

Transition isolant métal induite par pression dans l'isolant de Mott moléculaire organique [Au(Et-thiazdt)₂].

Benjamin Brière¹, Jonathan Caillaux¹, Andréa Perucchi⁴, Stefano Lupi³, Rodolphe Sopracase¹, Jean-Claude Soret¹, Nathalie Tenn², Dominique Lorcy² et Vinh Ta Phuoc¹

¹ GREMAN, CNRS UMR 7347-CEA, Université F. Rabelais, UFR Sciences, Parc de Grandmont, 37200 Tours, France

² Sciences Chimiques de Rennes, UMR 6226 CNRS-Université de Rennes 1, Matière Condensée et Systèmes Electroactifs (MaCSE), Campus de Beaulieu, Bât 10A, 35042 Rennes cedex, France

³ CNR-IOM and Department of Physics, Sapienza University of Rome, P.le A. Moro 2, 00185 Rome, Italy

⁴ Synchrotrone Elettra Trieste S.C.p.A., Area Science Park, 34012 Basovizza, Trieste, Italy

L'isolant de Mott moléculaire organique quasi 2D [Au(Et-thiazdt)₂] présente une transition métal isolant induite par l'application d'un pulse électrique ou d'une pression externe. Afin de comprendre les mécanismes à l'origine de cette transition, nous avons étudié les propriétés optiques de [Au(Et-thiazdt)₂] par spectroscopie infrarouge à haute pression et à température ambiante. Les résultats expérimentaux ont permis de mettre clairement en évidence un comportement métallique au-dessus de 1.5 GPa, caractérisé par l'apparition d'un pic de Drude et une évolution du poids spectral fortement anisotrope dans les spectres de conductivité optique. Suivant la direction d'empilement des molécules, nous avons observé une forte augmentation du poids spectral en dessous de 1 eV, alors que dans la direction transverse, la conductivité optique est caractérisée par un transfert de poids spectral du moyen infrarouge vers les basses énergies. Les calculs DFT montrent deux bandes de caractère SOMO (Singly Occupied Molecular Orbital) au voisinage du niveau de Fermi à pression ambiante. À haute pression, outre un élargissement des bandes SOMO, une bande de caractère SOMO-1 vient couper le niveau de Fermi. Il en résulte que la transition isolant- métal induite sous pression est simultanément une transition de Mott de type "bandwidth controlled" et "bandfilling controlled". De plus, la phase métallique de haute pression possède à la fois des porteurs corrélés et non corrélés. Par ailleurs, la conductivité optique calculée permet de reproduire qualitativement l'évolution des spectres expérimentaux en fonction de la pression appliquée.