

## La structure électronique du SrCu<sub>2</sub>(BO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> en EELS : anisotropie et corrélations électroniques

G. Radtke<sup>a,\*</sup>, A. Saul<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Laboratoire TECSSEN, UMR 6122 CNRS, Faculté des Sciences, case 262, Université Paul Cézanne-Aix Marseille III, 13397 Marseille cedex20, France

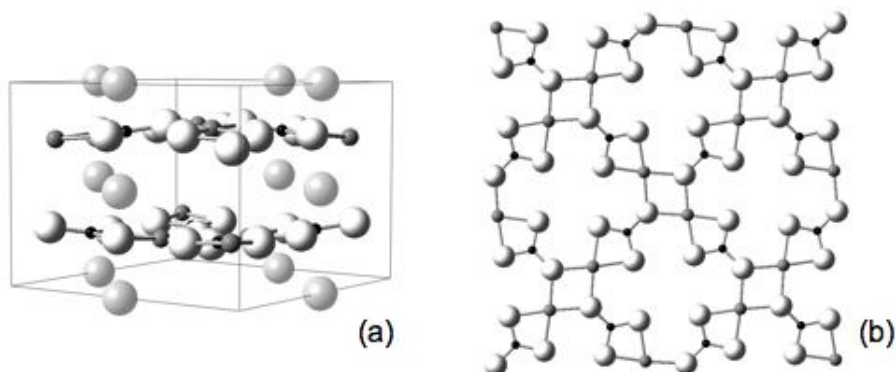
<sup>a</sup> Centre de Recherche en Matière Condensée et Nanosciences CNRS, Campus de Luminy, case 913, 13288 Marseille cedex9, France

---

**Résumé** – Nous présentons une étude expérimentale et théorique de la structure électronique du SrCu<sub>2</sub>(BO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> à travers l'analyse de la structure fine des seuils K du bore et de l'oxygène enregistrés en spectroscopie de pertes d'énergie des électrons. La possibilité de sélectionner l'orientation du vecteur de diffusion  $\mathbf{q}$  par rapport au repère du cristal dans un microscope électronique à transmission conventionnel a permis d'obtenir une information précise sur l'orientation spatiale des états électroniques sondés. En outre, la modélisation des signatures expérimentales a permis de mettre en évidence le rôle important joué par les corrélations sur la structure électronique de ce matériau.

---

La spectroscopie de pertes d'énergie des électrons figure parmi les techniques expérimentales les plus puissantes permettant d'étudier la structure électronique des solides. Les récents progrès en matière d'instrumentation (dans le domaine des spectromètres à haute résolution et des monochromateurs) permettent désormais d'obtenir une résolution en énergie avoisinant 0.1eV et ainsi de mesurer la structure fine des seuils d'ionisation avec une précision jusqu'alors inaccessible. Par ailleurs, le développement de codes de calcul de structure électronique permet une analyse de plus en plus fine des structures expérimentales. Il est désormais possible d'obtenir une information très précise sur la géométrie locale autour de l'atome excité et sur les liaisons chimiques qu'il établit avec les atomes voisins ou, dans le cas des métaux de transition et des terres rares, de déterminer leur valence formelle et leur état de spin. Les mesures de structure fine résolues en  $\mathbf{q}$  (moment transféré), largement facilitées dans un microscope électronique à transmission conventionnel par la possibilité de travailler avec une illumination parallèle, permet en plus d'obtenir une information sur l'orientation spatiale des états électroniques sondés dans les matériaux anisotropes.



**Figure 1** – (a) Maille tétragonale du SrCu<sub>2</sub>(BO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> et (b) portion d'une couche de CuBO<sub>3</sub> (noir : B, gris : Cu et blanc : O).

Nous présentons une étude expérimentale et théorique de la structure électronique de l'orthoborate SrCu<sub>2</sub>(BO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> à travers notamment l'analyse des seuils K du bore et de l'oxygène. Ce composé présente une structure tétragonale constituée par l'empilement de couches de [CuBO<sub>3</sub>] selon la direction [001] et séparés par les ions Sr<sup>2+</sup> (figure 1). Ces couches sont elles mêmes constituées de deux types d'unités structurales planes, triangulaires de BO<sub>3</sub> et rectangulaires de CuO<sub>4</sub>. Deux unités CuO<sub>4</sub> adjacentes partagent une arête pour former un dimer lui-même relié aux autres dimers de la couches par une unité BO<sub>3</sub>. Les ions Cu<sup>2+</sup> portant un spin 1/2 localisé sont responsables du magnétisme [1,2] dans ce composé qui est connu comme la première réalisation du modèle de Shastry-Sutherland [3]. La spectroscopie de pertes d'énergie des électrons est un outil parfaitement adapté à l'étude de la structure électronique d'un tel composé ; d'une part, parce que ses propriétés dépendent largement des trous 3d portés par les atomes de cuivre et qui peuvent donc être sondés par cette spectroscopie et d'autre part, parce qu'une information sur l'orientation spatiale de ces états électroniques peut être déduite à partir

---

\* Auteur à contacter : guillaume.radtke@univ-cezanne.fr – Tel : 04 91 28 90 12

d'expériences résolues en  $\mathbf{q}$ . Nous allons donc montrer comment l'étude expérimentale et théorique de la structure fine des seuils K du bore et de l'oxygène permet de comprendre la structure électronique complexe de ce composé et notamment de mettre en évidence le rôle important joué par les corrélations électroniques.

### Références

- [1] H. Kageyama et al., *Phys. Rev. Lett.* **82** (1999) 3168.
- [2] S. Miyahara et al., *cond. mat.* (1999) 9807075.
- [3] B. S. Shastry et al., *Physica B & C* **108B** (1981) 1069.