

Отзыв

официального оппонента доктора физико-математических наук Гареевой Зухры Владимировны на диссертацию Русинова 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».

Диссертационная работа Игоря Павловича Русинова представляет всестороннее исследование электронной структуры материалов с сильным спин-орбитальным взаимодействием: топологических изоляторов и рашбовских полупроводников. Главная особенность упомянутых соединений — формирование в них спин-поляризованных состояний. Запрещённая щель топологических изоляторов имеет инвертированный характер, а их топологические поверхностные состояния защищены различными симметриями. Вследствие данной защиты существует возможность их модификации, в частности, при напылении примесей, не нарушающих симметрии, за счёт которых сохраняется топологическая защита. В рашбовских полупроводниках наличие спин-поляризованных состояний вызвано как вкладом спин-орбитального взаимодействия, так и присутствием инверсионной асимметрии потенциала в объёме материала. Эти условия автоматически также удовлетворяются на поверхности данных соединений, что приводит к появлению рашбовских поверхностных состояний.

Спин-поляризованные состояния в топологических изоляторах и рашбовских полупроводниках играют ключевую роль в транспорте носителей заряда. В топологических изоляторах квантованные каналы проводимости с противоположным спином разделены по направлению (квантовый спиновый эффект Холла), а в рашбовских полупроводниках возникает прецессия спина. Таким образом, данные классы материалов являются ключевыми при создании устройств спинтроники, позволяющих управлять спиновой степенью свободы электронов за счёт внешних полей или других возмущений.

Поиск и исследование топологических изоляторов и рашбовских полупроводников различного вида, сопоставление состава различных материалов, принадлежащих к данным классам, аргументирует **мотивацию** представленных в диссертации исследований, и **актуальность** ее тематики.

Целью диссертационной работы является детальное изучение электронной структуры объёма и поверхностей материалов, которые обладают сильным спин-орбитальным взаимодействием: топологических изоляторов и систем с огромным спин-орбитальным расщеплением Рашбы.

Научная новизна исследования состоит в том, что были предложены новые электронные системы с ярко выраженными топологическими свойствами. Также был проведён анализ особенностей электронной структуры этих систем, связанных с формированием нетривиальной топологии.

Диссертация состоит из Введения, семи глав, заключения, благодарностей, списка сокращений и списка использованной литературы.

Во введении обоснована актуальность исследования, научная новизна, показано какое положение занимает данное исследование в физике конденсированного состояния, а также исторический контекст исследования, его теоретическая и практическая значимость. Также описаны методы, которые применялись в работе. Указана достоверность и апробация работы, представлены основные положения, выносимые на защиту, личный вклад автора и объём работы.

Первая глава представляет собой обзор основных результатов исследований эффектов электронной структуры поверхности, вызванных влиянием спин-орбитального взаимодействия, а именно, эффекта Рашбы, а также квантового спинового эффекта Холла. Представлен краткий исторический обзор исследований топологических изоляторов, начиная с первых представителей данного класса материалов, кристаллиновых и дуальных топологических изоляторов, а также изложены материалы исследований магнитных топологических изоляторов и топологических изоляторов высшего порядка. Описываются какие симметрии влияют на формирование того или иного топологического класса, а также особенности формирования топологических поверхностных состояний на границе с вакуумом. Также в первой главе вкратце описываются наиболее широко используемые в работе методы исследования электронной структуры рашбовских полупроводников и топологических изоляторов, а именно, теория функционала плотности и GW-приближение.

Вторая глава посвящена исследованию особенностей дисперсии состояний краёв запрещённой щели в семействе топологических изоляторов $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{X}$ ($\text{X}=\text{Te}, \text{Se}, \text{S}$) как в рамках метода теории функционала плотности, так и при помощи GW-приближения. На основе деталей дисперсии состояний краёв запрещённой щели, а именно, положения вершины валентной зоны и дна зоны проводимости, а также дисперсии в области инвертирования объёмной зоны Бриллюэна была рассмотрена возможность приложения данных соединений в качестве компонент спинтроники. Исследовалось влияние выбора метода и особенностей учёта обменно-корреляционного взаимодействия на электронную структуру данных материалов. Учёт многочастичных эффектов в рамках GW-приближения приводит к увеличению запрещённой щели, что является следствием также увеличения расстояния между занятой и незанятой областью спектра на энергетической шкале вне области инвертирования объёмной зоны Бриллюэна. С другой стороны, в области инвертирования данные области, наоборот, расположены ближе друг к другу. Указанные противоположные тенденции ведут к модификации дисперсии состояний краёв запрещённой щели и, соответственно, особенностей топологических поверхностных состояний.

Обнаружено, что наиболее выделяющимся для возможного практического приложения является соединение $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{S}$. Во-первых, оно обладает наибольшей запрещённой щелью по сравнению с другими представителями данного семейства материалов. Особенности дисперсии валентной зоны в области инвертирования объёмной зоны Бриллюэна приводят к формированию точки Дирака поверхностных состояний, лежащую на шкале энергии выше вершины валентной зоны, за счёт чего на основе данного соединения при контакте с сверхпроводником возможно формирование фермионов Майораны.

В третьей главе представлено исследование электронной структуры и топологических свойств теллуригалогенидов висмута BiTeX ($X=\text{I}, \text{Br}, \text{Cl}$), которые являются материалами с гигантским спин-орбитальным расщеплением Рашбы. В работе было рассмотрено влияние кристаллической анизотропии на оптические свойства соединений и диэлектрические константы, произведено сравнение с имеющимися экспериментальными данными. Найдены и исследованы энергии объёмных плазмонов в данных соединениях. Учёт спин-орбитального взаимодействия значительно влияет на электронный спектр, что приводит к хорошему согласию между теорией и экспериментом, что особенно важно для области оптических переходов, соответствующих видимой области спектра.

Для данного семейства была рассмотрена возможность индуцирования топологического фазового перехода под давлением. Из всех трёх соединений данный переход возможен только для BiTeI , тогда как для двух других кристаллический фазовый переход происходит при меньших давлениях, чем топологический переход. Рассмотрены детали поверхностной и объёмной электронной структуры в случае данного перехода. Состояние вейлевского полуметалла, которое является промежуточной фазой между фазами тривиального полупроводника и топологического изолятора, сопровождается также модификацией поверхностного состояния вблизи уровня Ферми. В ходе данной модификации состояние Рашбы модифицируется в состояние конуса Дирака.

В четвёртой главе представлено исследование электронной структуры объёма и поверхности теллуригалогенидов Bi_2TeX и Bi_3TeX ($X=\text{I}, \text{Br}$). Увеличение концентрации висмута в соединениях Bi_2TeX по сравнению с BiTeX приводит к топологическому характеру электронного спектра с областью инвертирования, в котором участвуют четыре ближайших зоны к уровню Ферми, что отличает данное соединение от рассмотренных в предыдущих главах. При этом для Bi_2TeX также обнаруживается так - называемый слабый топологический порядок, когда вдоль естественной плоскости скола (001) отсутствует защита по обращению времени. Впервые было обнаружено, что при этом для таких систем возможна защита зеркальной симметрией решётки. Таким образом, впервые был обнаружен пример материалов с дуальными топологическими свойствами, принадлежащих как к классу слабых, так и кристаллиновых топологических изоляторов, что обогатило классификацию топологических систем.

Увеличение концентрации висмута приводит к формированию соединений Bi_3TeX , которые являются топологическими металлами с защищёнными симметрией по обращению времени топологическими поверхностными состояниями, находящимися в локальных запрещённых щелях.

В пятой главе исследуется семейство полярных соединений A_3Bi (A — щелочные атомы) [KNa_2Bi , K_3Bi , Rb_3Bi]. Было показано, что указанные соединения принадлежат к классу сильных топологических изоляторов с нулевой запрещённой щелью с электронной структурой схожей с объёмным HgTe . Данный вывод не зависит от выбора учета обменно-корреляционного приближения и функционала. Автором было выявлено формирование несколько типов топологических переходов. При гидростатическом сжатии происходит топологический переход в фазу тривиального полупроводника. При этом одноосное

растяжении (сжатие) данных соединений приводит к фазе дираковского полуметалла (щелевого топологического изолятора). Фаза дираковского полуметалла характеризуется образованием пары объёмных точек Дирака вдоль Г-А направлений трёхмерной зоны Бриллюэна. Формирование данных особенностей объёмного спектра приводит к возникновению Ферми-арок на границе с вакуумом в случае боковых поверхностей. Вследствие полярности соединений A_3Bi на их поверхностях индуцируется эффект изгиба зон, что также отражается в формировании сложного характера дисперсии топологических поверхностных состояний.

Шестая глава представляет собой изложение результатов всестороннего исследования магнитных Ван Дер Ваальсовских семейств соединений $(MnBi_2Te_4)(Bi_2Te_3)_n$ и $MnSb_2Te_4(Bi_2Te_3)_n$. Данные материалы представляют собой класс так называемых магнитных топологических изоляторов. Топологическая защита поверхностных состояний в данных материалах возникает вследствие комбинации симметрии по обращению времени и не целочисленных пространственных трансляций. Показано, что в случае естественной поверхности скола кристалла возникает расщеплённое по обмену топологическое поверхностное состояние, вызванное инвертированием состояний краёв запрещённой щели в объёме. На боковых поверхностях сохраняется топологическая защита поверхностных состояний комбинированной симметрией по обращению времени и дробной трансляцией.

Тонкие плёнки соединений, принадлежащих к данным семействам, характеризуются фазой квантового аномального эффекта Холла (ненулевым целочисленным значением числа Черна), а также наличием одномерных краевых состояний.

В седьмой главе представлены результаты исследования спектроскопических свойств электронных систем со спин-поляризованными состояниями Дирака и Рашбы при формировании разных типов магнитных неоднородностей. Показано, что неоднородности приводят к образованию низкоразмерных связанных состояний на границах магнитных доменов. Результаты численного исследования поверхностной электронной структуры объясняют противоречия в экспериментах и указывают, что формирование бесщелевого конуса связано с низкоразмерными состояниями на границах магнитных доменов. Это свидетельствует о возможности управления групповой скоростью и направлением спиновой поляризации связанных состояний доменных стенок за счёт изменения лёгкой оси намагниченности. В двумерных электронных системах на основе спин-орбитального расщепления Рашбы индуцирование магнитных неоднородностей усложняет электронный спектр, и границы магнитных доменов содержат поляризованные по спину одномерные связанные состояния. Эти состояния не являются стабильными из-за соотношения различных вкладов в спектр двумерных состояний Рашбы.

В заключении автор суммирует итоги и основные результаты диссертационной работы.

Стоит отметить, что в работе автор применяет передовые методы исследования электронной структуры, которые наиболее подходят для исследования топологических изоляторов и рашбовских полупроводников: теория функционала плотности и приближение сильной связи. В рамках приближения сильной связи автором был реализован метод рекурсивных функций Грина, что позволило эффективно исследовать тонкие детали спектра на границах

раздела областей с разным значением топологических индексов. Приложение данных методов также делает результаты обоснованными и достоверными.

Результаты работы были опубликованы в 20 работах в международных журналах, включённых в Перечень рецензируемых научных изданий, а также докладывались на ведущих конференциях по физике топологических материалов.

Имеется несколько замечаний:

1. В работе, в частности исследуется влияние многочастичных эффектов на электронную структуру топологических материалов в рамках теории функционала электронной плотности и GW-приближения. При этом отсутствует описание результатов с использованием хорошо зарекомендовавших себя обменно-корреляционных функционалов с точным обменом.
2. Отсутствует обсуждение влияния более точного учёта обменно-корреляционного взаимодействия на формирование топологических фаз в теллурогалогенидах висмута.

Эти замечания не снижают научной ценности представляемой работы.

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».

Официальный оппонент, ведущий научный сотрудник,
заведующая лабораторией теоретической физики
Федерального государственного бюджетного учреждения
науки Института физики молекул и кристаллов -
обособленного структурного подразделения
Федерального государственного бюджетного научного
учреждения Уфимского Федерального исследовательского
центра Российской академии наук, д. ф.-м. н.

Гареева Зухра Владимировна

15.11.2024

450054, Республика Башкортостан,
г. Уфа, Пр-кт Октября, д. № 71;
Телефон/факс: 7 (347) 292-14-17
e-mail: zukhragzv@yandex.ru

Подпись Гареевой Зухры Владимировны заверяю
Уч. секретарь ИФМК УФИЦ РАН
канд. физ-мат. Наук

А.А. Бунаков

Список основных работ официального оппонента доктора физико-математических наук Гареевой Зухры Владимировны по тематике диссертации Русинова Игоря Павловича «Электронная структура топологических изоляторов и материалов с расщеплением Рашбы» в рецензируемых научных изданиях за последние 5 лет

1. Z. V. Gareeva, N. V. Shulga, A. K. Zvezdin. Multiferroics in Magneto electric–Spin Orbital–Devices // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2023. – P. 171323.
2. Z. V. Gareeva, I. Sharafullin, A. K. Zvezdin. 2D-Perovskite Multiferroics: Interface-Induced Magnetoelectric Effect in Perovskite-Based Multiferroic Superlattices // Crystals. – 2023. – Vol. 13. – Article number 1404.
3. Z. V. Gareeva, N. Shulga, R. Doroshenko, A. K. Zvezdin. Electric field control of magnetic states in ferromagnetic–multiferroic nanostructures // Physical Chemistry Chemical Physics. – 2023. – Vol. 25. – P. 22380-22387.
4. A. K. Zvezdin, Z. V. Gareeva, X. M. Chen, A. K. Magnetoelectric Effect in Multiferroics with a Perovskite Structure // Physics of Metals and Metallography. – 2022. – Vol. 123, №7. – P. 651-655.
5. A. K. Zvezdin, Z. V. Gareeva, A. M. Trochina, K. A. Zvezdin. Dynamics of Domain Walls in the Region of Compensated Angular Momentum in Ferrimagnetic Films with Plane Anisotropy // Physics of Metals and Metallography. – 2022. – Vol. 123, № 7. – P. 656-661.
6. Z. V. Gareeva, A. K. Zvezdin, K. A. Zvezdin, X. Chen Symmetry analysis of magnetoelectric effects in perovskite-based multiferroics // Materials. – 2022. – Vol. 15, № 5. – P. 574.
7. Z. V. Gareeva, N. V. Shulga, R. A. Doroshenko. Influence of the Dzyaloshinskii–Moriya interaction on the properties of magnetic states in nanostructures // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2021. – Vol. 123. – P. 168079.
8. Z. V. Gareeva, N. V. Shulga, R. A. Doroshenko. Hysteresis processes in a magnetoelectric nanoelement with Dzyaloshinskii–Moriya interaction // The European Physical Journal Plus. – 2022. – Vol. 137. – P. 454.
9. J. Chen, L. Liu, X. Li Zhu, Z. V. Gareeva, A. K. Zvezdin, X. M. Chen. The involvement of Pna21 phase in the multiferroic characteristics of La/Lu co-substituted BiFeO3 ceramics // Applied Physics Letters. – 2021. – Vol. 119, № 11. – P. 112901.