



# 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,**

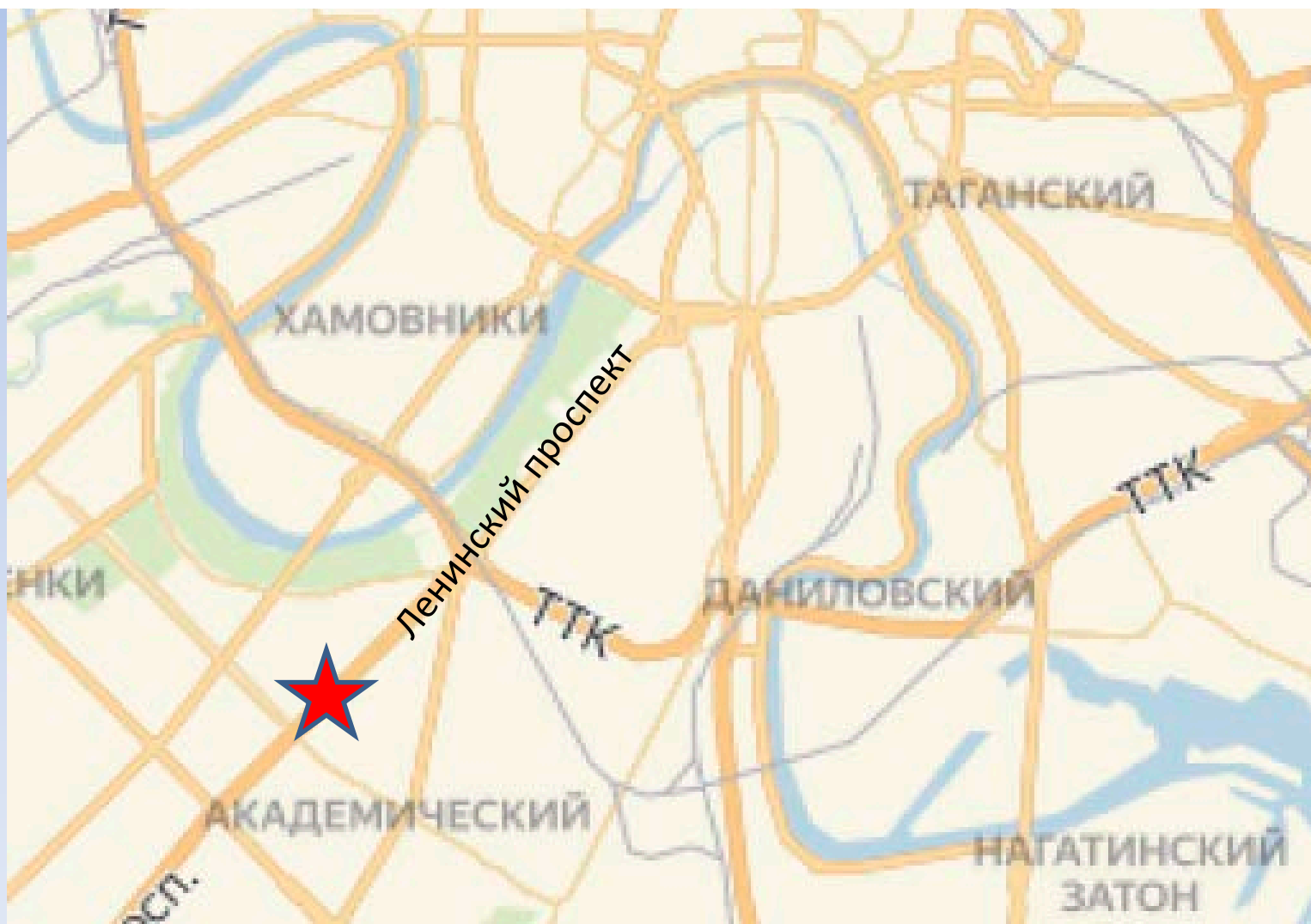
*Центр сверхпроводимости и квантовых материалов  
им. В.Л. Гинзбурга (ФИАН)*

<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



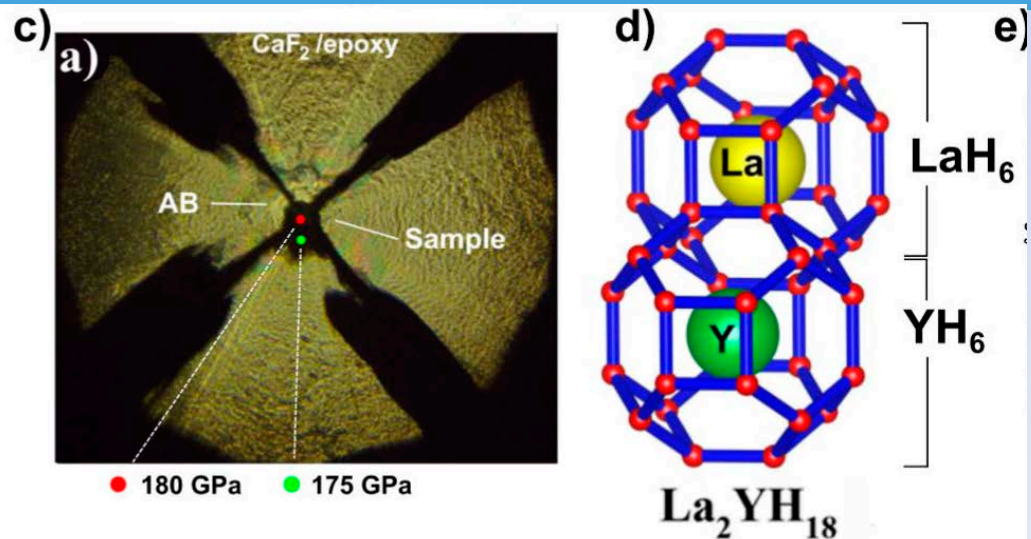
# Синтез новых материалов в алмазных камерах

## Superconductivity at 253 K in lanthanum-yttrium ternary hydrides

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

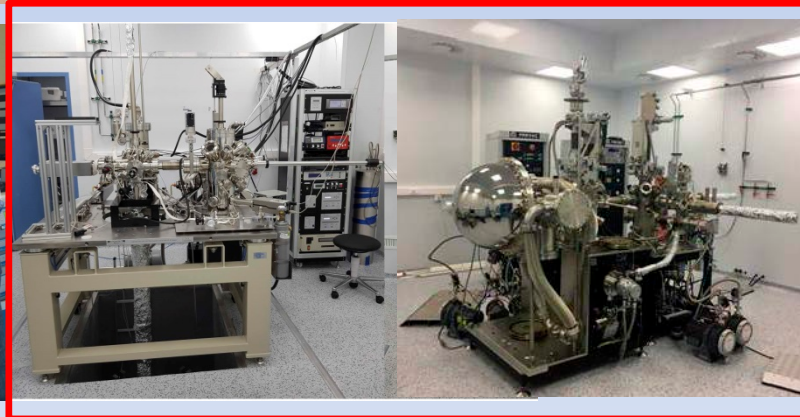
## Superconductivity at 161 K in thorium hydride ThH<sub>10</sub>: Synthesis and properties

Research: Original Research

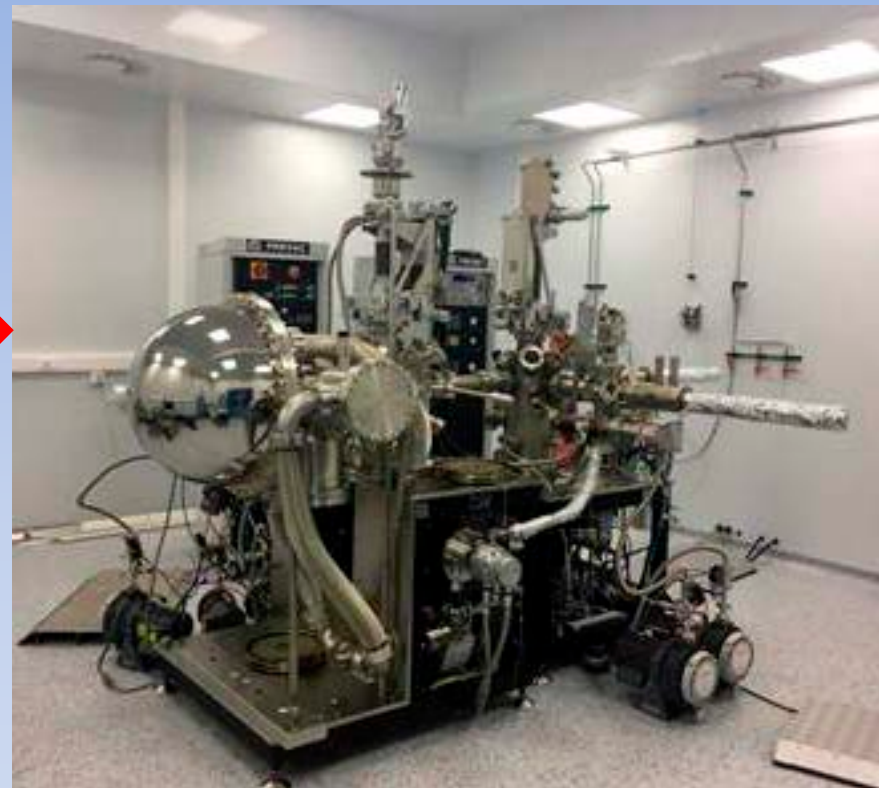




# Измерения физических свойств



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



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



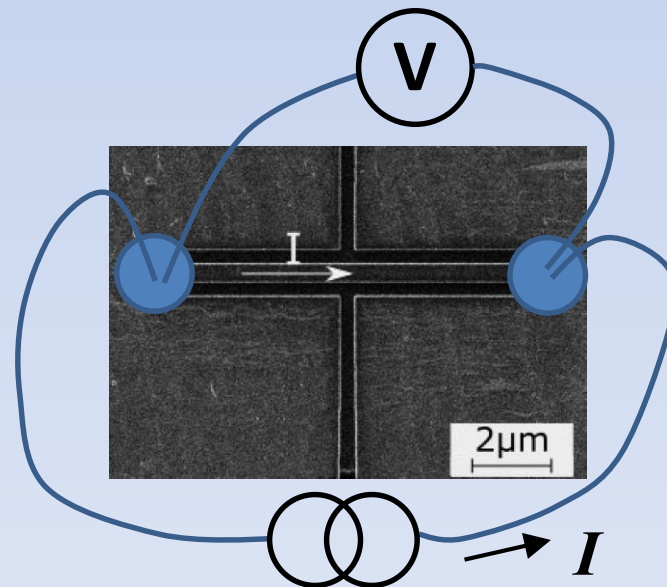
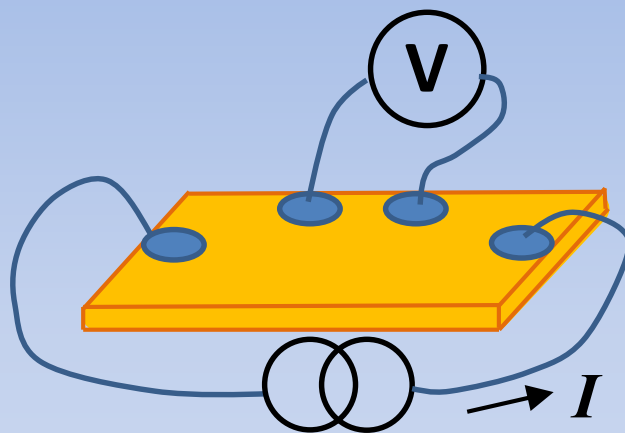
# Свойства ?

Воздействие



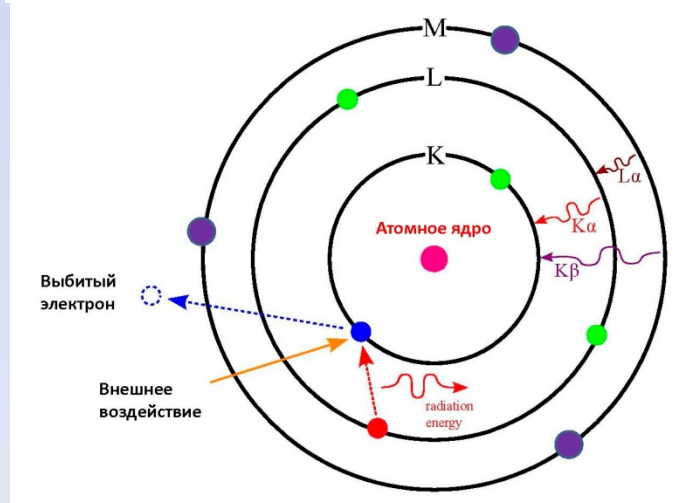
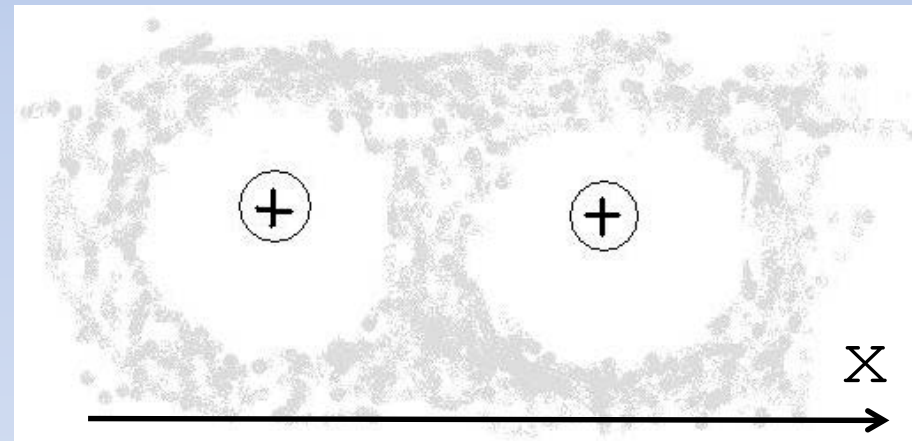
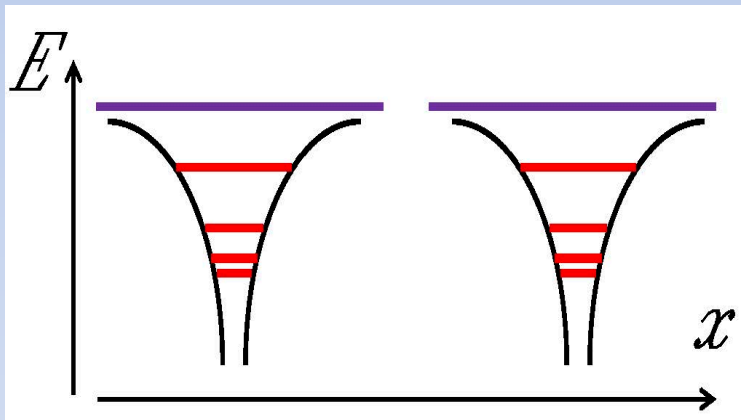
Результат

# DC & AC транспорт



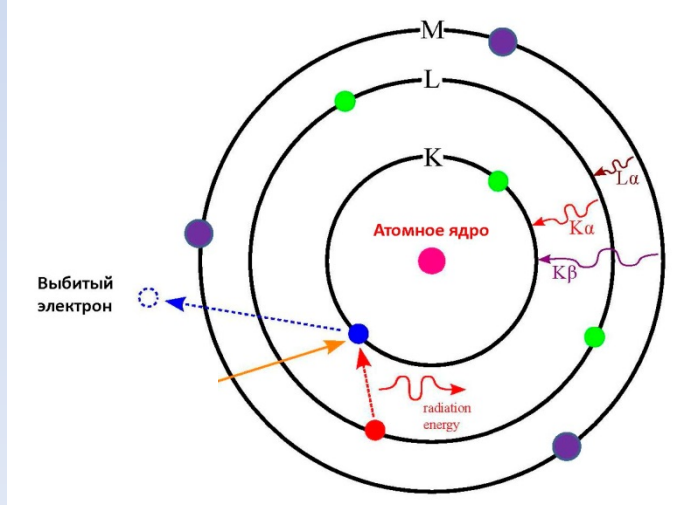
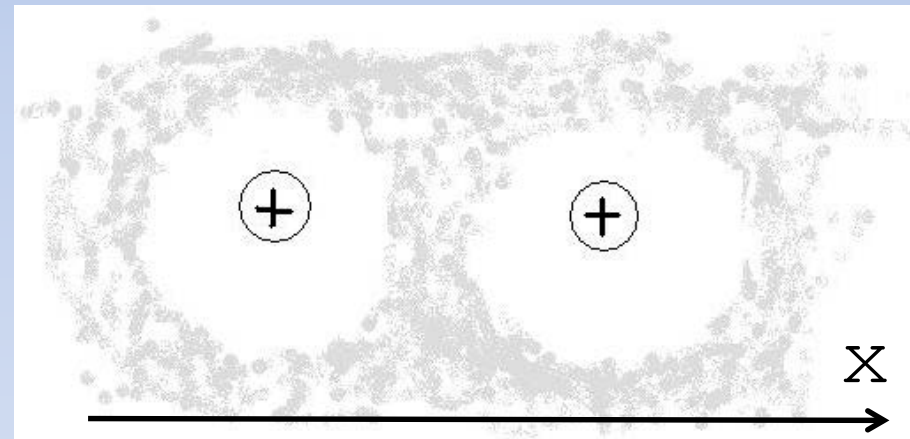
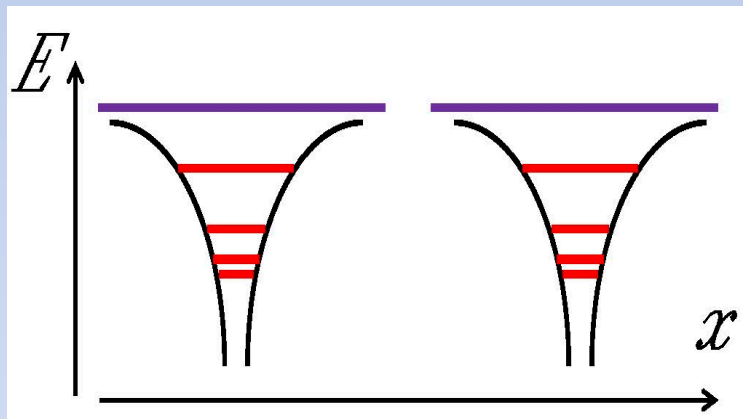
# Локальные свойства электронов в металлах, топологических изоляторах, дираковских полуметаллах и сверхпроводниках

“Электроны в металлах”  $\equiv$  электроны проводимости



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

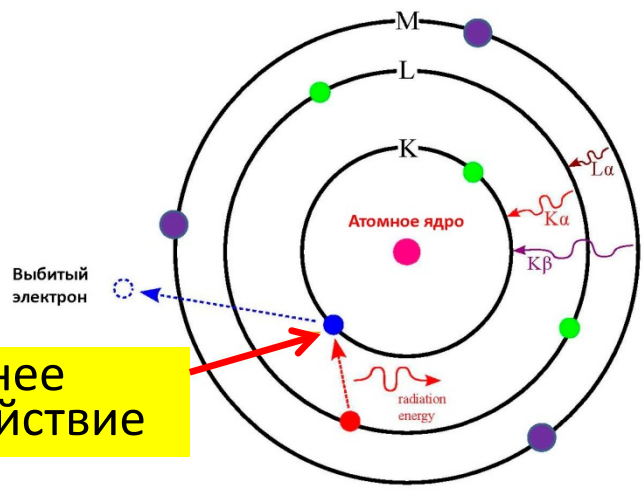
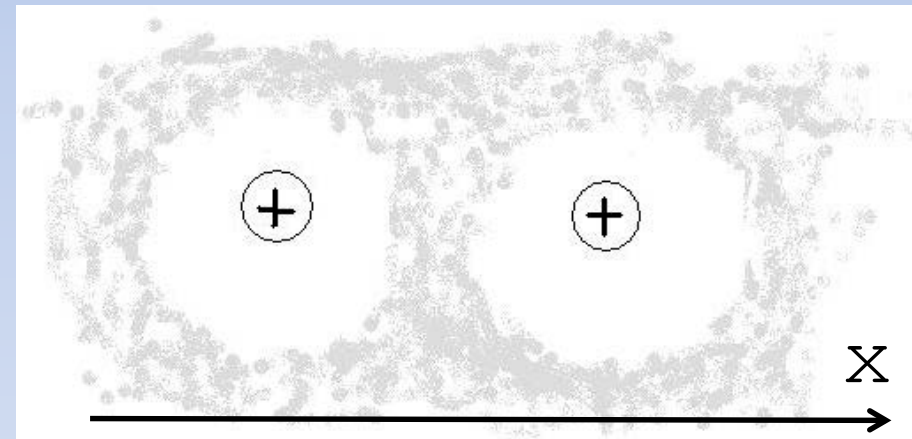
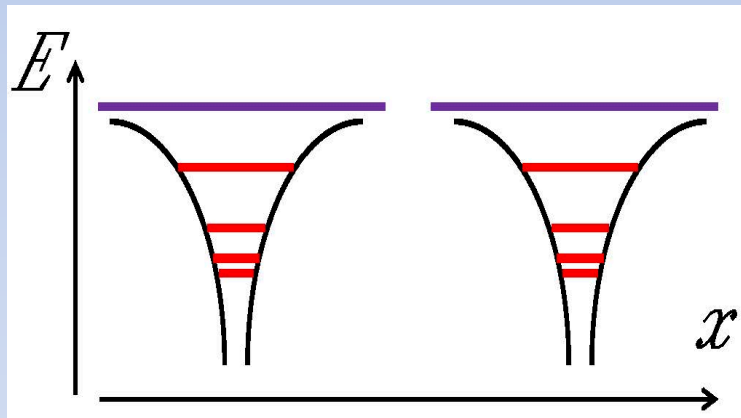
“Электроны в металлах”  $\equiv$  электроны проводимости



Свойства ?

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

“Электроны в металлах”  $\equiv$  электроны проводимости



Внешнее воздействие

Свойства ?

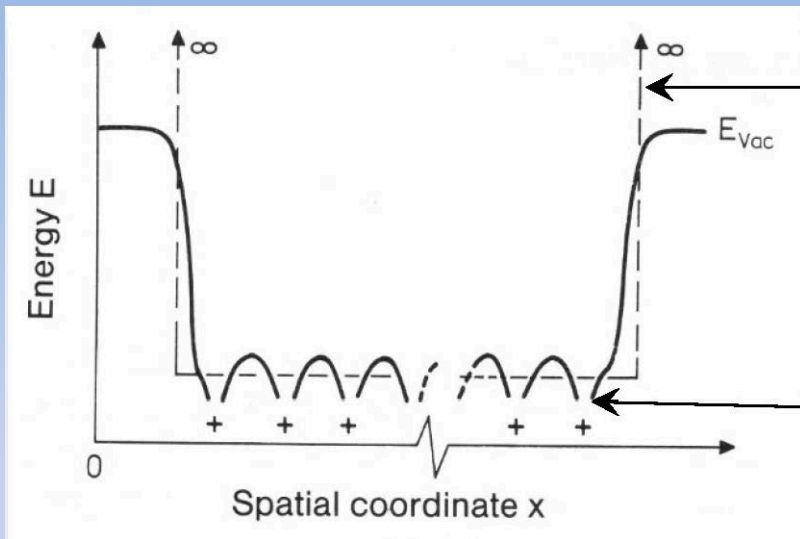


## Электронные свойства твердых тел –

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

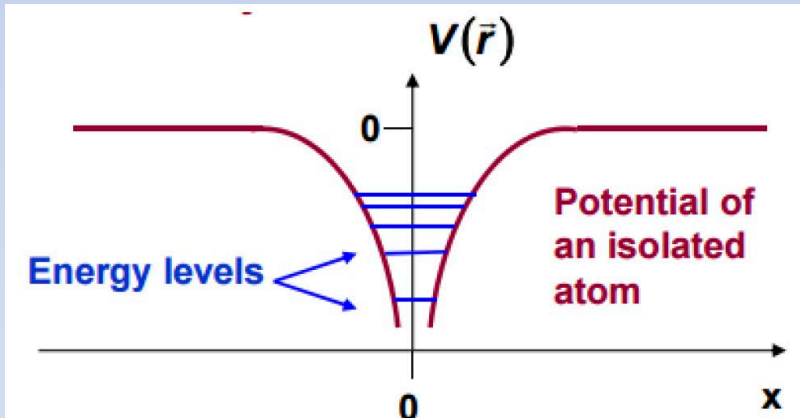
**Большинство свойств определяются спектром  $E(p)$**

- 1. Свойства электронов вблизи поверхности**
- 2. Локальные электронные свойства**

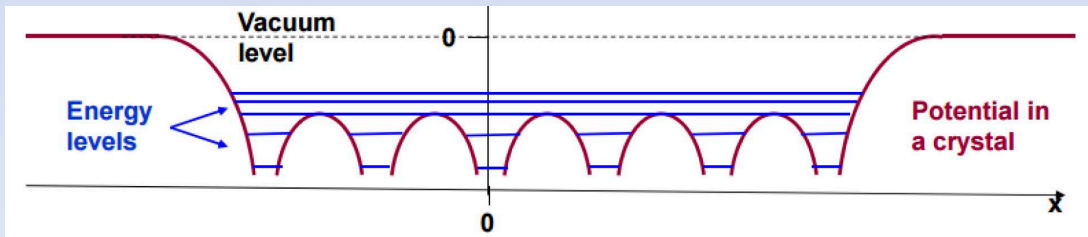


**Свободные электроны**

**Потенциал решетки**



**Уровни энергии в изолированном атоме**



**Потенциал решетки и уровни энергии**

Частица



Волна

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

Свободные электроны

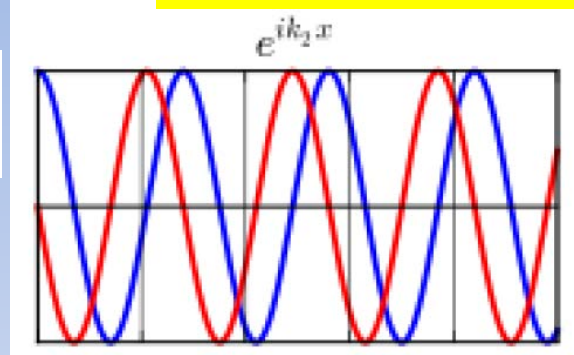
$$p = \hbar k$$

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

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

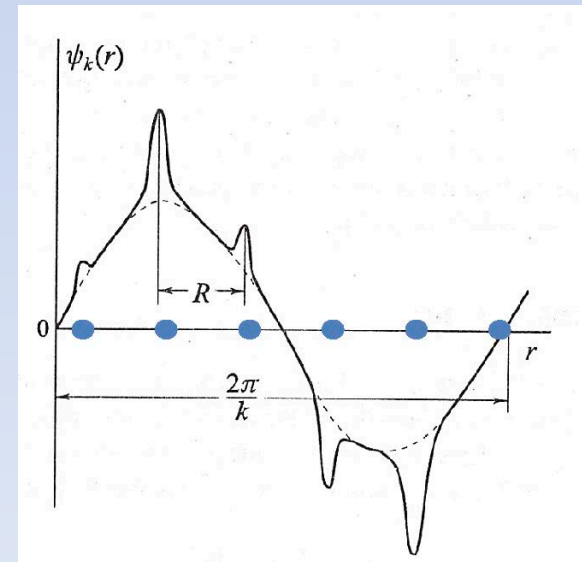
$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

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



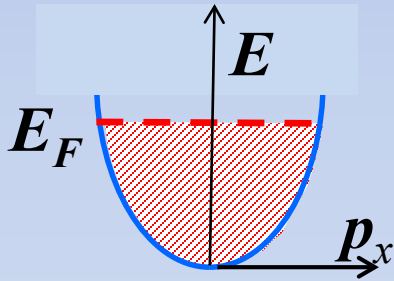
Почти свободные электроны

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

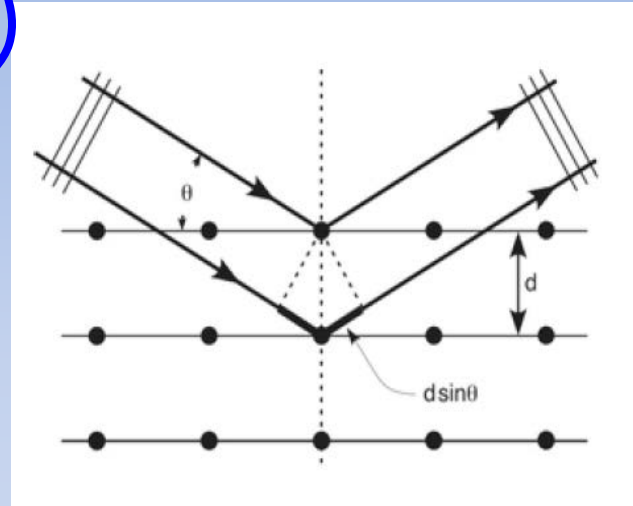


## Электроны в вакууме

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

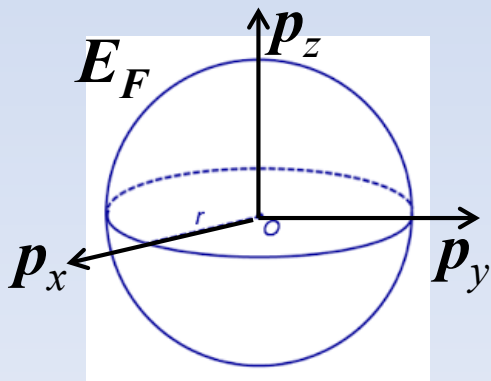


## А в кристалле ?



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

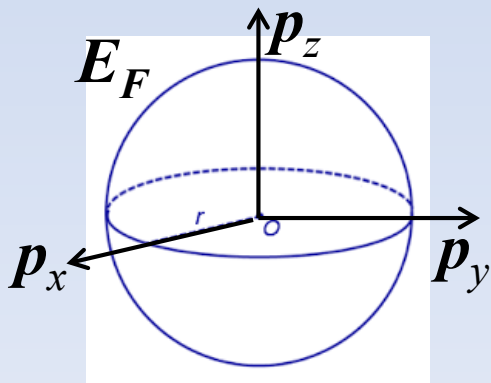
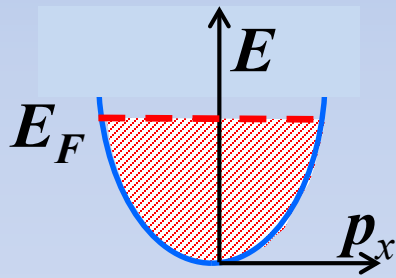
**Электрон:**  $p=hk/2\pi$ ;  $k=2\pi/\lambda$ ;  $E=p^2/2m = h^2/(2m\lambda)^2$



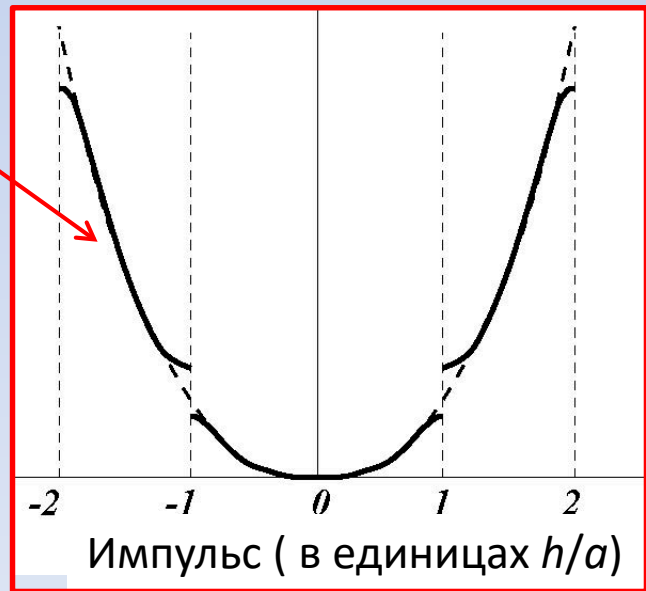
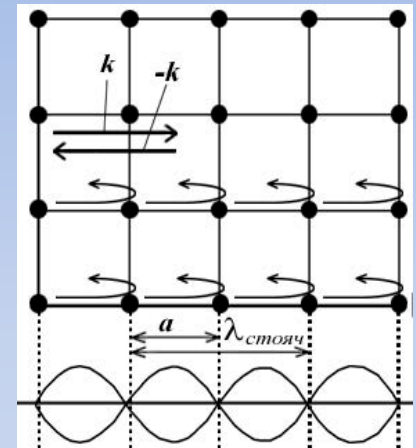
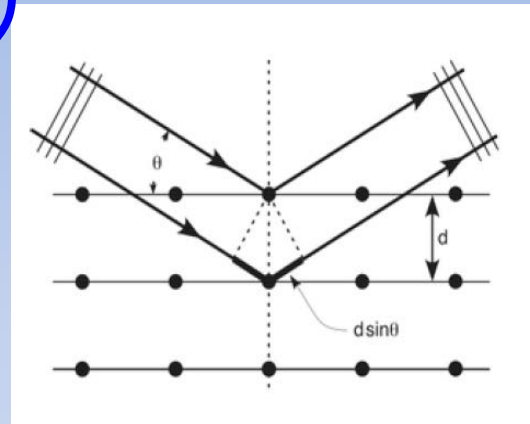


# Электроны в вакууме

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

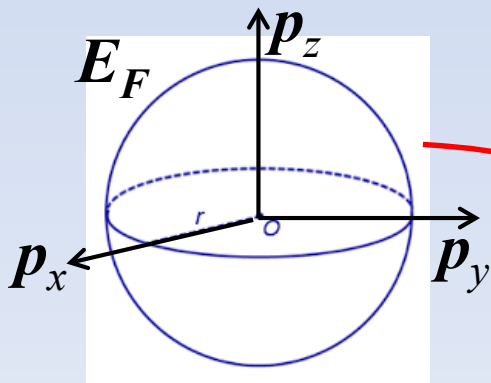
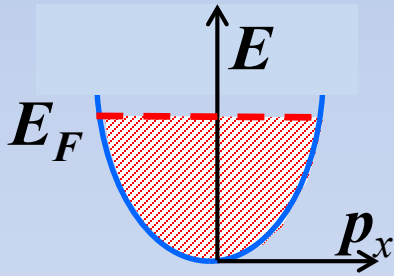


# Электроны в кристалле

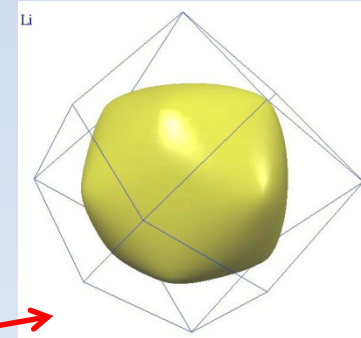
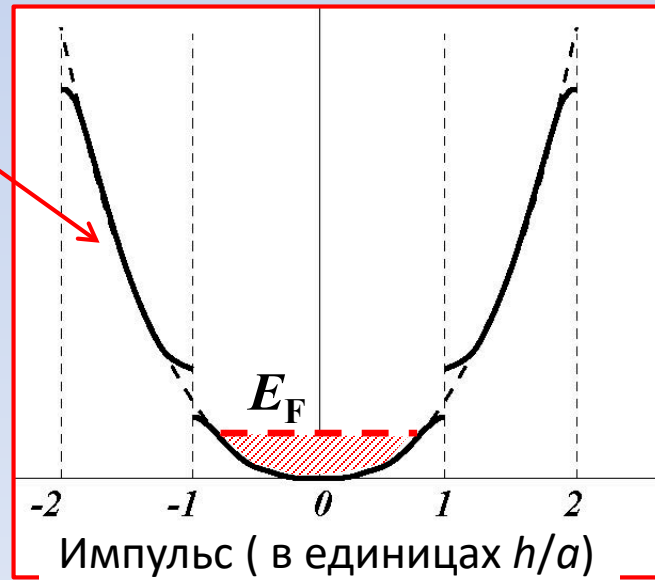
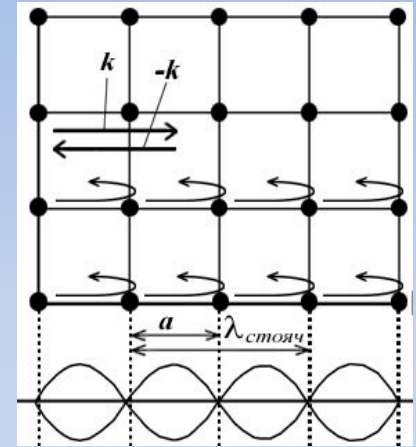
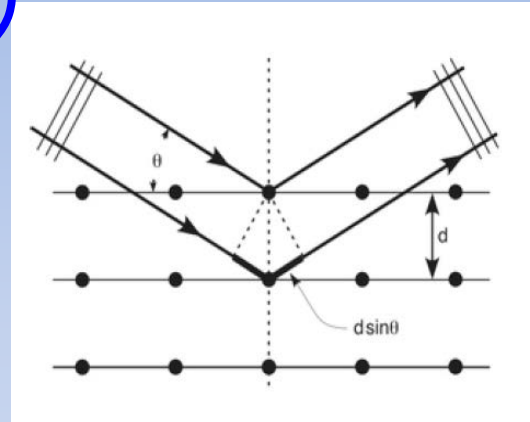


# Электроны в вакууме

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

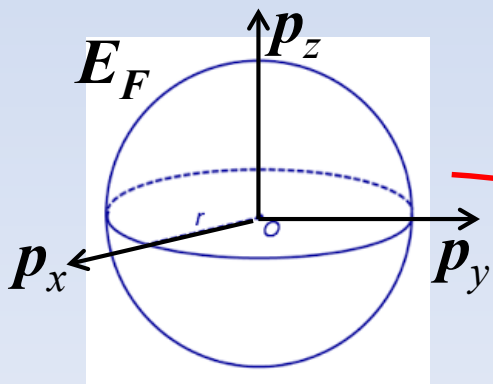
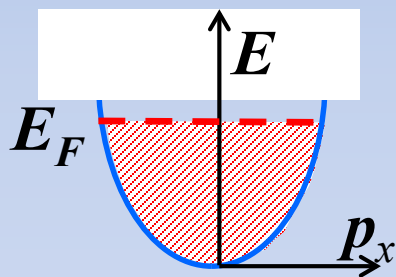


# Электроны в кристалле

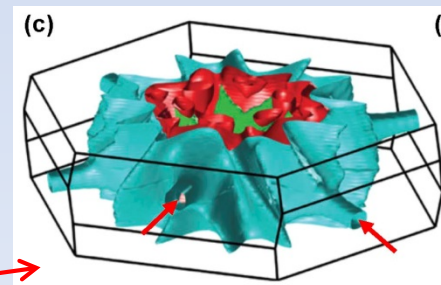
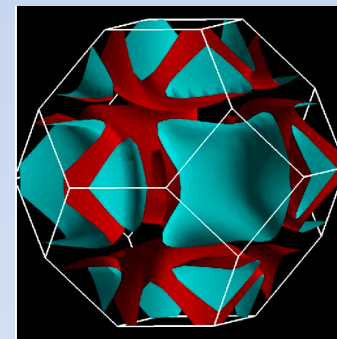
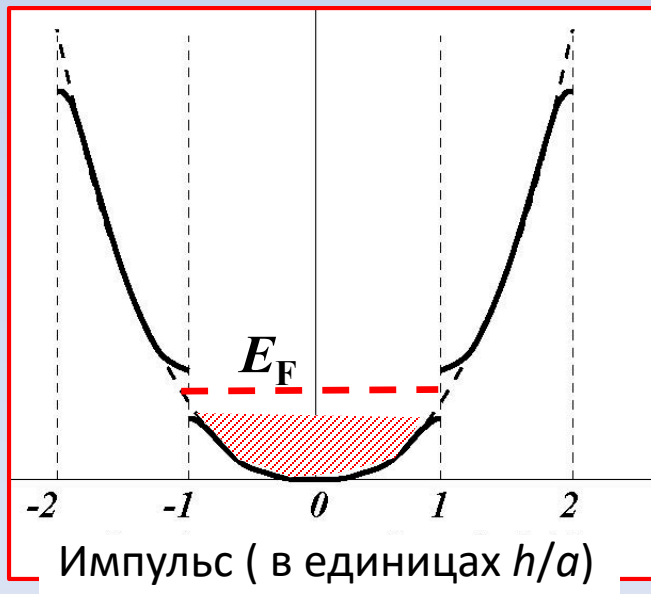
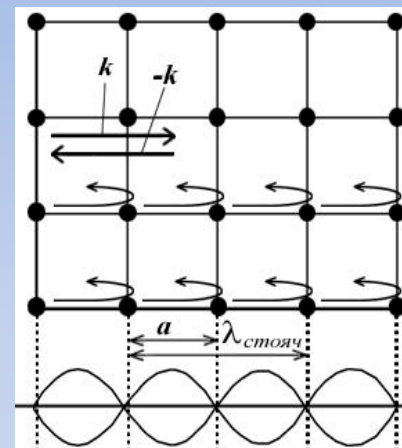
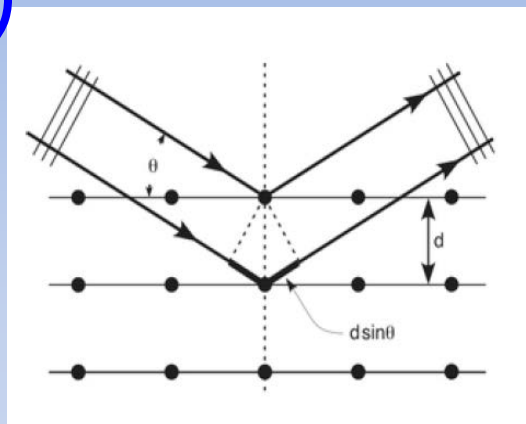


# Электроны в вакууме

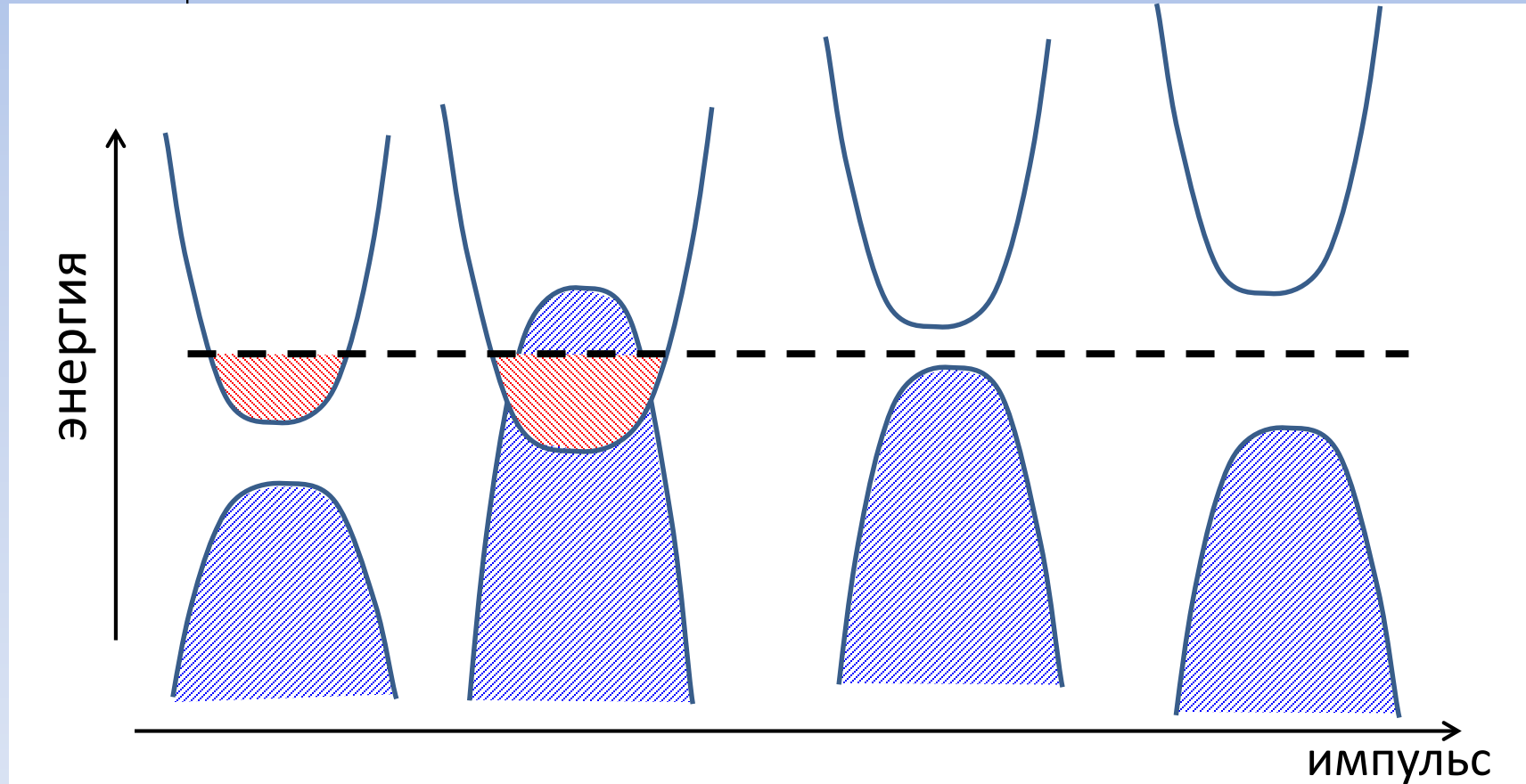
$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}$$



# Электроны в кристалле



# Энергетический спектр = Зонная структура




1-з металл,

2-з металл,

полупроводник

об.изолятор



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

**2. Сканирующая туннельная  
микроскопия/спектроскопия**



**Генрих Герц**

**1886**



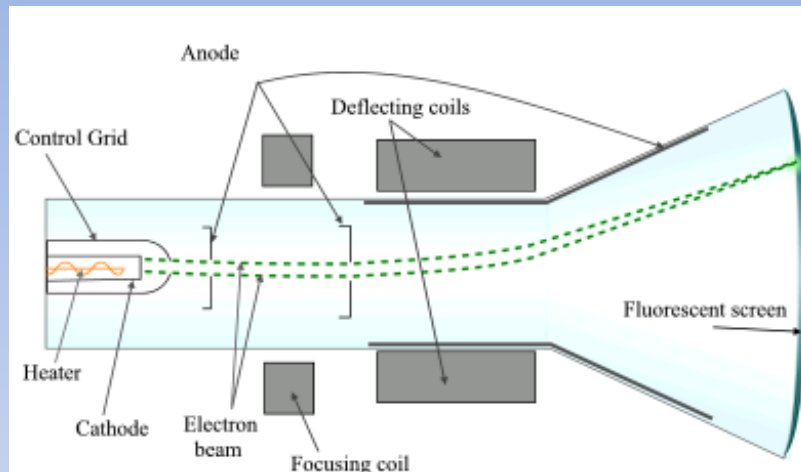
*заряженный конденсатор теряет свой заряд быстрее при освещении его пластин ультрафиолетовым излучением*



# 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.***

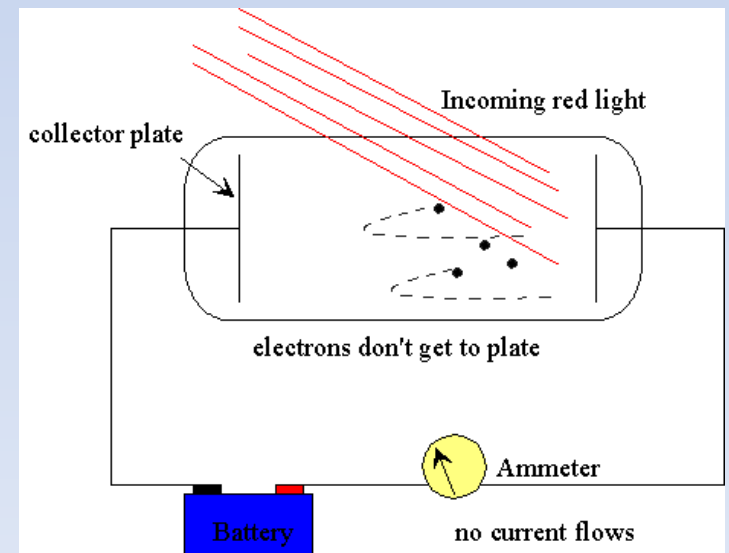
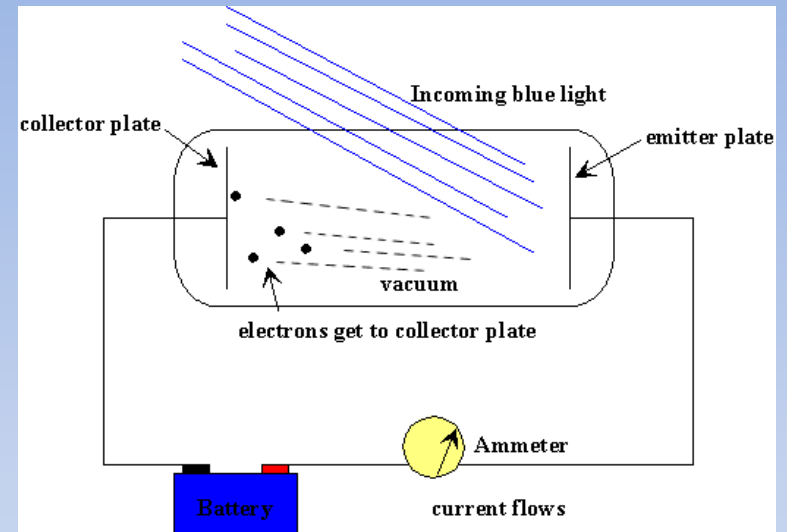
# Открытие фотоэффекта



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.*



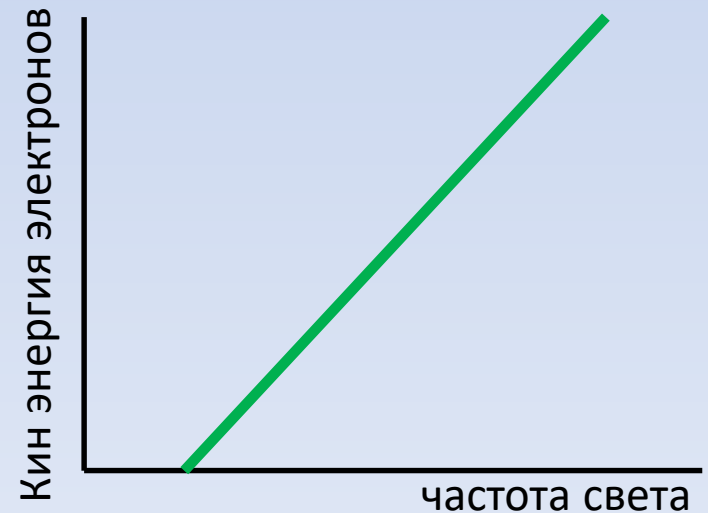
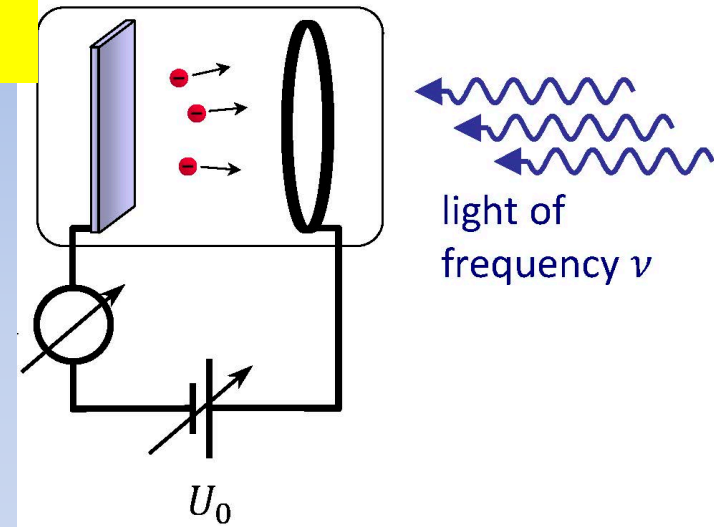
Итак, из опытов Герца, Столетова, Ленарда следует:

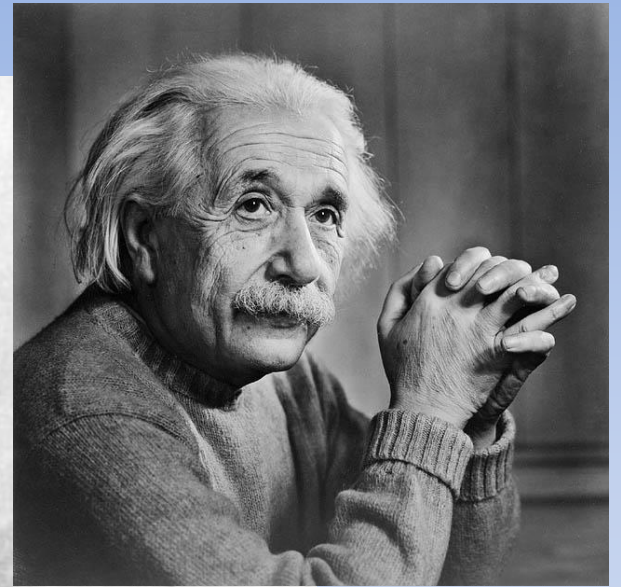
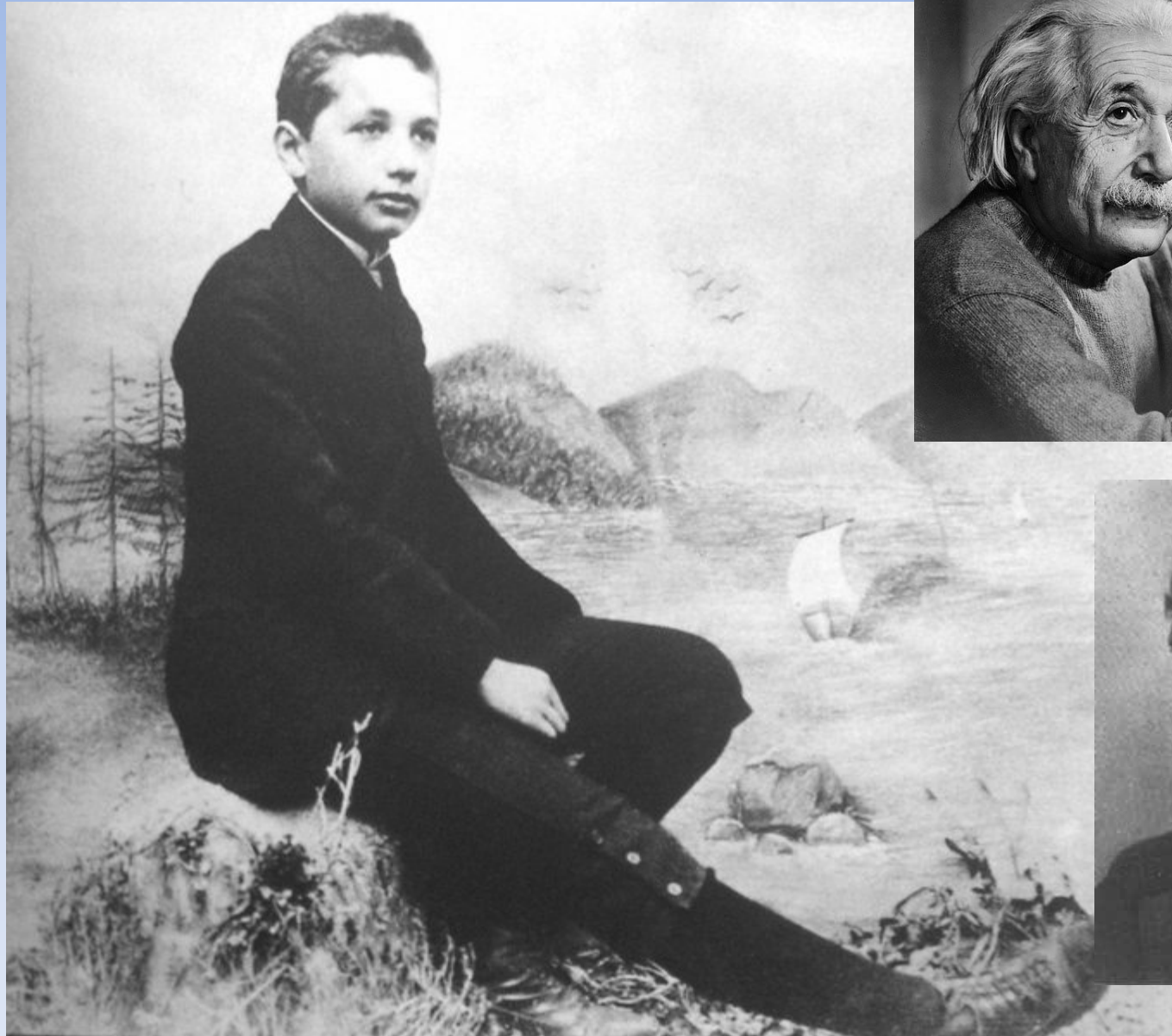
- **ИНТЕНСИВНОСТЬ СВЕТА увеличивает**

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

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

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

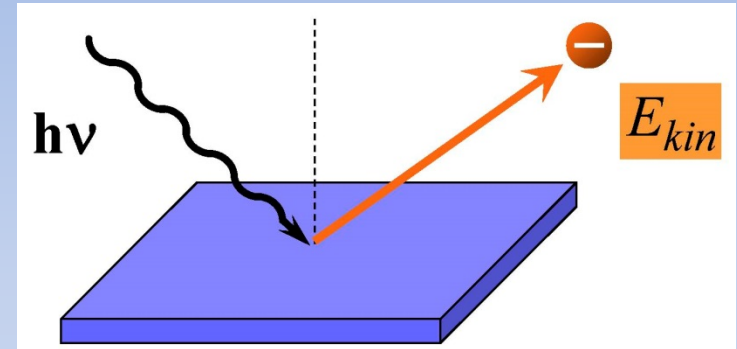




# Квантовая теория фотоэффекта



**1905**



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

**Альберт Эйнштейн (26лет)**

**Измерил постоянную Планка  
с точностью 0.5%  
с помощью фотоэффекта**



**Роберт Милликен**

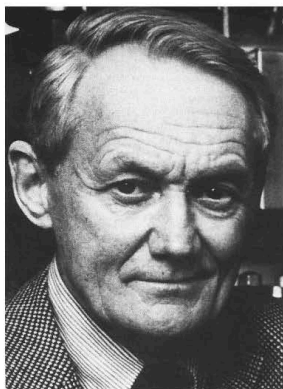
**1916**

*$h$*

**... и подтвердил  
теорию Эйнштейна**



# Принцип фотоэлектронной спектроскопии



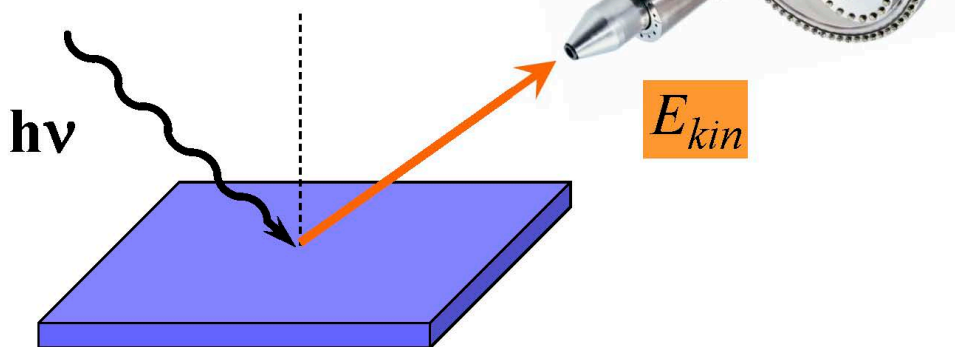
**Кай М. Зигбан**  
Нобелевская  
премия 1981

**Сохранение энергии**

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

**1981**

анализатор  
электронов





$E$

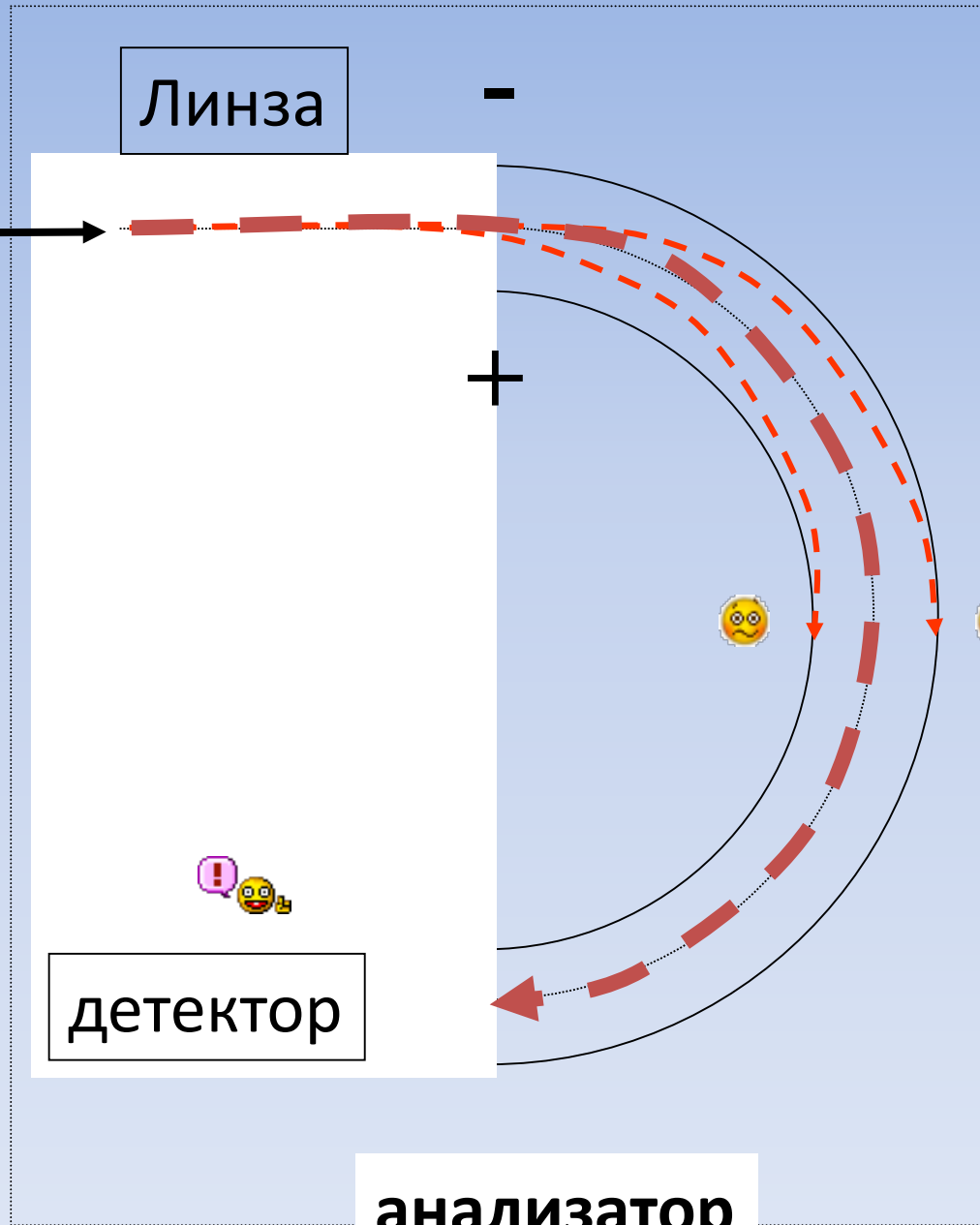
Линза

-

+

детектор

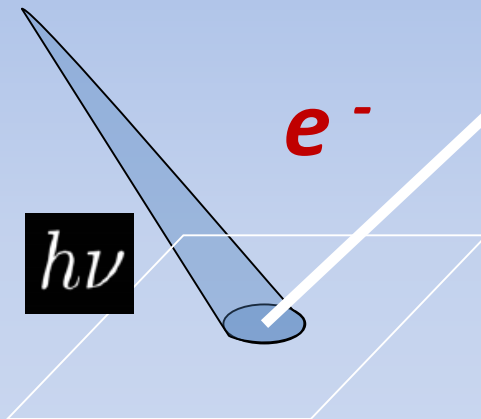
анализатор



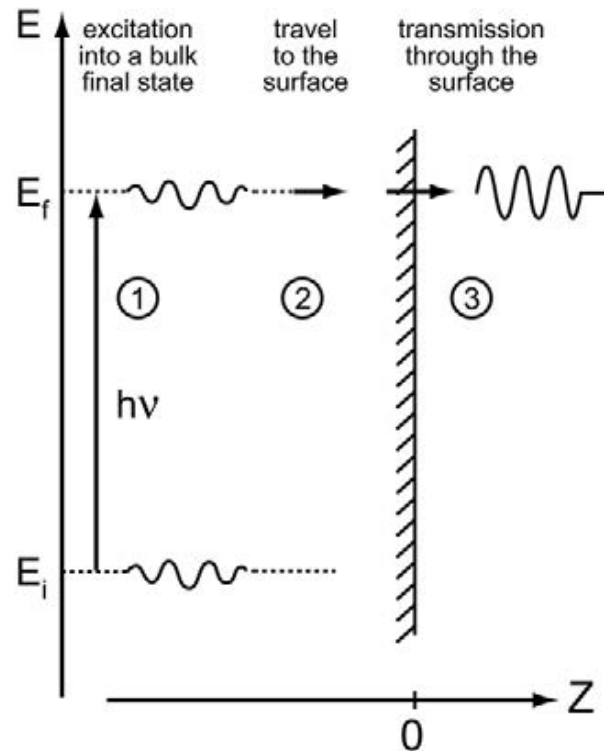
# Фотоэлектрический эффект

Сохранение энергии и импульса

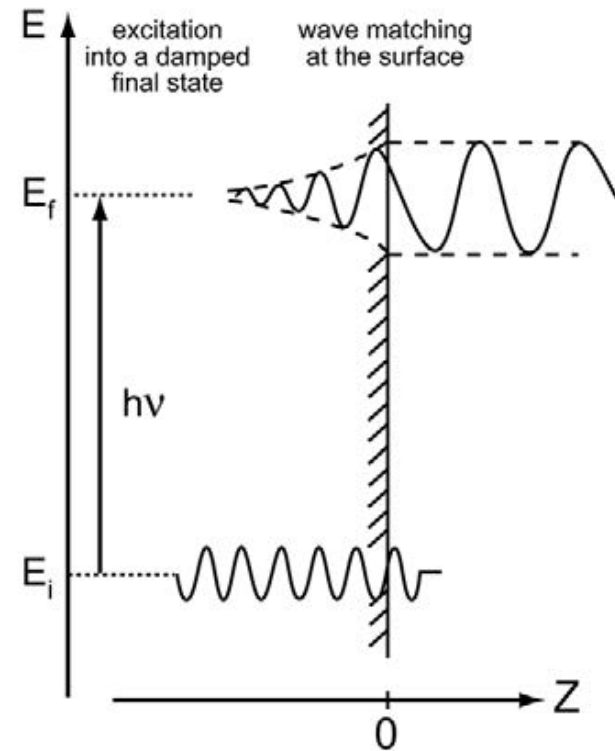
$$E_{\text{kin}} = h\nu - \phi - |E_B| \quad |k| = (2mE_{\text{kin}})^{1/2}/\hbar$$
$$k_f - k_i = 0$$



three-step model



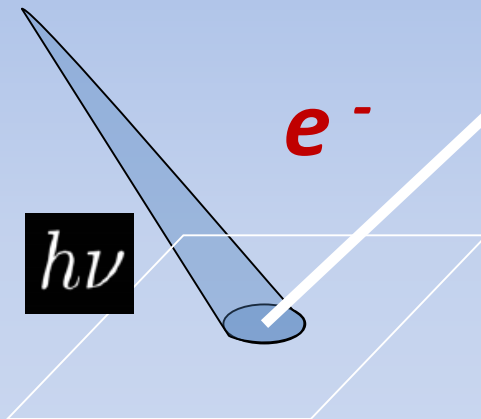
one-step model



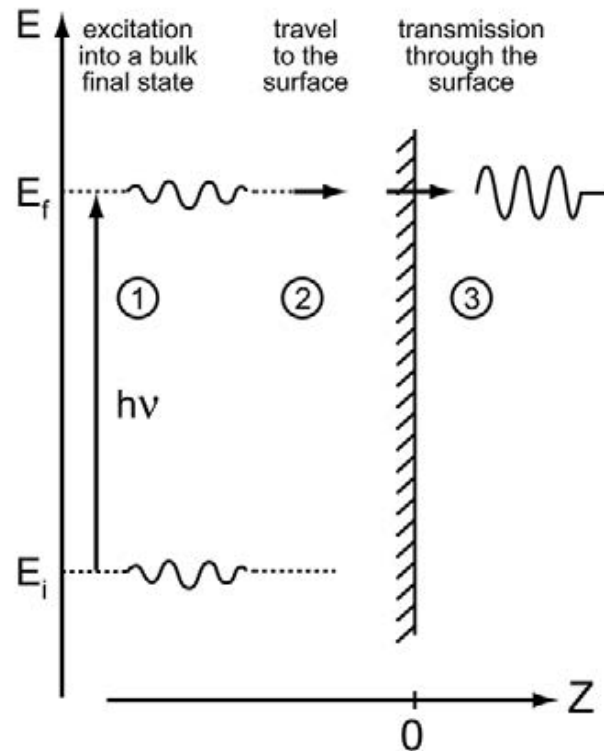
# Фотоэлектрический эффект

Сохранение энергии и импульса

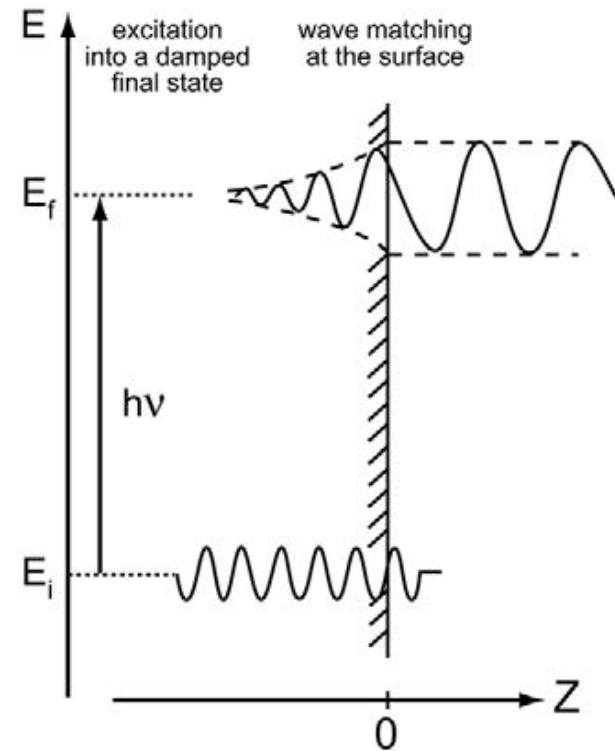
$$E_{\text{kin}} = h\nu - \phi - |E_B| \quad |k| = (2mE_{\text{kin}})^{1/2}/\hbar$$
$$k_f - k_i = G$$



three-step model

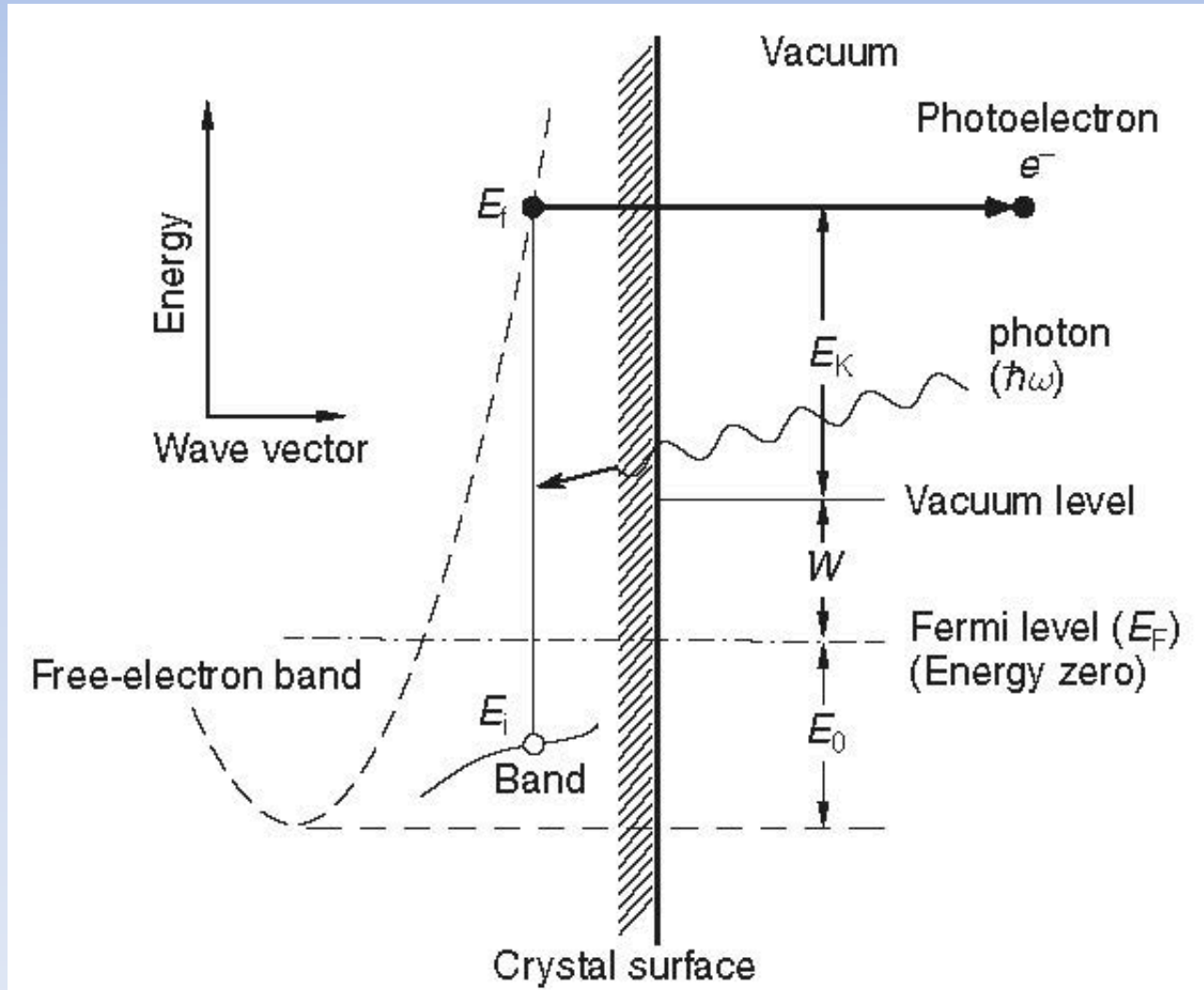


one-step model

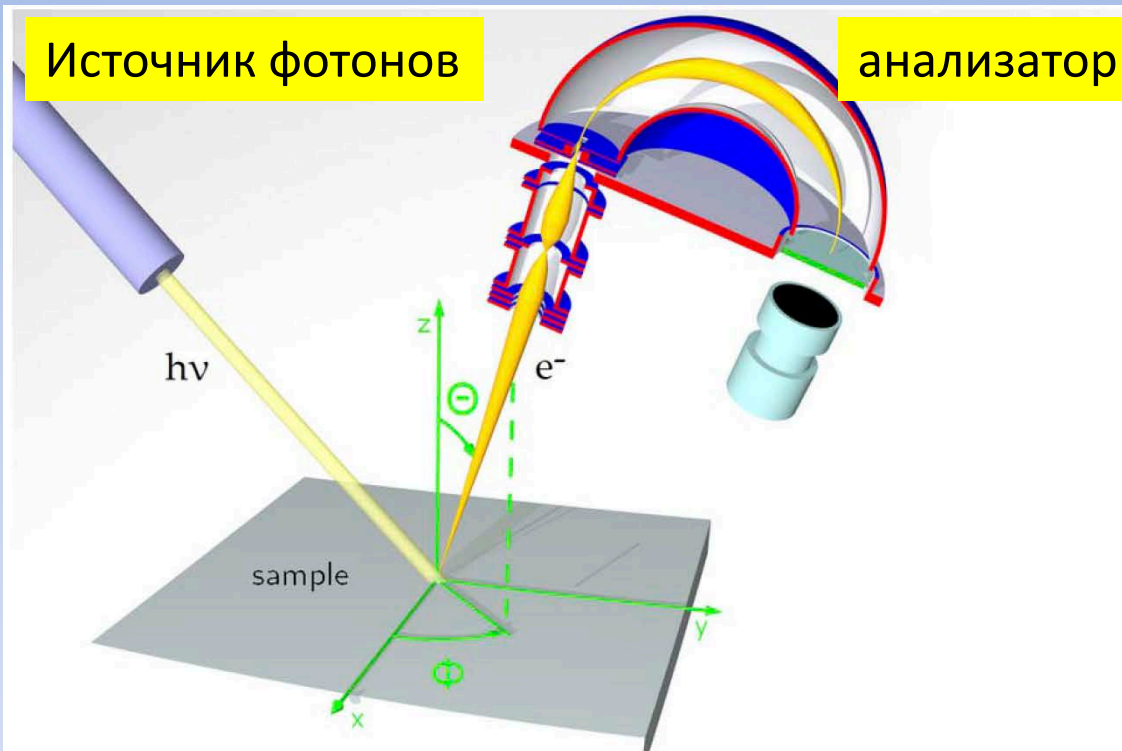




# Процесс эмиссии фотоэлектронов



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



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

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

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

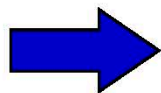
$$K_y = |\vec{K}| \sin\theta \sin\phi$$

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

вакуум

$$E_{kin}$$

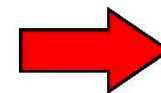
$$\vec{K}$$



Законы сохранения

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

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

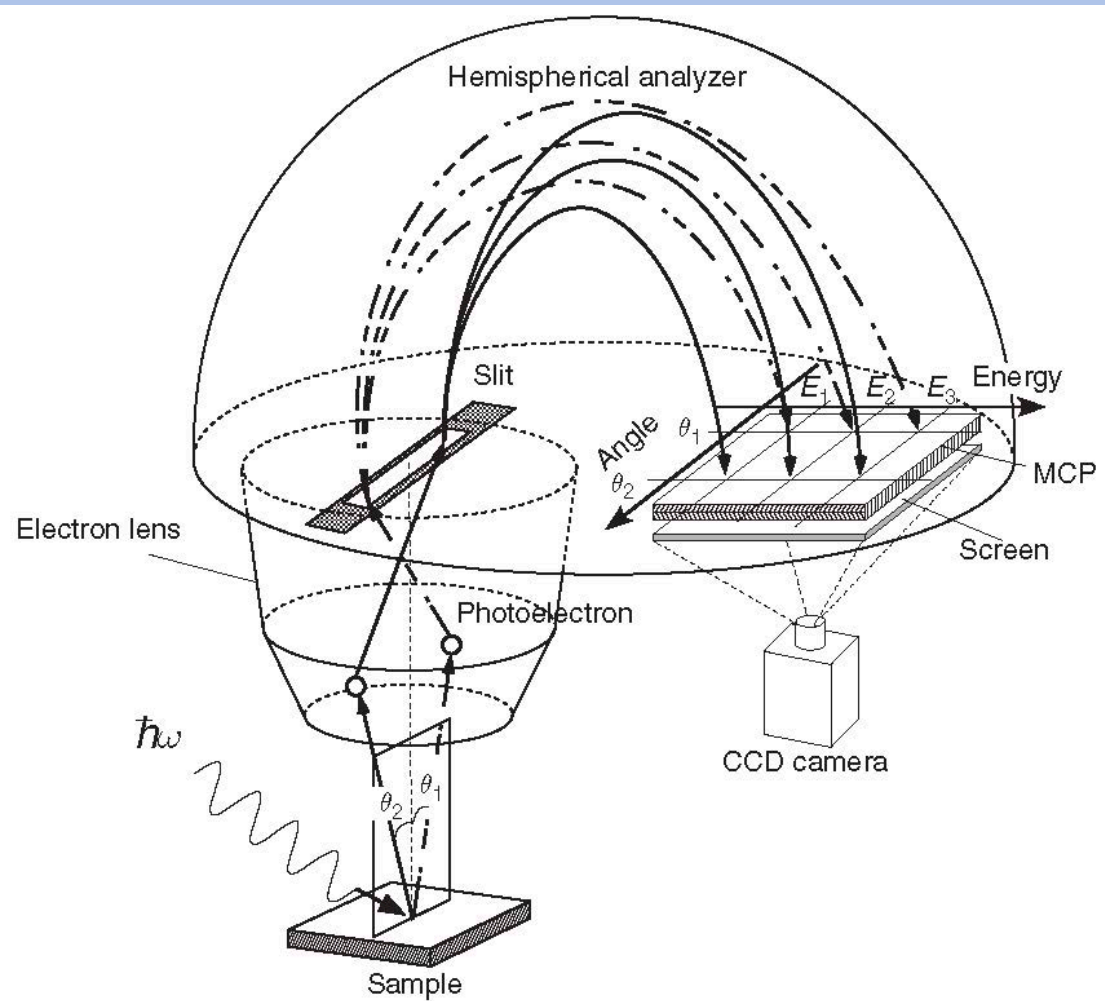


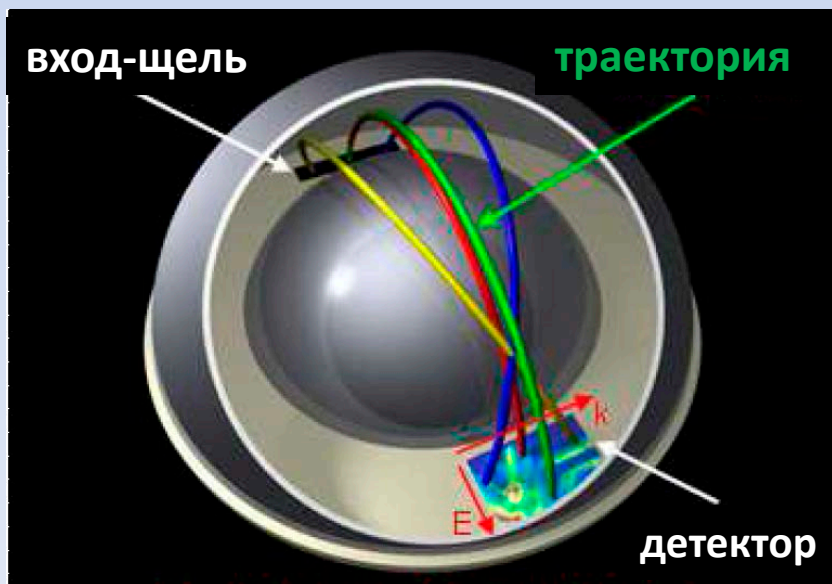
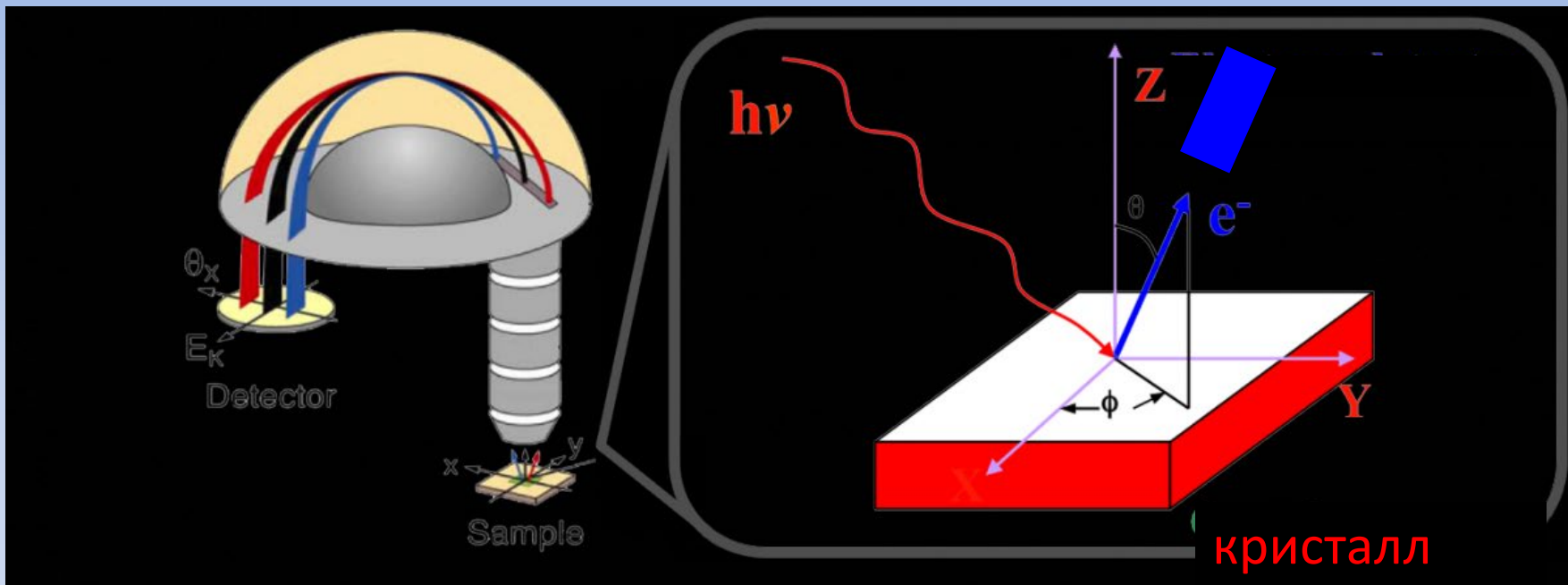
кристалл

$$E_B$$

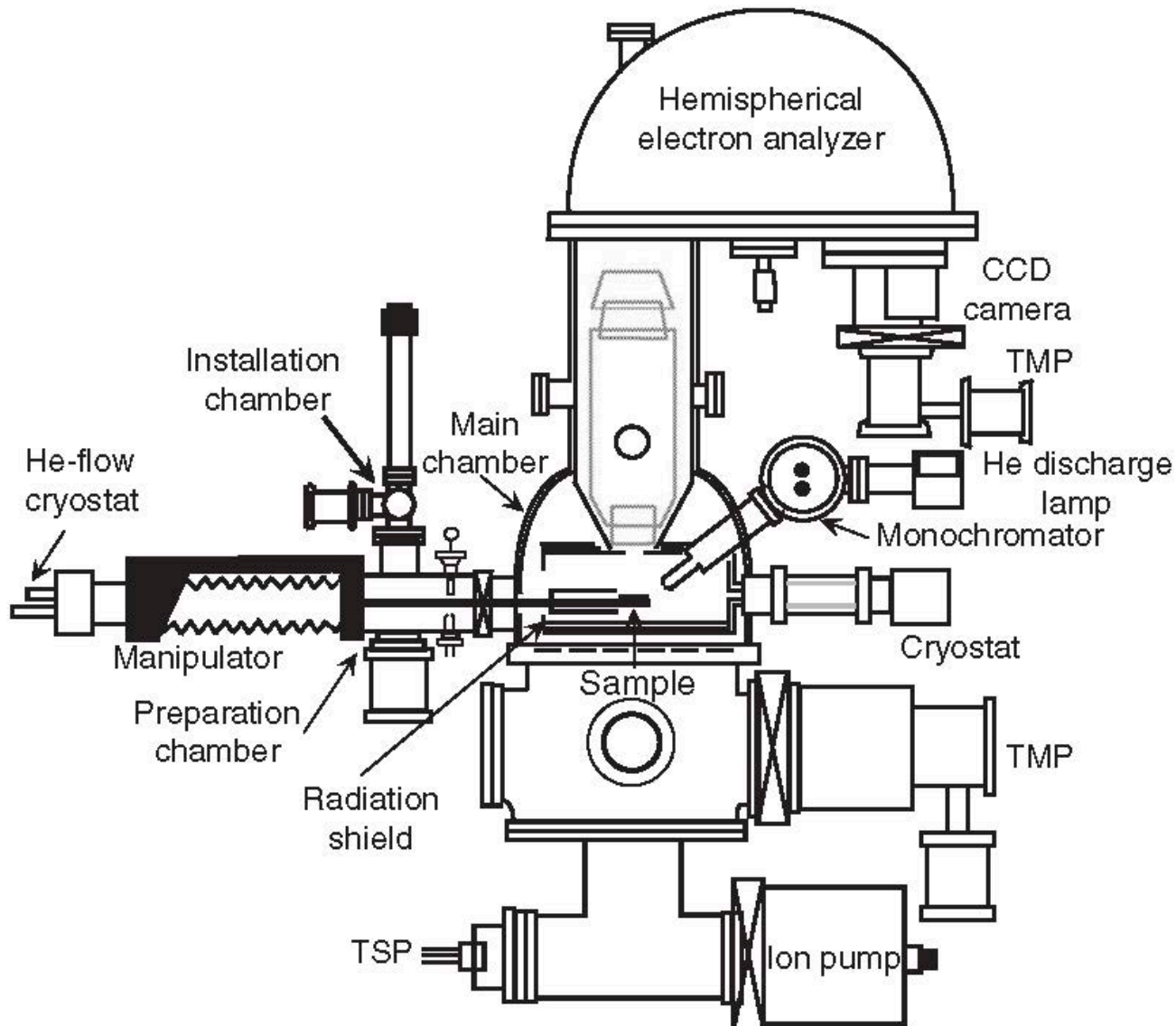
$$\vec{k}$$

# Геометрия анализа пучка





# Устройство спектрометра

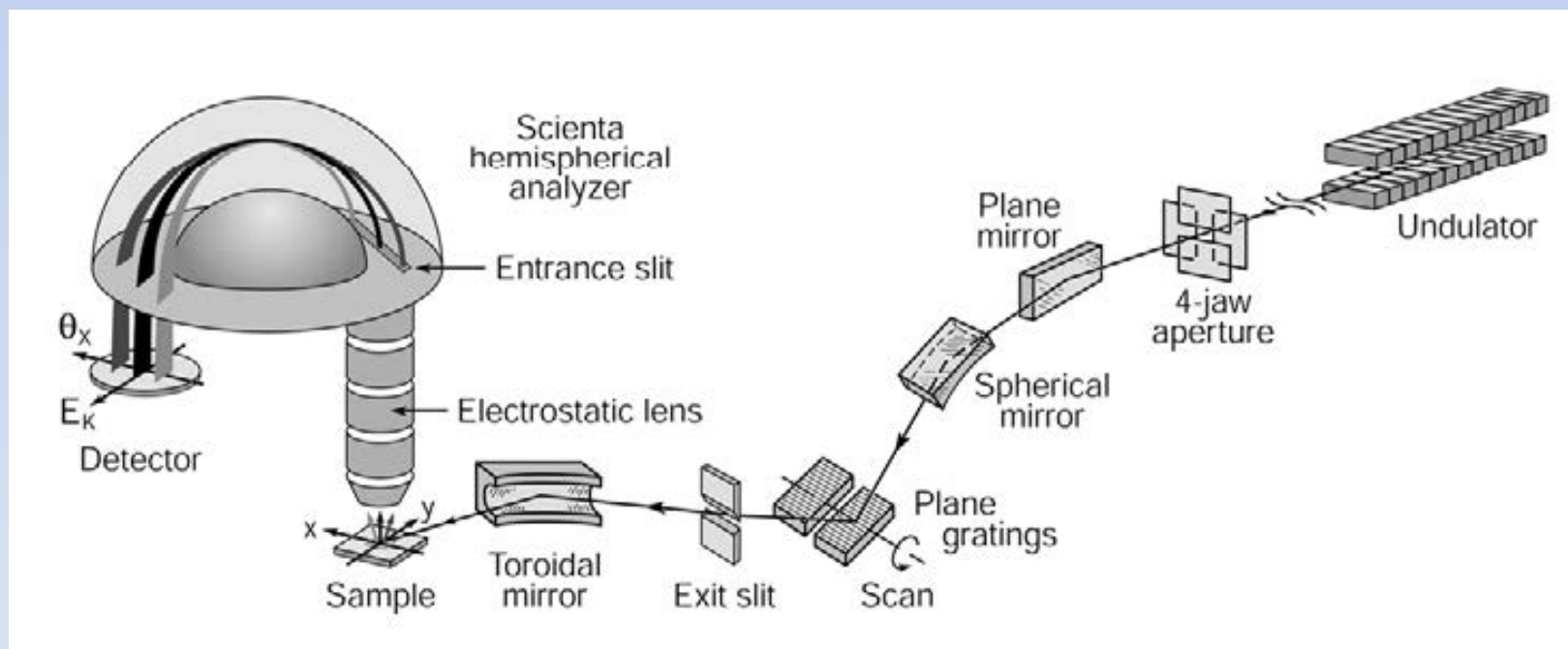




# Синхротрон Frascati

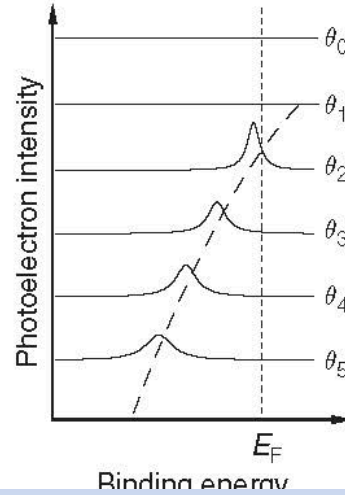
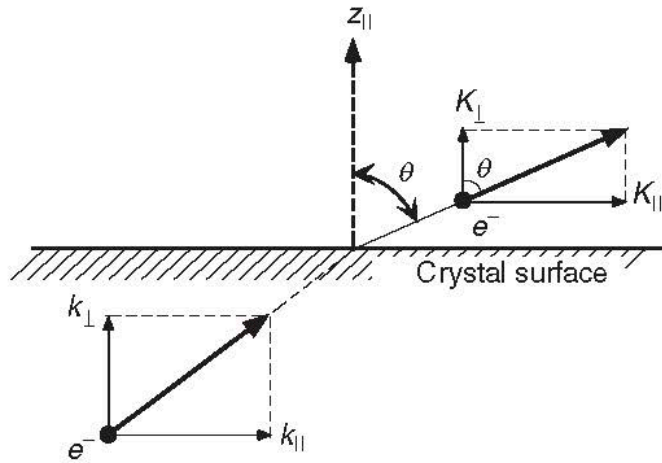


# Схема измерений с пучком на синхротроне

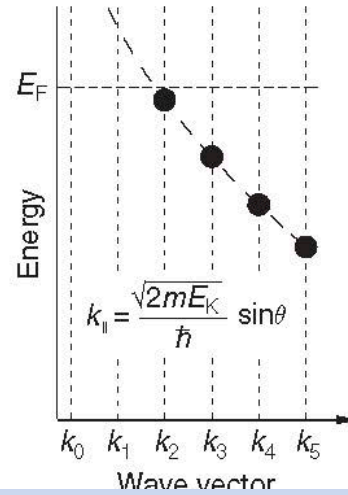




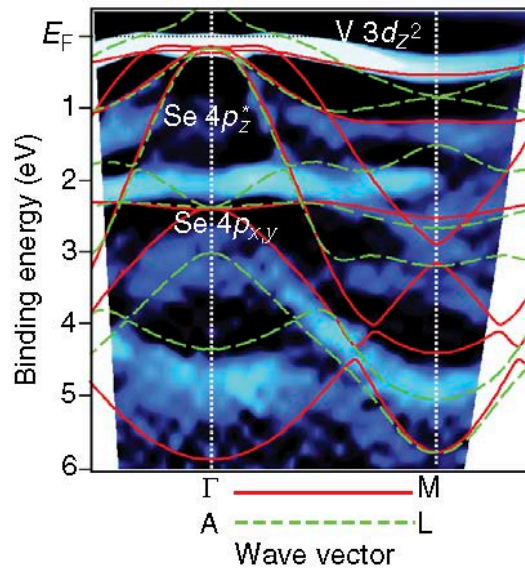
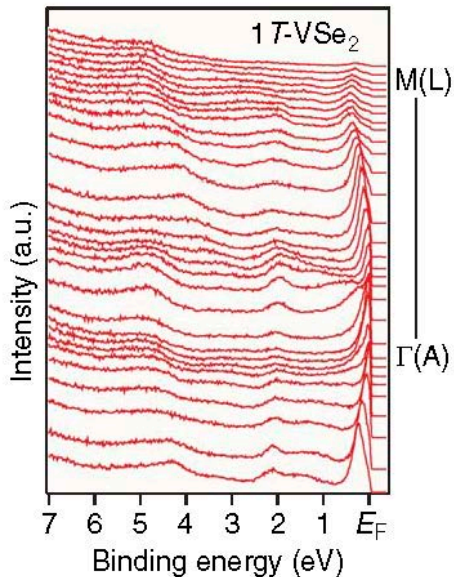
# Восстановление спектра



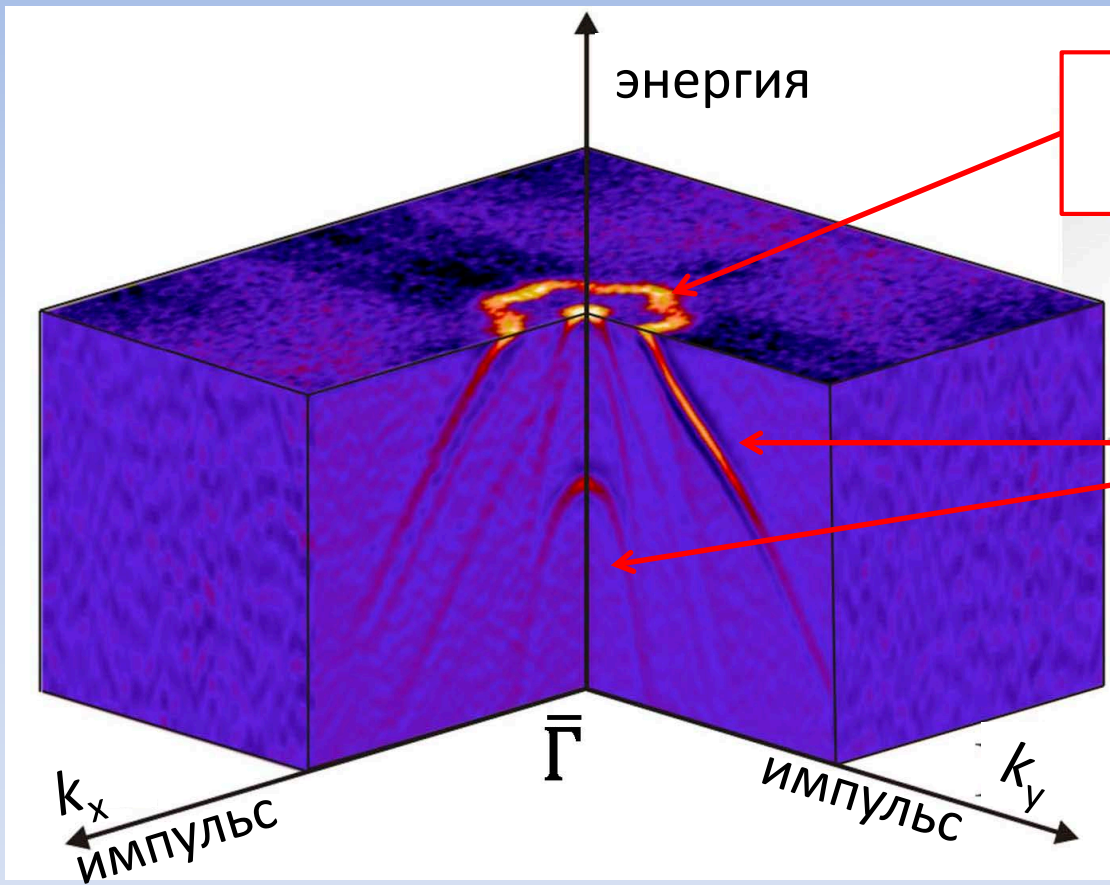
Energy band



Схема

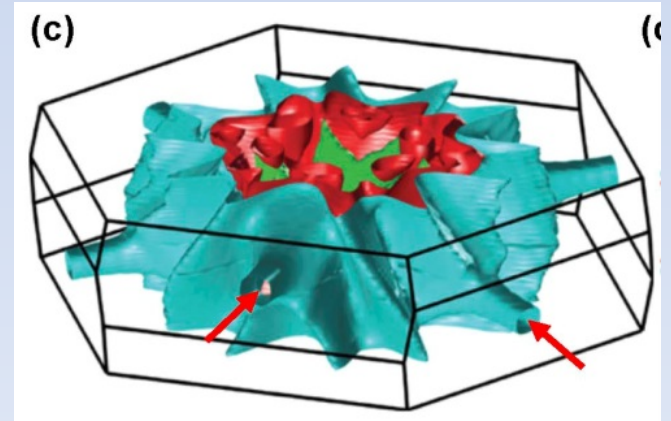


Результат



Контур постоянной энергии

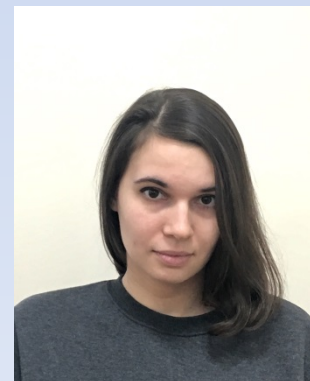
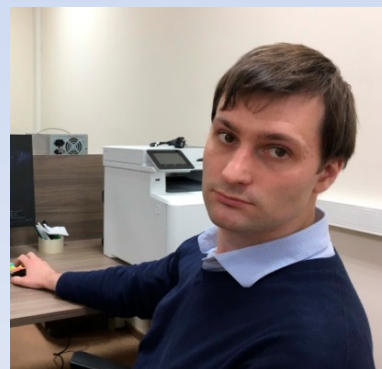
Ветви спектра



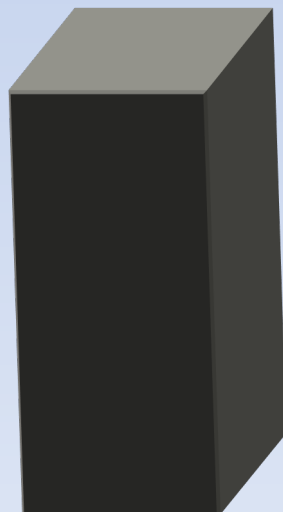
Установка  
фотоэлектронной  
спектроскопии с угловым  
разрешением  
(ARPES) Scienta R-4000



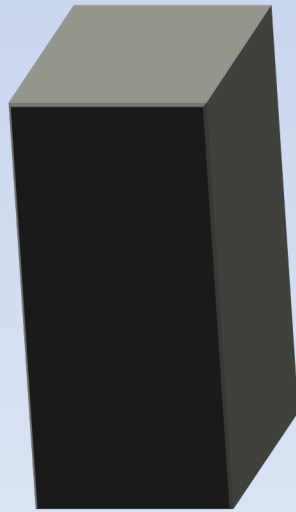
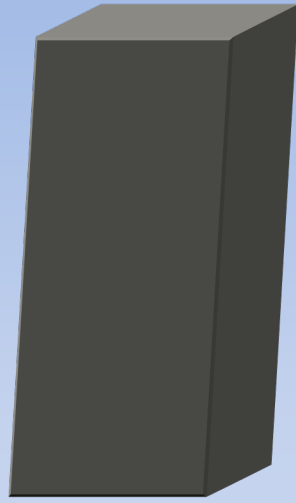
Температура 5-300К,  
Рабочий вакуум  $10^{-11}$ Торр  
Разрешение по энергии 1 мэВ  
Энергия фотонов 21эВ, 23эВ, 42эВ  
Разрешение по спину: 2D

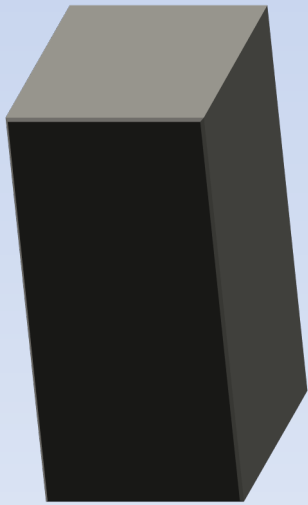
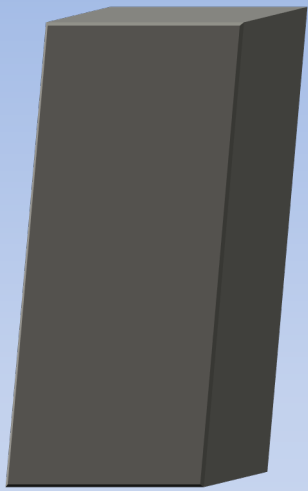


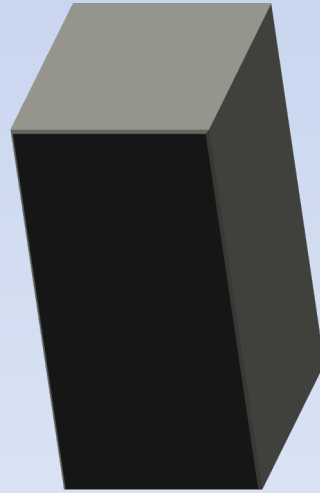
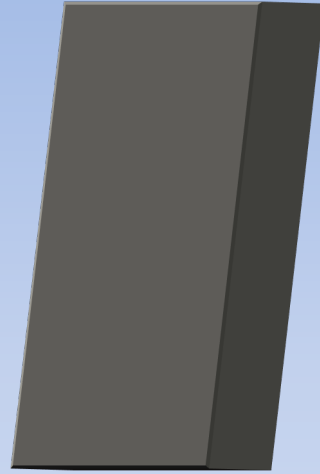
**Для измерений  
необходима чистая  
поверхность кристалла**

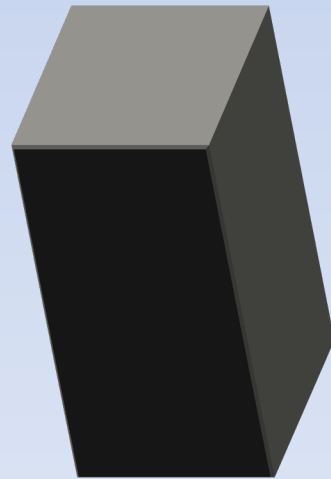
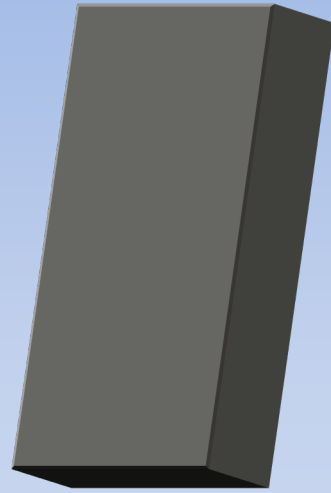


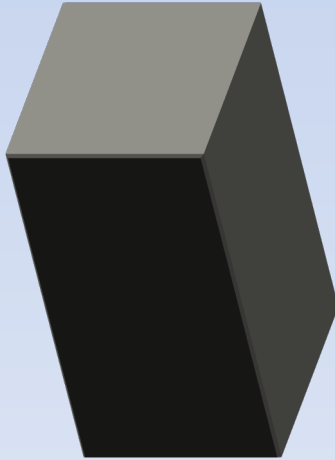
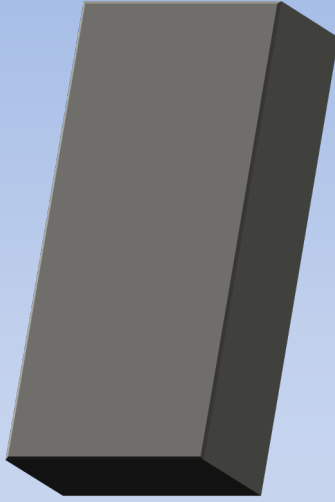


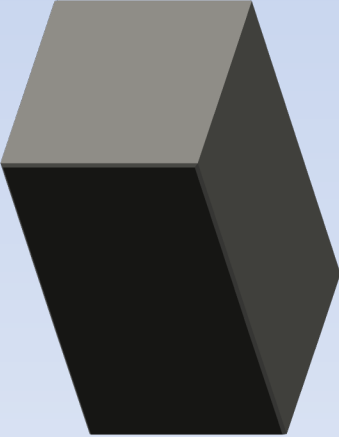
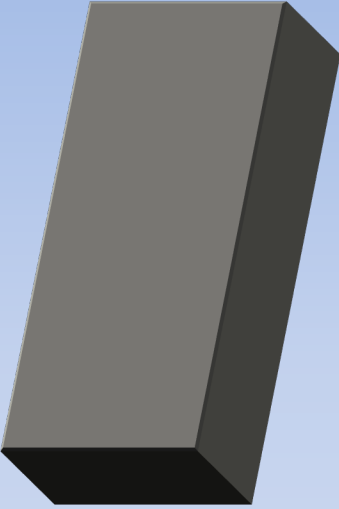




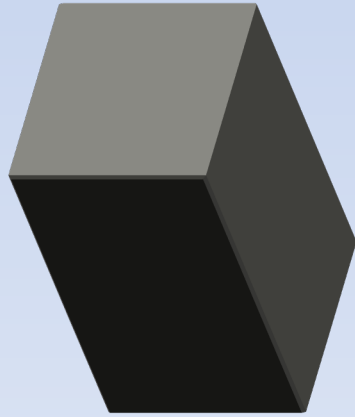
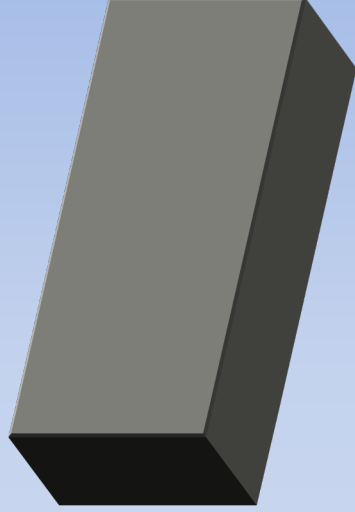


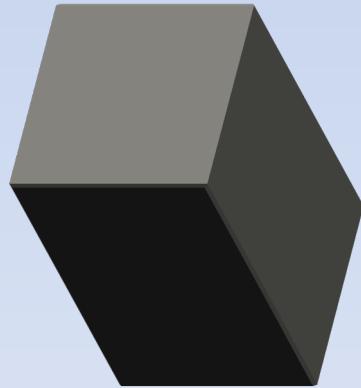
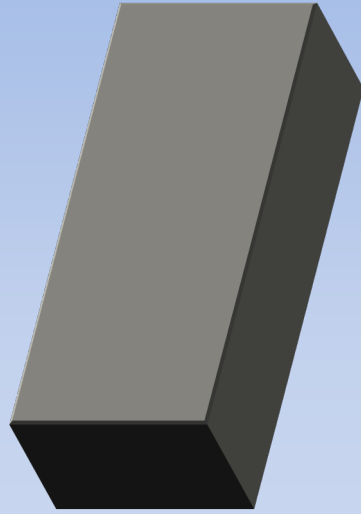


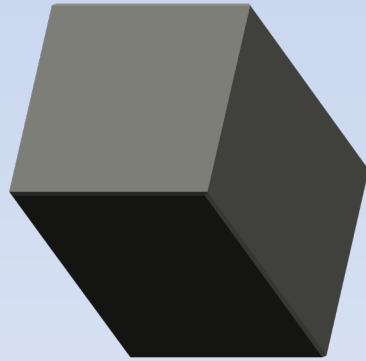
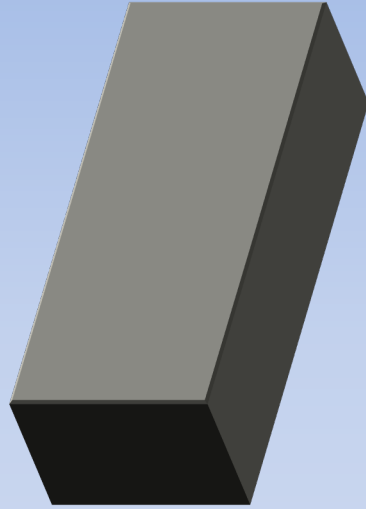


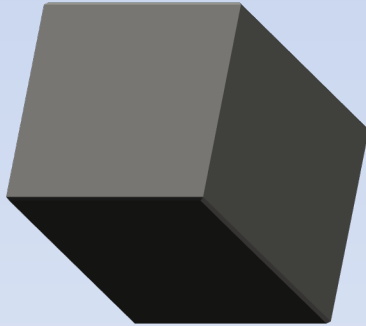
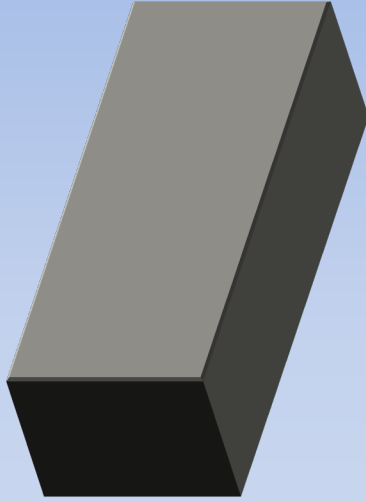


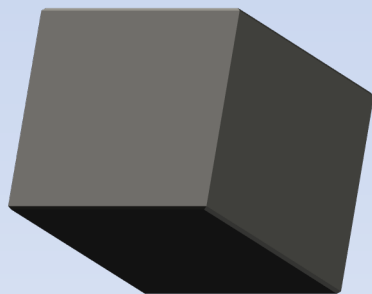
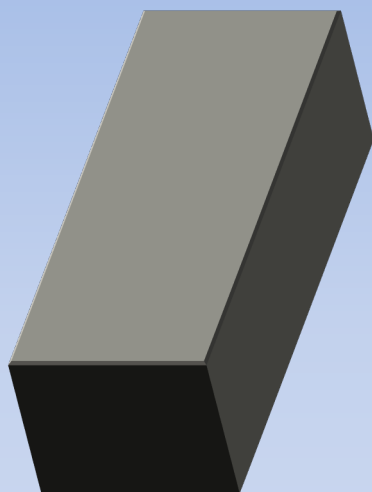


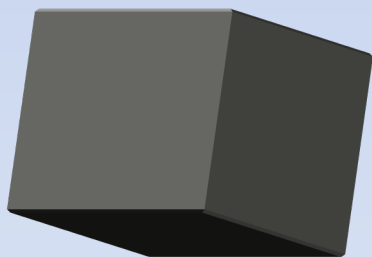
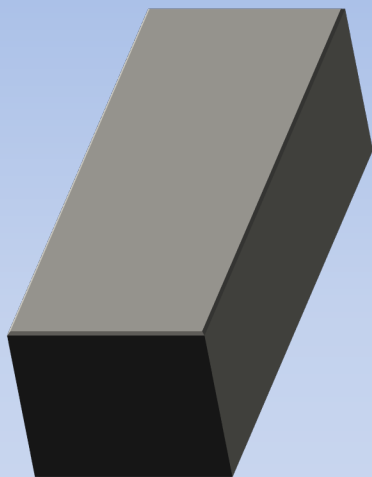




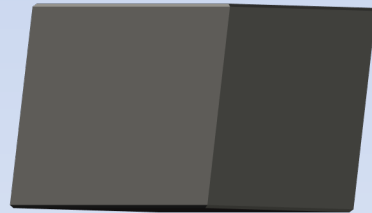
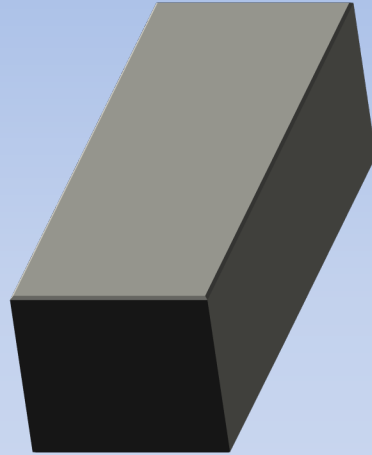


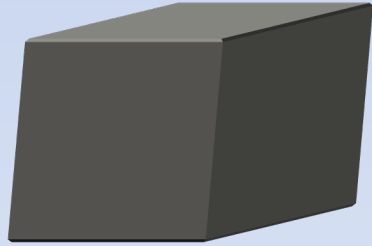
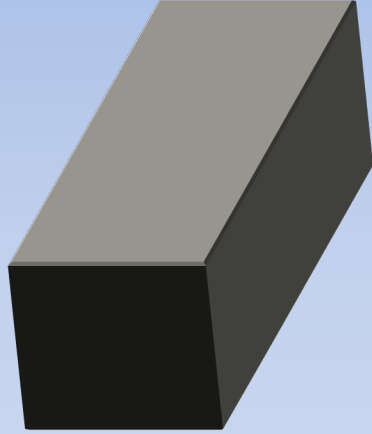


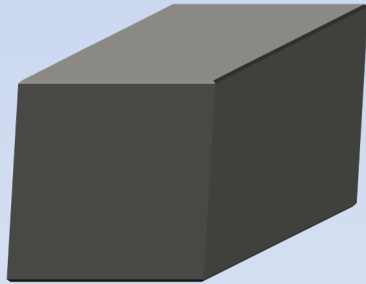
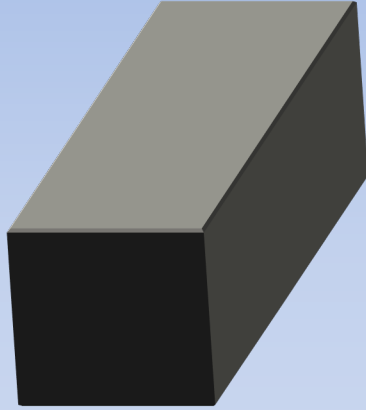


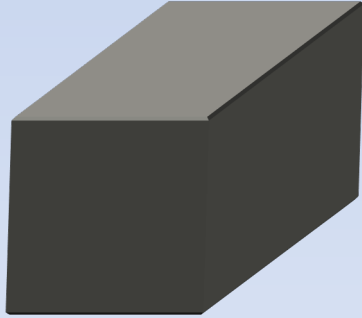
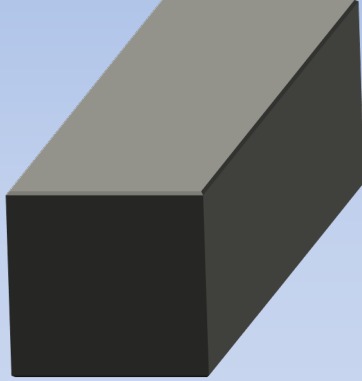




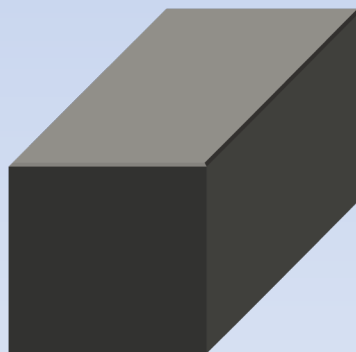
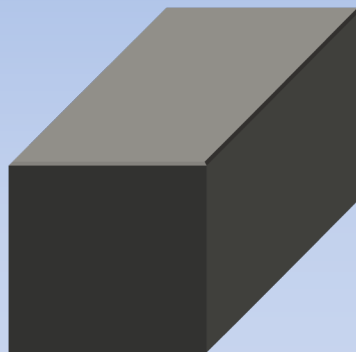




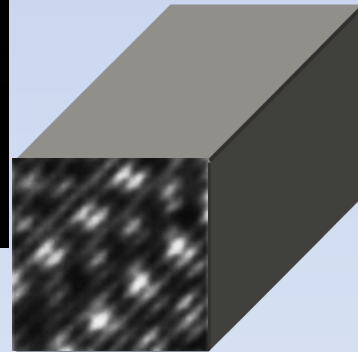
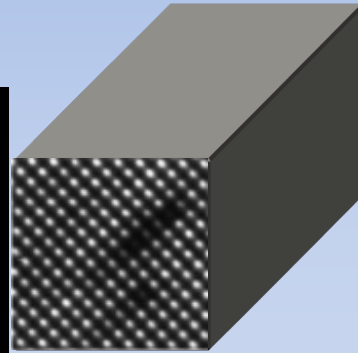
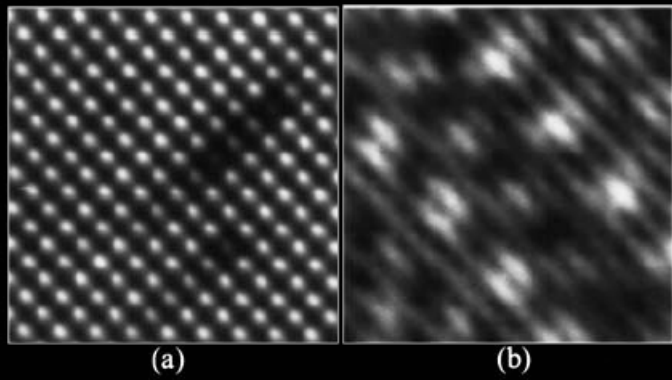




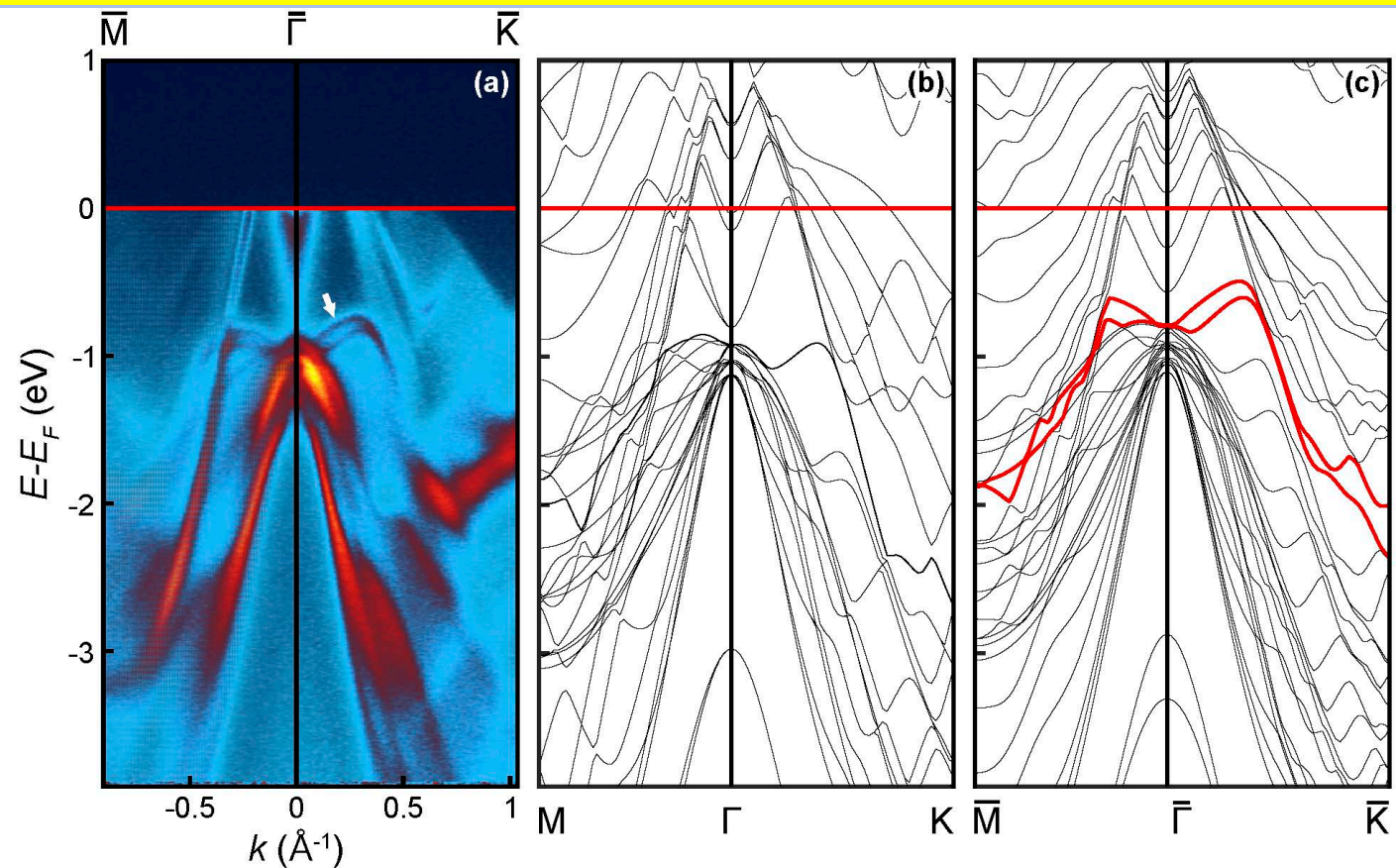
**Для измерений  
необходима чистая  
поверхность кристалла**



Для измерений  
необходима чистая  
поверхность кристалла



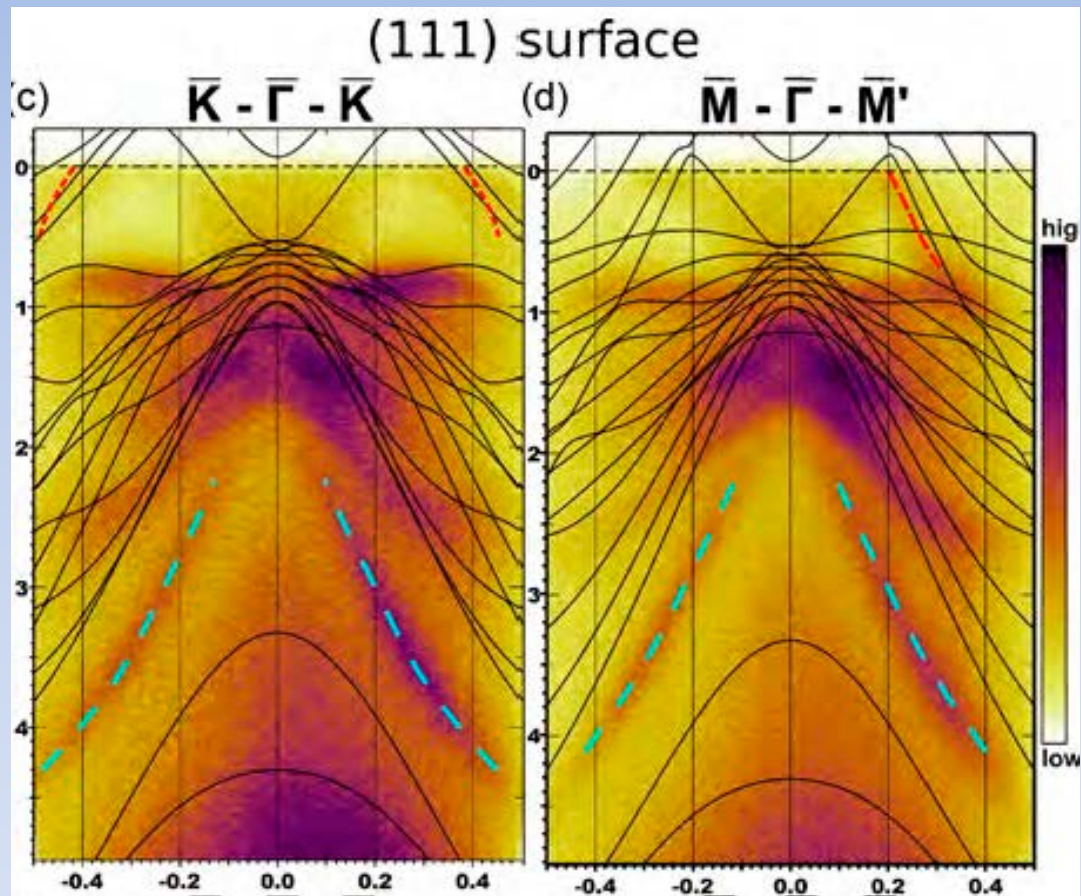
# Примеры недавних измерений и расчетов



Зонная структура сверхпроводника  $\text{Sn}_4\text{As}_3$

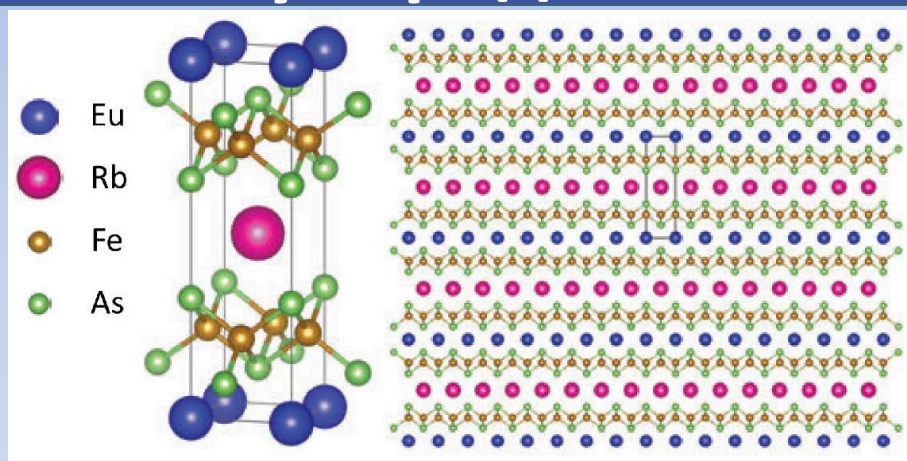
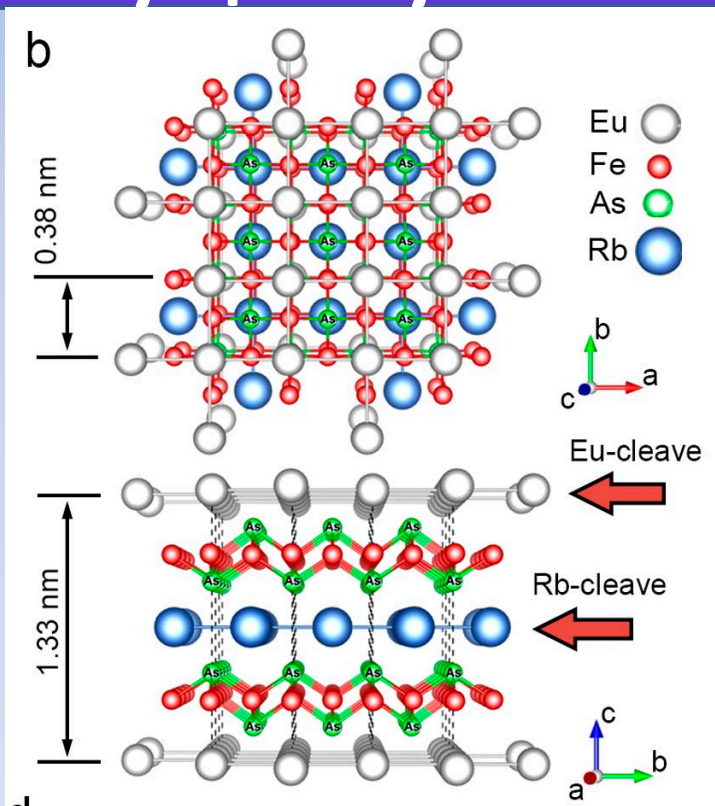


# Примеры недавних измерений



Зонная структура сверхпроводника SnAs

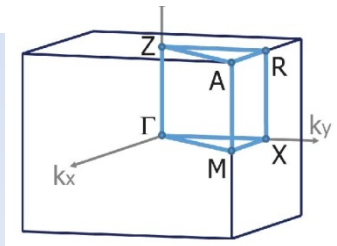
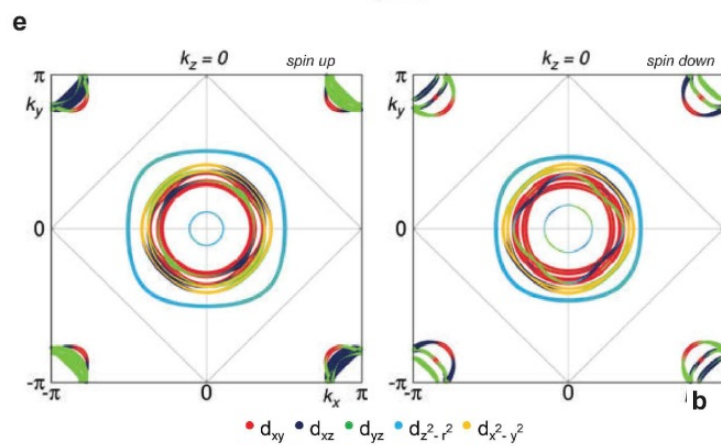
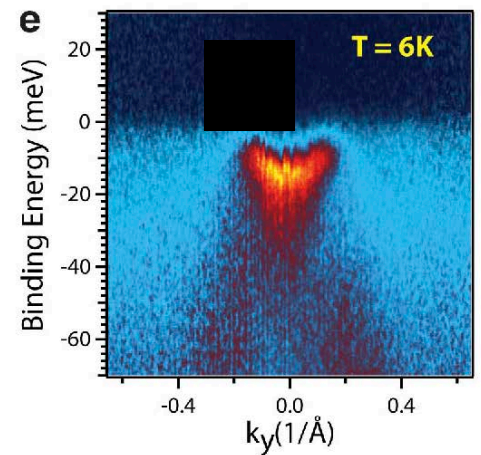
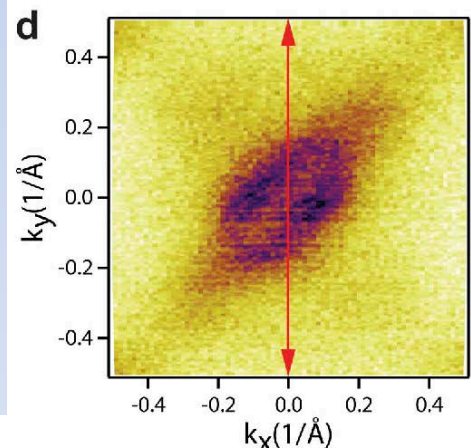
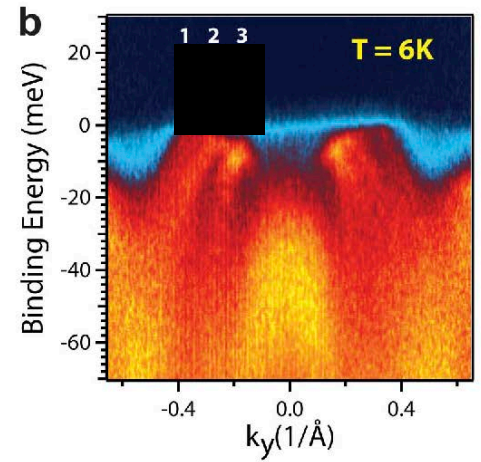
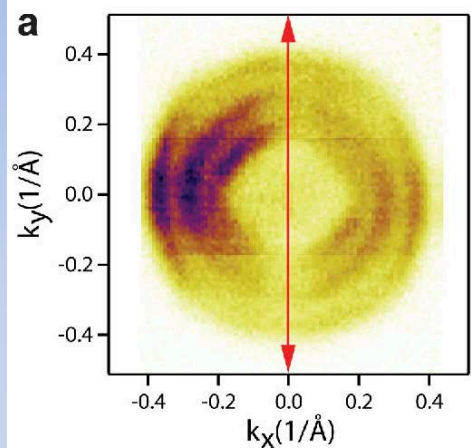
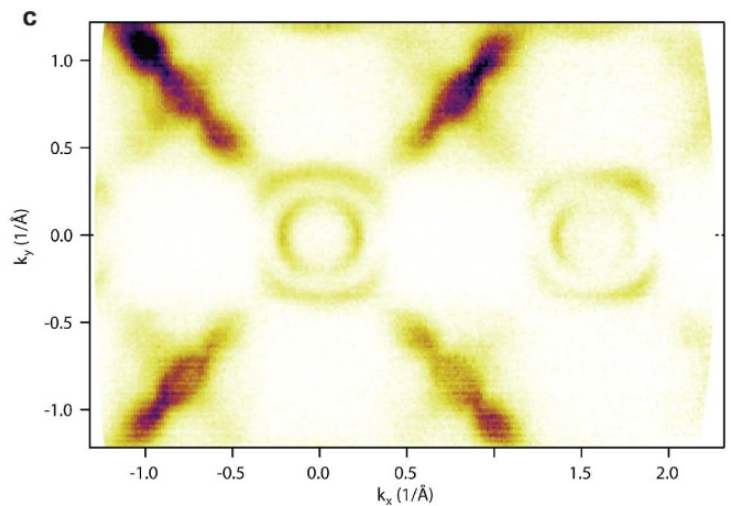
# Пример решения научной проблемы: как сверхпроводящее спаривание в $\text{RbEuFe}_4\text{As}_4$ сосуществует с магнитным упорядочением



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

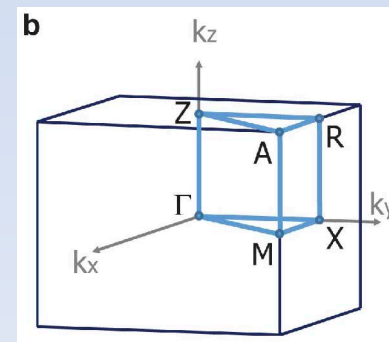
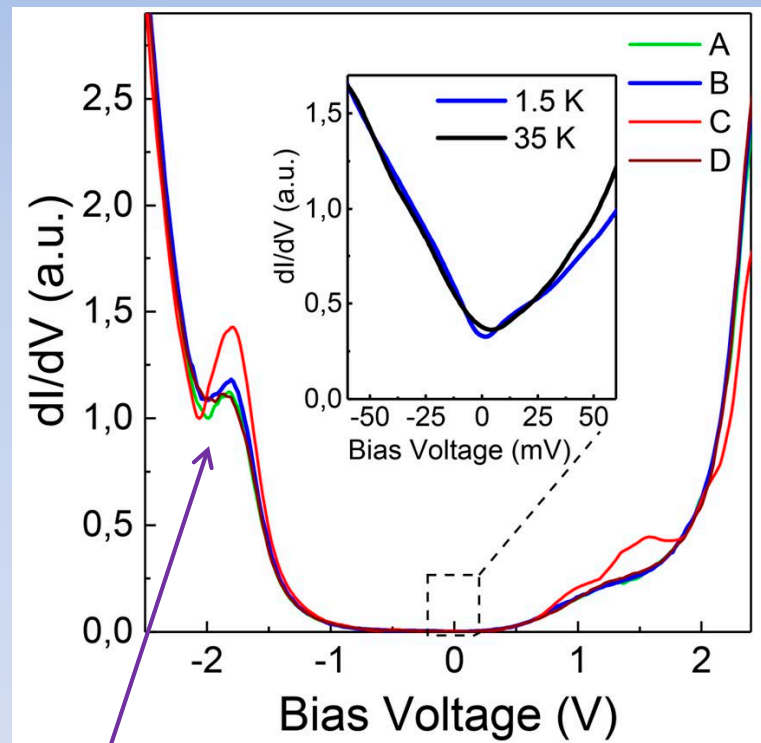
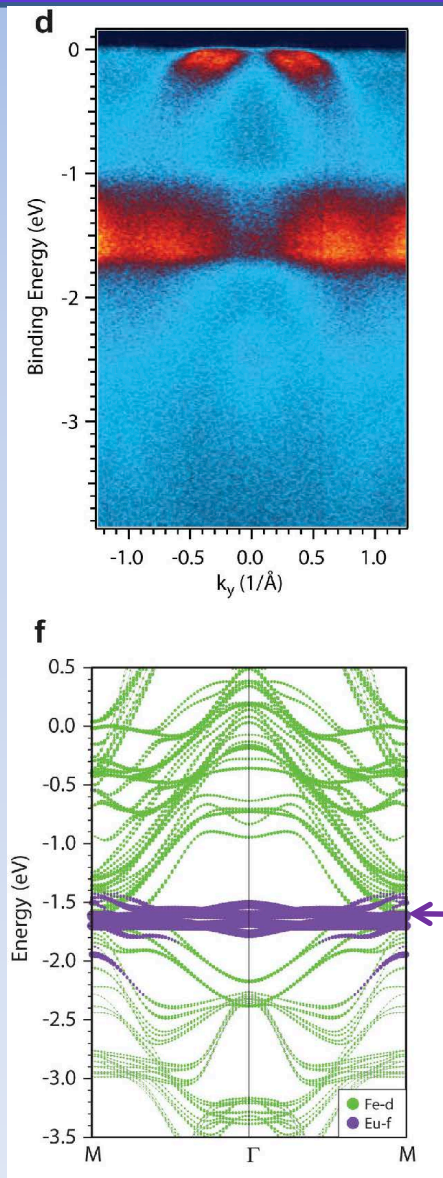
Как АФМ порядок Eu- сосуществует со сверхпроводимостью электронов Fe ?

# ARPES зонная структура RbEuFe<sub>4</sub>As<sub>4</sub>



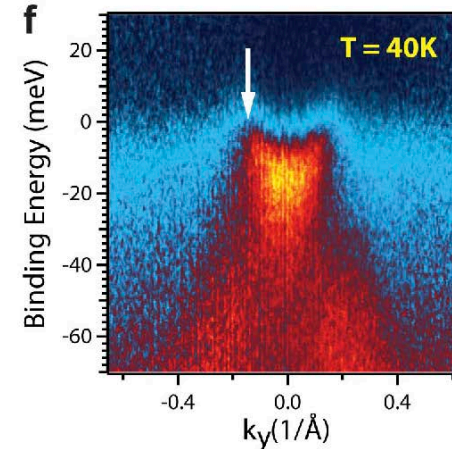
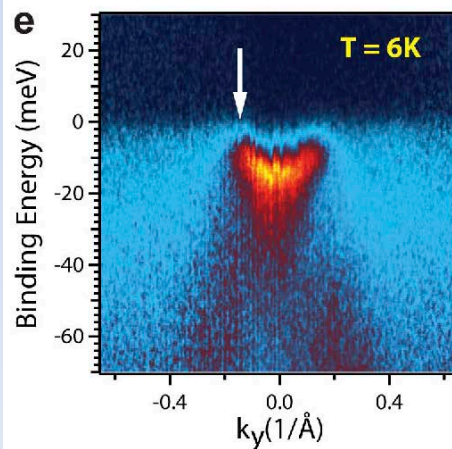
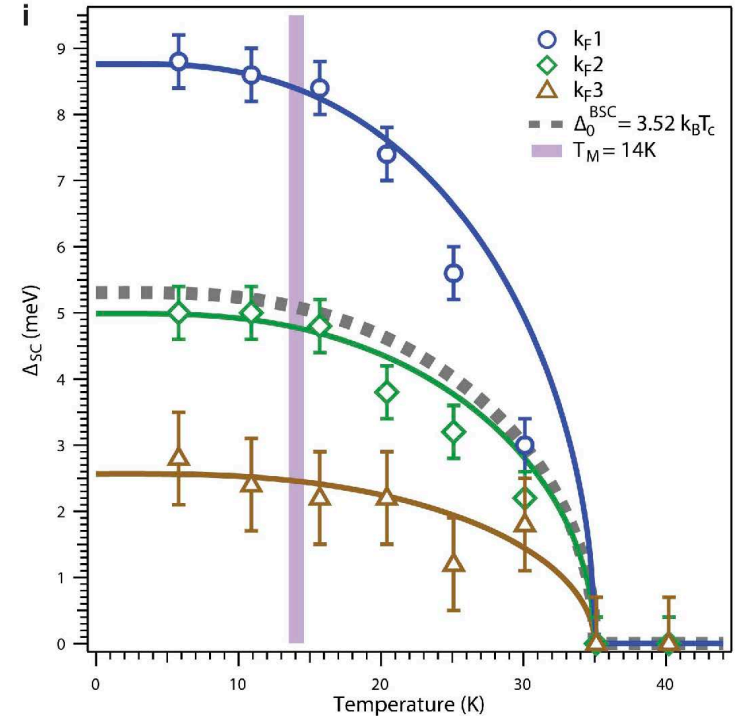
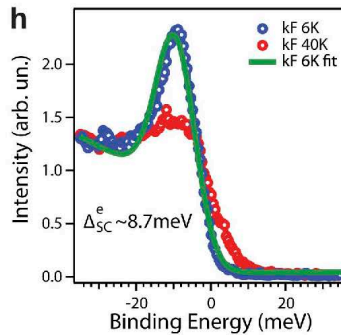
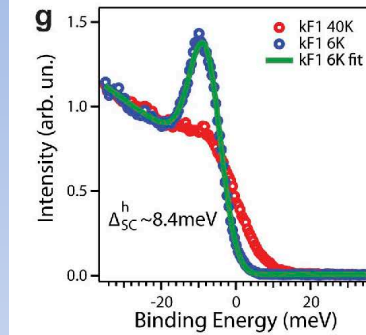
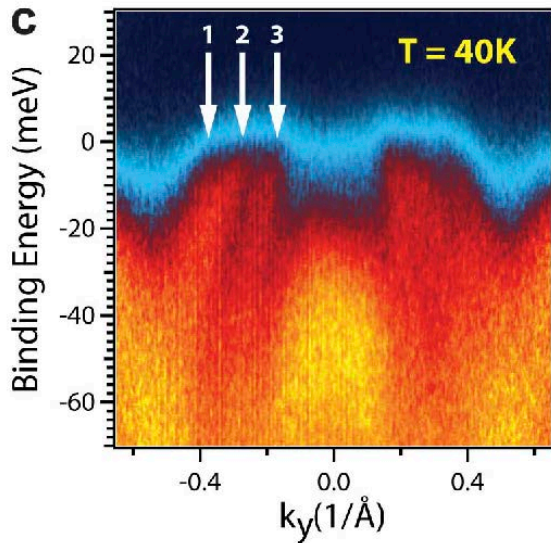
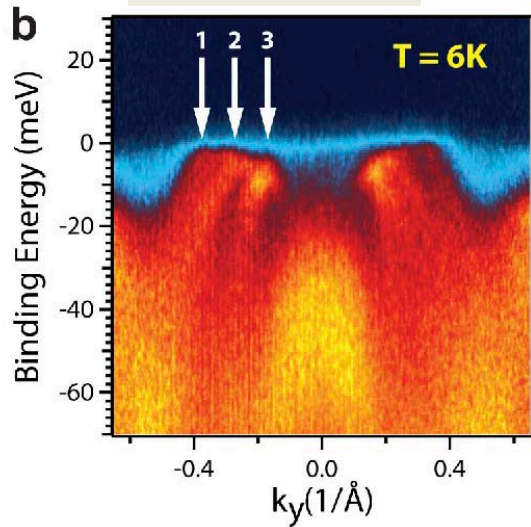


# STS и ARPES спектроскопия состояний Eu



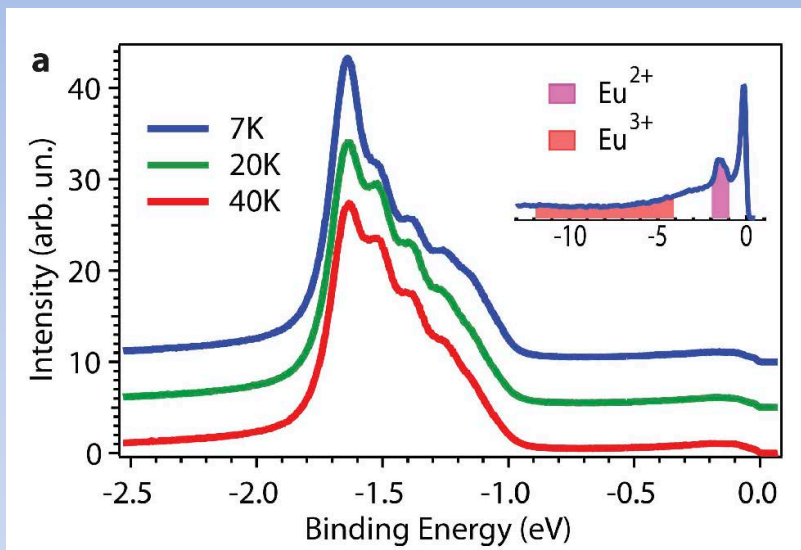
# Сверхпроводящие щели спектре ARPES

Hole pockets

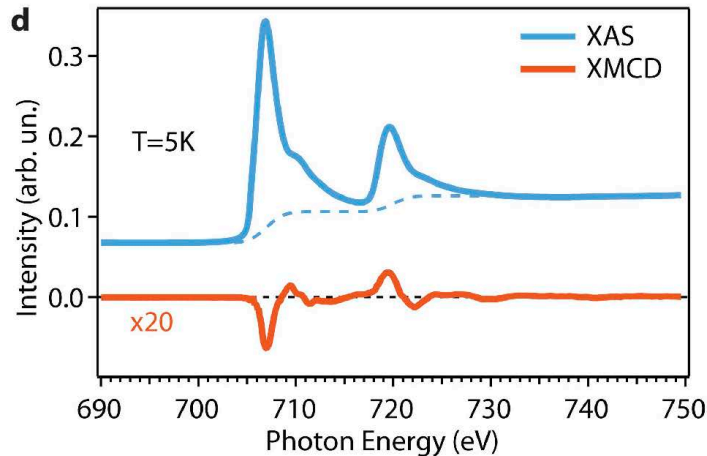
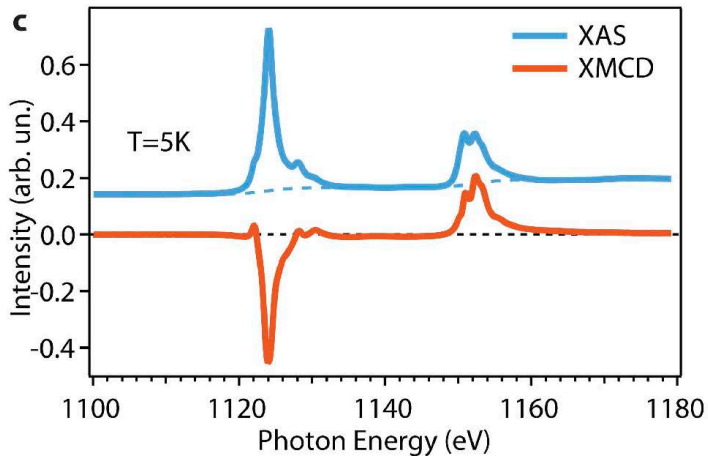


Electron pockets

# Магнитное состояние Eu

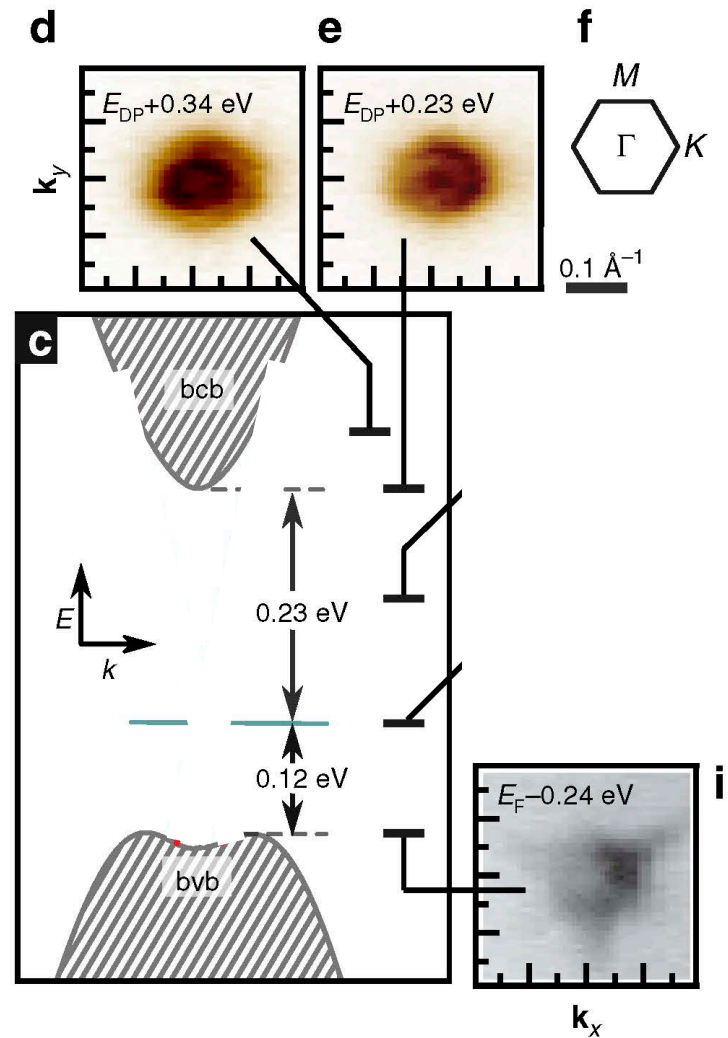


ResPES измерения на порге перехода Eu 4d→4f при энергии фотонов 142eV



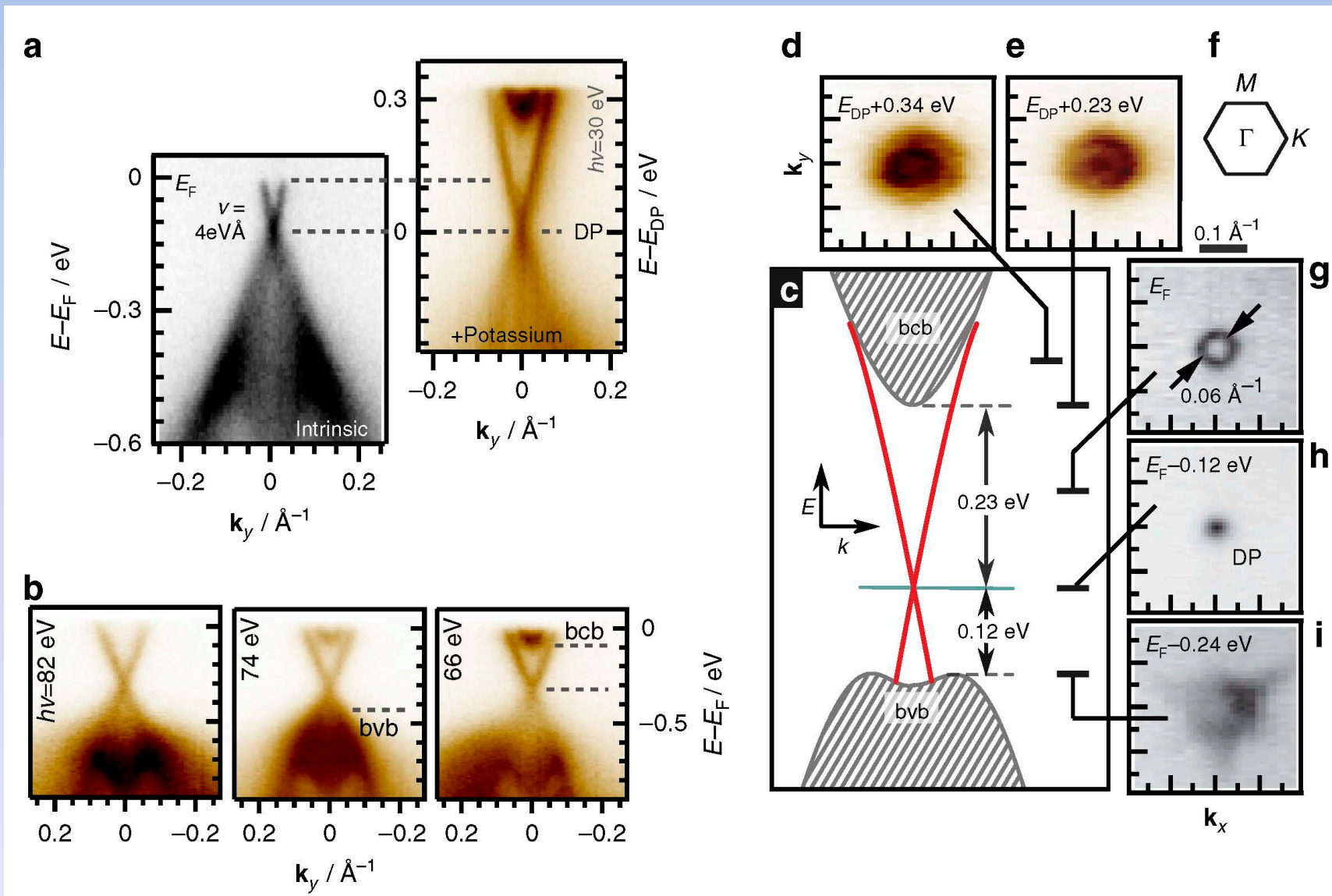
XMCD  
измерения:  
 $M(\text{Eu})=7.04\mu_B$   
 $M(\text{Fe})=0.03\mu_B$

# ARPES спектр $E(k)$ топологического изолятора BiSbTe

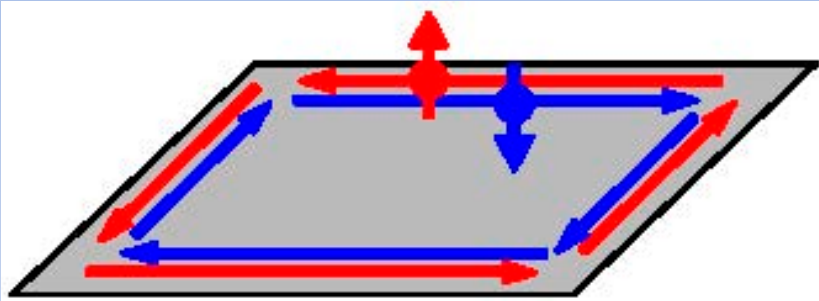




# ARPES спектр $E(k)$ топологического изолятора BiSbTe

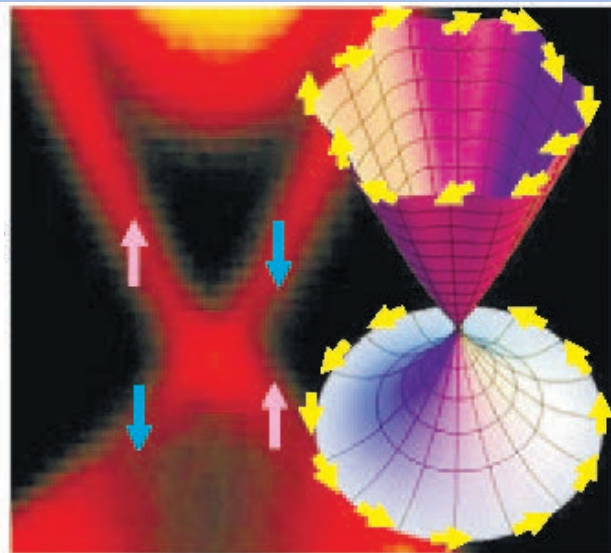


# Топологический изолятор. Что это? Для чего ?

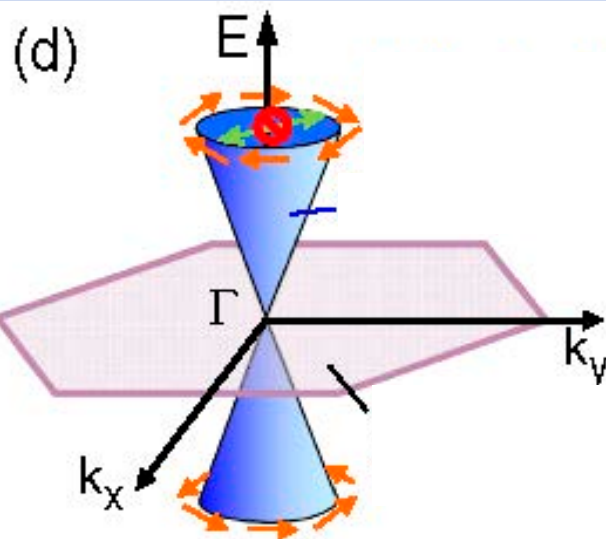


- Симметрия  $\in$  топология
- Пространство-время
- Киральные состояния
- 3D- аналог графена ?
- Магнитный монополь ?
- Фермион Майорана
- Спинтроника
- Квантовые вычисления
- .....

энергия



импульс

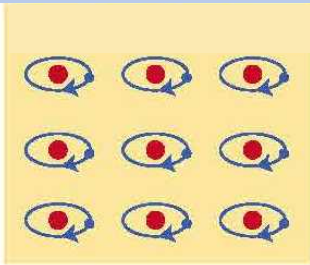


# Топологический изолятор: топология

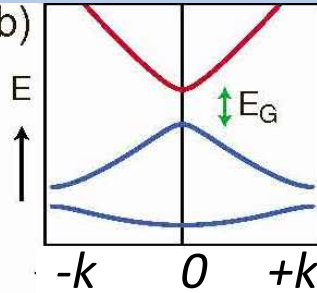
атомный  
изолятор

Зонная  
структура

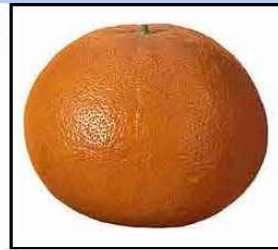
(a)



(b)

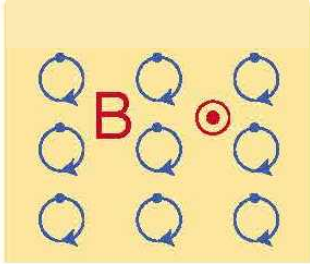


(c)

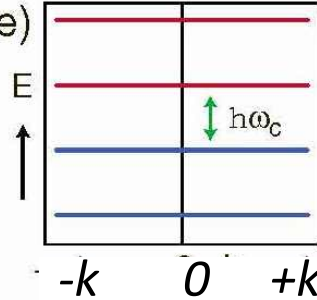


$$\gamma = 0$$

(d)



(e)



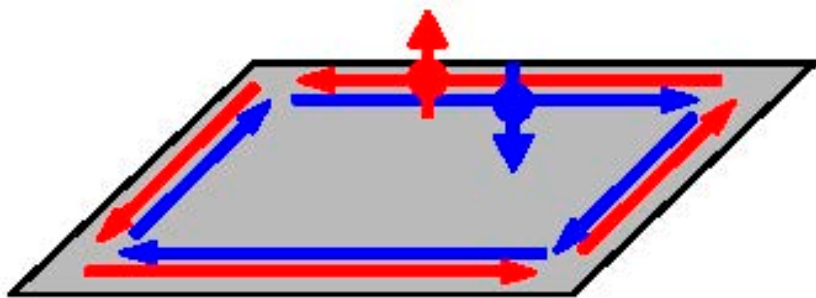
(f)



$$\gamma = 1$$

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)

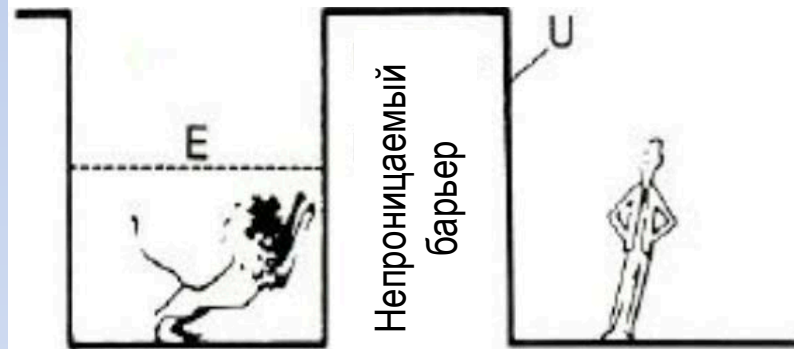
2. Сканирующая туннельная  
микроскопия/спектроскопия (STM/STS)

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

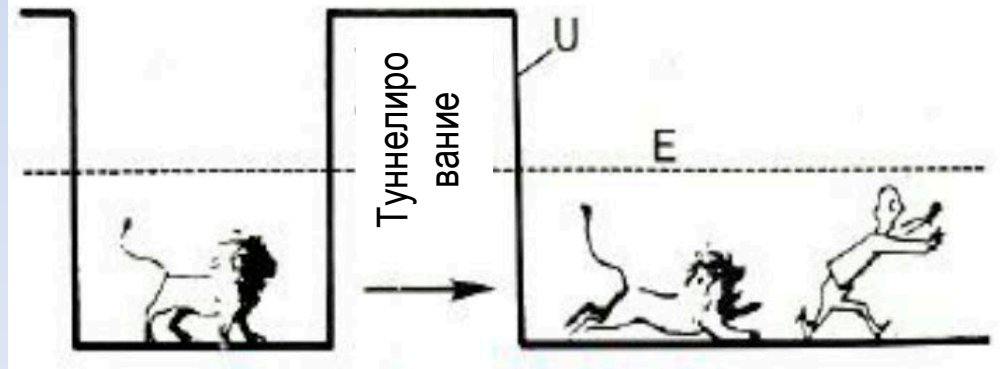
Фотон:  $k=2\pi/\lambda$ ;  $\lambda=c/f$ ;  $E=hf$

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



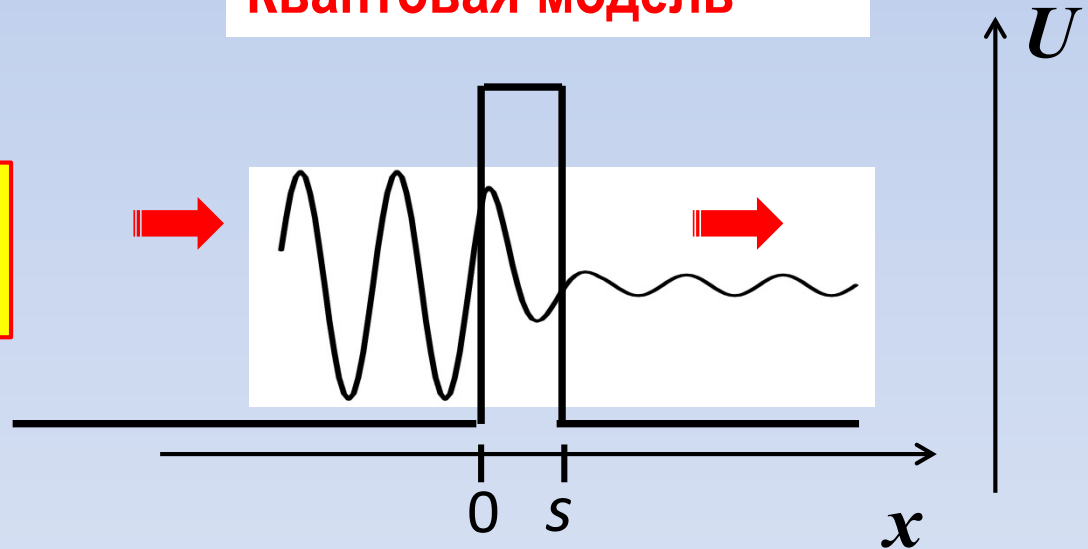
# Основы квантовой механики: частица-волна $\cos(kx + \omega t)$

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



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



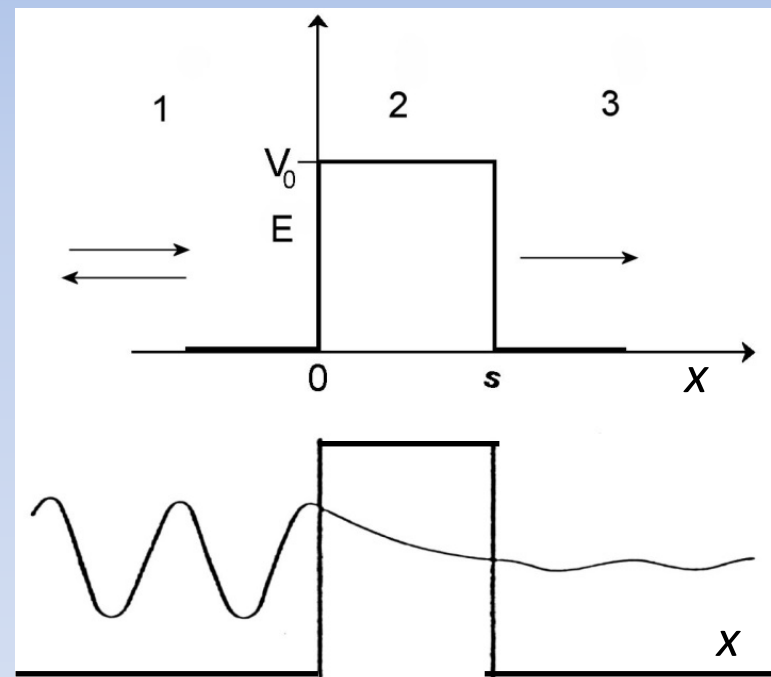
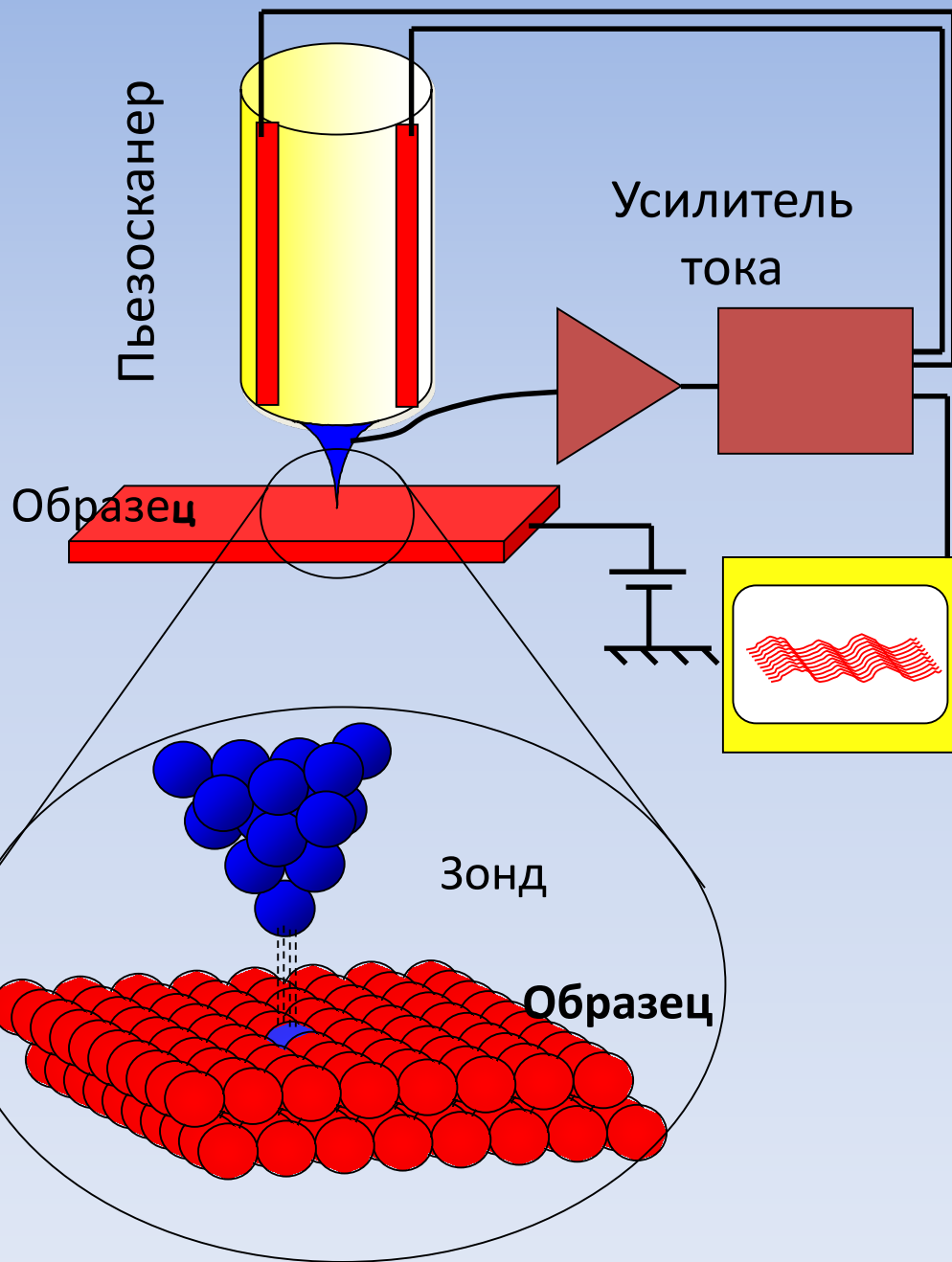
# Сканирующая туннельная микроскопия и спектроскопия

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



**1986**

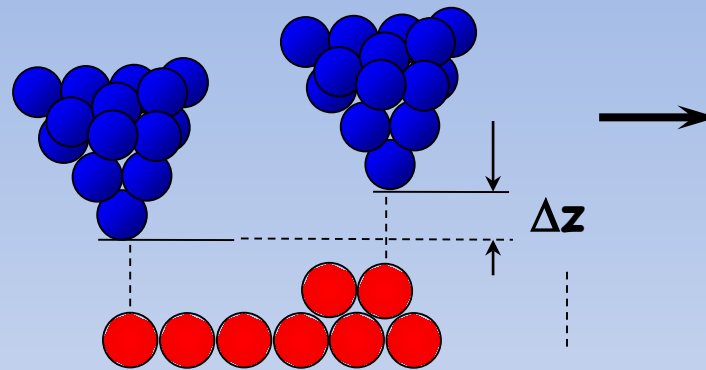
# Сканирующая туннельная микроскопия (STM)



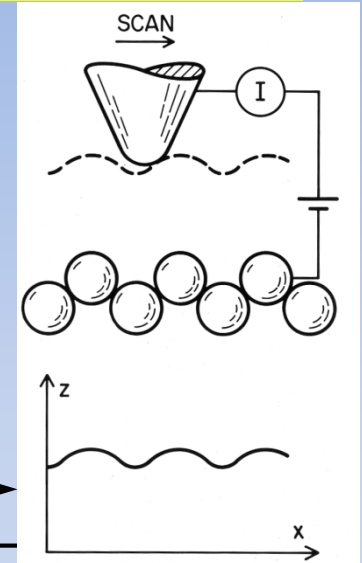
$$T \propto e^{-2ks}$$

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

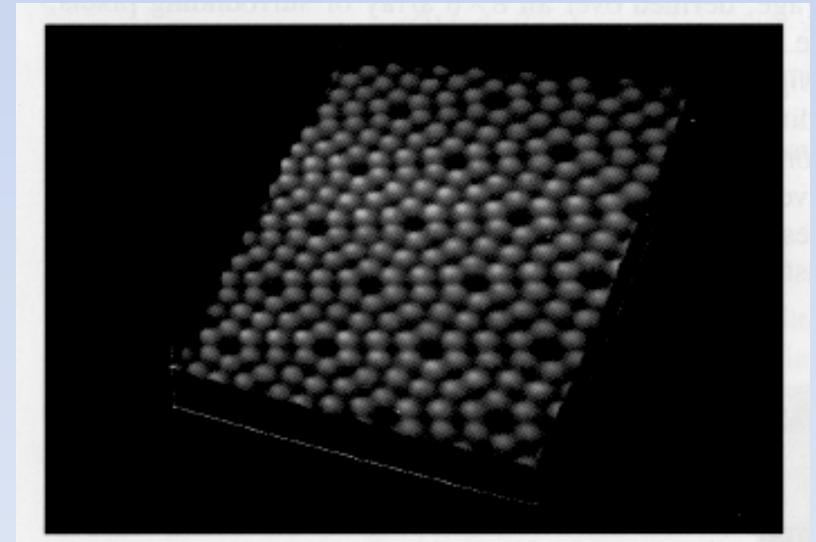
# Режим 1: Фиксированный туннельный ток (STM)



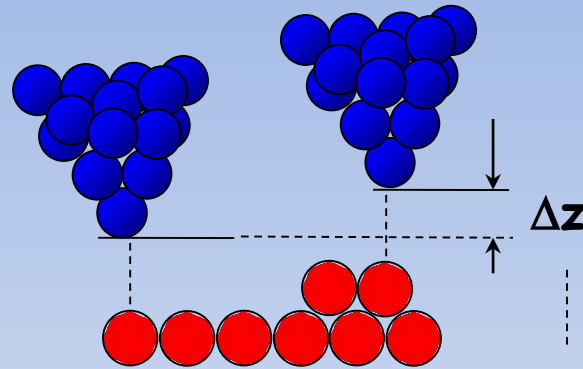
Рельеф поверхности



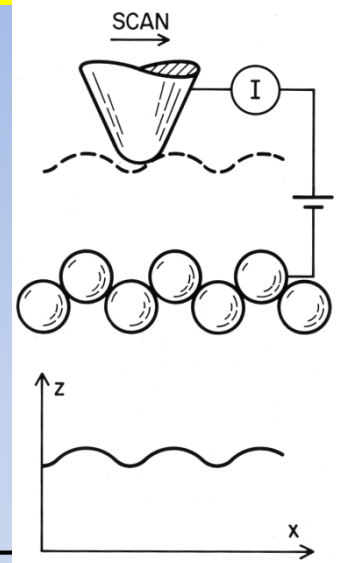
Изображение  
реконструированной  
поверхности Si(111)



# Режим 1: Фиксированный туннельный ток (STM)

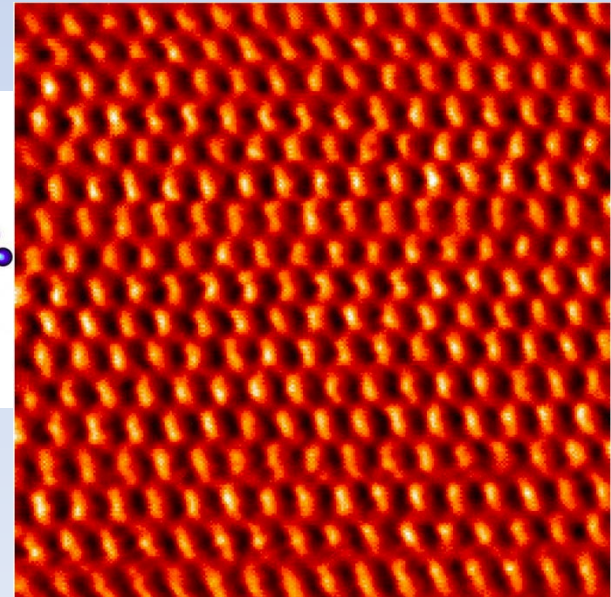
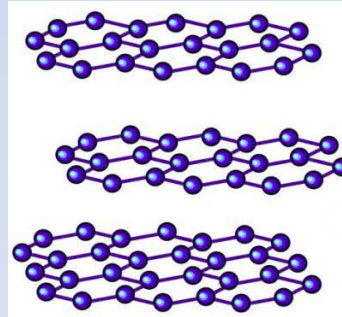


Рельеф поверхности

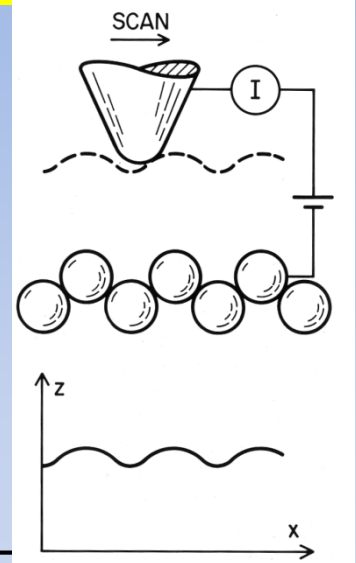
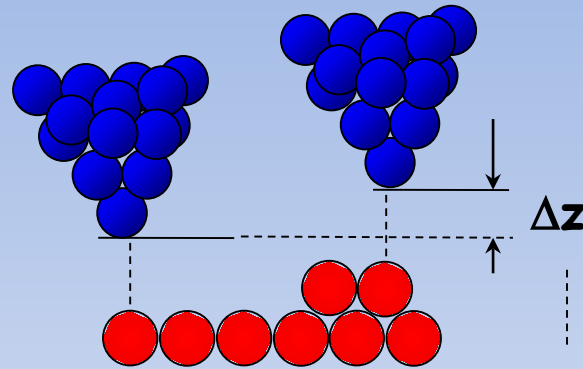


(0001) 5x5nm

Изображение  
поверхности высоко  
ориентированного  
графита (HOPG)

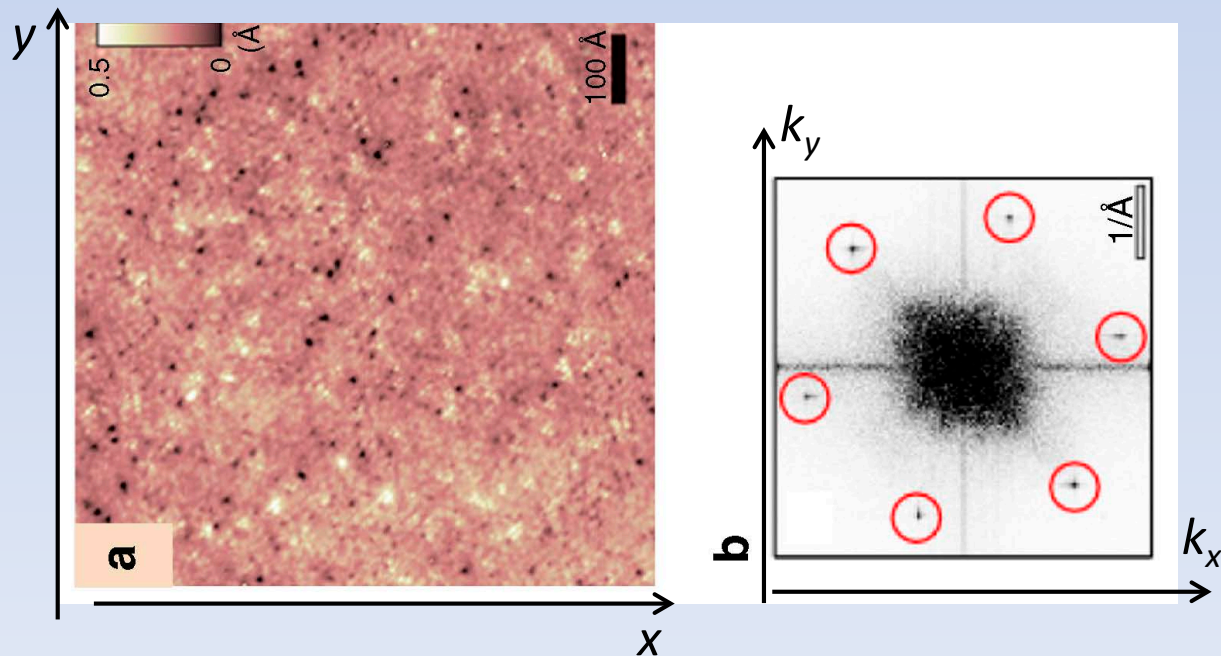


# Режим 1: Фиксированный туннельный ток (STM)

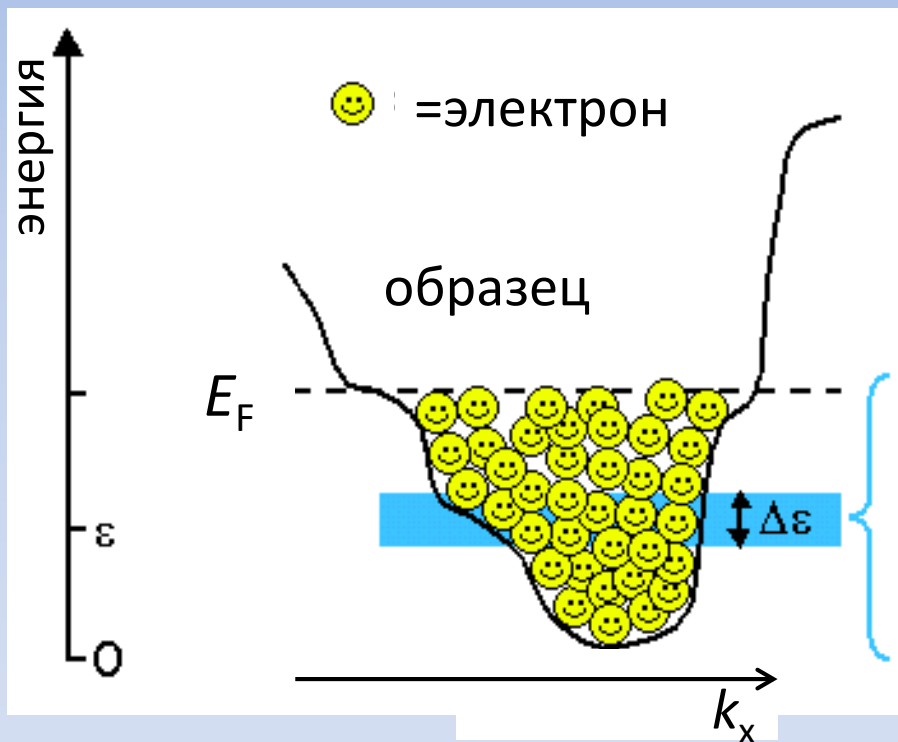


Рельеф поверхности

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

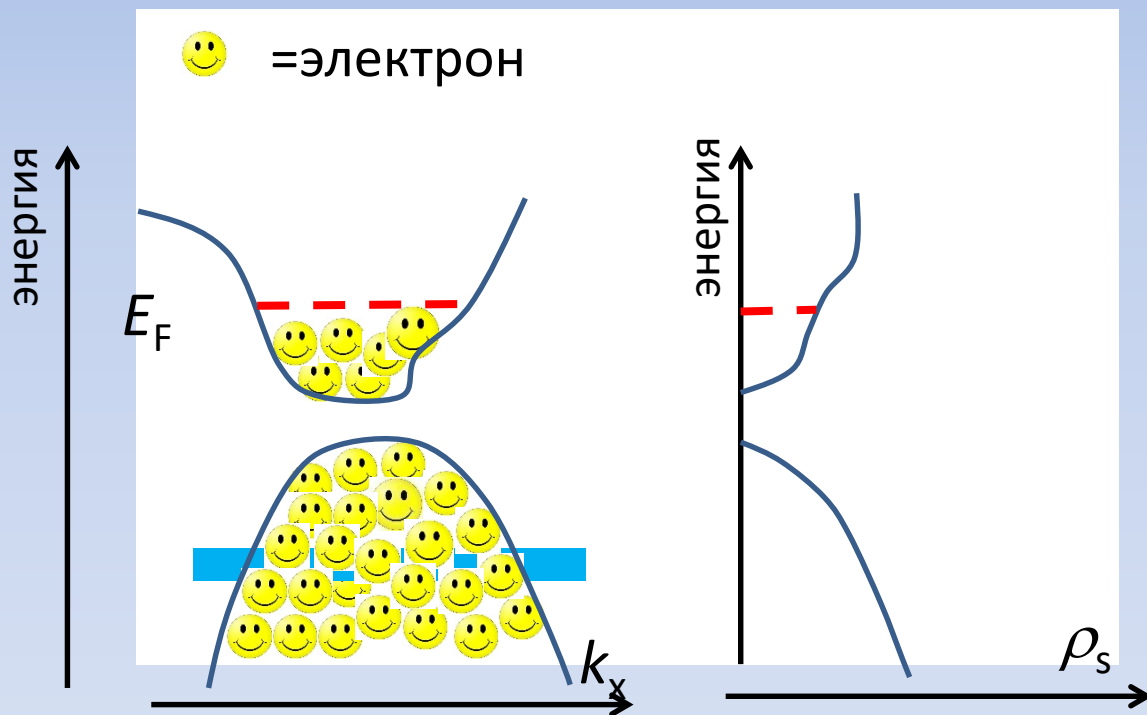


## Режим 2: Сканирующая туннельная спектроскопия (STS)

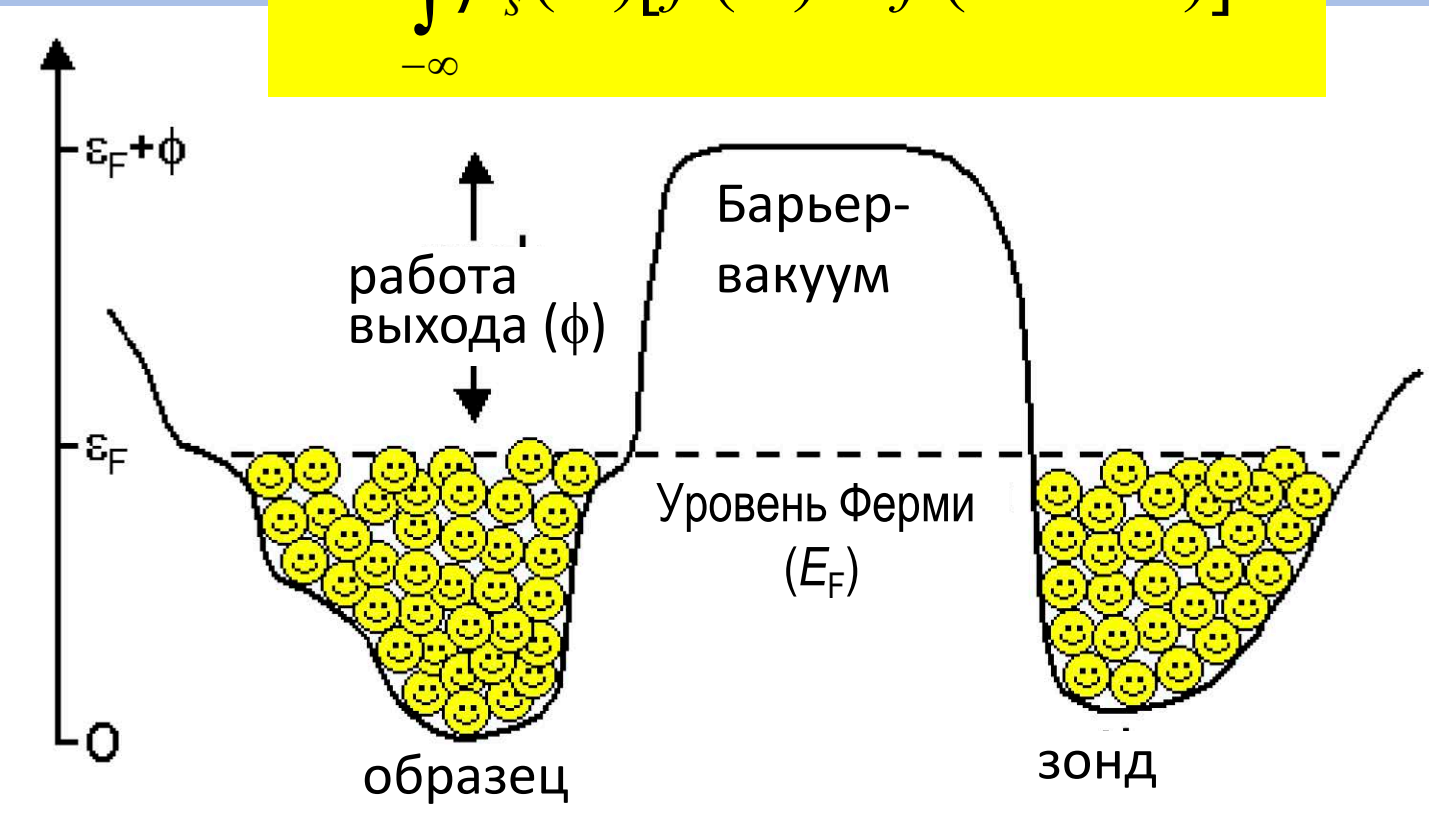


**Плотность состояний  $\rho(\varepsilon)$**  при энергии  $\varepsilon$  - это число электронов, сидящих в полоске, деленное на ее ширину  $\Delta\varepsilon$

## Режим 2: Сканирующая туннельная спектроскопия (STS)

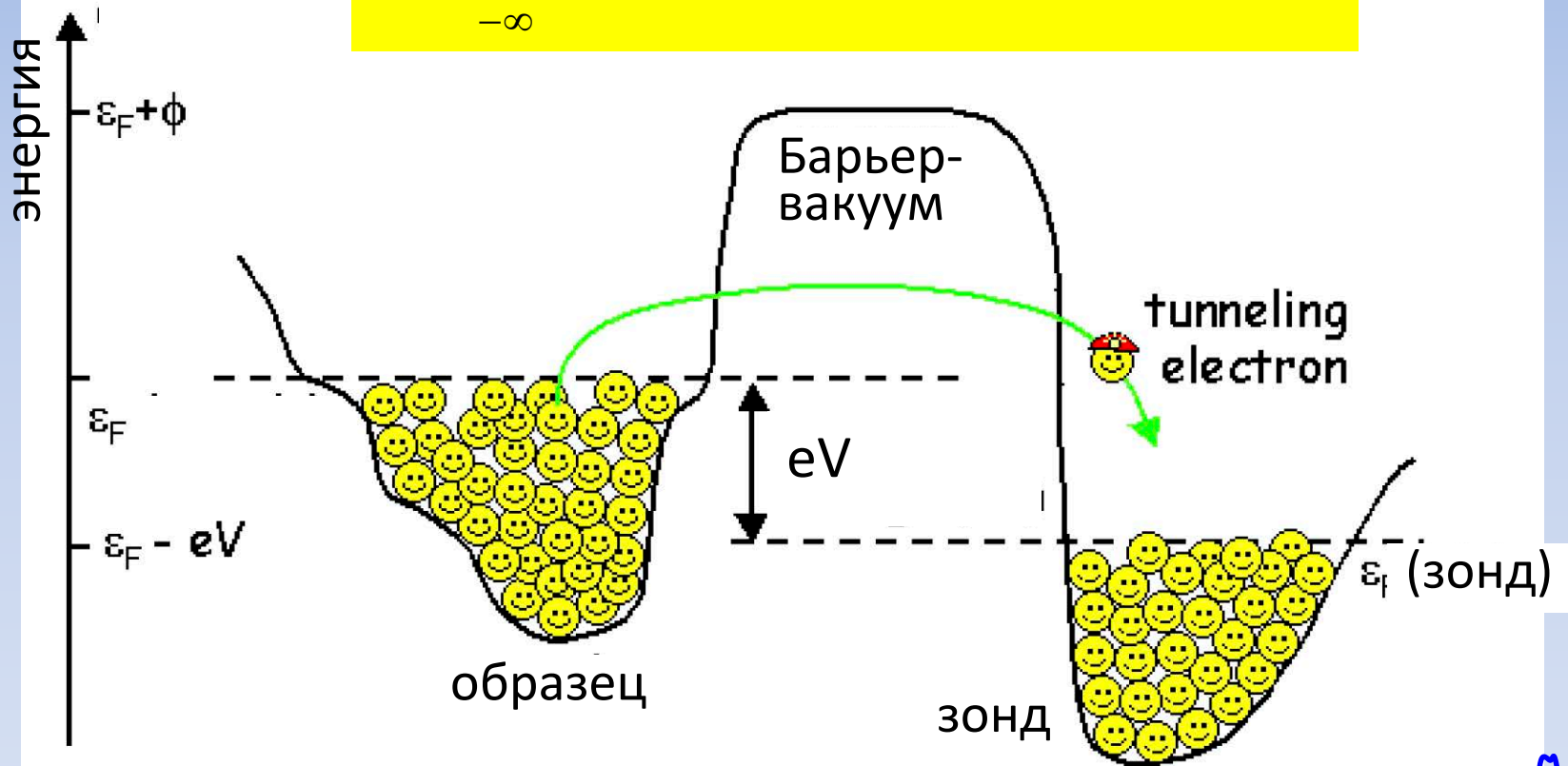


$$I \propto \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_s(E) [f(E) - f(E - eV)] dE$$

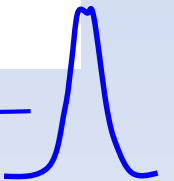




$$I \propto \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_s(E) [f(E) - f(E - eV)] dE$$

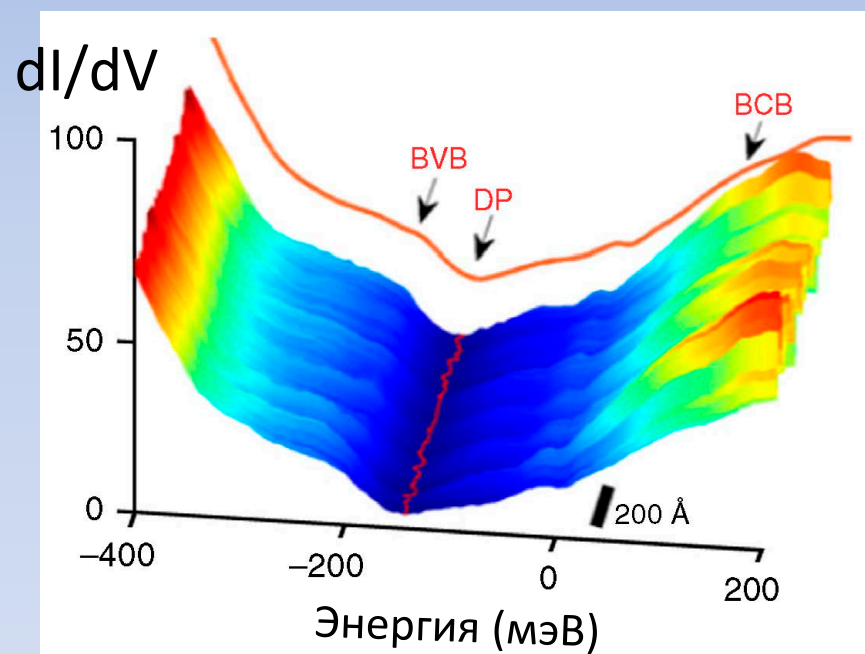
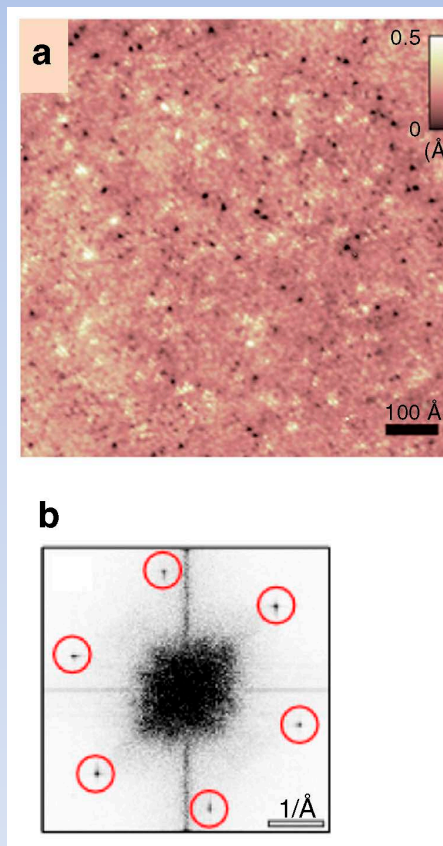


$$\left. \frac{dI}{dV} \right|_{V=V_0} \propto \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_s \left. \frac{\partial f(E - eV)}{\partial (eV)} \right|_{V=V_0} dE$$



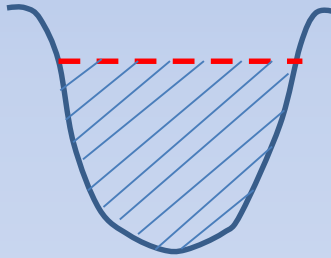
# Топологический изолятор Bi-SSTS

STM

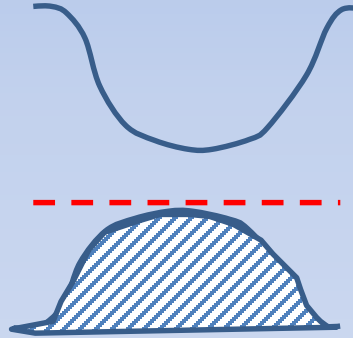


# Энергетический спектр сверхпроводника

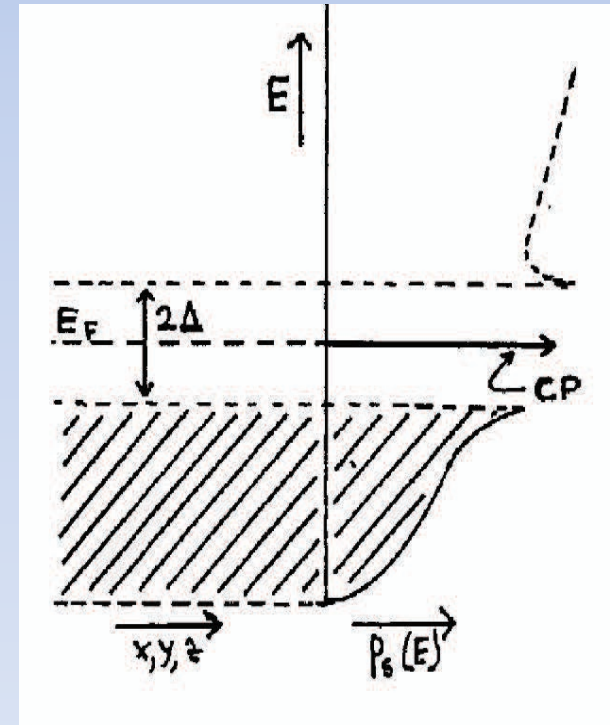
металл



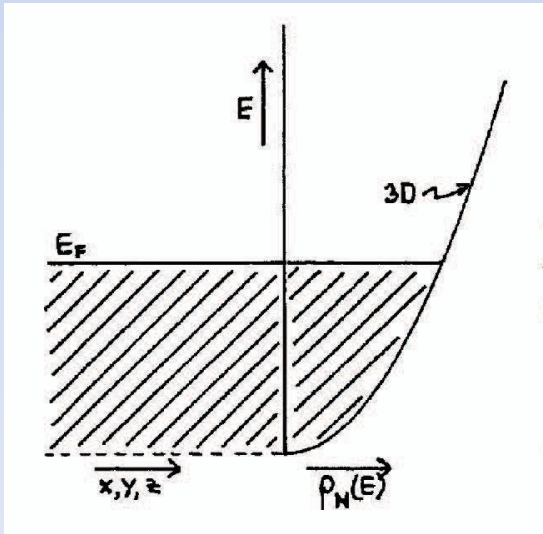
полупроводник  
(изолятор)



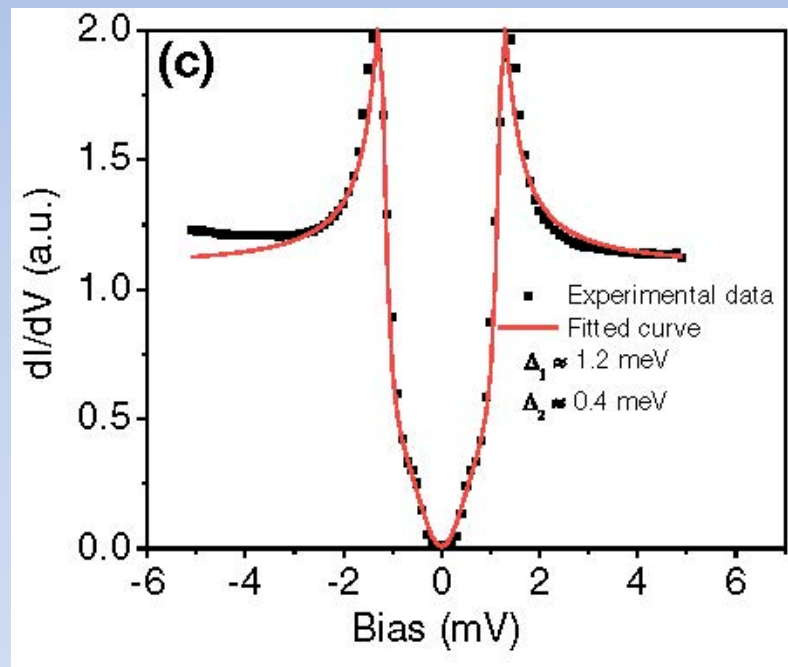
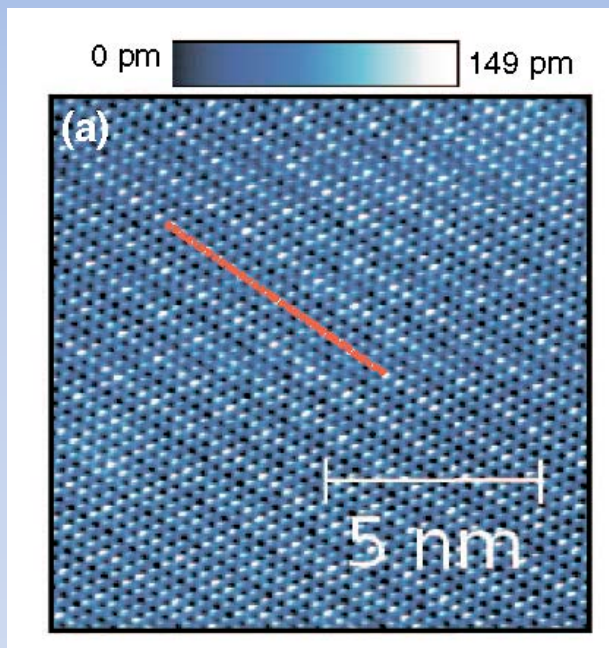
сверхпроводник



В спектре возникает щель  $2\Delta$



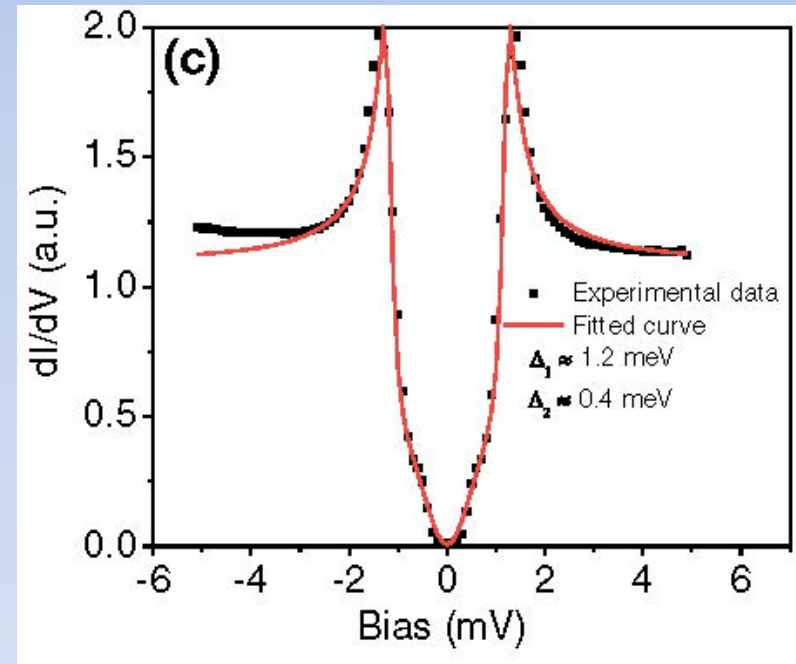
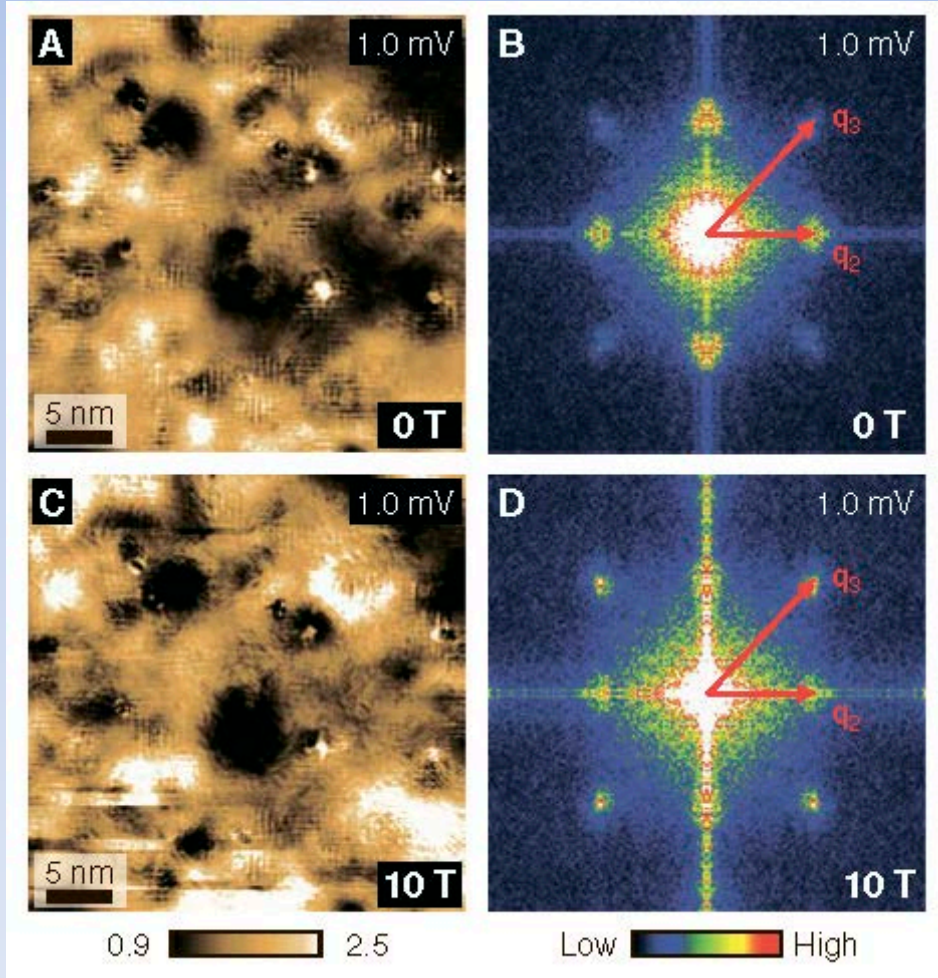
# Сверхпроводник NbSe<sub>2</sub>



# 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!**