle et ceux déterminés expérimentalement par by Gonnelli <i>et al.</i> [4]. . . . .	24
3.4	Supercourant (en unités de $t_{hop}/(\hbar a^2)$ ) dans $MgB_2$ en volume comme fonction du gradient $Q$ à la température de $T = 5.8$ K. . . . .	25
3.5	Courant critique (en unités de $t_{hop}/(\hbar a^2)$ ) dans $MgB_2$ en volume comme fonction de la temperature. . . . .	26
3.6	Courant critique (en unités de $(A/cm^2)$ ) dans $MgB_2$ en volume comme fonction de la temperature [29]. . . . .	27
3.7	Gaps en fonction de la concentration en impuretés $w_1$ pour $U_{FK} = 2$ eV et à la temperature $T = 23.2$ K. $w_1$ varie de 0.01 à 0.1. Les lignes en tirets correspondent au cas pur $U_{FK} = 0$ . . . . .	27
3.8	Gap en fonction de la temperature pour $MgB_2$ en présence d'un forte diffusion interbandes qui resulte en des paramètres attrctifs moyennés. Tous les $U$ sont fixés à 0.745 eV. . . . .	28
3.9	Gap $\Delta_\alpha$ en fonction du nombres de plans $\alpha$ pour une jonction de 670 plans avec une barrière de 20 plans . On montre que la moitié de la jonction puisque l'autre moitié est obtenue avec smétrie .La température est de 25,53, la $T_C$ qui correspond au massif où l'interaction de Hubbard est la même que celle de la barrière. . . . .	29

# Liste des tableaux

3.1	Les paramètres TB utilisés pour générer les deux bandes effective de MgB <sub>2</sub> . . . . .	23
-----	---	----



# Introduction Générale

La supraconductivité est l'un des phénomènes les plus intéressants dans la physique du solide tant par ses retombées technologiques énormes que par le défi qu'elle pose à sa compréhension d'un point de vue fondamental. En effet l'absence de résistance électrique est souhaitable dans la mesure où une grosse partie de l'énergie électrique produite par des générateurs est dissipée lors de son transport via des fils électriques ordinaires, à base de cuivre par exemple, par effet Joule. La possibilité offerte par une éventuelle réalisation de la supraconductivité à température ambiante est dès lors d'un bénéfice énorme pour l'économie, mais aussi pour l'environnement. A l'échelle mésoscopique la fabrication de circuits électroniques à base de supraconducteurs permet non seulement de réduire considérablement leur consommation en énergie électrique, mais également leur performances en terme de leur vitesse de traitement des données (processing speed). Bien que actuellement la supraconductivité n'est réalisable qu'à très basse température, les supraconducteurs sont déjà largement utilisés pour la génération de champs magnétiques puissants, indispensables dans applications aussi variées que l'imagerie médicale (IRM) et dans les accélérateurs de particules. Ils sont également utilisés dans la détection et la mesure de faibles champs magnétiques, comme dans le SQUID (superconducting quantum interference device) basé sur des boucles contenant des jonctions de Josephson.

Le but de ce travail est de modéliser par des techniques théoriques assez avancées des jonctions de Josephson à base d'un supraconducteur  $\text{MgB}_2$  dans le but de dégager des paramètres contrôlables en principe expérimentalement afin d'optimiser leur caractéristiques. Le choix du cadre théorique mis en œuvre dans ce travail est dicté par la difficulté, voire l'impossibilité de mener une étude pareille dans le cadre traditionnel des méthodes dites de premiers principes. Même si ces dernières sont couramment, utilisées par exemple, pour calculer les constantes de couplage électrons-phonons, il n'en reste pas moins que le problème de la supraconductivité relève des méthodes à plusieurs corps, en sus du fait que les propriétés à étudier dépendent de la température.

Pour une jonction de Josephson le facteur de qualité est donné par le produit du courant critique  $I_c$  qui peut traverser la jonction et de la résistance  $R_n$  qui vient principalement de la barrière entre les deux "électrodes". Le courant critique lui par contre dépend à la fois des électrodes supraconductrices, leurs gaps et leurs températures de transition, et de la barrière, notamment son épaisseur. Le facteur  $I_c R_n$  donne la vitesse à laquelle la jonction change d'état et par conséquent la fréquence opérationnelle associée pour les circuits électroniques à base de ces jonctions.

Le choix porté sur le matériaux est dicté par plusieurs facteurs, le principal étant la température critique relativement élevée à laquelle  $\text{MgB}_2$  devient supraconducteur, même si cette température reste assez basse comparativement à celles d'autres matériaux. Le facteur le plus attractif reste néanmoins celui de la facilité avec laquelle  $\text{MgB}_2$  se prête à en fabriquer des conformations variées comme sous forme de films minces ou de fils, ce qui permet une meilleure intégration avec les

---

composants couramment utilisés dans les circuits électroniques. En outre, l'abondance naturelle des deux éléments constitutifs, à savoir le magnésium et le bore, fait que les coûts de fabrication à grande échelle des composants à base de  $\text{MgB}_2$  restent abordables et donc les prix seront eux aussi abordables pour le consommateur final.

D'un point de vue fondamental  $\text{MgB}_2$  est un matériau qui présente des caractéristiques nouvelles parmi les supraconducteurs dits conventionnels avec lesquels il partage le fait que l'attraction effective, entre les électrons, responsable de la formation des paires de Cooper est due aux vibrations du réseau atomique. La particularité de  $\text{MgB}_2$  vient de ce qu'il possède deux gaps alors que les autres n'en possèdent qu'un seul. Ceci est dû notamment à l'anisotropie qui caractérise ses propriétés électroniques, composition et forme de sa surface de Fermi, et qui sont reflétée aussi dans d'autres propriétés thermodynamiques de  $\text{MgB}_2$  à l'état supraconducteur.

# Supraconductivité : Historique et Applications

Dans ce chapitre nous introduisons les notions de base sur la supraconductivité tels que traités dans des livres de référence comme Kittel [5] et Ibach et Lüth [6] et qui sont supposés être enseignés en graduation. Les méthodes théoriques avancées pour l'étude de la supraconductivité à l'échelle microscopique seront introduites dans le chapitre suivant.

## 1.1 Découverte et Premières Tentatives d'Explication

La supraconductivité [7] est un phénomène purement quantique qui se manifeste à l'échelle macroscopique par deux effets fondamentaux : d'une part l'absence de résistivité en dessous d'une certaine température critique  $T_c$ , un effet découvert par Kamerling Onnes et Gilles Holst en 1911 [8] [9], et d'autre part le diamagnétisme parfait caractérisé par l'expulsion totale de faibles flux magnétiques de l'intérieur d'un supraconducteur, effet découvert par Meissner-Ochsenfeld en 1933 et qui porte le nom "effet Meissner".

La supraconductivité fut découverte par Kamerling Onnes et Gilles Holst dans un specimen de mercure suite à la première liquifaction réussie de l'hélium réalisée par Onnes trois ans plus tôt. La mesure de la résistance du mercure montra qu'elle diminue avec la température jusqu'à ce qu'elle chute brutalement pour s'annuler au-dessous de 4.5 K. Du fait que la résistivité d'un supraconducteur est nulle un supercourant généré dans une boucle supraconductrice circule indéfiniment sans dissipation. Depuis sa première découverte dans le mercure la supraconductivité a été observée dans plusieurs autres systèmes à l'instar des éléments purs (Al, Pb, Nb..), des alliages (NbTi), des composés intermétalliques (Nb<sub>3</sub>Sn), des céramiques (YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-d</sub>), des matériaux bidimensionnels (graphène), des composés organiques. Certains éléments ne deviennent supraconducteurs que sous pression (Si). La mesure de la contribution électronique à la capacité calorifique  $c_e$  dans l'état normal et dans l'état supraconducteur montre que ce dernier possède une entropie plus faible ; ce qui indique clairement que dans l'état supraconducteur les électrons sont plus ordonnés que dans l'état normal. De plus la dépendance en exponentielle de  $c_e$  en fonction de la température ( $c_e \propto \exp[-2\Delta/k_B T]$ ) ( $k_B$  la constante de Planck) au-dessous de  $T_c$  indique, de manière similaire à semi-conducteur, l'existence d'un gap  $\Delta$ , dans le spectre des excitations électroniques, qui est absent dans l'état normal. Le gap  $\Delta(T)$  diminue avec la température de sa valeur maximale à  $T = 0$  pour s'annuler à  $T_c$ . D'autre part, la discontinuité de  $c_e(T)$  et la continuité de  $\Delta(T)$  à la température de transition indiquent que la

transition état normal-état supraconducteur est de second ordre.

L'observation de l'effet Meissner est un critère essentiel qui différencie un supraconducteur d'un conducteur parfait ayant une résistivité nulle, ce dernier ne pouvant expulser le champ magnétique de son intérieur. L'effet Meissner fut compris comme étant dû à la génération d'un supercourant à la surface du supraconducteur créant à l'intérieur du matériau une aimantation qui s'oppose exactement au champ extérieur et expulse le champ magnétique donnant  $B = 0$  à l'intérieur du supraconducteur. Par contre, si le champ est suffisamment fort, le diamagnétisme ne peut plus le contrer et deux situations se présentent : soit la supraconductivité est détruite au-delà d'un champ critique  $H_c$ , et on parle alors d'un supraconducteur de type *I*, soit le champ pénètre à l'intérieur du supraconducteur au-dessus d'un champ critique  $H_{c1}$ , le matériau restant supraconducteur jusqu'à un champ critique  $H_{c2} > H_{c1}$ , et on parle alors d'un supraconducteur de type *II*. Dans ce dernier l'effet Meissner est partiel entre  $H_{c1}$  et  $H_{c2}$  et le champ  $B$  pénètre sous forme de tubes de flux formant des vortex à l'intérieur du supraconducteur. Ces derniers sont dus à des supercourants qui empêchent le champ de pénétrer à l'extérieur des tubes. Un fait important fut établi/remarqué où le flux magnétique  $\Phi$  à l'intérieur de chaque tube est quantifié et est un multiple entier d'un flux élémentaire  $\Phi_0 = h/2e$ , où  $h$  est la constante de Planck et  $e$  est la charge élémentaire.

Il a fallu plus de deux décennies après la découverte de la supraconductivité pour que les théoriciens se penchent sur son explication à travers différentes théories phénoménologiques dont la théorie des frères London qui rend compte de l'effet Meissner et la théorie de Ginzburg-Landau qui permet de rendre compte d'autres propriétés en plus de l'effet Meissner.

## 1.1.1 Théories phénoménologiques

### 1.1.1.1 Les équations de London

La première tentative d'explication du comportement des électrons dans un supraconducteur était celle des frères London en 1934 [10]. Leur description phénoménologique est basée sur deux équations fondamentales combinée avec les équations de Maxwell [11] [12] :

$$\frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t} = \frac{1}{\mu_0 \lambda_L^2} \mathbf{E}, \quad (1.1)$$

et

$$\nabla \times \mathbf{J} = \frac{1}{\mu_0 \lambda_L^2} \mathbf{B}, \quad (1.2)$$

où  $\mathbf{J}$  est le supercourant,  $\mathbf{E}$  est le champ électrique,  $\mathbf{B}$  est le champ magnétique, et  $\lambda_L$  est une longueur caractéristique. Cette dernière est appelée longueur de pénétration ou épaisseur de London ; elle correspond à la distance sur laquelle le champ magnétique passe de sa valeur  $B_0$  à la surface du supraconducteur à une valeur nulle à l'intérieur de celui-ci. En d'autres termes elle définit également la pénétration du courant de surface  $\mathbf{J}$ .

Cette théorie rend compte de l'effet Meissner sans pour autant expliquer son origine, ni encore la problématique de l'absence de résistivité dans un supraconducteur.

### 1.1.1.2 La théorie de Ginzburg-Landau et les deux types de supraconducteurs

La théorie phénoménologique<sup>1</sup> de Ginzburg-Landau proposée en 1950 [13] est basée sur la description des transitions de phases du second ordre (ou continues) où le paramètre d'ordre  $\psi$  est posé comme un scalaire complexe. Il s'avérera pas la suite que  $\psi$  n'est rien d'autre que la fonction d'onde décrivant l'état des électrons supraconducteurs [14]. Dans cette théorie la densité de porteurs est donnée par le module de la fonction d'onde décrivant l'état de ces porteurs  $n_s(r) = |\psi(r)|^2$ . Comme pour le magnétisme par exemple il s'agit ici de procéder à un développement de l'énergie libre du système comme fonction du paramètre d'ordre et autour de la température critique de transition de l'état normal vers l'état supraconducteur, où l'énergie libre  $F$  est donnée par :

$$F = \int \alpha |\psi|^2 + \beta |\psi|^2 \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - qA \right)^2 \psi dr \quad (1.3)$$

$$\left( \frac{\delta F}{\delta \psi^*} \right) = 0 \quad (1.4)$$

Ils proposèrent deux équations fondamentales permettant de décrire l'état supraconducteur dont :

$$\alpha \psi + \beta \psi |\psi|^2 + \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - qA \right)^2 \psi = 0 \quad (1.5)$$

$$j = \frac{i\hbar q}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) - \frac{q^2 A}{m} |\psi|^2 \quad (1.6)$$

où  $\alpha$  et  $\beta$  sont des fonctions de la température et  $q$  et  $m$  sont la charge et la masse de la paire. cette théorie introduit deux longueurs caractéristiques dont :

- **la Longueur de cohérence**  $\xi$  : peut être définie comme étant la taille moyenne d'une paire de Cooper elle est donnée par :

$$\xi = \left( \frac{\hbar^2}{2m\alpha} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (1.7)$$

- **la Longueur de pénétration**  $\lambda$  : c'est la longueur sur laquelle le champ magnétique décroît de sa valeur initiale en pénétrant dans le supraconducteur, elle est définie comme

$$\lambda = \left( \frac{m\beta}{\mu_0 q^2 |\alpha|} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (1.8)$$

le rapport entre les deux longueurs définit le paramètre de GL  $\kappa = \frac{\lambda}{\xi}$  qui permet de classer selon sa valeur critique  $\kappa = \frac{1}{\sqrt{2}}$  les supraconducteurs en deux catégories principales, à savoir les supraconducteurs de type I et de type II

## 1.2 La théorie BCS

La théorie microscopique de Bardeen, Cooper et Schrieffer (BCS) Développée En 1957 [15] elle vient justifier les approches phénoménologiques décrites précédemment. En effet la découverte de l'effet

---

1. Cette théorie est fondée sur l'intuition en absence d'une justification microscopique. C'est la théorie BCS qui viendra apporter sa justification quelque temps plus tard.

isotopique renseigne sur l'implication des phonons dans l'apparition de la supraconductivité, cet état l'orsque il est traité en perturbation donne naissance dans un certain régime de fréquence à une interaction effective qui est attractive entre deux électrons il en résulte que deux électrons peuvent s'apparier et former un état lié appelé **paire de Cooper**.

Un électron étant un fermion de spin un demi, un état lié de deux électrons va se compter comme un boson (de spin 0) et par conséquent ces paires en se condensant peuvent former un condensat. l'interaction attractive entre deux électrons au-dessus de la mer de Fermi provoque une instabilité de cette dernière en effet elles forment un état cohérent, d'énergie plus basse que celui du métal normal qui sont non appariés

L'état fondamental proposé par BCS est une superposition cohérente d'états de paires d'électrons qui s'écrit

$$|\Psi\rangle = \prod_{|\vec{k}| \leq k_F} (u_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} c_{\vec{k},\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger) |0\rangle \quad (1.9)$$

où  $|0\rangle$  représente l'état dans la sphère de fermi et  $c_{\vec{k},\uparrow}^\dagger, c_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger$  les opérateurs de créations et d'annihilation respectivement d'un électron de spin  $\uparrow$  et de moment  $\vec{k}$  et  $k_f$  est le vecteur d'onde de Fermi, on a aussi  $|u_{\vec{k}}|^2 + |v_{\vec{k}}|^2 = 1$  avec  $|v_{\vec{k}}|^2$  et  $|u_{\vec{k}}|^2$  représente la probabilité que la paire de Cooper soit occupée ou vide respectivement . Une prédiction remarquable dans le spectre d'excitation électronique d'un tel système est l'existence d'un gap  $\Delta(k)$  comme montré sur la figure ci-dessous :

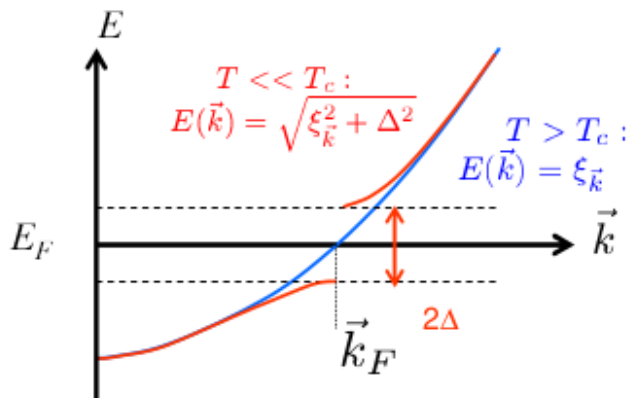


FIGURE 1.1 – Comparaison de la courbe de dispersion pour un métal normal avec un métal supraconducteur

Dans l'état fondamental tout les états de paires sont occupés ou vides, on obtient l'état excité en brisant les paires Cooper avec une énergie égale à  $2\Delta$  et donc la dispersion du supraconducteur est donnée par  $E(k) = \sqrt{\xi_k^2 + \Delta^2}$ .

Le gap supraconducteur est reliée à l'énergie d'excitation des phonons par la ci-dessous, avec  $N(E_f)$  est la densité au niveau de Fermi et  $V$  représente l'interaction attractive ente les électrons et  $\omega_D$  la fréquence de Debye :

$$\Delta = 2h\omega_D \exp\left[-\frac{2}{VN(E_f)}\right] \quad (1.10)$$

L'amplitude du gap à  $T = 0K$  est relié à la température critique avec la relation ci-dessous où  $k_B$  la constante de Boltzman et  $T_C$  la température critique :

$$\Delta(0) = 1.76k_B T_C \quad (1.11)$$

## 1.3 Effet Josephson

Si on considère une mince barrière isolante séparant deux métaux supraconducteurs un effet remarquable apparaîtra, c'est le passage des paires de Cooper par effet tunnel [7], En 1962, B. Josephson a prédit deux effets essentiels [16] :

1. L'effet Josephson continu qui stipule que même en absence de toute tension appliquée aux bornes de la jonction un supercourant apparaîtra entre les deux supraconducteur il a été observé par la première fois par Anderson et Rowel (1963).
2. Effet Josephson alternatif qui est une oscillation du supercourant proportionnelle à la tension au borne de la jonction avec une fréquence  $\omega = \frac{2eU}{h}$

### 1.3.1 Les équation de Josephson

Modélisons une jonction SIS (voir figure ci-dessous) On introduit les deux équation de Josephson

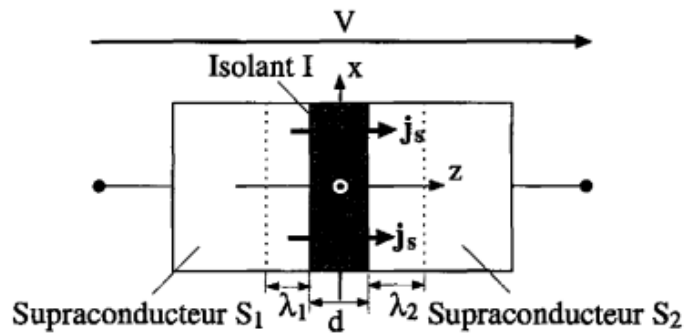


FIGURE 1.2 – schéma représentant une Jonction Josephson [2]

décrivant les effets précédents

$$j_s = j_c \sin \phi \quad (1.12)$$

avec  $j_c$  le courant de Josephson maximal ou critique et  $j_s$  est le supercourant

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{2eU}{h} \quad (1.13)$$

avec  $U$  est la tension appliquée et  $\phi = \phi_2 - \phi_1$  la différence de phase entre les deux supraconducteurs  $S_1$  et  $S_2$  (voir figure 1.2).

### 1.3.2 Les applications de l'effet Josephson

Parmi les succès de l'effet Josephson la fabrication des dispositifs quantiques qui détectent les faibles flux magnétiques même de quelques femtoTesla appelé SQUID ou Superconducting Quantum Interferometric Devices, qui sont utilisés dans un vaste domaine d'applications : magnétométrie, RMN bas champ, géophysique ...

## 1.4 Les supraconducteurs à haute température critique

Avant 1986 la température critique atteinte par les supraconducteurs ne dépasse pas les  $23K$  pour  $Nb_3Ge$  (figure(1.3)), c'est les supraconducteurs conventionnels, jusqu'à ce que Millier et Bednorz [17] montrent qu'un oxyde à base de lanthane, baryum, cuivre et oxygène, devient supraconducteur à une température critique  $T_c = 35K$  ce sont des supraconducteurs à haute température critique (cuprates) , depuis les recherches succèdent pour trouver des supraconducteurs à la température critique plus élevée [2]. Parmi eux, on s'intéressera, ici essentiellement au composé du Diborure de Magnésium  $MgB_2$  ( $T_c$  de l'ordre de  $40 K$ )

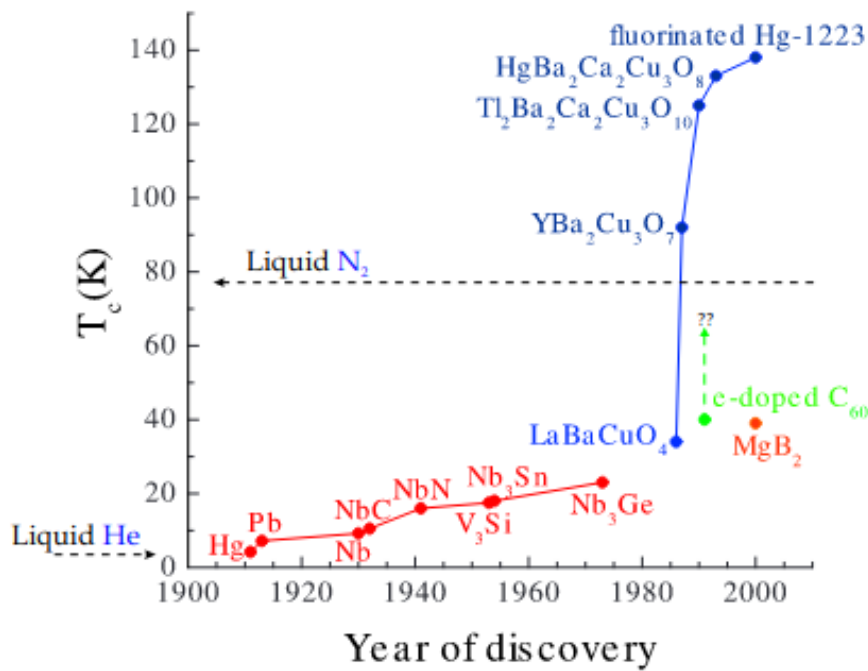


FIGURE 1.3 – Evolution des températures critique  $T_c$  les plus élevées en fonction de l'année de leurs découverte [3]



## 1.5 Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre un bref rappel de la théorie de la supraconductivité et les théories microscopique et phénoménologique fondamentales dont elle se base .

# Modélisation Théorique de la Supraconductivité, des Effets de Défauts, et de la Jonction de Josephson

## 2.1 Introduction

La théorie microscopique de la supraconductivité permet de comprendre plusieurs effets et de les expliquer dans le cas des systèmes homogènes, mais dans le cas des systèmes inhomogènes ( jonction par exemple) la connaissance de l'état fondamentale BCS est insuffisante pour dériver les différentes propriétés qui découlent .

Les théories Bogoliubovs-de Gennes et Gor'kov sont nécessaires pour reformuler la théorie BCS en termes d'équations différentielles [11] , dans notre travail on s'intéressera au formalisme de Nambu-Gor'kov qui appuie sur les fonctions de Green.

## 2.2 Seconde Quantification

Pour étudier un système formé d'un grand nombre de particules fortement corrélés on utilise le formalisme de la seconde quantification [18] , qui consiste à traiter l'état du système par un opérateur champ de matière , cet état est comme étant une combinaison linéaire d'états à différents nombres de particules . Avec l'opérateur champ s'écrit à la base des opérateurs de créations et d'annihilations de particules  $c_{i\sigma}^\dagger$  et  $c_{i\sigma}$  qui agissent dans l'espace de Fock<sup>1</sup> .

On définit les opérateurs de créations et d'annihilations de particules  $c_{i\sigma}^\dagger$  et  $c_{i\sigma}$  le formalisme de la seconde quantification comme suit :

$$c_{i\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger e^{-ikR_i} \quad (2.1)$$

$$c_{i\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k\sigma} c_{k\sigma} e^{ikR_i} \quad (2.2)$$

---

1. C'est la complétion de l'espace de Hilbert

## 2.3 Hamiltonien en Liaisons fortes

Dans le but de déterminer la structure de Bande des électrons en utilise l'approximation des Liaisons fortes dans le cadre de la seconde quantification. introduisant les opérateurs de création et d'annihilation d'un électron sur une orbitale d'un atome sur un site (i) localisé en  $R_i$  et de spin  $\sigma$   $c_{i\sigma}^\dagger$  et  $c_{i\sigma}$  et les coefficients  $t_{ij}$  qui traduisent l'amplitude de sauts des électrons de ce déplacer d'un site à un autre . L'hamiltonien dans ce modèle est donné par [18] :

$$H = \sum_{i\sigma} \epsilon_0 (c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + \sum_{\langle ij \rangle} t_{ij} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}) \quad (2.3)$$

On injectons les équations (2.1) (2.2) dans l'hamiltonien (2.3) , avec  $c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} = n_{k\sigma}$  opérateur nombre d'électrons on trouve

$$H = \sum_{kk'\sigma} \left[ \frac{1}{N} \sum_i \epsilon_0 e^{i(k-k')R_i} + \frac{1}{N} \sum_{ij} t_{ij} e^{ikR_j - ik'R_i} \right] c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} = \sum_{k\sigma} E(k) c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \quad (2.4)$$

Avec

$$E(k) = \sum_{\delta} -t_{\delta} e^{i\delta k}$$

## 2.4 Nombre/densité de paires de Cooper

On définit l'opérateur qui décrit la création d'une paire Cooper introduite par la théorie BCS (qui traduit que la paire est crée par deux électrons de spins opposés) par :

$$\langle c_{i\sigma}^\dagger c_{i-\sigma}^\dagger \rangle = \langle \hat{n}_{i\sigma} \rangle = n_{i\sigma} \quad (2.5)$$

qui est différent de zéro même si le nombre d'électrons est conservé , car on parle des états cohérent dans un supraconducteur et nulle pour un état normale.

## 2.5 Fonction de Green de Matsubara

Il existe plusieurs fonction de Green [19] dont la fonction de Green retardée qui traduit l'amplitude de probabilité de créer au temps  $t$  une particule fermionique de spin  $\sigma$  à la position  $r$ , et de la retrouver **transformée** en une particule de spin  $\sigma'$  à la position  $r'$  au temps  $t'$  ,on la définit comme suit :

$$G^R(r\sigma t, r'\sigma' t') = -i\theta(t - t') \langle c_{\sigma}(r, t) c_{\sigma'}^\dagger(r', t') \rangle^2 \quad (2.6)$$

Avec la moyenne thermodynamique d'un opérateur est donnée par :

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{\text{Tre}^{-\beta \hat{H} \hat{O}}}{\text{Tre}^{-\beta \hat{H}}} \quad (2.7)$$

---

2. c'est une moyenne thermodynamique dans l'ensemble grand canonique et  $\{A, B\}$  l'anti-commutation entre les opérateurs A et B.

Dans le but de calculer les fonction (2.6) une astuce mathématique a été introduite qui stipule que les arguments temps et les fréquences sont des quantités imaginaires (notons que cela n'a aucun sens physique<sup>3</sup>, c'est la fonction de Green Matsubara définit comme suit [19] :

$$G_{ij}(\tau, \tau') = -\langle T_\tau(c_i(\tau)c_j^\dagger(\tau')) \rangle \quad (2.8)$$

où  $T_\tau$  est l'opérateur chronologique temporel en temps imaginaire ( $\tau = it$ ), et donc l'équation 2.8 devient :

$$G_{ij\sigma}(\tau) = -\langle \tau_\tau c_{i\sigma}(\tau)c_{j\sigma}^\dagger(0) \rangle \equiv -Tr(e^{-\beta(H-\mu N)}\tau_\tau c_{i\sigma}(\tau)c_{j\sigma}^\dagger(0))/Z \quad (2.9)$$

Avec  $Z$  la fonction de partition donnée par

$$Z = Tr(e^{-\beta(H-\mu N)})^4 \quad (2.10)$$

La série de Fourier des fréquences de Matsubara, est traduite par la définition suivante :

$$G_{ij}(i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau e^{\frac{i\omega_n\tau}{\beta}} G_{ij}(\tau) \quad (2.11)$$

où  $\beta = \frac{1}{k_B T}$  et  $\omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta}$  est la fréquence Matsubara pour les fermions.

## 2.6 Etude dans le Massif

On utilise le modèle de Hubbard attractif( $U_H = -|U|$ ) pour modéliser l'interaction attractive entre les électrons médiée par des phonons cette interaction est en principe retardée, non localisée dans l'espace direct et en utilisant le découplage Hartree-Fock.

### 2.6.1 Le Modèle de Hubbard Attractif

Le modèle de Hubbard [20] décrit les électrons sur un réseau qui interagissent uniquement l'orsque ils se trouvent sur le même site, l'hamiltonien qui le décrit est écrit comme suit :

$$H = -\sum_{ij\sigma} t_{ij}(c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) - |U| \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \quad (2.12)$$

### 2.6.2 Équation de Mouvement de G et Fonctions F

A fin d'étudier les propriétés d'équilibre du système [20], on étudiera l'équation de mouvement (EOM) de la fonction de Green Matsubara .

Dans la représentation de Heisenberg un opérateur est définit

$$O(\tau) = e^{\tau(H-\mu N)} O e^{-\tau(H-\mu N)} \quad (2.13)$$

---

3. Exemple :le faite de traiter la théorie des circuits électriques avec des nombres complexes, même si tous les courants et tensions sont réels.

4. L'opérateur nombre est donné par  $N = \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}$

On rappelle que l'équation de mouvement de n'importe quel opérateur (2.13) est donnée par

$$\frac{\partial O(\tau)}{\partial \tau} = e^{\tau(H-\mu N)}[H - \mu N, O] - e^{-\tau(H-\mu N)} = [H - \mu N, O(\tau)] \quad (2.14)$$

On réécrit la fonction de Green (2.9) d'une manière explicite on trouve :

$$G_{ij\sigma}(\tau) = -\langle \tau_\tau c_{i\sigma}(\tau) c_{j\sigma}^\dagger(0) \rangle \equiv -\theta(\tau) \langle c_{i\sigma}(\tau) c_{j\sigma}^\dagger(0) \rangle + \theta(-\tau) \langle c_{j\sigma}^\dagger(0) c_{i\sigma}(\tau) \rangle \quad (2.15)$$

### 2.6.2.1 Equation de mouvement $G_{ij\sigma}$ :

On trouve l'équation de mouvement de la fonction de Green (2.15) comme :

$$\left( -\frac{\partial}{\partial \tau} + \mu \right) G_{ij\sigma}(\tau) + \sum_{\delta} t_{ij+\delta} G_{i+\delta j\sigma}(\tau) - \theta(\tau) |u| \langle \hat{n}_{i-\sigma}(\tau) c_{i\sigma}(\tau) c_{j\sigma}^\dagger(0) \rangle + \theta(-\tau) |u| \langle c_{j\sigma}^\dagger(0) \hat{n}_{i-\sigma}(\tau) c_{i\sigma}(\tau) \rangle = \delta(\tau) \delta_{ij} \quad (2.16)$$

### 2.6.2.2 Découplage Hartree-Fock

Dans l'approximation de Hartree-Fock [20]; on aura les moyennes

$$\langle n_{i-\sigma}(\tau) c_{i\sigma}(\tau) c_{j\sigma}^\dagger(0) \rangle, \langle c_{j\sigma}^\dagger(0) n_{i-\sigma}(\tau) c_{i\sigma}(\tau) \rangle \quad (2.17)$$

On voit bien que les moyennes de l'équation(2.17) implique quatre opérateur à évaluer.

L'électron ne peut pas changer son spin pendant qu'il se propage alors les moyennes d'opérateurs de la forme  $\langle c_{i\uparrow}^\dagger(\tau) c_{j\downarrow}(0) \rangle$  disparaissent ( pas d'ordre magnétique ) .

Par conséquent, dans la théorie de Hartree-Fock pour la supraconductivité on prend le cas de  $\sigma = \uparrow$  de l'équation (2.16) on aboutit à :

$$\left( -\frac{\partial}{\partial \tau} + \mu \right) G_{ij\uparrow}(\tau) + \sum_{\delta} t_{ii+\delta} G_{i+\delta j\uparrow}(\tau) - \theta(\tau) |u| \langle n_{i\downarrow} \rangle \langle c_{i\uparrow}(\tau) c_{j\uparrow}^\dagger(0) \rangle - \theta(\tau) |u| \langle c_{i\downarrow}^\dagger(\tau) c_{j\uparrow}^\dagger(0) \rangle \langle c_{i\downarrow}(\tau) c_{i\uparrow}(\tau) \rangle + \theta(-\tau) |u| \langle n_{i\downarrow} \rangle \langle c_{j\uparrow}^\dagger(0) c_{i\uparrow}^\dagger(\tau) \rangle + \theta(-\tau) |u| \langle c_{j\uparrow}^\dagger(0) c_{i\downarrow}^\dagger(\tau) \rangle \langle c_{i\downarrow}(\tau) c_{i\uparrow}(\tau) \rangle = \delta(\tau) \delta_{ij} \quad (2.18)$$

Si on suppose qu'on a l'invariance par translation temporel  $\langle c_{i\downarrow}(\tau) c_{i\uparrow}(\tau) \rangle = \langle c_{i\downarrow}(0) c_{i\uparrow}(0) \rangle$  l'équation (2.18) devient :

$$\left( -\frac{\partial}{\partial \tau} + \mu \right) G_{ij\uparrow}(\tau) + \sum_{\delta} t_{ii+\delta} G_{i+\delta j\uparrow}(\tau) - \theta(\tau) |u| \langle n_{i\downarrow} \rangle \langle c_{i\uparrow}(\tau) c_{j\uparrow}^\dagger(0) \rangle - \theta(\tau) |u| \langle c_{i\downarrow}^\dagger(\tau) c_{j\uparrow}^\dagger(0) \rangle \langle c_{i\downarrow}(0) c_{i\uparrow}(0) \rangle + \theta(-\tau) |u| \langle n_{i\downarrow} \rangle \langle c_{j\uparrow}^\dagger(0) c_{i\uparrow}(\tau) \rangle + \theta(-\tau) |u| \langle c_{j\uparrow}^\dagger(0) c_{i\downarrow}^\dagger(\tau) \rangle \langle c_{i\downarrow}(0) c_{i\uparrow}(0) \rangle = \delta(\tau) \delta_{ij} \quad (2.19)$$

On définit deux fonctions de Green supplémentaires  $F$  et  $\bar{F}$ , que l'on appelle **les fonctions de Green anormales**, elles sont définies comme suit :

$$F_{ij}(\tau) = -\langle T_\tau c_{i\uparrow}(\tau) c_{j\downarrow}(0) \rangle$$

et

$$\bar{F}_{ij}(\tau) = -\langle T_\tau c_{i\downarrow}^\dagger(\tau) c_{j\uparrow}^\dagger(0) \rangle$$

les deux relations sont reliées par  $\bar{F}_{ij}(\tau) = [F_{ji}]^*$  et donc l'équation (2.19) deviendra :

$$\left( -\frac{\partial}{\partial\tau} + \mu \right) G_{ij\uparrow}(\tau) + \sum_{\delta} t_{ii+\delta} G_{i+\delta j\uparrow}(\tau) + |u| \langle n_{i\downarrow} \rangle G_{ij\uparrow}(\tau) + |u| F_{ii}(0^-) \bar{F}_{ij}(\tau) = \delta(\tau) \delta_{ij} \quad (2.20)$$

Il en résulte que EOM de  $G_{ij\sigma}$  nécessite de trouver EOM de  $\bar{F}_{ij}$ .

### 2.6.2.3 Equation de mouvement $\bar{F}_{ij}$ :

Maintenant on introduira EOM de  $\bar{F}_{ij}(\tau)$  [20] :

$$\bar{F}_{ij}(\tau) = -\langle T_\tau c_{i\downarrow}^\dagger(\tau) c_{j\uparrow}^\dagger(0) \rangle = -\theta(\tau) \langle c_{i\downarrow}^\dagger(\tau) c_{j\uparrow}^\dagger(0) \rangle + \theta(-\tau) \langle c_{j\uparrow}^\dagger(0) c_{i\downarrow}^\dagger(\tau) \rangle$$

et donc :

$$\frac{\partial}{\partial\tau} \bar{F}_{ij}(\tau) = -\delta(\tau) \langle c_{i\downarrow}^\dagger(\tau) c_{j\uparrow}^\dagger(0) + c_{j\uparrow}^\dagger(0) c_{i\downarrow}^\dagger(\tau) \rangle - \theta(\tau) \langle \frac{\partial}{\partial\tau} c_{i\downarrow}^\dagger(\tau) c_{j\uparrow}^\dagger(0) \rangle + \theta(-\tau) \langle c_{j\uparrow}^\dagger(0) \frac{\partial}{\partial\tau} c_{i\downarrow}^\dagger(\tau) \rangle$$

avec le premier terme donne

$$\delta(\tau) \langle c_{i\downarrow}^\dagger(\tau) c_{j\uparrow}^\dagger(0) + c_{j\uparrow}^\dagger(0) c_{i\downarrow}^\dagger(\tau) \rangle = \{c_{i\downarrow}^\dagger(0), c_{j\uparrow}^\dagger(0)\} = 0$$

et

$$\frac{\partial}{\partial\tau} c_{i\downarrow}^\dagger(\tau) = e^{\tau(H-\mu N)} [H - \mu N, c_{i\downarrow}^\dagger(0)] - e^{-\tau(H-\mu N)}$$

On a donc

$$[H - \mu N, c_{i\downarrow}^\dagger(0)] = -([c_{i\downarrow}(0), H - \mu N])^+$$

ce qui nous donne

$$\begin{aligned} [H - \mu N, c_{i\downarrow}^\dagger(0)] &= -\sum_{\delta} t_{ii+\delta} c_{i+\delta\downarrow}(0) + |u| n_{i\uparrow}(0) c_{i\downarrow}(0) - \mu c_{i\downarrow}(0) \\ &= -\left( \sum_{\delta} t_{ii+\delta}^* c_{i+\delta\downarrow}^\dagger(0) - |u| n_{i\uparrow}(0) c_{i\downarrow}^\dagger(0) + \mu c_{i\downarrow}^\dagger(0) \right) \end{aligned} \quad (2.21)$$

$$\frac{\partial}{\partial\tau} c_{i\downarrow}^\dagger(\tau) = -\left( \sum_{\delta} t_{ii+\delta}^* c_{i+\delta\downarrow}^\dagger(\tau) - |u| n_{i\uparrow}(\tau) c_{i\downarrow}^\dagger(\tau) + \mu c_{i\downarrow}^\dagger(\tau) \right) \quad (2.22)$$

en injectant cette équation dans l'équation de EOM  $\bar{F}_{ij}(\tau)$  nous donnera :

$$\left(-\frac{\partial}{\partial\tau} - \mu\right)\bar{F}_{ij}(\tau) - \sum_{\delta} t_{ii+\delta}^* \bar{F}_{i+\delta j}(\tau) + |U|\langle T_{\tau} n_{i\uparrow}(\tau) c_{i\downarrow}^{\dagger}(\tau) c_{j\uparrow}^{\dagger}(0) \rangle = 0 \quad (2.23)$$

finalemt

$$\left(-\frac{\partial}{\partial\tau} - \mu\right)\bar{F}_{ij}(\tau) - \sum_{\delta} t_{ii+\delta}^* \bar{F}_{i+\delta j}(\tau) - |U|\langle n_{i\uparrow} \rangle \bar{F}_{ij}(\tau) + |U|\bar{F}_{ii}(0^-) G_{ij\uparrow}(\tau) = 0 \quad (2.24)$$

### 2.6.3 Calcul du Gap

Le gap est défini par les équations suivantes [20] :

$$\Delta_i = |U|F_{ii}(0^-) = |U|\langle c_{i\downarrow}(0)c_{i\uparrow}(0) \rangle, \Delta_i^* = |U|\bar{F}_{ii}(0^-) = |U|\langle c_{i\uparrow}^{\dagger}(0)c_{i\downarrow}^{\dagger}(0) \rangle \quad (2.25)$$

Étant donné le système est homogène, la transformée de Fourier des fonctions  $\bar{F}_{ij}(\tau)$  et  $G_{ij\uparrow}(\tau)$  sont données par :

$$\begin{aligned} \bar{F}_{ij}(\tau) &= \sum_k \bar{F}_k(\tau) e^{ik(i-j)} \\ \bar{F}_{i+\delta j}(\tau) &= \sum_k \bar{F}_k(\tau) e^{ik(i-j)} e^{ik\delta} \\ G_{ij\uparrow}(\tau) &= \sum_k G_{k\uparrow}(\tau) e^{ik(i-j)} \\ G_{i+\delta j\uparrow}(\tau) &= \sum_k G_{k\uparrow}(\tau) e^{ik(i-j)} e^{ik\delta} \end{aligned}$$

et donc on obtient finalement

$$\left(-\frac{\partial}{\partial\tau} + \mu + \frac{1}{2}|U|\langle n \rangle - \epsilon_k\right) G_{k\uparrow}(\tau) + \Delta \bar{F}_k(\tau) = \delta(\tau) \quad (2.26)$$

$$\left(-\frac{\partial}{\partial\tau} - \mu - \frac{1}{2}|U|\langle n \rangle + \epsilon_k\right) \bar{F}_k(\tau) + \Delta^* G_{k\uparrow}(\tau) = 0 \quad (2.27)$$

si on suppose que  $\langle n_{i\sigma} \rangle$  et  $\Delta_i$  sont indépendants du site  $i$  du réseau la transformer de Fourier des fréquences Matsubara nous donnent :

$$G_{k\uparrow}(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{-\infty}^{n=\infty} e^{i\omega_n \tau} G_{k\uparrow}(i\omega_n) \quad (2.28)$$

$$\bar{F}_k(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{-\infty}^{n=\infty} e^{i\omega_n \tau} \bar{F}_k(i\omega_n) \quad (2.29)$$

$$\delta(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} e^{i\omega_n \tau} \quad (2.30)$$

les équation (2.26) et (2.27) en fréquences Matsubara deviennent :

$$(i\omega_n + \mu + \frac{1}{2}|U|\langle n \rangle - \epsilon_k) G_{k\uparrow}(i\omega_n) + \Delta \bar{F}_k(i\omega_n) = 1 \quad (2.31)$$

$$(i\omega_n - \mu - \frac{1}{2}|U|\langle n \rangle + \epsilon_k) \bar{F}_k(i\omega_n) + \Delta^* G_{k\uparrow}(i\omega_n) = 0 \quad (2.32)$$

On résout ces équations on obtient

$$G_{k\uparrow}(i\omega_n) = \frac{i\omega_n - \mu - \frac{1}{2}|U|\langle n \rangle + \epsilon_k}{\omega_n^2 + (\mu + \frac{1}{2}|U|\langle n \rangle - \epsilon_k)^2 + |\Delta|^2} \quad (2.33)$$

$$\bar{F}_k(i\omega_n) = \frac{\Delta^*}{\omega_n^2 + (\mu + \frac{1}{2}|U|\langle n \rangle - \epsilon_k)^2 + |\Delta|^2} \quad (2.34)$$

De la définition de l'équation (2.25) de  $\Delta$  on a [20] :

$$\Delta_i^* = |U|\bar{F}_{ii}(0) = |U|T \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} \sum_k \bar{F}_k(i\omega_n) \quad (2.35)$$

la solution non triviale  $\Delta \neq 0$  de cette équation nous donne le gap  $\Delta$  de la théorie BCS donné par l'équation suivante

$$1 = |U|T \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} \int d\epsilon \frac{\rho(\epsilon)}{\omega_n^2 + (\mu + \frac{1}{2}|U|\langle n \rangle - \epsilon)^2 + |\Delta|^2} \quad (2.36)$$

### 2.6.3.1 Conclusion

- A partir de l'équation (2.36) on peut trouver<sup>5</sup> la température critique  $T_c$  en remplaçant  $\Delta = 0$  dans l'équation . on peut montrer, en comparant les énergies libres, que lorsqu'une solution super conductrice existe (c'est-à-dire  $\Delta \neq 0$ ), son énergie est inférieure à celle de la solution de l'état normal (Bardeen, Cooper et Schrieffer (1957)).

## 2.6.4 Calcul du Supercourant et du Courant Critique

A l'équilibre la distribution de charges dans le supraconducteur est centré à  $Q = 0$  et donc aucun courant circule, dans le but de circuler un courant on introduit une différence de phase des charges dont le gap est donné à nouveau par :

$$\Delta_j = e^{iQR_j} \Delta \quad (2.37)$$

et par conséquent les fonction de Green définit déjà  $\bar{F}_{ij}$  et  $G_{ij\sigma}$  perdent leurs invariance par translation , c'est pour cela on redéfinit à nouveau ces fonctions avec le même déphasage :

— La fonction de Green anormale est redéfinit comme :

$$\bar{F}_{ij}(i\omega_n) = e^{iQ(R_j+R_i)/2} \bar{F}_{ij}(i\omega_n)$$

— la fonction de Green normale :

$$G_{ij\uparrow}(i\omega_n) = e^{iQ(R_i+R_j)/2} G_{ij\uparrow}(i\omega_n)$$

— On redéfinit aussi les opérateurs de créations et d'annihilations :

$$\tilde{c}_{i\sigma}^\dagger = e^{iQR_i/2} c_{i\sigma}^\dagger, \tilde{c}_{i\sigma} = e^{-iQR_i/2} c_{i\sigma}$$

---

5. Avec une méthode numérique par exemple trapèze



Le courant total ainsi est défini comme :

$$j = -it \sum_{i\delta\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i+\delta\sigma} \delta = \sum_k v_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \quad (2.38)$$

Si on applique une différence de phase selon la direction  $z$  l'équation (2.38) devient :

$$j_z = -i \frac{|e|t}{a^2} \sum_\sigma (c_{i\sigma}^\dagger c_{i+\delta\sigma} - c_{i+\delta\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) \quad (2.39)$$

de la définition (2.8) de la fonction de Green on a :

$$G_{ii+\delta}(\tau) = -\langle T_\tau (c_{i\sigma}(\tau) c_{i\delta\sigma}^\dagger(0)) \rangle \quad (2.40)$$

l'équation (2.39) devient donc :

$$j_z = -i \frac{|e|t}{a^2} \sum_\sigma [G_{ii+\delta\sigma}(0) - G_{ii+\delta\sigma}(0)^*] = \frac{4|e|t}{a^2} \text{Im} G_{ii+\delta}(0) \quad (2.41)$$

en transformant cette équation en fréquences Matsubara on trouve finalement l'équation de  $j_z$  est donné par [20] :

$$\langle j_z \rangle = \frac{4|e|t}{a^2 h} T \sum_n \text{Im} G_{ii+\delta z}(i\omega_n) = \frac{4|e|t}{a^2 h} T \sum_n \text{Im} \left[ e^{iQa/2} G_{ii\delta z}(i\omega_n) \right] \quad (2.42)$$

## 2.7 Effets de Déffauts

Dans le but de modéliser les effets de défauts et donc la diffusion des électrons de l'autre partie de la jonction on c'est basé sur le modèle de Falicov-Kimball , qui est en lui même un modèle complexe à résoudre , d'où la nécessité d'une résolution numérique , et dans notre travail on se basera sur l'approximation de la théorie du champ moyen dynamique .

### 2.7.1 Le modèle de Falicov-Kimball

Dans le modèle de Falicov-Kimball [20] l'hamiltonien est donné par :

$$H_{FK} = E_f \sum_{i\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} - \mu_f \sum_{i\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + U_{FK} \sum_{i\sigma\sigma'} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} f_{i\sigma'}^\dagger f_{i\sigma'} \quad (2.43)$$

avec  $E_f$  présente le niveau d'énergie des charges localisées à trouver les opérateurs  $f_{i\sigma}^\dagger$  et  $f_{i\sigma}$  , et le terme  $U_{FK}$  traduit les interactions entre les charges localisées et l'électron de la bande qui saute d'un site à un autre , l'hamiltonien total est donné par :

$$H = - \sum_{ij\sigma} t_{ij} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) - |U| \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + E_f \sum_{i\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} - \mu_f \sum_{i\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + U_{FK} \sum_{i\sigma\sigma'} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} f_{i\sigma'}^\dagger f_{i\sigma'} \quad (2.44)$$

### 2.7.2 La théorie du champ moyen dynamique

La DMFT [20] traduit la projection d'un problème d'un réseau à N-corps sur un problème local à plusieurs corps, qui se base sur le modèle d'impureté d'Anderson, en effet même le modèle de Hubbard n'a pas de solution exacte pour des dimensions infinie [21].

La DMFT présente une quantité essentielle qui est la self-energy traduite à travers l'équation de Dyson donnée par :

$$G_{ij}(\tau) = \frac{1}{G_{ij}^0{}^{-1}(\tau) - \Sigma_{ij}(\tau)} \quad (2.45)$$

$G$  est la fonction de Green de l'Hamiltonien total  $H$  et  $G^0$  est la fonction de Green de l'Hamiltonien sans interactions donnée par :

$$G_{ij}^0(\tau) = \frac{1}{G_{ij}^0{}^{-1}(\tau) + \Sigma_{ij}(\tau)} \quad (2.46)$$

Pour un système homogène la transformé de Fourier en fréquences de Matsubara, nous donne :

$$G(i\omega_n) = \frac{1}{[G^0(i\omega_n)]^{-1} - \Sigma(i\omega_n)} \quad (2.47)$$

$$G^0(i\omega_n) = \frac{1}{[G(i\omega_n)]^{-1} + \Sigma(i\omega_n)} \quad (2.48)$$

Résoudre un problème avec des interactions revient donc finalement à calculer la self-énergie du système, ici on voit bien l'utilité de la DMFT car dans cette approximation quand la dimensionnalité du réseau devient infini ( $d \rightarrow \infty$ )  $\Sigma_{ij}(i\omega_n, k) \equiv \Sigma_i(i\omega_n)$  elle devient locale et ne dépend pas de  $k$ . et donc résoudre la DMFT où le modèle directement donnera le même résultat à des dimensionnalités infinies.

la fonction de Green locale est donnée par l'équation :

$$G(i\omega_n) = \int d\epsilon \rho(\epsilon) \frac{1}{i\omega_n + \mu - \Sigma(i\omega_n) - \epsilon} \quad (2.49)$$

### 2.7.3 Algorithme de la DMFT

On calcule la self-energy du système partant de l'algorithme de la DMFT suivant [20] :

1. Fixer le potentiel chimique  $\mu$
2. Donner une valeur initiale  $\Sigma_{int}(i\omega_n)$
3. Utiliser l'équation (2.49) pour avoir  $G(i\omega_n)$
4. Utiliser l'équation (2.48) pour avoir  $G_0(i\omega_n)$
5. Equation de Green de l'impureté  $G(i\omega_n)$
6. Calculer la self-energy finale  $\Sigma_{out}(i\omega_n)$  de l'équation (2.48)
7. Comparer  $\Sigma_{int}(i\omega_n)$  et  $\Sigma_{out}(i\omega_n)$  si le calcul n'a pas convergé revenir à l'étape 1.

## 2.8 Modélisation d'une Jonction de Josephson

On simule la Jonction de Josephson par des plans empilés longitudinalement de la nanostructure multicouche comme représenté dans le schéma de la figure 2.1 ci-dessous qui consiste en deux électrodes supraconductrices semi-infinies, où on prend le paramètre de Falicov-Kimball nulle  $U_{FK} = 0$  reliées par une barrière d'épaisseur finie montrée en vert, avec le même paramètre de Hubbards ( $U$ ) que les deux électrodes, mais avec  $U_{FK} \neq 0$ , on fixe  $w_1$  la concentration en impuretés, les sites du réseau sont indiqués par des points sur le plan le plus à droite.

Le terme de saut est le même pour chaque direction  $x$  et  $y$  sur chaque plan et est noté  $t^{\parallel}$  dans la figure 2.1, peut varier d'un plan à l'autre pour les sauts vers la droite ou la gauche dans la direction longitudinale noté  $t^{\perp}$  représenté par des lettres grecques  $\alpha, \beta \dots$  pour désigner les plans.

Principalement les fonctions de Green et par conséquent les courants sont obtenues par le raccordement des fonctions d'ondes aux interfaces [22].

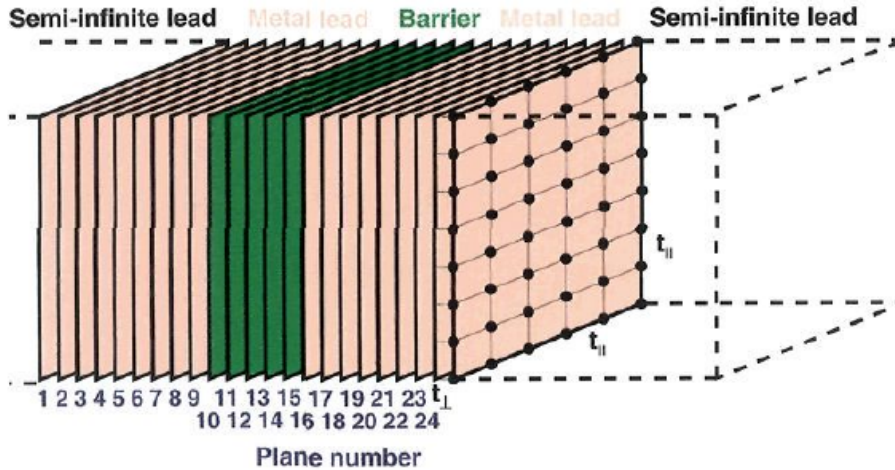


FIGURE 2.1 – jonction de josephson

# MgB<sub>2</sub>

## 3.1 Introduction

Dans ce chapitre nous adaptons le formalisme porté précédent aux cas du MgB<sub>2</sub>.

## 3.2 Données Expérimentales

Le découverte de la supraconductivité en 2001 par Nagamatsu et al.[23] [24] Le remplacement des ions <sup>10</sup>B par leurs isotopes <sup>11</sup>B dans MgB<sub>2</sub> produit un diminution de  $T_c$  de 1.0 K, ce qui renseigne clairement que les phonons sont impliqués de l'interaction attractive nécessaire pour surmonter la répulsion coulombienne et par conséquent pour la formation de paires de Cooper dans ce composé. Par contre le remplacement des ions de <sup>25</sup>Mg par <sup>24</sup>Mg n'a presque aucun effet sur  $T_c$ . Ceci indique une selectivité des modes de vibrations responsable du mécanisme de Cooper, et qu'en particulier ces modes viennent exclusivement de la vibration des atome de bohr[25].

D'autre MgB<sub>2</sub> est un supraconducteur de type II, ce qui en fait un bon candidat pour les applications technologiques comme  $H_C$  doit être élevé.

MgB<sub>2</sub> possède la température critique  $T_c$  la plus élevée parmi les supraconducteurs dits conventionnels, un record détenu jusqu'alors par Nb<sub>3</sub>Ge avec une temperature critique de 23 K. L'interet de MgB<sub>2</sub> ne vient pas seulement de sa température critique élevée qui est, du reste bien plus faible à celles des supraconducteurs à haute températures HTSCs, mais plutôt de sa "maleabilité", c'est-à-dire de la facilité avec laquelle il se prait à la fabrication de films minces et même des fils. Ceci n'est pas aisé avec les HTSCs. L'abandance des éléments constitutifs Mg et B permet aussi de réduire drastiquement les couts de fabrication.

Pour plusieurs décinies le matériaux de choix pour la fabrication des jonctions de Josephson (JJ) est le niubium de par la facilité du procédé de leur fabrication. L'incovénient majeur de ce type de jonction est la faible température de transition de Nb, qui est de 9 K (voir figure1.2). Ceci réduit la temperature operationnelle des JJ à base de Nb, comme la jonction Nb/AlO<sub>x</sub>/Nb, à entre 4 K et 5 K, necessitant un très fort refroidissement et par conséquent une consommation élevée d'énergie. Par contre les JJ à base de MgB<sub>2</sub>, du fait du fait de son gap élevé, peuvent opérer jusqu'à 20 K, des températures relativement facilement atteintes avec des refroidissement cryogéniques. Des études[26] [27] on montré la fabrication de JJs MgB<sub>2</sub>/MgO/MgB<sub>2</sub> mais avec un coefficient  $I_c R_N$  faible du fait que la largeur de la barrière était trop élevée pour permettre un courant critique  $I_c$  conséquent. D'autre on utilisé un bombardement par ions lourds, ce qui empêche ces dernier de diffuser efficacement à l'intérieur

de l'échantillon (mais aussi la nature 3D de celui-ci ?). Comparativement le bombardement par les ions  $\text{He}^+$  permet une pénétration plus importante et une possibilité élevée d'obtenir des barrières uniformes empêchant de ce fait le "courscircuitage" et offrant la possibilité d'une production de masse de ce type de JJs. En effet, plus récemment encore Kasaei et al [27] ont fabriqué des jonctions de Josephson irradiant une partie d'un échantillon plat de  $\text{MgB}_2$  par des ions  $\text{He}^+$  pour en détruire la supraconductivité et en faire une barrière en métal normal donnant une jonction de type SNS. Il a été montré qu'une dose de  $8 \times 10^{15}/\text{cm}^2$  permet la suppression complète de  $T_c$ . Dans [4] deux doses ont été utilisées, une faible de  $9 \times 10^{15}/\text{cm}^2$  et une forte de  $2 \times 10^{16}/\text{cm}^2$  donnant respectivement des densité de courant critique de  $\sim 10^7 \text{ A}/\text{cm}^2$  et  $1. \times 10^6 \text{ A}/\text{cm}^2$ .

### 3.3 Structure Electronique

La structure cristalline de  $\text{MgB}_2$  consiste en un empilement alterné de plans atomiques de Mg ayant une structure hexagonale et de B ayant une structure en nid d'abeille (honeycomb). Les orbitales responsables de la supraconductivité viennent essentiellement des atomes de B ; les atomes de Mg n'ayant pour rôle que la contribution de leurs électrons au remplissage de ses orbitales issues de B, et par conséquent aussi à fixer le potentiel chimique (où  $E_f$ ) de  $\text{MgB}_2$ . L'unité élémentaire du plan de B est anneau qui rappelle celui du benzène à base d'atome de C. Il s'en suit, que de même pour ce dernier et dans cadre de LCAO où TB, les orbitales atomiques hybrides  $sp^2$ , formés des orbitales  $s$ ,  $p_x$  et  $p_y$ , forment la liaison moléculaire  $\sigma$ , à caractère bidimensionnel, dans le plan de l'anneau, et les orbitales  $p_z$  forment une liaison  $\pi$  qui a un caractère plutôt tridimensionnel. Dans  $\text{MgB}_2$  les liaisons  $\sigma$  deviennent les orbitales  $\sigma$  qui ont une faible dispersion le long de l'axe  $c$  perpendiculaire au plan de B, et les liaisons  $\pi$  deviennent les orbitales  $\pi$  qui à la fois une dispersion dans le plan et le long de l'axe  $c$ . Il est à noter également qu'il y a très peu d'interaction entre les deux types de bandes. Du fait de leurs dispersions les bandes  $\sigma$  et  $\pi$  contribuent à la conduction dans le plan de B, alors que la conduction perpendiculairement à ce plan (le long de l'axe  $c$ ) est due exclusivement à la bande  $\pi$ . Ceci résulte en une forte anisotropie des propriétés de transport de  $\text{MgB}_2$  et se repercute aussi dans les propriétés thermodynamique, comme les champs critiques  $H_{c1}$  et  $H_{c2}$ , de celui-ci dans sa phase supraconductrice. Par ailleurs les orbitales  $\sigma$  et  $\pi$  jouent des rôles différents dans leurs contribution à la résistivité, se court-circuitant l'une l'autre aux hautes et aux basses températures. A haute température la faible interaction électrons-phonon de l'orbitale  $\pi$  est responsable de la diminution de la résistivité malgré la forte interaction électron-phonon de la bande  $\sigma$ . Cette dernière est par contre responsable de la supraconductivité et donc la résistivité nulle aux basses températures du fait justement de son fort couplage aux phonons.

Nous avons vu plus haut que les phonons due aux vibrations des atomes de bore sont responsable de la supraconductivité dans  $\text{MgB}_2$  et le mouvement des atomes de B est fortement couplé aux électrons occupant la bande  $\sigma$ . C'est ce qui explique que le remplacement de  $^{10}\text{B}$  par  $^{11}\text{B}$  dans  $\text{MgB}_2$  a bien plus d'effet sur  $T_c$  que le remplacement de  $^{25}\text{Mg}$  par  $^{24}\text{Mg}$ . Il est également remarquable que malgré la faible densité d'état de  $\text{MgB}_2$  au niveau de Fermi  $D(\epsilon_F)$ , sa température de transition est élevée. En effet et d'après la formule de BSC ?? la température critique  $T_c$  dépend à la fois de  $D(\epsilon_F)$ , de l'interaction électron-phonon  $V$  et de la fréquence caractéristique  $\omega_D$  des phonons. Et on comprend alors que la faible valeur de  $D(\epsilon_F)$  est compensée par les valeurs élevées de  $V$  et de  $\omega_D$ .

Une faible interaction entre les orbitales  $\sigma$  et  $\pi$  en plus de l'interaction coulombienne entre les électrons occupant ses orbitales font qu'un "effet de proximité" existe entraînant l'apparition des deux gaps à la même température critique. En effet en absence totale de ses interactions on aurait observé deux

condensat indépendants avec des gaps et des  $T_c$  différents. De l'autre côté si l'interaction était trop forte on aurait observé un gap commun comme est le cas pour les métaux normaux comme Al.

## 3.4 Nos Calculs Théoriques

### 3.4.1 Paramétrisation en Liaisons Fortes

Le  $\text{MgB}_2$  se cristallise dans la structure hexagonale ayant pour groupe d'espace P 6/mmm, et les paramètres de maille de  $a = 3.085 \text{ \AA}$  et  $c = 3.521 \text{ \AA}$ . Nous avons effectué, avec ses paramètres, un calcul *ab initio* avec le code **TB-LMTO** dans l'approximation GGA de la structure électronique de  $\text{MgB}_2$ . La structure de bande obtenue est montrée dans la Figure 3.1. Pour obtenir les paramètres, énergies atomiques et integrales de sauts, nous avons fitté la structure de bande par celle obtenue en liaisons fortes. Ces paramètres sont montrés dans le Tableau 3.1. On remarque une très bonne coincidence entre les deux calculs autour du niveau de Fermi. Cependant, un léger écart existe pour la bande  $\pi$  le long de la direction A L.

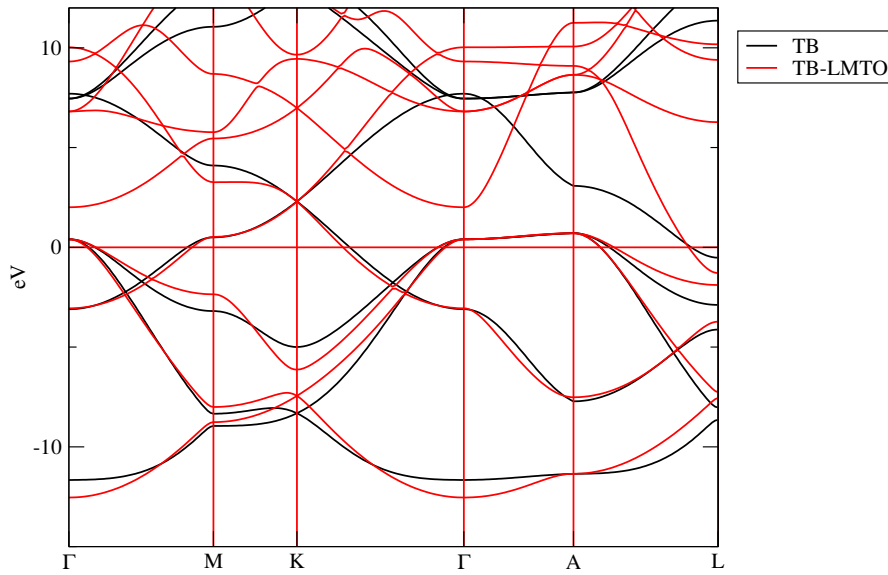


FIGURE 3.1 – Bandes d'énergie de  $\text{MgB}_2$  calculées par TB-LMTO(rouge) et en liaisons fortes(noir) le long des directions de haute symétrie de la première zone de Brillouin

### 3.4.2 Deux Bandes Effectives et Interactions

A partir des calculs *ab initio* de la structure de bande de  $\text{MgB}_2$  montrés dans la Fig. 3.1 on voit que deux bandes  $p$  traversent/coupent le niveau de Fermi. Dans la direction  $z$ , ou selon l'axe  $c$ , (la ligne  $\Gamma A$ ) une bande est très dispersive et correspond à la bande  $\pi$  qui va porter la majorité du courant selon cette direction. L'autre bande est beaucoup moins dispersive, ou plus plate, et correspond à la bande  $\sigma$  et qui a un caractère plutôt bidimensionnel. Et comme mentionné plus haut cette dernière est fortement couplée aux phonons  $E_g$  dans le plan du bohr, ce qui lui confère un gap élevé. Quant au gap de la bande  $\pi$  il est induit par celui de la bande  $\sigma$ . A cause de la structure hexagonale/honeycomb on a en tout six bandes  $p$  à considérer du fait qu'on a deux atomes inéquivalents par cellule élémentaire. Par contre si l'on ne s'intéresse qu'à la direction  $z$  on peut se restreindre à un seul atome de B par

plan. Au fait on somme sur  $\mathbf{k}_{\parallel}$ , et cette sommation est remplacée par une integrale sur la densité d'états à 2D  $\rho_{\parallel}(\epsilon)$ .

MgB<sub>2</sub> possède huit bandes, issue du bohr, dont dérivent ses propriété électroniques au basses énergies. Il s'agit de trois bandes  $p$  et une bande  $s$ , ce qui en fait huit puisqu'on a deux atomes inéquivalents par cellule élémentaire. Nous remarquons sur la Fig. 3.1 que seules quatres bandes traversent le niveau de Fermi et nous avons ses bandes par un modèle en liaisons fortes comme montré en traits noirs sur la figure. De plus en posant des contraintes sur les integrales de sauts le long de l'axe  $z$ , on réduit ce nombre à deux orbitales, d'où le modèle à deux orbitales<sup>1</sup>. Essentiellement, les seuls integrales, suivant l'axe  $z$ , non nulles sont  $pp\sigma$  (deux orbitales  $p$  qui on leurs lobes suivant l'axe  $z$ ) et  $pp\pi$  (deux orbitales qui on leurs lobes dans le plan  $xy$ ) et  $ss\sigma$ . En utilisant ces contraintes et le reste des paramètre donnés dans le Tableau 3.1, nous avons calculé les densités d'états à 2D  $\rho_{\parallel}(\epsilon)$ , montrées dans la Figure 3.2

Tableau 3.1 – Les paramètres TB utilisés pour générer les deux bandes effective de MgB<sub>2</sub>.

$\epsilon_s$	1.40
$t_{ss\sigma}$	-4.30
$t_{sp\sigma}$	5.10
$t_{ss\sigma}^{\perp}$	0.00 (-0.08)
$t_{sp\sigma}^{\perp}$	0.00
$\epsilon_{p\sigma}$	4.09
$t_{\sigma}$	4.15
$t_{\pi}$	-1.80
$t_{pp\sigma}^{\perp}$	0.00(-0.08)
$t_{pp\pi}^{\perp}$	0.00(1.20)
$\epsilon_{p\pi}$	-0.10

Le hamiltonien totale de MgB<sub>2</sub> est donné par

$$\mathcal{H}_{\text{MgB}_2} = - \sum_{i j m \sigma} t_{mij} (c_{m i \sigma}^{\dagger} c_{m j \sigma} + c_{m j \sigma}^{\dagger} c_{m i \sigma}) - \sum_{i m n} |U_{mn}| \hat{n}_{m i \uparrow} \hat{n}_{n i \downarrow} + E_f \sum_i \hat{n}_{f i} + U_{FK} \sum_i \hat{n}_{f i} (\hat{n}_{i \uparrow} + \hat{n}_{i \downarrow}), \quad (3.1)$$

### 3.4.3 Calcul des Gaps et Comparaison à l'Experience

#### 3.4.3.1 Two-gap system

Les gaps calculé dans notre modèle sont montrés dans la Figure 3.3 où ils sont comparés aux valeurs experimentales obtenus par Gonnelli *et al.*[4]. Les paramètres de Hubbards utilisés sont  $U_{11} = 1.680$  eV,  $U_{12} = 0.542$  eV,  $U_{21} = 0.433$  eV et  $U_{22} = 0.550$  eV

Pour la partie irradiée, utilisée plus tard dans la jonction, nous avons utilisé un paramètre de Hubbard unique  $U = -0.745$ . Ceci bien évidemment un gap unique pour les deux bandes, comme montré dans la Figure 3.8.

1. Nous tenons à indiquer que ces contraintes peuvent être levées entièrement si les calculs ultérieurs necessitent la tenue en compte de plus ou de toutes les orbitales.

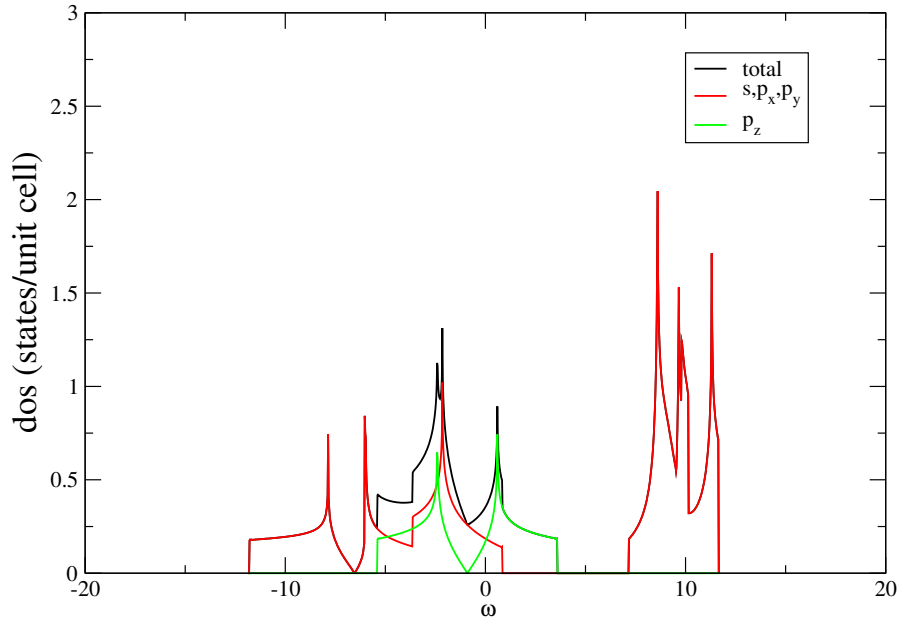


FIGURE 3.2 – Densités d'états partielles 2D pour le modèle à deux bandes effectives de  $\text{MgB}_2$ .

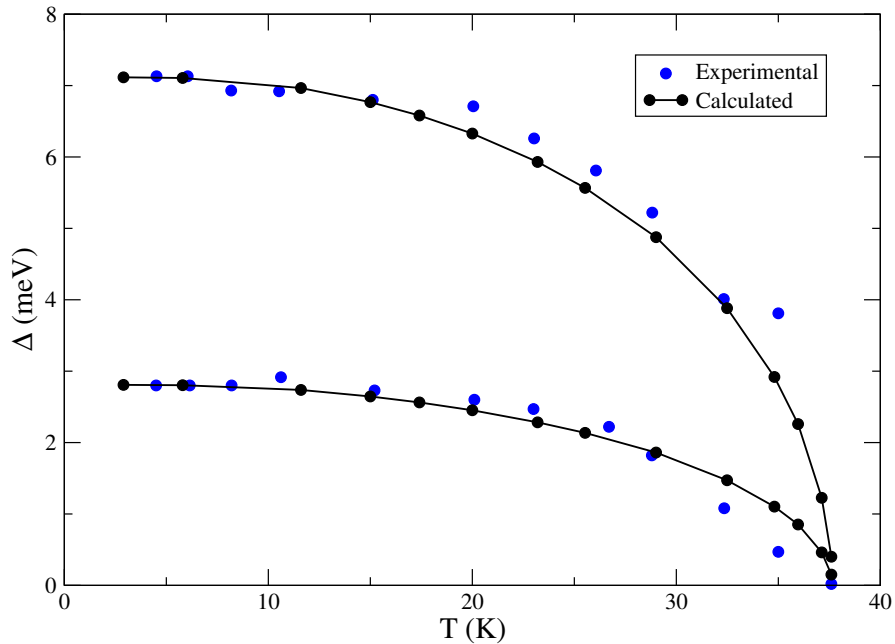


FIGURE 3.3 – Comparaison entre les gaps de  $\text{MgB}_2$  calculés dans le présent modèle et ceux déterminés expérimentalement par Gonnelli *et al.*[4].

### 3.4.4 Courant Critique en Fonction de la Temperature et Comparaison

Dans la Figure 3.4 nous montrons un exemple de calcul du supercourant dans le massif en fonction du gradient de la phase  $Q$  à  $T = 5.8$  K. On voit que la majorité du courant est porté par la deuxième bande ( $\pi$ ) bien que son gap est inférieur à celui de la première ( $\sigma$ ) comme montré plus haut dans la Figure 3.3. Ceci vient du fait que l'intégrale de saut, et donc la dispersion, le long de l'axe  $z$  sont différents.



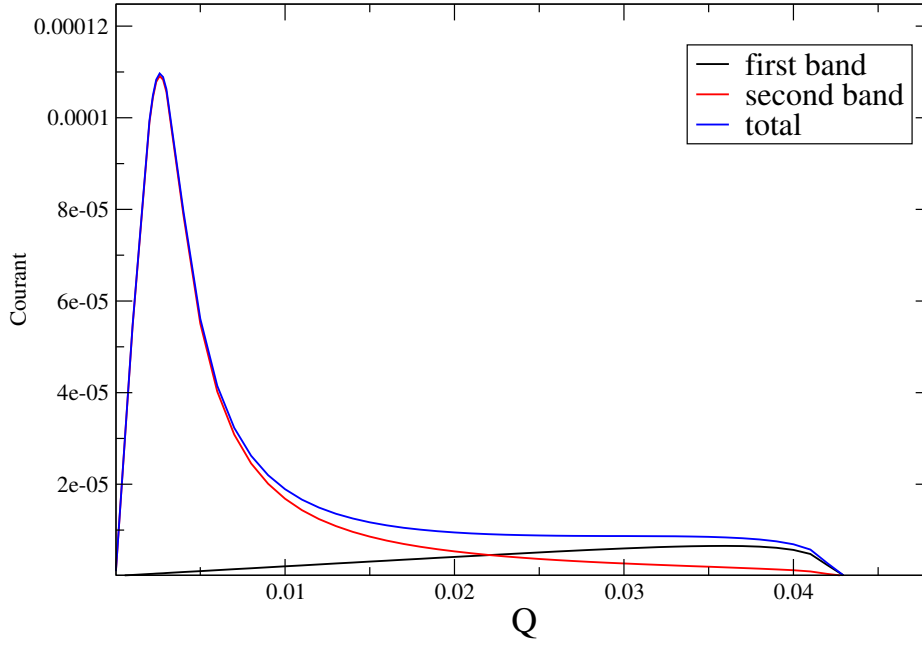


FIGURE 3.4 – Supercourant (en unités de  $t_{\text{hop}}/(\hbar a^2)$ ) dans MgB<sub>2</sub> en volume comme fonction du gradient  $Q$  à la température de  $T = 5.8$  K.

A partir de calcul du supercourant comme fonction du gradient  $Q$ , à l'instar de ce qui montré dans la Figure 3.4, on relève le maximum, et c'est ce qui définit le courant critique  $I_c$ . En repetant ces calculs à différentes températures nous avons obtenu les résultats montrés dans la Figure 3.5. Avec  $t_{\text{hop}}$  est  $t_\sigma = 4.15$  et  $t_\pi = -1.80$ .

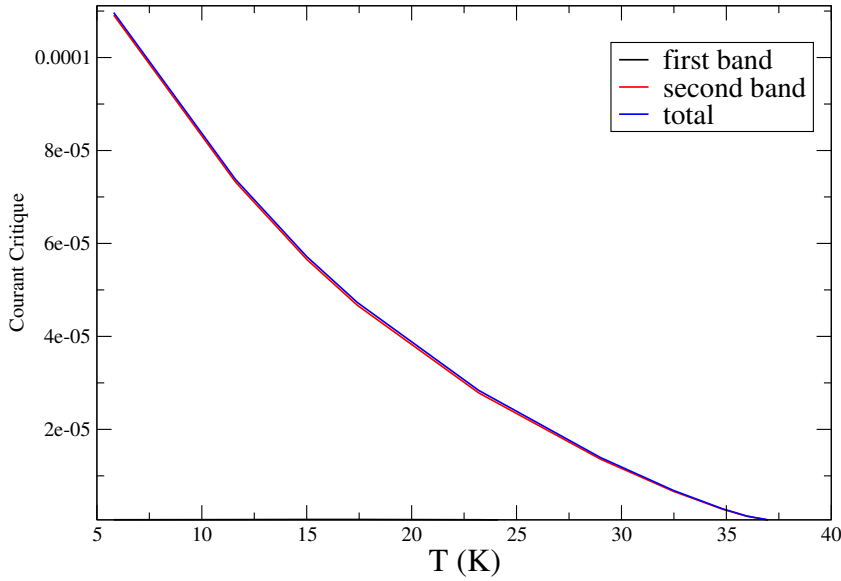


FIGURE 3.5 – Courant critique (en unités de  $t_{\text{hop}}/(\hbar a^2)$ ) dans  $\text{MgB}_2$  en volume comme fonction de la temperature.

la densité du courant critique est en unité  $et_{\text{hop}}/(\hbar a^2)$ , avec  $a$  est la cellule unitaire dans le plan (ab), dans notre cas la longueur des vecteurs unitaire est  $a = 3.085\text{\AA}$  et l'angle entre eux est de  $60^\circ$  cela donne un aire de  $8.242\text{\AA}^2$  et  $\hbar = 6.52822 \cdot 10^{-16} eV$ , de sorte que :

$$e/(\hbar a^2) = 2.9777 \cdot 10^{11} (A/cm^2/eV)$$

Si on s'intéresse à la bande  $\pi$  par exemple à  $T = 11.6K$  la valeur critique est de  $J_\pi \simeq 6 \times 10^{-5}$  et  $t_{\text{hop}} = 1.2eV$ , alors on trouve que la densité du courant critique est environ  $J_c \simeq 2.1 \times 10^7 A/cm^2$ .

On compare ces résultats avec les résultats obtenue par Cristina.B et Tsutomu.Y [29] présenter dans la figure 3.6, qui illustre le courant critique  $I_c$  en fonction de la temperature sous camps magnétique, on voit bien que à  $B = 0.5T$  la densité du courant est environ de  $10^6 A/cm^2$ , ce qui nous parvient à dire que sous un champ magnétique nulle on trouve le courant critique dans les environ  $10^7 A/cm^2$ , qui est de même ordre de grandeur que celui trouvé ( Voir figure 3.5). Des améliorations sont nécessaires pour une bonne comparaison avec les mesures experimentales, dont d'inclure plus de voisins intervenant dans les intégrales de saut.

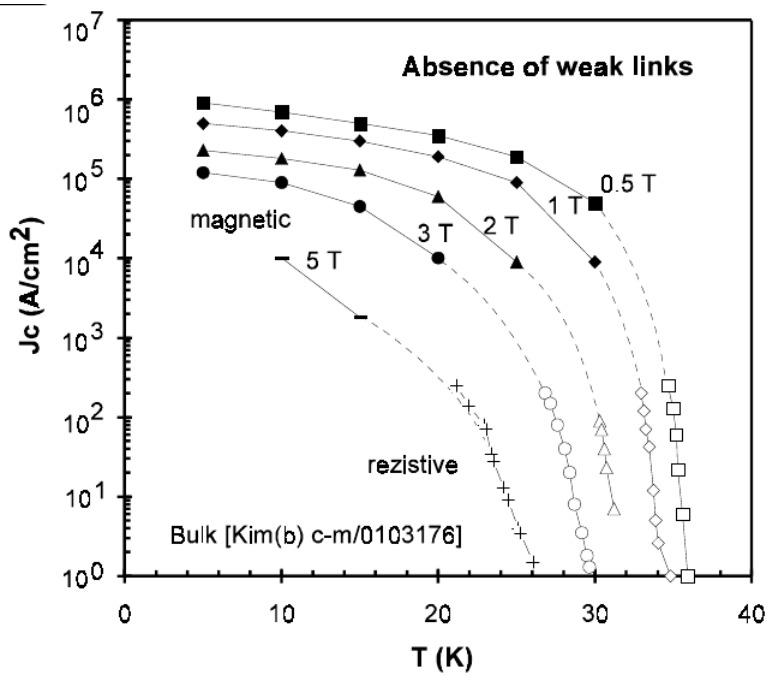


FIGURE 3.6 – Courant critique (en unités de  $(A/cm^2)$ ) dans  $MgB_2$  en volume comme fonction de la température [29].

### 3.4.5 Effets des Défauts : Gap et Courant et Critique

L'effet des impuretés diffusant sur les propriétés supraconductrice du  $MgB_2$  ( $U_{FK} = 2eV, T = 23.2K$ ) sont représentés dans la figure 3.7.

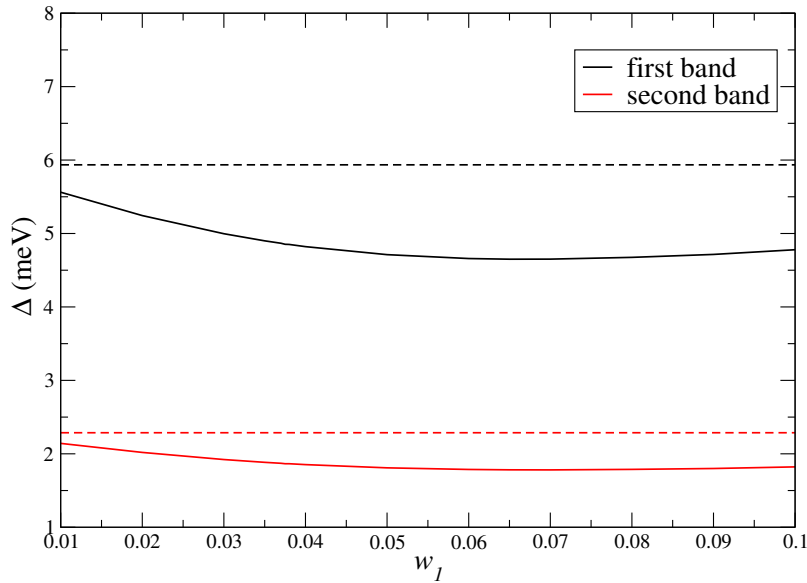


FIGURE 3.7 – Gaps en fonction de la concentration en impuretés  $w_1$  pour  $U_{FK} = 2 eV$  et à la température  $T = 23.2 K$ .  $w_1$  varie de 0.01 à 0.1. Les lignes en tirets correspondent au cas pur  $U_{FK} = 0$ .

On voit bien l'effet de l'augmentation du nombre de concentration en impuretés  $w_1$  en effet, les gaps

diminuent en fonction de la température à des faibles concentration  $w_1$  .

Pour tenir compte des effets de diffusion interbande on a utilisé des paramètres attrctifs moyennés( $U=0.745$  eV) .la Figure 3.8 montre bien un gap unique pour les deux bandes. On voit bien que le gap ne s'annule pas (figure 3.7 ) même à ( $U_{FK} \neq 0$ ) , c'est pourquoi il faut maintenir ( $U=0$  eV) dans la barrière et donc on obtient un courant de Josephson  $I_c$  , et pour avoir le facteur de qualité élevé ( qui est donné par  $I_c R_n$  ) on maintien aussi ( $U_{FK} \neq 0$ ) qui traduit une résistance élevé dans la barrière .

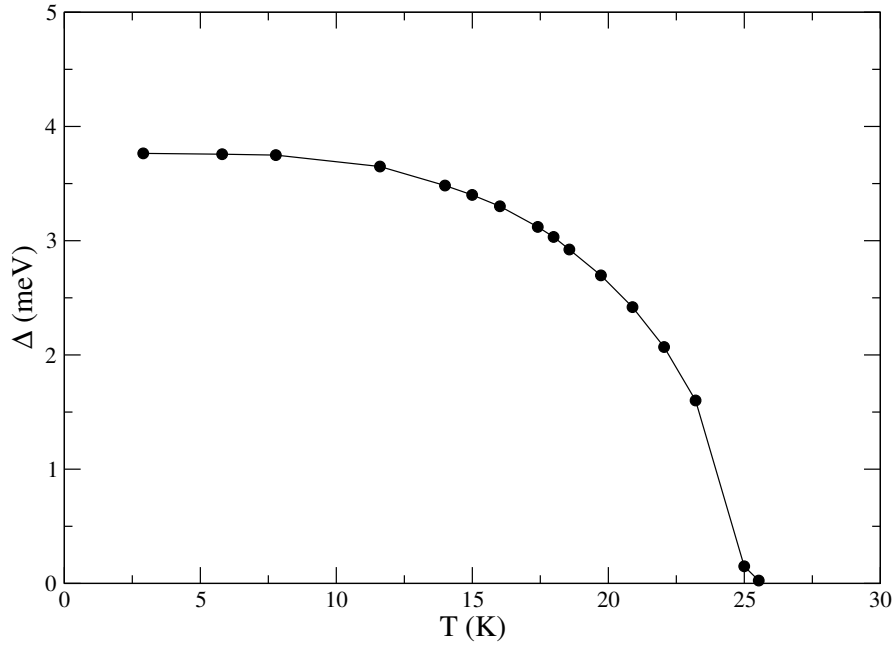


FIGURE 3.8 – Gap en fonction de la température pour  $MgB_2$  en présence d'un forte diffusion interbandes qui resulte en des paramètres attrctifs moyennés. Tous les  $U$  sont fixés à 0.745 eV.

### 3.4.6 Jonction de Josephson : Travail Préliminaire

Dans le cas d'une Jonction de 670 plans et une barrière de 20 plans à une température  $T = 25.53$  on obtient la variété du gaps montrés dans la figure 3.9 . On voit bien que le gap de la jonction coïncide avec le gap du massif (figure 3.3), mais dans le cas de la barrière on trouve pas les mêmes résultats obtenue avant (voire figure 3.8) , en effet le gap gap ne ne s'annule pas dans la partie de la barrière et cela revient à l'effet de proximité (le gap du massif qui induit l'existence du gap dans la barrière).

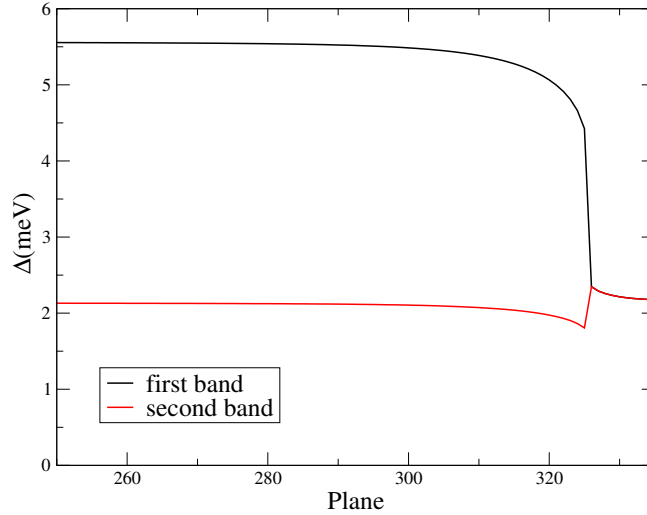


FIGURE 3.9 – Gap  $\Delta_\alpha$  en fonction du nombres de plans  $\alpha$  pour une jonction de 670 plans avec une barrière de 20 plans . On montre que la moitié de la jonction puisque l'autre moitié est obtenue avec smétrie .La température est de 25,53, la  $T_C$  qui correspond au massif où l'interaction de Hubbard est la même que celle de la barrière.

# Conclusion générale

Nous avons entrepris dans ce travail la modélisation de la supraconductivité dans le  $\text{MgB}_2$  en volume ainsi que sous forme des jonctions de Josephson. Nous avons tout d'abord obtenu les paramètres entrant dans la description en liaisons fortes d'un cristal parfait de  $\text{MgB}_2$  à partir d'un fit de la structure de bandes obtenue à partir de ces paramètres à celle obtenue par un calcul de premiers principes. Nous avons ensuite obtenu deux bandes effectives de manière à ce qu'elle se prêtent à une séparation entre une partie bidimensionnelle limitée à chaque plan de Bohr et des intégrales de sauts séparés qui lient un plan à ses plans premiers voisins. Cette manière de faire permet de tirer profit de méthodes existantes utilisées précédemment pour la modélisation de jonctions mais pour des modèles simples et à une seule bande d'énergie. Au hamiltonien ainsi obtenu nous avons ajouté des interactions de contact de type Hubbard avec un potentiel attractif qui permet de simuler l'interaction effective, entre deux électrons, due aux phonons et qui est responsable de la supraconductivité dans  $\text{MgB}_2$ . Cette interaction a été traitée dans l'approximation de Hartree-Fock, qui est suffisante pour reproduire les prédictions théoriques de la théorie BCS et les mesures expérimentales des deux gaps observés dans  $\text{MgB}_2$ . Pour simuler les effets des défauts générés dans la barrière, partie irradiée d'un échantillon de  $\text{MgB}_2$ , nous avons utilisé le modèle de Falikov-Kimball qui décrit l'interaction entre des charges localisées statiques, mais disposées aléatoirement sur le réseau atomique, et les électrons de conduction. Cette interaction a été traitée dans le cadre de l'approximation du champ moyen dynamique (DMFT) pour tenir compte des corrélations électroniques. Nous avons ainsi calculé des propriétés de  $\text{MgB}_2$  en volume dans sa phase supraconductrice, comme les gaps, la température de transition, les courants critiques, et ce fonction des paramètres entrant dans le hamiltonien, dont certains, comme la concentration de défaut et la largeur de la barrière d'une jonction, peuvent être manipulés facilement par l'expérimentateur.

Nous avons obtenu des résultats encourageants mais des améliorations sont nécessaires pour une comparaison concluante avec les mesures expérimentales. Parmi ces améliorations nous envisageons, d'une part, d'inclure plus de voisins intervenant dans les intégrales de saut et d'utiliser une base d'orbitales pas nécessairement orthogonale, c'est à dire inclure des intégrales de recouvrement en sus des intégrales de sauts. Ceci permettra un rapprochement encore meilleur des calculs en liaisons fortes avec ceux de premiers principes. D'autre part d'utiliser des méthodes nouvelles de calcul permettant d'inclure les effets des électrodes sur la partie centrale du dispositif, où ont lieu les corrélations électroniques, à travers des self-energies calculées de manière bien plus efficace que dans la méthode actuelle du quantum zipper.

# Bibliographie

- [1] C. Petrovic C. E. Cunningham N. Anderson S. L. Bud'ko, G. Lapertot and P. C. Canfield. Boron isotope effect in superconducting  $\text{MgB}_2$ . *PHYSICAL REVIEW LETTERS*, 86(9), FEBRUARY 2001.
- [2] Sylvain COLSON. *Étude de la matière de vortex dans  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$  à l'aide de la résonance de plasma Josephson*. PhD thesis, Université de L'école Polytechnique, 2003.
- [3] DAO Vu Hung. *Etude théorique de l'état de vortex dans de nouveaux supraconducteurs  $\text{MgB}_2$  et  $\text{PrOs}_4\text{Sb}_{12}$* . PhD thesis, Université de Joseph Fourier - Grenoble, 2006.
- [4] R. S. Gonnelli, D. Daghero, G. A. Ummarino, V. A. Stepanov, J. Jun, S. M. Kazakov, and J. Karpinski. Direct evidence for two-band superconductivity in  $\text{MgB}_2$  single crystals from directional point-contact spectroscopy in magnetic fields. *Phys. Rev. Lett.*, 89(24) :247004, Nov 2002.
- [5] Charles Kittel. *Introduction to Solid State Physics*. John Wylie and Sons, 1999.
- [6] Harald Ibach and Hans Lüth. *Solid-State Physics : An Introduction to Principles of Materials Science*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1995.
- [7] J.R. Schrieffer. *Theory of Superconductivity*. Perseus, 1999.
- [8] H. Kamerling Onnes. Investigations into the properties of substances at low temperatures, which have led, amongst other things, to the preparation of liquid helium. 1913.
- [9] H. Kamerling Onnes. Leiden communications. 120b,122b,124c, 1911.
- [10] J. R. Schrieffer J. Bardeen, L. N. Cooper. The electromagnetic equation of the superconductor. 1935.
- [11] F. Mila. *Physique du Solide Avancee I et II*. EPA, 2003-2004.
- [12] Simon Hurand. *Supraconductivité*. UFR de Sciences Fondamentales et Appliquées, 2020-2021.
- [13] Michael Tinkham. *Introduction To Superconductivity*. 1999.
- [14] A.Georges and T.Giamarchi. *Introduction au problème à N corps et à la physique des fermions fortement corrélés*. 2002.
- [15] L.N.Cooper J.Bardeen and J.R.Schrieffer. Theory of superconductivity. *Physical Review*, 108 :1175, 1957.
- [16] Rémi Kahn Philippe Mangin. *Supraconductivité*. 2013.
- [17] J. G. Bednorz and K. A. Müller. Possible high  $T_c$  superconductivity in the Ba-La-Cu-O system. *Z. Physik B - Condensed Matter*, 64, June 1986.

## Bibliographie

---

- [18] Raphaël Photopoulos. *Un modèle de liaisons fortes tridimensionnel pour les cuprates supraconducteurs monocouches à base de lanthane*. PhD thesis, Université de Caen Normandie, 2019.
- [19] Henrik Bruus and Karsten Flensberg. *Introduction to Many-body quantum theory in condensed matter physics*. 2002.
- [20] J. K. Freericks. *Transport in multilayered nanostructures : the dynamical mean-field theory approach*. Imperial College Press, 2006.
- [21] G.Kolitar and D.Vollhardt. Strongly correlated materials :insights from dynamical mean-field theory. *Physics Today*, pages 53–59, 2004.
- [22] M. Potthoff and W. Nolting. Surface metal-insulator transition in the hubbard mode. *Phys. Rev. B*, 59(4) :2549–2555., January 1999.
- [23] Jun Nagamatsu, Norimasa Nakagawa, Takahiro Muranaka, Yuji Zenitani, and Jun Akimitsu. Superconductivity at 39 k in magnesium diboride. *Nature*, 410 :63–64, 2001.
- [24] C. Canfield and G. W. Crabtree. Magnesium diboride : Better late than never. *Physics Today*, 56 :34, 2003.
- [25] K. Semba K. Ueda, S. Saito and T. Makimoto. All mgb2 josephson tunnel junctions. *Appl Phys. Rev. Lett.*, 86 :172502, 2005.
- [26] Y.-H. Yang L. Li, H. Zhang and G.-X. Miao. High-quality epitaxial mgb2 josephson junctions grown by molecular beam epitaxy. *AIP Advances.*, 8 :075020, 2018.
- [27] L. Kasaei, L. C. Feldman T. Gustafsson Ke Chen X. X. Xi T. Melbourne, V. Manichev, and B. A. Davidson. Mgb2 josephson junctions produced by focused helium ion beam irradiation. *Adv. Eng. Mater.*, 19 :160792, 2017.
- [28] S. L. Bud’ko J. E. Ostenson G. Lapertot C. E. Cunningham P. C. Canfield, D. K. Finnemore and C. Petrovic. Superconductivity in dense mgb<sub>2</sub> wires. *PHYSICAL REVIEW LETTERS*, 86(1), March 2001.
- [29] Cristina Buzea and Tsutomu Yamashita. Review of superconducting properties of mgb<sub>2</sub>. *TOPICAL REVIEW*, 15 August 2001.