

ОТЗЫВ

официального оппонента о диссертации Загороднева Игоря Витальевича «Краевые электронные возбуждения в графене и 2D топологическом изоляторе на основе квантовых ям Cd(Hg)Te», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10 – «Физика полупроводников»

Диссертационная работа И.В. Загороднева посвящена **актуальной теме**: теоретическому исследованию краевых электронных состояний в двумерных (2D) полупроводниковых материалах и структурах особого типа. Речь идет о системах, двумерные (то есть формально определенные на бесконечной плоскости) электронные состояния в которых могут быть в длинноволновом приближении описаны 2D уравнениями типа Дирака с периодическими граничными условиями. Примерами подобных систем являются графен и наноструктуры на основе квантовых ям CdTe/HgTe/CdTe с инвертированным спектром в некотором интервале толщин HgTe слоя (эти и подобные им наноструктуры также называют 2D топологическими изоляторами). В случае системы конечных размеров (при наличии границ с внешней средой) 2D уравнения необходимо дополнить граничными условиями, что может привести к радикальной перестройке структуры и спектра электронных состояний. Такая перестройка может сопровождаться формированием локализованных вблизи границы (краевых) квазиодномерных состояний и соответствующих ветвей электронного спектра.

Новизна и достоверность результатов диссертации И.В. Загороднева не подлежат сомнению. Им проводится исследование стандартных модельных 2D гамильтонианов двух типов с использованием **кр-приближения**: 1) Двухподрешеточного гамильтониана со слабым спин-орбитальным взаимодействием для описания электронных состояний в графене; 2) Двухзонного гамильтониана с сильным спин-орбитальным взаимодействием для описания 2D топологического изолятора на основе CdTe/HgTe/CdTe квантовой ямы. Ясно, что в рамках **кр-приближения**, когда рассмотрение ведется на языке огибающей функции, а не истинной волновой функции системы, вполне корректная постановка граничных условий для огибающей функции выходит за рамки применимости модели и может носить лишь феноменологический или вариационный характер. Эта постановка сводится к введению некоторой матрицы коэффициентов, связывающих компоненты огибающей функции с её производными на границе системы. Связь этих коэффициентов с реальными физическими параметрами является самостоятельной и весьма нетривиальной задачей. При этом, однако, сами коэффициенты должны удовлетворять определенным общефизическим требованиям. Автором диссертации сформулированы такие требования для рассматриваемых им модельных гамильтонианов: 1) Эрмитовость, приводящая к отсутствию потока частиц через границу; 2) Симметрия относительно обращения времени, предполагающая отсутствие

магнитного порядка. Это позволило существенно ограничить число феноменологических коэффициентов в матрице граничных условий для огибающей функции. После проведенного таким образом анализа автор применил его для нахождения электронных спектров исследуемых систем в различных геометриях. Стоит отметить, что обычно рассмотрение подобных задач в мировой литературе подразумевает (вообще говоря, без особых физических оснований) использование так называемых «открытых» граничных условий для огибающей функции, при которых все ее компоненты на границе равны нулю.

Оценивая диссертацию в целом, я считаю, что она выполнена на высоком научном уровне. Получены интересные результаты, имеющие большое практическое значение для интерпретации экспериментальных данных по свойствам краевых состояний в графене и 2D топологических изоляторах. Все это определяет **научную и практическую значимость** работы. Главное ее достижение состоит в выявлении значительного влияния граничных условий на свойства краевых состояний и определяемые ими физические характеристики исследуемых 2D полупроводниковых материалов и структур.

Диссертация состоит из введения, обзора литературы, двух глав, заключения, списка литературы и двух приложений.

Введение посвящено обоснованию актуальности, целей, научной новизны и практической ценности работы; в нем также сформулированы положения, выносимые на защиту.

В обзоре литературы обсуждается проблема граничных условий для компонент огибающей функции в приближении эффективной массы. Сделан вывод о том, что общий вид граничных условий в немагнитной системе можно получить из общих физических соображений, таких как условия эрмитовости и симметрии относительно инверсии времени. Также сделан подробный обзор теоретических и экспериментальных работ по краевым состояниям в графене, содержится некоторое (хотя и весьма неполное) введение в физику 2D топологических изоляторов и 1D плазменных колебаний.

Первая глава диссертации является ключевой и посвящена краевым состояниям в графене. Эта глава представляет собой самосогласованное исследование, которое могло бы служить основой для отдельной работы. Исходя из условий эрмитовости и инвариантности по отношению к инверсии времени, автором выводятся граничные условия, описывающие краевые состояния в графене в пренебрежении междолинным взаимодействием. Показано, что при любом граничном условии (даже с учетом междолинных переходов) электронный спектр краевых состояний в графене на трансляционно-инвариантном линейном краю в низкоэнергетическом приближении представляет собой лучи, начинающиеся, в центре проекций долин на направление края. Проанализировано поведение краевых состояний в магнитном поле и найден размерно-квантованный спектр графеновой полосы с различными типами краев. Наиболее интересный эффект, обусловленный магнитным полем, заключается в возникновении пересечений объемных уровней Ландау с уровнями краевых состояний.

Также обсуждается графеновая антиточка (лист графена с круглым отверстием), на которой существуют краевые состояния. Показано, что в транспортном сечении рассеяния на такой антиточке возникают особенности типа Брейга-Вигнера, обусловленные резонансным рассеянием на уровнях краевых состояний. Квазиклассическим методом решена задача о поведении уровней антиточки в магнитном поле; показано, что при изменении поля происходит периодическое изменение энергии краевых состояний с периодом осцилляций, определяемым квантом магнитного потока hc/e , проходящего через отверстие. Эти результаты используются для объяснения некоторых экспериментов.

Существенных замечаний по содержанию первой главы у меня нет, но есть мелкие придирки, связанные с неряшливостью оформления. Так, например, в тексте на стр.52, поясняющем графики рис. 1.4, говорится о красных и синих линиях электронного спектра графена в магнитном поле, тогда как сам рис.1.4 выполнен в черно-белом изображении. Есть также мелкие орфографические ошибки и опечатки.

Вторая глава диссертации, посвященная граничным условиям для компонент огибающей функции и краевым состояниям в 2D топологическом изоляторе на основе квантовых ям CdTe/HgTe/CdTe, несколько уступает первой по значимости. Для собственных состояний модельного гамильтониана типа ВNZ автором построено 6-параметрическое граничное условие, удовлетворяющее требованиям эрмитовости и инвариантности по отношению к инверсии времени. Также показано, что два из этих шести параметров связаны с нарушением пространственной инверсии на границе и в определенных случаях могут быть равны нулю. Неожиданным (с точки зрения автора, но не оппонента) результатом явился тот факт, что при некоторых значениях граничных параметров краевые состояния имеют существенно нелинейную дисперсию и могут вообще отсутствовать вблизи центра проективной зоны Бриллюэна. В конце главы рассмотрены длинноволновые 1D плазменные колебания, возникающие, на краю 2D топологического изолятора. Показано, что их закон дисперсии определяется известным уравнением для 1D плазмонов, в котором роль характерного размера системы играет четверть глубины локализации краевого состояния.

Мои замечания по содержанию второй главы связаны с ее незавершенным и, по сути дела, вспомогательным характером по отношению к первой главе.

- 1) Практически не обсуждаются ни физический смысл феноменологических граничных параметров, ни конкретные ситуации (характер оборванных связей, тип адсорбированных на границе атомов, релаксация пограничных слоев и т.д.), в которых роль этих параметров могла бы проявиться.
- 2) Не приводится сравнение полученных результатов расчета спектра модельного 2D топологического изолятора в k -схеме с результатами расчетов из первых принципов (типа DFT), а также с экспериментальными данными по квантовым ямам CdTe/HgTe/CdTe.

- 3) К сожалению, автор не воспользовался в полной мере полученными им результатами, используя лишь физически малообоснованные «открытые» граничные условия при анализе плазменных колебаний краевых дираковских фермионов в 2D топологическом изоляторе на основе CdTe/HgTe/CdTe квантовой ямы (раздел 2.4) . Это сильно обедняет содержание второй главы в целом.
- 4) Во второй главе резко возросло количество опечаток (например, на стр. 85, 87, 89, 96; подпись к рис. 2.4 содержит смесь русского и английского текстов).

Заключение посвящено формулировке основных результатов работы.

Диссертант продемонстрировал хорошее владение математическим аппаратом, используемым для решения современных задач теоретической физики. Материал изложен логично и подробно, а приведенные замечания не снижают общую положительную оценку работы. Результаты диссертации опубликованы в рецензируемых научных изданиях и доложены на представительных научных конференциях. Автореферат полностью отражает содержание диссертации.

Работа И.В. Загороднева соответствует всем требованиям ВАК РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям. Ее автор заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10 – “Физика полупроводников”.

ОФИЦИАЛЬНЫЙ ОППОНЕНТ:

Тугушев Виктор Витальевич
Доктор физико-математических наук
Ведущий научный сотрудник
Отдела прикладных наноэлектронных структур
Курчатовского комплекса НБИКС-технологий
НИЦ «Курчатовский институт»
Адрес: 123182, Москва, пл. Курчатова 1.
Тел.+7(917)5274419
E-mail: tuvictor@mail.ru

/В.В. Тугушев/

Подпись В.В. Тугушева ЗАВЕРЯЮ:
Заместитель директора по научной работе
главный ученый секретарь НИЦ «Курчато

?

/В.И. Ильгисонис/

«30» декабря 2015 г.