

Les isolants de Mott, des conducteurs bloqués

Antonio Tejeda et Arantzazu Mascaraque

Certains conducteurs électriques deviennent isolants quand on modifie la pression ou la température. Les physiciens tentent de mieux comprendre ce phénomène en l'étudiant sur des matériaux bidimensionnels.

Les alchimistes voulaient changer le plomb en or, mais cela s'est révélé être une chimère. Il est toutefois possible de changer certains conducteurs électriques en isolants, ce qui est en fait aussi étonnant que le grand œuvre des alchimistes...

Ces conducteurs, des métaux qui se muent en isolants quand on baisse la pression ou la température, alors qu'ils devraient, selon les critères théoriques usuels, rester conducteurs, sont nommés isolants de Mott. Le changement qui fait passer ces matériaux de l'état de conducteur à celui d'isolant et *vice versa* est ce que les physiciens nomment une transition de phase. Comment ont débuté et progressé les recherches sur la transition métal-isolant ? Où en est-elle aujourd'hui ? C'est ce que nous allons examiner ici. Nous verrons en particulier que les physiciens étudient actuellement une classe d'isolants de Mott où la transition ne concerne que la surface du matériau et dont les détails sont accessibles à l'analyse expérimentale et théorique. C'est dans un tel système, une surface de germanium recouverte d'une monocouche ordonnée d'atomes d'étain, que nous avons découvert en 2006 une transition métal-isolant, liée à l'évolution de la répartition des atomes d'étain avec la température.

L'ESSENTIEL

✓ Les isolants de Mott passent de l'état conducteur à celui d'isolant quand on change la température ou la pression.

✓ L'état isolant de ces matériaux s'explique en tenant compte des interactions des électrons dans le réseau cristallin.

✓ Comme l'indiquent des études en deux dimensions, la transition conducteur-isolant est liée à une modification de la structure cristalline du matériau.

Albert Marini/Investigacion y Ciencia

Les isolants de Mott sont une anomalie parmi les matériaux conducteurs, isolants ou semi-conducteurs. Pour bien saisir pourquoi, évoquons d'abord les principes de construction de ce pan si important de la physique des solides du XX^e siècle qu'est la « théorie des bandes », et soulignons lequel se révèle faux dans le cas des isolants de Mott.

Initialement, la théorie des bandes a été développée pour décrire les conducteurs métalliques. Dans ces matériaux, la fonction décrivant l'état quantique d'un électron mobile – la « fonction d'onde » ou l'« orbitale électronique » de cet électron – est délocalisée. Cela signifie que l'espace où peut se trouver un tel électron de conduction s'étend à tout le matériau : il n'est pas attaché à un atome particulier. En outre, dans un tel conducteur, la superposition des orbitales a pour résultat que les énergies possibles pour les électrons sont réparties en bandes permises, séparées par des bandes interdites. Ainsi, les électrons délocalisés ont non seulement leurs énergies dans la bande de conduction (la bande permise la plus haute dans l'échelle des énergies), mais ils sont aussi partagés entre un grand nombre des atomes du matériau.

La théorie des bandes a toute une histoire qui s'achève en 1928 avec la contribu-

tion majeure du physicien suisse Félix Bloch (1905-1983). C'est lui qui a introduit l'idée que les électrons d'un matériau cristallin (un métal par exemple) sont soumis à une énergie potentielle périodique, due au motif répétitif de la structure atomique d'un cristal. Bloch a montré que la périodicité des orbitales atomiques crée la structure en bandes d'énergies permises et interdites.

De même que l'on monte un escalier en commençant par le bas, les électrons remplissent les bandes permises à partir de la plus petite énergie, car chaque orbitale ne peut contenir que deux électrons. Dans un métal non excité, l'énergie maximale des électrons est égale au « niveau de Fermi », un paramètre qui dépend du matériau et de la température. Les électrons dont l'énergie a une valeur proche du niveau de Fermi peuvent accéder, moyennant un apport d'énergie (grâce à un champ électrique par exemple), aussi petit soit-il, à des niveaux inoccupés. Ces électrons se déplacent alors dans le matériau pratiquement comme s'ils y étaient libres, sans interagir avec les autres électrons : c'est pourquoi la théorie de Bloch porte le nom de modèle des électrons quasi libres.

Quand la théorie des bandes montre ses limites

Le niveau de Fermi, défini ci-dessus pour des métaux, est un paramètre que l'on peut aussi définir pour les isolants. Selon la théorie des bandes, la position du niveau de Fermi détermine la nature conductrice ou non du matériau. Si le niveau de Fermi se trouve au milieu d'une bande d'énergies permises, le matériau est un métal. Quand, au contraire, il se trouve dans une bande interdite, au-dessus de la dernière bande permise complètement occupée, le matériau est un isolant : aucun électron n'acquiert, sous l'influence d'un champ électrique ordinaire, assez d'énergie pour atteindre un niveau permis et ainsi se déplacer librement.

La théorie des bandes explique le comportement des conducteurs métalliques et des isolants, mais est-elle toujours valable ? Dès 1937, les physiciens néerlandais Jan De Boer et Evert Verwey ont remarqué que l'oxyde de nickel et d'autres métaux de transition sont de mauvais conducteurs de l'électricité, alors qu'ils ont des bandes d'énergie *a priori* partiellement

occupées. La théorie des bandes, pourtant si efficace, semblait contredite, ce qui a fasciné les physiciens et amorcé le développement d'une nouvelle théorie.

C'est le Britannique Nevill Mott (1905-1996) qui expliquera l'échec de la théorie des bandes en décrivant le comportement de ces isolants, qui porteront plus tard son nom. La théorie des bandes est en effet fondée sur l'idée que les interactions entre électrons sont négligeables. Or ce pré-supposé perd sa validité pour certains matériaux et dans certaines circonstances.

Bande de conduction dédoublée

Comme les électrons sont tous de même charge négative, leurs interactions sont des forces électrostatiques de répulsion telles que les décrit la loi de Coulomb, c'est-à-dire inversement proportionnelles au carré de leur distance. Aussi Mott a-t-il remarqué que, dans leurs déplacements d'un atome à l'autre, deux électrons peuvent se retrouver sur la même orbitale et y exercer une répulsion mutuelle. Il supposa que dans les matériaux censés être des conducteurs selon la théorie des bandes, mais qui ne le sont pas, cet effet doit être important.

Plus précisément, imaginons d'abord que chaque atome héberge deux électrons dans la bande de conduction. Quand leur énergie cinétique est faible, ces électrons sont peu mobiles et peuvent donc rester longtemps liés au même atome. Toutefois, en raison de la force de répulsion qu'ils exercent l'un sur l'autre, ils tendent à s'éloigner.

Ce phénomène se traduit de façon collective par un dédoublement de la bande de conduction en deux bandes séparées. Ce dédoublement correspond au remplacement de chaque état d'énergie initial, capable d'héberger deux électrons de spins différents, par deux états distincts d'énergies différentes, chacun capable d'héberger l'un des deux électrons. Cela peut créer une bande d'énergie inférieure complètement saturée en électrons, et une bande d'énergie supérieure inoccupée.

En d'autres termes, le niveau de Fermi se retrouvant dans une bande interdite entre la bande permise inférieure et la

1. ISOLANT OU CONDUCTEUR ? La compréhension des propriétés électroniques de certains matériaux est un défi pour les physiciens.