

Quelques résultats concernant les matériaux $\text{Na}_x\text{-Co-O}_2$: modèle structural et conséquences magnétiques.

G. Collin, H. Alloul, J. Bobroff, D. Colson(*), G. Lang,
Ph. Mendels, I. Mukhamedshin(**), N. Blanchard

Laboratoire de Physique des Solides Orsay, (*) SPEC Saclay, (**) Kazan State University.

L'étude des propriétés des cobaltites de sodium $\text{Na}_x\text{-Co-O}_2$ se heurte à plusieurs types de difficultés dont une détermination suffisamment précise de la composition n'est pas la moindre. Il est deux raisons principales à cet état de chose :

1) la composition 'vraie' ne dépend que du degré d'oxydation du cobalt, lui-même imposé par les conditions d'élaboration essentiellement température et nature de l'atmosphère. Il en résulte souvent des écarts importants entre compositions 'nominales' et 'intrinsèques'.

2) du fait du caractère superconducteur ionique des matériaux il est souvent difficile, lors des expériences, d'éviter tout échange avec l'atmosphère avec la conséquence de changements apparemment 'spontanés' de composition.

De plus la situation est encore compliquée par l'existence de deux types d'empilement ; hexagonal ou 'two layers' et rhomboédrique ou 'three layers' dont les domaines de stabilité sont distincts mais sont parfois en recouvrement

Les études structurales constituent une voie d'accès à l'étude de ces systèmes dans des conditions relativement aisées : en effet, on observe systématiquement, et sur tout le diagramme de phase, la présence de pics de diffractions additionnels (corrélations 3-D) qui découpent le système en un grand nombre de domaines, séparés entre eux par des gaps de composition (mélange de phases). Les structures sont pour l'essentiel 'incommensurables' avec une évolution régulière de la composante $q(b^*)$ du vecteur d'onde de modulation en fonction de la teneur en sodium. Chacun de ces domaines présente de plus un comportement magnétique spécifique.

On présentera un modèle phénoménologique de distribution des ions sodium, modèle conforté par des calculs DFT-GGA+U (1). On montrera l'évolution du diagramme de phase magnétique en fonction de la concentration en sodium (degré d'oxydation du cobalt). On détaillera quelques exemples concernant les matériaux qui apparaissent comme des « pôles de référence » $x(\text{Na})$ 1/2, 2/3, 5/6, ...

(1)Y. Hinuma et al., Phys. Rev. B, 77, 224111, 2008