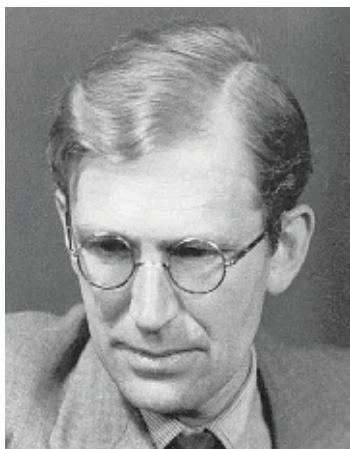


## Sir Nevill Mott

✓ 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

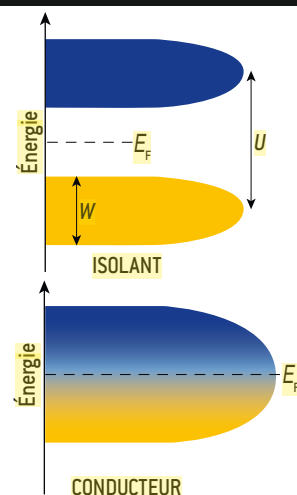
La conductivité d'un matériau, c'est-à-dire son aptitude à laisser passer les charges électriques, est déterminée par la structure de ses bandes d'énergies électroniques et par la position de son niveau de Fermi  $E_F$ . Les niveaux électroniques non occupés de plus basse énergie forment la bande de conduction (en bleu); les niveaux occupés de plus haute énergie forment la bande de valence (en orange). Dans les conducteurs, par exemple dans les métaux, le niveau de Fermi se trouve dans une bande permise, où il constitue le plus haut niveau d'énergie occupé:

les bandes de conduction et de valence se rejoignent. Dans les isolants, en revanche, le niveau de Fermi se situe dans une bande interdite. L'écart d'énergie correspondant empêche le passage des électrons vers la bande de conduction.

Dans certaines circonstances, la conductivité est altérée par la répulsion mutuelle des électrons. Certains matériaux, qui devraient être des métaux (car leur dernière bande est partiellement occupée), se comportent comme des isolants parce que l'énergie qui y est nécessaire pour vaincre la répulsion entre élec-

trons ( $U$ ) se révèle supérieure à la largeur de la bande ( $W$ ). Ainsi, les interactions entre électrons dans ces matériaux ont pour effet de doubler la bande à moitié remplie en deux bandes séparées par un saut d'énergie  $U$ , l'une, la bande inférieure, complètement remplie et l'autre, la bande supérieure, complètement vide.

Ces matériaux, qui se comporteraient comme des conducteurs si les interactions entre les électrons ne les obligeaient pas à se changer en isolants, sont ce que l'on nomme des isolants de Mott.



dimensions? Lorsque deux électrons se déplacent librement dans les trois directions de l'espace, leur répulsion électrostatique peut *a priori* les envoyer dans toutes les directions, de sorte qu'ils sont difficiles à localiser. Or, comme nous le verrons plus loin, les orbitales atomiques nécessaires pour former un isolant de Mott n'apparaissent que dans les systèmes où la localisation des électrons est relativement facile. Il aurait donc été dommage de ne pas profiter de cet avantage et de ne pas exploiter toutes les techniques de la physique de surface pour étudier précisément les isolants de Mott à seulement deux dimensions.

Soulignons toutefois que les systèmes physiques bidimensionnels ont souvent des propriétés très différentes de celles des systèmes tridimensionnels. Cela se manifeste dans bien des situations: par exemple, un matériau qui est magnétique à trois dimensions ne l'est plus forcément lorsqu'il est à l'état de couche mince.

Qu'est-ce qui change dans la pratique lorsqu'on étudie un phénomène électronique en surface? Pour que le système atteigne une énergie et une réactivité minimales, les positions atomiques – et les orbitales électroniques associées – tendent à se modifier par rapport à celles qui existent en volume. En surface, en raison de la disparition d'une partie des forces interatomiques, les atomes de la couche externe d'un cristal sont en effet susceptibles de se réorganiser. Ces réarrangements de surface sont qualifiés de «reconstructions».

De même que le cristal est caractérisé par une maille volumique, un motif tridi-

mensionnel d'atomes qui, répété dans toutes les directions, reproduit tout le cristal, une surface cristalline est caractérisée par une maille surfacique. On caractérise les reconstructions par deux nombres  $x$  et  $y$ , qui déterminent la partie de la surface à répéter par rapport à la maille volumique du cristal. Ces deux nombres, présentés sous la forme  $(x \times y)$ , sont éventuellement suivis par la donnée de l'orientation de la reconstruction (de la maille surfacique) par rapport aux directions principales des couches profondes, précédée de la lettre R. Par exemple, la reconstruction  $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$  décrit une réorganisation de la monocouche de surface aboutissant à un motif dont les deux faces ont une longueur égale à  $\sqrt{3}$  fois la longueur d'une face de la maille volumique et qui est en outre tourné de  $30$  degrés par rapport aux mailles des couches profondes.

## Isolant de Mott à deux dimensions

Pour réaliser un isolant de Mott à deux dimensions, les surfaces semi-conductrices étaient les meilleures candidates, car leurs bandes d'énergie électronique sont étroites. Les électrons y sont pour cette raison assez localisés, de sorte que l'on peut s'attendre à ce que la répulsion coulombienne ait un effet important. Les expériences portant sur des surfaces ont débuté dans les années 1990, mais jusqu'en 2006, les seules surfaces identifiées comme isolants de Mott étaient une variété de carbure de silicium (SiC) ou le silicium lui-même. Dans ce dernier cas, il faut modifier

le nombre d'électrons de surface par dopage (addition) simultané de bore et de potassium, ce qui produit une bande de conduction à moitié remplie.

En 1997, Hanno Weitering, de l'Université du Tennessee à Knoxville, aux États-Unis, a étudié avec ses collègues une reconstruction  $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$  réalisée à partir d'une couche mince de potassium déposée sur du silicium dopé avec du bore. Une telle surface plate a une maille surfacique ne comportant qu'un seul électron disponible. L'un des résultats de la théorie des bandes est que si le nombre total d'électrons dans la maille est impair, alors la bande de conduction est à moitié remplie, de sorte que le solide est un conducteur métallique. La détermination expérimentale des états électroniques par photoémission à haute résolution a cependant montré que le système de H. Weitering ne se comportait pas comme un conducteur.

La photoémission à haute résolution peut être inversée en envoyant des électrons sur le matériau, puis en détectant cette fois les photons émis, ce qui permet d'étudier les états électroniques vides du système (que les électrons incidents remplissent en émettant des photons). En procédant ainsi, H. Weitering a pu conclure que son système à reconstruction  $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$  est un isolant de Mott, même si son équipe n'a pu observer directement la transition métal-isolant.

À la même époque, Leif Johansson de l'Université de Linköping, en Suède, Jean-Marc Themlin, à Marseille, et leurs collègues travaillaient pour leur part sur