



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по научной работе ННГУ
Доктор физ.-мат. наук, доцент

В.Б. Казанцев

« 10 » мая 2017 г.

ОТЗЫВ

ведущей организации – Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского» (ННГУ им. Н.И. Лобачевского)

на диссертацию Еналдиева Владимира Викторовича
«СВОЙСТВА КРАЕВЫХ И ПОВЕРХНОСТНЫХ СОСТОЯНИЙ В ДИРАКОВСКИХ МАТЕРИАЛАХ», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10 – Физика полупроводников

Актуальность темы диссертационной работы

Одним из наиболее актуальных направлений в физике полупроводников в последние 10–15 лет является экспериментальное и теоретическое исследование материалов с дираковскими (коническими) особенностями электронного спектра. К таким материалам, как известно, относятся графен и графеноподобные двумерные материалы на основе ковалентных полупроводников IV группы (кремниевый аналог графена силицен и двумерное гексагональное олово – станен). Кроме того, дираковским конусом характеризуются электронные состояния на краю двумерных и на поверхности трехмерных топологических изоляторов (ТИ) и на поверхности топологических кристаллических изоляторов (ТКИ) – твердых растворов на основе соединений $A^{IV}B^{VI}$ со структурой каменной соли.

Теоретические исследования ТИ и ТКИ связаны с бурным развитием в последнее десятилетие топологической зонной теории, в рамках которой принимается во внимание не только симметрия кристаллического пространства (пространственная группа симметрии бесконечного кристалла), но и группы гомологий заполненных энергетических зон кристалла, являющиеся его топологическими инвариантами. При этом постулируется так называемый принцип соответствия «объем – граница», согласно которому на границе двух полубесконечных трехмерных (двумерных) диэлектрических кристаллов, характеризуемых

различными топологическими инвариантами, возникают двумерные поверхностные (одномерные краевые) проводящие состояния.

Несмотря на то, что топологическая классификация материалов в целом принята научным сообществом и используется для предсказания возникновения проводящих поверхностных или краевых состояний, ряд принципиально важных вопросов все еще остается неизученным. В частности, методы топологической зонной теории не позволяют определить закон дисперсии поверхностных (краевых) состояний в зависимости от типа поверхности (края), что принципиально важно, например, при изучении электронного транспорта по поверхности ТИ и ТКИ. Более того, формирование проводящих или диэлектрических поверхностных (краевых) состояний на границе раздела двух материалов с одинаковыми значениями топологических инвариантов никак не описывается в рамках топологической зонной теории, а потому такая задача должна решаться методами «традиционной» зонной теории твердых тел. В этой связи теория как условно топологических (обусловленных скачком топологического инварианта на границе раздела), так и условно нетопологических (не связанных с изменением топологических инвариантов) поверхностных (краевых) состояний может быть построена единообразно в рамках известных методов зонной теории (метод сильной связи, приближение огибающей функции). Разработка теории поверхностных состояний различного типа несомненно является важной и актуальной в современной физике полупроводников.

Примечательно, что все указанные выше материалы (графен, ТИ, ТКИ) являются либо бесщелевыми, либо узкозонными полупроводниками и минимальное феноменологическое описание краевых и поверхностных электронных состояний в них осуществляется в рамках двухзонных $k\cdot p$ -моделей, позволяющих свести исследование свойств поверхностных (краевых) состояний к решению трехмерного (двумерного) уравнения Дирака и его модификаций. В диссертационной работе В.В. Еналдиева в рамках феноменологического подхода строится теория поверхностных и краевых электронных состояний и решается ряд фундаментальных задач для ТИ со структурой теллурида висмута, твердого раствора висмут-сурьма, ТКИ со структурой каменной соли, а также графена. Поэтому **актуальность выбранной темы диссертационной работы В.В. Еналдиева не вызывает никаких сомнений.**

Научная новизна и достоверность полученных результатов

Диссертация В.В. Еналдиева состоит из введения, обзора литературы, трех глав, заключения, списка условных обозначений и сокращений, библиографии и двух приложений.

Во введении обосновывается актуальность темы исследования, приводятся цели и задачи диссертационного исследования, обсуждаются научная новизна, практическая значимость работы и степень достоверности результатов исследования. Введение содержит, конечно, и список положений, выносимых на защиту.

Обзор литературы посвящен вопросам, связанным с поверхностными состояниями в ТИ типа $\text{Bi}_2(\text{Se,Te})_3$, ТКИ типа $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x(\text{Se,Te})$, результатам теоретических и экспериментальных работ по эффекту Ааронова-Бома в нанопроволоках на основе трехмерных ТИ, а также красным состояниям в графене. Обзор литературы в целом содержит ссылки на все ключевые работы в соответствующих областях и позволяет получить представление о современном их состоянии.

В первой главе диссертации исследованы спектры поверхностных состояний в прямозонных узкощелевых полупроводниках типа $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x(\text{Se,Te})$ и $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ с экстремумами энергетических зон в L точке зоны Бриллюэна. Введено однопараметрическое граничное условие, позволяющее рассчитать распространенные состояния на поверхности таких полупроводников. Впервые показано, что на плоской границе поверхностные состояния имеют спектр безмассовых дираковских фермионов, энергии которых лежат в зависимости от знака феноменологического параметра в граничном условии для огибающих функций либо в запрещенной зоне, либо на фоне одной из разрешенных зон. Также впервые получено точное аналитическое решение для электронного спектра в трехмерном дираковском кристалле в геометрии цилиндрической нанопроволоки, в т.ч. и в присутствии внешнего продольного однородного стационарного магнитного поля. В спектре выделены как «объемные» размерно-квантованные состояния, так и поверхностные подзоны. Впервые вычислен вклад одномерных поверхностных подзон в магнитопроводимость квантовой проволоки. Предсказаны осцилляции Ааронова-Бома магнитопроводимости нанопроволоки в том случае, когда энергии поверхностных состояний лежат вне запрещенной зоны на фоне размерно-квантованных подзон.

Вторая глава посвящена исследованию граничных условий для огибающих функций на поверхности трехмерных ТИ и спектров поверхностных состояний в таких системах. С использованием условий эрмитовости эффективного гамильтониана, инвариантности граничных условий относительно обращения времени и операций пространственной симметрии поверхности (111) впервые выведено общее граничное условие для огибающих функций в трехмерных ТИ типа $\text{Bi}_2(\text{Se,Te})_3$, которое содержит три действительных феноменологических параметра, определяемых микроскопическими характеристиками поверхности. В результате анализа зависимости спектров распространенных состояний на поверхности (111) от значений параметров в граничном условии сделан вывод о том, что в

общем случае спектр не имеет «стандартного» конического вида. Более того, аналогичные результаты (отсутствие в общем случае конической дисперсии краевых состояний) получены и для двумерного ТИ в рамках микроскопического подхода – в модели сильной связи. При этом в соответствии с принципом соответствия «объем – граница» для всех энергий в запрещенной зоне объемного материала существует нечетное число пар краевых состояний.

В третьей главе диссертации решена задача о поглощении электромагнитного излучения электронной подсистемой наноперфорированного графена. Впервые показано, что вблизи отверстия в графене возможно существование квазистационарных краевых состояний с квазиэквидистантным спектром, которые приводят к резонансу в поглощении циркулярно поляризованного излучения. Для отверстий нанометрового диаметра резонансная частота лежит в терагерцовом диапазоне. В условиях резонанса абсолютным значением коэффициента поглощения можно управлять при помощи напряжения на затворе.

В приложения вынесен ряд громоздких расчетов, относящихся к первой главе диссертации.

Таким образом, после прочтения диссертационной работы можно сделать вывод, что она **содержит целый ряд новых научных результатов**, обогащающих соответствующую область знаний.

При проведении расчетов автор использовал проверенные методы теоретической физики полупроводников (метод инвариантов, *k*-*p*-метод, приближение огибающей функции, метод сильной связи) в совокупности со стандартными подходами квантовой механики, что дает основание считать полученные результаты **достоверными**.

Практическая значимость работы

Несомненно, наиболее важным с практической точки зрения результатом работы является предсказание резонансного поглощения излучения терагерцового диапазона частот электронами, локализованными вблизи нанотверстий в графене. Это явление дает возможность создания на основе наноперфорированного графена амплитудных модуляторов для терагерцового излучения.

В целом, полученные в диссертации результаты могут быть использованы при проведении исследований транспортных и оптических свойств в ТИ, ТКИ и графене в организациях, занимающихся экспериментальным и теоретическим исследованием этих систем, включая Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН (гор. Москва), ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН (гор. Москва), МГУ им. М.В. Ломоносова (гор. Москва), ИФТТ РАН (гор. Черноголовка, МО), ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН (гор. Черноголовка, МО), ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН (гор. Санкт-Петербург), ННГУ им. Н.И. Лобачевского (гор. Нижний Новгород), ИФМ РАН (гор. Нижний Новгород), ИФП им. А.В. Ржанова СО РАН (гор. Новосибирск).

Замечания

Диссертация В.В. Еналдиева написана ясным физическим языком и производит приятное впечатление, однако в процессе ее чтения возникает несколько вопросов и замечаний:

1. В первой главе работы не указаны условия на тип границ, для которых справедливо однопараметрическое граничное условие $\Gamma\psi|_S = 0$ для биспинорной волновой функции с граничным оператором Γ , определяемым выражением (1.19). Хотелось бы иметь разъяснения о том, как физически реализуются такие поверхности.
2. В разделе 2.1 после учета эрмитовости гамильтониана в ограниченной области пространства автором получено условие (2.4) для матрицы Q , определяемой микроскопической структурой поверхности трехмерного топологического изолятора. Какое число независимых феноменологических параметров содержит матрица Q из выражения (2.4)?
3. В этом же разделе автором учтена T -инвариантность и пространственная симметрия поверхности (111), в результате чего матрица Q принимает вид (2.6) и содержит уже 3 действительных феноменологических параметра. Автору следовало бы уделить большее внимание обсуждению вопроса о физическом смысле этих параметров и их связи с параметрами зонной структуры топологического изолятора и работой выхода электрона из него.

Сделанные замечания, однако, не являются принципиальными, не отражаются на научной новизне, практической значимости работы и несколько не снижают ее высокий уровень, а носят, скорее, характер пожеланий для проведения дальнейших исследований.

Диссертация В.В. Еналдиева является законченной научной работой, выполненной на высоком уровне, и содержит решение ряда задач о транспортных и оптических свойствах поверхностных и краевых состояний в топологических (кристаллических) изоляторах и графене. Материалы диссертации опубликованы в ведущих российских (Письма в ЖЭТФ, ЖЭТФ) и зарубежных (Physical Review B) специализированных научных журналах и доложены на тематических российских и международных научных конференциях. Общее количество публикаций по теме диссертации в рецензируемых журналах, входящих в Перечень ВАК РФ – 5. Автореферат полностью отражает содержание диссертации.

По своему научному уровню, актуальности, новизне, практической значимости и достоверности полученных результатов диссертация В.В. Еналдиева «**Свойства краевых и поверхностных состояний в дираковских материалах**» представляет собой завершённую научно-квалификационную работу, соответствующую требованиям Положения о

присуждении ученых степеней, утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а ее автор, **Еналдиев Владимир Викторович**, безусловно заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности **01.04.10 – Физика полупроводников**.

Доклад В.В. Еналдиева по материалам диссертационной работы и отзыв ННГУ по данной диссертации заслушаны и обсуждены на расширенном заседании кафедры теоретической физики физического факультета и лаборатории «Теория наноструктур» Научно-исследовательского физико-технического института (НИФТИ) ННГУ им. Н.И. Лобачевского 19 апреля 2017 г. (протокол № 12). На заседании присутствовало 20 сотрудников, в том числе 4 доктора и 12 кандидатов физико-математических наук – специалистов по теме диссертационного исследования.

Отзыв подготовили:

Сатанин Аркадий Михайлович,
доктор физико-математических наук, профессор,
профессор кафедры теоретической физики
физического факультета ННГУ им. Н.И. Лобачевского
почтовый адрес: 603950, гор. Нижний Новгород, пр. Гагарина, дом 23, корпус 3, комната 506
номер телефона: (831) 4623304
адрес электронной почты: sarkady@mail.ru



Конаков Антон Алексеевич,
кандидат физико-математических наук,
ассистент кафедры теоретической физики
физического факультета ННГУ им. Н.И. Лобачевского
почтовый адрес: 603950, гор. Нижний Новгород, пр. Гагарина, дом 23, корпус 3, комната 537
номер телефона: 8-910-391-04-67
адрес электронной почты: konakov_anton@mail.ru



и.о. зав. кафедрой теоретической физики
физического факультета, д. ф.-м. н., доцент



Бурдов В.А.

и.о. зав. лабораторией «Теория наноструктур»
НИФТИ, к. ф.-м. н.



Денисенко М.В.

ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского»
603950, Нижний Новгород, пр. Гагарина, дом 23, корпус 2,
номер телефона: (831) 4623304
адрес электронной почты: unn@unn.ru