

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.

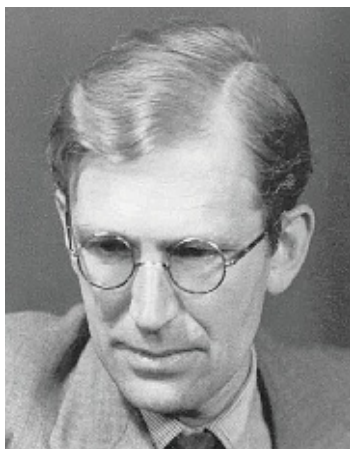
En d'autres termes, le niveau de Fermi se retrouvant dans une bande interdite entre la bande permise inférieure et la

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



Sir Nevill Mott

✓ Né à Leeds en 1905, Nevill Mott, devenu professeur de physique théorique à l'Université de Bristol, puis directeur de l'Institut Cavendish à Cambridge, s'est consacré toute sa vie à appliquer la théorie quantique aux solides, publiant son premier article en 1927 et son dernier en 1996, l'année de sa mort. Son nom est associé à de nombreux concepts de la physique moderne.



Physics Portrait Gallery/Univ. de Bristol

bande supérieure, aucun électron ne peut profiter des orbitales vides voisines pour quitter son atome et permettre la conduction électrique. Le matériau, qui selon la théorie des bandes (quand on néglige les interactions des électrons) devrait être conducteur, est en réalité isolant.

Puisque les métaux existent, tous les matériaux ne subissent pas ce processus, mais certains tendent plus que d'autres à passer de conducteur en isolant. Quels sont les effets qui conduisent à la transition métal-isolant ?

Mott a identifié que la pression exercée sur le matériau était l'un de ces effets. Plus précisément, si l'on suppose un matériau métallique au sein duquel des électrons de conduction sont quasi libres, son étirement, c'est-à-dire l'application d'une pression négative, écarte les atomes. Au-delà d'un certain étirement, les électrons ne peuvent plus passer facilement d'un atome à l'autre. Ils perdent leur mobilité et cessent d'interagir avec leurs semblables ; le système ressemble alors à un ensemble d'atomes isolés où chaque électron est localisé autour d'un atome, situation où le matériau est isolant.

Une autre façon simple de modifier l'interaction électronique est de diminuer la température. À très basse température, chaque électron localisé près d'un ion dispose de si peu d'énergie que la simple présence d'un autre électron sur un atome voisin suffit à le repousser et donc à le confiner sur son atome. Comme les pressions négatives, l'abaissement de la température peut donc transformer certains matériaux en isolants. C'est précisément ce que nous avons observé sur un système constitué d'étain déposé sur un substrat de germanium.

Si le principe de la transition métal-isolant a été éclairé par les travaux de Mott, bien des questions restent aujourd'hui ouvertes sur le magnétisme du matériau ou sur les états métalliques anormaux qui se créent lors de cette transition. Par

ailleurs, l'intérêt pour les isolants de Mott s'est renouvelé depuis la découverte en 1986 par Georg Bednorz et Alex Müller, du Laboratoire de recherche d'IBM à Zurich, d'une famille de composés qui restent supraconducteurs à température relativement élevée, parfois supérieure à celle de l'ébullition de l'azote liquide. Il s'agit de céramiques, c'est-à-dire des substances non organiques et non métalliques, cristallines ou vitrifiées. Or la plupart des physiciens pensent que la supraconductivité à haute température et la transition métal-isolant sont des phénomènes liés. La proximité entre les deux types de matériaux s'observe par exemple sur leurs « diagrammes de phase », graphiques qui indiquent les états macroscopiques du système en fonction de certaines variables (la température par exemple). L'étude de la transition métal-isolant éclairera donc peut-être le mécanisme complexe de la supraconductivité à haute température.

La photoémission à haute résolution : une nouvelle technique

Une puissante méthode – la photoémission à haute résolution – facilite aujourd'hui l'étude expérimentale des isolants de Mott. Cette technique consiste à provoquer grâce à une illumination assez intense un fort effet photoélectrique, puis à recueillir et à analyser, en énergie et en angle, le flux d'électrons produits. À ces possibilités expérimentales s'ajoutent de nouvelles approches théoriques (théorie du « champ moyen dynamique ») qu'ont développées Antoine Georges, de l'École polytechnique près de Paris, et Gabriel Kotliar, de l'Université Rutgers dans le New Jersey.

C'est dans cette mouvance que s'inscrit notre travail sur l'observation en surface de la transition métal-isolant. Pourquoi avoir choisi d'étudier les isolants de Mott à deux

2. LE SYNCHROTRON SLS, de l'Institut Paul Scherrer, près de Zurich, en Suisse, est l'instrument avec lequel les auteurs ont réalisé leurs expériences de photoémission à haute résolution.



Wikimedia Commons/Habi