


I Sr_2RuO_4 : Structure et Diffraction

- 1) maille quadratique contient 2 nœuds pour le réseau centré
Chaque nœud est décoré par un motif $\text{Sr}_2\text{RuO}_4 \Rightarrow 2 \text{ motifs / maille}$
- 2) RR quadratique de paramètres $\frac{2\pi}{a^2} \vec{a}^2$; $\frac{2\pi}{a^2} \vec{b}^2$; $\frac{2\pi}{c^2} \vec{c}^2$
- 3)  $k_i = k_s = \frac{2\pi}{\lambda}$ Condition de Bragg $\vec{k}_s - \vec{k}_i = \vec{G}_{hkl}$
 $\Rightarrow \frac{4\pi}{\lambda} \sin \theta = G_{hkl} = \frac{2\pi}{a} \sqrt{h^2 + k^2 + \frac{c^2}{a^2}}$
 hkl est les coord. d'un nœud du RR.
- 4) intensité non nulle si $\sin \theta = \frac{1}{2a} \sqrt{h^2 + k^2 + \frac{c^2}{a^2}}$
- 5) $c > a$; le premier pic de Bragg est (001); $2\theta_{001} = 2 \arcsin\left(\frac{1}{2c}\right)$
 $\Rightarrow 2\theta_{001} = 6,84^\circ$. On constate que ce pic est éteint.
- 6) $Z_o \ll Z_{\text{Sr}}, Z_{\text{Ru}}$, l'oxygène contribuera peu à la diffraction des rayons X. Pour les neutrons, il faut regarder les longueurs de diffusions associées à chaque élément.

$$S_{hkl} = f_{\text{Ru}} (1 + e^{i\pi(h+k+l)}) + f_{\text{Sr}} (1 + e^{i\pi(h+k+l)}) \left(e^{i2\pi(hx_1 + ky_1 + lz_1)} + e^{i2\pi(hx_2 + ky_2 + lz_2)} \right)$$

$$7) S_{hkl} = (1 + e^{i\pi(h+k+l)}) \left(\dots \right)$$

$= 0$ si $h+k+l = 2n+1 \equiv$ condition des extinctions systématiques.

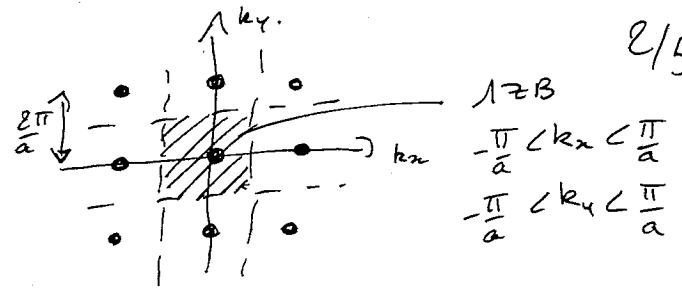
h	k	l	$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{h^2+k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}}$	$2\theta_{hkl}$	$h+k+l$	extinction
		0 0 1	$\frac{1}{2c}$	$6,84^\circ$	1	oui
①	1 0 0	2	$\frac{1}{c}$	$13,71^\circ$	2	non
	0 0 3	3	$\frac{3}{2c}$	$20,63^\circ$	3	oui
③	1 0 0	4	$\frac{2}{c}$	$27,62^\circ$	4	non
	1 0 0	1	$\frac{1}{2a}$	$22,75^\circ$	1	oui
②	1 0 1	2	$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{a^2} + \frac{1}{c^2}}$	$23,79^\circ$	2	non
(1 1 0	2	$\frac{1}{a\sqrt{2}}$	$32,4^\circ > 30^\circ$	2	non
	1 0 3	4	$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{a^2} + \frac{9}{c^2}}$	$30,9^\circ > 30^\circ$	4	non

II Modèle de liaisons fortes

2/5

1. RR carré de paramètre $\frac{2\pi}{a}$.

2. $C_{m',n'} = e^{ik_x(n'-n)a + ik_y(m'-m)a} C_{m,n}$



3. $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \Rightarrow \langle \phi_{00} | H | \psi \rangle = E \langle \phi_{00} | \psi \rangle$

$\Rightarrow \varepsilon_{00} - t_y(C_{01} + C_{0,-1}) - t_x(C_{10} + C_{-1,0}) - t'(C_{11} + C_{-1,-1} + C_{-1,1} + C_{1,-1}) = E C_{00}$
 \Rightarrow Solution non nulle ($C_{00} \neq 0$) ssi

$$E = \varepsilon_0 - 2t_y \cos(k_y a) - 2t_x \cos(k_x a) - 2t' [\cos(k_x + k_y)a + \cos(k_x - k_y)a]$$

$$E = \varepsilon_0 - 2t_x \cos(k_x a) - 2t_y \cos(k_y a) - 4t' \cos k_x a \cos k_y a$$

4-a) Pour la bande d_{xy} , $E = \varepsilon_0 - 2t(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) - 4t' \cos k_x a \cos k_y a$
 au voisinage du minimum ($E = \varepsilon_0 - 4t - 4t'$ pour $k_x = 0, k_y = 0$).

$$E \approx \varepsilon_0 - 2t \left(1 - \frac{k_x^2 a^2}{2} + 1 - \frac{k_y^2 a^2}{2} \right) - 4t' \left(1 - \frac{k_x^2 a^2}{2} \right) \left(1 - \frac{k_y^2 a^2}{2} \right)$$

$$\approx \varepsilon_0 - 4t - 4t' + (t a^2 + 2t' a^2) k_x^2 + (t + 2t') a^2 k_y^2 + O(k^2)$$

$$\approx \varepsilon_0 - 4t - 4t' + (t + 2t') a^2 k^2 + O(k^2)$$

Forme parabolique de type e⁻ libre avec $\frac{\hbar^2}{2m^*} = (t + 2t') a^2$

$$\Rightarrow m^* = \frac{\hbar^2}{2(t + 2t') a^2}$$

b) $E(k_x, k_y = 0) = \varepsilon_0 - 2t_x \cos(k_x a) - 4t' \cos(k_x a) - 2t$
 $= \varepsilon_0 - 2t - 2\cos(k_x a) [t + 2t']$

$E_F = 0 = \varepsilon_0 - 2t - 2\cos(k_{F_x} a) [t + 2t']$

$$|k_{F_x} = \frac{1}{a} \arccos \left(\frac{\varepsilon_0 - 2t}{2(t + 2t')} \right)$$

AN: $|k_{F_x} = 0,71 \text{ \AA}^{-1}|$
 (ligne de Fermi \equiv cercle de rayon k_{F_x})

5 - Pour d_{zx} , $E = \varepsilon_0 - 2t_x \cos k_x a \Rightarrow E_F = 0 = \varepsilon_0 - 2t_x \cos k_{F_x} a$
 lignes de Fermi: k_y quelconque et $k_{F_x} = \pm \frac{1}{a} \arccos \left(\frac{\varepsilon_0}{2t_x} \right)$
 \Rightarrow 2 segments $\perp k_x$.

AN: $|k_{F_x}^{(3D)} = \pm 0,57 \text{ \AA}^{-1}|$

a) $2\mu\text{eV}$ e^- éjectés par photoémission et analysés en moment d'énergie.

b) c) $g(k) = \frac{2S}{(2\pi)^2} \Rightarrow$ nbr d'états ds la 1^{re} BZ $\left(\frac{2\pi}{a} \right)^2 g(k) = 2 \frac{S}{a}$

$\frac{\pi}{a} = 0,80 \text{ \AA}^{-1}$ nbr d'états occupés dans 1 bande $\int_{k \leq k_F} g(k) d^2k = g(k) \times$ aire ds l'espace des k délimitée par la ligne de Fermi.

bande d_{xy} : $\frac{\pi k_F^2}{(\frac{2\pi}{a})^2} = 61\%$

3/5

bandes d_{3z^2} (d_{3y^2}) : $\frac{2k_F^2 \times \frac{2\pi}{a}}{(\frac{2\pi}{a})^2} = \frac{2k_F^2}{(2\pi/a)} = 71\%$

d) A chaque croisement de bandes, la dégénérescence est levée avec apparition d'un gap $\vdash \Rightarrow \swarrow$

III Phase Supraconductrice

Capacité calorifique

1. a) $0 \rightarrow k_B T \Rightarrow \Delta E \approx k_B T \times [g(E_F) k_B T] \Rightarrow C = \frac{dE}{dT} \propto T$
dans un métal décrit par le modèle d'électrons libres.

b) $E(T) = \int_0^\infty g(E) \frac{E}{1 + e^{\frac{E-E_F}{k_B T}}} dE = A \int_0^\infty \frac{E^{3/2}}{1 + e^{\frac{E-E_F}{k_B T}}} dE$
(à 3D $g = \frac{1}{2}$)

$\approx A E_F^{5/2} \left[\frac{2}{5} + \frac{\pi^2}{6} \frac{3}{2} \left(\frac{k_B T}{E_F} \right)^2 \right]$

$\Rightarrow C \approx A E_F^{5/2} \frac{\pi^2}{6} \frac{3 k_B^2}{E_F^2} T$ avec $g(E_F) = \frac{3N}{2E_F} = A \sqrt{E_F}$
 $\Rightarrow A = \frac{3N}{2 E_F^{3/2}}$

$\Rightarrow \boxed{C \approx \frac{3N \pi^2 k_B^2}{4} \frac{T}{E_F}}$

c) $\frac{C}{T} \approx 38 \text{ mJ/K}^2 \text{ mol} = \frac{3}{4} \frac{\pi^2 k_B^2}{E_F} \times 4 (4e^- \text{ par mole de SrRuO}_4)$

$\Rightarrow E_F = 0,56 \text{ eV} \Rightarrow k_F = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE_F} \approx 0,38 \text{ \AA}^{-1}$

k_F est substantiellement réduit / aux résultats de photoémission.
 \Rightarrow modèle d' e^- libre peu réaliste.

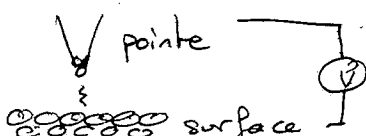
2. A $T=0$ $\mu_0 H_c \approx 1,55(5) \text{ T}$

$\frac{1}{2} \mu_0 H_c$ est l'énergie de condensation du supra correspondant à l'énergie magnétique nécessaire pour maintenir $B=0$ dans le supra (effet Meissner).

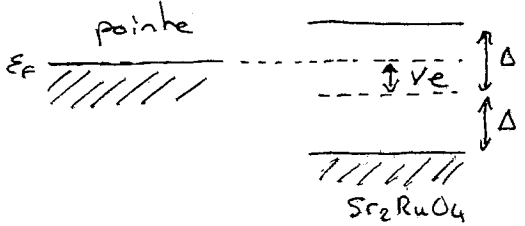
$\Rightarrow \Delta = \frac{1}{2\mu_0} (\mu_0 H_c)^2 \times \frac{1}{n} \approx 4,34 \cdot 10^{-23} \text{ J} \approx 0,27 \text{ meV}$

avec BCS $\Rightarrow T_c \approx 1,8 \text{ K} > 1,5 \text{ K observé}$

\Rightarrow supra non-conventionnel

- 1 -  passage d'un courant de la pointe à la surface par effet tunnel

Ce courant est \propto à la différence de potentiel chimique entre la pointe et la surface donc à V .

- 2 -  tunneling si états disponibles du côté Sr_2RuO_4
 $eV > \Delta$ ou $eV < -\Delta$
 on observe $\Delta \sim 0,2 \text{ meV}$ cohérent avec chaleur spécifique.

IV Dérivés de Sr_2RuO_4

- 1 - Pour les faibles teneur en Ca - jusqu'à $x = 0,2$ comportement métallique avec ρ croissant en T
 au dessous de $x = 0,15$ transition métal isolant avec comportement isolant ($\rho \downarrow$ avec T) à basse T
 la T de la transito Π -I \uparrow avec le taux de Ca
 et Ca_2RuO_4 semble toujours isolant.

$$0,15 < x_c < 0,2$$

- 2 - $\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$ Drude

Peu de différence de structure (changement des paramètres de maille) \Rightarrow spectre de phonons similaire entre

Ca et Sr \Rightarrow on attend des τ similaires.

la différence de comportement doit s'expliquer par une différence de la variation $n(T) \sim$ cste ds le métal
 Sr_2RuO_4 et de type semi-conducteur $n(T) \propto e^{-\frac{E_g}{2k_B T}}$
 ds Ca_2RuO_4 .

à faible x , le comportement ressemble à la transition métal-isolant de Peierls (transition métal-isolant \Leftrightarrow transition structurale)

3 - Diffraction de neutrons. On doit voir apparaître de nouveaux pics de Bragg "magnétiques" (en dehors des pics structuraux) - En particulier on peut les conditions d'extinction dans la phase magnétique.

