

## Создание материалов с заданными электронными свойствами

**В.М. Пудалов,**

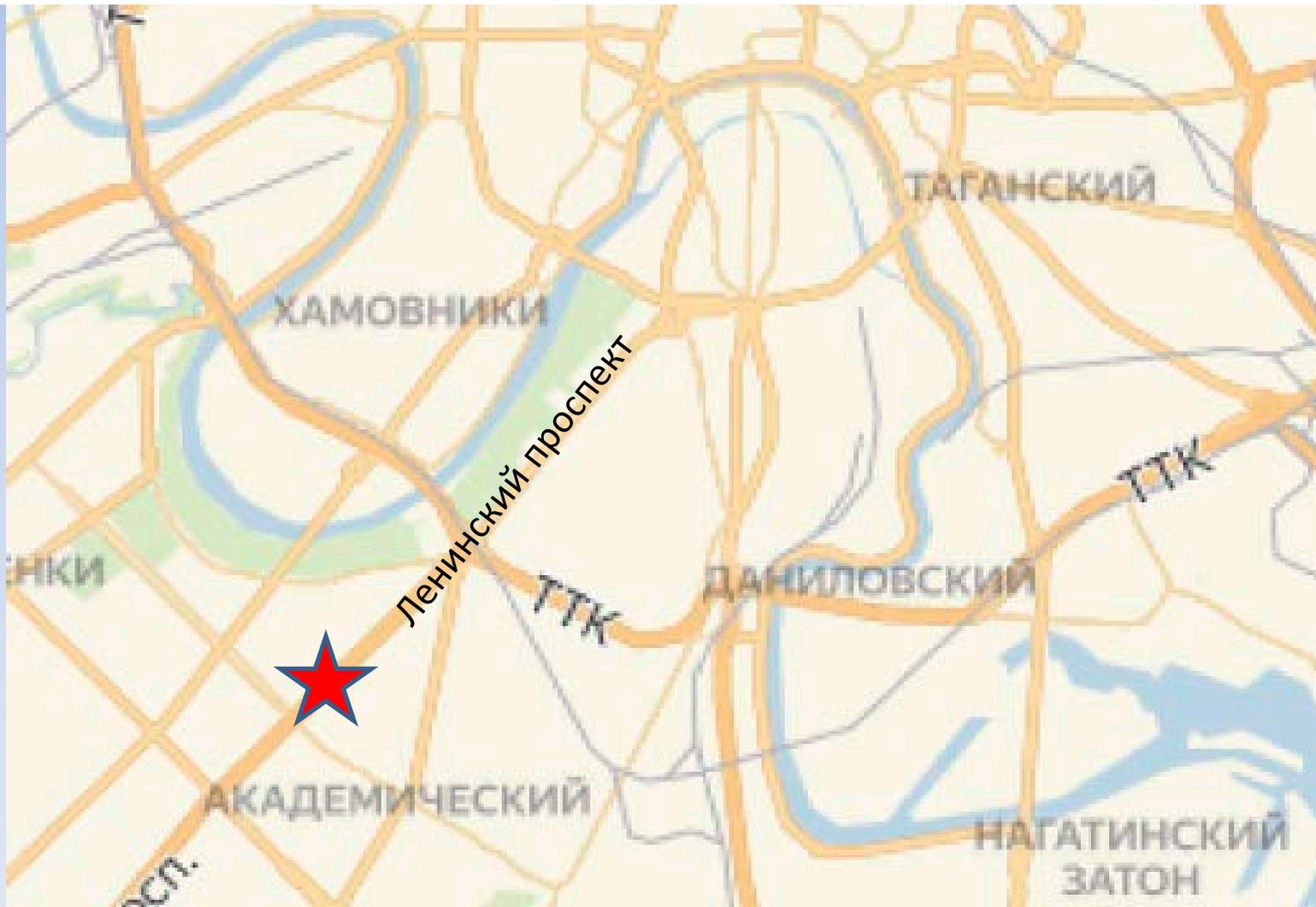
*Центр сверхпроводимости и квантовых материалов  
им. В.Л. Гинзбурга (ФИАН)*

<https://gc.lebedev.ru/>

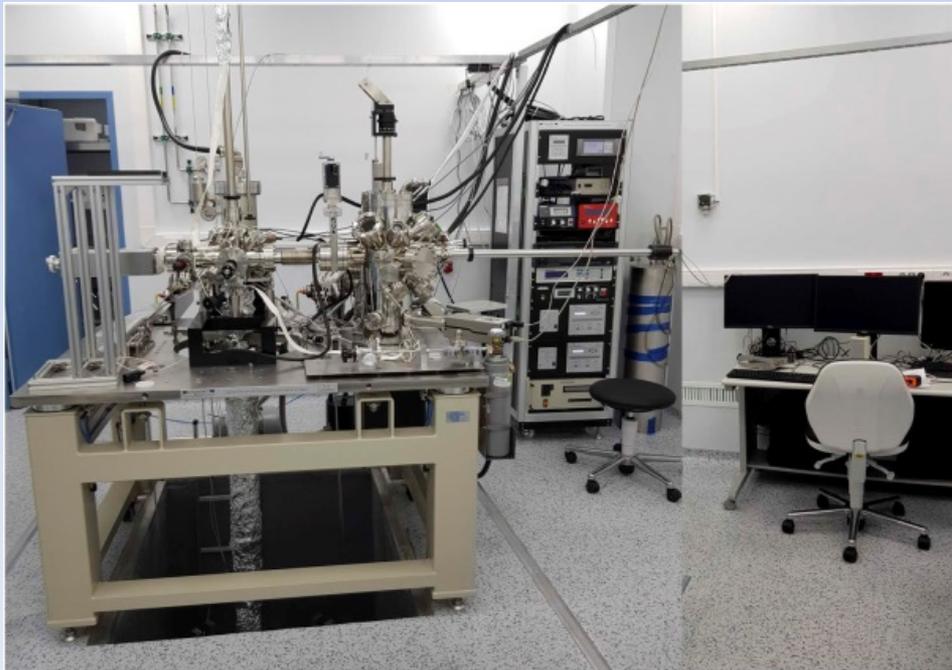
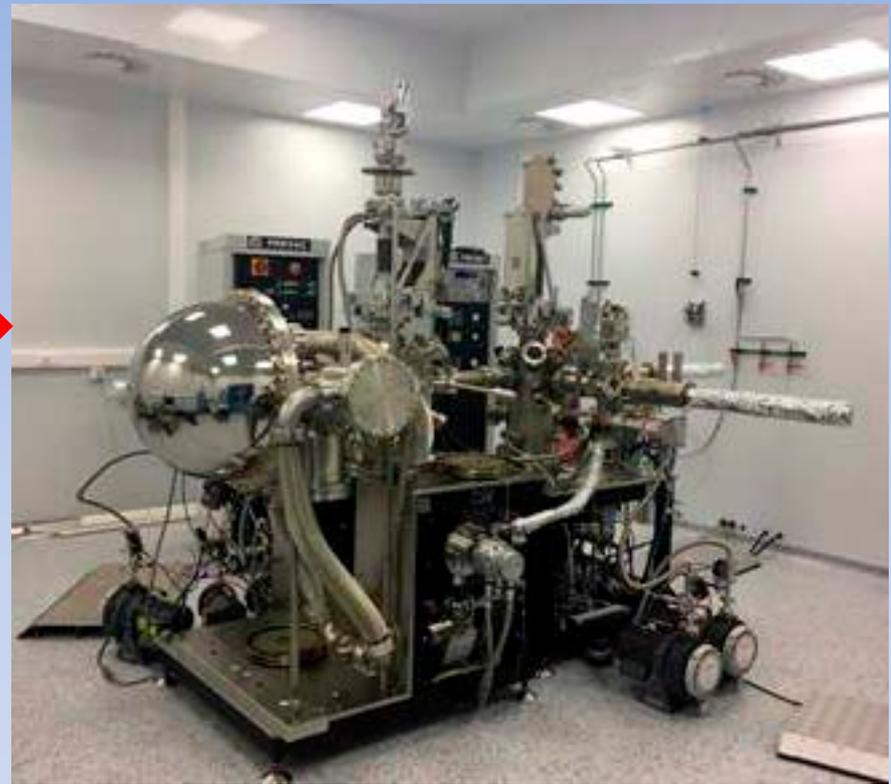
<https://sites.lebedev.ru/ru/ovsisns/4066.html>

<https://sites.lebedev.ru/ru/ovsisns/4074.html>

**Где находится база: Москва, ФИАН**  
<https://www.lebedev.ru/>



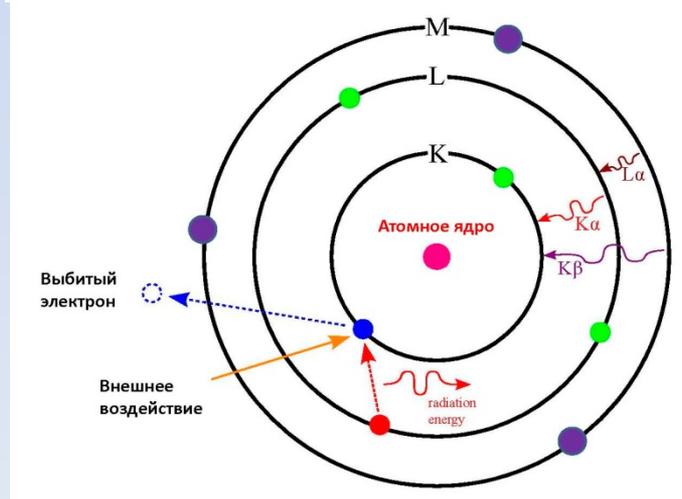
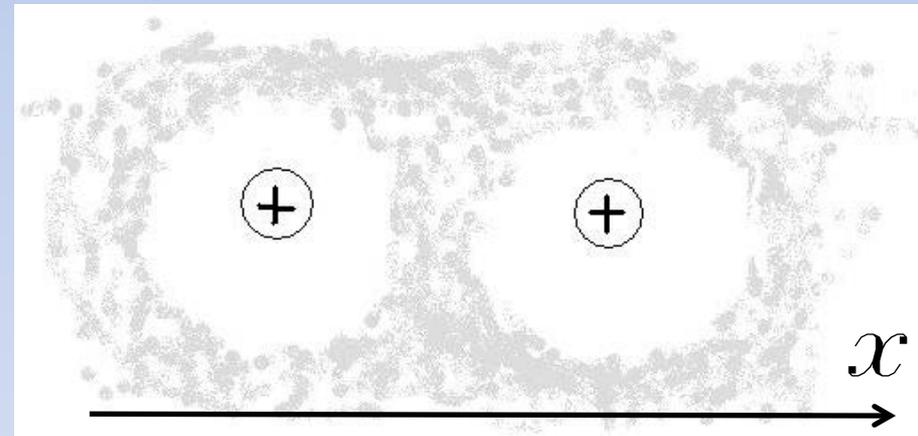
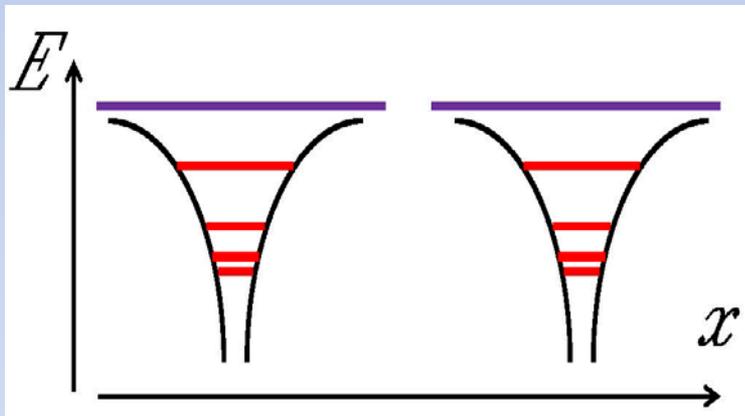
Установка  
фотоэлектронной  
спектроскопии с  
угловым разрешением  
(ARPES) Scienta R-4000



Сверхвысоковакуумный  
низкотемпературный  
сканирующий  
туннельный микроскоп  
Unisoku 1300 (0.3K/15T)

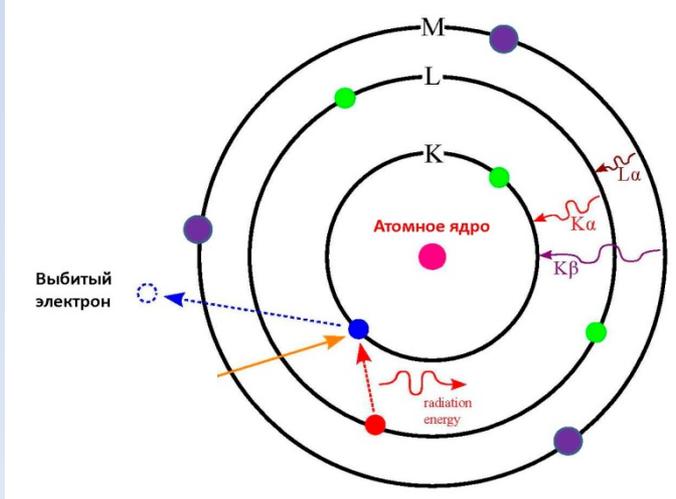
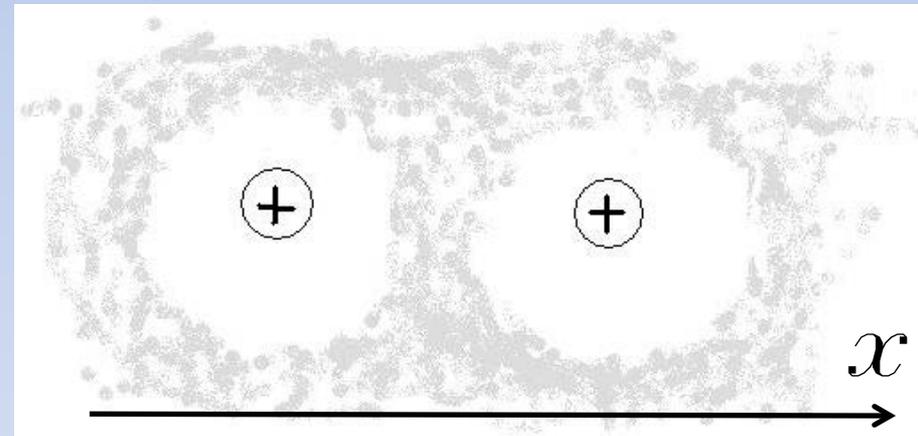
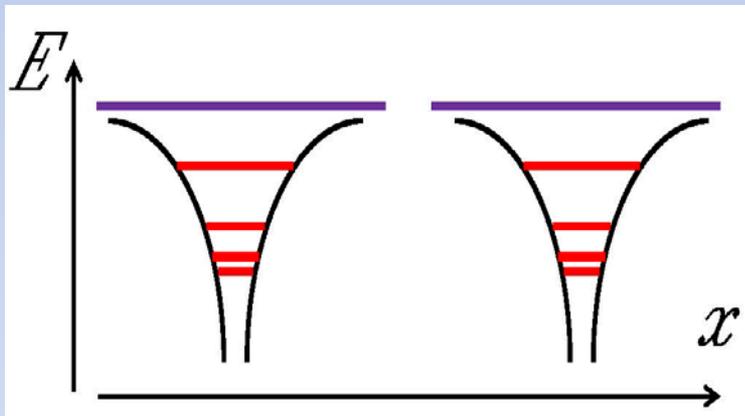
# Локальные свойства электронов в металлах, топологических изоляторах, дираковских полуметаллах и сверхпроводниках

“Электроны в металлах”  $\equiv$  электроны проводимости



# Локальные свойства электронов в металлах, топологических изоляторах, дираковских полуметаллах и сверхпроводниках

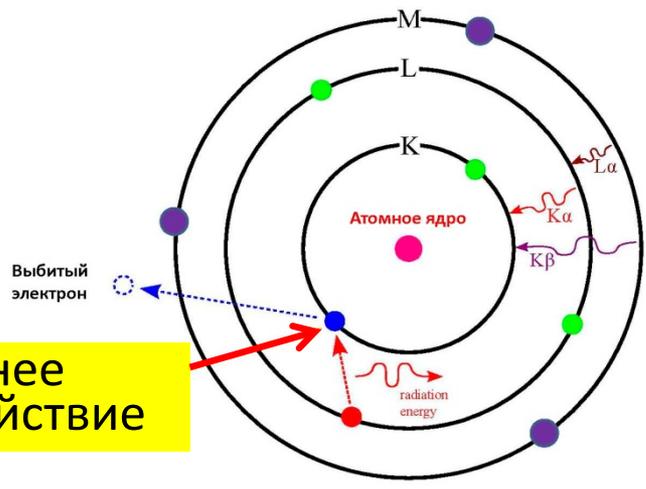
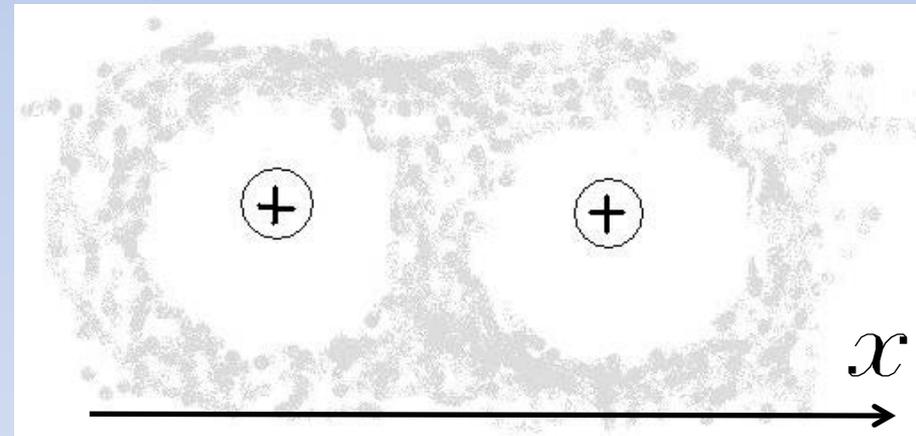
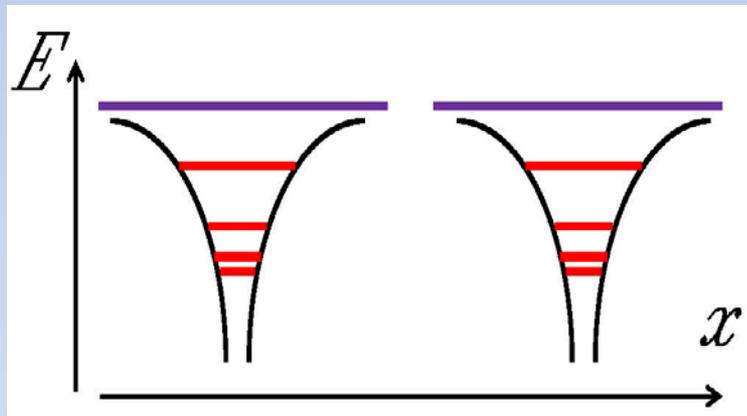
“Электроны в металлах”  $\equiv$  электроны проводимости



Свойства ?

# Локальные свойства электронов в металлах, топологических изоляторах, дираковских полуметаллах и сверхпроводниках

“Электроны в металлах”  $\equiv$  электроны проводимости



Внешнее воздействие

Свойства ?

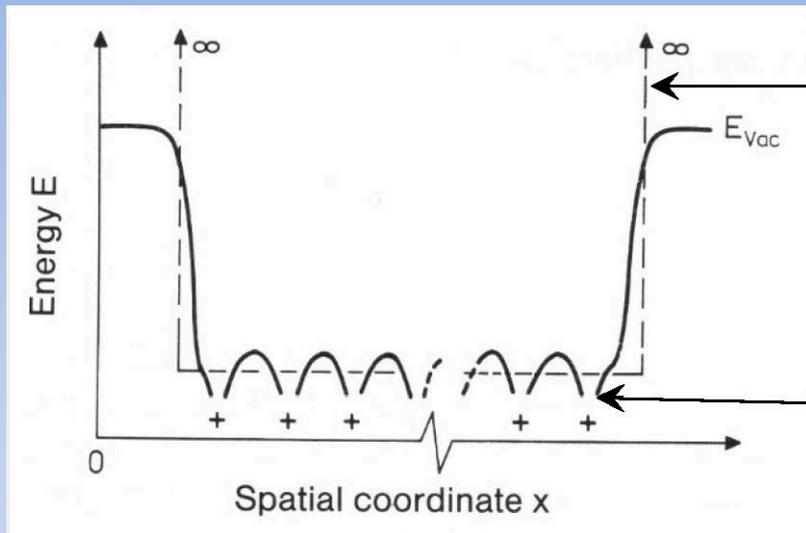
## Электронные свойства твердых тел –

- Сверхпроводимость,
- Магнетизм,
- Электроника,
- Спинтроника,
- Квантовые вычисления,...

**Большинство свойств определяются спектром  $E(p)$**

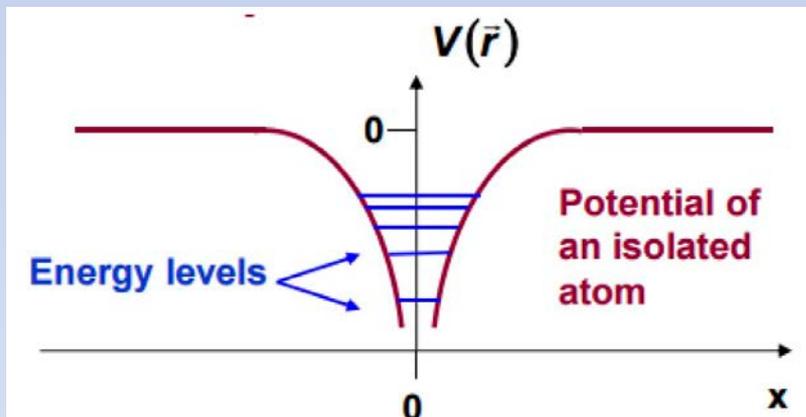
**1. Свойства электронов вблизи поверхности**

**2. Локальные электронные свойства**

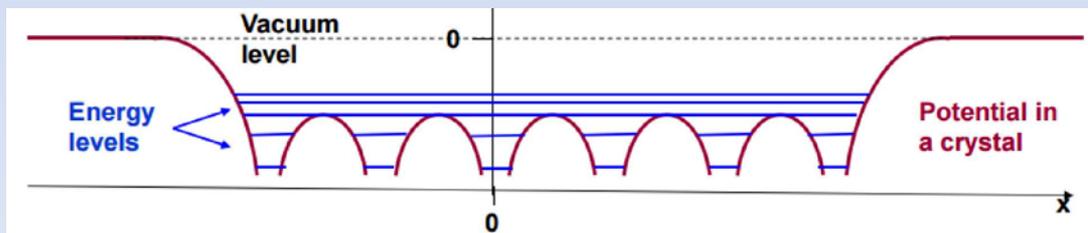


**Свободные электроны**

**Потенциал решетки**



**Уровни энергии в изолированном атоме**



**Потенциал решетки и уровни энергии**

Частица



Волна

$$\Psi = u(r)e^{ikr}$$

Свободные электроны

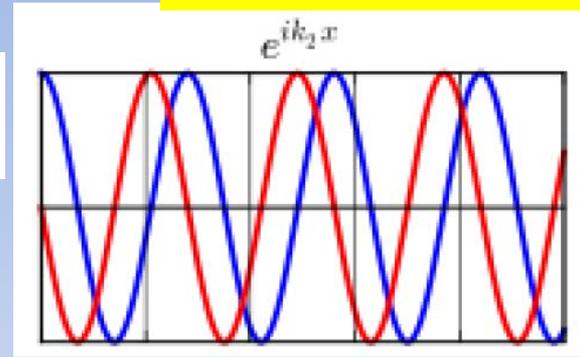
$$p = \hbar k$$

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

$$\Psi = e^{ikr}$$

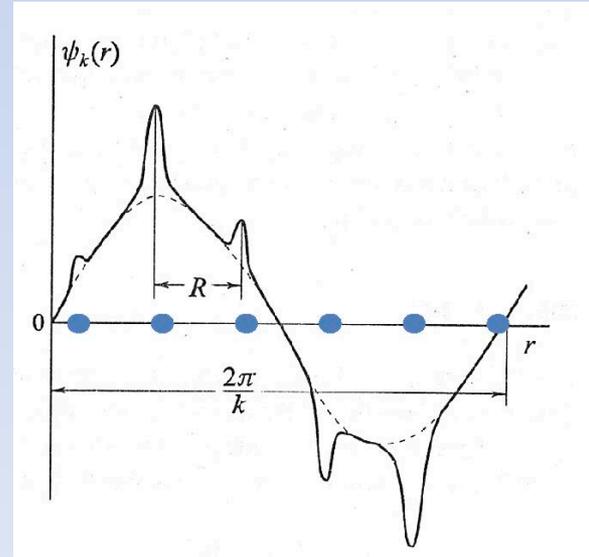
$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$E = p^2/2m = \hbar^2/(2m\lambda)^2$$



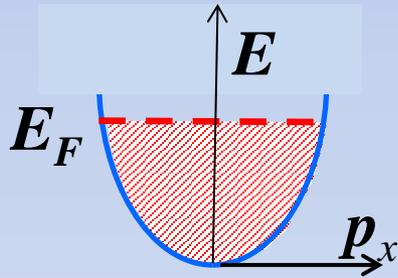
Почти свободные электроны

Квазичастицы  $\approx$  “электроны”  
 $e, m^*(E), k, E^*(k)$

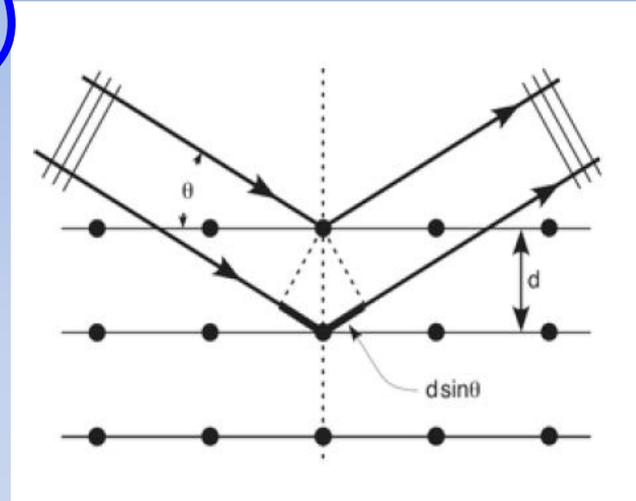


## Электроны в вакууме

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}$$

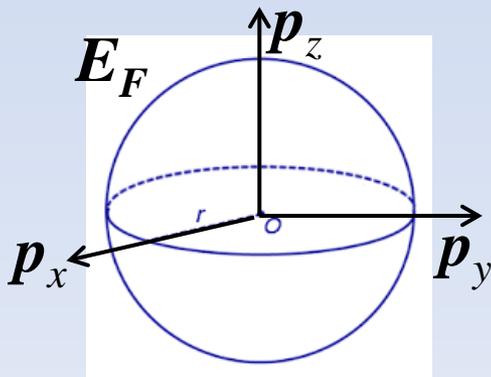


## А в кристалле ?



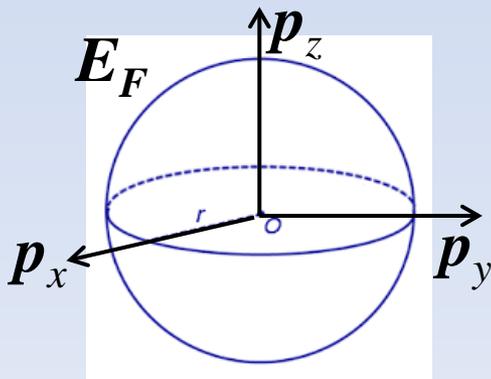
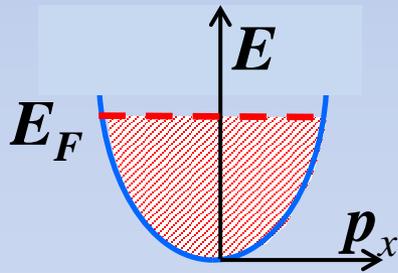
**Фотон:**  $k=2\pi/\lambda$ ;  $\lambda=c/\nu$ ;  $E=h\nu$

**Электрон:**  $p=hk/2\pi$ ;  $k=2\pi/\lambda$ ;  $E=p^2/2m = h^2/(2m\lambda)^2$

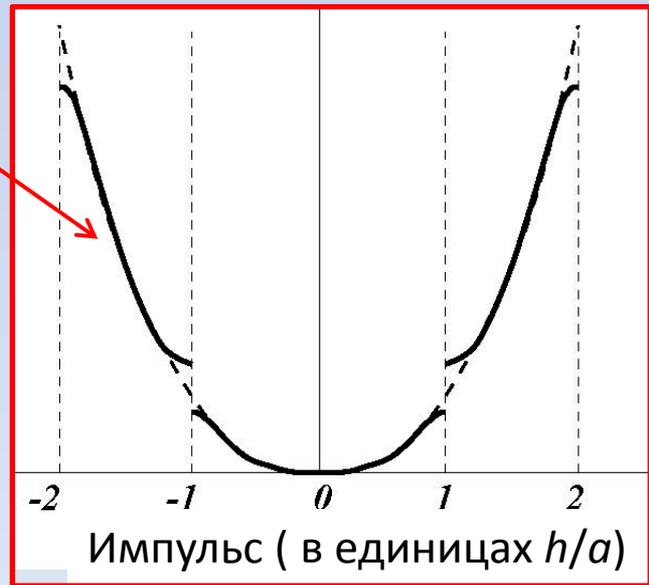
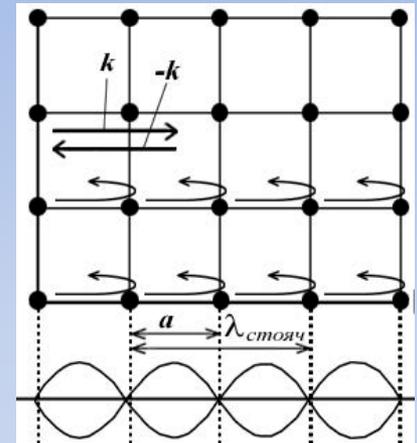
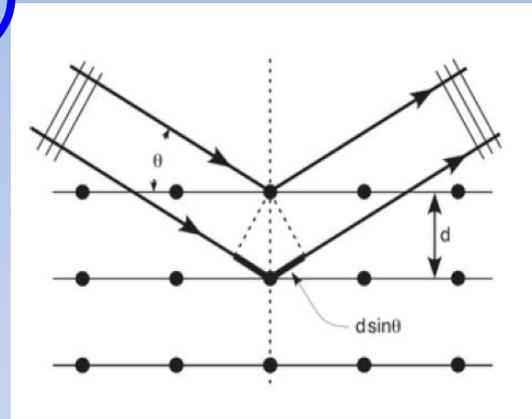


# Электроны в вакууме

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}$$

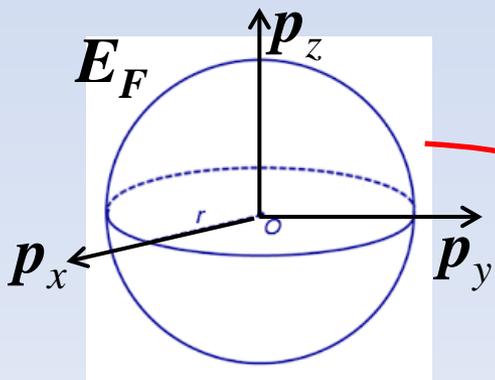
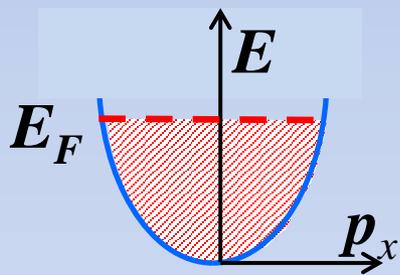


# Электроны в кристалле

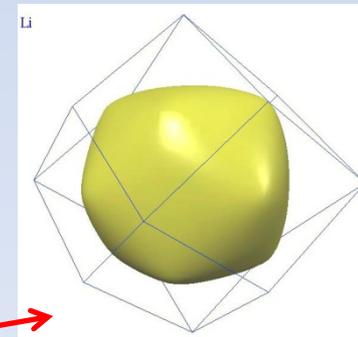
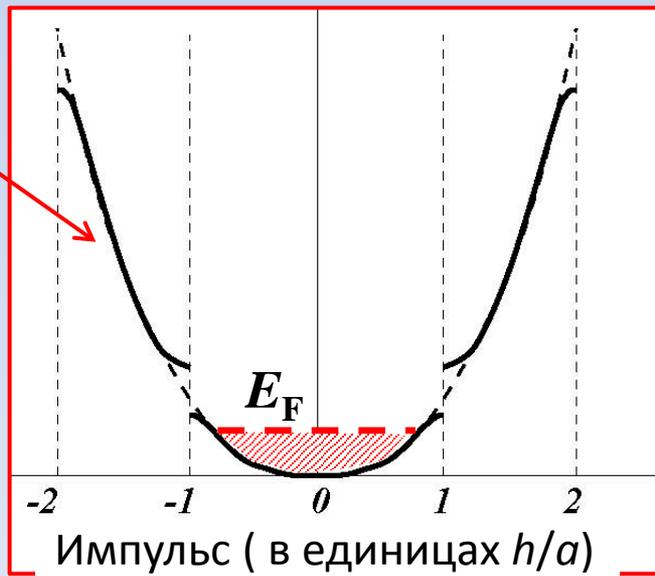
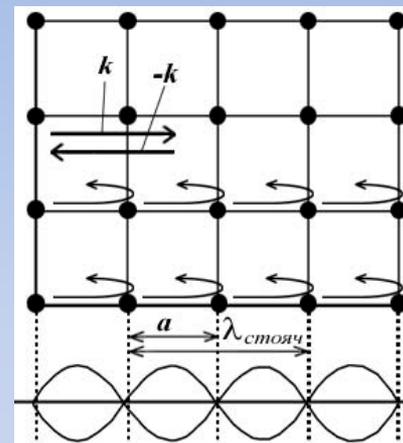
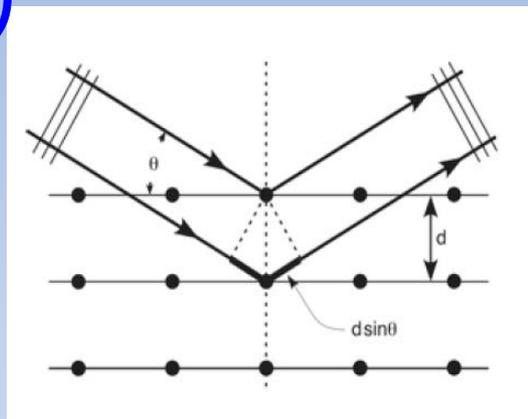


# Электроны в вакууме

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}$$

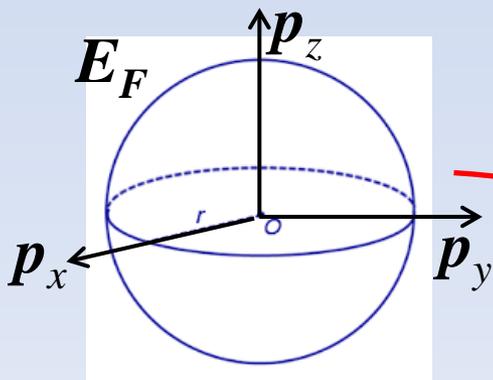
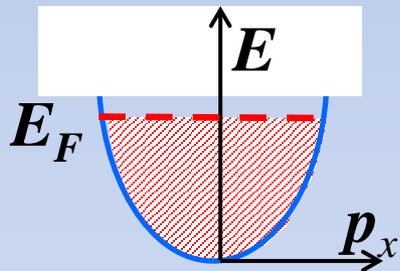


# Электроны в кристалле

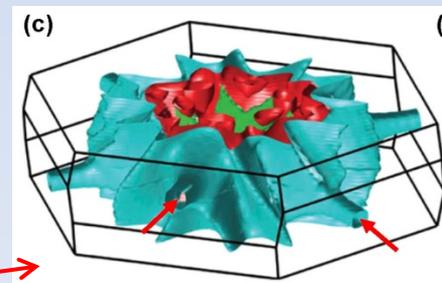
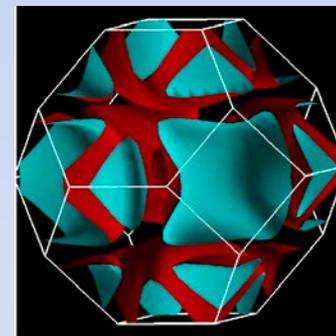
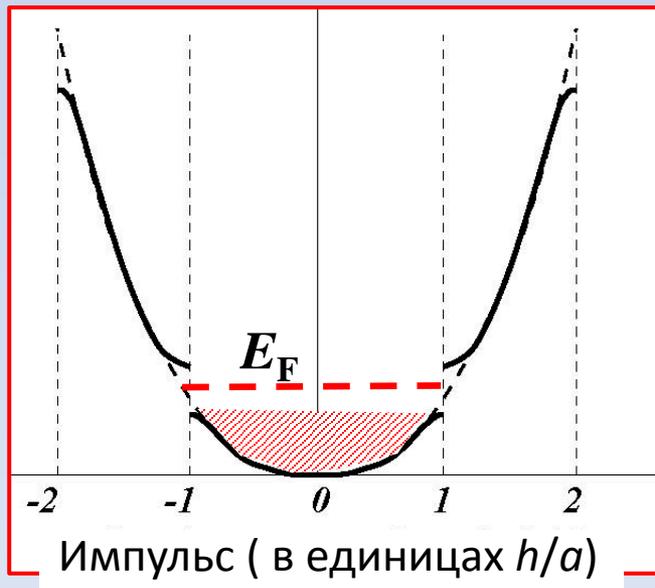
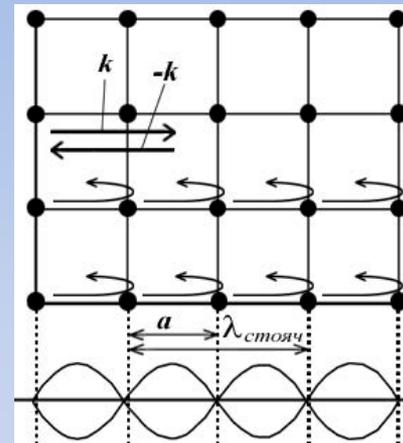
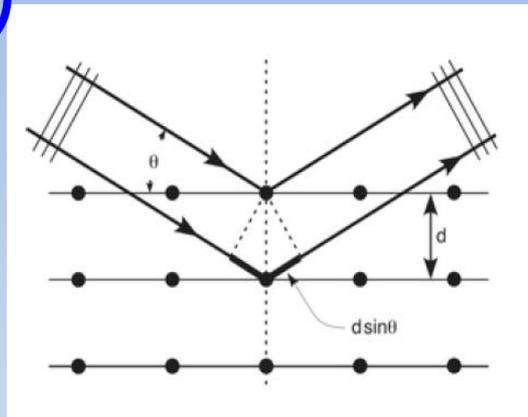


# Электроны в вакууме

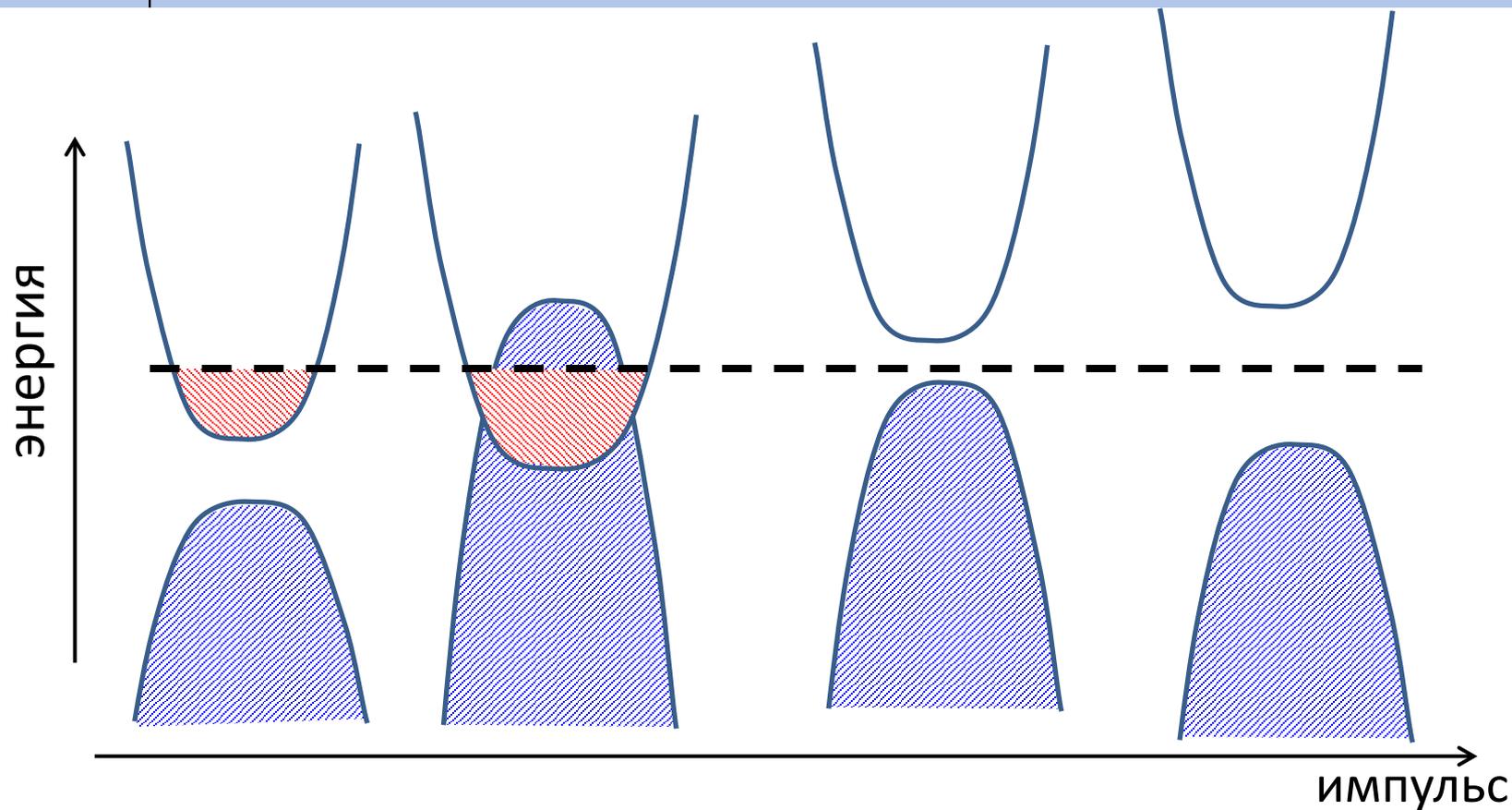
$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}$$



# Электроны в кристалле



# Энергетический спектр = Зонная структура



1-3 металл, 2-3 металл, полупроводник об.изолятор



1. Фотоэлектронная спектроскопия  
с угловым разрешением (ARPES)

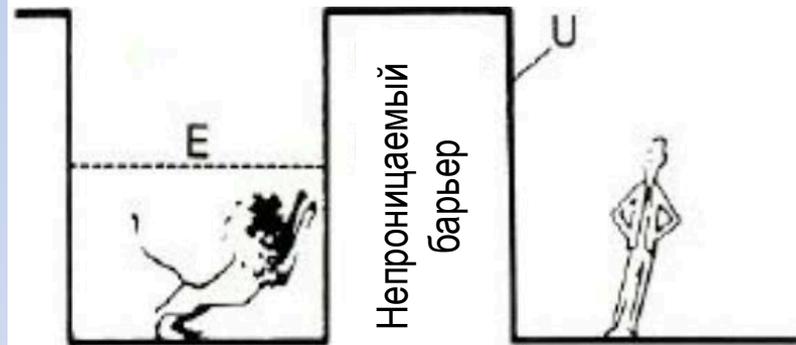
2. Сканирующая туннельная  
микроскопия/спектроскопия (STM/STS)

# Основы квантовой механики: частица-волна $\cos(-kx+\omega t)$

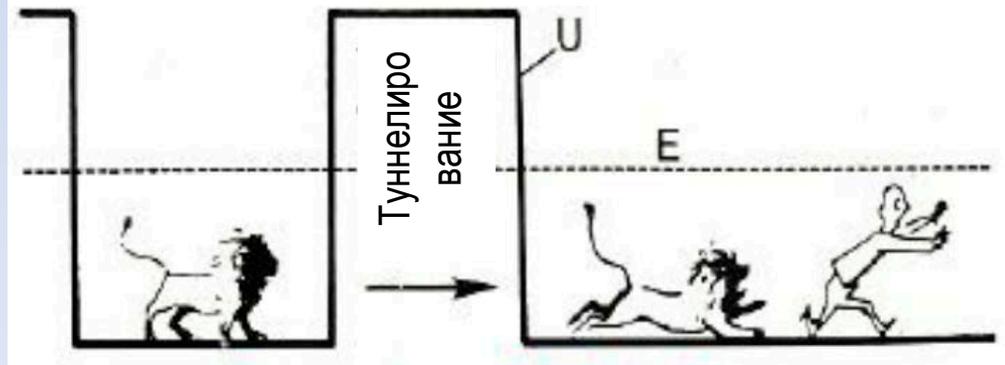
Фотон:  $k=2\pi/\lambda$ ;  $\lambda=c/f$ ;  $E=hf$

Электрон:  $p=hk/2\pi$ ;  $k=2\pi/\lambda$ ;  $E=p^2/2m = h^2/(2m\lambda)^2$

## Классическая модель



## Квантовая модель



Туннелирование волны  
через барьер



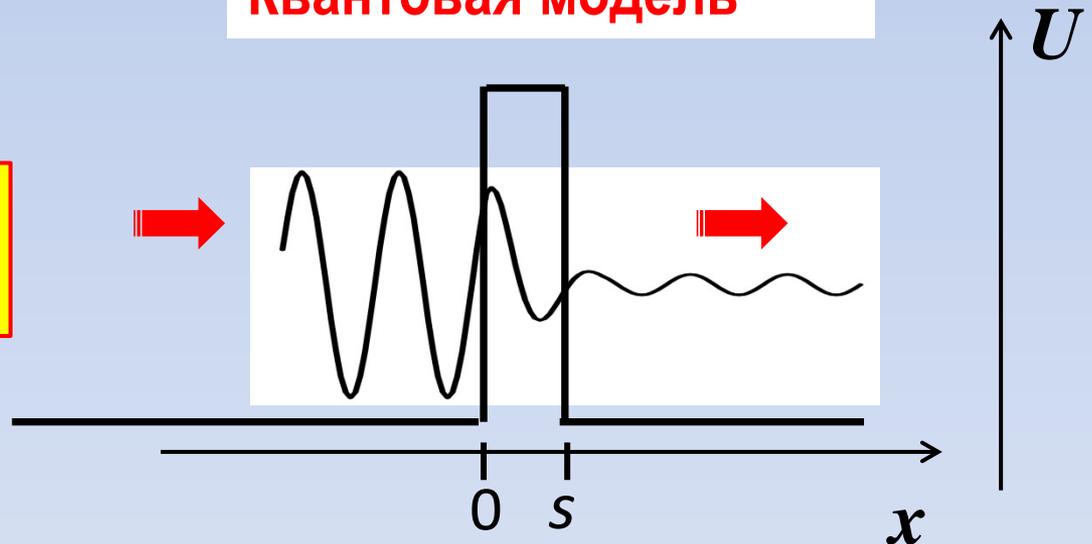
# Основы квантовой механики: частица-волна $\cos(kx + \omega t)$

Фотон:  $\lambda = c/\nu$ ;  $k = 2\pi/\lambda$ ;  $E = h\nu$

Электрон:  $p = mv$ ;  $p/h = k/2\pi$ ;  $k = 2\pi/\lambda$ ;  $E = p^2/2m = h^2/(2m\lambda)^2$

## Квантовая модель

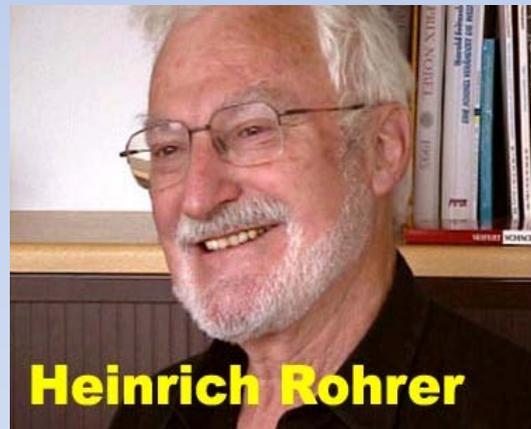
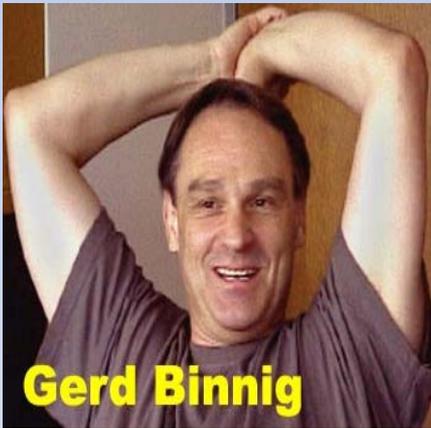
Туннелирование  
волны через барьер



$$T \propto e^{-2ks}$$

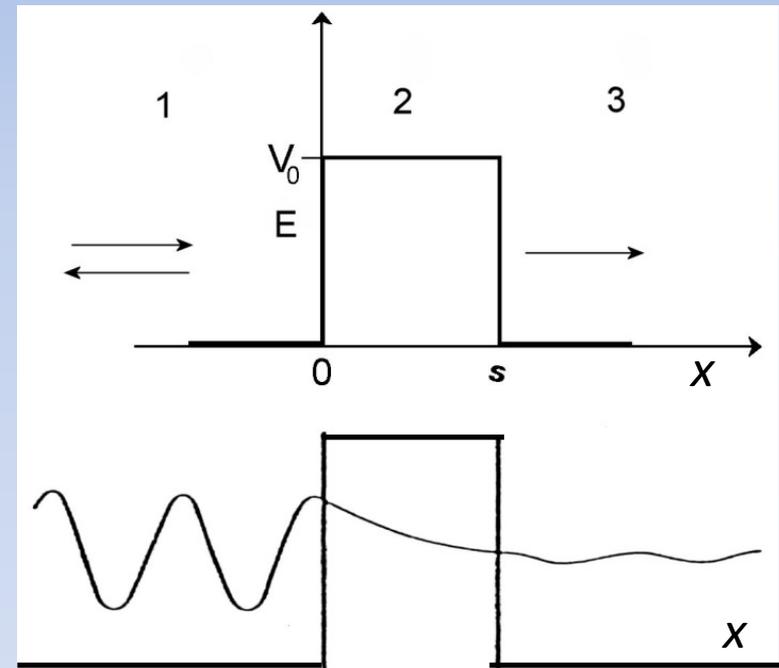
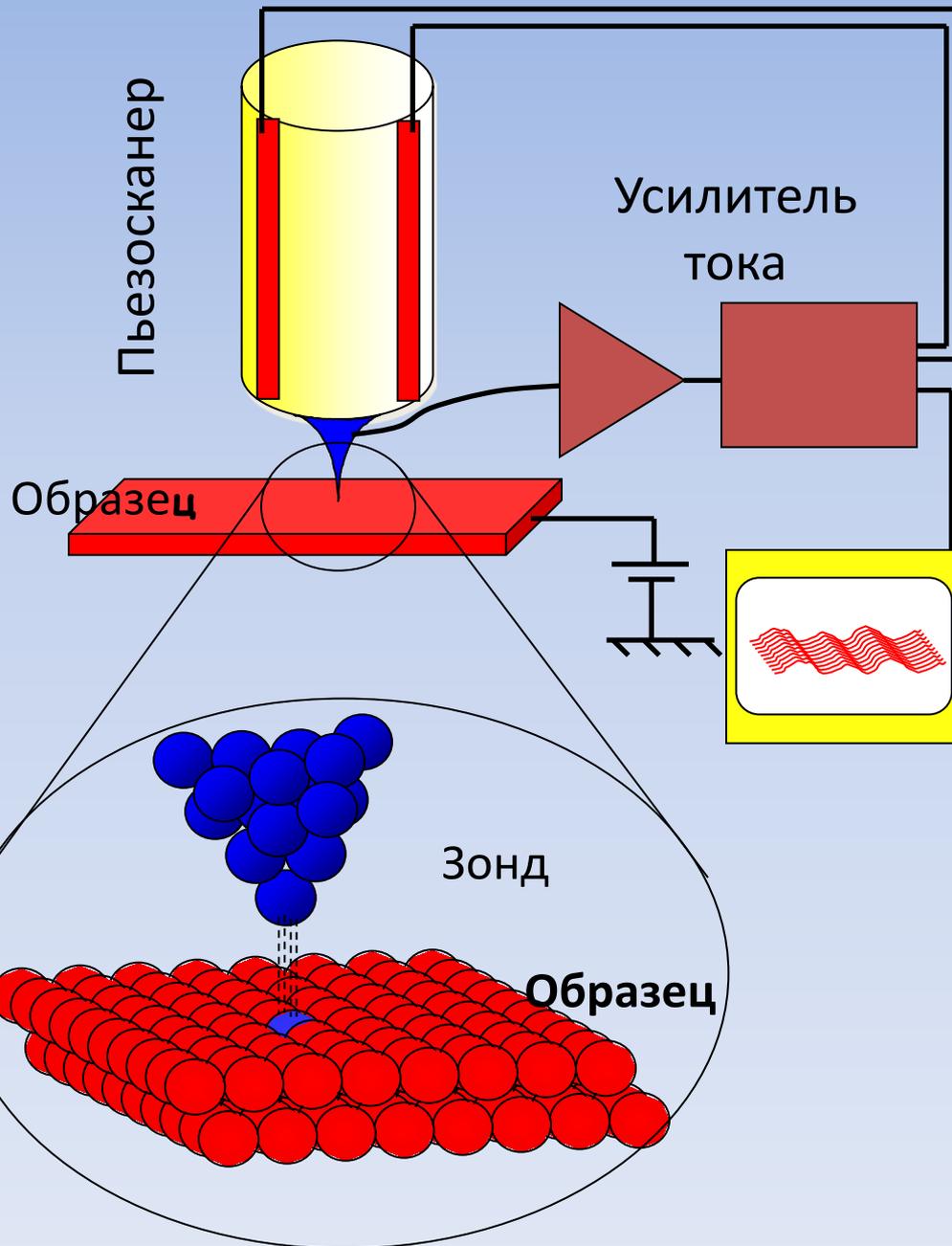
# Сканирующая туннельная микроскопия и спектроскопия

Изобретена в 1981г в IBM. Нобелевская премия 1986г.



1986

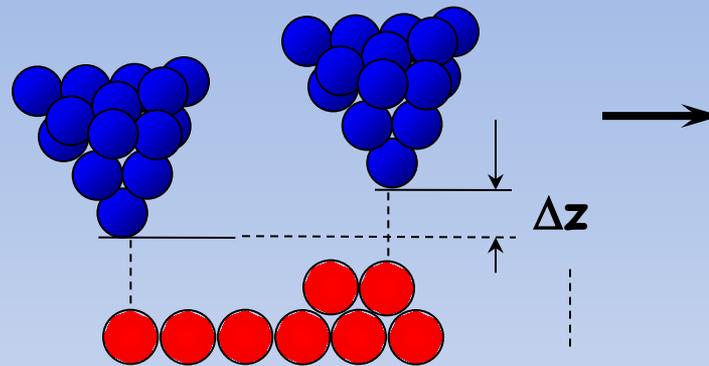
# Сканирующая туннельная микроскопия (STM)



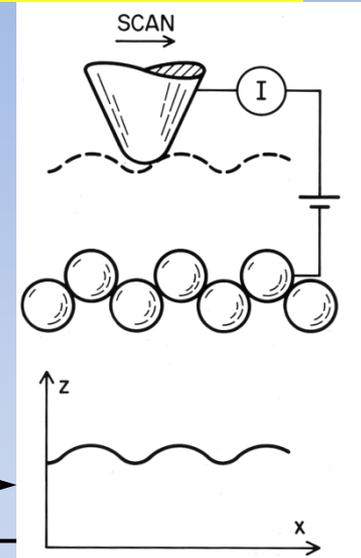
$$T \propto e^{-2ks}$$

$$s = 0.4 \text{ нм}, \quad T \sim 10^{-4}$$

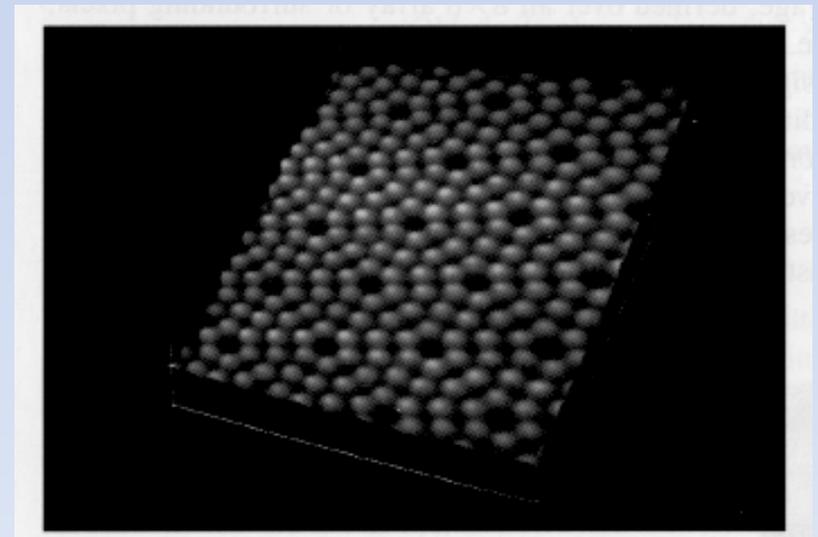
# Режим 1: Фиксированный туннельный ток (STM)



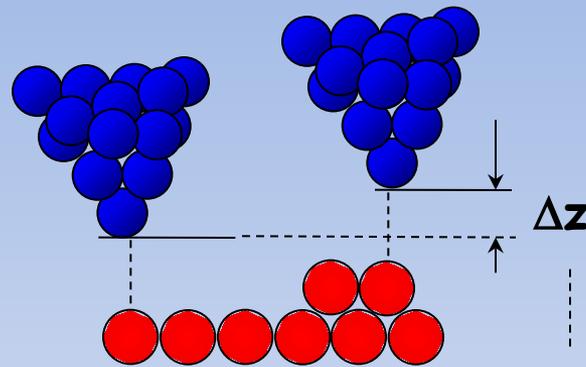
Рельеф поверхности



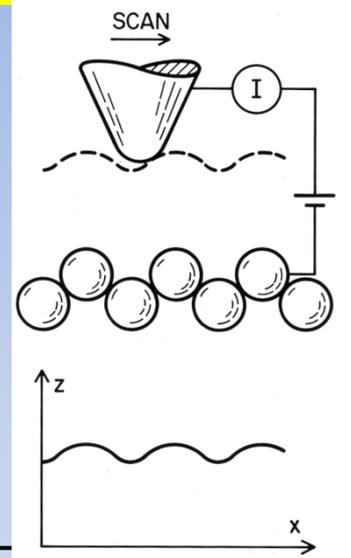
Изображение  
реконструированной  
поверхности Si(111)



# Режим 1: Фиксированный туннельный ток (STM)

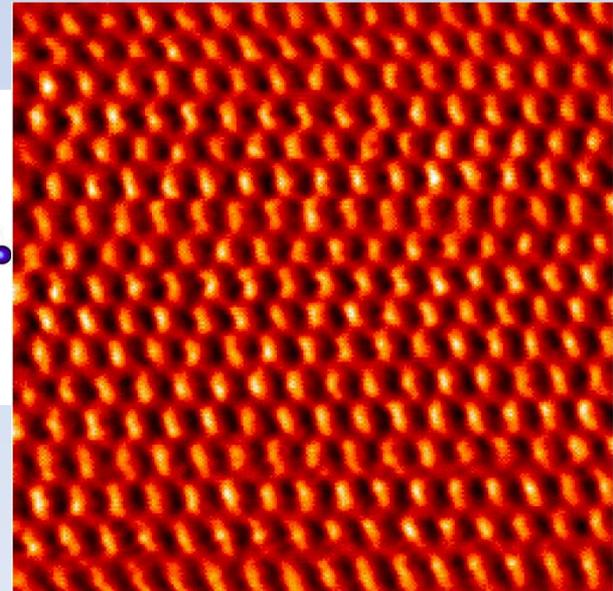
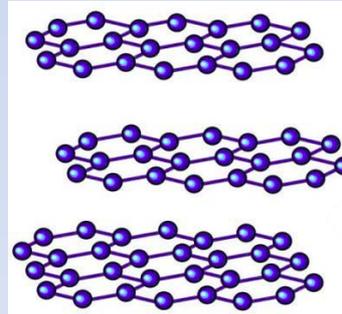


Рельеф поверхности

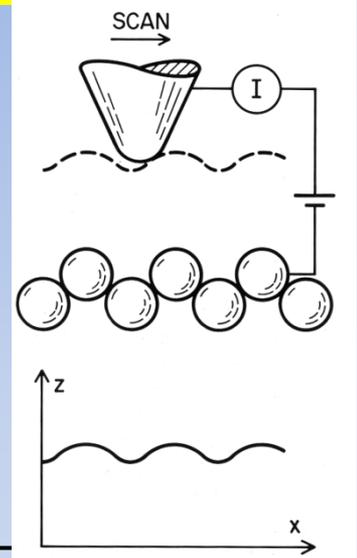
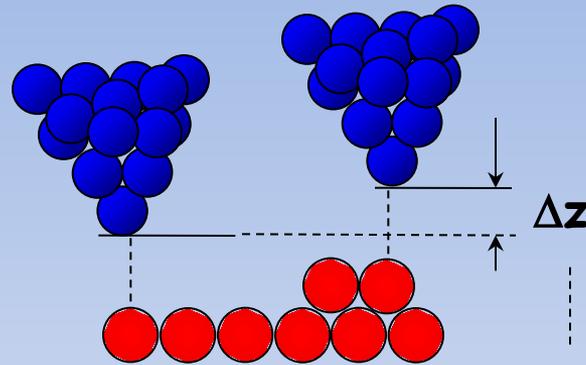


(0001) 5x5nm

Изображение  
поверхности высоко  
ориентированного  
графита (HOPG)

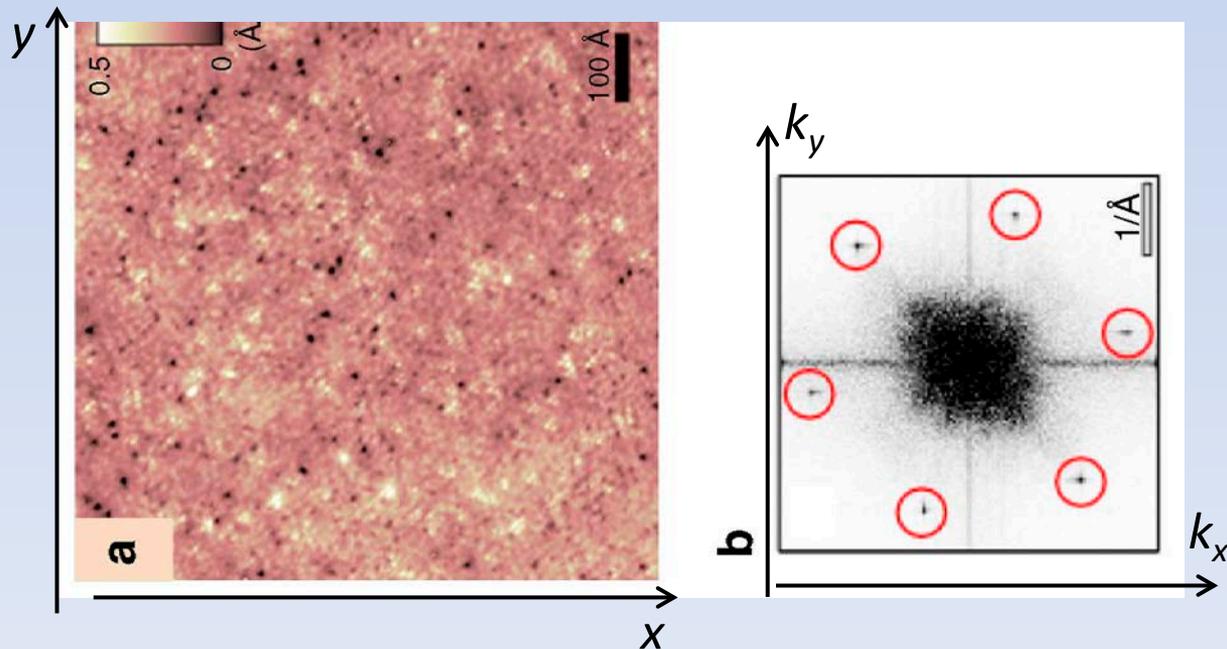


# Режим 1: Фиксированный туннельный ток (STM)

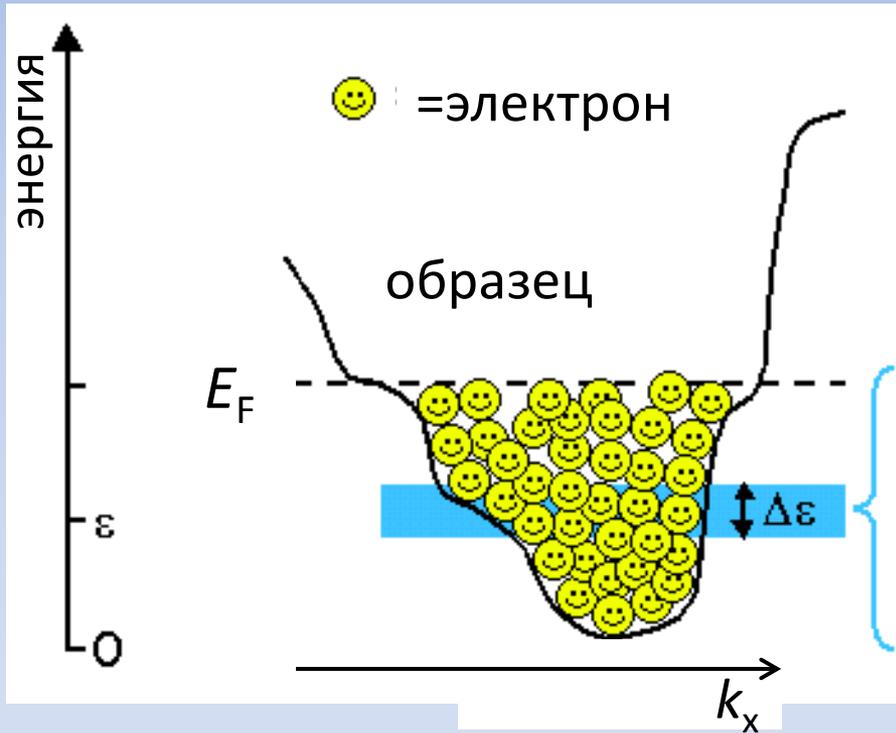


Рельеф поверхности

Изображение  
поверхностных  
состояний в  
кристалле  
 $\text{Sn-Bi}_{1.1}\text{Sb}_{0.9}\text{Te}_2\text{S}$   
(BiSSTS)

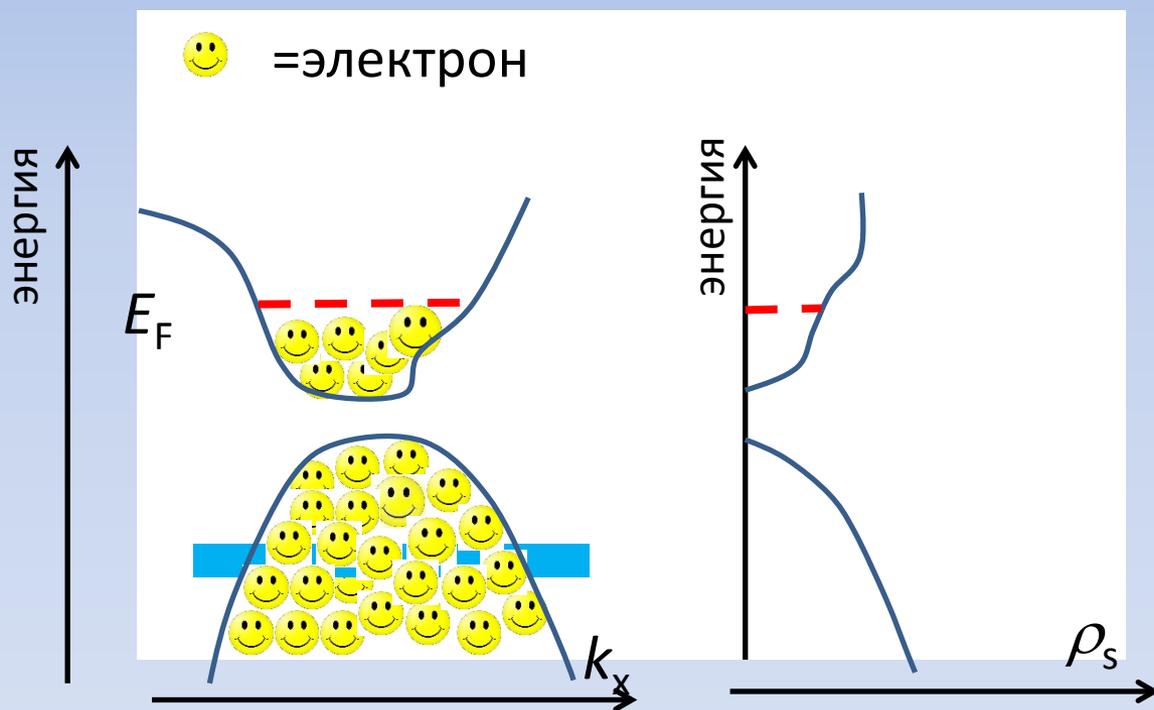


## Режим 2: Сканирующая туннельная спектроскопия (STS)

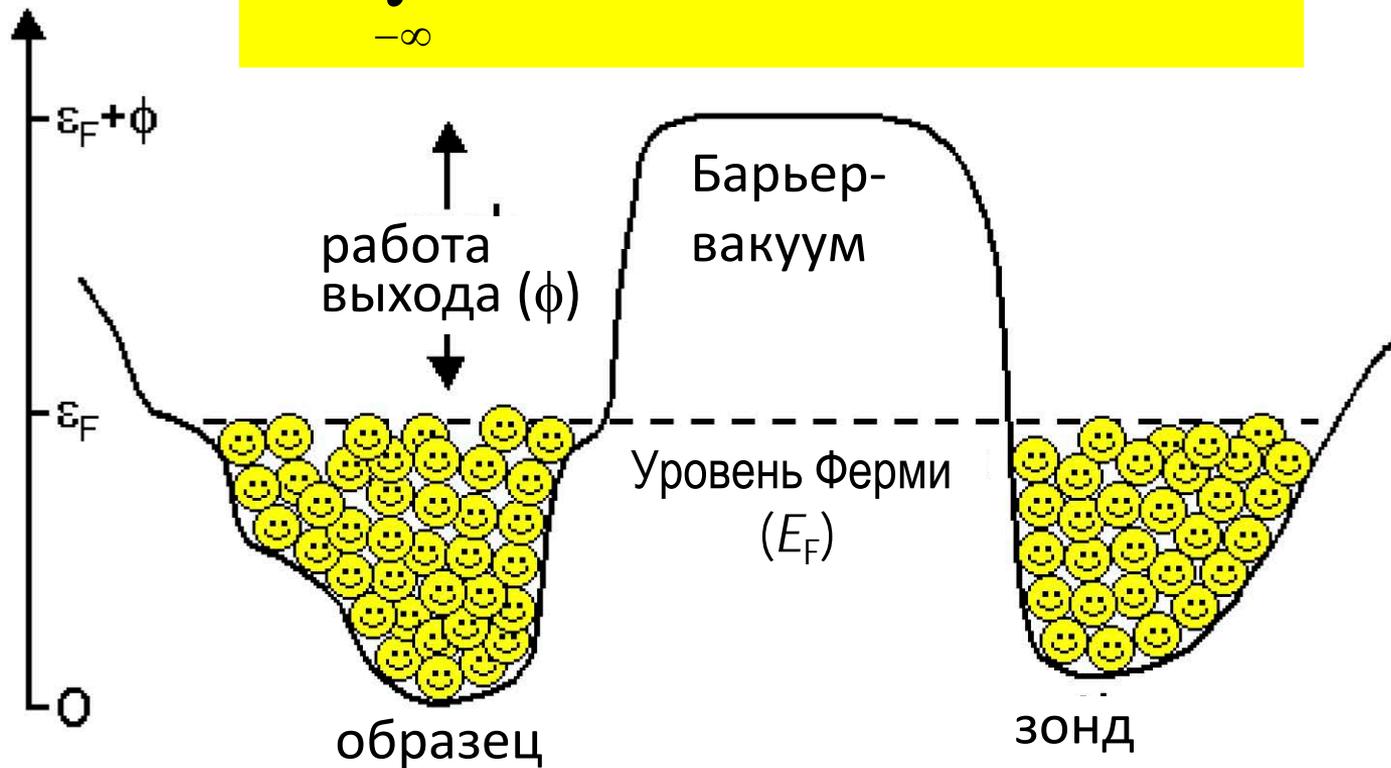


**Плотность состояний  $\rho(\varepsilon)$**   
при энергии  $\varepsilon$  - это число  
электронов, сидящих в  
полоске, деленное на ее  
ширину  $\Delta\varepsilon$

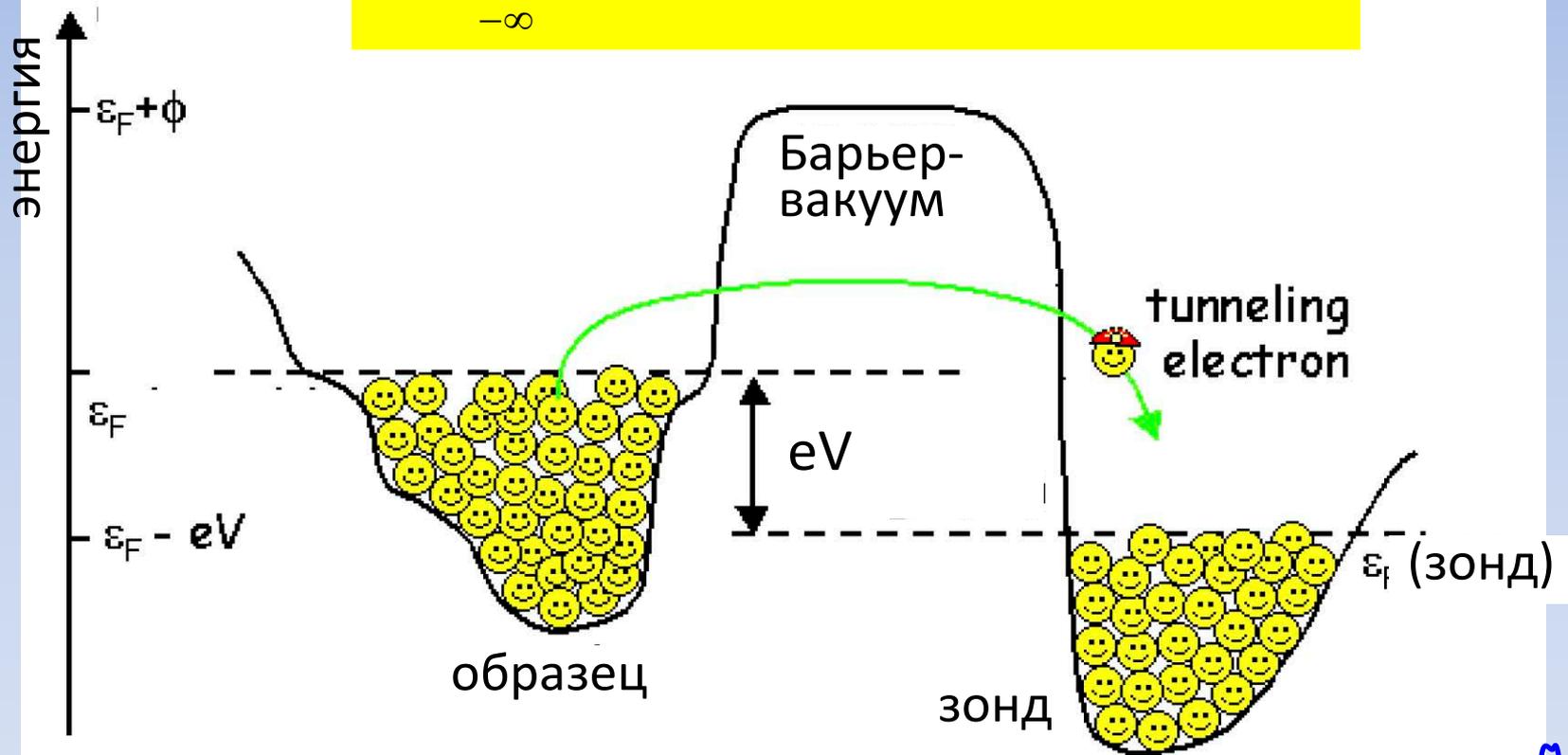
## Режим 2: Сканирующая туннельная спектроскопия (STS)



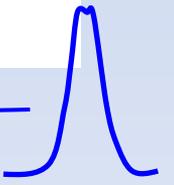
$$I \propto \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_s(E) [f(E) - f(E - eV)] dE$$



$$I \propto \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_s(E) [f(E) - f(E - eV)] dE$$

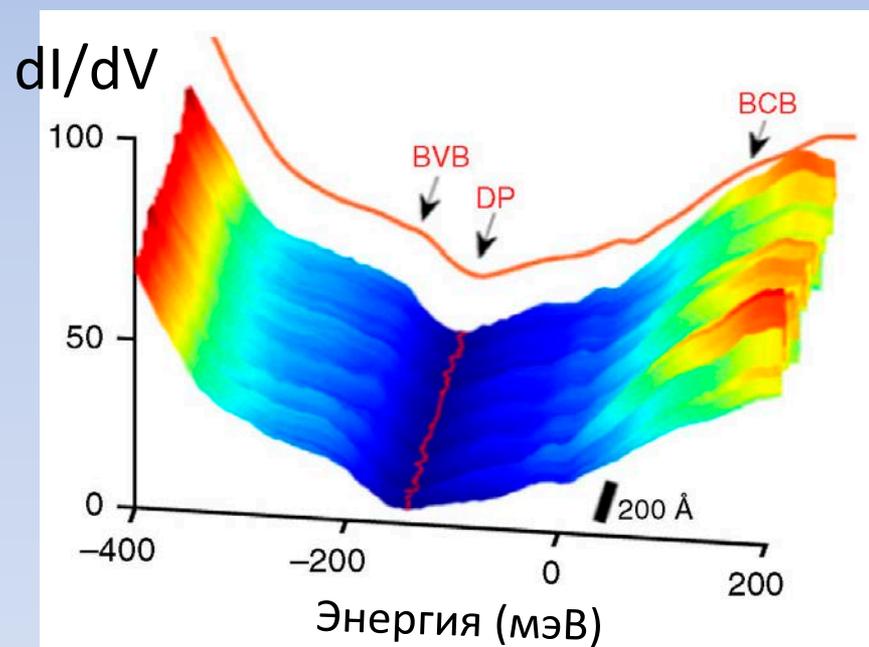
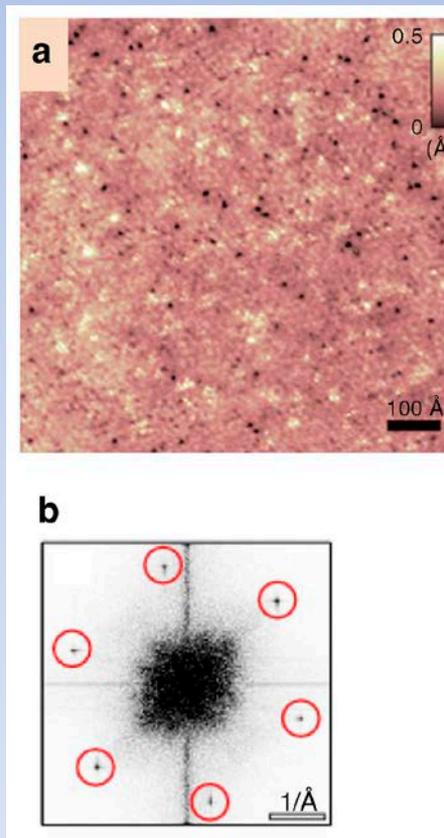


$$\left. \frac{dI}{dV} \right|_{V=V_0} \propto \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_s \frac{\partial f(E - eV)}{\partial (eV)} \Big|_{V=V_0} dE$$



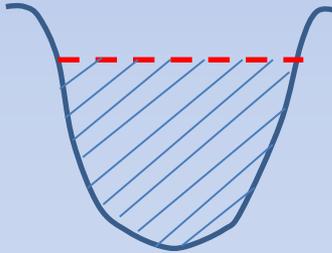
# Топологический изолятор Bi-SSTS

STM

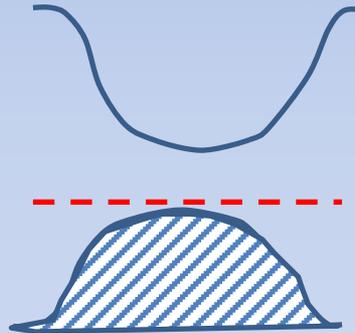


# Энергетический спектр сверхпроводника

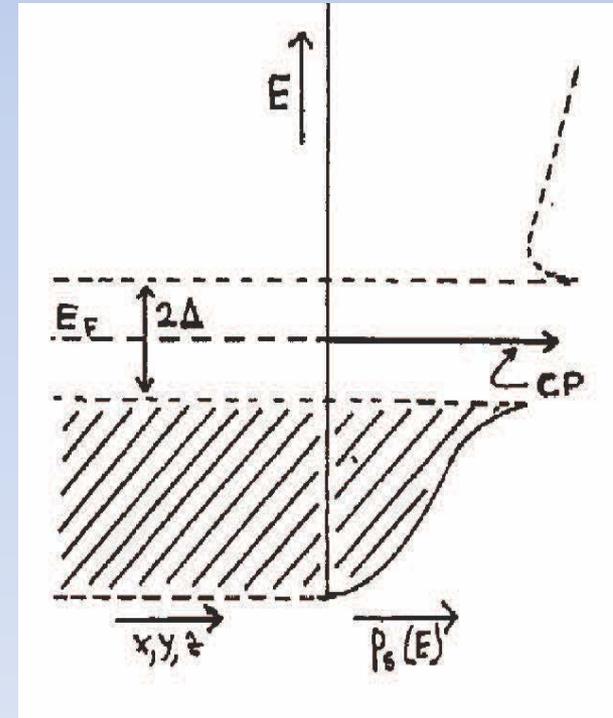
металл



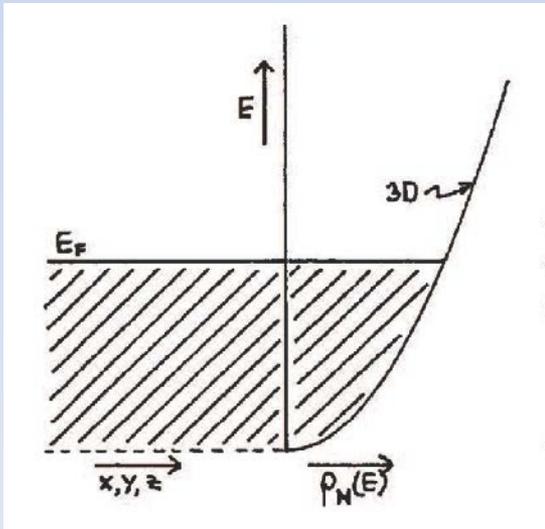
полупроводник  
(изолятор)



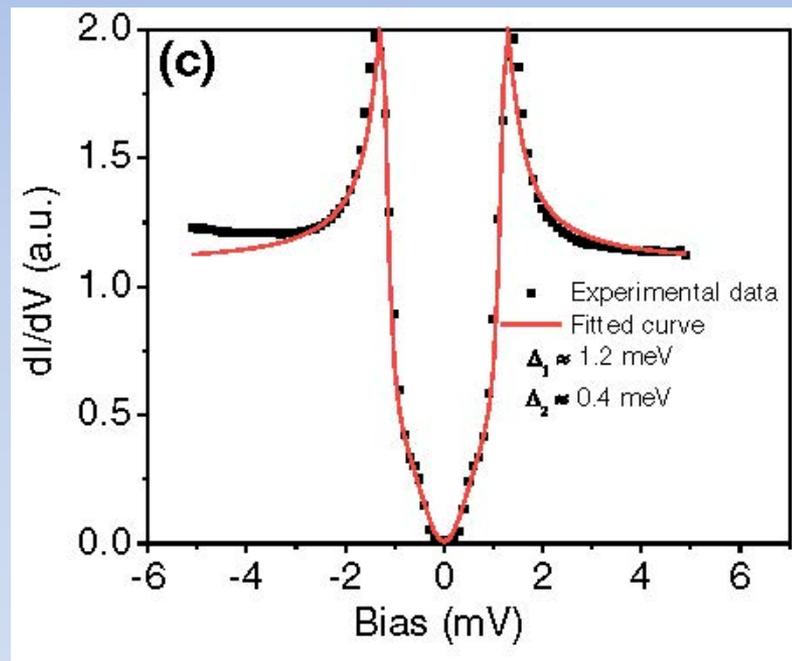
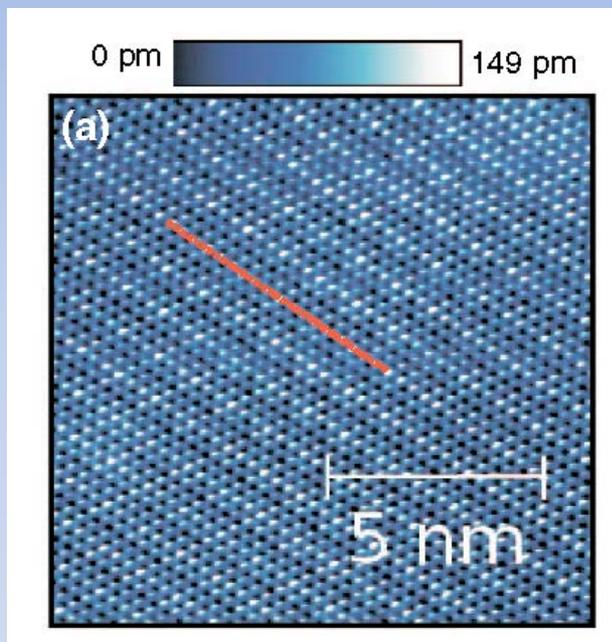
сверхпроводник



В спектре возникает щель  $2\Delta$



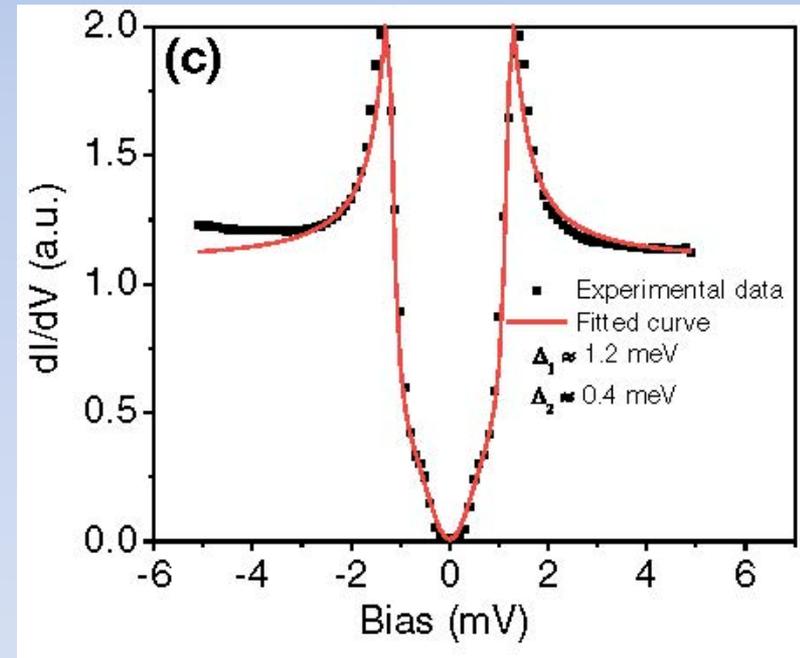
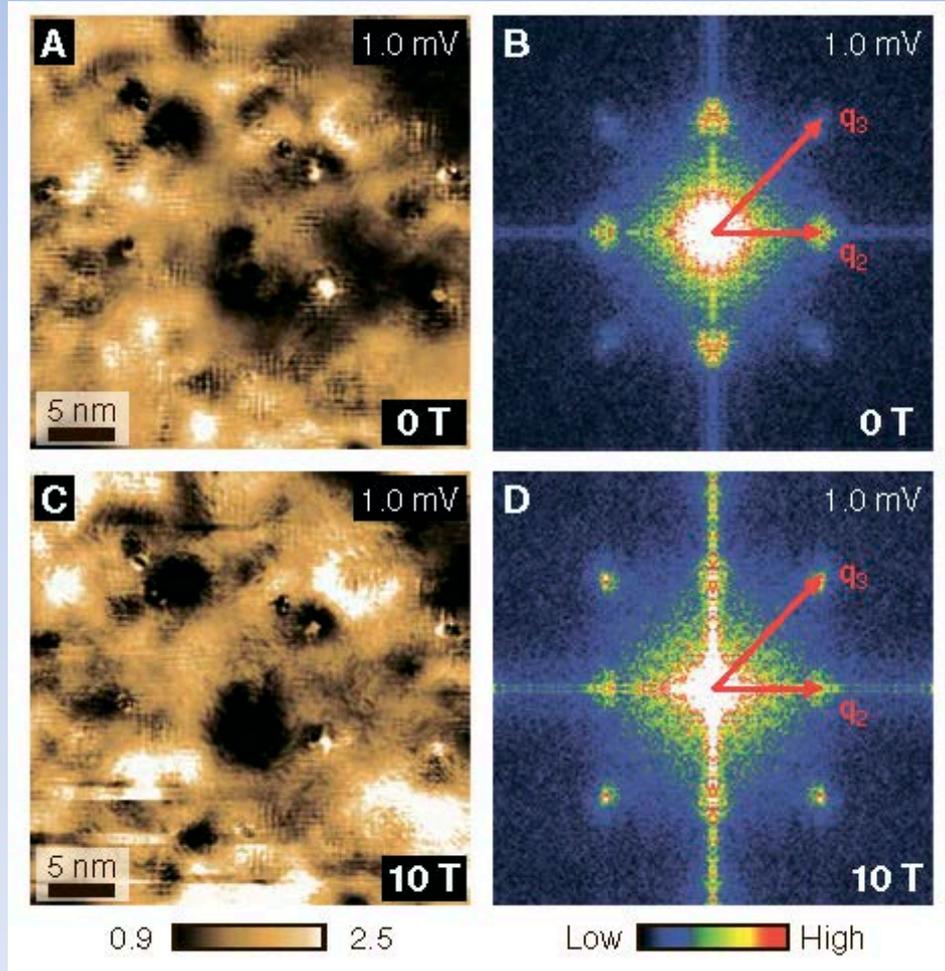
# Сверхпроводник NbSe<sub>2</sub>



# Сверхпроводник NbSe<sub>2</sub>

Карта  $dI/dV$  и ее Фурье преобразование

$dI/dV$  усредненная по линии



**Вместо того, чтобы слушать, лучше посмотреть глазами и поработать руками в СУПЕРсовременной научной Лаборатории мирового уровня**

**Настоятельно рекомендуем студентам:**

- ✓ Экскурсия в лаборатории Центра
- ✓ Практика в лабораториях Центра в каникулы (конкурсный отбор до 10 кандидатур)

**Запись на экскурсию:**

**Моргун Леонид Александрович**

**+7(499)1326907, 64-85**

**[morgunla@lebedev.ru](mailto:morgunla@lebedev.ru)**

**[morgun@gmail.com](mailto:morgun@gmail.com)**

***До встречи в ФИАН!***

## Резюме

Два мощных метода изучения спектра электронов:

- На поверхности интегрально (ARPES)
- На поверхности локально (STM)

С их помощью обнаружены и изучаются новые  
квантовые материалы – как основа будущей  
спинтроники, квантовых вычислений,...



**Спасибо за внимание!**

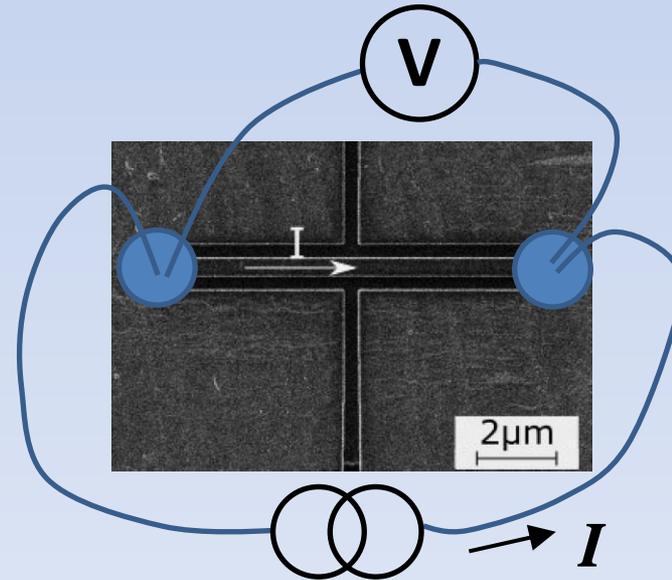
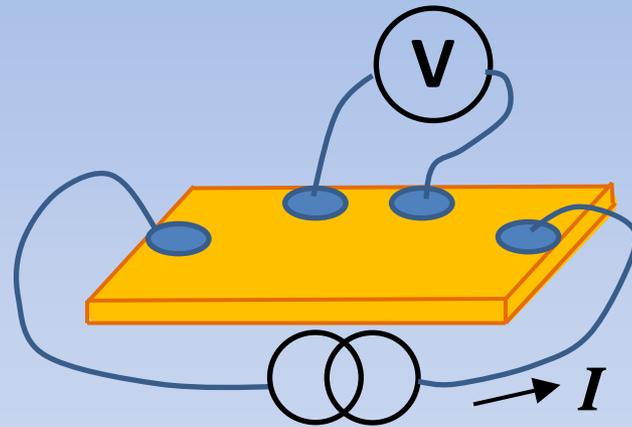
# Свойства ?

Воздействие



Результат

# DC & AC транспорт

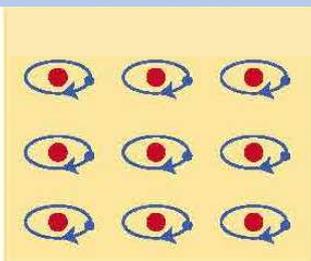


# Топологический изолятор: топология

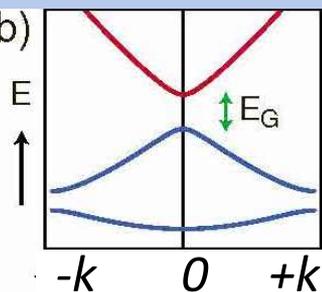
атомный  
изолятор

Зонная  
структура

(a)



(b)

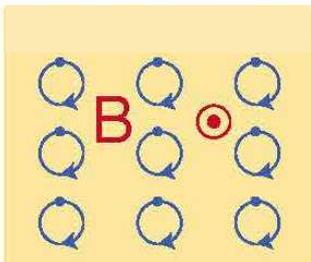


(c)

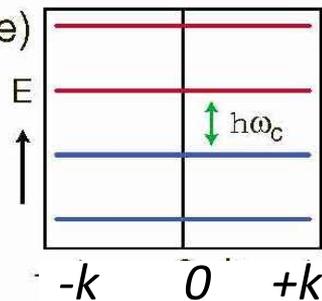


$$\gamma = 0$$

(d)



(e)



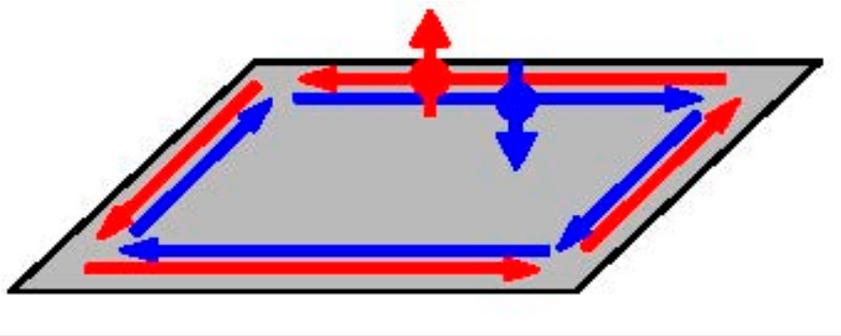
(f)



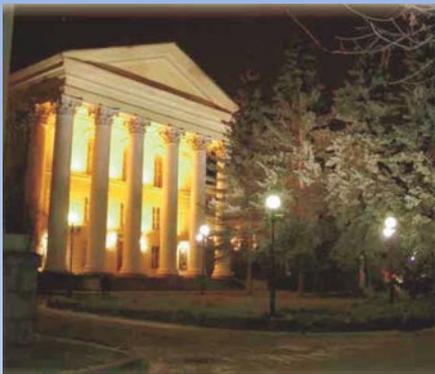
$$\gamma = 1$$

изолятор,  
сделанный  
магнитным  
полем

# Топологический изолятор. Что дальше?



- метрика → топология
- Пространство-время
- Киральные состояния
- 3D- аналог графена ?
- Магнитный монополь ?
- Фермион Майорана
- Спинтроника
- Квантовые вычисления
- .....



**Фотоэмиссия электронов с угловым разрешением (ARPES) и туннельная спектроскопия (STS) -**

**Инструменты для измерения энергетического спектра**