

ОТЗЫВ

официального оппонента о диссертации Силкина Игоря Вячеславовича «Электронная структура многокомпонентных тетрадимитоподобных топологических изоляторов» представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Диссертация посвящена детальному теоретическому исследованию электронной структуры ряда многокомпонентных тетрадимитоподобных полупроводниковых соединений, а также тонких пленок на их основе. По структуре работа состоит из пяти глав, а также формального введения. Первая глава посвящена введению в физику топологических изоляторов – нового класса веществ, характеризующихся изолирующим объемом и проводящими спин-поляризованными электронными поверхностными состояниями в трехмерном случае и одномерными краевыми каналами в двумерном. В этой главе последовательно вводятся основные понятия современной физики топологических изоляторов и показано, что язык топологических инвариантов является дополнительной и независимой характеристикой твердых тел. Перспективность топологических изоляторов как для наблюдения принципиально новых фундаментальных явлений, так и для практического использования привела к взрывному росту количества публикуемых на эту тему научных работ.

Актуальность работы связана с тем, что все исследуемые в работе соединения являлись кандидатами для реализации топологических изоляторов, однако теоретическая проверка наличия или отсутствия топологических свойств возможна лишь путем реалистичного расчета электронной структуры этих соединений, что и является основной темой диссертации.

Во второй главе сделан обзор методов расчета электронной структуры твердых тел, дано представление о теории функционала электронной плотности, описан метод линеаризованных присоединенных плоских волн и особенности его применения к исследуемым системам и, наконец, отдельный параграф посвящен учету релятивистским поправок. Использование самых

современных методов расчета свидетельствует о **надежности и достоверности полученных результатов.**

О **новизне и научной значимости** работы можно судить из глав с третьей по пятую, в которых представлены оригинальные результаты. Третья глава посвящена расчетам электронного спектра шести тетрадимитоподобных соединений свинца, олова, висмута, сурьмы, селена и теллура единого гомологического ряда, а также тонких пленок на их основе. Показано, что спин-орбитальное взаимодействие имеет ключевую роль в формировании электронного спектра вблизи уровня Ферми, а все исследованные соединения являются сильными топологическими изоляторами. Для построения электронной структуры поверхностных состояний проведен расчет тонких пленок с толщинами от одной до четырех элементарных ячеек. Показан процесс формирования дираковского конуса поверхностных состояний по мере увеличения толщины пленок. Четвертая глава посвящена тетрадемитоподобным соединениям GeBiTe и GeSbTe с композиционным беспорядком. Ключевой идеей данной главы является предположение, что интересующие топологические свойства зависят не от конкретного расположения атомов в слоях смешанного состава, а только от их относительной концентрации. Результаты расчетов, сделанных для соединений с концентрацией германия от 0 до 100% с шагом 25%, показали справедливость этой модели. Наконец, пятая глава посвящена четырехкомпонентным тетрадемитоподобным серосодержащим соединениям, а также тонким пленкам на основе этих соединений. Основными результатами данной главы является подтверждение наличия топологических свойств у объемных материалов. Подавляющая часть результатов, представленных в этих главах, получена впервые, что свидетельствует **новизне и научной значимости** работы.

Отдельно отметим **практическую значимость работы.** Эксперименты по наблюдению специфических свойств топологических изоляторов в большинстве случаев ограничиваются низкими температурами, что во многом связано с малой величиной (200 мэВ и менее) запрещенной зоны уже обнаруженных топологических изоляторов. Для расширения температурного диапазона в эксперименте необходим поиск новых топологических изоляторов с большей величиной запрещенной энергетической щели, что

возможно, в том числе, за счет изменения кристаллической структуры и атомного состава имеющихся соединений, чему и посвящена значительная часть работы. В частности, для серосодержащих соединений $\text{PbBi}_2\text{Te}_2\text{S}_3$ и $\text{PbBi}_4\text{Te}_4\text{S}_3$, результаты расчета электронной структуры которых представлены в главе 5, получены величины запрещенной зоны 307 мэВ и 319 мэВ, соответственно, что может обеспечить сохранение топологических свойств этих соединений вплоть до комнатной температуры.

Замечания.

К работе имеются следующие замечания:

1. В работе достаточно кратко даны пояснения о мотивации к исследованию тех или иных соединений. Это создает мнимое впечатление об оторванности расчетов от эксперимента. Пояснения такого рода уместно бы смотрелись, например, в конце главы 1.
2. Известно, что любой реальный экспериментальный образец имеет непостоянную толщину, и в случае тонкой пленки относительная вариация толщины может быть существенной. При расчете двухмерного топологического инварианта Z_2 тонких пленок был обнаружен любопытный результат, когда его величина немонотонно зависела от толщины пленки. Более того, для соединения $\text{Pb}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ наличие или отсутствие топологических свойств менялось при увеличении толщины пленки 3 раза. Этот факт кажется чрезвычайно удивительным сам по себе и, в свете вышесказанного, требует дополнительного пояснения и анализа как с точки зрения однозначности расчетов топологического инварианта, так и возможности экспериментальной реализации двумерного топологического изолятора на соединениях такого типа.
3. Непонятно, с какой целью для каждого из исследуемых соединений указываются результаты расчета, как с учетом спин-орбитального взаимодействия, так и без него. Какой физический смысл несут расчеты электронной структуры без спин-орбитального взаимодействия?

4. В работе не хватает списка используемых сокращений. Например, стоит только догадываться, что такое "а.е." - атомные единицы длины или что-то другое.

Указанные замечания не снижают общей значимости работы и не снижают общей положительной оценки работы. Полученные И.В. Силкиным результаты имеют существенное значение для физики топологических изоляторов. Основные результаты диссертации опубликованы в ведущих переводных отечественных журналах. Автореферат правильно и полно отражает содержание диссертации. Считаю, что представленная диссертационная работа, безусловно, удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым ВАК РФ к кандидатским диссертациям, а сам И.В. Силкин заслуживает присвоения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - физика конденсированного состояния.

Научный сотрудник лаборатории №26
Института Физики Полупроводников
им. А.В. Ржанова Сибирского отделения
Российской академии наук,
кандидат физико-математических наук
(защищен по специальности 01.04.10 – физика
полупроводников)

Дмитрий
Андреевич
Козлов

Подпись Д.А. Козлова заверяю

Ученый секретарь ИФП СО РАН,
кандидат физико-математических наук



Александр
Владимирович
Каламейцев

630090 г. Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева 13
тел. 8 (383) 330-90-55
e-mail: ifp@isp.nsc.ru
<http://www.isp.nsc.ru>

20.02.2015