

Étude de microstructures de phases électroniques ordonnées par micro-diffraction des rayons X

Ce contrat doctoral (3 ans) a pour but l'étude de l'évolution de la microstructure d'états électroniques quantiques (ondes de densité de charge) sous l'effet de stimuli lumineux ou mécaniques. Les microstructures seront imagées par micro-diffraction des rayons X, technique consistant à mesurer un signal de diffraction en balayant le point d'impact du faisceau de rayons X incident sur la surface des échantillons étudiés. Les expériences seront précédées d'un développement instrumental original sur la ligne de lumière CRISTAL au synchrotron SOLEIL, qui permettra l'utilisation de la micro-diffraction des rayons X dans des environnements échantillon complexes (machines de traction cryogéniques, illumination laser).

Contexte scientifique de l'étude

Ce travail de thèse s'inscrit dans le domaine de la Physique de la Matière Condensée et porte sur le thème des états électroniques quantiques apparaissant dans les solides cristallins. Nous nous intéresserons en particulier aux composés à onde de densité de charge (ODC), caractérisés par une modulation périodique des positions atomiques et de la densité électronique [Figure 1]. En tant qu'ensembles électroniques périodiques, les ODCs sont parfois appelées « cristaux d'électrons ». A l'instar de leurs homologues atomiques, les cristaux d'électrons peuvent se déformer élastiquement, présenter des défauts (dislocations) ou subir des transitions de phase structurales. La thèse sera construite autour de deux objectifs scientifiques :

- **Cartographies de l'état de déformation d'ODCs soumises à une illumination laser.** Dans des systèmes de dimensionnalité 1 à 3, nous chercherons à étudier les effets du photodopage (excitation des électrons de l'ODC vers les bandes de conduction) et des gradients thermiques inhérents à l'excitation laser (génération de champs électriques locaux par effet thermoélectrique) sur la longueur d'onde et la courbure des fronts d'onde des ODCs.
- **Distribution spatiale de phases à ODC à proximité d'une ligne de transition de phase ODC → ODC.** Nous nous intéresserons aux mécanismes d'une transition de phase ODC → ODC orientationnelle récemment mise en évidence dans un composé quasi-2D soumis à une traction uniaxiale. Une coexistence de 2 ODC orthogonales (ODCa et ODCc) a été observée dans un domaine étroit de contraintes mécaniques correspondant à une symétrie particulière de la structure atomique sous-jacente, laissant supposer la présence de domaines ODCa et ODCc et appelant à des études microstructurales avancées.

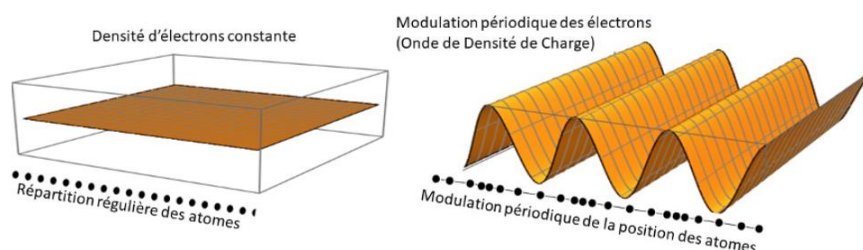


Figure 1 : L'apparition d'une onde de densité de charge (ODC) dans un cristal se caractérise par une modulation périodique des positions atomiques et de la densité électronique au niveau de Fermi, avec la même période.

La diffraction des rayons X permet d'analyser l'amplitude, la direction et la périodicité des modulations liées aux ODCs. Ces trois paramètres seront cartographiés en balayant un faisceau incident de rayons X de taille micrométrique à la surface des échantillons : on parlera alors de **micro-diffraction**. Cette technique repose sur l'obtention de microfaisceaux de rayons X intenses et nécessite l'usage d'une source de rayonnement synchrotron. Au cours de ce travail de thèse, le (la) doctorant(e) sera amené(e) à développer des techniques originales de micro-diffraction des rayons X, compatibles avec une illumination laser et les machines de traction cryogéniques.

Nature des activités et compétences développées

- Développement instrumental

Évaluation des besoins expérimentaux, conception, assemblage et test d'un dispositif de mesure.

- Physique expérimentale

Bibliographie, plans d'expérience, préparation d'échantillons, réalisation d'expériences, analyse de données, campagnes de mesures sur grand instrument.

Techniques : Diffraction des rayons X, optique des rayons X, mesures de transport, scripts python.

- Modélisation

Elasticité, gradients thermiques induits par illumination laser, effet thermoélectrique.

Organisation de la thèse et équipes d'accueil

La thèse se déroulera conjointement au [Laboratoire de Physique des Solides](#) (LPS) et au [Synchrotron SOLEIL](#), deux sites distants de 3 km. Le travail de développement instrumental et les expériences-clefs de la thèse seront menés sur la **ligne de lumière CRISTAL** à SOLEIL. L'analyse des données d'expérience et la réalisation d'expériences complémentaires, en diffraction de laboratoire ou en transport, se feront au sein de l'**équipe LUTÈCE** au LPS.

La micro-diffraction est une technique proposée sur la ligne CRISTAL depuis plus de 10 ans. Il s'agit aussi d'un des grands axes de développement futur de la ligne, dont l'objectif est de rendre accessible la micro-diffraction dans un large ensemble d'environnements échantillon.

L'équipe LUTÈCE a contribué de manière significative dans la description des microstructures d'ODCs sous sollicitations diverses, avec la mesure d'un réseau de solitons d'ODC se manifestant sous courant [1], la mesure résolue en temps de la nucléation-croissance de phases ODC photoinduites [2], la distorsion de fronts d'ODC sous illumination laser ou sous courant [3,4] et enfin la transition de phase orientationnelle d'ODC sous traction uniaxiale [5].

Profil recherché

Le (la) candidat(e) sera titulaire d'un M2 en Physique, Physique de la Matière Condensée ou Sciences des Matériaux, incluant idéalement une formation initiale en Structure de la Matière et Diffraction des Rayons X. Durant le contrat doctoral, le (la) candidat(e) pourra suivre une formation Cristallographie et Grands Instruments pour se familiariser avec les techniques de pointe proposées dans les centres synchrotron et XFEL. Une bonne maîtrise de Python est attendue pour l'analyse des données (travail sur les tableaux, ajustement de courbes, etc.). Les profils de candidat(e)s démontrant une fibre en développement instrumental seront appréciés.

Références

[1] V. Jacques et al, Phys. Rev. B **85**, 035113 (2012) ; [2] C. Laulhé et al, Phys. Rev. Lett. **118**, 247401 (2017) ; [3] V. Jacques et al., Phys. Rev. Lett. **117**, 156401 (2016); [4] E. Bellec et al. Phys. Rev. B **101**, 125122 (2020); [5] A. Gallo-Frantz et al., Nat. Comm. **15**, 3667 (2024).

Pour candidater

Nous accueillons vos candidatures au fil de l'eau. Merci de nous faire parvenir un CV, une lettre de motivation, vos relevés de notes en M1 et M2 ainsi que les noms et adresses e-mail de personnes référentes, sous la forme d'un seul fichier au format pdf.

Contacts : Vincent Jacques [✉](#), Claire Laulhé [✉](#), Pierre Fertey [✉](#)



Microstructure of ordered electronic phases studied by X-ray micro-diffraction

This 3-year PhD contract aims at studying evolutions of the microstructure of quantum electronic states (charge density waves), as induced by optical or mechanical stimuli. The microstructures will be imaged by X-ray micro-diffraction, *i.e.* by measuring a diffraction signal while scanning the position of the incident X-ray beam on the sample surface. To do so, a dedicated setup will be developed at the CRISTAL beamline of SOLEIL synchrotron, that will enable the use of x-ray microdiffraction with complex sample environments (cryogenic traction device, laser illumination...).

Scientific context

This work concerns the Physics of Condensed Matter and more precisely quantum electronic states appearing in crystals. We will particularly focus on Charge Density Wave (CDW) systems, characterized by a periodic modulation of atomic positions and electron density (see Fig. 1). As periodic electronic structures, CDWs are often called “electronic crystals”. Those display their own properties, in particular elastic distortion, defects (dislocations) or structural phase transitions. The PhD thesis will be built on two scientific objectives:

- **Mapping of laser-induced CDW deformations.** We will study the effect of photodoping (excitation of the condensed CDW electrons to conduction bands) as well as the effect of laser-induced thermal gradients (generation of local electric fields through the thermoelectric effect) on the wavelength and curvature of the CDW wavefronts. A wide class of systems with different dimensionalities will be investigated.
- **Spatial distribution of CDW phases close to a CDW orientational transition.** We will study the mechanisms leading to a strain-induced CDW orientational transition that was recently found in a quasi-2D system submitted to a uniaxial stress. We indeed found a coexistence of two orthogonal CDW phases in a narrow range of stresses, corresponding to a specific symmetry of the crystal structure, that requires advanced and dedicated microstructural studies.

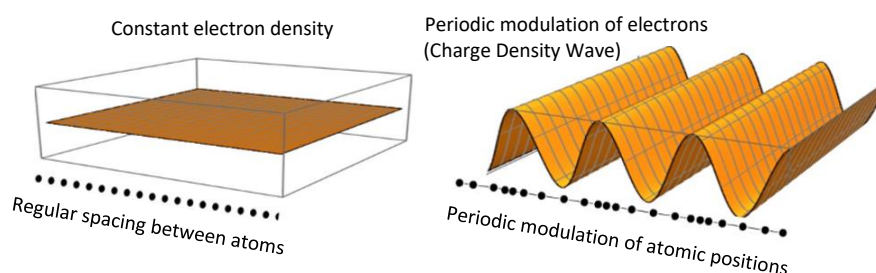


Figure 1 : *The appearance of a Charge Density Wave (CDW) in a crystal is characterized by a periodic modulation of the atomic positions and of the electron density with same periodicity.*

X-ray diffraction allows one to analyse the amplitude, orientation and periodicity of the CDW modulations. These three parameters will be mapped by scanning a micron-sized incident X-ray beam on the sample surface, a technique called **micro-diffraction**. This technique requires using an intense X-ray micro-beam and thus such bright sources as synchrotrons. During this PhD work, the student will develop original X-ray micro-diffraction techniques, compatible with laser excitation and cryogenic traction devices.

Activities & skills developed

- Instrumental development

Assessment of experimental requirements; design, construction and commissioning of a measurement setup.

- Experimental Physics

Bibliography, setting-up experimental strategies, sample preparation, performing experiments, data analysis, experimental campaigns at large scale facilities.

Techniques: X-ray diffraction, x-ray optics, transport measurements, python scripts.

- Modelling

Elasticity, laser-induced thermal gradients, thermoelectric effect.

Organisation of the thesis

The PhD thesis will be performed jointly at [Laboratoire de Physique des Solides](#) (LPS) and [SOLEIL Synchrotron](#), which are 3km apart. The instrumental development and the key-experiments will be performed at the **CRISTAL beamline** of SOLEIL synchrotron. The data analysis and additional experiments (x-ray diffraction and electronic transport) will be performed in the **LUTECE team** at LPS.

The micro-diffraction technique has been used and opened to users for more than 10 years. The beamline aims at developing it further, with the idea of making it compatible with complex experimental environments.

The LUTECE team at LPS significantly contributed to the microstructural description of CDWs under various conditions: measurement of a CDW soliton lattice under electric current [1], time-resolved study of photoinduced CDW phase nucleation and growth [2], CDW wavefront distortion under light excitation or under current [3,4] and orientational CDW phase transition under uniaxial stress [5].

Your profile

Holding a Master's degree in Physics, Condensed Matter Physics or Materials Science, ideally including basics of Structure of Materials and X-ray diffraction. During the PhD contract, you will be able to follow a series of lectures on Crystallography and Large-Scale Facilities to get familiar with state-of-the art techniques proposed at synchrotron and XFEL sources. A good knowledge of Python is expected for data analysis (work on arrays, fitting procedures etc). The applicants with a taste for instrumental development will be appreciated.

References

[1] V. Jacques et al, Phys. Rev. B **85**, 035113 (2012) ; [2] C. Laulhé et al, Phys. Rev. Lett. **118**, 247401 (2017) ; [3] V. Jacques et al., Phys. Rev. Lett. **117**, 156401 (2016); [4] E. Bellec et al. Phys. Rev. B **101**, 125122 (2020); [5] A. Gallo-Frantz et al., Nat. Comm. **15**, 3667 (2024).

How to apply

We welcome applications on a rolling basis. Please send us a CV, a cover letter, your marks obtained in Master 1 and Master 2, as well as the names and email addresses of referees of your choice, in a single .pdf file.

Contacts : Vincent Jacques [✉](#), Claire Laulhé [✉](#), Pierre Fertey [✉](#)

