

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу
Рябищенковой Анастасии Геннадьевны «Адсорбция, диффузия и интеркаляция
немагнитных атомов на поверхностях тетрадимитоподобных топологических
изоляторов», представленную на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук по специальности
01.04.07 – физика конденсированного состояния

Диссертационная работа Рябищенковой А.Г. посвящена теоретическому исследованию с использованием первопринципных расчетов адсорбции, диффузии и интеркаляции немагнитных атомов на поверхностях тетрадимитоподобных топологических изоляторов Be_2Se_3 и Be_2Te_3 . Рассматриваемая тема актуальна в свете того, что топологические изоляторы являются перспективными материалами и имеют значительный потенциал для использования, например, в приборах спинтроники. Изучение взаимодействия различных веществ, в том числе отдельных адатомов, с поверхностями подобных материалов, безусловно, интенсифицирует развитие науки о новых перспективных материалах со сложной атомно-электронной структурой.

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы из 116 наименований. Работа изложена на 137 страницах машинописного текста, содержит 43 рисунка и 9 таблиц.

Во введении обосновывается актуальность исследуемой проблемы, сформулированы цель и задачи диссертационной работы, описаны научная новизна, научная и практическая ценность, основные защищаемые положения.

Первая глава посвящена описанию теоретических методов исследования взаимодействия адатомов с поверхностью рассматриваемых в работе топологических изоляторов. Дается описание основ теории функционала электронной плотности, псевдопотенциального подхода, метода проекционных присоединенных волн, метода анализа зарядового состояния атомов. Приводятся основные положения теории переходного состояния и описываются метод подталкивания упругой ленты для расчета энергии активации диффузии адатомов и методика расчета коэффициента диффузии.

Во второй главе обсуждаются полученные в работе адсорбционные характеристики атомов 1, 2 и 13 групп, такие как энергия и позиция адсорбции, количество переданного поверхности заряда, а также локальная атомная структура вблизи адатома; анализируются и выявляются тенденции в изменениях данных характеристик внутри группы.

Третья глава посвящена исследованию диффузии адатомов по бездефектным поверхностям (0001) Be_2Se_3 и Be_2Te_3 . Рассматриваются энергии активации проникновения адатомов под поверхность и диффузии по поверхности. Проводятся расчеты температурных зависимостей диффузионных путей адатомов.

В четвертой главе представлены результаты исследования диффузии и интеркаляции адатомов щелочных металлов с поверхности Be_2Se_3 , содержащей моноатомную ступень, в ван-дер-ваальсовы пустоты. Рассматривается также поведение адатомов на верхних краях ступеней.

В пятой главе дается теоретическая интерпретация эксперимента, в котором допинг поверхности (0001) Be_2Se_3 атомами углерода приводил к смещению точки Дирака в направлении зоны проводимости, что сопровождалось уширением первого межплоскостного расстояния.

Научная новизна полученных в диссертационной работе результатов заключается в том, что впервые проведено систематическое первопринципное исследование адсорбции, диффузии и интеркаляции атомов 1, 2 и 13 групп, нанесенных как на идеальную, так и на ступенчатую поверхности тетрадимитоподобных топологических изоляторов. Получены новые данные по энергиям адсорбции адатомов 1, 2 и 13 групп на поверхности (0001) тетрадимитоподобных топологических изоляторов, по энергиям активации диффузии адатомов на указанной поверхности, а также диффузионных длинах и их зависимости от температуры. Результаты исследования адсорбции атомов цезия и углерода на поверхности Be_2Se_3 (0001) объясняют экспериментально наблюдаемые свойства данных систем. Результаты исследования диффузии атомов рубидия на ступенчатой поверхности Be_2Se_3 (0001) позволяют проинтерпретировать экспериментальные данные, полученные методом сканирующей туннельной микроскопии.

Научная и практическая значимость работы заключается в том, что полученные в работе результаты теоретического исследования адсорбции, диффузии и интеркаляции немагнитных атомов на поверхности топологических изоляторов вносят существенный вклад в область, связанную с изучением топологически-нетривиальных материалов, и способствуют интерпретации имеющихся в литературе экспериментальных данных. Изложенный в диссертации материал может быть использован в последующих научных исследованиях в качестве априорной информации о процессах адсорбции, диффузии и интеркаляции атомов трех рассмотренных групп на поверхностях (0001) Be_2Se_3 и Be_2Te_3 . Знание равновесных положений адатомов на поверхностях рассматриваемых материалов, а также информация о зарядовом состоянии адатомов, могут быть использованы для проведения первопринципных и модельных теоретических расчетов. Информация о локализации, энергии активации диффузии и диффузионных длинах адсорбатов может быть полезной при планировании экспериментов, а также для интерпретации их результатов.

Достоверность результатов исследований обусловлена корректностью постановки решаемых задач и их физической обоснованностью, применением современных методов расчета, взаимным согласием и непротиворечивостью полученных результатов и выводов, а также качественным и количественным

согласием полученных результатов с результатами других теоретических и экспериментальных исследований. Обоснованность научных положений и выводов, сформулированных в диссертации, не вызывает сомнения.

Результаты и выводы диссертационной работы Рябищенковой А.Г. достоверны и имеют научную и практическую ценность. Защищаемые положения отражены в выводах диссертации. Работа достаточно апробирована, материалы докладывались на международных и российских конференциях. По результатам работы опубликовано 10 научных работ, из которых 4 – в высокорейтинговых журналах, индексируемых в Web of Science и Scopus. Содержание автореферата соответствует содержанию диссертационной работы.

К диссертации имеются следующие замечания.

1. Считаю не вполне обоснованным введение в работе весьма условной величины – температуры активации диффузии. Согласно определению автора, это температура, при которой адатом «начинает проходить не менее $2,5 \text{ \AA}$ за 1 минуту» (по всей видимости, имеется в виду среднеквадратическое смещение адатома). Нет пояснений почему именно за 1 минуту, а не, например, за 10 минут и т.д.

2. В первом выводе используется неверный оборот: «Показано, что атомы 1, 2 и 13 групп на поверхностях $\text{Bi}_2\text{Se}_3(0001)$ и $\text{Bi}_2\text{Te}_3(0001)$ адсорбируются в ямочные позиции ГЦК типа...». На самом деле, разница между энергиями адсорбции в ГЦК и ГПУ позициях, согласно данным автора, для многих адатомов сравнительно небольшая, что говорит о том, что адатомы могут занимать как ГЦК, так и ГПУ позиции, но с разными вероятностями, зависящими от энергии адсорбции. Сам автор это знает и несколько раз писал об этом в диссертации, однако в выводе использовал неверный оборот, который может ввести в заблуждение читателя.

3. Во втором выводе снова встречается неверное высказывание, искажающее результаты автора: «Для всех рассматриваемых адатомов диффузия на поверхностях $\text{Bi}_2\text{Se}_3(0001)$ и $\text{Bi}_2\text{Te}_3(0001)$ происходит путем перескоков из позиций типа ГЦК в позиции типа ГПУ через мостиковые позиции, являющиеся переходными состояниями». В действительности, механизм диффузии адатомов по рассматриваемой поверхности комбинированный и состоит из двух последовательных скачков: из ГЦК в ГПУ позицию, затем из ГПУ в следующую ГЦК позицию. В обозначениях работы это $f \rightarrow h \rightarrow f$ (можно, кстати, рассматривать и как $h \rightarrow f \rightarrow h$). Важны сразу оба энергетических барьера, т.е. два значения энергий активации переходов $f \rightarrow h$ и $h \rightarrow f$, которые и учитываются в формуле для расчета коэффициента диффузии (формула 1.29 на стр. 31 диссертации и на стр. 12 автореферата), и длина диффузионного скачка в упомянутой формуле берется именно как всего комбинированного перехода $f \rightarrow h \rightarrow f$. Однако автор почему-то про это забывает при написании выводов к третьей главе и второго вывода диссертации.

Указанные замечания не изменяют положительной оценки работы. Диссертацию Рябищенковой А.Г. можно считать научно-квалификационной работой, в которой содержится решение задачи исследования адсорбции, диффузии и интеркаляции немагнитных атомов на поверхностях тетрадимитоподобных топологических изоляторов, имеющей существенное значение для физики конденсированного состояния.

По актуальности проблемы, уровню и объему выполненных исследований, научной новизне и практической значимости результатов, достоверности выводов работа удовлетворяет всем требованиям ВАК РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям и изложенным в пунктах 9–14 действующего «Положения о присуждении учёных степеней», а её автор, Рябищенкова Анастасия Геннадьевна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент

заведующий кафедрой высшей математики
и математического моделирования
ФГБОУ ВО «Алтайский государственный
технический университет им. И.И. Ползунова»
(656038, Алтайский край, г. Барнаул, пр. Ленина, 46;
+7(3852)29-07-10; altgtu@list.ru; www.altstu.ru),
доктор физико-математических наук
(01.04.07 – физика конденсированного состояния),
профессор

Полетаев Геннадий Михайлович
e-mail: gmpoletaev@mail.ru
тел. +79132362365

03.04.2018

Подпись заверяю:
Начальник УКСП и СО



А.С. Химочка