

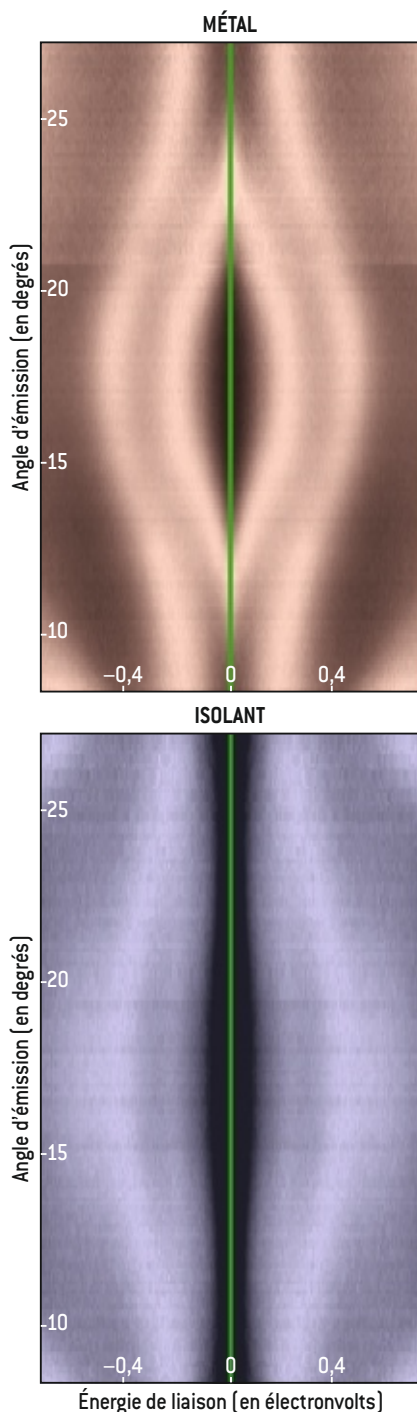
une surface de structure pratiquement identique, sauf que le substrat était en carbure de silicium au lieu d'être en silicium. Là encore, on s'attendait à ce que la reconstruction de surface soit métallique, mais elle s'est à nouveau révélée isolante. Une fois de plus, la transition métal-isolant n'avait pu être observée directement, ce qui n'a rien d'étonnant. En effet, les structures en potassium sur silicium de H. Weitering ou en carbure de silicium de L. Johansson et J.-M. Themlin se trouvent être des isolants de Mott très stables qu'il est difficile de transformer en conducteurs métalliques par chauffage, l'augmentation de température modifiant trop leur surface.

La transition observée sur une monocouche d'étain

Ainsi, la découverte à la fin des années 1990 d'isolants de Mott bidimensionnels fondait l'espoir de pouvoir observer directement la façon dont se déroule la transition de phase métal-isolant (en deux dimensions). À peu près au même moment, on a spéculé sur l'existence d'un état fondamental isolant de Mott dans le cas d'une couche mince d'étain sur germanium, mais sans en obtenir de preuve expérimentale.

En 2001, Fernando Flores, de l'Université autonome de Madrid, a montré par le calcul la stabilité de la reconstruction de surface (3×3) d'étain sur le germanium (existante) ainsi que celle d'une reconstruction ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$) R 30° également d'étain sur germanium, qui n'était alors qu'hypothétique.

Stimulée par ces travaux, notre collaboration franco-espagnole a enfin pu observer, pour la première fois, une transition métal-isolant sur une monocouche d'étain déposée sur du germanium, constituée d'un atome d'étain pour trois de germanium. En 2006, dans l'équipe de Daniel Malterre, à l'Université de Nancy, nous avons fait varier sous un vide poussé la température de ce système entre celle de l'ébullition de l'hélium liquide (4 kelvins, ou -269°C) et la température ambiante. Par microscopie à effet tunnel, nous avons suivi les reconstructions de surface en fonction de la température alors que se déroulait la transition métal-isolant (voir la figure 4).



3. LA PHOTOÉMISSION à haute résolution livre ici la structure de bande du système étain sur germanium des auteurs et la façon dont elle change avec la température. Les énergies et les angles des électrons libérés sont en effet caractéristiques de leurs états initiaux, ce qui permet de visualiser les énergies des électrons superficiels en fonction de leur quantité de mouvement, laquelle détermine leur angle d'émission. Ainsi, vers 140 kelvins (*en haut*), on note une bande d'énergie (*zone brillante*) qui englobe le niveau de Fermi (*ligne verte*) : le matériau se comporte comme un métal. Vers 12 kelvins (*en bas*), la bande qui recouvrait le niveau de Fermi a disparu : le matériau se comporte comme un isolant.

Ce changement d'état se révèle être le résultat d'une évolution de la structure cristalline de surface avec la température. Entre 150 et 50 kelvins, on a une reconstruction de surface (3×3) comportant trois atomes d'étain par maille, l'un d'eux étant plus haut que les deux autres. Toutefois, quand la température diminue vers 30 kelvins, les atomes d'étain se redispotent tous dans le même plan, de sorte qu'apparaît une reconstruction de surface ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$) R 30° ne comportant plus qu'un seul atome d'étain (voir l'encadré page ci-contre). Nous avons étudié cette surface par photoémission au synchrotron SLS (Source de lumière suisse), près de Zurich (voir la figure 2), et montré qu'elle se comporte comme un métal.

Nous avons ainsi réussi à observer l'évolution de la région du niveau de Fermi avec la température (voir la figure 3). Au-dessus de 30 kelvins, la dernière bande n'est que partiellement occupée et contient le niveau de Fermi, ce qui est typique d'un matériau métallique. Lorsque la température diminue, cette bande se retrouve bien au-dessous du niveau de Fermi, ce qui est caractéristique d'un isolant. Comme le nombre d'électrons ne change pas avec la température, la seule conclusion possible était que notre système avait bien subi une transition métal-isolant, la première jamais observée directement en surface.

Pour autant, nous ne pouvions en conclure avoir réussi à obtenir un isolant de Mott en surface. Trois types de transition métal-isolant différents existent en effet : les transitions d'Anderson, de Peierls et de Mott. La transition d'Anderson est due au désordre : les défauts peuvent piéger les électrons et empêcher leur mouvement, ce qui rend isolant un système initialement métallique. La transition de notre système n'était pas une transition d'Anderson, car les images par microscopie à effet tunnel montraient que les défauts ne jouent aucun rôle actif.

Dans la transition de Peierls, le réseau cristallin se déforme et subit une distorsion géométrique de sa périodicité, qui diminue l'énergie du système. On sait par ailleurs que cette distorsion résulte de l'immobilisation d'une onde de densité de charge électronique et, dans une telle situation, la taille de la maille surfacique est plus grande à basse température qu'à haute température. Or c'est l'inverse

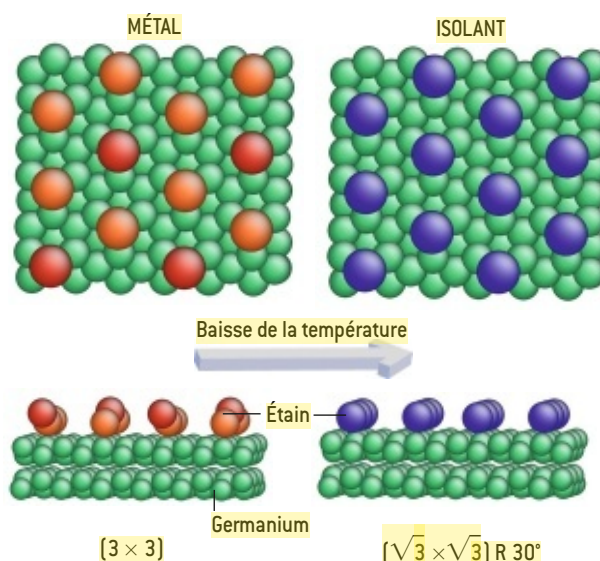
UNE TRANSITION DE PHASE LIÉE À LA STRUCTURE DU MATÉRIAU

La structure cristalline d'un matériau a une grande influence sur ses propriétés électroniques, car une modification de la géométrie du réseau peut affecter directement la structure des bandes. Ce couplage entre la structure cristalline et la structure de bande s'observe par exemple dans le cas du système constitué d'une monocouche d'étain (en rouge ou en bleu) déposée sur un substrat de germanium (en vert) lorsque la température diminue.

On constate en effet que l'arrangement, ou « reconstruction », noté (3×3) caractérise le système pour les hautes températures et en fait un conducteur. La

maille du réseau atomique de cette reconstruction comprend donc trois atomes d'étain, dont deux sont à la même hauteur et le troisième est surélevé (ci-contre à gauche).

Quand la température diminue, le réseau cristallin se réorganise toutefois et adopte la reconstruction $(\sqrt{3} \times \sqrt{3}) R 30^\circ$, qui en fait un isolant (ci-contre à droite). La maille de cette reconstruction ne comprend qu'un seul atome d'étain, et tous les atomes d'étain sont désormais disposés sur le même plan. Dans cette géométrie, les interactions entre électrons deviennent trop fortes pour pouvoir être vaincues avec l'énergie cinétique des électrons, qui ne circulent plus.



A. Mascaraque et A. Tejeda

dans notre système : la reconstruction (3×3) de la phase à haute température est plus grande que la reconstruction $(\sqrt{3} \times \sqrt{3}) R 30^\circ$ adoptée par le système à basse température. La transition que nous avons observée n'étant ni celle d'Anderson ni celle de Peierls, il s'agit bien d'une transition de Mott.

Notre découverte, c'est-à-dire la certitude de l'existence d'une transition de Mott en surface, a été suivie de nombreux travaux sur ce thème. Ainsi, Gianni Profeta et ses collègues et Erio Tosatti, de l'École internationale de Trieste (SISSA), en Italie, ont confirmé par des calculs l'existence d'un état fondamental isolant de Mott pour des systèmes étain sur germanium ou étain sur silicium, qui seraient en plus antiferromagnétiques. Cela signifie que dans ces systèmes, les spins des atomes voisins tendent à s'aligner, mais avec des orientations opposées, au contraire de ce qui est le cas dans les milieux ferromagnétiques. Ces chercheurs proposent que l'augmentation du désordre dans le système (mesuré par l'entropie) est le moteur de la transition métal-isolant.

En 2007, Silvio Modesti et ses collègues, du Laboratoire national pour les technologies avancées et les nanosciences à Trieste, en Italie, ont observé l'état isolant de Mott pour le système étain sur silicium. La structure se révèle semblable à celle du système étain sur germanium,

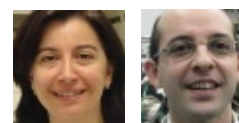
de sorte que la théorie des bandes en fait aussi un système métallique. La photoémission à haute résolution et la spectroscopie locale par microscope à effet tunnel montrent au contraire que ce système présente une transition de Mott et devient isolant au-dessous de 150 kelvins.

Le mécanisme exact de la transition reste à élucider

Tous ces exemples d'isolants de Mott suggèrent qu'un mécanisme général de transition de Mott en surface existe, et qu'il est susceptible de se déclencher aussi sur d'autres surfaces obtenues par dépôt d'une couche métallique sur un substrat semi-conducteur. À ce propos, des études de 2008 et 2009 de Harumo Morikawa, à Séoul, de Stefano Colonna, à Rome, et de leurs collègues confirment la présence d'états peu conducteurs dans les systèmes étain sur germanium à basse température. Cela renforce l'impression que les systèmes à base d'étain sur germanium et étain sur silicium constituent une sorte de prototype de matériau à transition de Mott.

Vers où tout cela mène-t-il ? Si nous disposons grâce à ces avancées d'une classe de systèmes d'étude de la transition de Mott, il reste à élucider son mécanisme exact. Nous élaborons actuellement un modèle de la dynamique de la transition,

LES AUTEURS



Arantzazu MASCARAQUE est professeur de physique à l'Université Complutense de Madrid, en Espagne.

Antonio TEJEDA est physicien à l'Institut Jean Lamour du CNRS, à Nancy.

BIBLIOGRAPHIE

L. Chaput et al., Giant alkali-metal-induced lattice relaxation as the driving force of the insulating phase of alkali-metal/Si(111):B, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 107, 187603, 2011.

R. Cortès et al., Observation of a Mott insulating ground state for Sn/Ge(111) at low temperature, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 96, 126103, 2006.

G. Profeta et E. Tosatti, Triangular Mott-Hubbard insulator phases of Sn/Si(111) and Sn/Ge(111) surfaces, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 98, 086401, 2007.

S. Modesti et al., Insulating ground state of Sn/Si(111)-(3x3) R30°, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 98, 126401, 2007.