

УТВЕРЖДАЮ

зам. директора ФТИ им. А.Ф. Иоффе,

доктор физико-математических наук

\_\_\_ П.Н. Брунков

18 декабря 2024 г.

### ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

на диссертацию Русинова Игоря Павловича «Электронная структура топологических изоляторов и материалов с расщеплением Рашбы», представленную в диссертационный совет 24.1.262.01 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физического института им. П.Н. Лебедева Российской академии наук на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8. «Физика конденсированного состояния»

Диссертационная работа И.П. Русинова посвящена теоретическому исследованию электронной структуры объемных и поверхностных состояний большого ряда материалов с сильным спин-орбитальным взаимодействием, в том числе с магнитным упорядочением. Исследования проведены методами теории функционала электронной плотности с использованием различных приближений и методами сильной связи. Особое внимание уделено анализу топологии зонной структуры материалов и характеру спин-орбитального расщепления, изучению топологически защищенных поверхностных состояний и поверхностных состояний с сильным спин-орбитальным расщеплением Рашбы, влиянию магнитного упорядочения на зонную структуру материалов. **Актуальность** темы исследований несомненна и связана с современным развитием физики конденсированного состояния, поиском и изучением материалов с сильным спин-орбитальным расщеплением энергетического спектра и с нетривиальной топологией зонной структуры, таких как

топологические изоляторы, полуметаллы Вейля и магнитные топологические изоляторы, исследованием свойств поверхностных и краевых состояний. Первопринципные расчеты и методы молекулярной динамики являются в настоящее время основным теоретическим инструментом таких исследований. Выбор актуальных химических соединений, электронная структура которых исследуется в диссертации, стимулирован в том числе достижениями в области технологии твердых тел и результатами экспериментальных исследований зонной структуры методами фотоэмиссионной спектроскопии. **Новизна** диссертационного исследования состоит в рассмотрении новых соединений, анализе их зонной структуры и топологии, изучении характеристик поверхностных состояний на различных кристаллографических гранях и с различной химической структурой поверхности.

Диссертация состоит из Введения, семи глав, Заключения, списка сокращений и списка литературы.

Во Введении обоснована актуальность диссертационной работы, описаны цели и задачи исследований, научная новизна, теоретическая и практическая значимость, сформулированы положения, выносимые на защиту, описан личный вклад автора, описана структура диссертации.

Первая глава диссертации имеет обзорный характер и описывает современное состояние дел в области исследования электронной структуры топологических изоляторов и материалов с гигантским спин-орбитальным расщеплением Рашбы, первопринципных методов расчета электронной структуры кристаллических материалов и топологических инвариантов. Дана классификация двумерных и трехмерных топологических изоляторов и магнитных топологических изоляторов, описаны тривиальные и топологические состояния на поверхностях кристаллов. Рассмотрена теория функционала электронной плотности для расчета электронной структуры, различные используемые приближения.

Вторая глава диссертации посвящена исследованию топологических изоляторов на основе халькогенидов со слоистой тетрадимитоподобной структурой, примером которых является один из первых открытых топологических изоляторов  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ . Представлены расчеты зонных структур соединений  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ ,  $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$ ,  $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{S}$  и твердого раствора  $\text{Bi}_2\text{Te}_{1.85}\text{S}_{1.15}$ . Определены параметры зонных структур, в том числе положения точек экстремума в зоне Бриллюэна и ширины запрещённых зон, полученные в рамках различных приближений. Продемонстрировано, что учет многочастичных поправок в рамках GW приближения приводит к уменьшению инвертированной запрещенной зоны в  $\Gamma$  точке, но к некоторому увеличению истинной непрямой запрещенной зоны во всех рассмотренных соединениях. Аккуратный расчет позволяет получать величины запрещенных зон, которые наблюдаются в экспериментах.

В третьей главе диссертации представлено исследование электронной структуры теллур-галогенидов висмута  $\text{BiTeI}$ ,  $\text{BiTeCl}$  и  $\text{BiTeBr}$ . Описана кристаллическая и зонная структура этих слоистых полярных материалов с сильным спин-орбитальным взаимодействием Рашбы. Представлены расчеты зонной структуры, выполненные с использованием различных обменно-корреляционных приближений. Указано на принципиальное отличие зонной структуры  $\text{BiTeI}$  и  $\text{BiTeBr}$  от зонной структуры  $\text{BiTeCl}$ , заключающееся в расположении экстремумов зон в различных точках зоны Бриллюэна. Проведен расчет высокочастотной и низкочастотной диэлектрической константы материалов, а также спектров поглощения и экстинкции. Проанализировано влияние гидростатического давления на кристаллическую и электронную структуру материалов. Расчет подтверждает наличие в  $\text{BiTeI}$  топологических переходов в фазу полуметалла Вейля, затем в фазу топологического изолятора при давлениях меньших, чем происходит кристаллический фазовый переход. Сделано также предсказание о невозможности наблюдения

топологических фазовых переходов в  $\text{BiTeBr}$  и  $\text{BiTeCl}$  при гидростатическом давлении.

Четвертая глава диссертации посвящена исследованию электронной структуры соединений  $\text{Bi}_2\text{TeI}$ ,  $\text{Bi}_2\text{TeBr}$ ,  $\text{Bi}_3\text{TeI}$  и  $\text{Bi}_3\text{TeBr}$ . Рассчитаны зонные структуры объемных материалов, проанализировано влияние спин-орбитального взаимодействия на зонную структуру. Показано, что инвертирование зон в  $\text{Bi}_2\text{TeI}$  и  $\text{Bi}_2\text{TeBr}$  возникает за счет спин-орбитального взаимодействия; при этом  $\text{Bi}_2\text{TeI}$  относится к классу слабых топологических изоляторов, а  $\text{Bi}_2\text{TeBr}$  обладает полуметаллическим спектром. Выполнено исследование спектра и спиновой структуры поверхностных состояний для всех возможных типов химических окончаний поверхности (001).

В пятой главе представлены результаты исследования электронной структуры висмутидов щелочных металлов  $\text{K}_3\text{Bi}$ ,  $\text{KNa}_2\text{Bi}$  и  $\text{Rb}_3\text{Bi}$ . Рассчитаны параметры зонной структуры кубических модификаций с использованием различных приближений. Все проведенные расчеты показывают, что данные материалы обладают инвертированной зонной структурой, аналогичной соединению  $\text{HgTe}$ , при этом наибольшей щелью между зонами  $\Gamma_8$  и  $\Gamma_6$  обладает  $\text{K}_3\text{Bi}$ . Исследована релаксация кристаллической структуры вблизи поверхности и электронные поверхностные состояния для различных типов окончания. Изучено также влияние гидростатического сжатия и одноосной деформации на электронную структуру  $\text{KNa}_2\text{Bi}$ .

Шестая глава диссертации посвящена исследованию объемных кристаллов и тонких пленок соединений  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ ,  $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_n$ ,  $\text{MnSb}_2\text{Te}_4$  и  $(\text{MnSb}_2\text{Te}_4)(\text{Sb}_2\text{Te}_3)_n$ . Выполнен расчет магнитного упорядочения и электронной структуры объемных материалов и тонких пленок. Продемонстрировано, что в зависимости от химического состава и толщины пленок системы могут демонстрировать антиферромагнитное

или ферромагнитное упорядочение и находиться в различных фазах магнитного топологического изолятора.

Седьмая глава посвящена исследованию доменных стенок и краевых электронных состояний, локализованных на доменных стенках, на поверхности магнитных топологических изоляторов и в двумерных магнитных системах с сильным спин-орбитальным взаимодействием Рашбы. В рамках модельных гамильтонианов, перенесенных в метод сильной связи, рассчитана структура краевых состояний для различных магнитных конфигураций, включая доменные стенки Нееля и Блоха. Проанализированы спектр и спиновая структура краевых состояний, условие возникновения краевых состояний.

В Заключении сформулированы основные результаты работы. Список использованной литературы содержит 433 наименования, включая публикации соискателя, соответствует тематике работы и отражает современное состояние дел.

**Достоверность и обоснованность** результатов диссертационной работы и положений, выносимых на защиту, обеспечивается последовательными и самосогласованными расчетами с использованием современных хорошо зарекомендовавших себя вычислительных пакетов, тщательным выбором необходимых алгоритмов и приближений на основе большого накопленного опыта, подробным критическим анализом результатов, сравнением результатов с имеющимися литературными данными, как теоретическими, полученными другими группами, так и экспериментальными.

Наиболее интересными **научно значимыми результатами**, полученными в работе, представляются следующие:

1. Разработаны подходы для количественного описания зонной структуры ряда узкозонных соединений на основе  $Bi$ ,  $Te$ ,  $Se$ ,  $S$  и анализа топологии их зонной структуры.

2. Определено влияние многочастичных поправок в рамках первопринципных методов расчета на зонную структуру топологических материалов. Многочастичные поправки в этих материалах в отличие от традиционных полупроводников приводят к уменьшению инвертированной запрещенной зоны в  $\Gamma$  точке зоны Бриллюэна.
3. Описаны топологические и кристаллические фазовые переходы в полярных кристаллах  $\text{BiTeI}$ ,  $\text{BiTeCl}$  и  $\text{BiTeBr}$  при гидростатическом сжатии.
4. Описана зонная структура висмутидов щелочных металлов  $\text{K}_3\text{Bi}$ ,  $\text{KNa}_2\text{Bi}$  и  $\text{Rb}_3\text{Bi}$  и продемонстрирован инверсный порядок расположения зон, обусловленный спин-орбитальным взаимодействием.
5. Определен характер магнитного упорядочения и электронная структура слоистых магнитных соединений  $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_n$  и  $(\text{MnSb}_2\text{Te}_4)(\text{Sb}_2\text{Te}_3)_n$ .

Несомненна также и **практическая ценность** работы: в работе впервые определена зонная структура ряда химических соединений, определены параметры зонной структуры, предсказаны новые материалы с нетривиальной топологией зонной структуры.

По диссертации имеются следующие **замечания**:

1. В главе 3 диссертации изучаются материалы с сильным спин-орбитальным взаимодействием. Было бы полезно проследить корреляцию между шириной запрещенной зоны материала и параметром спин-орбитального расщепления Рашбы и эффективной массой носителей. Представляется, что такая корреляция есть и соответствующие соотношения могут быть получены в рамках кр-теории, учитывающей близко расположенные валентную зону и

зону проводимости, как это делается для традиционных полупроводников.

2. В главе 3 было бы полезно пояснить физическую причину принципиального отличия зонной структуры (различного расположения экстремумов зон в зоне Бриллюэна) соединений  $\text{BiTeI}$  и  $\text{BiTeBr}$  от  $\text{BiTeCl}$ .
3. В главе 4 на стр. 114 указано, что соединение  $\text{Bi}_3\text{TeI}$  без учета спин-орбитального взаимодействия являлось бы полуметаллом Вейля. Нет ли здесь терминологической ошибки? Без учета спин-орбитального взаимодействия все состояния являются по крайней мере двукратно вырожденными. Традиционно полуметаллами Веля называют материалы с невырожденными вейлевскими конусами.
4. Эффективный гамильтониан спин-орбитального взаимодействия (5.7) на стр. 155 в главе 5 содержит одновременно линейные по волновому вектору  $k$  и квадратичные по волновому вектору  $k$  спин-зависимые вклады. Представляется, что это противоречит симметрии к инверсии времени.
5. В тексте диссертации встречаются опечатки. Помимо технических опечаток, которых сложно избежать, в тексте встречается терминология, отличающаяся от общепринятой, например: «кристаллиновый топологический изолятор» вместо «кристаллического топологического изолятора», «магнетизация» вместо «намагниченности», «приближение хаотичной фазы» вместо «приближения случайных фаз», «локальное приближение плотности» вместо «приближения локальной плотности», «спиральность спина» (стр. 157) и др.

Отмеченные выше недостатки носят главным образом рекомендательный характер и не ставят под сомнение основные результаты и выводы работы. Общая оценка диссертации положительная, диссертация выполнена на высоком научном уровне.

Диссертационная работа И.П. Русинова вносит существенный вклад в развитие физики конденсированного состояния, характеризуется масштабностью проведенных работ, последовательностью и логичностью изложения. Результаты, составившие основу диссертации, опубликованы в 22 работах, в том числе в 20 статьях в авторитетных научных журналах: Physical Review B, Physical Review Letters, Nature, npj Quantum Materials, Scientific Reports, New Journal of Physics, Письма в ЖЭТФ и др., доложены на российских и международных конференциях. Диссертационная работа может быть использована при проведении исследований в ФТИ им. А.Ф. Иоффе, ФИАН, Институте физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, Институте физики микроструктур РАН, МГУ, СПбГУ, Томском государственном университете и других научных учреждениях физического профиля. Автореферат адекватно и достаточно полно отражает содержание и выводы диссертации.

Диссертация Русинова Игоря Павловича «Электронная структура топологических изоляторов и материалов с расщеплением Рашбы» представляет собой законченное исследование и полностью соответствует критериям "Положения о присуждении ученых степеней" для ученой степени доктора наук, утвержденного постановлением Правительства РФ № 842 от 24.09.2013 г., и её автор заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8. «Физика конденсированного состояния».

Доклад И.П. Русинова по материалам докторской диссертации заслушан 12 ноября 2024 г. на совместном семинаре Сектора теории квантовых когерентных явлений в твердом теле и Сектора теории оптических и электрических явлений в полупроводниках ФТИ им. А.Ф. Иоффе. Отзыв на диссертацию составлен главным научным сотрудником, зав. Сектором теории квантовых когерентных явлений в твердом теле ФТИ им. А.Ф. Иоффе, доктором физ.-мат. наук Тарасенко



Сергеем Анатольевичем. Отзыв одобрен на совместном семинаре Сектора теории квантовых когерентных явлений в твердом теле и Сектора теории оптических и электрических явлений в полупроводниках ФТИ 3 декабря 2024 г., протокол № 12 от 03.12.2024.

Тарасенко Сергей Анатольевич  
доктор физико-математических наук по специальности 01.04.10 – физика полупроводников, член-корреспондент РАН, главный научный сотрудник, зав. Сектором теории квантовых когерентных явлений в твердом теле Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук»  
194021, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 26,  
post@mail.ioffe.ru, <http://www.ioffe.ru>, тел.: (812) 297-2245

Контактные данные:

эл. почта: tarasenko@coherent.ioffe.ru

тел. 7(812) 292-7155

17.12.2024

Подпись С.А. Тарасенко удостоверяю:  
Ученый секретарь ФТИ им. А.Ф. Иоффе  
кандидат физ.-мат. наук

М.И. Патров

Список основных работ сотрудников ведущей организации Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН (г. Санкт-Петербург) по тематике диссертации Русинова Игоря Павловича «Электронная структура топологических изоляторов и материалов с расщеплением Рашбы» в рецензируемых научных изданиях за последние 5 лет

1. G.V. Budkin, S.A. Tarasenko, Spin splitting in low-symmetry quantum wells beyond Rashba and Dresselhaus terms, *Phys. Rev. B* 105, L161301, (2022)
2. M.V. Durnev, G.V. Budkin, S.A. Tarasenko. Splitting of Dirac Cones in HgTe Quantum Wells: Effects of Crystallographic Orientation, Interface-, Bulk-, and Structure-Inversion Asymmetry. *J. Exp. Theor. Phys.* 135, 540–548 (2022).
3. V.A. Soltamov, C. Kasper, A.V. Poshakinskiy, A.N. Anisimov, E.N. Mokhov, A. Sperlich, S.A. Tarasenko, P.G. Baranov, G.V. Astakhov, and V. Dyakonov, Excitation and coherent control of spin qudit modes in silicon carbide at room temperature, *Nature Commun.* 10, 1678 (2019)
4. S.D. Ganichev, E.L. Ivchenko, V.V. Bel'kov, S.A. Tarasenko, M. Sollinger, D. Weiss, W. Wegscheider, and W. Prettl, Spin-galvanic effect, *Nature* 417, 153 (2002)
5. V.I. Perel', S.A. Tarasenko, I.N. Yassievich, S.D. Ganichev, V.V. Bel'kov, and W. Prettl, Spin-dependent tunneling through a symmetric barrier, *Phys. Rev. B* 67, 201304(R) (2003)
6. M. V. Durnev, S. A. Tarasenko. Edge photogalvanic effect caused by optical alignment of carrier momenta in two-dimensional Dirac materials. *Phys. Rev. B* 103, 165411 (2021)
7. J. Michl, C. C. Palekar, S. A. Tarasenko, F. Lohof, C. Gies, M. von Helversen, R. Sailus, S. Tongay, T. Taniguchi, K. Watanabe, T. Heindel, B. Rosa, M. Rödel, T. Shubina, S. Höfling, S. Reitzenstein, C. Anton-Solanas, and C. Schneider. Intrinsic circularly polarized exciton emission in a twisted van der Waals heterostructure. *Phys. Rev. B* 105, L241406 (2022)
8. M. V. Durnev, S. A. Tarasenko. Edge photogalvanic effect caused by optical alignment of carrier momenta in two-dimensional Dirac materials. *Phys. Rev. B* 103, 165411 (2021)
9. S. Hubmann, G. V. Budkin, M. Otteneder, D. But, D. Sacré, I. Yahniuk, K. Diendorfer, V. V. Bel'kov, D. A. Kozlov, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretzky, V. S. Varavin, V. G. Remesnik, S. A. Tarasenko, W. Knap, and S. D. Ganichev. Symmetry breaking and circular photogalvanic effect in epitaxial  $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$  films. *Phys. Rev. Materials* 4, 043607 (2020)