

Отзыв официального оппонента

член-корреспондента Российской академии наук, доктора физико-математических наук Саранина Александра Александровича на диссертацию Русина Игоря Павловича «Электронная структура топологических изоляторов и материалов с расщеплением Рашбы», представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8 — «Физика конденсированного состояния».

Актуальность темы диссертации. Большой интерес, как со стороны теоретиков, так и экспериментаторов привлекают к себе недавно открытые материалы – топологические изоляторы. После теоретического предсказания существования таких материалов в 2005 г. они были экспериментально подтверждены в 2009 г. Топологические изоляторы — это узкозонные полупроводники (изоляторы), поверхность которых является проводящей благодаря формированию особых поверхностных состояний. Управление проводящими свойствами поверхности в данных материалах открывает возможность создания новых устройств магнитной памяти, а также квантовых компьютеров. На сегодняшний день обнаружено немало примеров топологических изоляторов, которые продолжают изучаться и классифицироваться.

Ещё одним классом активно исследуемых материалов со значительным вкладом спин-орбитального взаимодействия является класс полярных рашбовских полупроводников BiTeX ($X = \text{I}, \text{Cl}, \text{Br}$), инверсионная асимметрия которых приводит к формированию спин-орбитального расщепления Рашбы в объёмных и поверхностных состояниях. Данные материалы активно исследуются для возможности их приложения в качестве устройств спинтроники, например, спинового транзистора.

Поскольку особенности электронного спектра влияют на необычные свойства поверхности топологических изоляторов и рашбовских полупроводников, теоретические исследования электронной структуры данных соединений целесообразно проводить с помощью первопринципных методов. Работа И. П. Русина посвящена теоретическому исследованию потенциальных топологических изоляторов и полупроводников с гигантским спин-орбитальным взаимодействием Рашбы, что делает её особенно актуальной.

К достоинствам данной работы можно отнести то, что в ней были предсказаны первые представители нового класса антиферромагнитных топологических изоляторов, что было подтверждено в последующих экспериментальных работах. Кроме того, также в работе было показано формирование фазы квантового аномального эффекта Холла в тонких плёнках данных соединений. Другой выявленной особенностью данных соединений является формирование на их поверхности одномерных состояний на границе магнитных доменов, которые вносят вклад в транспорт носителей заряда. Показано, что формирование данных состояний также происходит в рашбовских полупроводниках в присутствии магнитных примесей.

Рецензируемая работа вскрывает общие закономерности электронной структуры, формирует концептуальную базу для прогноза и создания новых топологических материалов, что полезно как для теоретиков, так и для экспериментаторов и технологов.

Научная новизна работы заключается в том, что для широкого набора слоистых Ван Дер Ваальсовских соединений на основе исследования в рамках первопринципных методов впервые была рассмотрена взаимосвязь между атомным составом и соответствующими электронными свойствами. Предсказаны особенности электронной структуры соединения $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{S}$, которое может быть использовано в качестве компонента квантового компьютера. Найдены уникальные свойства соединений Bi_2TeI и Bi_2TeBr , которые могут быть отнесены как к классу слабых, так и кристаллиновых топологических изоляторов. Найдены примеры класса антиферромагнитных топологических изоляторов в семействах соединений $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_n$ и $(\text{MnSb}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_n$. Продемонстрировано наличие фазы квантового аномального эффекта Холла в тонких плёнках данных соединений. Также на их поверхности впервые установлено наличие одномерных состояний в области границ доменных стенок.

Диссертация состоит из введения, семи глав, заключения, списка сокращений и списка литературы.

В вводной части диссертации аргументирована актуальность исследования, обозначена его научная новизна. Указаны теоретическая и практическая ценность исследования. Описаны методы, которые использовались в работе. Обоснована достоверность результатов и описана апробация исследования. Перечислены основные положения, выносимые на защиту. Указан личный вклад автора в исследование.

В первой главе диссертации представлен анализ ключевых научных достижений в изучении эффектов, связанных с электронной структурой поверхности, обусловленных спин-орбитальным взаимодействием. Глава включает исторический экскурс в исследование классификации топологических изоляторов, а также обзор теоретических методов исследования электронной структуры, которые широко применялись в работе.

Во второй главе анализируются характеристики дисперсии состояний краёв запрещённой зоны в семействе топологических изоляторов $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{X}$ ($\text{X} = \text{Te}, \text{Se}, \text{S}$) с использованием метода теории функционала плотности и GW-приближения. GW-приближение увеличивает запрещённую щель, так как растёт расстояние между занятой и незанятой областями спектра вне области инвертирования краев запрещённой щели объёмной зоны Бриллюэна. В области инвертирования эти области, наоборот расположены ближе друг к другу. Такое поведение зон отличает топологические изоляторы от тривиальных полупроводников и ведёт к изменению дисперсии состояний краёв запрещённой щели и, соответственно, топологических поверхностных состояний. Было показано, что замена центрального слоя халькогена на более лёгкий в данном семействе соединений ведёт к увеличению величины запрещённой щели, что приводит к смещению точки Дирака выше вершины валентной зоны на поверхности $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{S}$ и возможности приложения данного соединения для индуцирования фермионов Майораны при контакте со сверхпроводником.

В третьей главе анализируются электронная структура и топологические свойства теллуругалогенидов висмута BiTeX ($X = \text{I}, \text{Br}, \text{Cl}$), которые обладают гигантским спин-орбитальным расщеплением Рашбы. Описывается возможность индуцирования топологического фазового перехода под давлением для данного семейства. Показано, что такой переход возможен только для BiTeI . Найдено, что промежуточная фаза между тривиальным полупроводником и топологическим изолятором (состояние вейлевского полуметалла) сопровождается модификацией поверхностного состояния вблизи уровня Ферми, причем эта модификация сопровождается смещением точек касания валентной зоны и зоны проводимости (точек Вейля). Также для данных соединений были рассмотрены оптические свойства. Найдены энергии объёмных плазмонов. Учёт спин-орбитального взаимодействия улучшает согласование теории с экспериментом, особенно в области оптических переходов видимого спектра.

В четвёртой главе анализируется электронная структура объёма и поверхности теллуругалогенидов Bi_2TeX и Bi_3TeX ($X = \text{I}, \text{Br}$). Повышение концентрации висмута в соединениях Bi_2TeX по сравнению с BiTeX формирует топологический характер электронного спектра. При этом в Bi_2TeX также обнаруживается как слабый топологический порядок, так и защита зеркальной симметрией решётки. На примере данных соединений в работе впервые было показано существование материалов с дуальными топологическими свойствами, которые принадлежат к классам как слабых, так и кристаллиновых топологических изоляторов. При дальнейшем повышении концентрации висмута образуются соединения Bi_3TeX , которые представляют собой топологические металлы с защищёнными топологическими поверхностными состояниями, расположенными в локальных запрещённых щелях и обладающими свойствами спиновой поляризации и геликоидального характера спиновой закрутки.

В пятой главе изучаются полярные соединения A_3Bi (A — щелочные атомы): KNa_2Bi , K_3Bi и Rb_3Bi . Доказано, что эти вещества относятся к классу сильных топологических изоляторов с нулевой запрещённой зоной. Для данных соединений было найдено, что при гидростатическом сжатии происходит переход в фазу тривиального полупроводника, тогда как одноосное растяжение и сжатие приводит соответственно к фазе дираковского полуметалла и щелевого топологического изолятора. При этом для фазы дираковского полуметалла характерно появление пары объёмных точек Дирака, из-за чего на границе с вакуумом возникают Ферми-арки — низкоразмерные состояния, соединяющие точки Дирака в спектре. Вследствие частичного переноса заряда от щелочных атомов к висмуту, поверхность соединений характеризуется значительной полярностью и формированием состояний оборванной связи и сложного характера дисперсии топологического поверхностного состояния.

В шестой главе представлены результаты комплексного исследования магнитных соединений $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_n$ и $(\text{MnSb}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_n$, относящихся к классу магнитных топологических изоляторов. Эти материалы обладают защитой поверхностных состояний благодаря сочетанию симметрии по обращению времени и пространственных трансляций.

Тонкие плёнки соединений из этих семейств находятся в фазе квантового аномального эффекта Холла с целочисленным значением числа Черна и наличием одномерных краевых состояний в спектре.

В седьмой главе описаны результаты исследования электронной структуры и топологических свойств магнитных систем со спин-поляризованными состояниями Дирака и Рашбы в случае формирования в них магнитных доменных стенок. Показано, что данные неоднородности создают низкоразмерные связанные состояния на границах магнитных доменов. Результаты численного исследования объясняют противоречия в экспериментах и указывают на связь бесщелевого конуса с низкоразмерными состояниями, которые также вносят вклад в холловскую проводимость исследуемых систем.

В заключительной части работы автор подводит итоги и описывает ключевые результаты, полученные в ходе исследования.

Обоснованность и достоверность результатов гарантируются использованием современных методов изучения электронной структуры, которые активно применяются и хорошо себя зарекомендовали для исследования топологических изоляторов и рашбовских полупроводников, а также последующим экспериментальным подтверждением полученных результатов. Особенно выделяется недавнее экспериментальное подтверждение фазы квантового аномального эффекта Холла в тонких плёнках MnBi_2Te_4 , которая теоретически предсказана в рамках представляемой диссертации. Основные применяемые в работе методы — теория функционала плотности и приближение сильной связи. Также в рамках приближения сильной связи автор использовал метод рекурсивных функций Грина, что позволило детально исследовать спектр на границах раздела областей с разными значениями топологических индексов, таких как поверхности объёмных материалов, боковые грани тонких плёнок и магнитные доменные стенки.

Основные результаты диссертации опубликованы в 20 статьях в научных журналах, индексируемых международной базой данных Web of Science, а также докладывались на ведущих конференциях по исследованиям топологических материалов.

Имеется несколько замечаний, которые не снижают ценности представляемой работы:

1. Из текста диссертации не всегда понятно, какие соединения были синтезированы, а какие являются гипотетическими.
2. Во второй главе диссертации широко исследовались многочастичные поправки в спектр объёмных состояний соединений $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{X}$ ($\text{X} = \text{Te}, \text{Se}, \text{S}$). Почему данные поправки не применялись для остальных материалов в диссертации?

Диссертационная работа удовлетворяет всем требованиям «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ №842 от 24 сентября 2013 года, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора физико-

математических наук. Автореферат диссертации полностью отражает содержание диссертации и опубликованные статьи по её тематике.

Диссертант И. П. Русинов несомненно заслуживает присуждения ему ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8 — «Физика конденсированного состояния».

Член-корреспондент Российской академии наук,
профессор, заместитель директора Федерального
государственного бюджетного учреждения науки
Института автоматизации и процессов управления
Дальневосточного отделения
Российской академии наук, д. ф.-м. н.

Саранин Александр Александрович

690041, г. Владивосток,
улица Радио, дом 5;

Телефон: +7 (4232) 31-04-26
e-mail: saranin@iacp.dvo.ru

20.11.2024

«ЗАВЕРЯЮ»
ЗАМЕСТИТЕЛЬ СЕКРЕТАРЬ НАУЧ ДВОРА И

Д. А. ЦУКАНОВ

20.11.2024

Список основных работ официального оппонента члена-корреспондента РАН, доктора физико-математических наук Саранина Александра Александровича по тематике диссертации Русинова Игоря Павловича «Электронная структура топологических изоляторов и материалов с расщеплением Рашбы» в рецензируемых научных изданиях за последние 5 лет

1. A.N. Mihalyuk, Y.E. Vekovshinin, L.V. Bondarenko, A.Y. Tupchaya, T.V. Utas, D.V. Gruznev, S.V. Ereemeev, A.V. Zotov, A.A. Saranin. Insights into the electronic properties of PbBi atomic layers on Ge (111) and Si (111) surfaces // *Frontiers in Materials*. – 2022. – Vol. 9. – P. 882008.
2. A. N. Mihalyuk, D. V. Gruznev, L. V. Bondarenko, A. Y. Tupchaya, Y. E. Vekovshinin, S. V. Ereemeev, A. V. Zotov, A. A. Saranin. A 2D heavy fermion CePb₃ kagome material on silicon: emergence of unique spin polarized states for spintronics // *Nanoscale*. – 2022. – Vol. 14. – P. 14732-14740.
3. A. Mihalyuk, L. Bondarenko, A. Tupchaya, T. Utas, J.-P. Chou, D. Gruznev, S. Ereemeev, A. Zotov, A. A. Saranin. Unveiling the hybridization between the Cr-impurity-mediated flat band and the Rashba-split state of the α -Au/Si (111) surface // *Nanoscale*. – 2022. – Vol. 14, № 31. – P.11227-11234.
4. N.V. Denisov, A.V. Matetskiy, A.V. Zotov, A.A. Saranin. Non-monotonic changes in conductance of Bi (111) films induced by Cs adsorption // *Applied Physics Letters*. – 2022. – Vol. 121, № 4. – P. 043101.
5. T. Takashiro, R. Akiyama, I. A. Kibirev, A. V. Matetskiy, R. Nakanishi, S. Sato, T. Fukasawa, T. Sasaki, H. Toyama, K. L. Hiwatari, A. V. Zotov, A. A. Saranin, T. Hirahara, S. Hasegawa. Soft-magnetic skyrmions induced by surface-state coupling in an intrinsic ferromagnetic topological insulator sandwich structure // *Nano Letters*. – 2022. – Vol. 22, № 3. – P. 881-887.
6. A. N. Mihalyuk, L. V. Bondarenko, A. Y. Tupchaya, T. V. Utas, Y. E. Vekovshinin, D. V. Gruznev, S. V. Ereemeev, A. V. Zotov, and A. A. Saranin. One-dimensional spin-polarized electron channel in the two-dimensional PbBi compound on silicon // *Physical Review B*. – 2021. – Vol. 104. – P. 125413.
7. A.V. Matetskiy, I.A. Kibirev, A.N. Mihalyuk, S.V. Ereemeev, A.V. Zotov, A.A. Saranin. Synthesis and electronic properties of InSe Bi-layer on Si (111) // *Applied Surface Science*. – 2021. – Vol. 539. – P. 148144.
8. A.V. Matetskiy, V.V. Mararov, I.A. Kibirev, A.V. Zotov, A.A. Saranin. Trivial band topology of ultra-thin rhombohedral Sb₂Se₃ grown on Bi₂Se₃ // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2020. – Vol. 32, № 16. – P. 165001.

9. A.N. Mihalyuk, J.P. Chou, S.V. Ereemeev, A.V. Zotov, A.A. Saranin. One-dimensional Rashba states in Pb atomic chains on a semiconductor surface // Physical Review B. – 2020. – Vol. 102, № 3. – P. 035442.