

СВЕДЕНИЯ О РЕЗУЛЬТАТАХ ПУБЛИЧНОЙ ЗАЩИТЫ ДИССЕРТАЦИИ

Диссертационный совет Д 212.267.07, созданный на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», извещает о результатах состоявшейся 12 марта 2015 года публичной защиты диссертации Силкина Игоря Вячеславовича «Электронная структура многокомпонентных тетрадимитоподобных топологических изоляторов» по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук.

Время начала заседания: 14:30

Время окончания заседания: 16:30

На заседании диссертационного совета присутствовали 19 из 24 членов диссертационного совета, из них 7 докторов наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния:

1. Ивонин И.В., заместитель председателя диссертационного совета	д-р физ.-мат. наук	01.04.10
2. Киреева И.В., ученый секретарь диссертационного совета	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
3. Бордовицын В.А.	д-р физ.-мат. наук	01.04.02
4. Брудный В.Н.	д-р физ.-мат. наук	01.04.10
5. Войцеховский А.В.	д-р физ.-мат. наук	01.04.10
6. Давыдов В.Н.	д-р физ.-мат. наук	01.04.10
7. Дударев Е.Ф.	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
8. Караваев Г.Ф.	д-р физ.-мат. наук	01.04.10
9. Коротаев А.Д.	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
10. Лавров П.М.	д-р физ.-мат. наук	01.04.02
11. Мельникова Н.В.	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
12. Потехаев А.И.	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
13. Толбанов О.П.	д-р физ.-мат. наук	01.04.10
14. Трифонов А.Ю.	д-р физ.-мат. наук	01.04.02
15. Тюменцев А.Н.	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
16. Тютюрев В.Г.	д-р физ.-мат. наук	01.04.10
17. Чумляков Ю.И.	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
18. Шаповалов А.В.	д-р физ.-мат. наук	01.04.02
19. Шарапов А.А.	д-р физ.-мат. наук	01.04.02

Заседание провёл заместитель председателя диссертационного совета, доктор физико-математических наук Ивонин Иван Варфоломеевич.

По результатам защиты диссертации тайным голосованием (результаты голосования: за присуждение ученой степени – 19, против – нет, недействительных бюллетеней – нет) диссертационный совет принял решение присудить И.В. Силкину ученую степень кандидата физико-математических наук.

Заключение диссертационного совета Д 212.267.07
на базе федерального государственного автономного образовательного
учреждения высшего образования
«Национальный исследовательский Томский государственный университет»
Министерства образования и науки Российской Федерации
по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук
аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 12.03.2015 г., № 21

О присуждении **Силкину Игорю Вячеславовичу**, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация **«Электронная структура многокомпонентных тетрадимитоподобных топологических изоляторов»** по специальности **01.04.07** – Физика конденсированного состояния, принята к защите 25.12.2014 г., протокол № 18, диссертационным советом Д 212.267.07 на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» Министерства образования и науки Российской Федерации (634050, г. Томск, пр. Ленина, 36, приказ о создании диссертационного совета № 798-745/68 от 13.04.2007 г.).

Соискатель **Силкин Игорь Вячеславович**, 1983 года рождения.

В 2007 году соискатель окончил государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Томский государственный университет».

В 2014 году соискатель очно окончил аспирантуру федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет».

Работает в должности ведущего инженера лаборатории наноструктурных поверхностей и покрытий в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» Министерства образования и науки Российской Федерации.

Диссертация выполнена на кафедре физики металлов федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» Министерства образования и науки Российской Федерации.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, **Чулков Евгений Владимирович**, федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», кафедра физики металлов, профессор.

Официальные оппоненты:

Зотов Андрей Вадимович, доктор физико-математических наук, профессор, федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт автоматизации и процессов управления Дальневосточного отделения Российской академии наук, лаборатория технологии двумерной микроэлектроники, заведующий лабораторией

Козлов Дмитрий Андреевич, кандидат физико-математических наук, федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук, лаборатория № 26, научный сотрудник

дали положительные отзывы о диссертации.

Ведущая организация – федеральное государственное бюджетное учреждение науки **Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук**, г. Красноярск, в своем положительном заключении, подписанном **Овчинниковым Сергеем Геннадьевичем** (доктор физико-математических наук, профессор, заместитель директора института), указала, что изучение электронных свойств двумерных топологических изоляторов является одним из приоритетных направлений в физике топологических изоляторов. В отличие от обычных тонких полупроводниковых пленок, интерес к тонким пленкам топологических изоляторов обусловлен уникальностью их краевых состояний, которые открывают перспективность создания на их основе миниатюрных приборов для спинтроники и квантовых компьютеров.

Актуальность диссертации обусловлена развитием именно пленочного подхода. К наиболее значимым результатам относятся: предсказание структурных параметров, при которых слоистые тетрадимитоподобные соединения будут проявлять свойства топологических изоляторов; исследование зависимости двумерных топологических свойств тонких пленок соединений, являющихся трехмерными топологическими изоляторами, от их толщины; предсказание существования двух конусов Дирака в соединении $\text{Pb}_2\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{S}_3$. Полученные результаты могут служить основой для экспериментального исследования предсказанных структур с целью их дальнейшего практического применения, и могут быть использованы в научных и учебных организациях при проведении исследований по сходной тематике.

Соискатель имеет 9 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации – 9 работ, опубликованных в рецензируемых научных изданиях – 4 (из них 1 статья в зарубежном журнале, включенном в Web of Science, и 3 статьи в российских журналах, переводные версии которых включены в Web of Science), в сборниках материалов международных и всероссийских научных конференций – 5. Общий объем публикаций – 1,95 п.л., авторский вклад – 0,8 п.л.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Силкин, И. В. Трехмерные и двумерные топологические изоляторы в слоистых соединениях $\text{Pb}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$, $\text{Pb}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ и $\text{Pb}_2\text{Bi}_2\text{Se}_5$ / **И. В. Силкин**, Ю. М. Коротеев, С. В. Еремеев, Г. Бильмайер, Е. В. Чулков // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2011. – Т. 94, №3. – С. 234–239. – 0,7 / 0,3 п.л.

2. Silkin, I. V. Influence of the Ge – Sb sublattice atomic composition on the topological electronic properties of $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ / **I. V. Silkin**, Yu. M. Koroteev, G. Bihlmayer, E. V. Chulkov // Applied Surface Science. – 2013. – Vol. 267. – P. 169–172. – 0,3 / 0,15 p.p. – DOI: 10.1016/j.apsusc.2012.09.017.

3. Силкин, И. В. Природные серосодержащие минералы как топологические изоляторы с широкой запрещенной щелью / **И. В. Силкин**, Т. В. Меньщикова, М. М. Отроков, С. В. Еремеев, Ю. М. Коротеев, М. Г. Вергниори, В. М. Кузнецов,

Е. В. Чулков // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2012. – Т. 96, № 5. – С. 352. – 0,35 / 0,1 п.л.

4. Ereemeev S. V. New topological surface state in layered topological insulators: Unoccupied dirac cone / S. V. Ereemeev, **I. V. Silkin**, T. V. Menshchikova, A. P. Protogenov, E. V. Chulkov // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2012. – Т. 96, № 11. – С. 870–874. – 0,35 / 0,1 п.л. (на англ. яз.)

На автореферат поступили 6 положительных отзывов. Отзывы представили:

1. **В.В. Чалдышев**, д-р физ.-мат. наук, ведущий научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе, г. Санкт-Петербург, *без замечаний*.
2. **С.А. Безносюк**, д-р физ.-мат. наук, проф., заведующий кафедрой физической и коллоидной химии Алтайского государственного университета, г. Барнаул, *с замечанием* об отсутствии верификации полученных результатов с экспериментальными данными.
3. **А.М. Бобрешов**, д-р физ.-мат. наук, проф., декан физического факультета, Воронежского государственного университета, заведующий кафедрой электроники, *с замечанием* об отсутствии оценки погрешности проведенных расчетов.
4. **А.Г. Липницкий**, д-р физ.-мат. наук, заведующий лабораторией теоретических исследований и компьютерного моделирования Центра наноструктурных материалов и нанотехнологий Белгородского государственного национального исследовательского университета, *с замечаниями*: не приведены сопоставления результатов расчетов с известными экспериментальными данными; не проведено обсуждение достоверности аналогичных теоретических прогнозов топологических свойств электронной структуры, известных из литературных источников; отсутствует обоснование точности, с которой рассчитаны представленные численные данные; не обсуждено влияние использованного приближения к плотности обменно-корреляционной энергии электронной подсистемы на результаты расчетов характеристик электронной структуры топологических изоляторов методом функционала плотности: оценка такого влияния должна входить как одна из основных составляющих в обосновании достоверности результатов расчетов электронной структуры систем с энергетической щелью методом функционала плотности.

5. **Д.А. Таюрский**, д-р физ.-мат. наук, проф., заместитель директора Института физики Казанского (Приволжского) федерального университета, *с замечанием*: не ясно, какое влияние оказывают температурные эффекты на топологические свойства, и что является критерием применимости ТИ при создании реальных приборов. 6. **В.Н. Удодов**, д-р физ.-мат. наук, проф., заведующий лабораторией физики твердого тела, заведующий кафедрой теоретической физики и информационных технологий в образовании Хакасского государственного университета им. Н.Ф. Катанова, г. Абакан, и **А.В. Попов**, канд. физ.-мат. наук, доц., проректор по науке и инновациям Хакасского государственного университета им. Н.Ф. Катанова, г. Абакан, *с замечаниями*: основной вывод 3 является описательным при отсутствии анализа; не показано, согласуются ли результаты автора с результатами других авторов (в частности, экспериментальными).

В отзывах отмечается, что синтез новых материалов является трудоемкой и дорогостоящей задачей, поэтому предсказания электронных свойств новых топологических изоляторов чрезвычайно важны для их практического применения; диссертационная работа развивает новое перспективное направление электронной теории твердого тела; выполненное современными методами исследование является важным этапом в развитии теории топологических изоляторов и возможностей управления их электронными свойствами.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что А.В. Зотов является известным специалистом в области изучения электронной структуры и влияния на нее спин-орбитального взаимодействия для двумерных систем; Д.А. Козлов является известным специалистом в области изучения топологических изоляторов и квантового эффекта Холла; в Институте физики им. Л.В. Киренского работают квалифицированные специалисты, известные своими достижениями в теоретических расчётах электронной структуры сложных полупроводниковых систем методом функционала электронной плотности; на базе института создан диссертационный совет по специальности 01.04.07.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработан метод, позволяющий свести сложную задачу изучения топологических свойств электронной структуры системы с композиционным беспорядком к более простой – изучению этих свойств упорядоченной структуры при разных концентрациях и положениях атомов в слоях смешанного состава;

предложены новые многокомпонентные тетрадимитоподобные топологические изоляторы;

доказано существование поверхностных топологических состояний в трехкомпонентных и четырехкомпонентных тетрадимитоподобных материалах.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

доказано, что слоистые трёхкомпонентные тетрадимитоподобные соединения $(A^{IV}B^{VI})_2 \cdot A^V_2B^{VI}_3$, а также четырёхкомпонентные тетрадимитоподобные соединения $(PbS)_n \cdot (Bi_2Te_2S)_m$ являются трёхмерными топологическими изоляторами; некоторые тонкие плёнки этих соединений являются двумерными топологическими изоляторами; слоистые квазибинарные соединения $Ge_2Bi_2Te_5$ и $Ge_2Sb_2Te_5$ со слоями смешанного состава, в которых атомы Ge и Bi(Sb) статистически распределены по узлам кристаллической решётки, являются сильными трёхмерными топологическими изоляторами;

применительно к проблематике диссертации эффективно использован полнопотенциальный метод присоединенных плоских волн квантовой механики для расчета энергетической зонной структуры;

раскрыто, что трёхмерный топологический изолятор $Pb_2Bi_2Te_2S_3$ имеет два конуса Дирака в центре зоны Бриллюэна.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждаются тем, что:

определены топологические изоляторы, обладающие широкой фундаментальной запрещённой щелью, что позволяет им проявлять топологические электронные свойства при повышенных температурах;

представлены результаты, которые могут служить надёжной основой для экспериментального исследования предсказанных топологических изоляторов и создания эффективных способов управления их свойствами с целью дальнейшего практического применения.

Рекомендации об использовании результатов диссертационного исследования. Полученные результаты могут быть использованы в научных и учебных организациях, в которых ведутся исследования по сходной тематике: Институте физики им. Киренского СО РАН (г. Красноярск), Институте физики полупроводников СО РАН (г. Новосибирск), Московском государственном университете им. М.В. Ломоносова, Физическом институте им. П.Н. Лебедева РАН (г. Москва), Институте радиоэлектроники им. В.А. Котельникова РАН (г. Москва), Центре лазерной технологии и материаловедения (г. Москва), Физико-техническом институте им. А.Ф. Иоффе (г. Санкт-Петербург), Институте автоматизации и процессов управления ДВО РАН (г. Владивосток), Национальном исследовательском Томском государственном университете и др.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

идея базируется на квантовомеханической природе топологических изоляторов и общепринятой методике вычисления Z_2 топологического инварианта, при помощи которого классифицируются различные топологические состояния кристаллов;

использовано сравнение авторских результатов с полученными ранее результатами по данной тематике.

установлено качественное совпадение авторских результатов с результатами, представленными в независимых источниках.

Научная новизна работы заключается в том, что впервые проведены полностью релятивистские расчёты объёмной электронной структуры малоизученных тетрадимитоподобных соединений типа $(A^{IV}B^{VI})_2 \cdot A^V_2B^{VI}_3$ и $(PbS)_n \cdot (Bi_2Te_2S)_m$, и на их основе выявлены материалы, являющиеся трёхмерными топологическими изоляторами. Исследована зависимость двумерных топологических свойств тонких плёнок указанных выше соединений, являющихся трёхмерными топологическими изоляторами, от их толщины. В соединении $Pb_2Bi_2Te_2S_3$ теоретически предсказано существование двух конусов Дирака в центре двумерной зоны Бриллюэна.

Личный вклад соискателя состоит в: участии в постановке цели и задач исследования, выборе средств достижения цели, формулировке научных положений и выводов, подготовке к публикации научных статей по теме диссертации, в получении численных результатов исследования.

Диссертация соответствует п. 9 Положения о присуждении ученых степеней, является научно-квалификационной работой, в которой содержится решение задачи по поиску новых топологических изоляторов, исследованию их электронной структуры и топологических свойств, за счёт изменения кристаллической структуры и атомного состава, имеющей значение для развития физики конденсированного состояния.

На заседании 12.03.2015 г. диссертационный совет принял решение присудить **Силкину И.В.** ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 19 человек, из них 7 докторов наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния, участвовавших в заседании, из 24 человек входящих в состав совета, проголосовал: за – 19 , против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Заместитель председателя
диссертационного совета



Ивонин Иван Варфоломеевич

Ученый секретарь
диссертационного совета

Киреева Ирина Васильевна

12.03.2015 г.