

"УТВЕРЖДАЮ"

Проректор по научной работе  
Федерального государственного  
бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Челябинский государственный  
университет»  
д.ф.-м.н., профессор

И.В. Бычков

«24 » 09 2023 г.

## ОТЗЫВ

ведущей организации на диссертационную работу Переваловой Александры Николаевны «Особенности электронных свойств монокристаллов топологических полуметаллов WTe<sub>2</sub> и MoTe<sub>2</sub>», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

### Актуальность темы диссертации

Диссертация А.Н. Переваловой посвящена решению актуальной проблемы, связанной с установлением и описанием основных закономерностей поведения и взаимосвязи структурных, электро-, магнитотранспортных и оптических характеристик топологических вейлевских полуметаллов WTe<sub>2</sub> и MoTe<sub>2</sub>. Топологические полуметаллы представляют собой новый класс материалов, который привлекает большое внимание исследователей благодаря необычным электронным свойствам, обусловленным нетривиальной топологией зонной структуры, и возможности создания на их основе устройств сверхбыстрой электроники и спинtronики. Таким образом, тема диссертационной работы А.Н. Переваловой актуальна и представляет большой интерес как для фундаментальной науки, так и для прикладных исследований.

### Структура и основное содержание диссертационной работы

Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения и списка используемой литературы. Объем диссертации составляет 116 страниц. Список литературы включает 118 наименований.

Во введении обоснована актуальность работы, сформулированы цель и задачи исследования, описаны научная новизна полученных результатов, их теоретическая и практическая значимость, степень достоверности, методы исследования, личный вклад автора, изложены положения, выносимые на защиту.

Первая глава представляет собой обзор научной литературы по теме диссертации. Обсуждаются результаты изучения структуры и электронных свойств топологических

полуметаллов, полученные в предыдущих исследованиях. На основе проведенного анализа научной литературы сформулирована цель и определены задачи диссертационной работы.

**Во второй главе** описан метод синтеза монокристаллов топологических полуметаллов WTe<sub>2</sub> и MoTe<sub>2</sub>, представлены результаты аттестации образцов методами рентгеноструктурного анализа, сканирующей электронной микроскопии и рентгеновского энергодисперсионного микроанализа, описаны методики измерения электронных транспортных и оптических свойств.

**В третьей главе** приводятся результаты исследования электронных транспортных свойств монокристалла WTe<sub>2</sub> в интервале температур от 2 до 300 К и в магнитных полях до 9 Тл, а также оптических свойств при комнатной температуре. Обнаружен и объяснен ряд особенностей поведения электронных характеристик WTe<sub>2</sub>, а именно: квадратичной температурной зависимости электросопротивления при температурах от 2 до 15 К, минимума на температурной зависимости сопротивления в магнитных полях от 5 до 9 Тл, нелинейной полевой зависимости сопротивления Холла.

**Четвертая глава** посвящена исследованию электронных свойств монокристалла MoTe<sub>2</sub>. Приводится анализ данных по электро-, магнитосопротивлению и эффекту Холла, полученных в интервале температур от 2 до 300 К и в магнитных полях до 9 Тл. Обнаружен ряд отличий в поведении электронных транспортных характеристик MoTe<sub>2</sub> по сравнению с WTe<sub>2</sub>, в частности, отсутствие минимума на температурной зависимости сопротивления в магнитном поле 9 Тл, появление которых автор связывает с относительно большим количеством дефектов и примесей в образце. Исследовано влияние закалки на электросопротивление и оптические свойства MoTe<sub>2</sub>.

**В заключении** перечислены полученные основные результаты и выводы.

#### **Научная новизна результатов диссертационной работы**

К новым и наиболее важным результатам диссертационной работы можно отнести следующие:

- показано, что квадратичная температурная зависимость электросопротивления WTe<sub>2</sub> в интервале температур от 2 до 15 К связана с рассеянием на поверхности, где имеет место интерференционный механизм рассеяния «электрон-фонон-поверхность»;
- установлено, что причиной минимума на температурной зависимости сопротивления WTe<sub>2</sub> в магнитном поле является переход от эффективно сильных к эффективно слабым магнитным полям;
- показано, что нелинейная полевая зависимость сопротивления Холла WTe<sub>2</sub> и MoTe<sub>2</sub> связана, наряду с механизмом компенсации/раскомпенсации электронных и дырочных носителей тока, с рассеянием на поверхности;
- впервые проведен сравнительный анализ оптических спектров MoTe<sub>2</sub>, полученных до и после структурного фазового перехода из полупроводниковой фазы в

полуметаллическую в результате закалки, который показал, что проводящие свойства MoTe<sub>2</sub> улучшаются после закалки.

### **Теоретическая и практическая значимость результатов диссертационной работы**

Теоретическая значимость работы заключается в обнаружении и объяснении ряда особенностей поведения электронных характеристик монокристаллов топологических полуметаллов WTe<sub>2</sub> и MoTe<sub>2</sub>. Практическая значимость работы обусловлена возможностью применения полученных зависимостей электронных характеристик от внешних воздействий (температура, магнитное поле, термообработка) при разработке различных устройств на основе данных материалов.

### **Достоверность и обоснованность результатов исследования**

Достоверность и обоснованность полученных автором результатов определяется использованием современных хорошо апробированных методик, метрологически аттестованного оборудования, хорошей воспроизводимостью результатов при проведении измерений на разных образцах одинакового состава, согласованностью полученных результатов с литературными данными.

### **Апробация работы**

Основные результаты, представленные в диссертации, докладывались ее автором на различных российских и международных конференциях и опубликованы в 10 статьях в научных журналах, входящих в перечень ВАК.

### **Вопросы и замечания по диссертационной работе**

1. Название диссертационной работы содержит термин «топологические полуметаллы». Первая глава диссертации включает сведения о методах синтеза, структуре и электронных свойствах топологических материалов. Однако во второй и последующих главах автор не упоминает о связи представленных результатов с топологией. Представляется неясным, как полученные результаты связаны с топологическими особенностями исследуемых материалов.

2. Концентрации и подвижности носителей заряда в исследуемых в работе монокристаллах WTe<sub>2</sub> и MoTe<sub>2</sub> были определены с помощью двухзонной модели. Почему была использована именно такая модель и как были проведены оценки?

3. На полевых зависимостях сопротивления в магнитном поле и холловского сопротивления WTe<sub>2</sub> наблюдаются «ступеньки» при температуре 2 К. Чем они обусловлены?

Указанные замечания не снижают научной ценности диссертационной работы и ее высокой положительной оценки.

### **Заключение**

Диссертационная работа А.Н. Переваловой «Особенности электронных свойств монокристаллов топологических полуметаллов WTe<sub>2</sub> и MoTe<sub>2</sub>» является законченной научно-

квалификационной работой, в которой получены новые экспериментальные результаты. Автореферат полно и правильно отражает основное содержание диссертации.

Результаты, полученные в диссертационной работе, могут быть использованы в научно-исследовательских и образовательных организациях, в которых занимаются исследованиями топологических материалов и разработкой новых функциональных устройств на их основе, например, в Московском государственном университете им. М.В. Ломоносова, Институте радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Санкт-Петербургском государственном университете, Институте физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Челябинском государственном университете, Уральском федеральном университете.

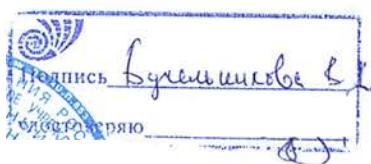
Считаем, что диссертационная работа «Особенности электронных свойств монокристаллов топологических полуметаллов  $WTe_2$  и  $MoTe_2$ » соответствует всем требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней и пункту 1 «Теоретическое и экспериментальное изучение физической природы и свойств неорганических и органических соединений как в кристаллическом (моно- и поликристаллы), так и в аморфном состоянии, в том числе композитов и гетероструктур, в зависимости от их химического, изотопного состава, температуры и давления» Паспорта специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния, а ее автор, Перевалова Александра Николаевна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Доклад А.Н. Переваловой по материалам ее диссертационной работы заслушан на объединенном семинаре кафедры физики конденсированного состояния ФГБОУ ВО «Челябинский государственный университет» 8 сентября 2023 г.

Заведующий кафедрой  
физики конденсированного состояния,  
доктор физико-математических наук, профессор

В.Д. Бучельников

Почтовый адрес: 454001, г. Челябинск, ул. Братьев Кашириных, 129  
тел.: (351) 799-71-17  
E-mail: buche@csu.ru



НАЧАЛЬНИК  
ОТДЕЛА КАДРОВ  
Н.А. Зудова

Регистрация  
закончена

17.10.2023г. 4

/ Перевалова А.Н./

**Сведения о ведущей организации**  
 по диссертации Переваловой Александры Николаевны  
 «Особенности электронных свойств монокристаллов топологических  
 полуметаллов WTe<sub>2</sub> и MoTe<sub>2</sub>», представленной на соискание ученой степени  
 кандидата физико-математических наук по специальности

1.3.8. Физика конденсированного состояния

Полное наименование организации в соответствии с уставом	Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Челябинский государственный университет»
Сокращенное наименование организации в соответствии с уставом	ФГБОУ ВО «ЧелГУ»
Ведомственная принадлежность	Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Почтовый индекс, адрес организации	454001, УрФО, Челябинская обл., г. Челябинск, ул. Братьев Кашириных, д. 129
Веб-сайт организации	<a href="http://www.csu.ru">www.csu.ru</a>
Телефон организации	(351) 799-71-01
Адрес электронной почты организации	odou@csu.ru
Список основных публикаций работников организации по теме рецензируемой диссертации за последние 5 лет (не более 15)	<p>[1] Sokolovskiy, V. Meta-GGA SCAN Functional in the Prediction of Ground State Properties of Magnetic Materials: Review of the Current State / V. Sokolovskiy, D. Baigutlin, O. Miroshkina, V. Buchelnikov // Metals. – 2023. – V. 13, iss. 4. – P. 728.</p> <p>[2] Wilfong, B. Helical spin ordering in room-temperature metallic antiferromagnet Fe<sub>3</sub>Ga<sub>4</sub> / B. Wilfong, A. Fedorko, D.R. Baigutlin, O.N. Miroshkina, X. Zhou, G.M. Stephen, A.L. Friedman, V. Sharma, O. Bishop, R. Barua, S.P. Bennett, D.Y. Chung, M.G. Kanatzidis, V.D. Buchelnikov, V.V. Sokolovskiy, B. Barbiellini, A. Bansil, D. Heiman, M.E. Jamer // Journal Alloys and Compounds. – 2022. – V. 917. – P. 165532.</p> <p>[3] Buchelnikov, V.D. Design of a Stable Heusler Alloy with Switchable Metal-to-Half-Metal Transition at Finite Temperature / V.D. Buchelnikov, V.V. Sokolovskiy, O.N. Miroshkina, D.R. Baigutlin, M.A. Zagrebin,</p>

- B. Barbiellini, B. Singh, A. Bansil, and E. Lähderanta. // Advanced Theory Simulations. – 2021. – V.2. – P. 2100311.
- [4] Buchelnikov, V.D. Prediction of a Heusler alloy with switchable metal-to-half-metal behavior / V.D. Buchelnikov, V.V. Sokolovskiy, O.N. Miroshkina, D.R. Baigutlin, M.A. Zagrebin, B. Barbiellini, E. Lähderanta // Physical Review B. – 2021. – V. 103. – P. 054414
- [5] Blinov, M. Effects of magnetic and structural phase transitions on the normal and anomalous Hall effects in Ni-Mn-In-B Heusler alloys // M. Blinov, A. Aryal, S. Pandey, I. Dubenko, S. Talapatra, V. Prudnikov, E. Lähderanta, S. Stadler, V. Buchelnikov, V. Sokolovskiy, M. Zagrebin, A. Granovsky, N. Ali // Physical Review B. – 2021. – V. 103. – P. 094423.
- [6] Jamer, M.E. Superconducting and antiferromagnetic properties of dual-phase  $V_3Ga$  / M.E. Jamer, B. Wilfong, V.D. Buchelnikov, V.V. Sokolovskiy, O.N. Miroshkina, M.A. Zagrebin, D.R. Baigutlin, J. Naphy, B.A. Assaf, L.H. Lewis, A. Pulkkinen, B. Barbiellini, A. Bansil, D. Heiman // Applied Physics Letters. – 2020. – V. 117. – P. 062401.
- [7] Miroshkina, O.N. Exchange-correlation corrections for electronic properties of half-metallic  $Co_2FeSi$  and nonmagnetic semiconductor  $CoFeTiAl$  // O.N. Miroshkina, D.R. Baigutlin; V.V. Sokolovskiy, M.A. Zagrebin, A. Pulkkinen, Bernardo Barbiellini, E. Lähderanta; Vasiliy D. Buchelnikov // Journal of Applied Physics. – 2020. – V. 127, iss. 17. – P. 175108.
- [8] Pulkkinen, A. Coulomb correlation in noncollinear antiferromagnetic  $\alpha$ -Mn / A. Pulkkinen, B. Barbiellini, J. Nokelainen, V. Sokolovskiy, D. Baigutlin, O. Miroshkina, M. Zagrebin, V. Buchelnikov, C. Lane, R.S. Markiewicz, A. Bansil, J. Sun, K. Pussi, E. Lähderanta // Physical Review B. – 2020. – V. 101. – P. 075115
- [9] Sokolovskiy, V. First-principles study of Ni-Co-Mn-Sn alloys with regular and inverse Heusler structure / V. Sokolovskiy, M. Zagrebin, V.D. Buchelnikov // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2019. – V. 476. – P. 546-550.

- [10] Buchelnikov, V.D. Correlation effects on ground-state properties of ternary Heusler alloys: First-principles study / V.D. Buchelnikov, V.V. Sokolovskiy, O.N. Miroshkina, M.A. Zagrebin, J. Nokelainen, A. Pulkkinen, B. Barbiellini, E. Lähderanta // Physical Review B. – 2019. – V. 99. – P. 014426.
- [11] Buchelnikov, V.D. Peculiarities of phonons in Ni-Mn-Ga alloys: *Ab initio* studies / V.D. Buchelnikov, O.N. Miroshkina, M.A. Zagrebin, V.V. Sokolovskiy, C.K. Pyles, A.T Zayak // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2019. – V. 470. – P. 73-76.
- [12] Zagrebin, M.A. Ground state and magnetic properties of the Cr-doped Ni-Mn-(Ga, Ge, In, Sn) alloys: Insights from ab initio study / M.A. Zagrebin, V.V. Sokolovskiy, V.D. Buchelnikov // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2019. – V. 470. P. 123-126.

Верно:

Ученый секретарь

Ученого совета ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

Г.С. Вардугина

«19 » июня 2023

