

Введение в конденсированное состояния. Энергетический спектр. Методы интегрального (ARPES) и локального (STS) измерения спектра

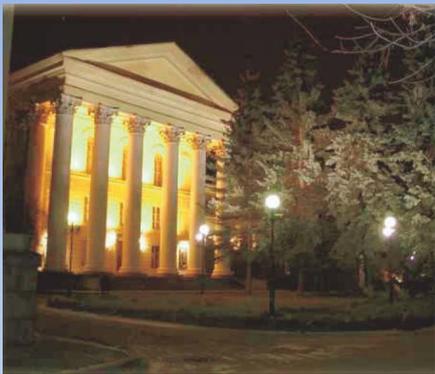
В.М. Пудалов,

*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>



Цель: создание материалов с заданными электронными свойствами

В.М. Пудалов,

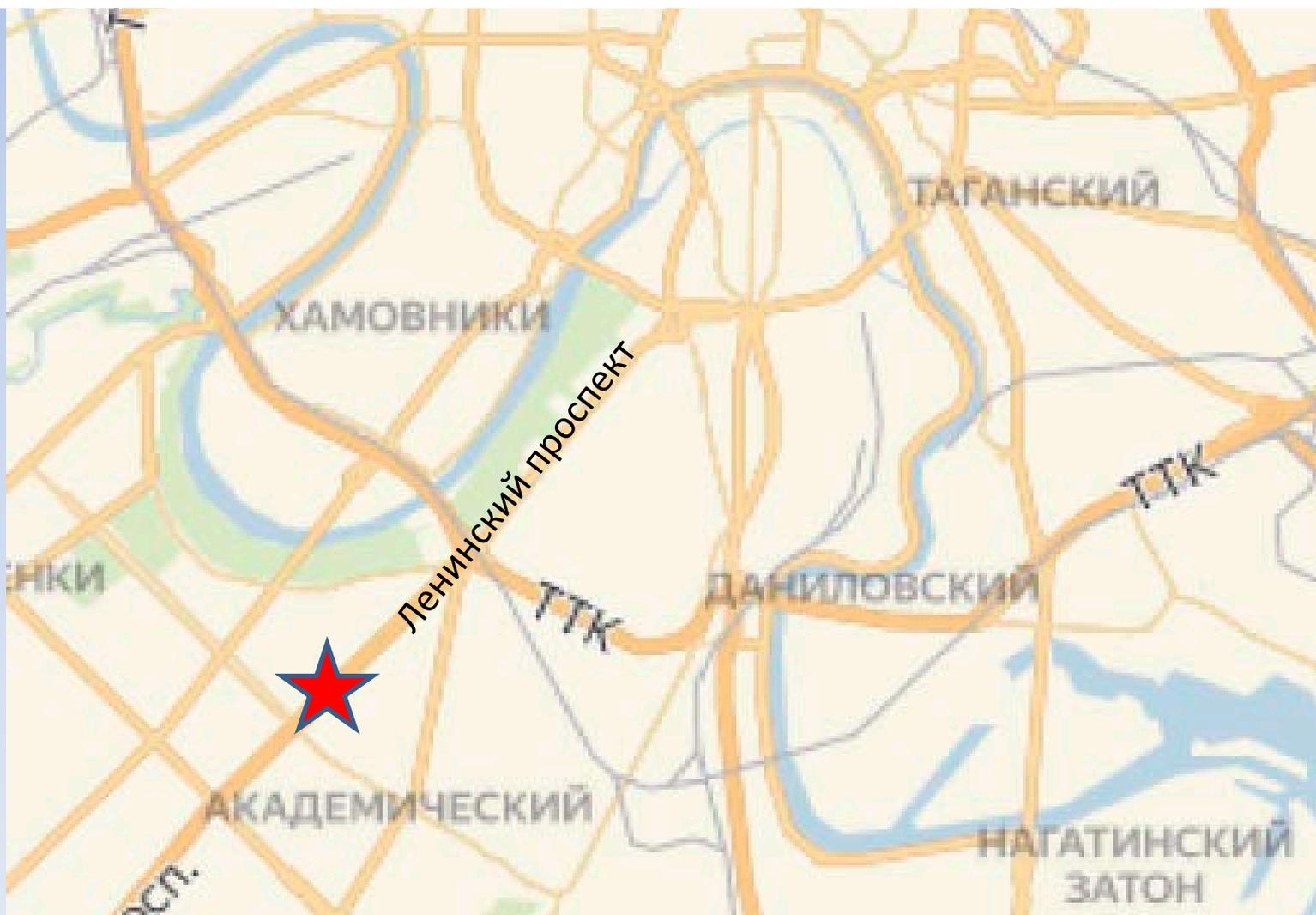
*Центр сверхпроводимости и квантовых материалов
им. В.Л. Гинзбурга (ФИАН)*

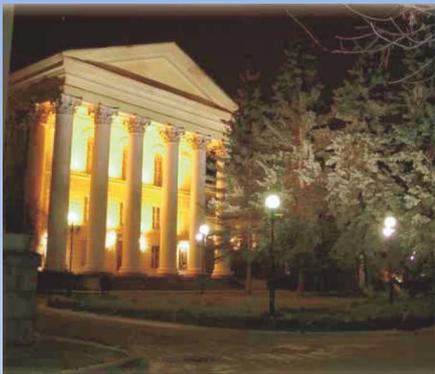
<https://gc.lebedev.ru/>

<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/>





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

Полный цикл научных исследований :
идея, формулирование “хотелок”,

Численные расчеты
структуры, свойств.

Создание, экспер. проверка



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

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

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

Синтез новых материалов, рост кристаллов



Изготовление наноструктур



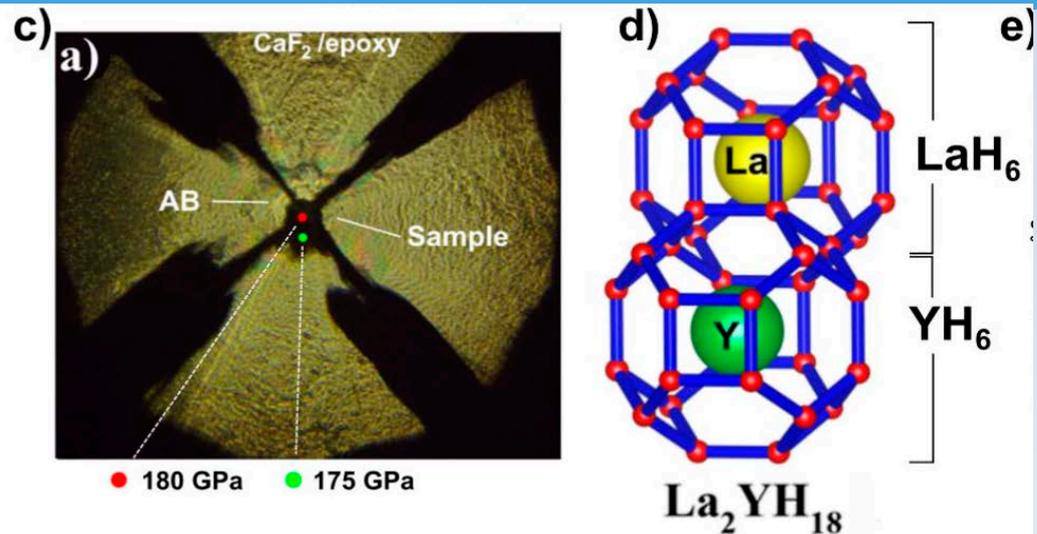
Синтез новых материалов в алмазных камерах

Superconductivity at 253 K in lanthanum-yttrium ternary hydrides

Dmitrii V. Semenov,^{1,&,*} Ivan A. Troyan,^{2,&} Anna G. Ivanova,^{2,&} Alexander G. Kvashnin,^{1,&,*} Michael Hanfland,³
Andrey V. Sadakov,⁴ Oleg A. Sobolevskiy,⁴ Kirill S. Pervakov,⁴ Alexander G. Gavriluk,^{2,5} Igor S. Lyubutin,²
Konstantin V. Glazyrin,⁶ Nico Giordano,⁶ Denis N. Karimov,² Alexander L. Vasiliev,^{2,7} Ryosuke Akashi,⁸ Vladimir
M. Pudalov^{4,9} and Artem R. Oganov^{1,*}

Superconductivity at 161 K in thorium hydride ThH₁₀: Synthesis and properties

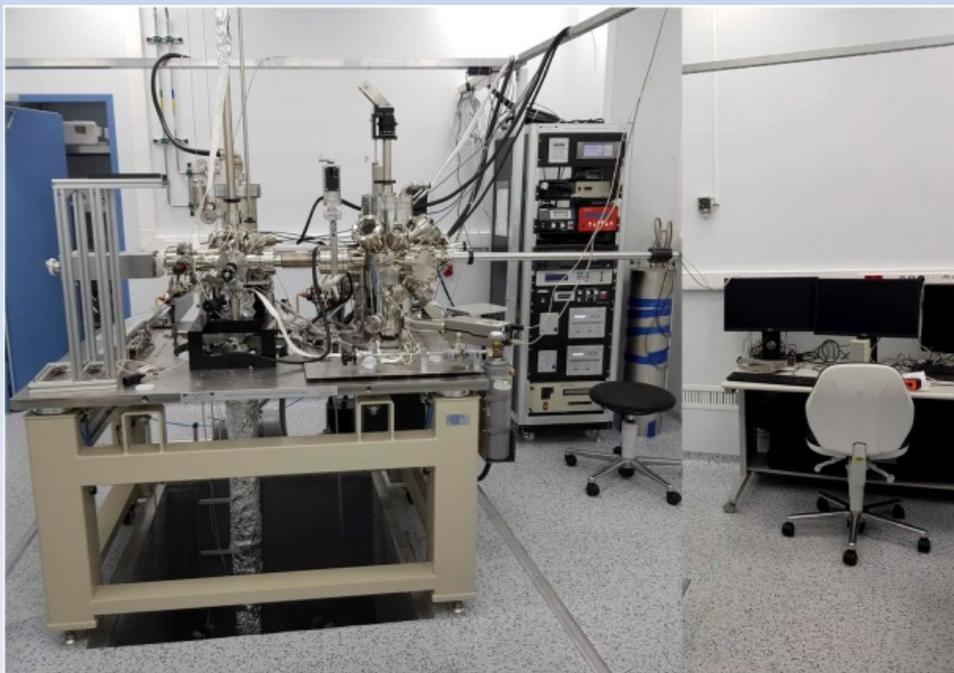
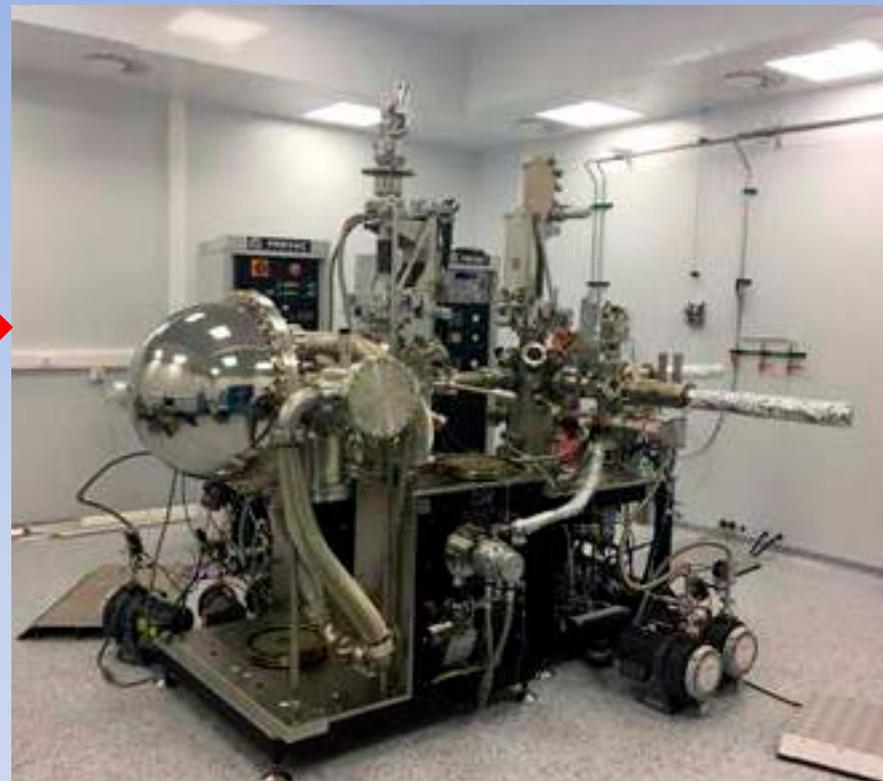
Research: Original Research



Измерения физических свойств



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



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

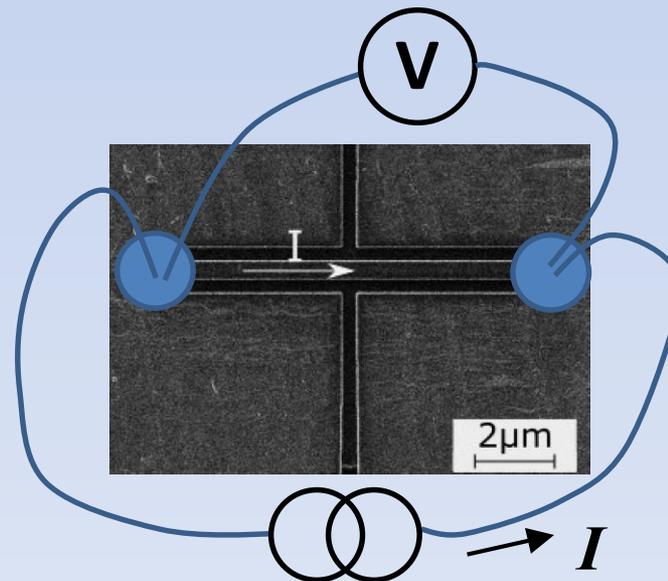
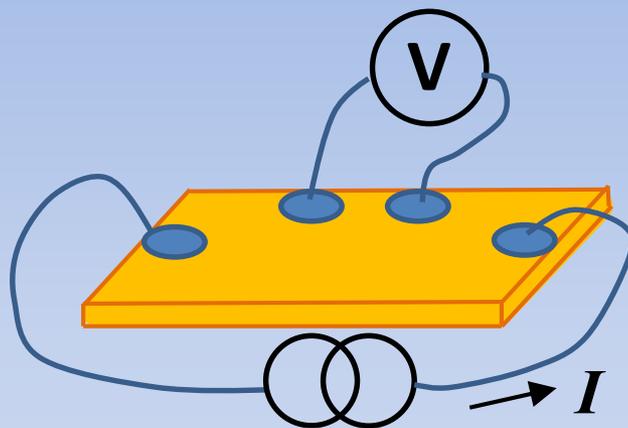
Свойства ?

Воздействие



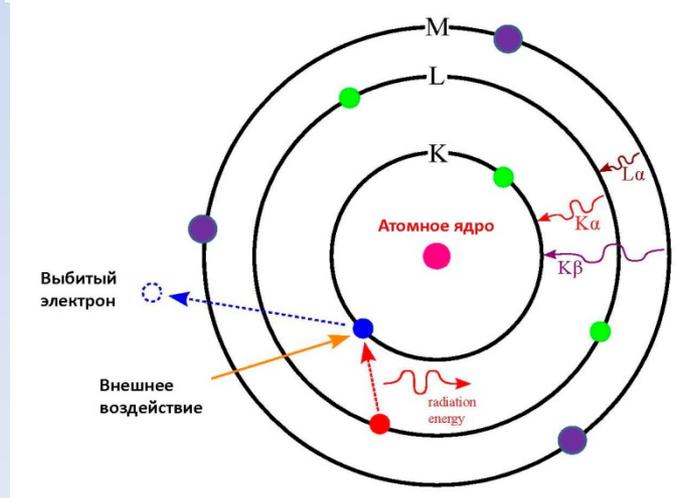
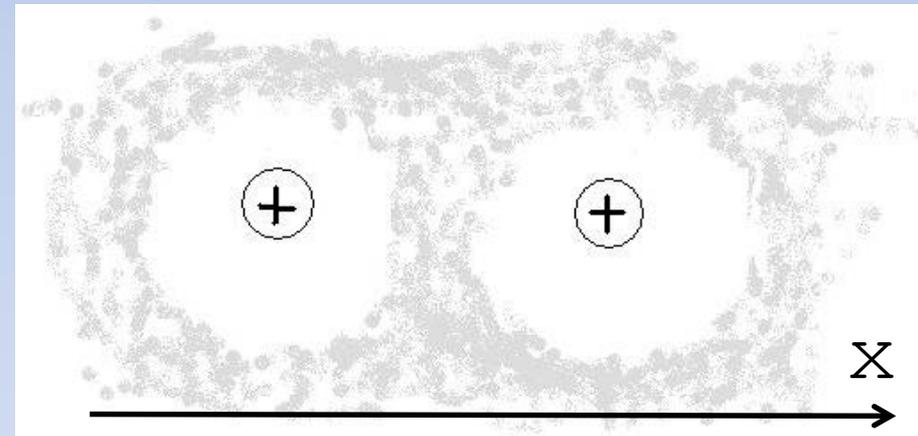
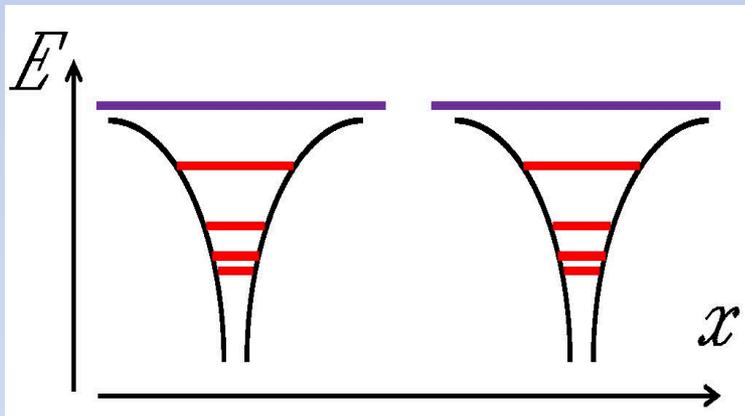
Результат

DC & AC транспорт



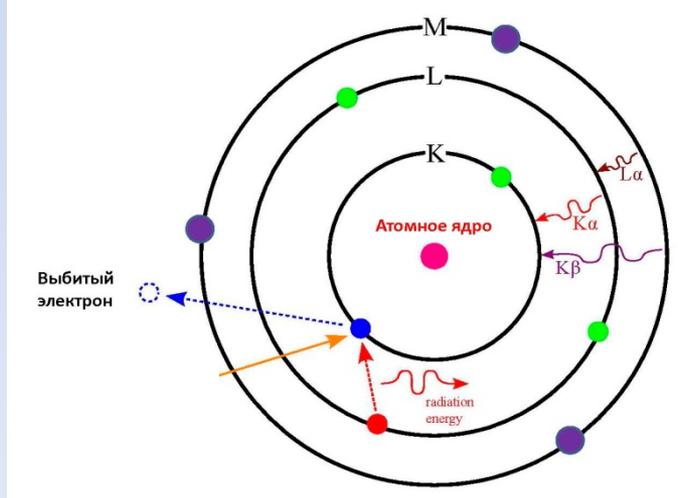
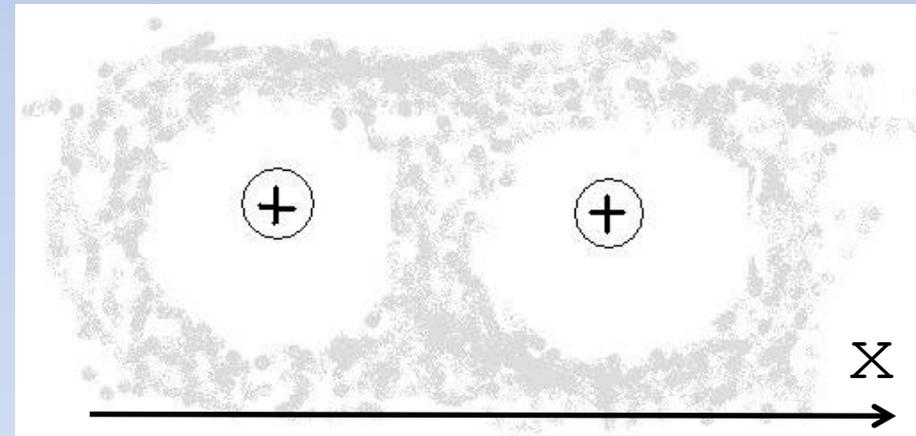
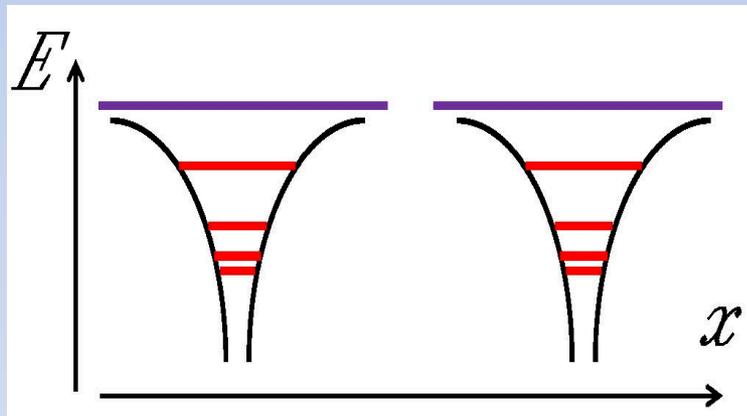
Локальные свойства электронов в металлах, топологических изоляторах, дираковских полуметаллах и сверхпроводниках

“Электроны в металлах” \equiv электроны проводимости



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

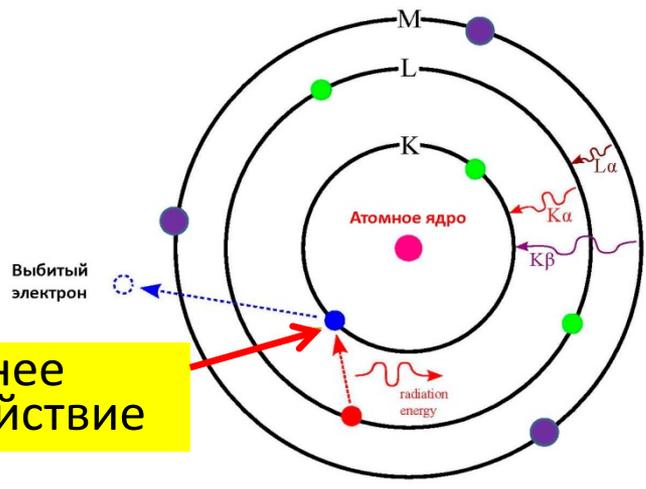
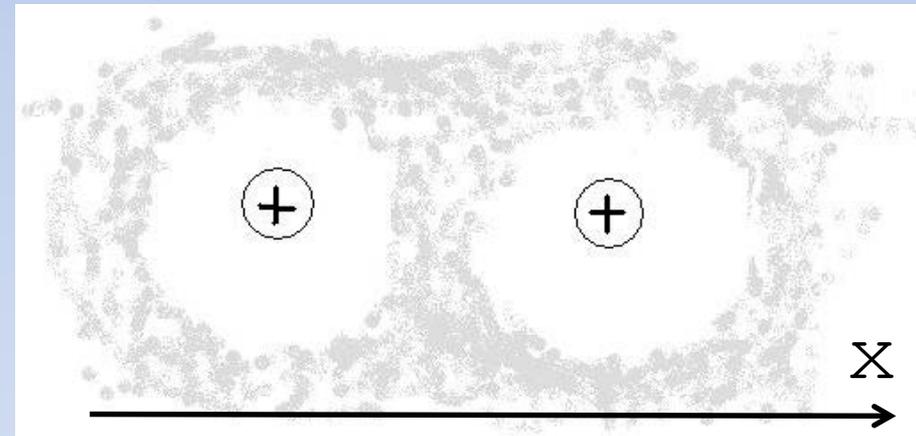
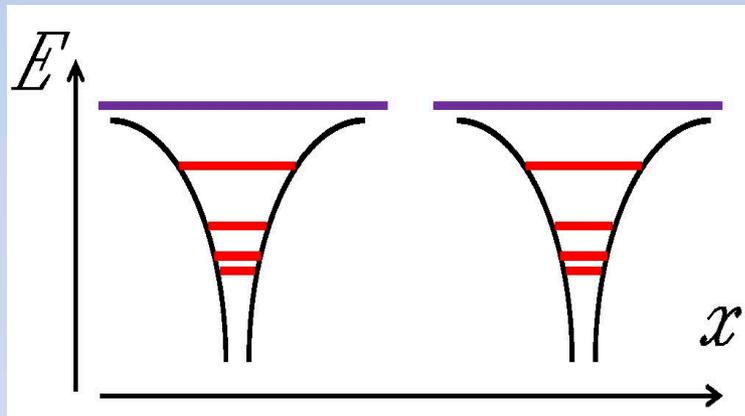
“Электроны в металлах” \equiv электроны проводимости



Свойства ?

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

“Электроны в металлах” \equiv электроны проводимости



Внешнее воздействие

Свойства ?

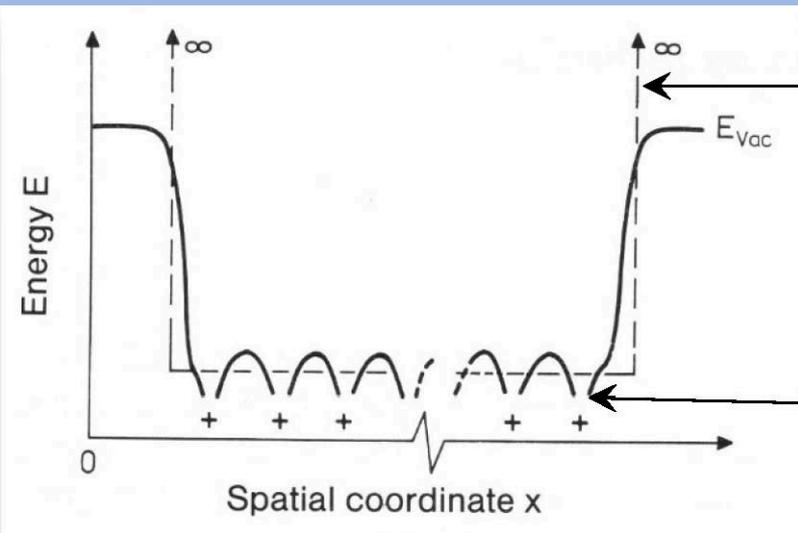
Электронные свойства твердых тел –

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

Большинство свойств определяются спектром $E(p)$

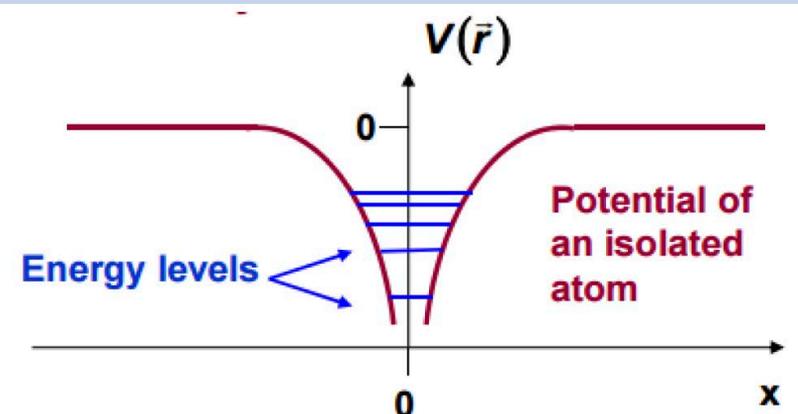
1. Свойства электронов вблизи поверхности

2. Локальные электронные свойства

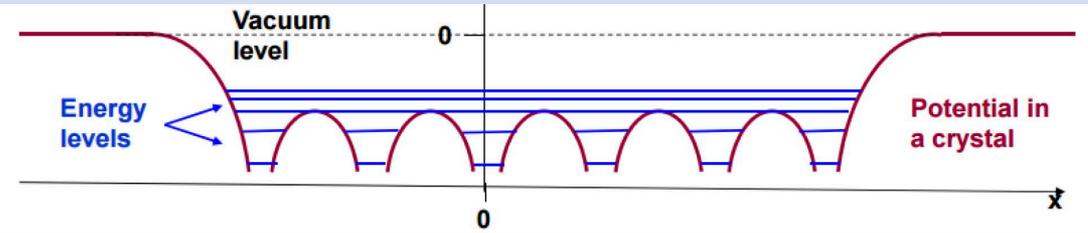


Свободные электроны

Потенциал решетки



Уровни энергии в изолированном атоме



Потенциал решетки и уровни энергии

Частица



Волна

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

Свободные электроны

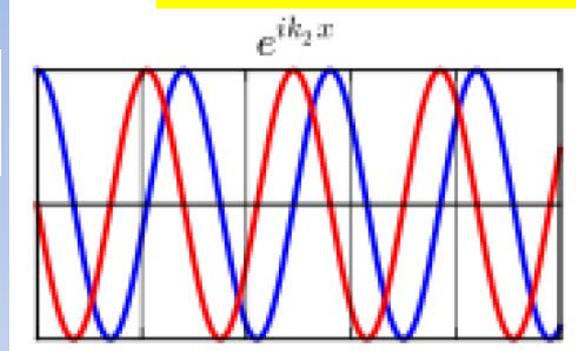
$$p = \hbar k$$

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

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

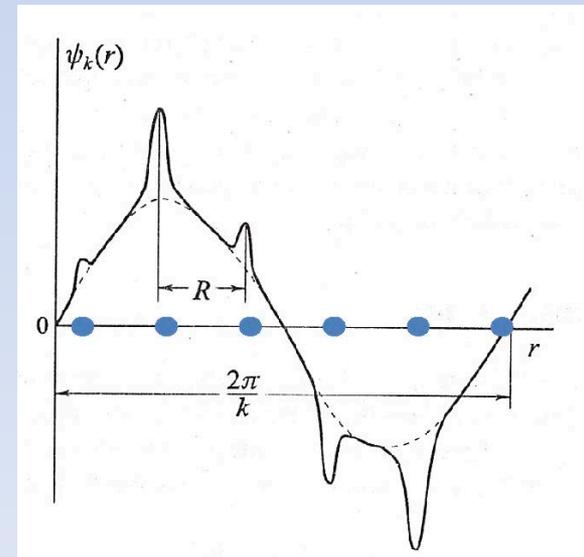
$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

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



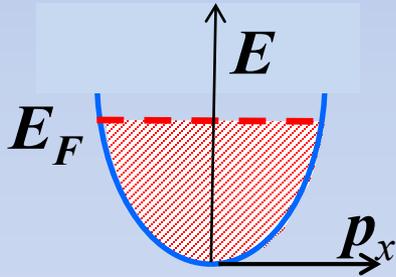
Почти свободные электроны

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

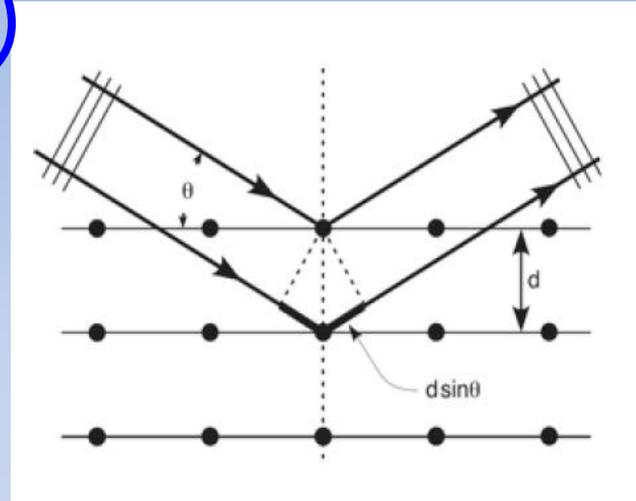


Электроны в вакууме

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

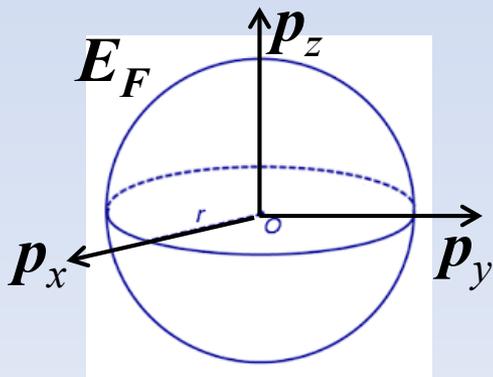


А в кристалле ?



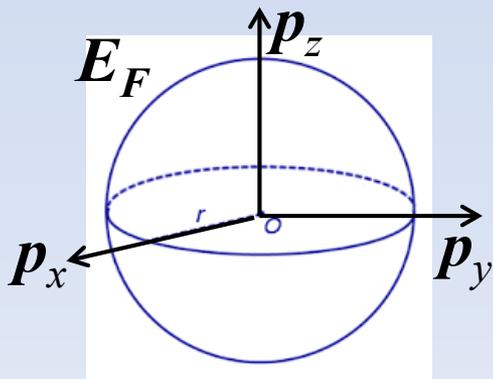
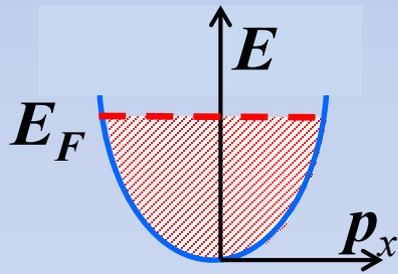
Фотон: $k=2\pi/\lambda$; $\lambda=c/\nu$; $E=h\nu$

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

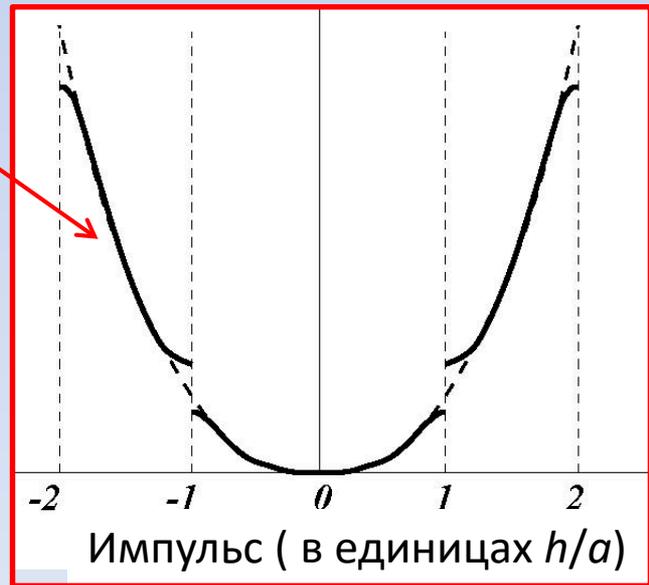
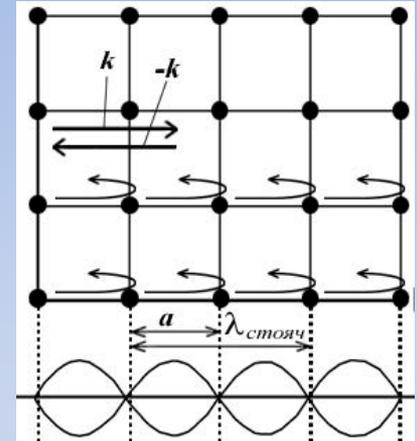
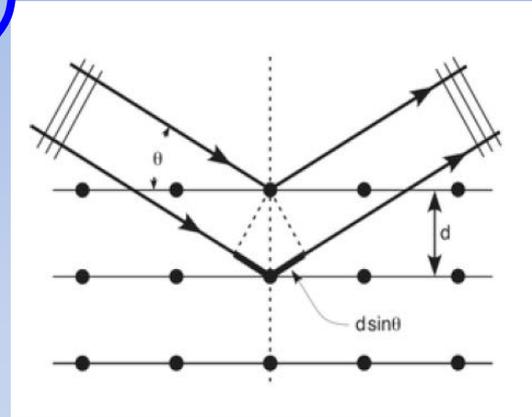


Электроны в вакууме

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

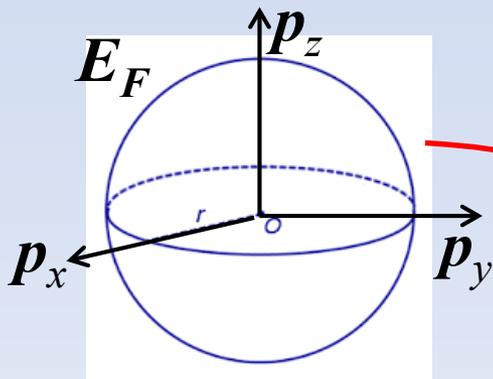
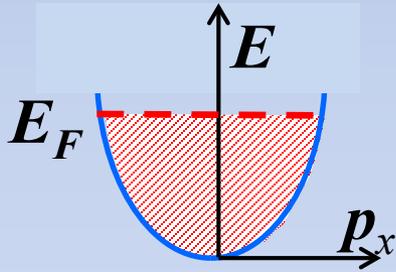


Электроны в кристалле

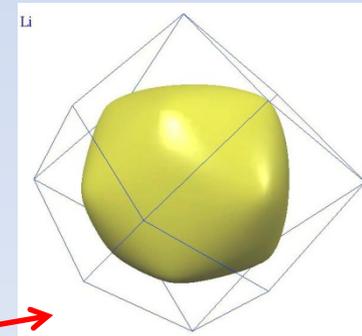
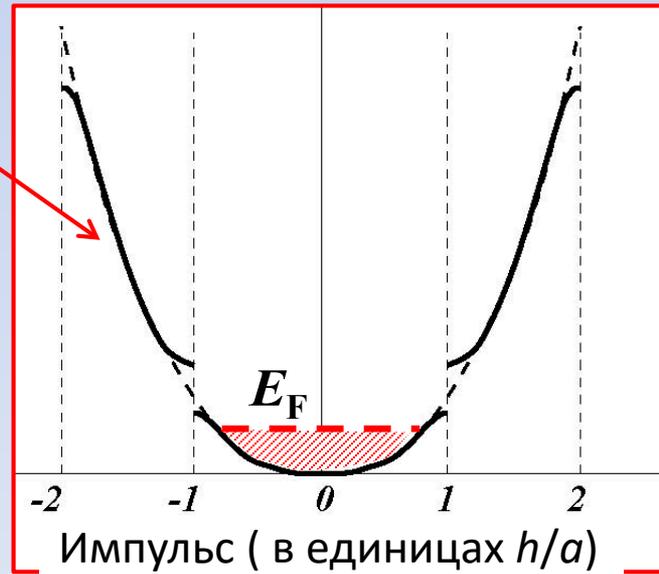
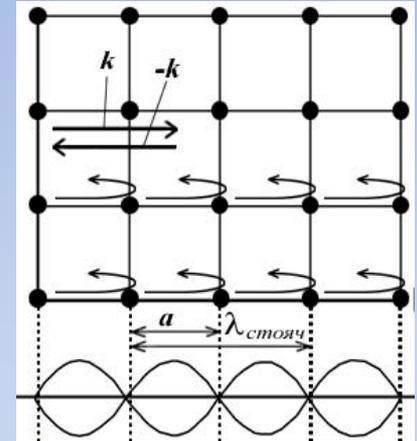
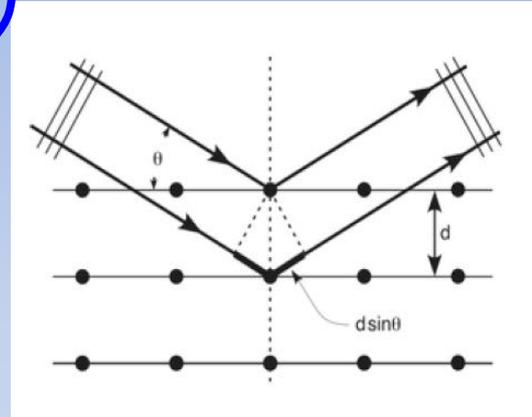


Электроны в вакууме

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

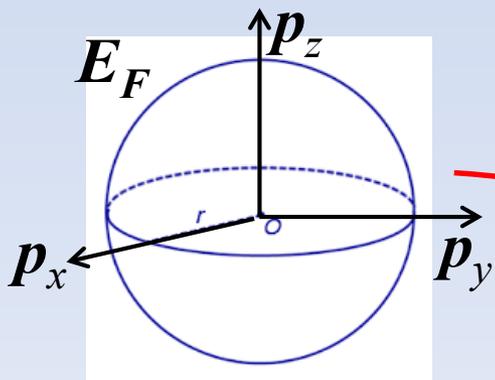
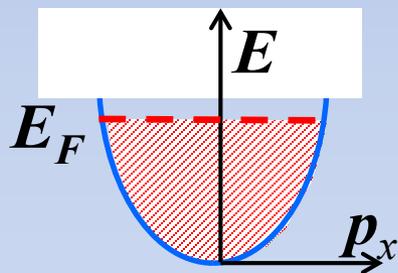


Электроны в кристалле

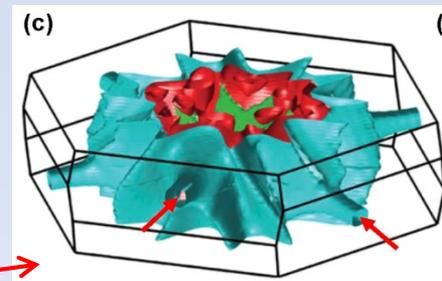
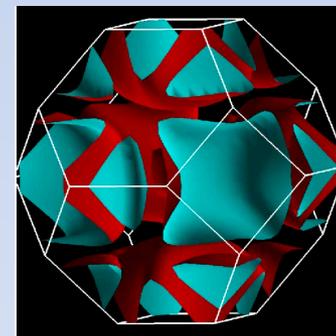
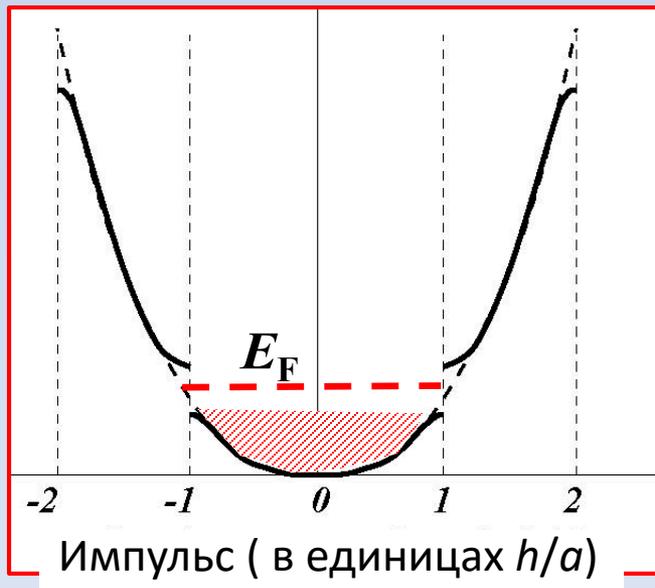
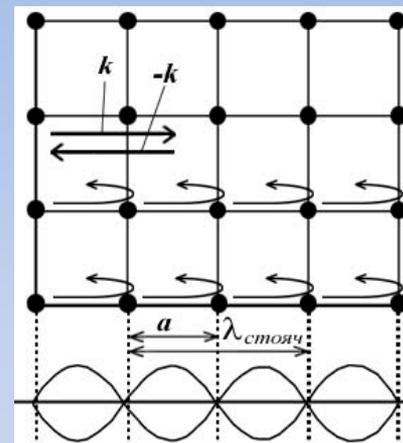
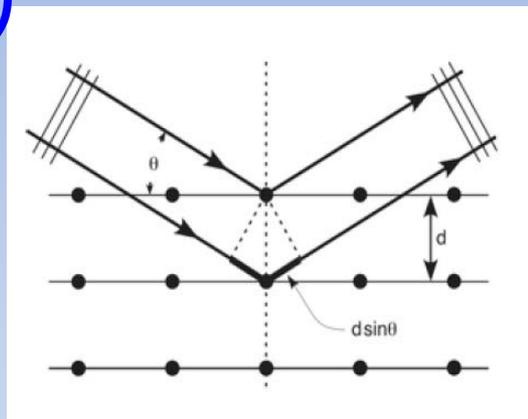


Электроны в вакууме

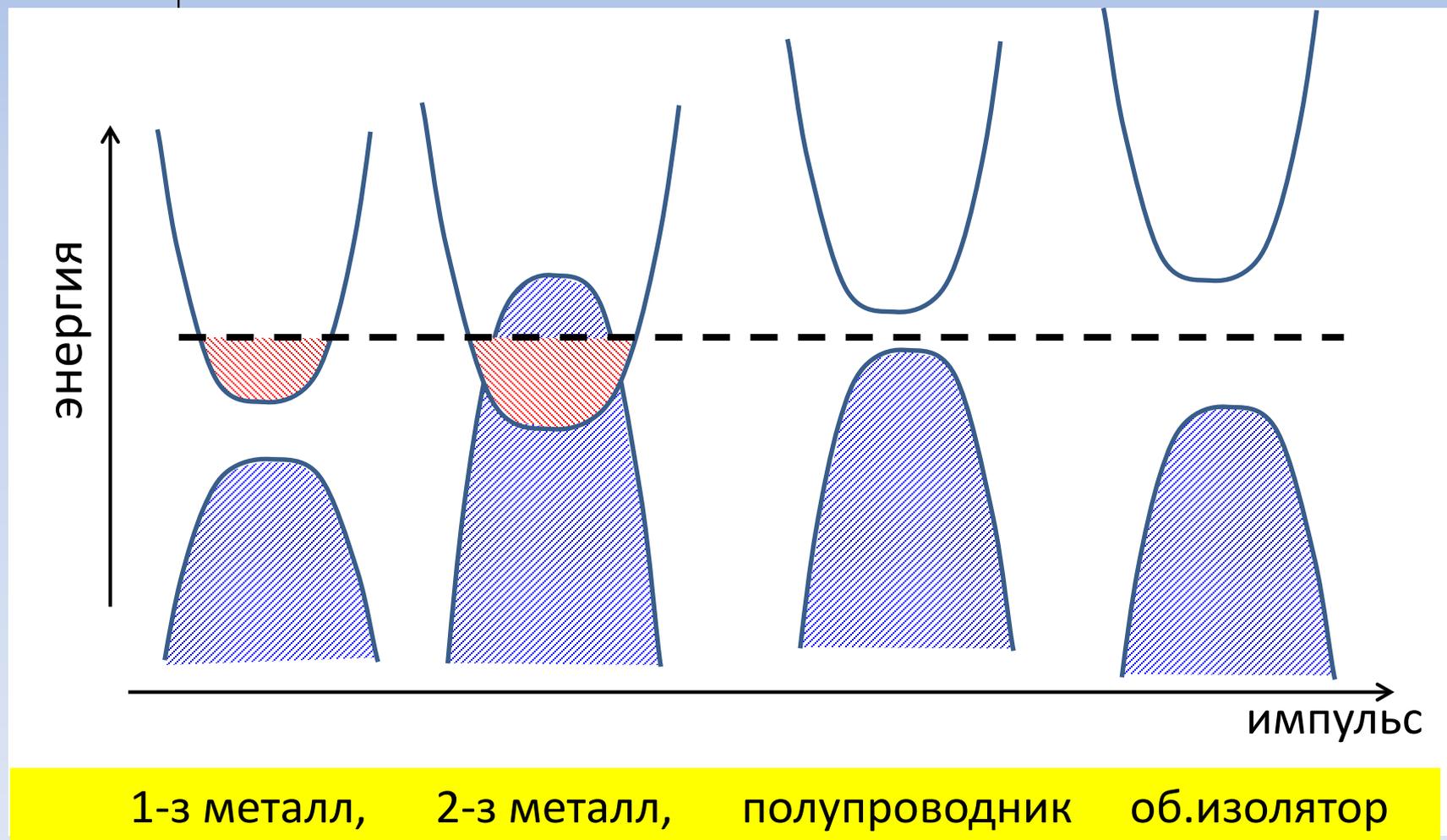
$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}$$



Электроны в кристалле



Энергетический спектр = Зонная структура





**1. Фотоэлектронная спектроскопия
с угловым разрешением (ARPES)**

**2. Сканирующая туннельная
микроскопия/спектроскопия**



Генрих Герц

1886

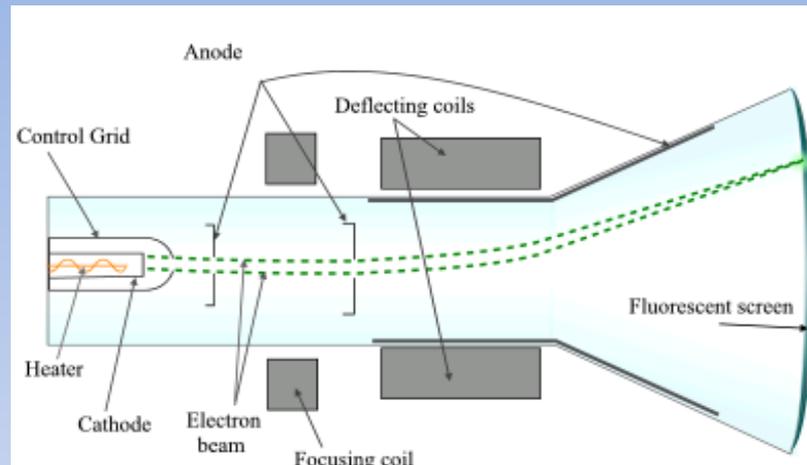


заряженный конденсатор теряет свой заряд быстрее при освещении его пластин ультрафиолетовым излучением

Открытие электрона



Джозеф Джон Томпсон



1899



частица

3 закона фотоэффекта



1889



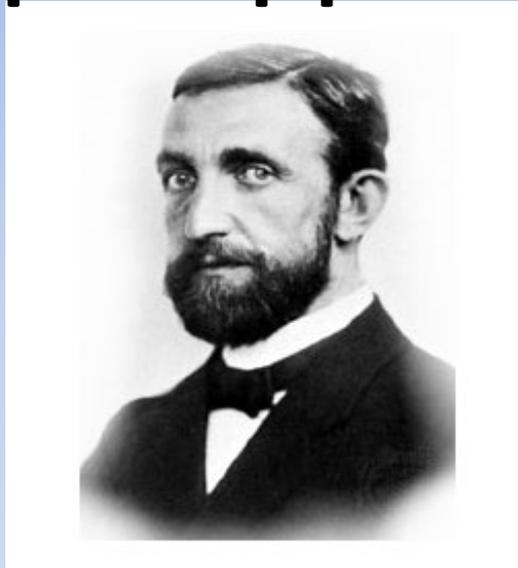
Александр Г. Столетов

I. При фиксированной частоте света число фотоэлектронов, вырываемых из катода в единицу времени, пропорционально интенсивности света.

II Максимальная начальная скорость (максимальная начальная кинетическая энергия) фотоэлектронов не зависит от интенсивности падающего света, а определяется только его частотой f .

III. Для каждого вещества существует красная граница фотоэффекта, ниже которой фотоэффект невозможен.

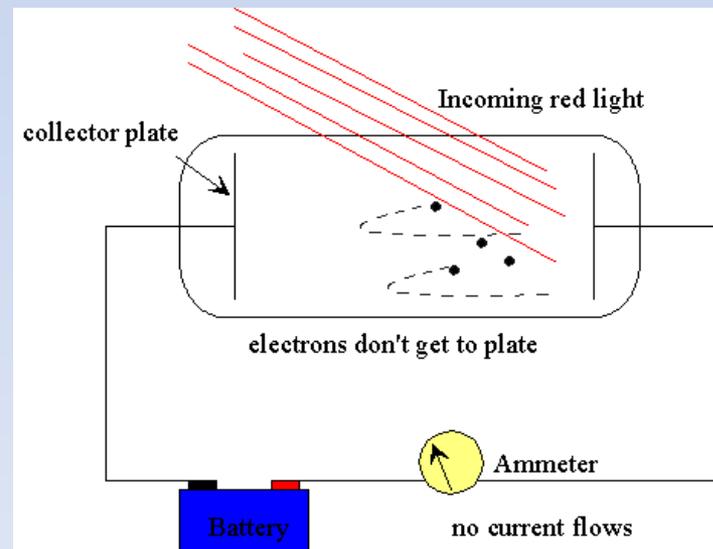
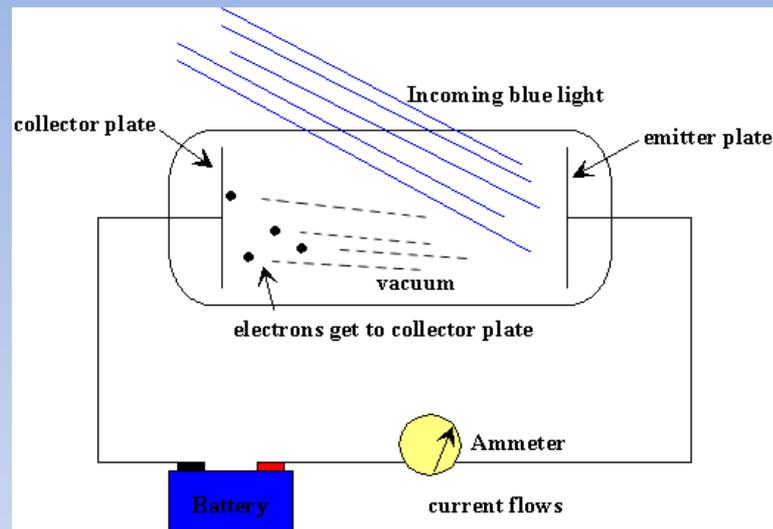
Открытие фотоэффекта



1902

Филипп фон Ленард

Задерживающее напряжение (а значит, и максимальная скорость вылетающих электронов) не зависит от освещённости, а зависит только от цвета (а значит, от частоты) падающего света.



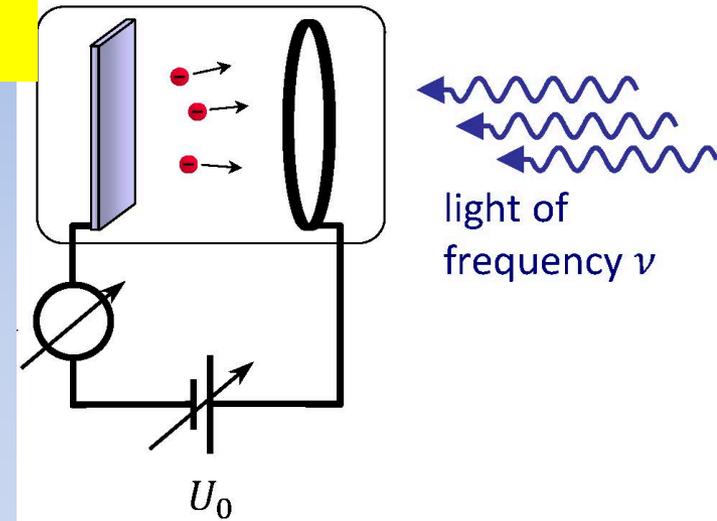
Итак, из опытов Герца, Столетова, Ленарда следует:

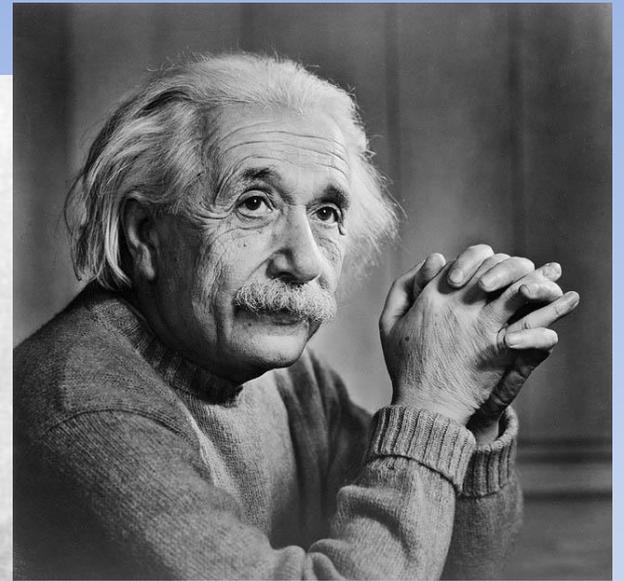
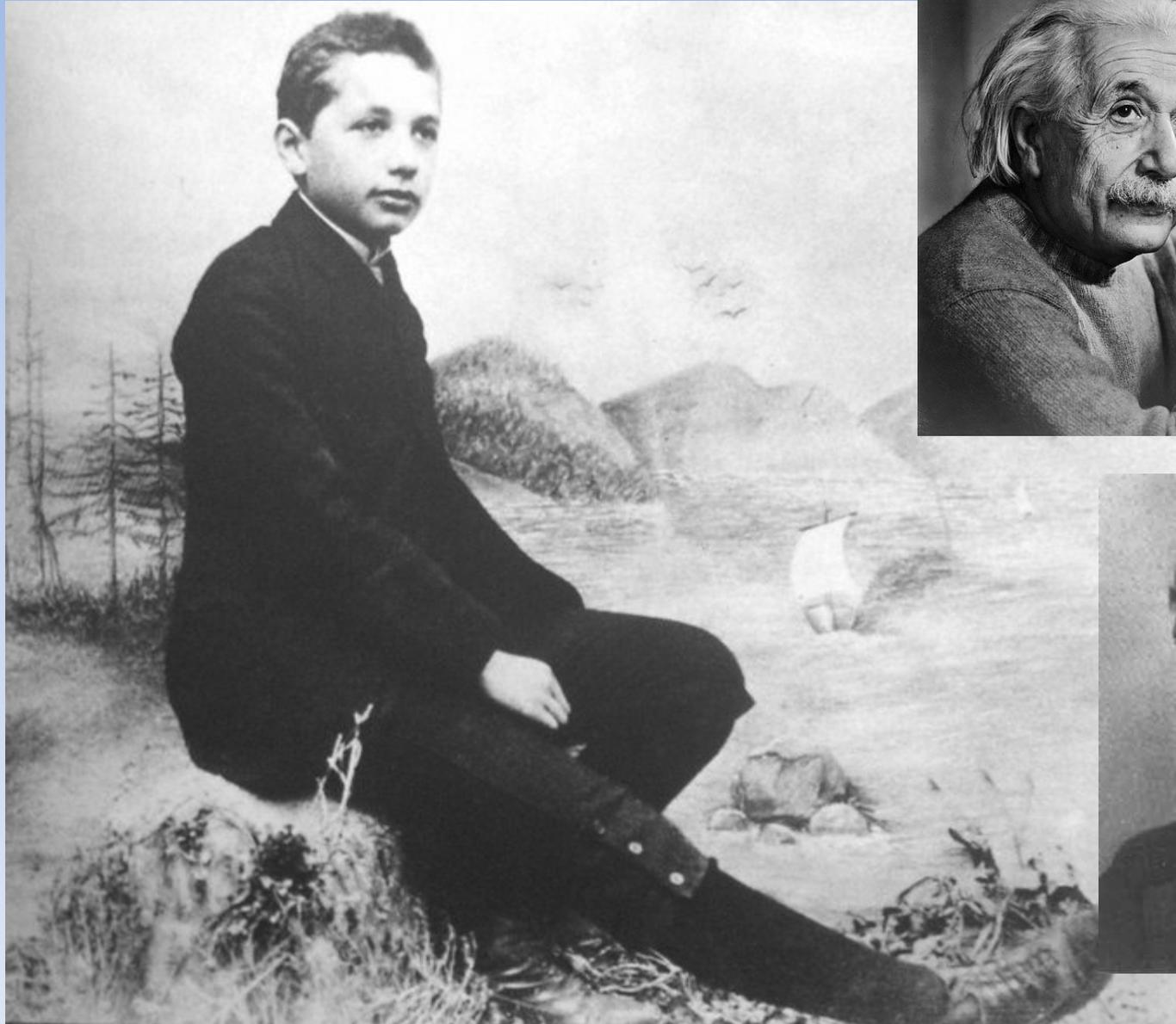
- **ИНТЕНСИВНОСТЬ СВЕТА увеличивает**

$$I_{\text{phot}} \quad \text{но не} \quad E_{\text{max}}^{\text{kin}}$$

- $E_{\text{max}}^{\text{kin}}$ **ЗАВИСИТ ОТ ЧАСТОТЫ СВЕТА**

$$E_{\text{max}}^{\text{kin}} \propto \nu - \text{const}$$

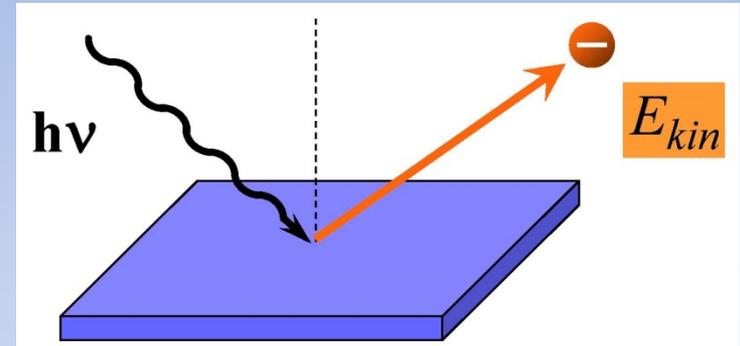




Квантовая теория фотоэффекта



1905



$$E_{kin} = h\nu - \phi$$

Альберт Эйнштейн (26лет)

Измерил постоянную Планка
с точностью 0.5%
с помощью фотоэффекта



Роберт Милликен

1916

h

... и подтвердил
теорию Эйнштейна

Принцип фотоэлектронной спектроскопии



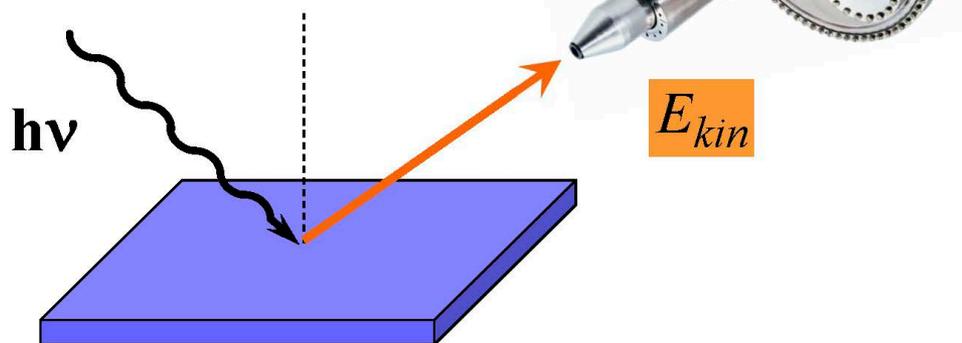
Кай М. Зигбан
Нобелевская
премия 1981

Сохранение энергии

$$E_{kin} = h\nu - \phi - |E_B|$$

1981

анализатор
электронов





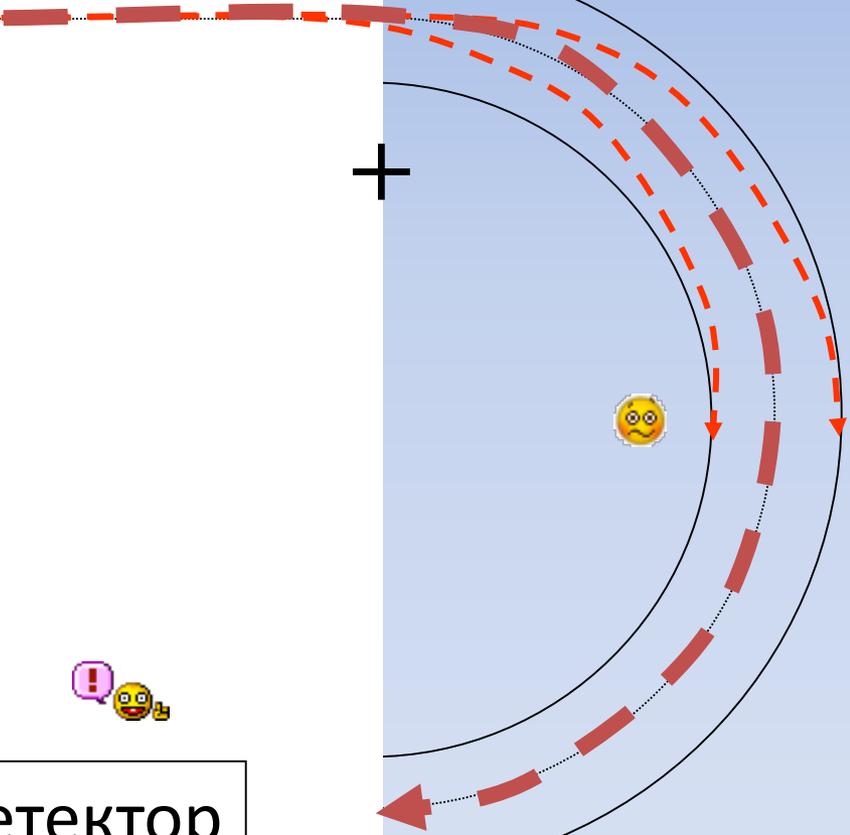
E



Линза

-

+



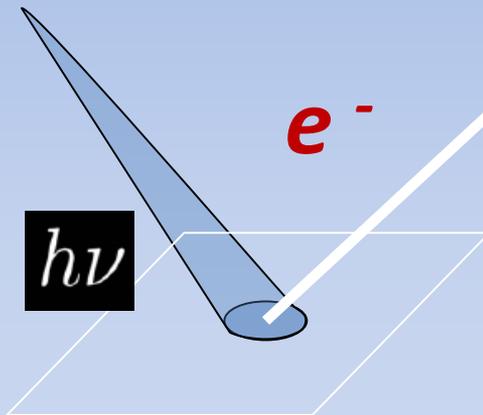
детектор

анализатор

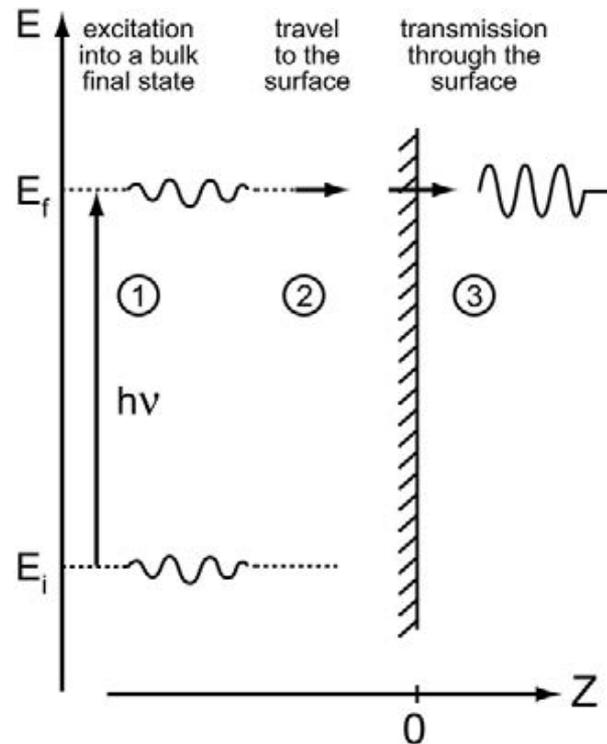
Фотоэлектрический эффект

Сохранение энергии и импульса

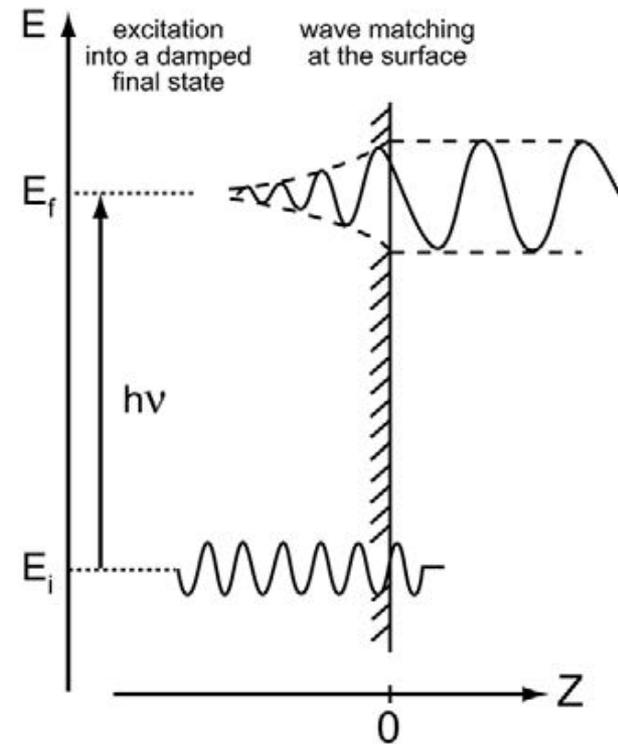
$$E_{\text{kin}} = h\nu - \phi - |E_B| \quad |k| = (2mE_{\text{kin}})^{1/2}/\hbar$$
$$k_f - k_i = 0$$



three-step model



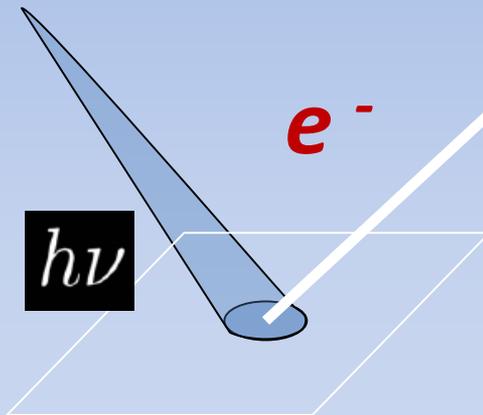
one-step model



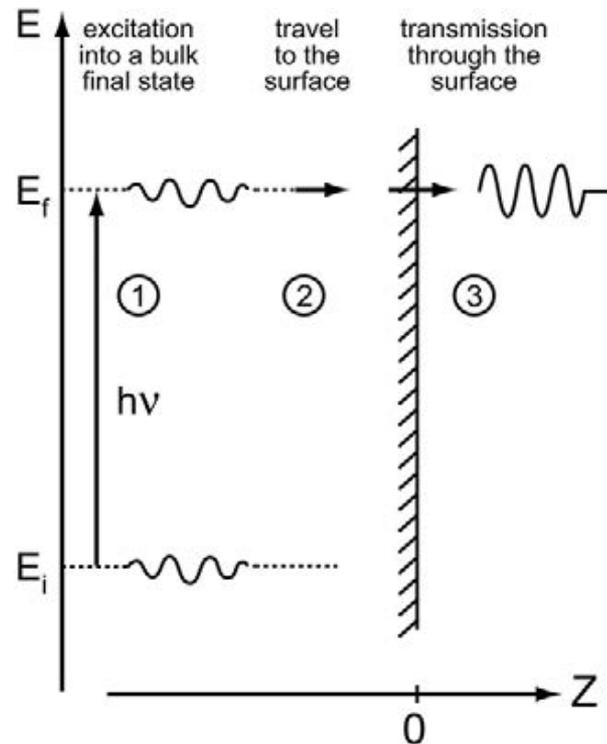
Фотоэлектрический эффект

Сохранение энергии и импульса

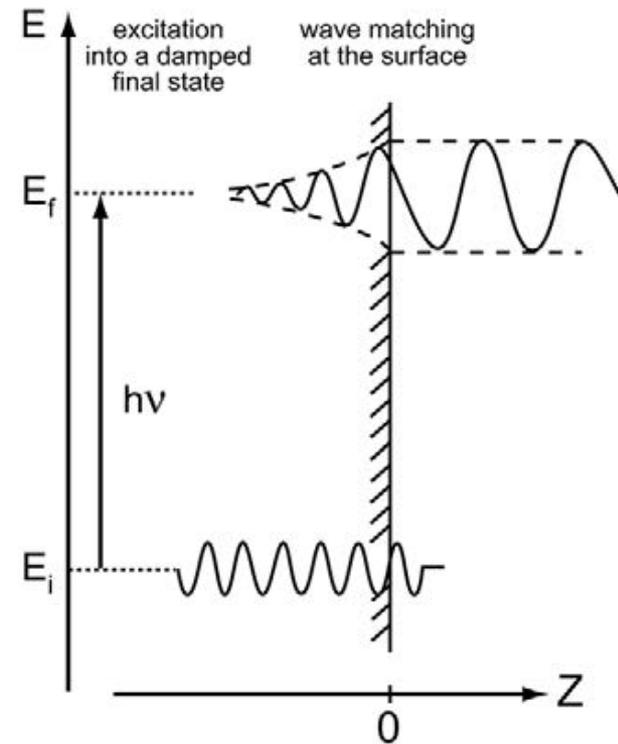
$$E_{\text{kin}} = h\nu - \phi - |E_B| \quad |k| = (2mE_{\text{kin}})^{1/2}/\hbar$$
$$k_f - k_i = G$$



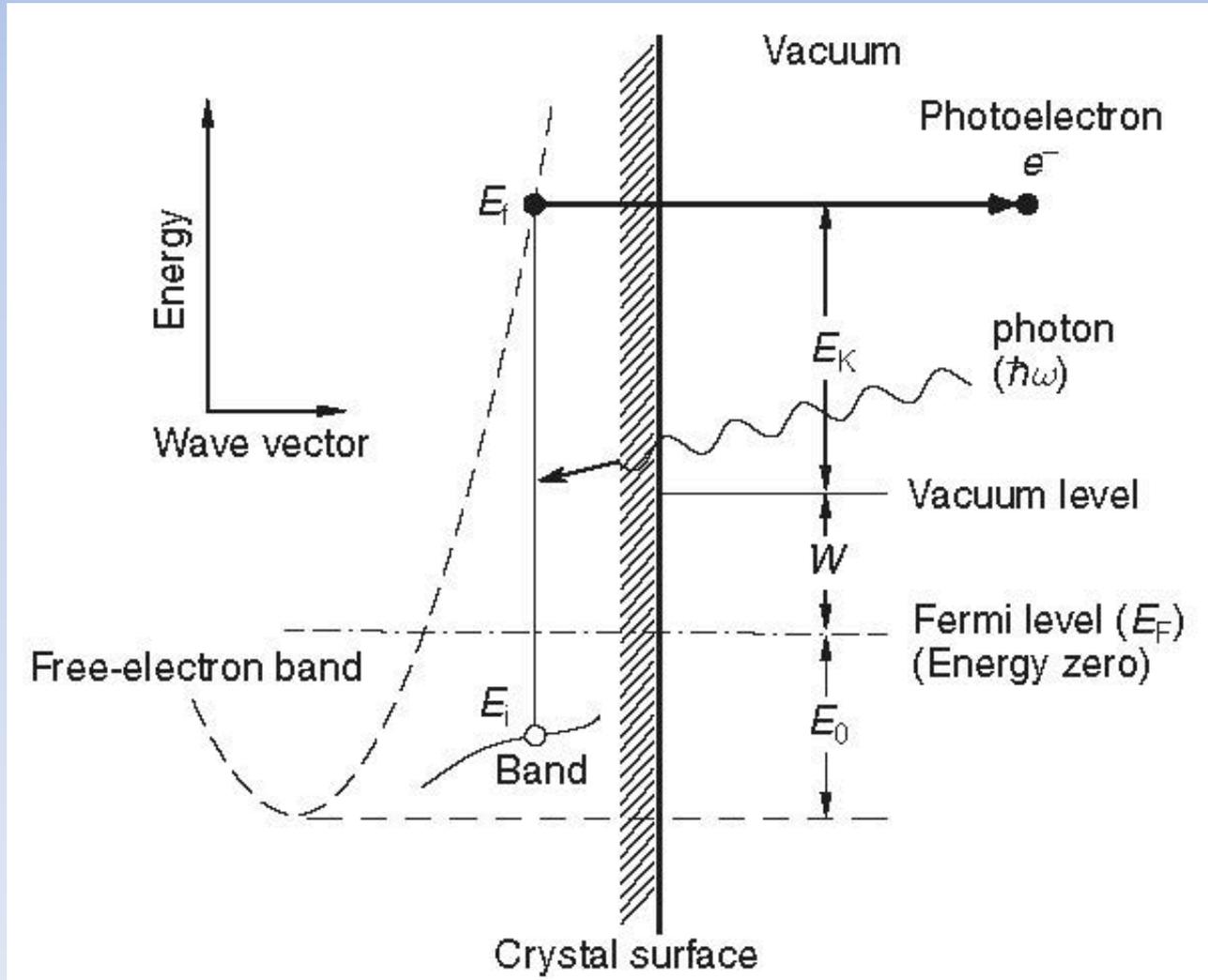
three-step model



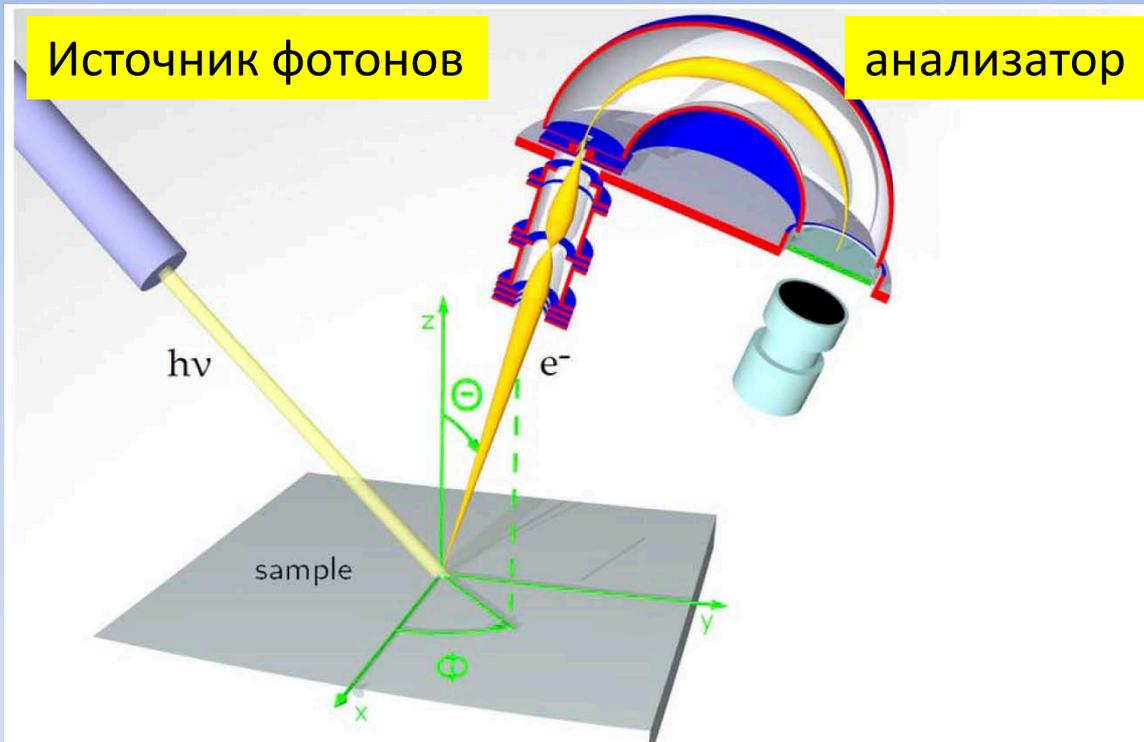
one-step model



Процесс эмиссии фотоэлектронов



Измеряется энергия E_{kin} и угол отклонения $\varphi \Rightarrow$ импульс K



$$E_{kin}, \theta, \varphi \rightarrow \vec{K}$$

$$|\vec{K}| = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE_{kin}}$$

$$K_x = |\vec{K}| \sin\theta \cos\phi$$

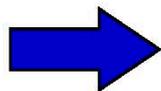
$$K_y = |\vec{K}| \sin\theta \sin\phi$$

$$K_z = |\vec{K}| \cos\theta$$

вакуум

$$E_{kin}$$

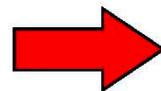
$$\vec{K}$$



Законы сохранения

$$E_{kin} = h\nu - |E_B| - \phi$$

$$\vec{K} = \vec{k} (+\vec{k}_{photon})$$

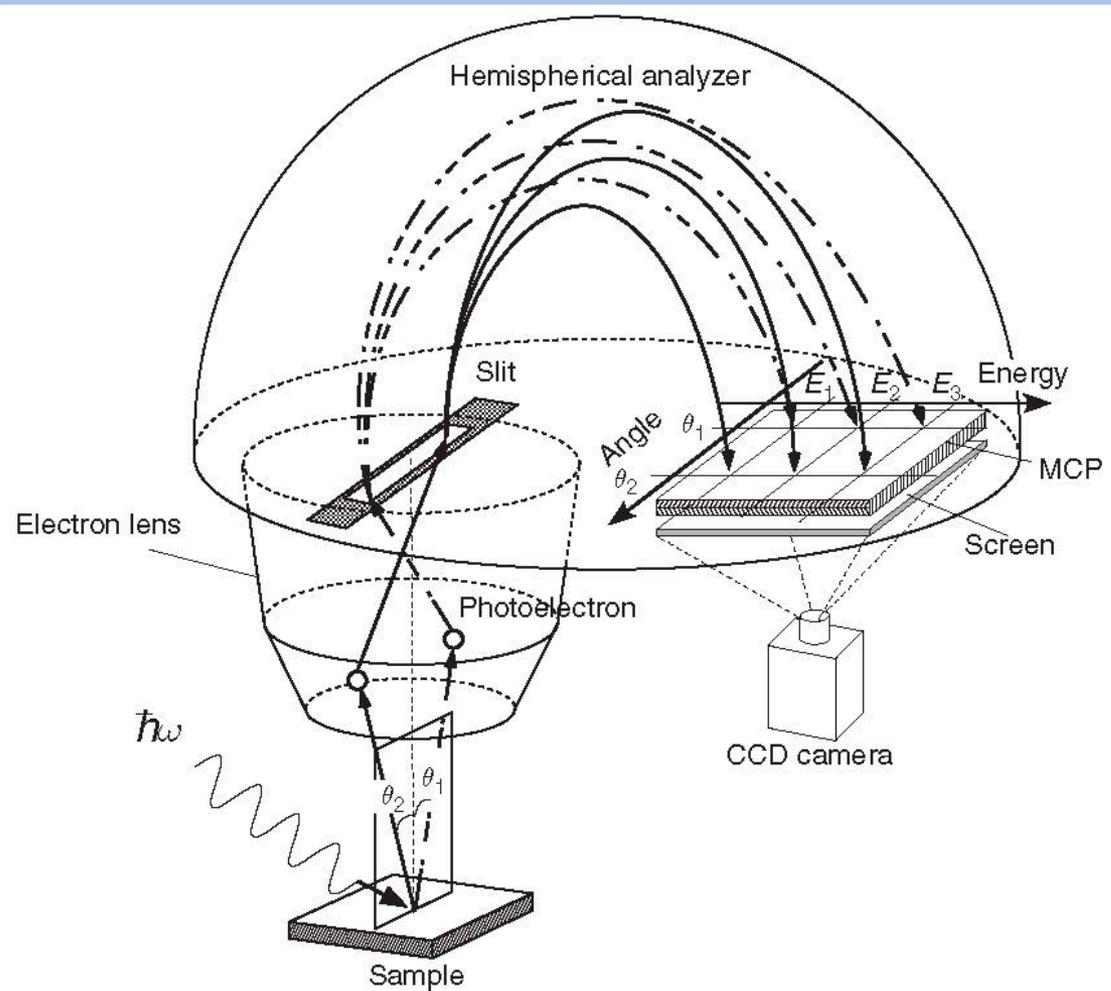


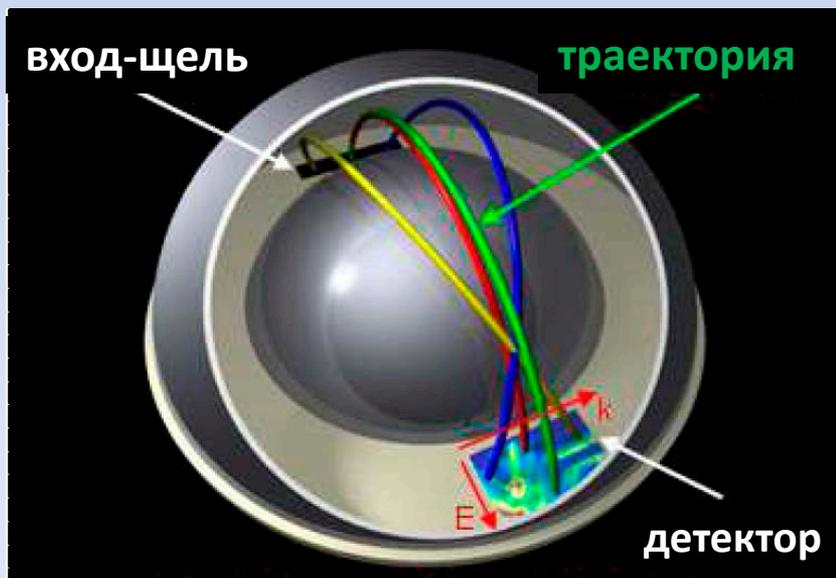
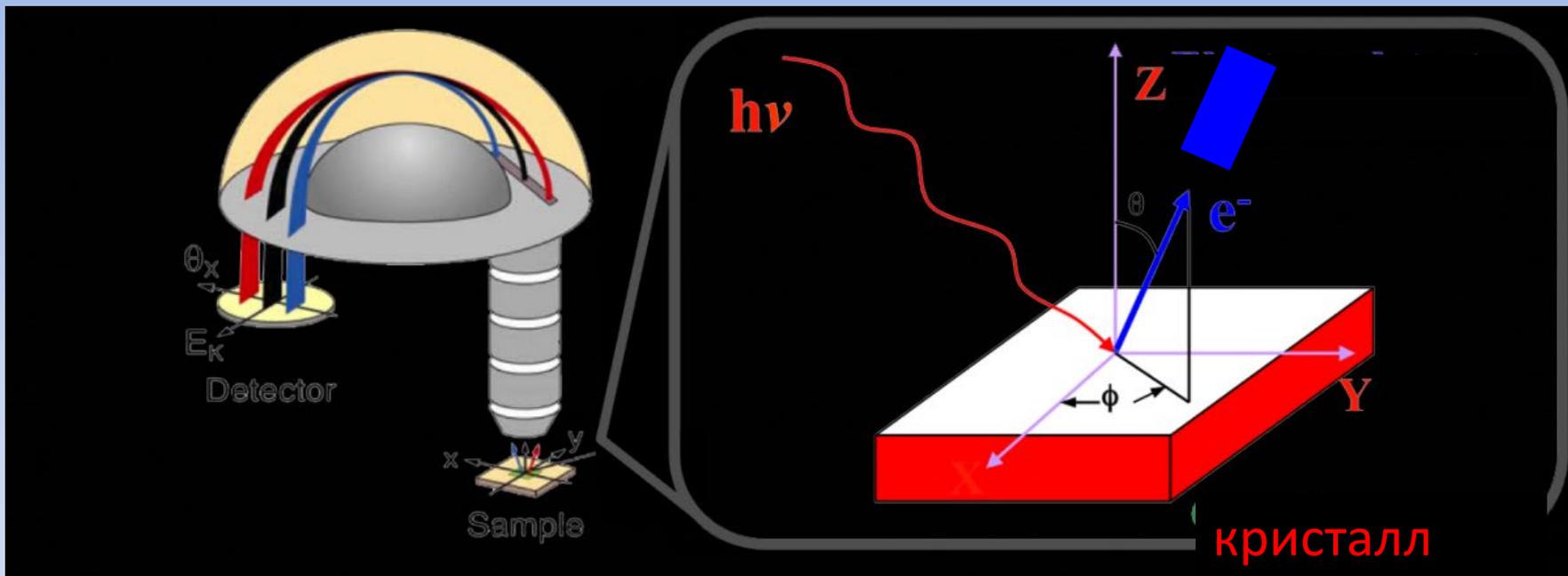
кристалл

$$E_B$$

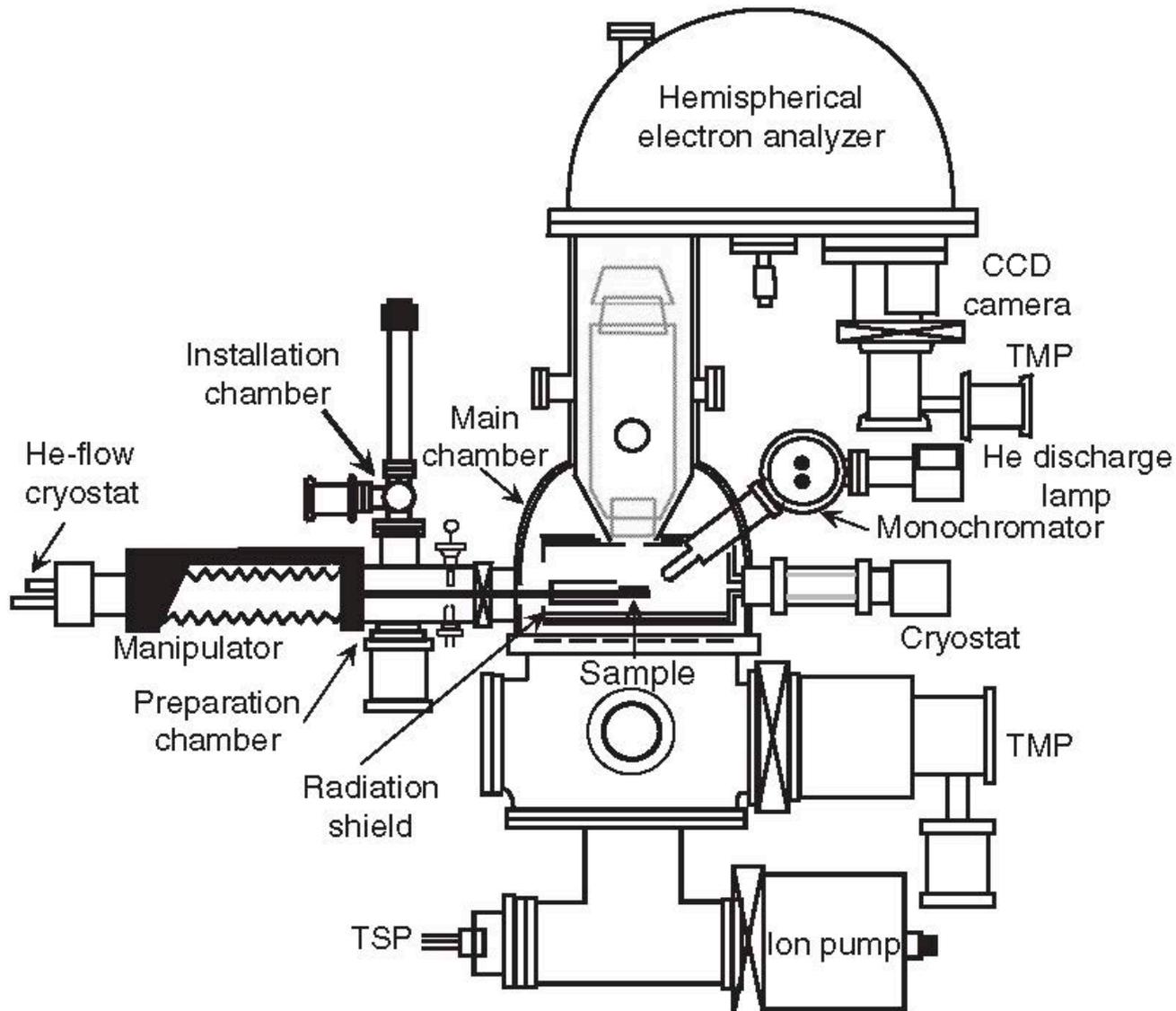
$$\vec{k}$$

Геометрия анализа пучка





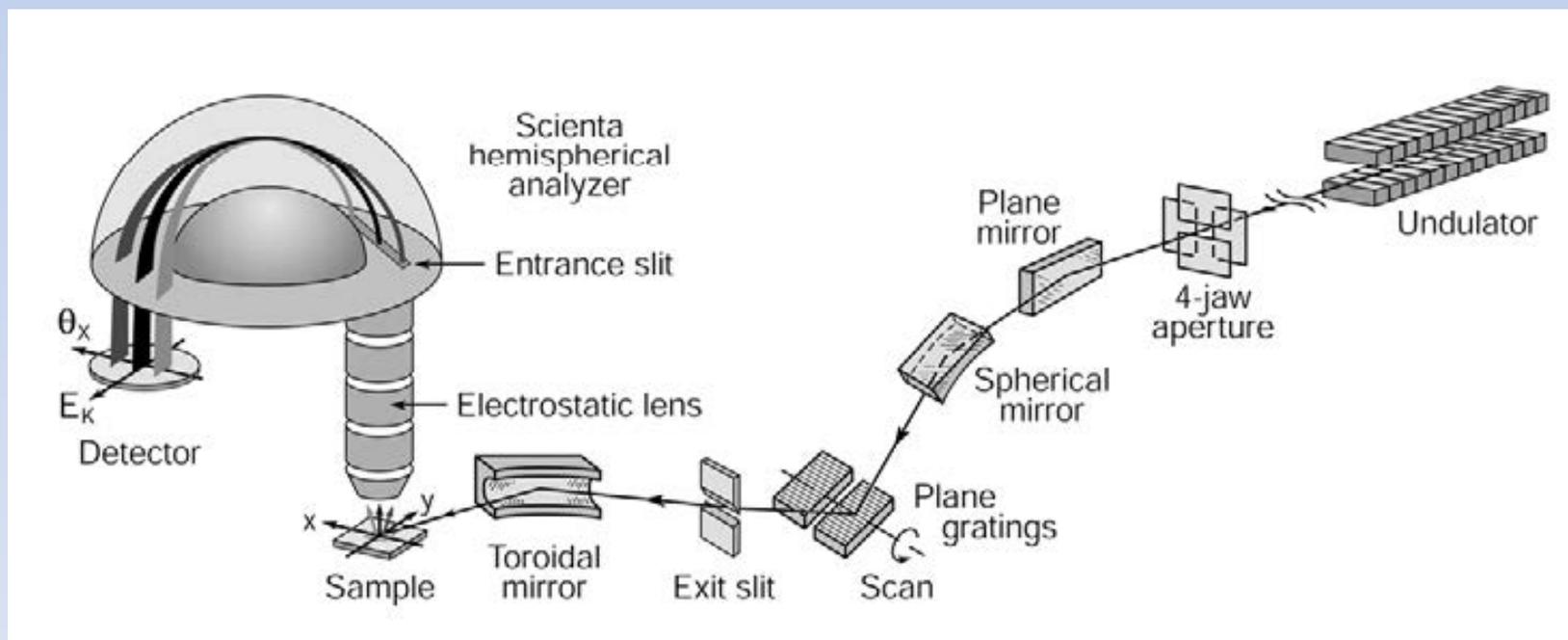
Устройство спектрометра



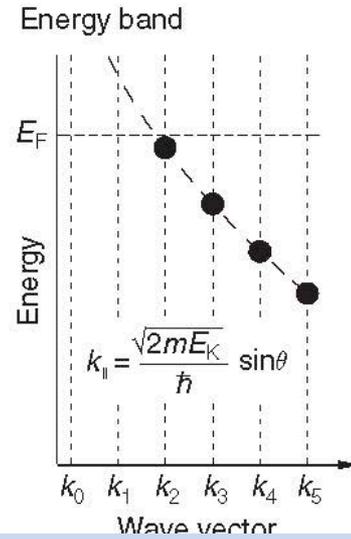
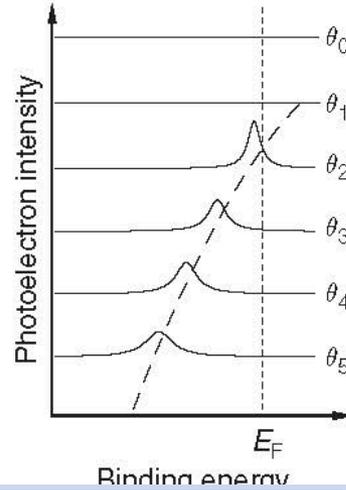
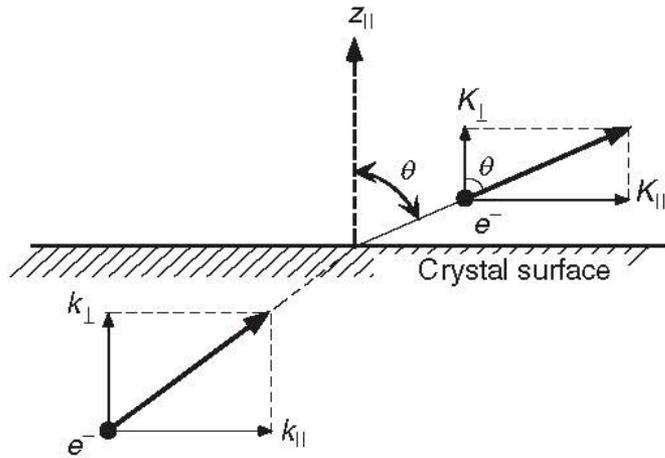
Синхротрон Frascati



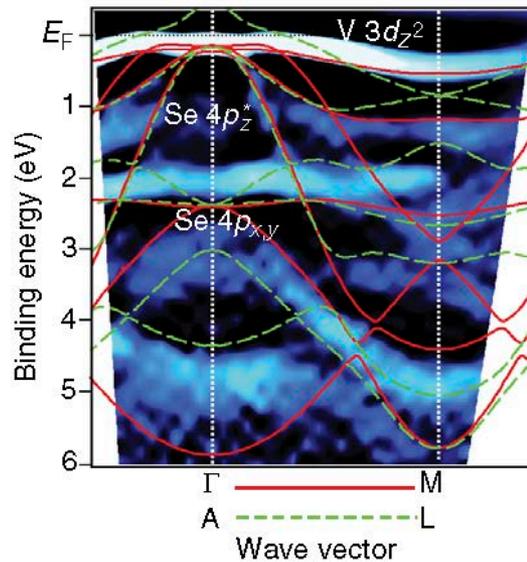
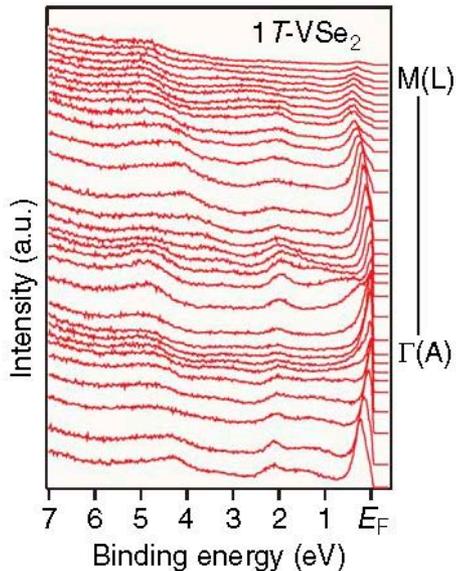
Схема измерений с пучком на синхротроне



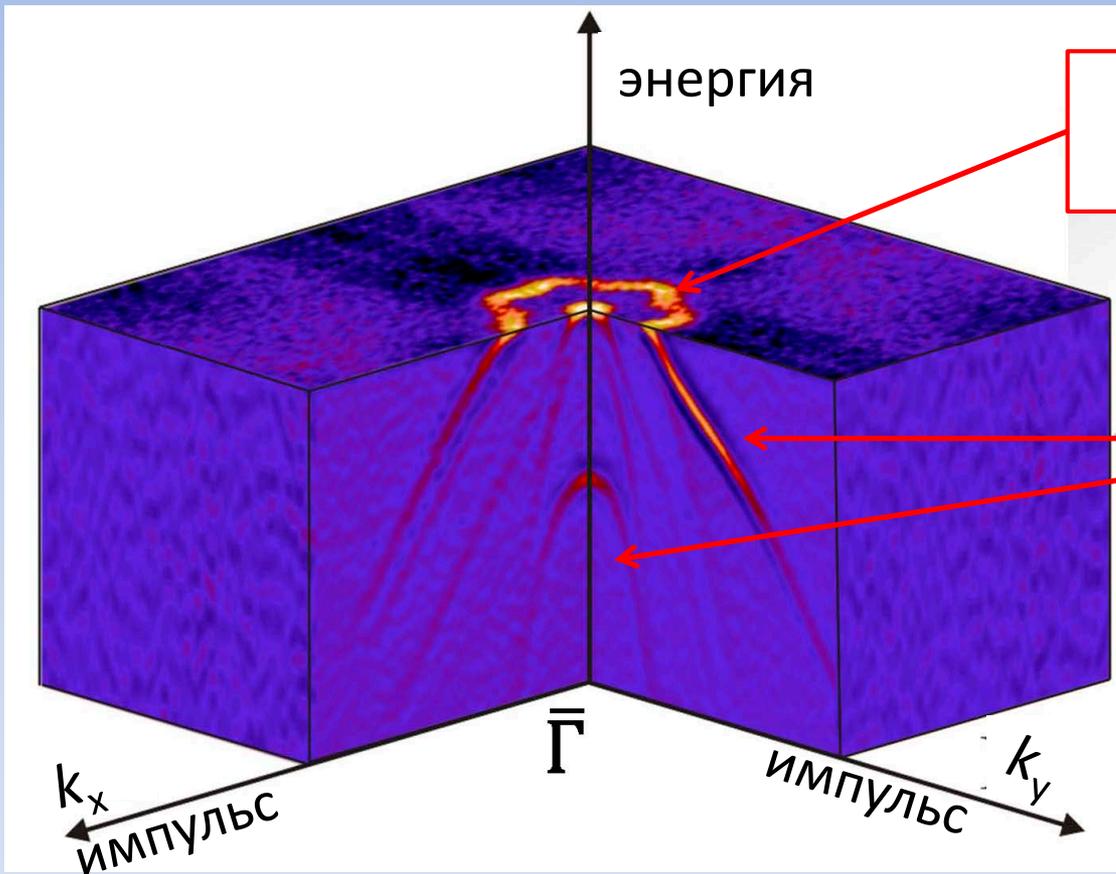
Восстановление спектра



Схема

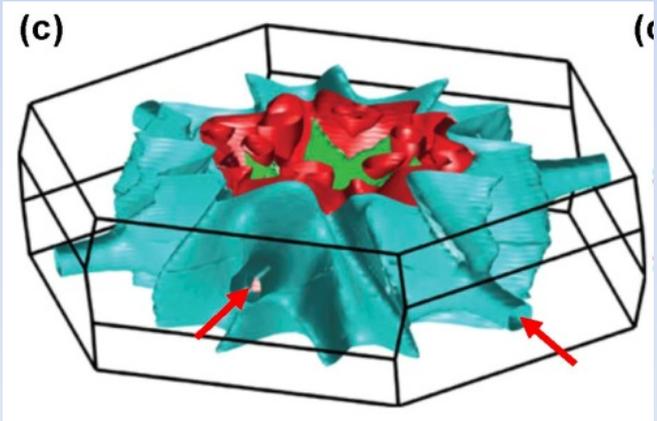


Результат

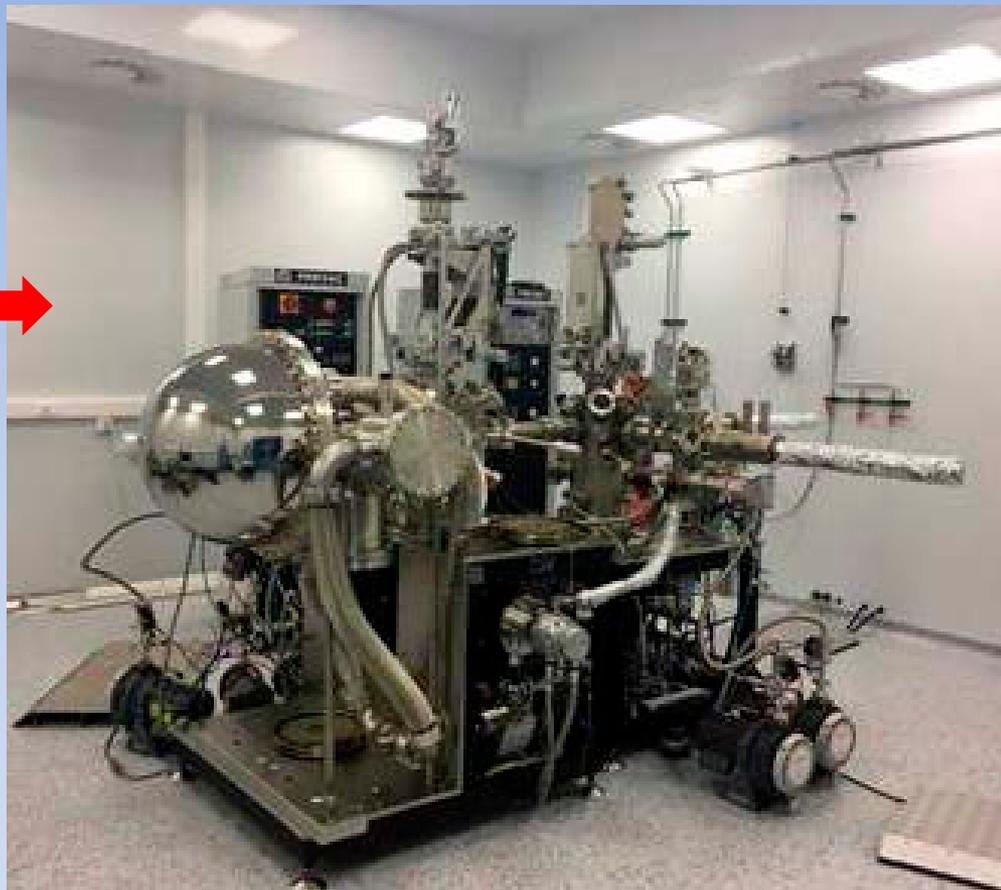


Контур постоянной энергии

Ветви спектра



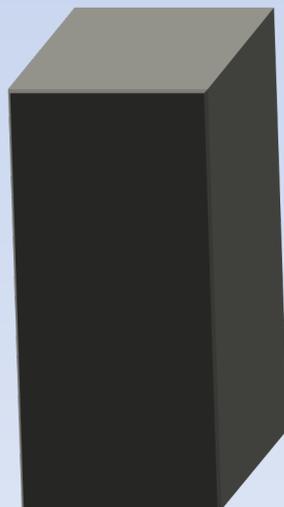
Установка
фотоэлектронной
спектроскопии с угловым
разрешением
(ARPES) Scienta R-4000

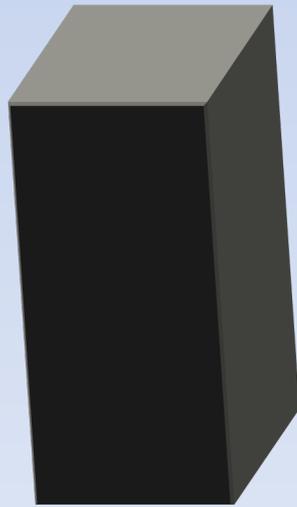
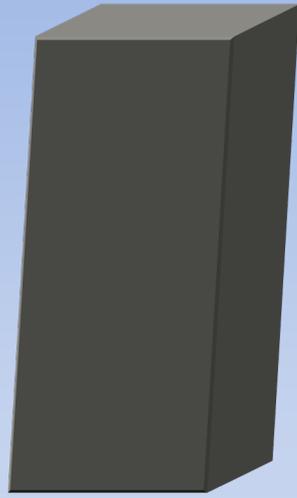


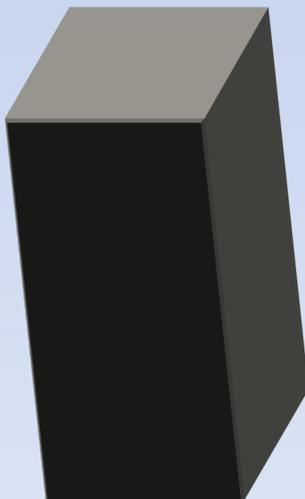
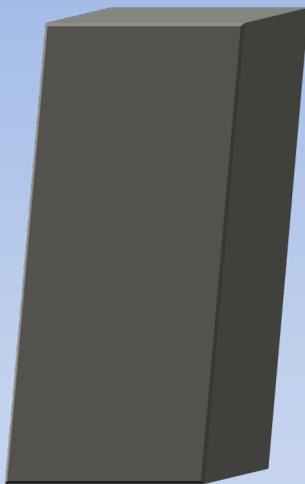
Температура 5-300К,
Рабочий вакуум 10^{-11} Торр
Разрешение по энергии 1 мэВ
Энергия фотонов 21эВ, 23эВ, 42эВ
Разрешение по спину: 2D

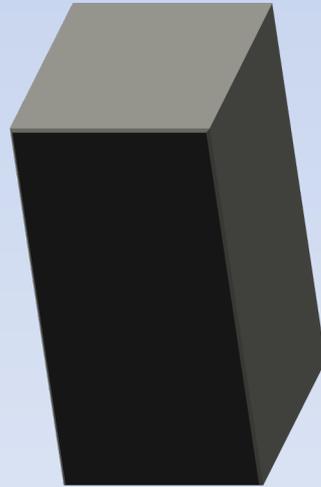
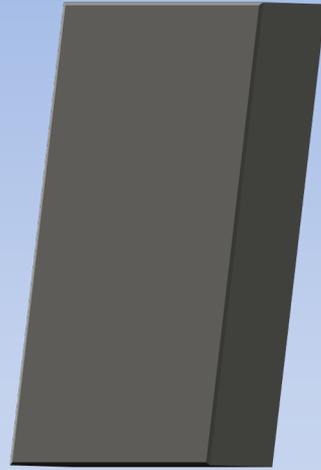


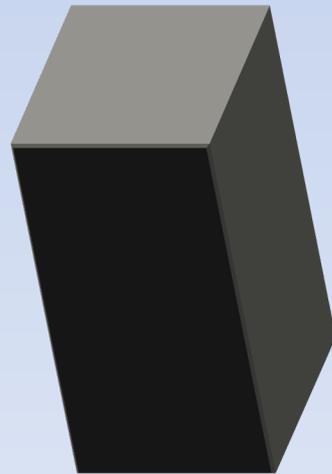
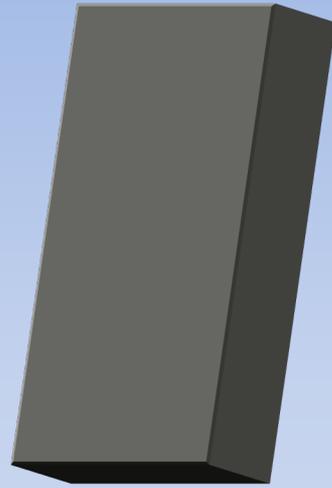
**Для измерений
необходима чистая
поверхность кристалла**

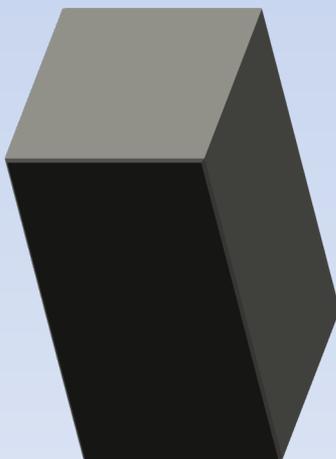
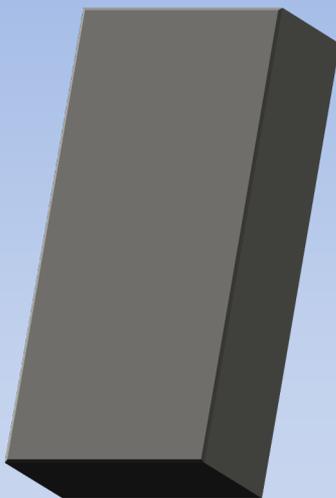


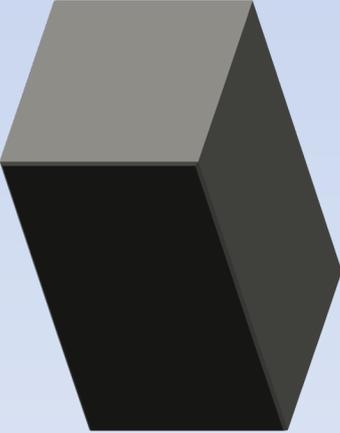
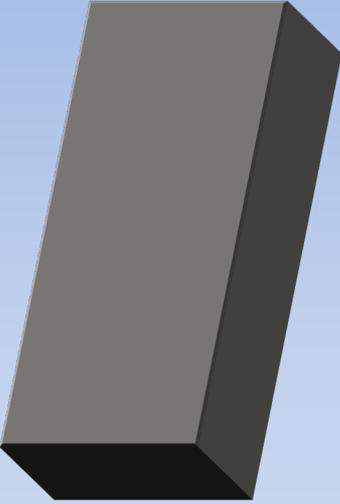


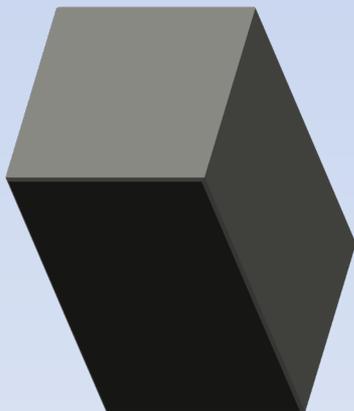
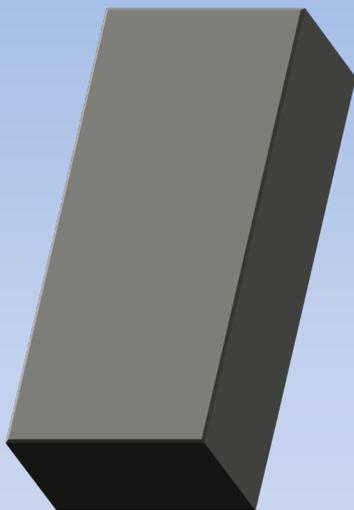


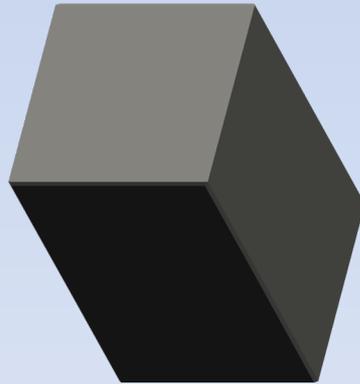
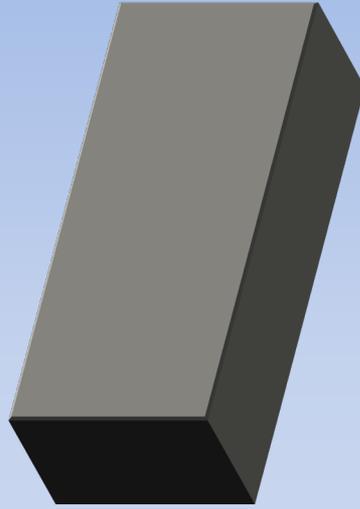


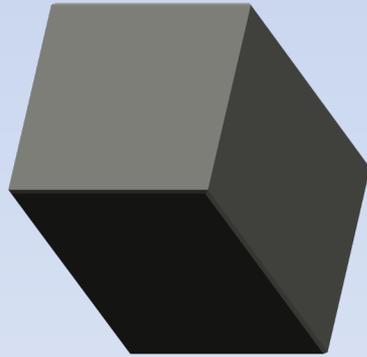
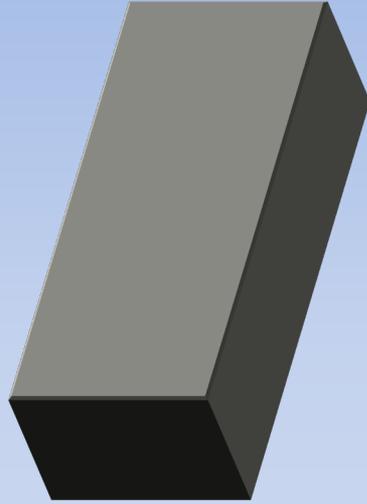


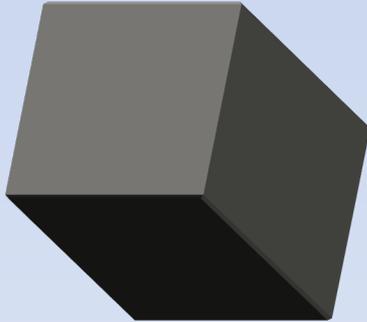
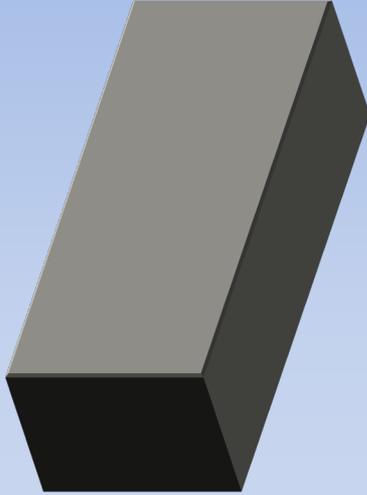


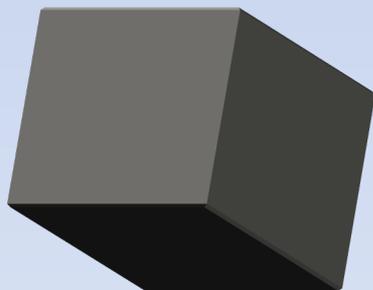
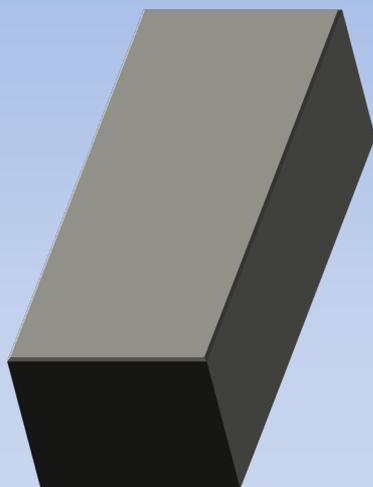


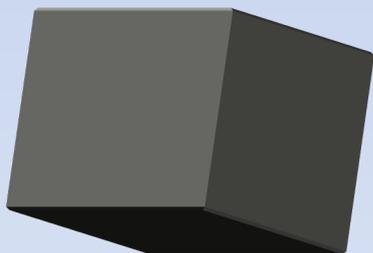
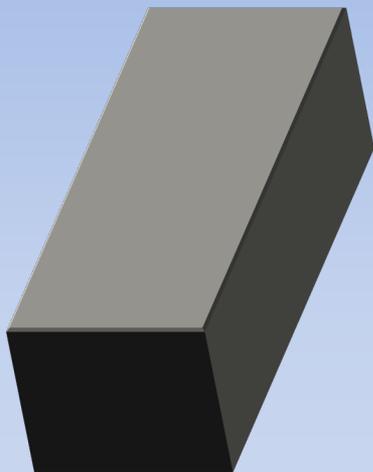


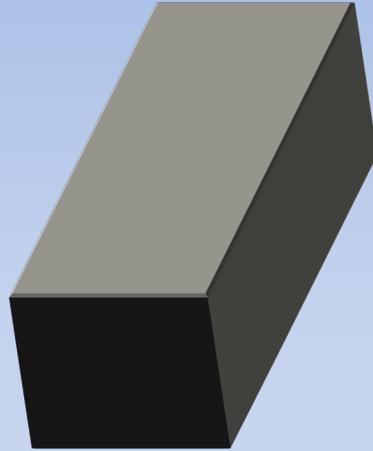


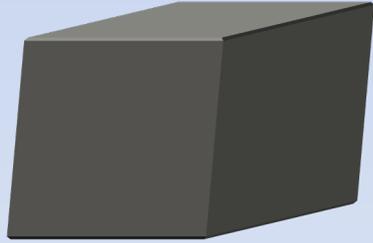
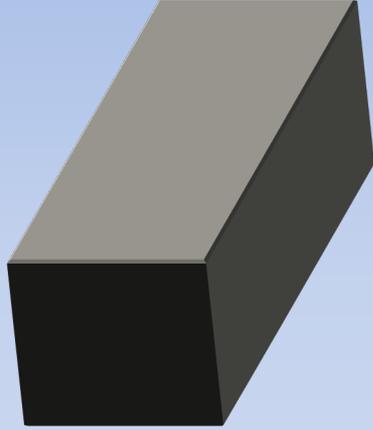


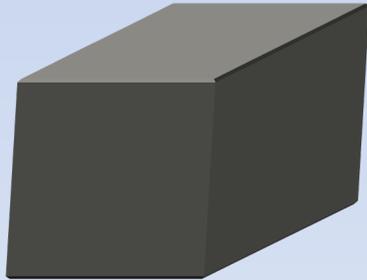
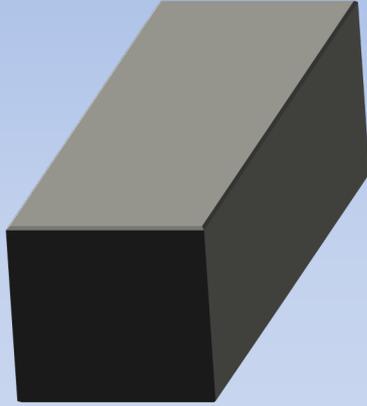


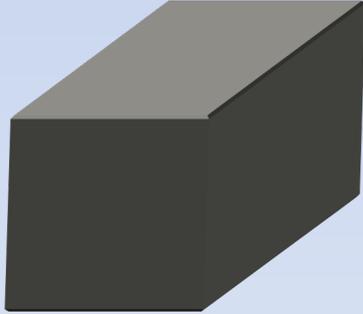
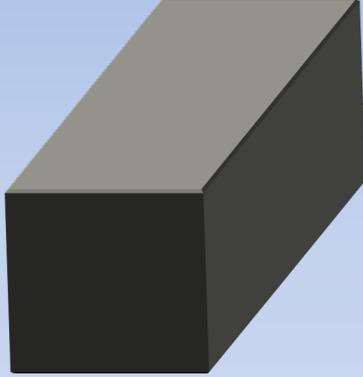




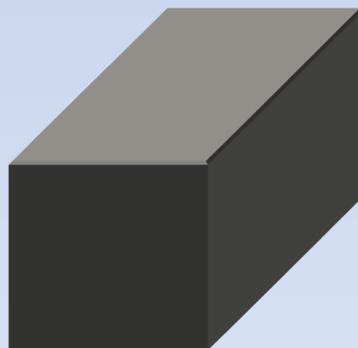
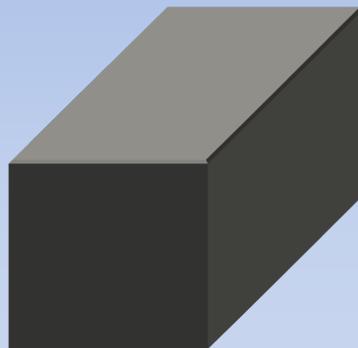




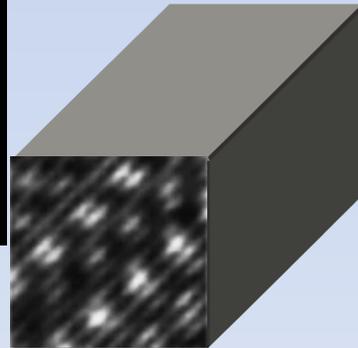
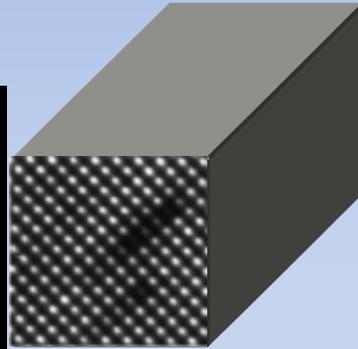
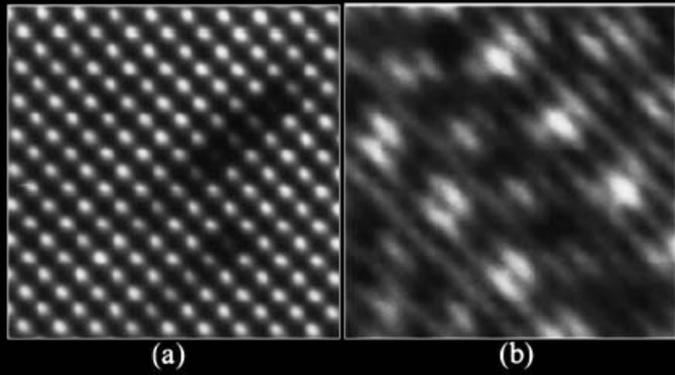




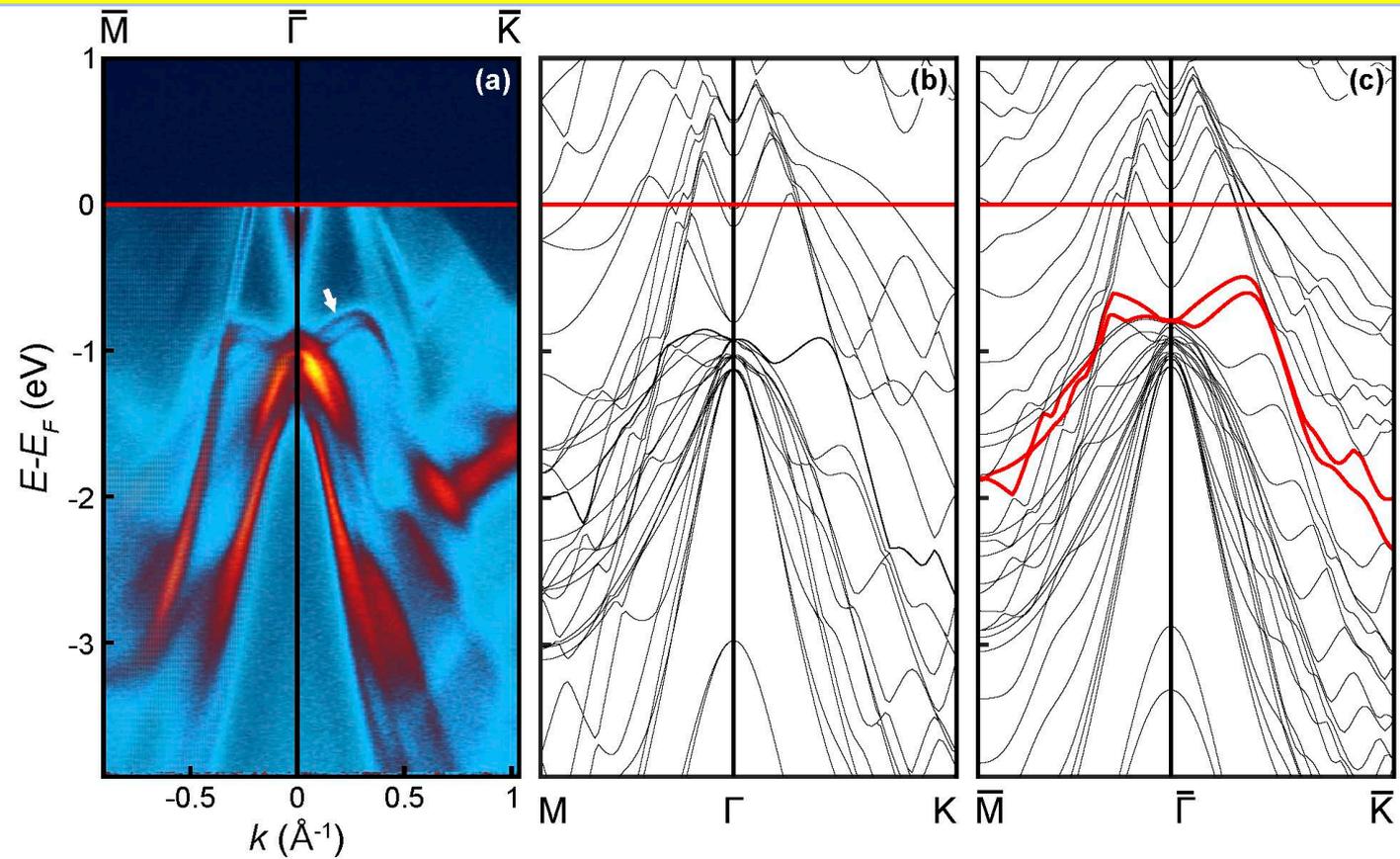
**Для измерений
необходима чистая
поверхность кристалла**



**Для измерений
необходима чистая
поверхность кристалла**

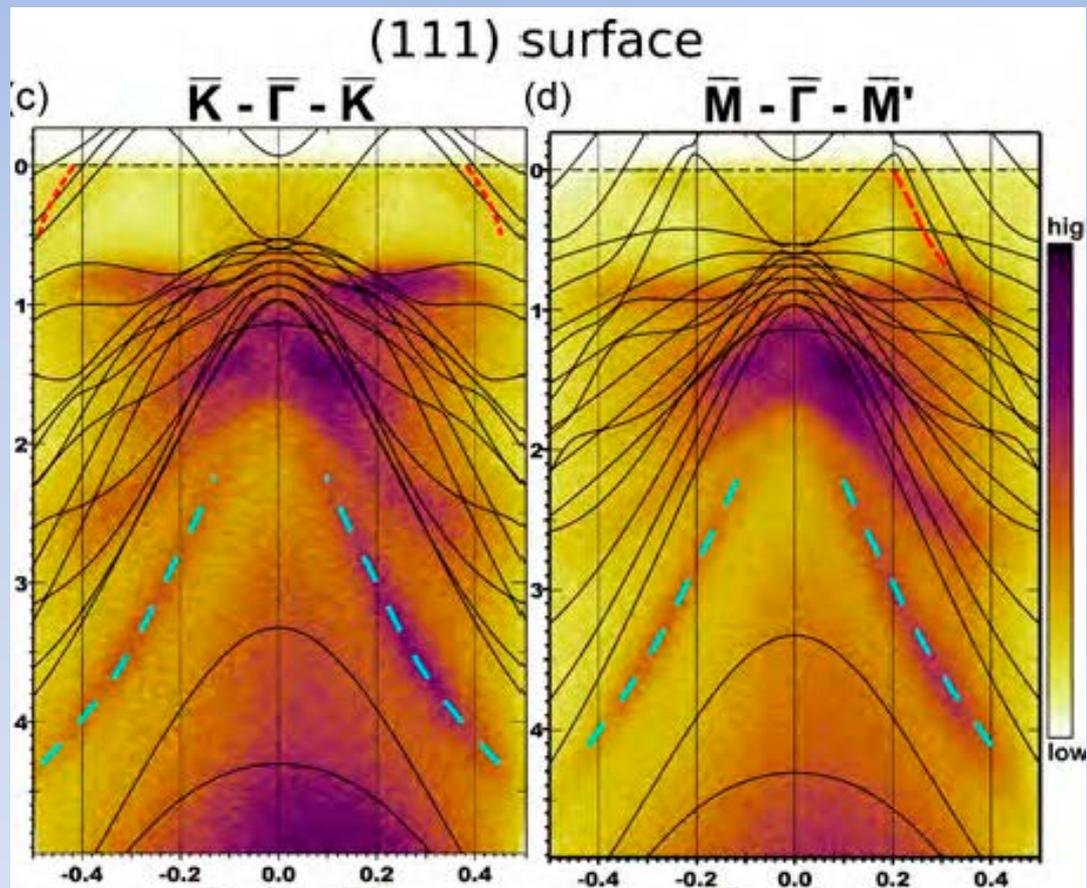


Примеры недавних измерений и расчетов



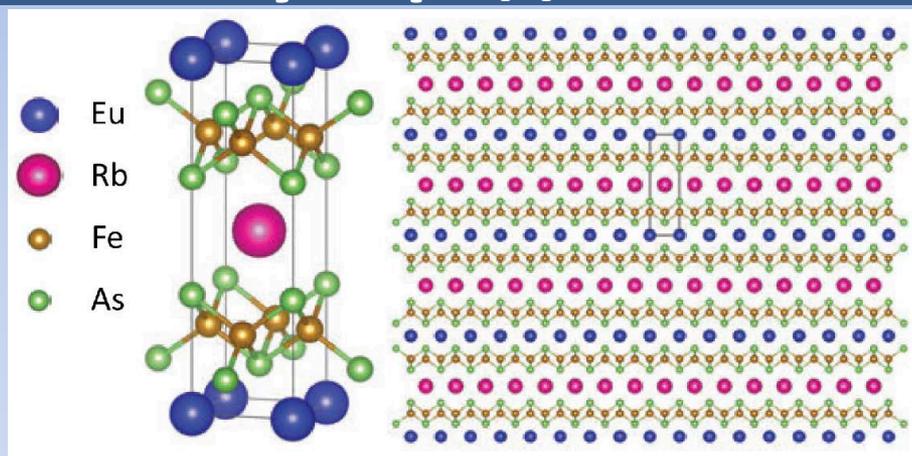
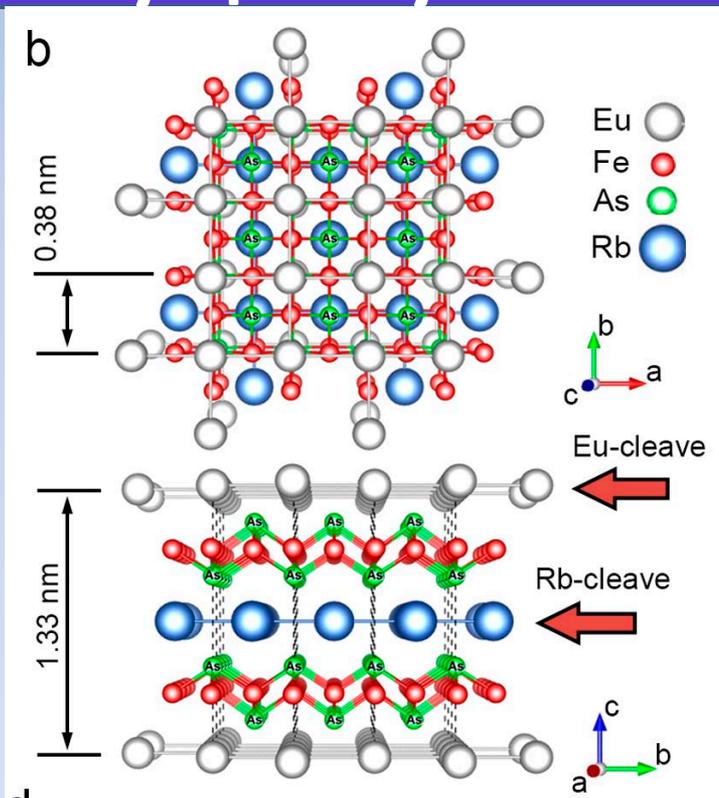
Зонная структура сверхпроводника Sn_4As_3

Примеры недавних измерений



Зонная структура сверхпроводника SnAs

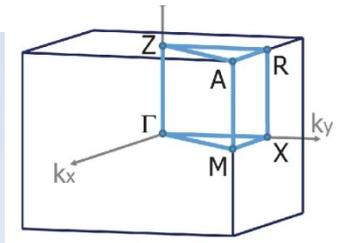
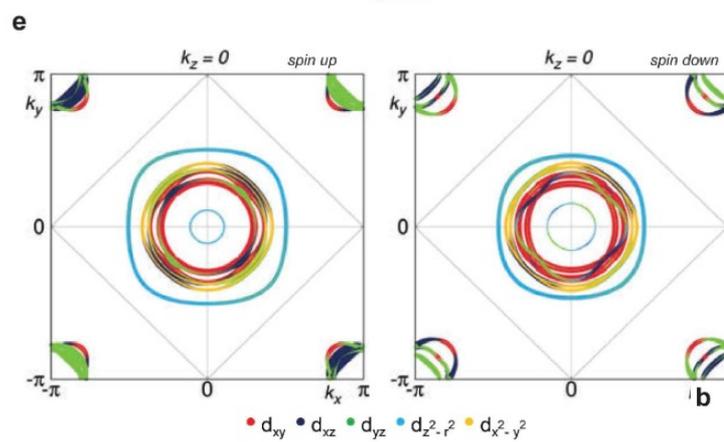
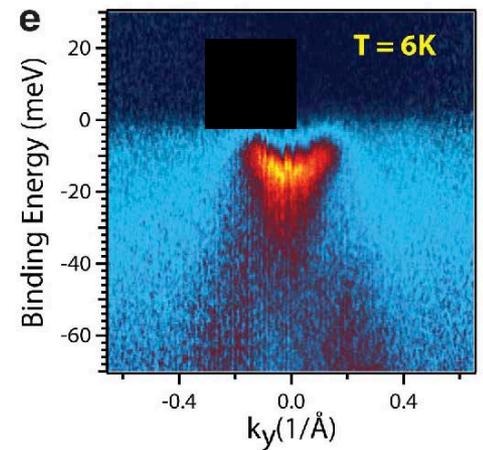
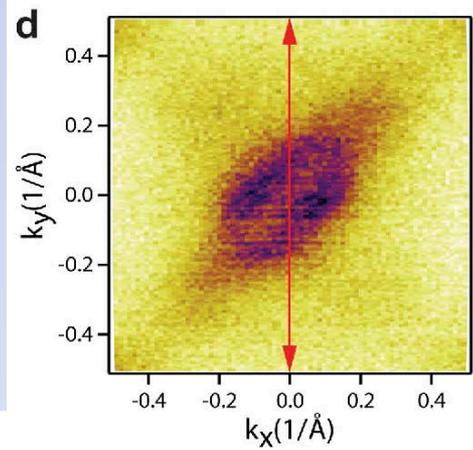
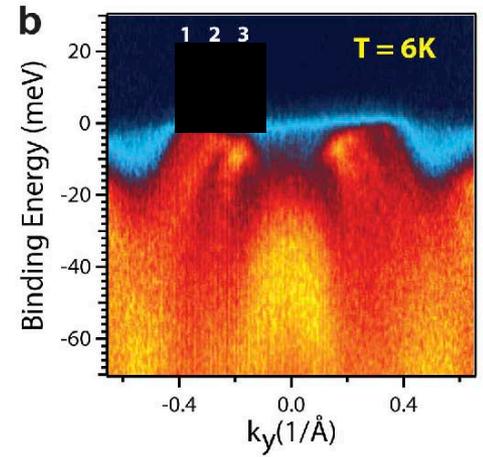
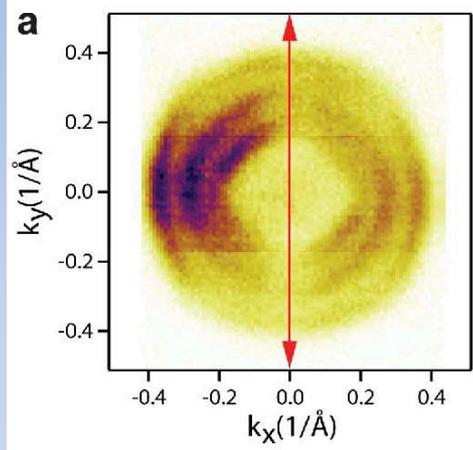
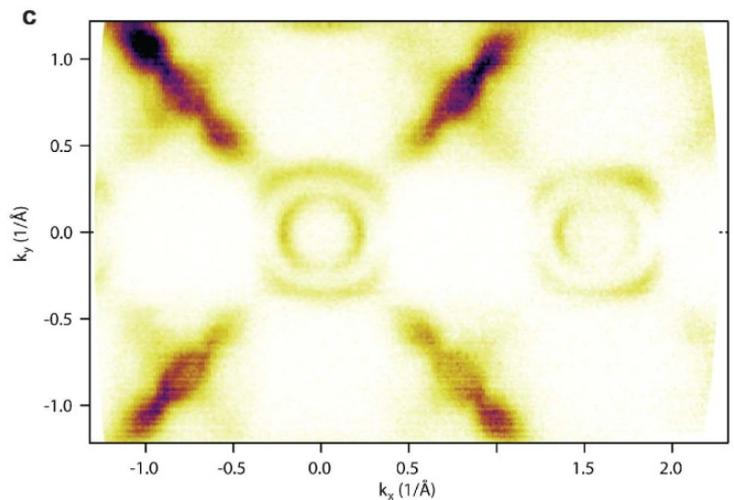
Пример решения научной проблемы: как сверхпроводящее спаривание в $\text{RbEuFe}_4\text{As}_4$ сосуществует с магнитным упорядочением



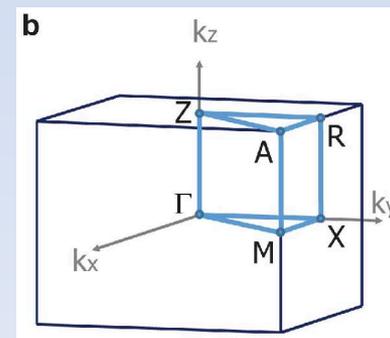
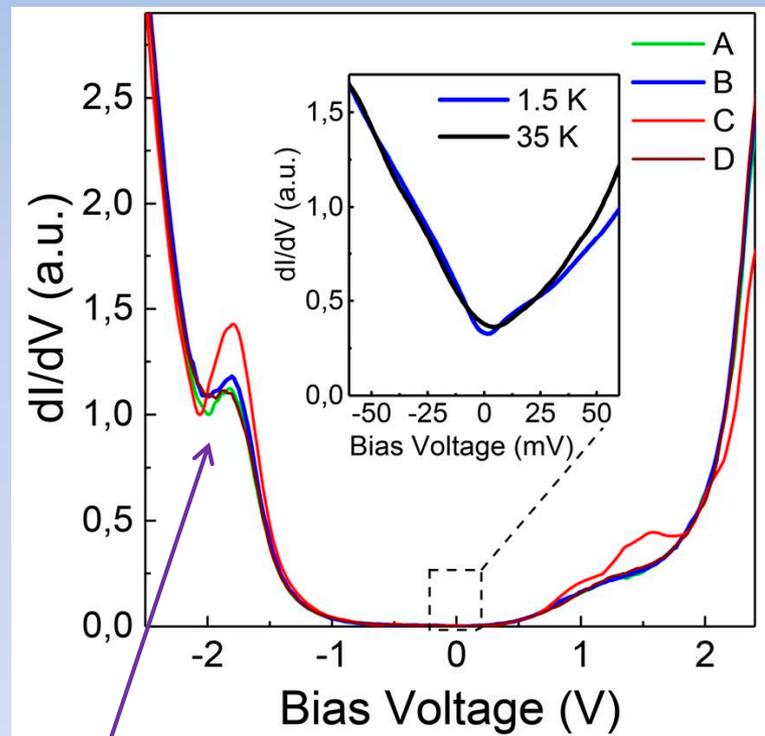
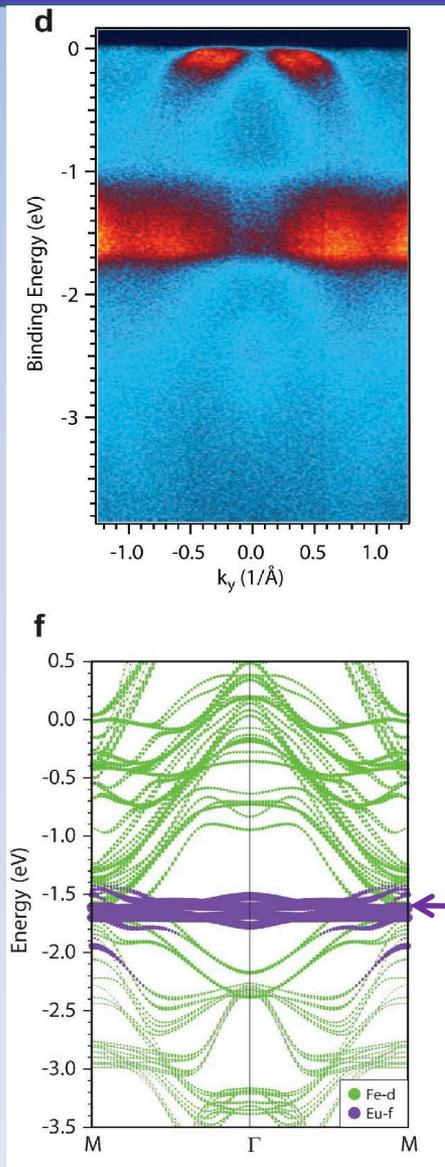
Свободные 3d электроны Fe на уровне Ферми недалеко от упорядоченных больших магнитных моментов атомов Eu

Как АФМ порядок Eu- сосуществует со сверхпроводимостью электронов Fe ?

ARPES зонная структура RbEuFe₄As₄

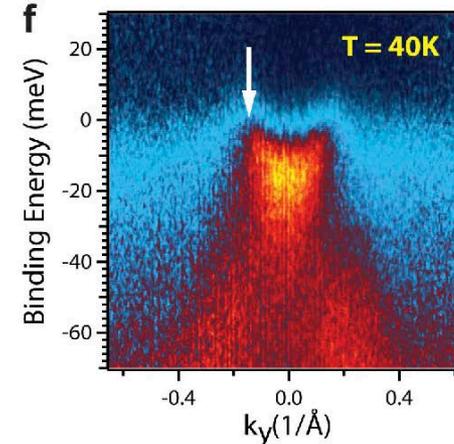
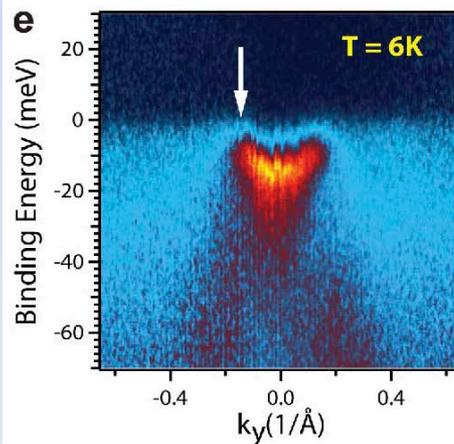
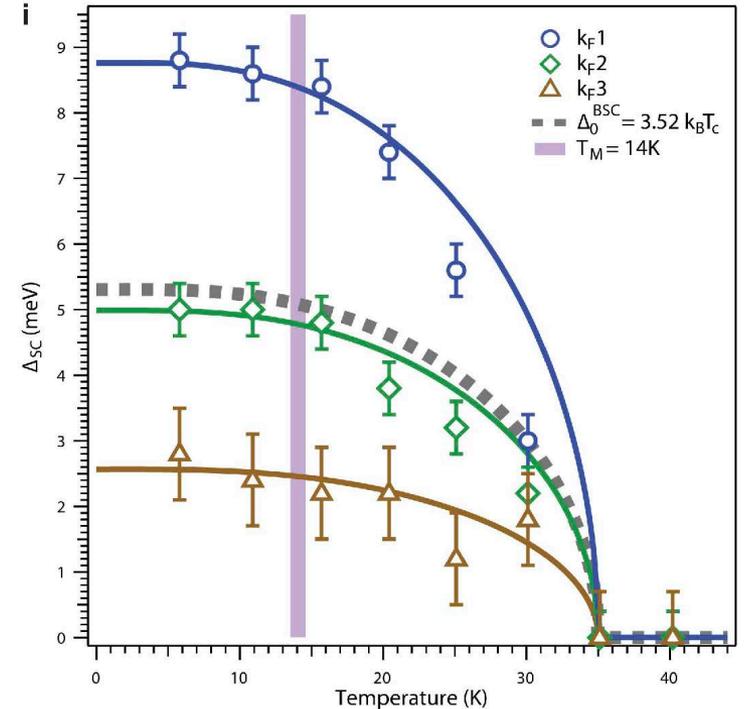
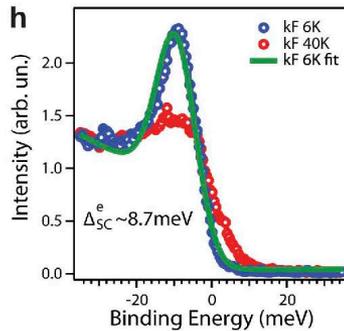
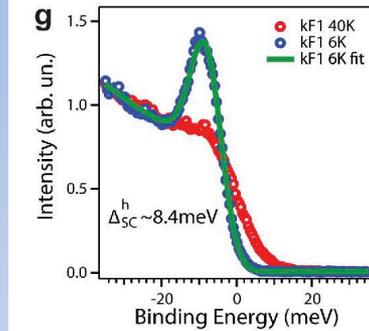
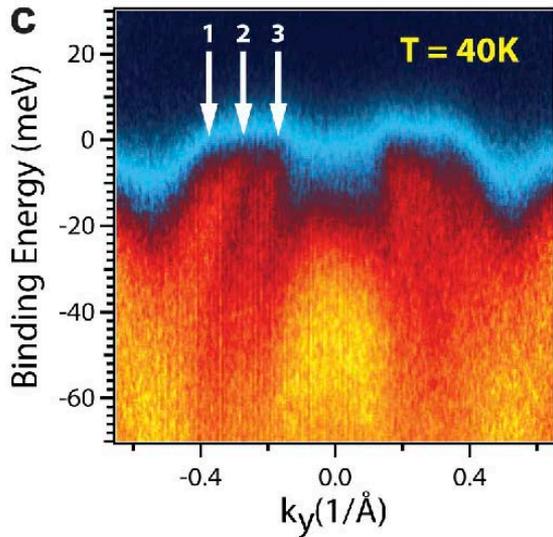
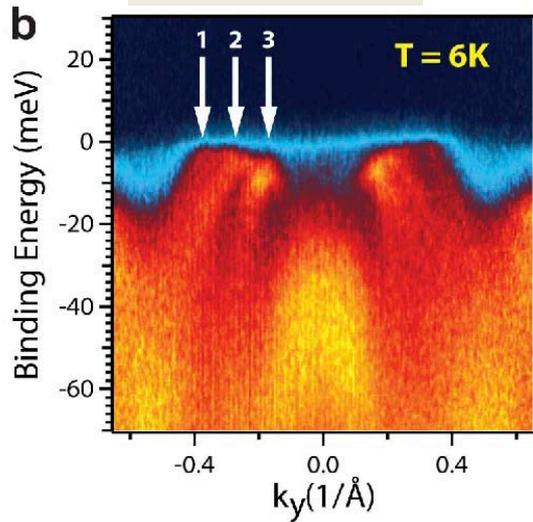


STS и ARPES спектроскопия состояний Eu



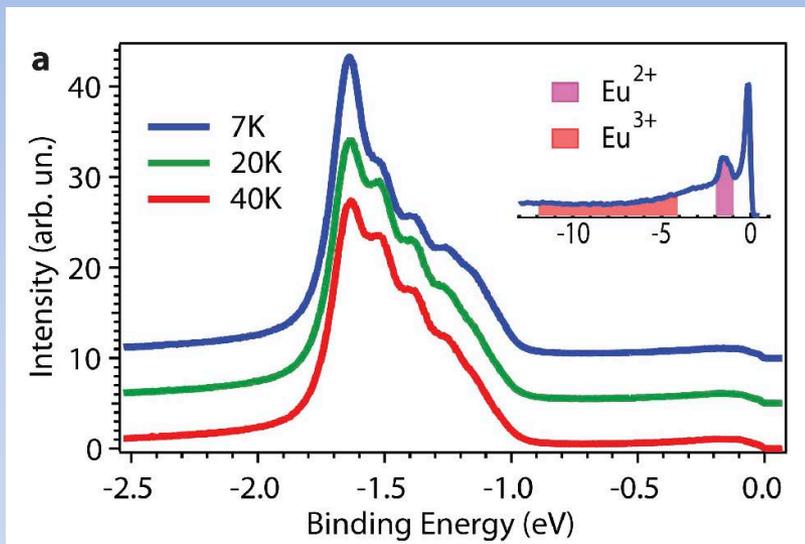
Сверхпроводящие щели спектре ARPES

Hole pockets

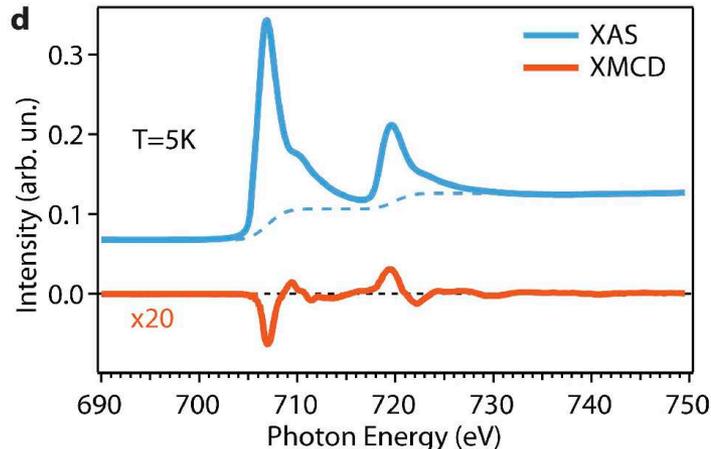
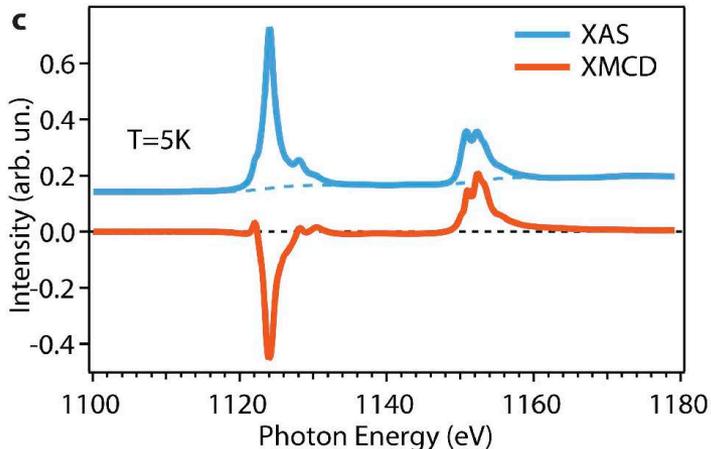


Electron pockets

Магнитное состояние Eu

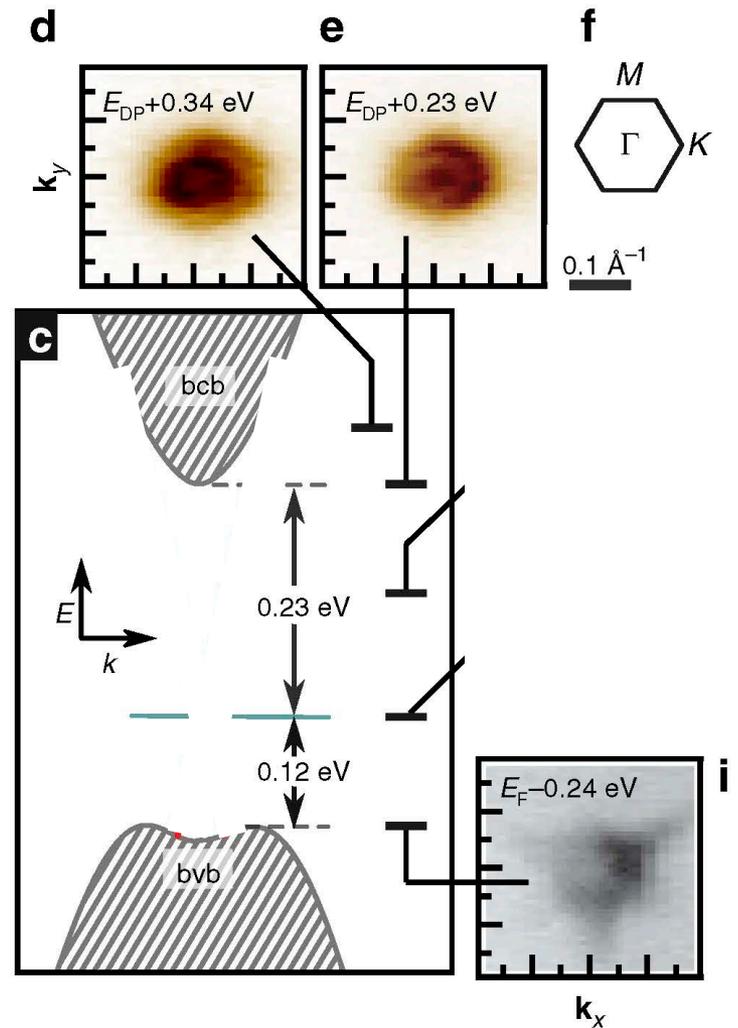


ResPES измерения на порге перехода Eu 4d→4f при энергии фотонов 142eV

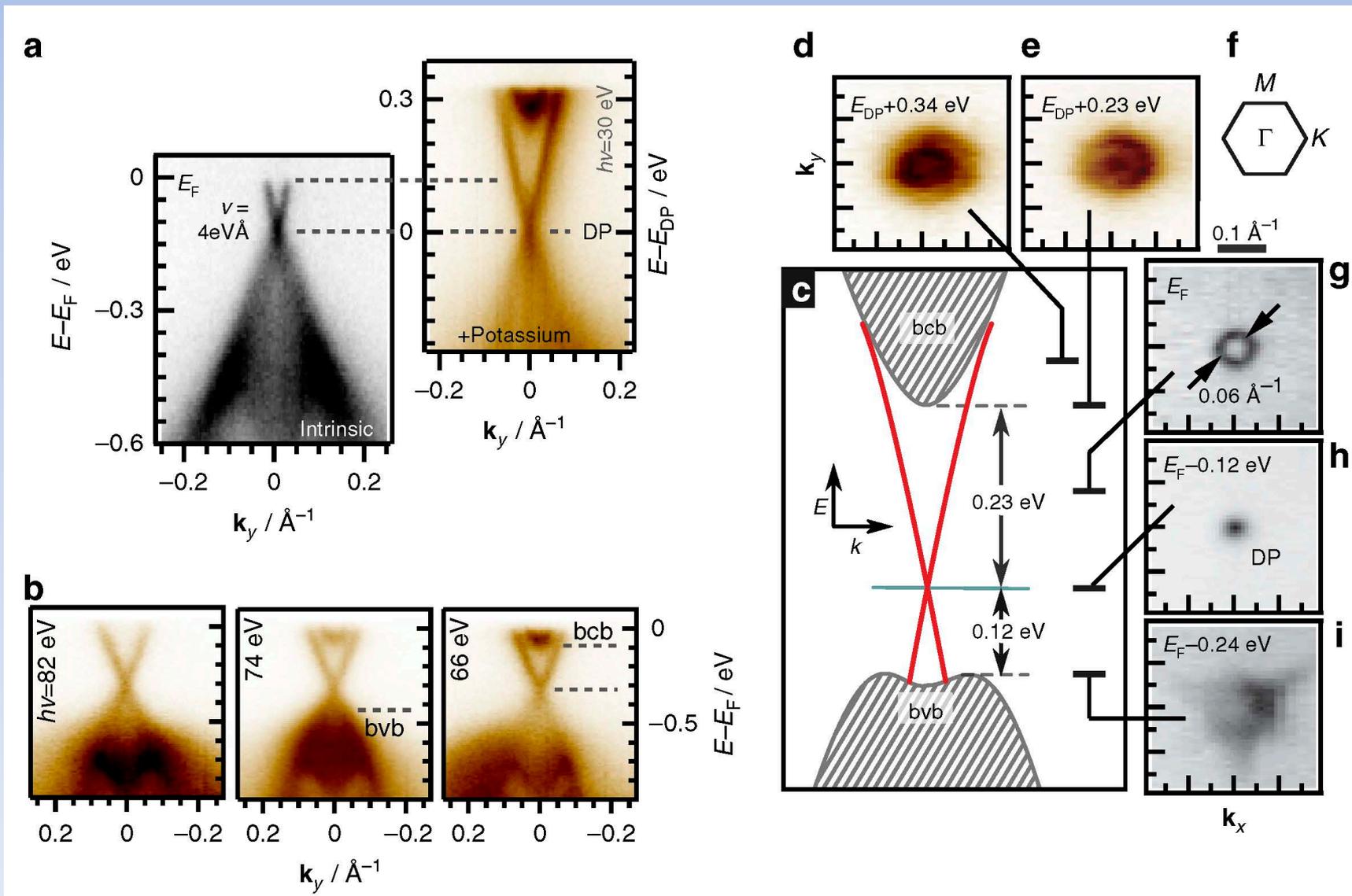


XMCD
измерения:
 $M(\text{Eu})=7.04\mu_B$
 $M(\text{Fe})=0.03\mu_B$

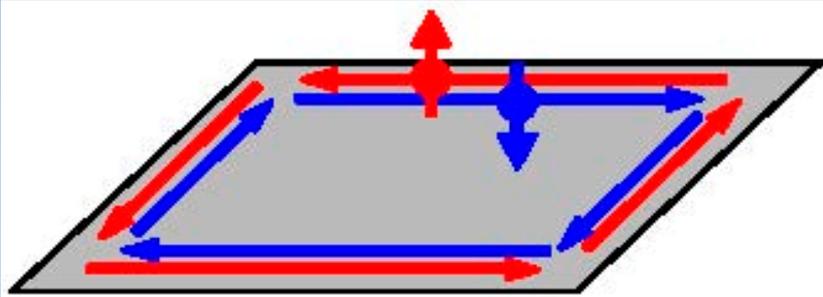
ARPES спектр $E(k)$ топологического изолятора BiSbTe



ARPES спектр $E(k)$ топологического изолятора BiSbTe

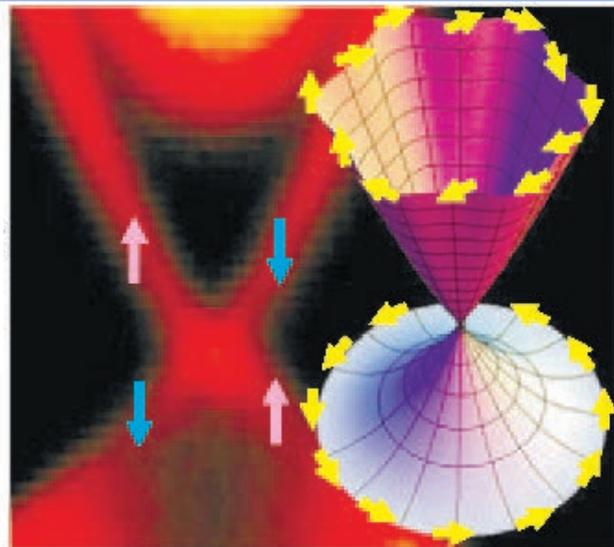


Топологический изолятор. Что это? Для чего ?

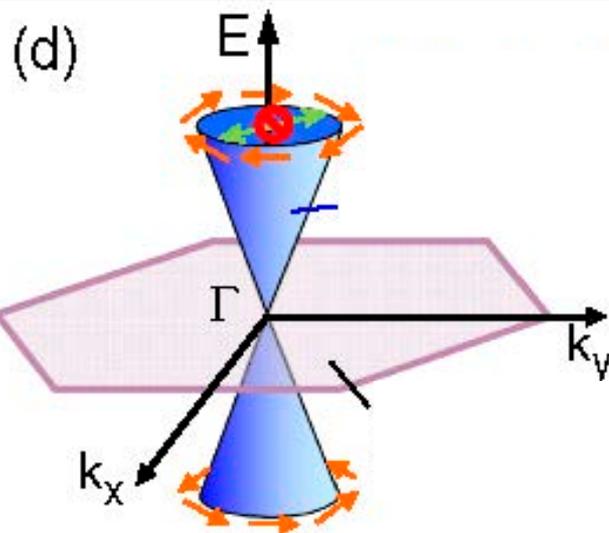


- Симметрия \in топология
- Пространство-время
- Киральные состояния
- 3D- аналог графена ?
- Магнитный монополь ?
- Фермион Майорана
- Спинтроника
- Квантовые вычисления
-

энергия



импульс

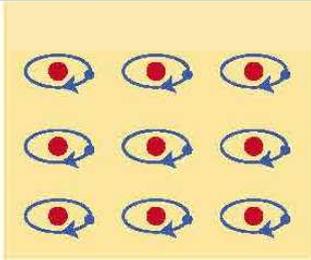


Топологический изолятор: топология

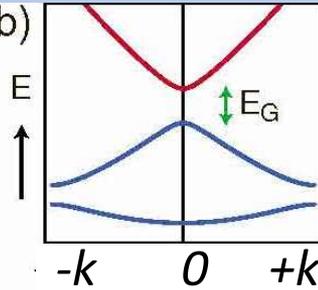
атомный
изолятор

Зонная
структура

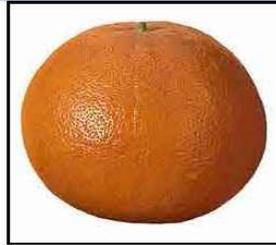
(a)



(b)

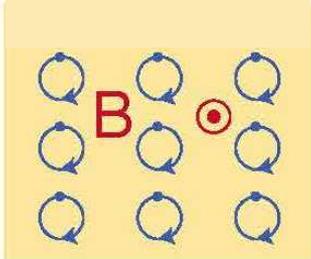


(c)

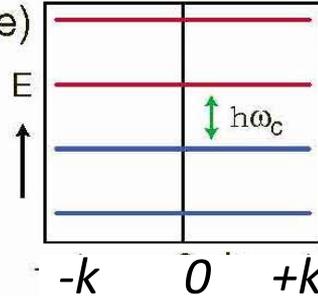


$$\gamma = 0$$

(d)



(e)



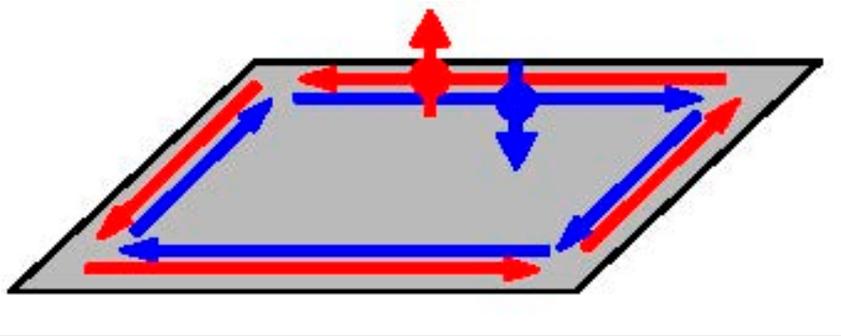
(f)



$$\gamma = 1$$

изолятор,
сделанный
магнитным
полем

Топологический изолятор. Что дальше?



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



1. Фотоэлектронная спектроскопия
с угловым разрешением (ARPES)

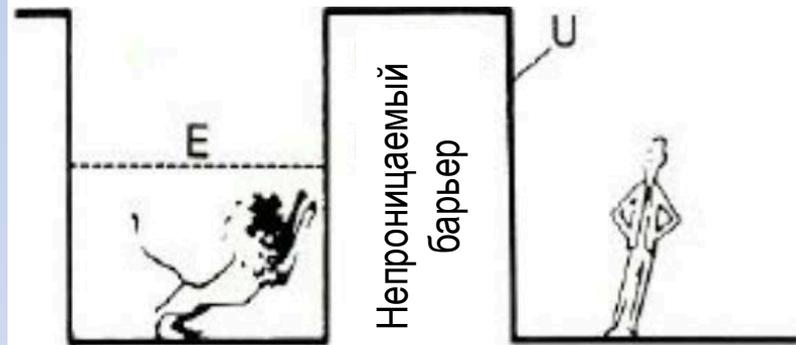
2. Сканирующая туннельная
микроскопия/спектроскопия (STM/STS)

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

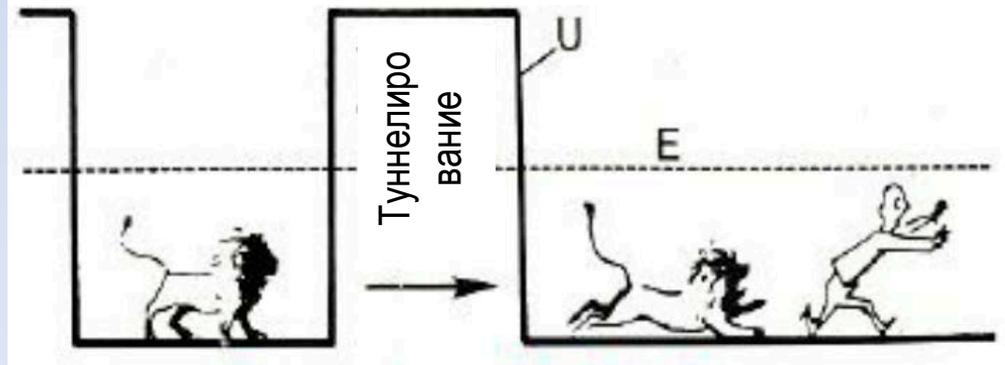
Фотон: $k=2\pi/\lambda$; $\lambda=c/f$; $E=hf$

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



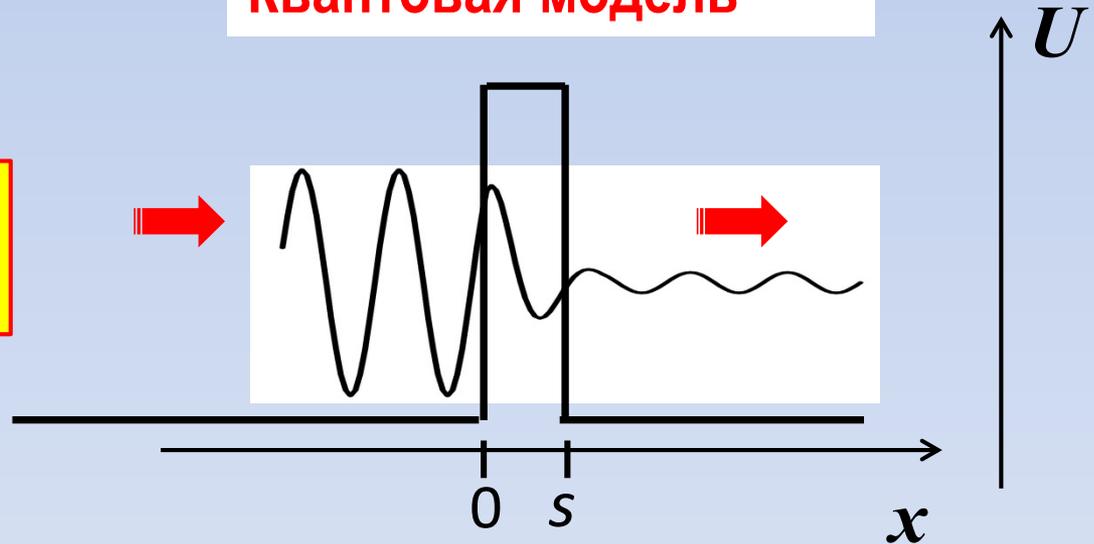
Основы квантовой механики: частица-волна $\cos(kx + \omega t)$

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

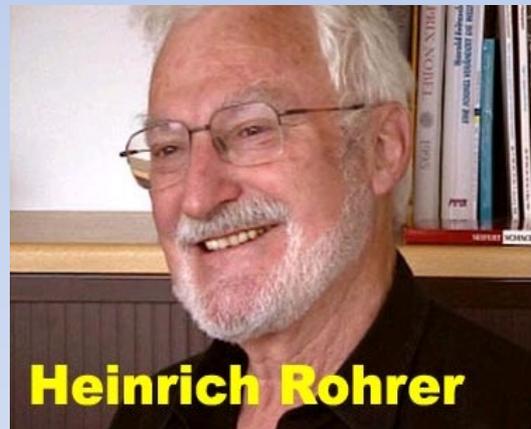
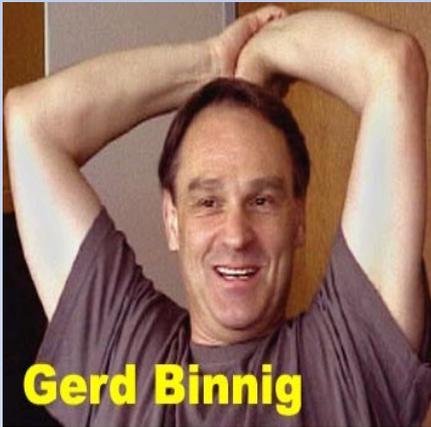
Туннелирование
волны через барьер



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

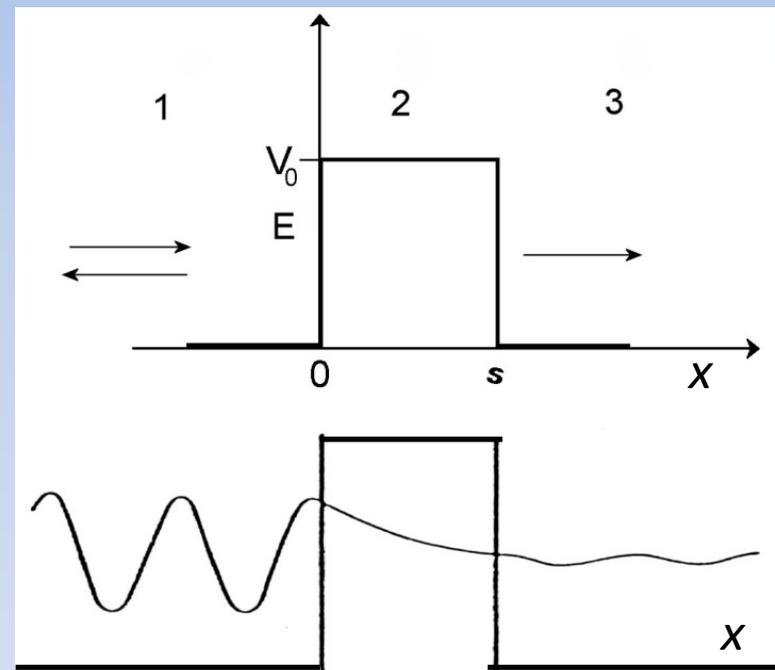
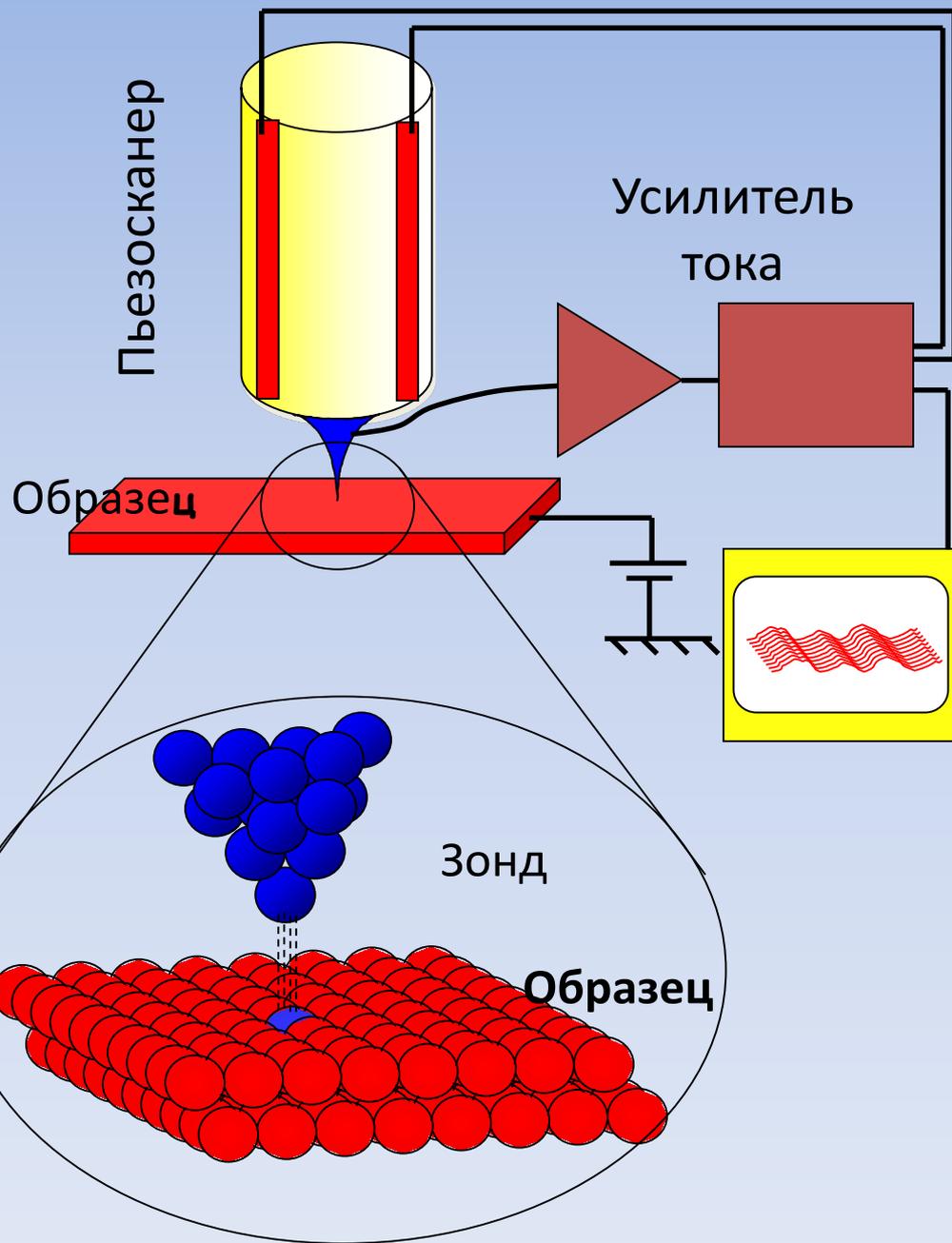
Сканирующая туннельная микроскопия и спектроскопия

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



1986

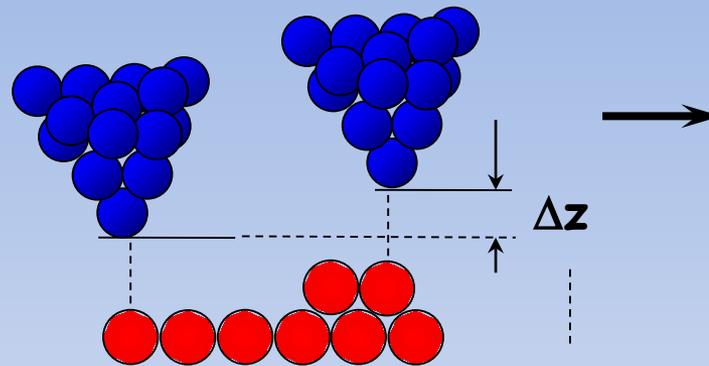
Сканирующая туннельная микроскопия (STM)



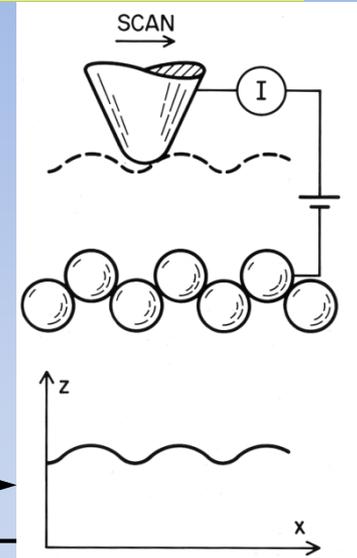
$$T \propto e^{-2ks}$$

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

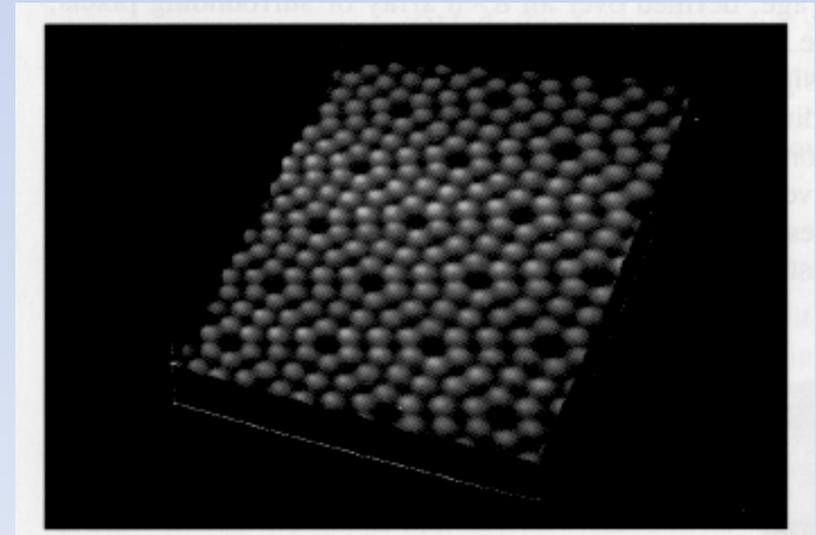
Режим 1: Фиксированный туннельный ток (STM)



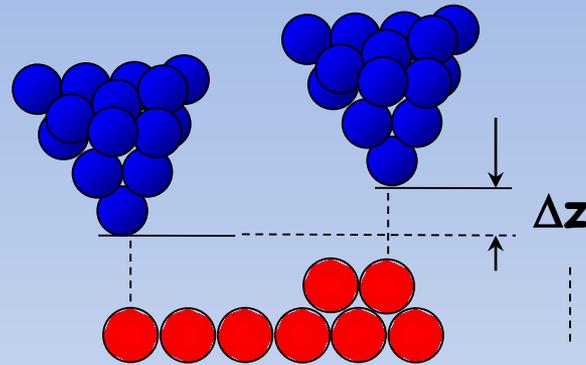
Рельеф поверхности



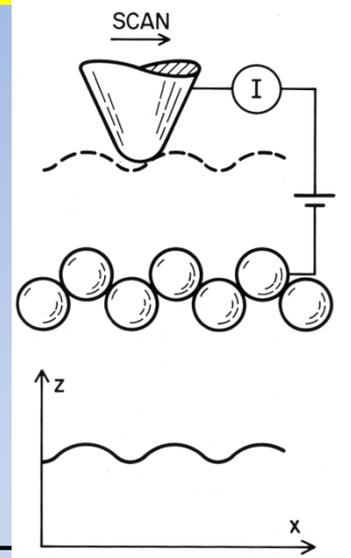
Изображение
реконструированной
поверхности Si(111)



Режим 1: Фиксированный туннельный ток (STM)

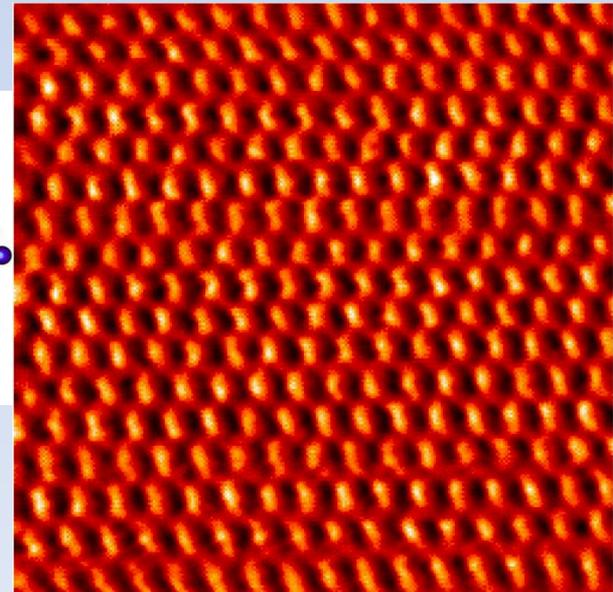
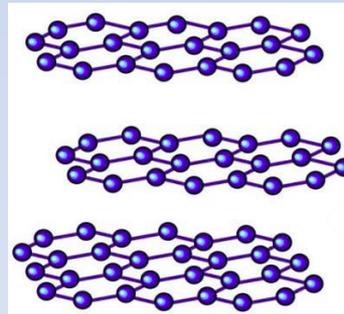


Рельеф поверхности

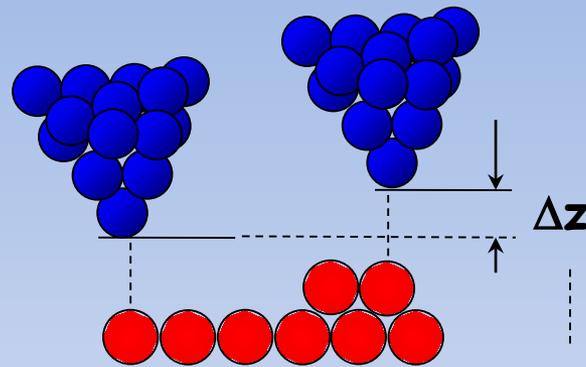


(0001) 5x5nm

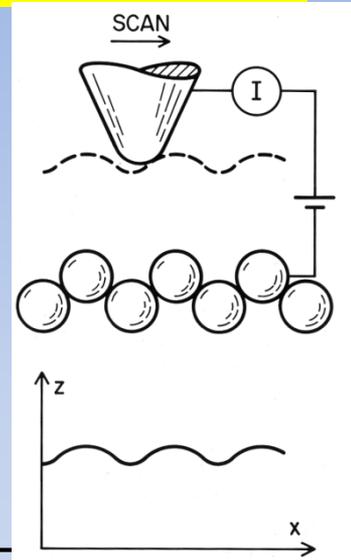
Изображение
поверхности высоко
ориентированного
графита (HOPG)



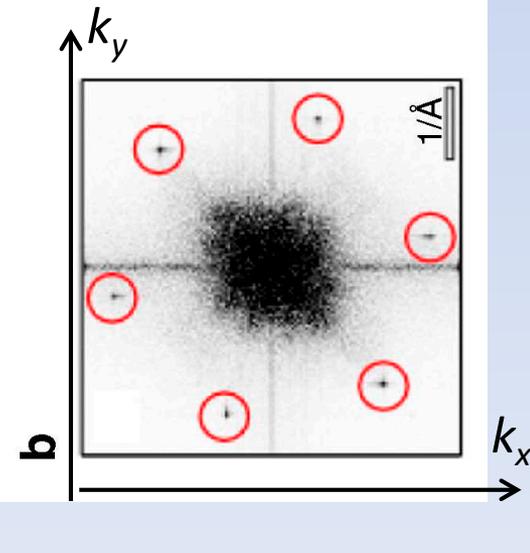
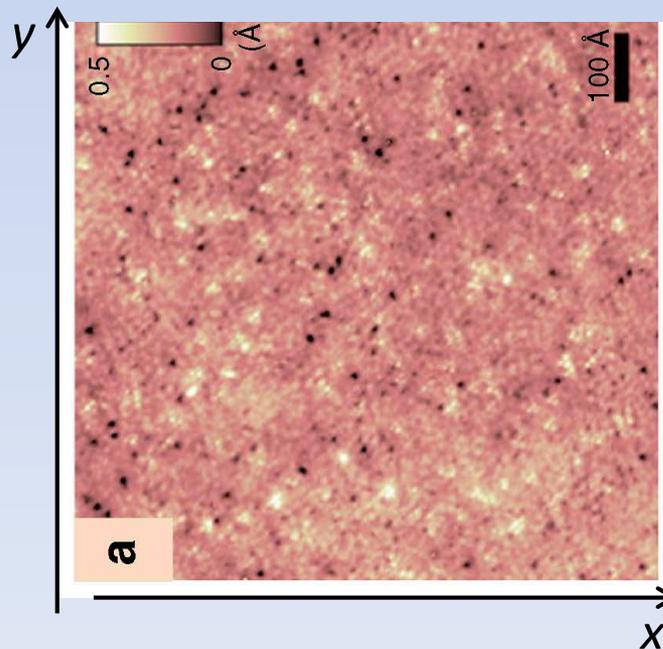
Режим 1: Фиксированный туннельный ток (STM)



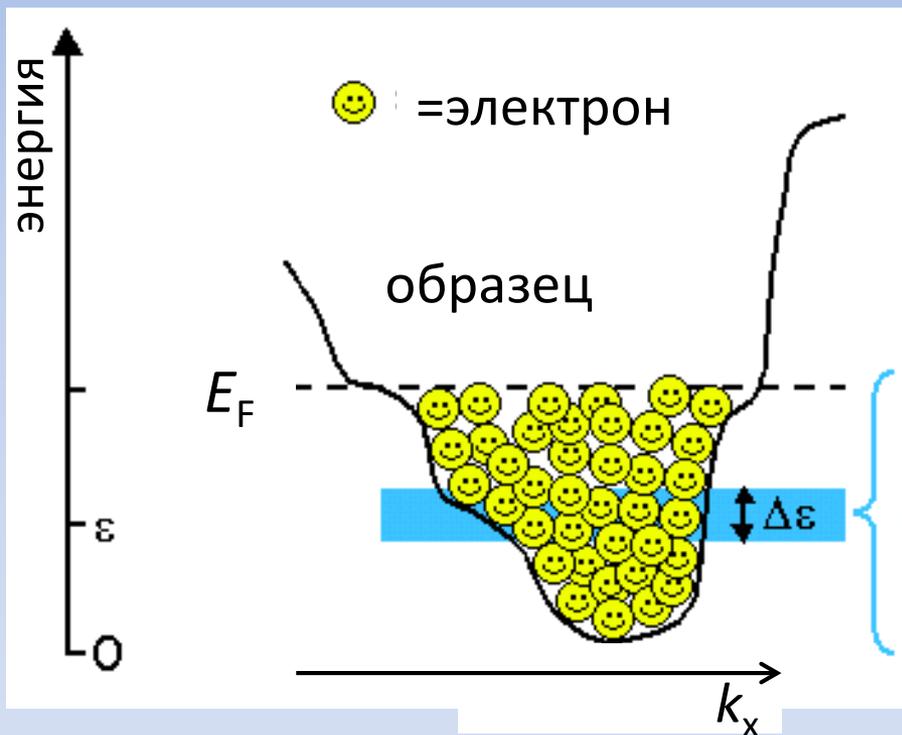
Рельеф поверхности



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

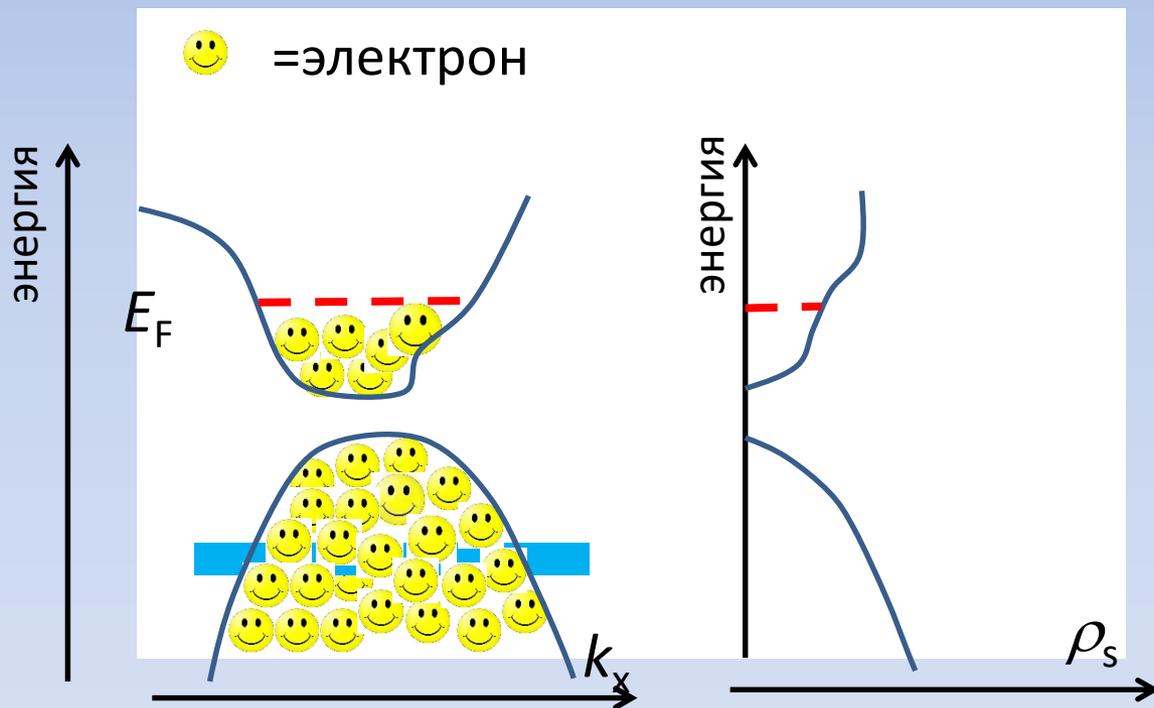


Режим 2: Сканирующая туннельная спектроскопия (STS)

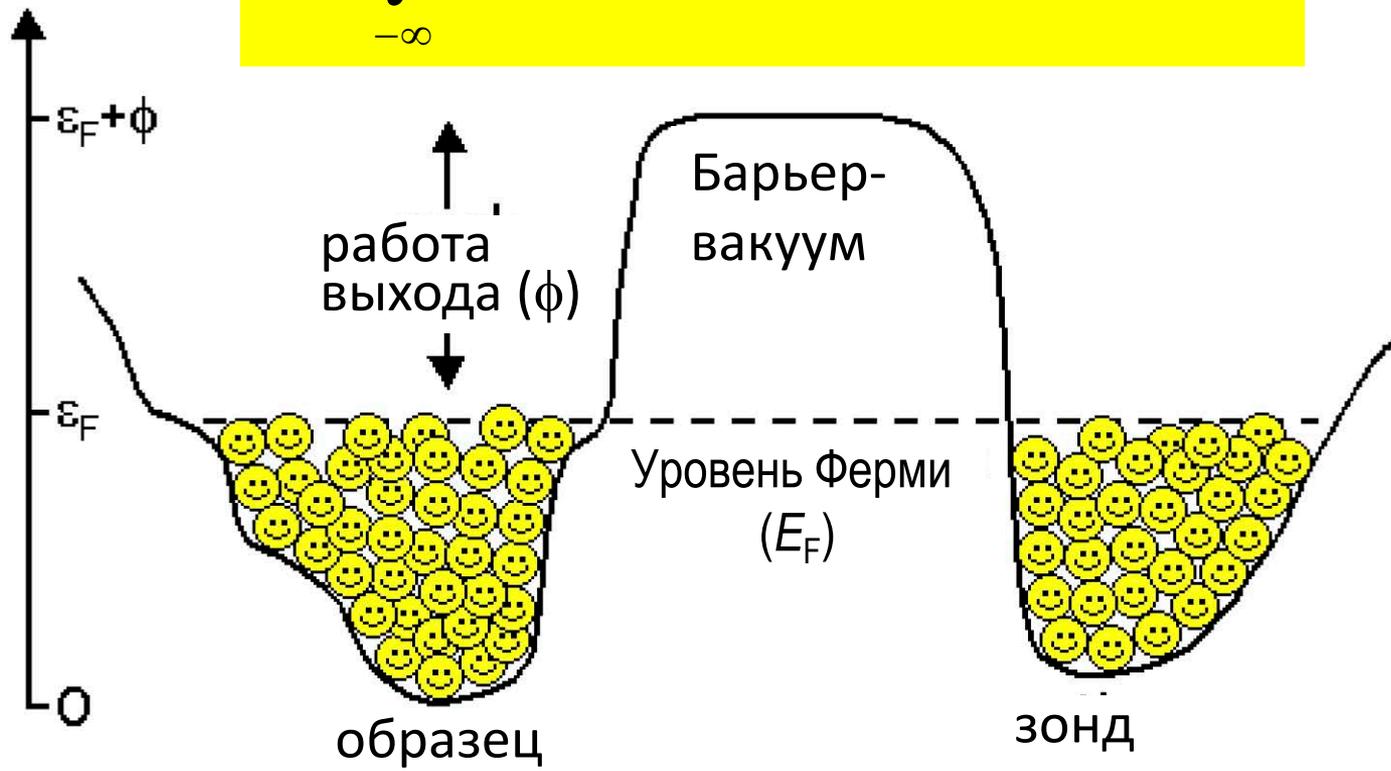


Плотность состояний $\rho(\varepsilon)$
при энергии ε - это число
электронов, сидящих в
полоске, деленное на ее
ширину $\Delta\varepsilon$

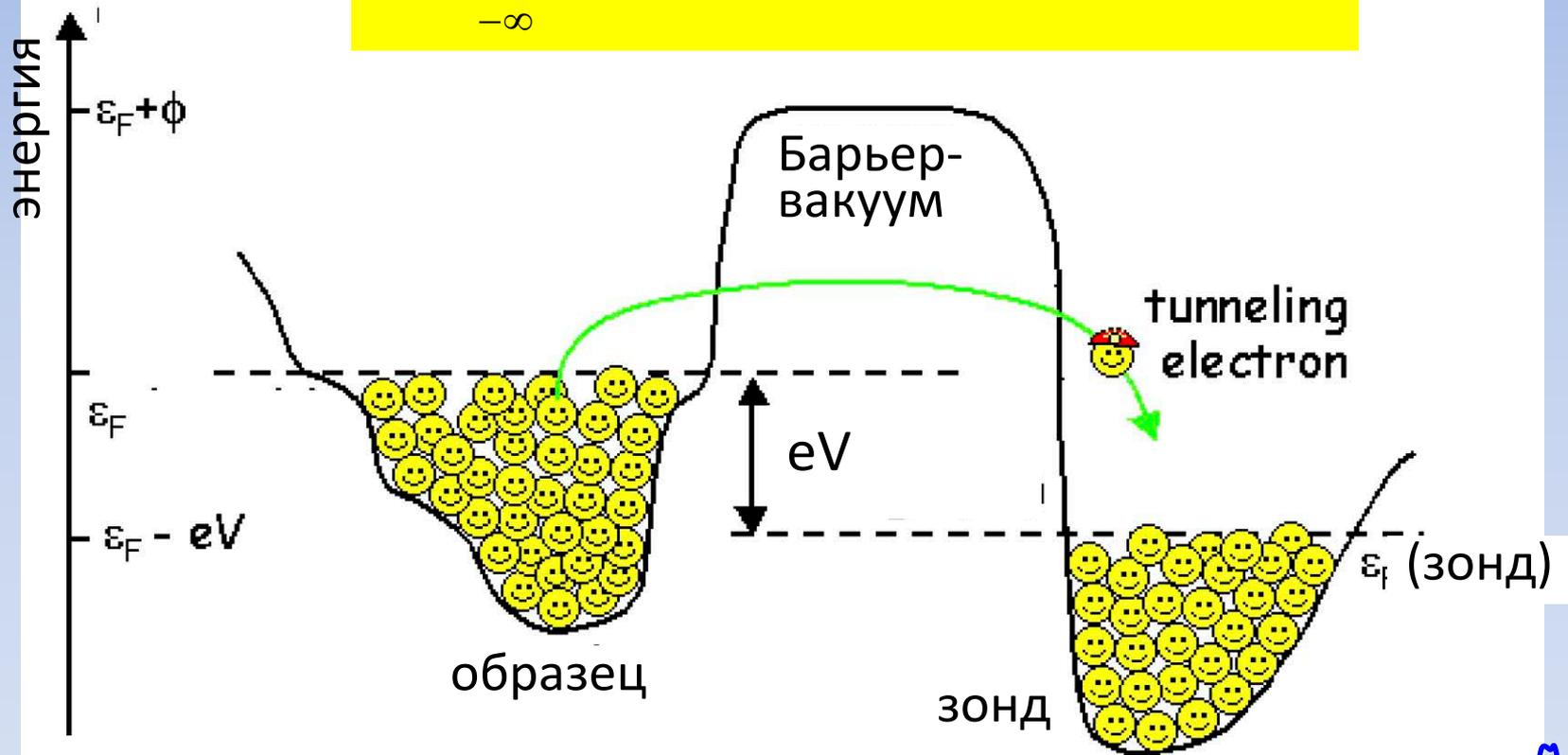
Режим 2: Сканирующая туннельная спектроскопия (STS)



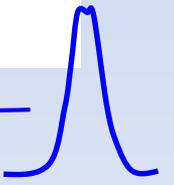
$$I \propto \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_s(E) [f(E) - f(E - eV)] dE$$



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

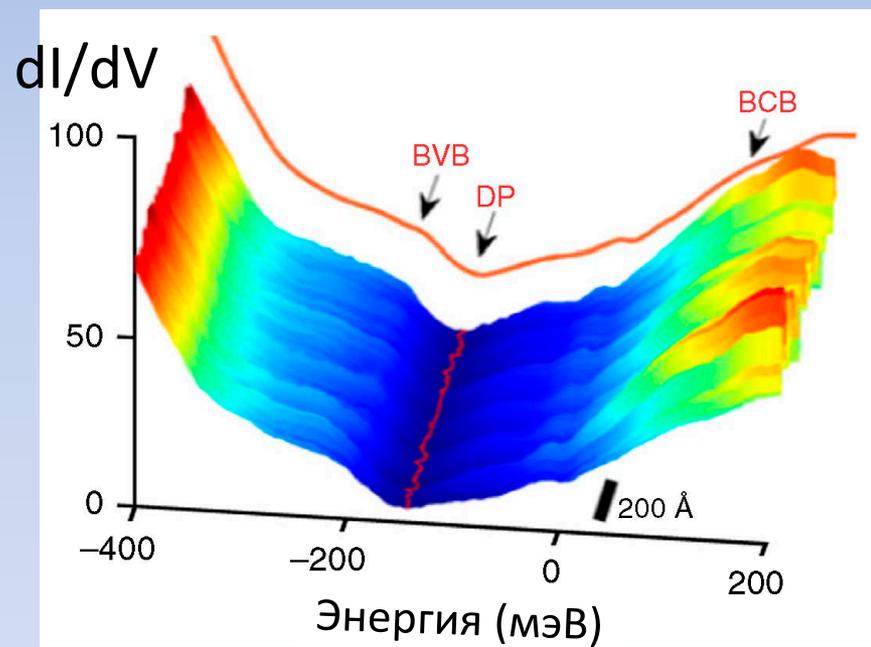
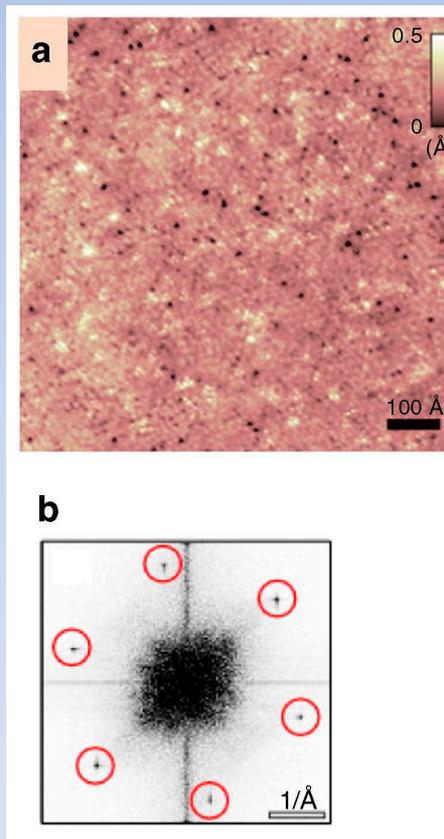


$$\left. \frac{dI}{dV} \right|_{V=V_0} \propto \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_s \left. \frac{\partial f(E - eV)}{\partial (eV)} \right|_{V=V_0} dE$$



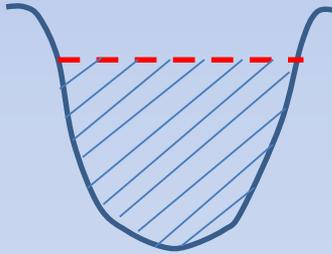
Топологический изолятор Bi-SSTS

STM

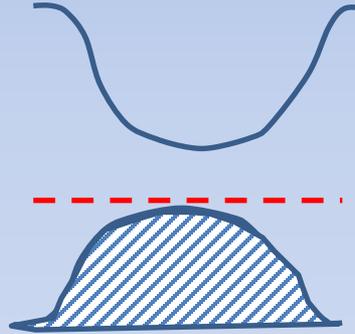


Энергетический спектр сверхпроводника

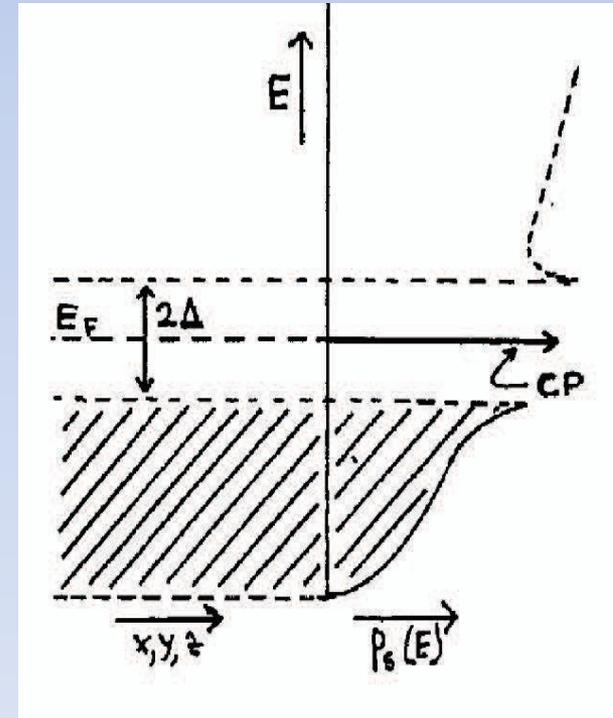
металл



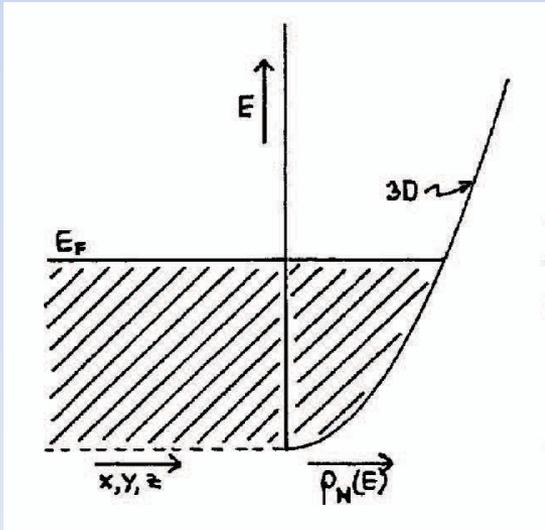
полупроводник
(изолятор)



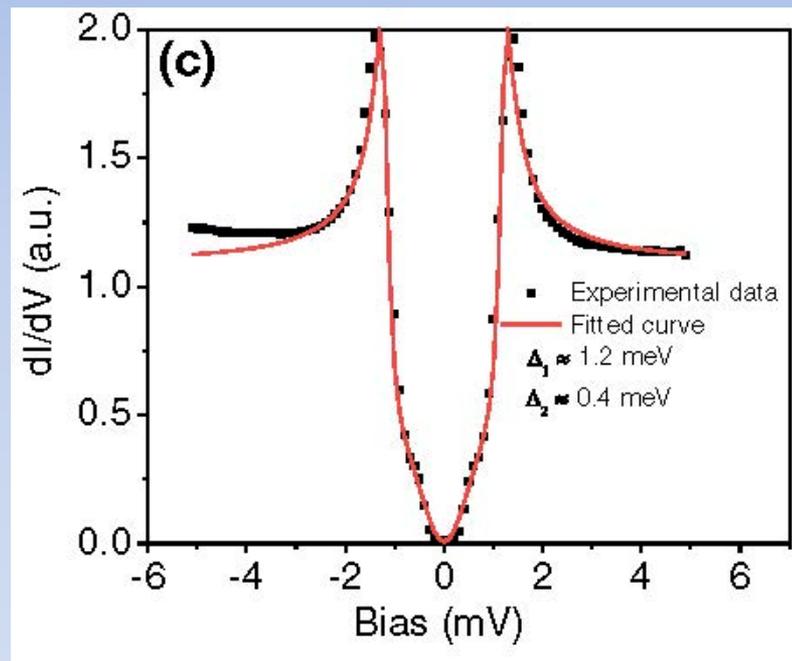
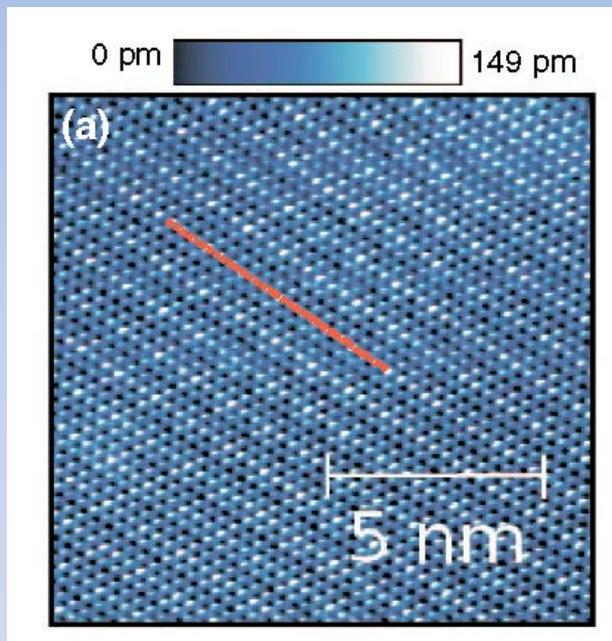
сверхпроводник



В спектре возникает щель 2Δ



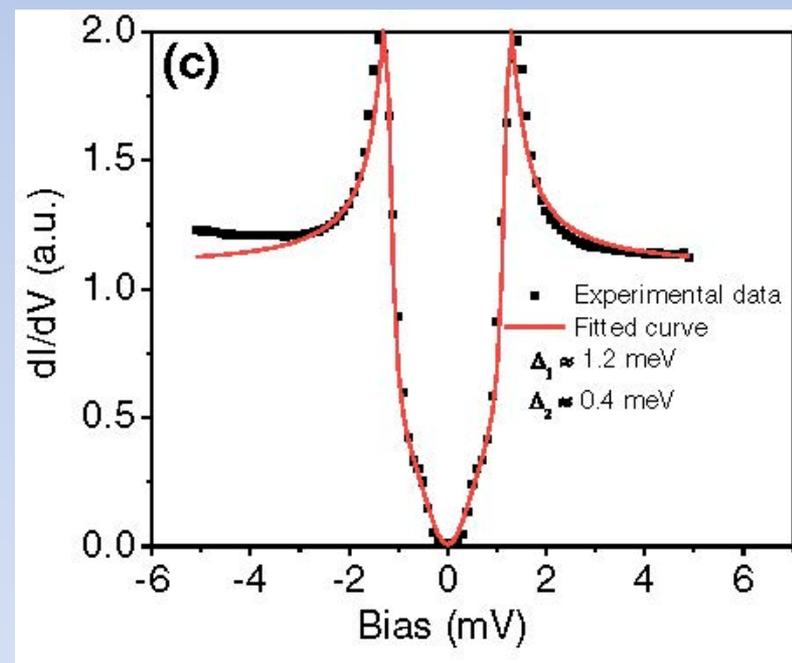
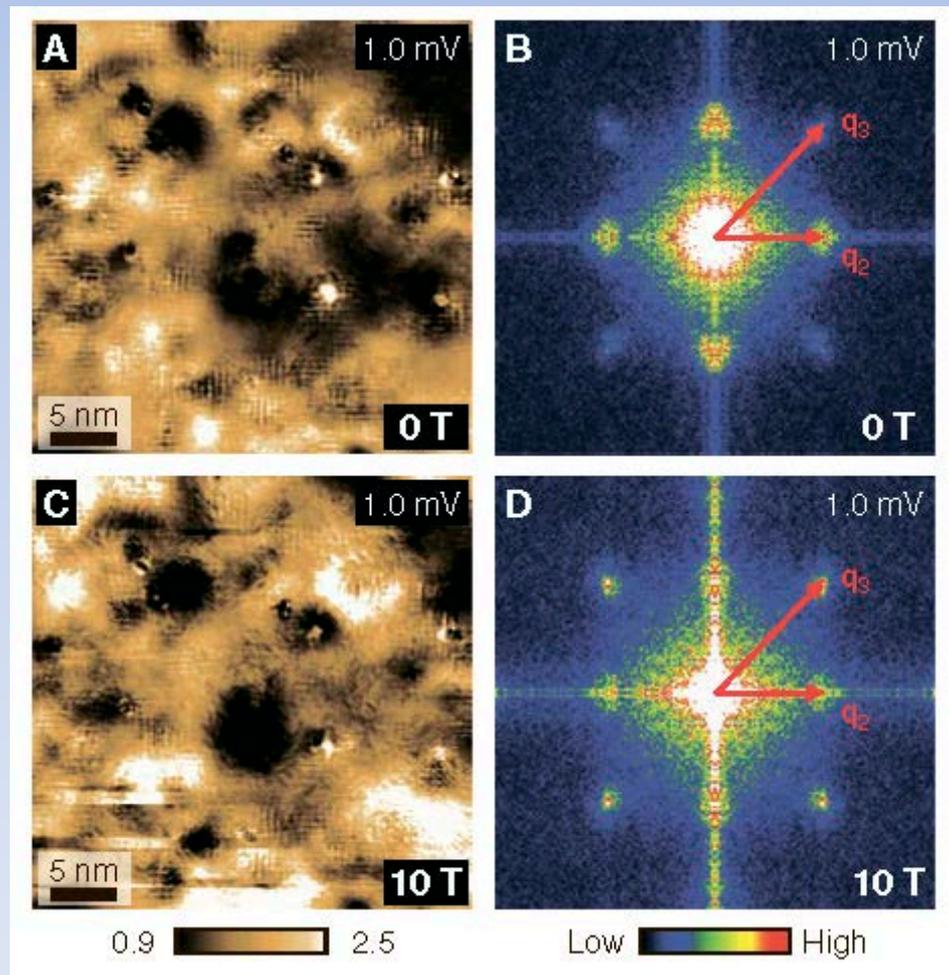
Сверхпроводник NbSe₂



Сверхпроводник NbSe₂

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

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!