

Partie 2 : Brève introduction aux interactions entre atomes dans un isolant topologique

2.1 Introduction aux isolants topologiques

La physique du solide est une branche de la physique portant sur l'étude des matériaux en se basant sur leurs propriétés microscopiques. Parmi les classes de matériaux bien connues, notons par exemple les métaux et les isolants, qui se distinguent les uns des autres de par leur capacité à conduire l'électricité (métaux) ou, au contraire, à empêcher tout courant électrique de circuler (isolants). Il existe d'autres types de solides moins connus du public, mais grandement étudié par les physiciens et physiciennes pour leurs propriétés particulières et intéressantes. Les isolants topologiques font partie de ces matériaux qui ne correspondent ni à la définition d'un métal ni à celle d'un isolant. La surface des matériaux appartenant à cette catégorie peut conduire l'électricité, comme un métal. Toutefois, en leur volume, les isolants topologiques bloquent la propagation du courant de la même manière que le ferait un isolant. Les particularités de ces matériaux pourraient avoir de nombreuses applications technologiques intéressantes, par exemple dans le domaine de l'information quantique. La recherche entourant les isolants topologiques est ainsi très active depuis quelques années. Le séléniure de bismuth (Bi_2Se_3) est un exemple d'isolant topologique fréquemment étudié, puisqu'il n'est pas aussi dangereux ou difficile à produire que d'autres matériaux possédant des propriétés similaires. Nous nous intéresserons ici à des observations expérimentales de résonance magnétique nucléaire effectuées sur le Bi_2Se_3 ainsi qu'à une possible façon d'expliquer théoriquement ces observations.

2.2 Réseaux cristallins

Afin de mieux comprendre la structure atomique du Bi_2Se_3 , il est d'abord nécessaire de résumer quelques unes des caractéristiques importantes des réseaux cristallins. Un cristal est un solide dans lequel les atomes sont arrangés de façon périodique, et la position de chaque atome dans le réseau est appelée *site*. La figure 2.1 représente un réseau cristallin en deux dimensions.

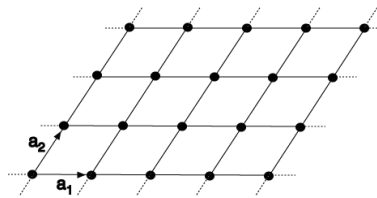


Figure 2.1 – Schéma d'un réseau cristallin en deux dimensions (2D) [1]. Chaque point représente un *site*, soit un endroit précis dans l'espace où l'on peut retrouver un noyau atomique et ses électrons de coeur. Les vecteurs \mathbf{a}_1 et \mathbf{a}_2 sont appelés *vecteurs du réseau*. Imaginons que l'on se place en un site situé à une position \mathbf{r} par rapport à l'origine et que l'on effectue une translation $\mathbf{t} = n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2$ ($n, m \in \mathbb{Z}$). La nouvelle position $\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \mathbf{t}$ correspond alors à un site équivalent dans le réseau.

De par l'arrangement très spécifique des atomes dans le solide, il est possible de définir une *cellule unité*, soit un motif qui se répète dans le cristal. La plus petite cellule unité qu'il est possible d'imaginer afin de reproduire le cristal en entier par répétition du motif est appelée *cellule primitive* [2]. Les images présentées à la figure 2.2 schématisent respectivement la cellule primitive dans le Bi_2Se_3 ainsi que l'arrangement microscopique des atomes

qui le composent. Afin de simplifier les discussions qui suivront, nous imaginerons que les atomes qui forment le Bi_2Se_3 sont formés de deux parties distinctes. Tout d'abord, le noyau et les électrons de coeurs forment un ion qui est fixé (immobile) à son site. Ensuite, les électrons de valence de l'atome sont libres de se déplacer dans le réseau. Toutefois, la probabilité de retrouver un électron de valence dans une certaine région de l'espace dépend de la distance entre cette région de l'espace et le site de l'atome auquel l'électron appartient.

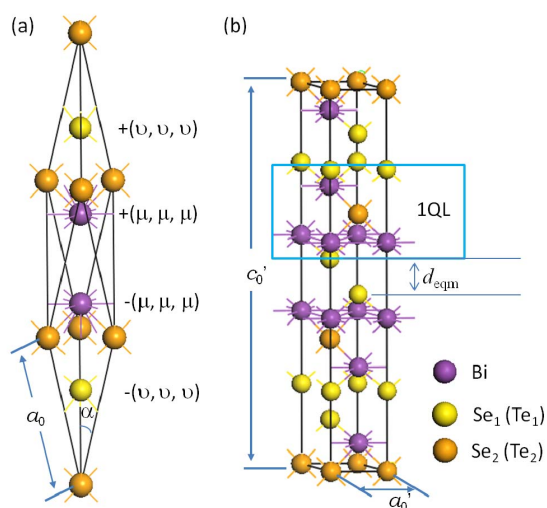


Figure 2.2 – Structure atomique du sélénure de bismuth (Bi_2Se_3) [3]. (a) : schéma de la cellule primitive du réseau tri-dimensionnel. La cellule unité du Bi_2Se_3 est composée de cinq atomes, soit deux atomes de bismuth et trois atomes de sélénium. (b) : schéma de l'arrangement des atomes. Le Bi_2Se_3 est composé d'une superposition de couches quintuples. Une couche quintuple est composée d'un étage d'atomes de sélénium ($\text{Se}_{out} = \text{Se}_2$) suivi d'un étage de bismuth (Bi_1), puis de deux étages de sélénium ($\text{Se}_{in} = \text{Se}_1$) et, finalement, d'une deuxième couche de bismuth (Bi_2).

2.3 Motivation du projet : Spectres de RMN expérimentaux

La spectroscopie par résonance magnétique (RMN) est une méthode expérimentale qui se base sur l'existence des moments magnétiques nucléaires (voir la section 2.4.1 pour plus de détails). Les résultats expérimentaux tirés des mesures de RMN sont des spectres en fréquence desquels il est possible d'obtenir plusieurs observations qui permettent de caractériser les matériaux. Les auteurs de l'article *^{77}Se nuclear magnetic resonance of topological insulator Bi_2Se_3* [4] ont cherché à repérer des signatures de la topologie des électrons du Bi_2Se_3 dans la RMN. Autrement dit, serait-il possible de déterminer qu'un matériau est un isolant topologique en observant certaines caractéristiques de son spectre de RMN ? Sans entrer dans les détails du fonctionnement de la RMN, il est important de noter qu'il s'agit d'une sonde de *volume* : les données sont prises sur l'ensemble des atomes qui constituent le cristal. Or, tel qu'expliqué plus tôt, les propriétés distinctes des isolants topologiques se trouvent à leur surface. Il serait donc naturel de croire que la spectroscopie par résonance magnétique n'est pas la meilleure méthode expérimentale pour la caractérisation des isolants topologiques.

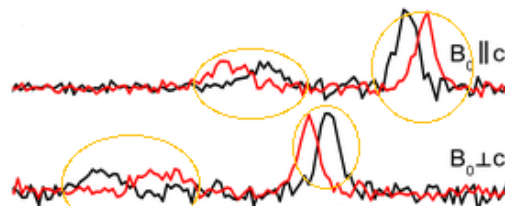


Figure 2.3 – Spectre RMN pour ^{77}Se dans Bi_2Se_3 (courbes noires) [4]. Les pics d'absorption sont encadrés en orange.

À partir d'un modèle théorique décrivant l'énergie du sélénure de bismuth et la façon dont ses atomes et électrons se comportent, nous avons tenté d'expliquer les résultats expérimentaux de [4]. Entre autres, nous avons cherché à comprendre pourquoi les spectres de RMN présentaient des pics de résonance très larges. Les résultats théoriques que nous avons obtenus laissent croire que les interactions entre les noyaux des atomes de Bi_2Se_3 pour-

raient contribuer de façon importante à la largeur des pics observés sur les spectres de RMN. Le mécanisme d'interaction entre les noyaux sera brièvement expliqué dans les paragraphes qui suivent.

2.4 Interactions indirectes entre les noyaux

2.4.1 Moments magnétiques

À l'échelle macroscopique, on peut s'imaginer le moment magnétique comme étant un vecteur reliant le pôle sud d'un aimant rectangulaire à son pôle nord. Comme tout vecteur, le moment magnétique a donc une direction, un sens et une magnitude. Si l'aimant est plongé dans un fort champ magnétique, son moment magnétique s'aligne dans la direction de ce champ. Aussi, si on l'approche d'un second aimant, les deux aimants s'attireront ou se repousseront selon leur orientation relative. Les interactions entre l'aimant et son environnement sont traduites par des forces qui s'exercent sur lui.

À l'échelle atomique, les électrons et certains noyaux possèdent un moment magnétique particulier : le moment magnétique de spin. S'il n'est pas nécessaire de savoir ce qu'est un spin pour comprendre les discussions qui suivront, notons toutefois que ce ne sont pas tous les isotopes d'un élément donné qui possèdent un spin - et par extension, un moment magnétique de spin. Par exemple, tous les atomes de bismuth que l'on retrouve dans la nature sont sous la forme d'un même isotope (^{209}Bi) et cet isotope possède un spin. Par conséquent, tous les noyaux de bismuth dans le sélénure de bismuth ont un moment magnétique de spin. Le cas du sélénium est très différent. En effet, le seul isotope de sélénium possédant un spin non-nul est le ^{77}Se , mais la proportion naturelle de cet isotope est d'environ 7% [5].

2.4.2 Interactions électron-noyau

Lorsqu'un atome possède un moment magnétique, il est possible de le comparer à un petit aimant qui crée un champ magnétique autour de lui. Tel que mentionné en

2.4.1, les électrons possèdent eux aussi un moment magnétique. Pensons maintenant à l'effet d'un champ magnétique sur un aimant avec un exemple simple : une boussole. L'aiguille d'une boussole est libre de pivoter sur elle-même et pointe toujours dans la direction du champ magnétique dans lequel elle est plongée. De façon similaire, imaginons maintenant un électron de conduction libre de se déplacer dans le cristal et qui approche un noyau. Le moment magnétique de l'électron tend alors à s'aligner avec celui du noyau, à l'image de l'aiguille de la boussole qui pivote selon l'orientation du champ magnétique terrestre. Il y a donc une interaction nette entre les électrons de valence et les noyaux du cristal dû à l'existence de leur moment magnétique.

Considérons maintenant qu'un électron approche un premier noyau. Son moment magnétique s'aligne avec celui du noyau, générant par le fait même une première interaction électron-noyau. Supposons maintenant que ce même électron se déplace dans le cristal et qu'il s'approche suffisamment d'un second noyau : une deuxième interaction électron-noyau se produit. On peut ainsi imaginer que l'électron est un médium permettant de communiquer l'information concernant le moment magnétique d'un premier noyau à un deuxième noyau. L'effet résultant est ainsi une interaction indirecte entre les deux noyaux, et ce en raison du passage de l'électron de conduction.

2.5 Conclusion

À partir d'un modèle théorique décrivant la façon dont se comportent les atomes et les électrons dans le sélénure de bismuth, nous avons pu calculer la façon dont les différents noyaux de la cellule unité de Bi_2Se_3 interagissent entre eux, et ce selon les principes énoncés à la section 2.4.2. Ces résultats semblent indiquer que les interactions indirectes entre les noyaux pourraient contribuer à la largeur des raies spectrales observées par [4]. Cette conclusion n'est toutefois pas définitive, puisque d'autres processus non-explorés pourraient aussi jouer un rôle dans la largeur des courbes spectrales de RMN pour le sélénure de bismuth.

Bibliographie

- [1] Philip Hofmann. Crystal structures. <http://users-phys.au.dk/philip/pictures/physicsfigures/node4.html>, 2009. [En ligne ; Disponible le 11-avril-2016].
- [2] Neil W. Ashcroft and N. David Mermin. *Solid state physics*. Thomson, 1976.
- [3] Xin Luo, Michael B. Sullivan, and Su Ying Quek. First-principles investigations of the atomic, electronic, and thermoelectric properties of equilibrium and strained Bi₂Se₃ and Bi₂Te₃ including van der Waals interactions. *Physical Review*, 2012.
- [4] Nataliya M. Georgieva, Damian Rybicki, Robin Guehne, Grant V. M. Williams, Shen V. Chong, Kazuo Kawakami, Ion Garate, and Jurgen Haase. ⁷⁷Se nuclear magnetic resonance of topological insulator Bi₂Se₃. *arXiv :1511.01727v2*, 2016.
- [5] WebElements. Webelements—selenium : isotope data. <https://www.webelements.com/selenium/isotopes.html>, 2016. [En ligne ; Disponible le 9-avril-2016].