

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.262.01 НА БАЗЕ
ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ
НАУКИ ФИЗИЧЕСКОГО ИНСТИТУТА ИМ. П.Н. ЛЕБЕДЕВА РОССИЙСКОЙ
АКАДЕМИИ НАУК ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ
ДОКТОРА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 20 января 2025 г № 77

О присуждении Русинову Игорю Павловичу, гражданину Российской Федерации, учёной степени доктора физико-математических наук.

Диссертация «Электронная структура топологических изоляторов и материалов с расщеплением Рашбы» по специальности 1.3.8 — Физика конденсированного состояния принята к защите 8 октября 2024 года, (протокол заседания № 73) диссертационным советом 24.1.262.01, созданным 11 апреля 2012 года приказом Минобрнауки № 105/нк на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физического института им. П.Н. Лебедева Российской академии наук (ФИАН), 119991 ГСП-1 Москва, Ленинский проспект, д. 53.

Соискатель Русинов Игорь Павлович, 1987 года рождения, в 2010 году окончил государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Костромской государственный университет имени Н. А. Некрасова» по специальности «Физика». Диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук на тему «Влияние учета многочастичных эффектов на электронную структуру материалов с сильным спин-орбитальным взаимодействием» по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния защитил в 2013 г. в диссертационном совете федерального государственного бюджетного образовательного учреждения

высшего профессионального образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет».

В период подготовки диссертации с 2017 по 2024 год соискатель являлся старшим научным сотрудником лаборатории наноструктурных поверхностей и покрытий Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет». С 10 января 2025 принят на работу в должности ведущего инженера в Центр высокотемпературной сверхпроводимости и квантовых материалов им. В. Л. Гинзбурга Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физического института им. П. Н. Лебедева Российской академии наук.

Научный консультант: Чулков Евгений Владимирович, доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник лаборатории наноструктурных поверхностей и покрытий Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования "Национальный исследовательский Томский государственный университет".

Официальные оппоненты:

1. Саранин Александр Александрович, член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук, профессор, заместитель директора Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института автоматизации и процессов управления Дальневосточного отделения Российской академии наук;
2. Гареева Зухра Владимировна, доктор физико-математических наук, 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;

3. Столяров Василий Сергеевич, доктор физико-математических наук, руководитель Центра перспективных методов мезофизики и нанотехнологий Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)»

дали положительные отзывы о диссертации.

Ведущая организация — Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук (ФТИ им. А.Ф. Иоффе), город Санкт-Петербург, в своем положительном отзыве, подписанном членом-корреспондентом РАН, доктором физико-математических наук Тарасенко Сергеем Анатольевичем, главным научным сотрудником, заведующим Сектором теории квантовых когерентных явлений в твердом теле ФТИ им. А.Ф. Иоффе, и утвержденном доктором физико-математических наук Брунковым Павлом Николаевичем, заместителем директора ФТИ им. А.Ф. Иоффе, указала, что диссертация Русинова И. П. является законченным исследованием, полностью соответствует критериям, установленным Положением о присуждении ученых степеней, утвержденным постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г., а её автор заслуживает присуждения учёной степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8—Физика конденсированного состояния.

Соискатель имеет 39 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликованы 22 работы, из них в рецензируемых научных изданиях, индексируемых в базе данных Web of Science, опубликовано 20 работ.

В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем И. П. Русиновым работах.

Наиболее значимые результаты по теме диссертации опубликованы в статьях:

1. **Rusinov I. P.** Role of anisotropy and spin-orbit interaction in the optical and dielectric properties of BiTeI and BiTeCl compounds / I. P. Rusinov,

O. E. Tereshchenko, K. A. Kokh, A. R. Shakhmametova, I. A. Azarov, E. V. Chulkov // JETP Letters. – 2015. – Vol. 101, is. 8. – P. 507–512.

2. **Rusinov I. P.** Pressure effects on crystal and electronic structure of bismuth tellurohalides / I. P. Rusinov, T. V. Menshchikova, I. Yu. Sklyadneva, R. Heid, K.-P. Bohnen, E. V. Chulkov // New Journal of Physics. – 2016. – Vol. 18. – Article number 113003. – 11 p. – URL: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1367-2630/18/11/113003>

3. **Rusinov I. P.** Mirror-symmetry protected non-TRIM surface state in the weak topological insulator Bi_2TeI / I. P. Rusinov, T. V. Menshchikova, A. Isaeva, S. V. Eremeev, Yu. M. Koroteev, M. G. Vergniory, P. M. Echenique, E. V. Chulkov // Scientific Reports. – 2016. – Vol. 6. – Article number 20734. – 7 p.

4. Sklyadneva I. Yu. Pressure-induced topological phases of KNa_2Bi / I. Yu. Sklyadneva, **I. P. Rusinov**, R. Heid, K.-P. Bohnen, P. M. Echenique, E. V. Chulkov // Scientific Reports. – 2016. – Vol. 6. – Article number 24137. – 9 p.

5. Eremeev S. V. Temperature-driven topological quantum phase transitions in a phase-change material $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ / S. V. Eremeev, **I. P. Rusinov**, P. M. Echenique, E. V. Chulkov // Scientific Reports. – 2016. – Vol. 6. – Article number 38799. – 6 p.

6. **Rusinov I. P.** Nontrivial topology of cubic alkali bismuthides / I. P. Rusinov, I. Yu. Sklyadneva, R. Heid, K.-P. Bohnen, E. K. Petrov, Yu. M. Koroteev, P. M. Echenique, E. V. Chulkov // Physical Review B. – 2017. – Vol. 95, No. 22. – Article number 224305. – 7 p.

7. Klimovskikh I. I. Giant Magnetic Band Gap in the Rashba-Split Surface State of Vanadium-Doped BiTeI : A Combined Photoemission and Ab Initio Study / I. I. Klimovskikh, A. M. Shikin, M. M. Otrokov, A. Ernst, **I. P. Rusinov**, O. E. Tereshchenko, V. A. Golyashov, J. Sanchez-Barriga, A. Yu. Varykhalov, O. Rader, K. A. Kokh, E. V. Chulkov // Scientific Reports. – 2017. – Vol. 7. – Article number 3353. – 8 p.

8. Zeugner A. Modular Design with 2D Topological-Insulator Building Blocks: Optimized Synthesis and Crystal Growth and Crystal and Electronic Structures of Bi_xTeI ($x = 2, 3$) / A. Zeugner, M. Kaiser, P. Schmidt, T. V. Menshchikova, **I. P. Rusinov**,

A. V. Markelov, W. Van den Broek, E. V. Chulkov, T. Doert, M. Ruck, A. Isaeva // *Chemistry of Materials*. – 2017. – Vol. 29, № 3. – P. 1321–1337.

9. Annese E. Electronic and spin structure of the wide-band-gap topological insulator: Nearly stoichiometric $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{S}$ / E. Annese, T. Okuda, E. F. Schwier, H. Iwasawa, K. Shimada, M. Natamane, M. Taniguchi, **I. P. Rusinov**, S. V. Eremeev, K. A. Kokh, V. A. Golyashov, O. E. Tereshchenko, E. V. Chulkov, A. Kimura // *Physical Review B*. – 2018. – Vol. 97, № 20. – Article number 205113. – 6 p.

10. **Rusinov I. P.** Chemically driven surface effects in polar intermetallic topological insulators A_3Bi / I. P. Rusinov, P. Golub, I. Yu. Sklyadneva, A. Isaeva, T. V. Menshchikova, P. M. Echenique, E. V. Chulkov // *Physical Chemistry Chemical Physics*. – 2018. – Vol. 20, № 41. – P. 26372–26385.

11. Otrokov M. M. Prediction and observation of an antiferromagnetic topological insulator / M. M. Otrokov, I. I. Klimovskikh, H. Bentmann, D. Estyunin, A. Zeugner, Z. S. Aliev, S. Gass, A. U. B. Wolter, A. V. Koroleva, A. M. Shikin, M. Blanco-Rey, M. Hoffmann, **I. P. Rusinov**, A. Yu. Vyazovskaya, S. V. Eremeev, Yu. M. Koroteev, V. M. Kuznetsov, F. Freyse, J. Sanchez-Barriga, I. R. Amiraslanov, M. B. Babanly, N. T. Mamedov, N. A. Abdullayev, V. N. Zverev, A. Alfonsov, V. Kataev, B. Buchner, E. F. Schwier, S. Kumar, A. Kimura, L. Petaccia, G. Di Santo, R. C. Vidal, S. Schatz, K. Kissner, M. Unzelmann, C. H. Min, S. Moser, T. R. F. Peixoto, F. Reinert, A. Ernst, P. M. Echenique, A. Isaeva, E. V. Chulkov // *Nature*. – 2019. – Vol. 576, № 7787 – P. 416–422.

12. Otrokov M. M. Unique Thickness-Dependent Properties of the van der Waals Interlayer Antiferromagnet MnBi_2Te_4 Films / M. M. Otrokov, **I. P. Rusinov**, M. Blanco-Rey, M. Hoffmann, A. Yu. Vyazovskaya, S. V. Eremeev, A. Ernst, P. M. Echenique, A. Arnau, E. V. Chulkov // *Physical Review Letters*. – 2019. – Vol. 122, № 10. – Article number 107202. – 6 p.

13. Eremeev S. V. Topological Magnetic Materials of the $(\text{MnSb}_2\text{Te}_4) \cdot (\text{Sb}_2\text{Te}_3)_n$ van der Waals Compounds Family / S. V. Eremeev, **I. P. Rusinov**, Yu. M. Koroteev, A. Yu. Vyazovskaya, M. Hoffmann, P. M. Echenique, A. Ernst, M. M. Otrokov,

E. V. Chulkov // Journal of Physical Chemistry Letters. – 2021. – Vol. 12, № 17. – P. 4268–4277.

14. **Rusinov I. P.** Spectral features of magnetic domain walls on the surface of three-dimensional topological insulators / I. P. Rusinov, V. N. Men'shov, E. V. Chulkov // Physical Review B. – 2021. – Vol. 104, № 3. – Article number 035411. – 13 p.

15. Zaitsev N. L. Interplay between exchange-split Dirac and Rashba-type surface states at the MnBi₂Te₄/BiTeI interface / N. L. Zaitsev, **I. P. Rusinov**, T. V. Menshchikova, E. V. Chulkov // Physical Review B. – 2023. – Vol. 107, № 4. – Article number 045402. – 9 p.

Выбор официальных оппонентов обосновывается их высокой квалификацией и наличием достижений мирового уровня в области спинтроники и спектроскопии, а ведущей организации – ее репутацией признанного научного центра, проводящего исследования в области физики конденсированного состояния.

Диссертация И.П. Русинова посвящена исследованию электронной структуры и топологических свойств материалов с сильным вкладом спин-орбитального взаимодействия и магнетизма. В частности, в диссертации детально изучается дисперсия состояний краёв запрещённой щели, поперечная проводимость, топологические инварианты, искривление Берри, спиновая текстура поверхностных состояний в семействах магнитных и немагнитных топологических изоляторов и полупроводников с гигантским спин-орбитальным расщеплением Рашбы. Актуальность темы диссертации вызвана широким спектром явлений, позволяющих существенно расширить функционал и миниатюризировать компонентную базу вычислительных устройств нового поколения. К таким явлениям относятся квантовый аномальный эффект Холла, квантовый спиновый эффект Холла, бездиссипативный спиновый транспорт, прецессия спина в баллистическом транспорте, а также эффект спинового фильтра.

На основании выполненных соискателем исследований были получены следующие основные результаты:

1. Установлено, что в семействе соединений $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{X}$ ($\text{X}=\text{Te}, \text{Se}, \text{S}$) многочастичные поправки к электронному спектру в рамках GW-приближения приводят к значительной модификации дисперсии состояний краёв запрещённой щели и, в свою очередь, дисперсии поверхностных состояний. Так, данные поправки приводят к уменьшению величины запрещённой щели в области инвертирования зоны Бриллюэна и, наоборот, увеличению запрещённой щели вне данной области. Среди данных соединений выделяется $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{S}$, для которого точка Дирака топологического поверхностного состояния располагается выше вершины валентной зоны, а величина запрещённой щели является максимальной для данного семейства соединений. Данная особенность электронного спектра позволяет применять данное соединения для индуцирования фермионов Майораны;
2. Найдено, что в семействе соединений BiTeX ($\text{X}=\text{I}, \text{Cl}, \text{Br}$) топологический фазовый переход из фазы тривиального полупроводника в фазу топологического изолятора возможен только для соединения BiTeI . Данный топологический переход происходит через фазу вейлевского полуметалла и сопровождается значительной модификацией поверхностных состояний Рашбы, которые в фазе топологического изолятора преобразуются в топологические состояния, защищённые симметрией по обращению времени;
3. Найдено, что соединения, принадлежащие к семейству Bi_2TeX ($\text{X}=\text{I}, \text{Br}$), одновременно принадлежат к классам как слабых топологических изоляторов, так и кристаллических (crystalline) топологических изоляторов. Таким образом, поверхностные состояния в случае естественной плоскости скола (001) топологически защищены зеркальной симметрией кристалла;
4. Для интерметаллидов KNa_2Bi , K_3Bi и Rb_3Bi выявлена возможность топологических фазовых переходов между фазами объёмного дираковского

полуметалла, топологического изолятора и тривиального полупроводника под воздействием гидростатического и одноосного сжатий;

5. Выявлены семейства магнитных полупроводниковых соединений $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_n$ и $(\text{MnSb}_2\text{Te}_4)(\text{Sb}_2\text{Te}_3)_n$, которые принадлежат к классу антиферромагнитных топологических изоляторов. Теоретически обнаружено, что в тонких плёнках данных соединений формируется фаза квантового аномального эффекта Холла;
6. Найдено, что на поверхности магнитных топологических изоляторов и магнитно допированных рашбовских полупроводников на границах магнитных доменов возникают низкоразмерные топологические состояния.

Все результаты, представленные автором, являются новыми. Новизна обусловлена тем, что:

- Впервые было проанализировано и обобщено влияние учёта многочастичных эффектов на детали электронной структуры семейства полупроводников $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{X}$ ($\text{X}=\text{Te}, \text{Se}, \text{S}$) с нетривиальной зонной топологией;

- Впервые проанализирована возможность топологического фазового перехода в полупроводниках с гигантским спин-орбитальным расщеплением Рашбы BiTeX ($\text{X}=\text{I}, \text{Cl}, \text{Br}$), а также прослежено как особенности топологического фазового перехода сказываются на особенностях дисперсии поверхностных состояний;

- Впервые были детально проанализированы топологические свойства объёма и электронная структура поверхностей семейств соединений Bi_2TeX и Bi_3TeX ($\text{X}=\text{I}, \text{Br}$). Выявлены особенности дисперсии и спиновой текстуры топологических поверхностных состояний в случае естественного скола поверхностей данных соединений;

- Впервые была проанализирована электронная структура семейства соединений на основе висмута и щелочных металлов: KNa_2Bi , K_3Bi , Rb_3Bi . Рассмотрено, как особенности полярного характера химических связей влияют на

поверхностную электронную структуру данных соединений, в частности, на формирование тривиальных состояний вследствие эффекта изгиба зон, а также модификацию топологических поверхностных состояний. Рассмотрено как одноосное сжатие и растяжение, а также гидростатическое сжатие формируют картину топологических фазовых переходов в данных соединениях;

- Впервые рассмотрены электронные и топологические свойства магнитных Ван дер Ваальсовских соединений $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_n$ и $(\text{MnSb}_2\text{Te}_4)(\text{Sb}_2\text{Te}_3)_n$ в случае объёма данных соединений, а также поверхностей и тонких плёнок;

- Впервые рассмотрена электронная структура магнитных доменных стенок на поверхности топологических изоляторов и систем с расщеплением Рашбы. Выявлено как особенности поверхностных состояний Дирака и Рашбы, а также магнитный порядок в области границы с вакуумом влияют на особенности индуцированных одномерных состояний в области магнитной доменной стенки.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что были найдены новые классы топологических соединений, которые являются платформой для последующего практического приложения в устройствах спинтроники и квантовых вычислений: антиферромагнитные топологические изоляторы, а также дуальные топологические изоляторы (которые являются одновременно слабыми и кристаллическими топологическими изоляторами). Полученные результаты выявляют как организация магнитного порядка и её особенности (магнитная конфигурация, направление легкой оси намагниченности, величина магнитных моментов) сказываются на электронных и топологических свойствах материалов с сильным спин-орбитальным взаимодействием. Также найдена взаимосвязь между структурными особенностями, обусловленными наличием висмута, щелочных металлов и галогенов, и электронной структурой, что важно для прогноза и предсказания топологических свойств соединений с сильным вкладом спин-орбитального взаимодействия. Совокупность найденных автором закономерностей важна для практического

приложения рассмотренных в диссертации материалов (в т.ч. в спинтронике), для предсказания свойств новых материалов, принадлежащих к классу топологических изоляторов и рашбовских полупроводников и интерпретации их экспериментально наблюдаемых свойств, а также для целенаправленного конструирования новых материалов с наперед заданными свойствами.

Результаты диссертационной работы И.П. Русинова могут быть использованы при проведении исследований в Физическом институте им. П. Н. Лебедева РАН, Томском Государственном Университете, Физико-техническом институте им. А. Ф. Иоффе, Институте физики полупроводников им. А. В. Ржанова Сибирского Отделения РАН, Институте физики металлов М. Н. Михеева Уральского Отделения РАН, Институте физики им. Л. В. Киренского Сибирского Отделения РАН, Институте физики твердого тела им. Ю. А. Осипьяна РАН, Московском Государственном Университете им. М. В. Ломоносова, Санкт-Петербургском Государственном Университете, Московском физико-техническом институте.

Достоверность результатов работы подтверждается их согласием с экспериментальными данными, результатами теоретических исследований других авторов в частных случаях, их публикациями в ведущих в мире рецензируемых журналах, а также представлением на многих Российских и международных конференциях.

Все научные результаты, включенные в диссертацию И.П. Русинова, получены лично автором, который осуществил все представленные в работе расчеты и обработал полученные данные. Подготовка результатов к публикации проводилась совместно с соавторами.

В ходе защиты соискатель И.П. Русинов аргументированно ответил на заданные ему вопросы членов диссертационного совета, а также на замечания ведущей организации и оппонентов.

Разработанные и апробированные автором новые теоретические подходы исследования электронной структуры и топологических свойств материалов, на

сегодняшний день широко вошедшие в практику исследователей, а также результаты проведенных автором исследований уникальных свойств топологических изоляторов и материалов со спин-орбитальным расщеплением Рашбы можно рассматривать в совокупности как выдающееся научное достижение, имеющее важнейшее значение для физики конденсированного состояния.

На заседании 20 января 2025 года диссертационный совет принял решение присудить И. П. Русинову учёную степень доктора физико-математических наук.

При проведении тайного голосования члены диссертационного совета в количестве 22 человек, из них 6 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации (1.3.8 — Физика конденсированного состояния), участвовавшие в заседании, из 26 человек, входящих в состав совета, проголосовали:

за присуждение учёной степени – 22,

против присуждения учёной степени – 0,

недействительных бюллетеней – 0.

Председатель диссертационного совета
член-корр. РАН, д.ф.-м.н.

Колачевский Николай Николаевич

Учёный секретарь диссертационного совета
д.ф.-м.н.

Золотько Александр Степанович

20 января 2025 г.