

Секция 2

Физические науки

2.1 Физика конденсированного состояния

Научная статья

УДК 537.9

ББК 22.379

ГРНТИ 29.19.33

ВАК 1.3.8.

PACS 31.15.-p

OCIS 310.6870

MSC 00A79

Исследование физических свойств топологических изоляторов

А. Д. Селюкова ¹

*Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
«Ульяновский государственный педагогический университет имени И. Н. Ульянова», 432071,
Ульяновск, Россия*

Поступила в редакцию 20 мая 2025 года

После переработки 23 мая 2025 года

Опубликована 14 июня 2025 года

Аннотация. Представлены результаты исследования энергетических характеристик топологических изоляторов в микроструктурных системах в терагерцовом диапазоне. Разработана теоретическая модель для расчёта энергетического спектра носителей электрического заряда в плёнках на основе топологических изоляторов в терагерцовом диапазоне. Проведено численное моделирование энергетического спектра носителей электрического заряда в плёнках на основе топологических изоляторов в терагерцовом диапазоне.

Ключевые слова: топологический изолятор, терагерцовый диапазон, энергетический спектр, носитель электрического заряда, плёнка, модель, электронные свойства, микроструктурная система

¹E-mail: selyukova2003810@gmail.com

Введение

Топологический изолятор является особым типом материала, который в объёме представляет собой диэлектрик или изолятор), а на поверхности проводит электрический ток. Топологические изоляторы демонстрируют уникальные электронные свойства, обусловленные наличием топологически защищённых поверхностных состояний. В терагерцовом диапазоне (0.1–10 ТГц) нелинейные эффекты в таких материалах становятся особенно значимыми из-за сильной спин-орбитальной связи и дисперсионных свойств. Исследуются энергетические спектры носителей электрического заряда в плёнках из топологических изоляторов. Возможность управления нелинейными оптическими свойствами топологических изоляторов в терагерцовом диапазоне открывает перспективы для создания устойчивых к помехам устройств связи и датчиков нового поколения.

Целью работы является исследование энергетических характеристик топологических изоляторов в микроструктурных системах в терагерцовом диапазоне.

Задачи исследования могут быть сформулированы следующим образом:

1. разработка теоретической модели нелинейной электродинамики топологических изоляторов с учётом топологических поверхностных состояний,
2. численное моделирование энергетического спектра носителей электрического заряда в плёнках на основе топологических изоляторов в терагерцовом диапазоне.

Объектом исследования является топологический изолятор на основе Bi_2Se_3 с искусственно созданной микроструктурной периодической системой включений.

Предметом исследования является совокупность физических процессов в плёнках на основе топологических изоляторов в терагерцовом диапазоне.

Методы исследования включают в себя анализ научной литературы по топологическим изоляторам, численное моделирование энергетического спектра носителей заряда в плёнке топологического изолятора. Материалы исследования включают в себя плёнки топологических изоляторов.

Научная новизна исследования заключается в том, что впервые проведены численные расчёты энергетического спектра носителей электрического заряда в плёнках на основе топологических изоляторов в терагерцовом диапазоне при различных толщинах плёнок топологических изоляторов.

Теоретическая значимость исследования заключается в раскрытии новых аспектов вопроса о свойствах материалов с топологическим порядком. Практическая значимость исследования заключается в том, что результаты работы могут быть использованы для создания прототипов терагерцовых модуляторов и датчиков с повышенной помехоустойчивостью.

Обзор

Топологические изоляторы — это материалы, которые являются изолирующими в своём объёме, но имеют проводящие поверхностные или краевые состояния, которые топологически защищены от обратного рассеяния и беспорядка. Топологические изоляторы обладают потенциалом для достижений в электронике, спинтронике, квантовых вычислениях и энергоэффективных устройствах. Топологические изоляторы — это новые фазы вещества с изолирующим объёмом и проводящими поверхностными или краевыми состояниями. Топологические изоляторы демонстрируют уникальные электронные свойства из-за взаимодействия между топологией, зонной структурой и квантовыми волновыми функциями. Топологические изоляторы — это материалы, характеризующиеся изолирующими внутренними частями и проводящими поверхностными состоя-

ниями, защищёнными симметрией обращения времени. Топологические изоляторы перспективны для электрических и спинтронных устройств из-за их способности манипулировать электронным спином без переноса заряда, что повышает производительность и эффективность. Топологические изоляторы представляют собой уникальный класс материалов, характеризующихся изолирующими объёмными свойствами, демонстрируя при этом проводящие поверхностные или краевые состояния, которые устойчивы к беспорядку и обратному рассеянию, в первую очередь из-за симметрии обращения времени [1, 2]. Топологический изолятор характеризуется изолирующими объёмными и проводящими поверхностными состояниями, что является разновидностью нового твёрдого материала, как обсуждается в работе [2], и он защищён симметрией обращения времени. Топологический изолятор — это новый тип твёрдого материала, характеризующийся изолирующими объёмными и проводящими поверхностными состояниями. Топологический изолятор обладает уникальными свойствами, такими как недиссипативная электрическая передача и высокая подвижность носителей. В работе [2] обсуждается разработка, синтез, характеристика и применение топологических изоляторов. Это отличительное поведение возникает из-за нетривиальной топологии их электронных волновых функций, что привело к значительному интересу к их потенциальному применению в различных областях, включая электронику, спинтронику и квантовые вычисления [3, 4]. Топологический изолятор — это новая фаза материи, характеризующаяся топологически защищёнными односторонними краевыми состояниями, которые невосприимчивы к дефектам или беспорядкам, с приложениями, распространяющимися на оптику, подчёркивающими её быстрое развитие и многообещающий потенциал в различных областях. В работе [3] изучаются нелинейные топологические состояния высшего порядка и солитоны, расширяя концепции топологического изолятора на оптику, с многообещающими приложениями и открывая новую фазу материи с топологически защищёнными состояниями, невосприимчивыми к дефектам или беспорядкам. Топологические изоляторы, такие как теллурид висмута (Bi_2Te_3), демонстрируют такие преимущества, как недиссипативная электрическая передача и высокая подвижность носителей, что может повысить производительность устройства за счёт снижения энергопотребления и увеличения скорости работы [3, 5]. Кроме того, текущие исследования изучают синтез новых материалов и интеграцию топологических изоляторов в коммерческие технологии с целью использования их уникальных свойств для передовых приложений [4, 5]. Топологические изоляторы — это материалы с изолирующими объёмными состояниями и топологически защищёнными проводящими поверхностными и краевыми состояниями, демонстрирующие высокую подвижность носителей, сверхвысокий показатель преломления и значительные нелинейные оптические свойства, что делает их перспективными для современных оптических функциональных устройств и приложений. Топологические изоляторы — это новый тип электронного материала с изолирующим объёмным состоянием и топологически защищённым проводящим поверхностными и краевыми состояниями, как обсуждается в статье [6], которые демонстрируют выдающиеся оптические свойства, включая высокую подвижность носителей, сверхвысокий показатель преломления, широкий рабочий спектральный диапазон и динамическую настраиваемость, играют важную роль в оптических функциональных устройствах. Топологические изоляторы, демонстрирующие выдающиеся оптические свойства, включающие высокую подвижность носителей, сверхвысокий показатель преломления, широкий рабочий спектральный диапазон и динамическую настраиваемость, играют важную роль в оптических функциональных устройствах. В частности, топологические изоляторы со специальными топологическими энергетическими зонами обладают высоким нелинейным оптическим коэффициентом, превосходящим обычные полупроводниковые и двумерные материалы. Ожидается, что нелинейные оптические

свойства топологических изоляторов реализуют высокоэффективное нелинейное оптическое преобразование, нелинейное поглощение и полностью оптическое переключение, терагерцовое излучение [6]. Топологические изоляторы предоставят новую платформу для взаимодействия света и вещества, а также для развития нелинейной оптики. В работе [6] делаются выводы о текущих достижениях в некоторых исследованиях нелинейных оптических эффектов на основе топологических изоляторов и связанных с ними устройств и даются перспективы потенциальных приложений топологических изоляторов в нелинейной оптике.

Модель

Расчёт энергетического спектра носителей электрического заряда в топологических изоляторах включает в себя несколько передовых вычислительных методов, каждый из которых решает определённые задачи, связанные с топологическими изоляторами. Один из подходов заключается в использовании методов бесконечномерных операторов, которые избегают искусственной периодичности и граничных условий, что позволяет точно вычислять спектральные свойства даже при наличии дефектов и беспорядка. Этот метод особенно эффективен для исследования спектральных свойств топологических изоляторов без ограничений приближений суперячеек или искусственного усечения, как показано в модели Холдейна, и применим к другим двумерным и трёхмерным системам [7]. В статье [7] исследованы спектральные свойства топологических изоляторов при наличии дефектов материала, рёбер и беспорядка в модели Холдейна. Спектральные свойства могут быть вычислены в двух и трёх измерениях. В статье [7] представлены методы расчёта энергетического спектра топологических изоляторов с использованием методов вычисления спектральных свойств бесконечномерных операторов. Эти методы позволяют избежать искусственной периодичности и нефизических граничных условий, что позволяет проводить прямое исследование спектральных свойств даже при наличии дефектов, рёбер и беспорядка. В статье [7] показано, что разработанные вычислительные инструменты позволяют рассчитывать спектры, приближённые собственным состояниям, спектральные меры и транспортные свойства, что подтверждается численными примерами для модели Холдейна и может быть распространено на другие топологические изоляторы в двух и трёх измерениях. Другой метод включает в себя высокопроизводительные вычисления с использованием спектра фазы Берри в k -пространстве, который рассчитывается непосредственно из электронных волновых функций. Этот подход, не опирающийся на функции Ванье, подходит для скрининга больших баз данных двумерных материалов, идентифицируя многочисленные квантовые спиновые холловские, квантовые аномальные холловские и кристаллические топологические изоляторы [8]. В статье [8] используется автоматизированная оценка спектра фазы Берри в k -пространстве, рассчитанного непосредственно из электронных волновых функций, что позволяет избежать необходимости использования функций Ванье. Этот метод обеспечивает высокопроизводительные вычисления и идентифицирует топологические изоляторы путём поиска материалов с бесщелевым спектром фазы Берри. Алгоритм параллельного переноса используется для вычисления необходимых матричных элементов, что позволяет извлекать топологические индексы и анализировать энергетический спектр различных двумерных топологических изоляторов [8]. Метод теории функционала плотности DFT-1/2 также применяется для трёхмерных топологических изоляторов, обеспечивая точные результаты для запрещённых зон и топологических инвариантов без увеличения вычислительных затрат по сравнению со стандартной теорией функционала плотности. Этот метод особенно полезен для материалов со сложными системами и большим количеством атомов [9]. В статье [9] метод DFT-1/2 был использован для получения топологического инварианта Z_2 , что не

увеличивает вычислительные затраты по сравнению со стандартным методом теории функционала плотности, что позволяет применять его для материалов с большим числом атомов и сложных систем. В статье [9] обсуждается применение метода DFT-1/2 для расчёта энергетического спектра трёхмерных топологических изоляторов, в частности, для таких материалов, как Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 , CuTlSe_2 и CuTlS_2 . Этот метод обеспечивает точные результаты для ширины запрещённых зон, формы зон и атомного характера вблизи области инверсии зон. Этот метод эффективно вычисляет топологические инварианты без увеличения вычислительных затрат по сравнению со стандартным методом теории функционала плотности, что делает его пригодным для сложных систем с большим числом атомов [9]. Кроме того, низкоэнергетическое моделирование трёхмерных наноструктур топологических изоляторов с использованием четырёхзонного гамильтониана объёмной модели $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ предлагает стратегию подгонки, которая обеспечивает точное описание низкоэнергетических объёмных и поверхностных состояний, решая такие проблемы, как анизотропия зон и электронно-дырочная асимметрия [10]. Топологические изоляторы представляют собой новые квантовые состояния со спиральными бесщелевыми краевыми или поверхностными состояниями внутри объёмной запрещённой зоны, упомянутые в статье [10], которые устойчивы к слабым инвариантным к обращению времени возмущениям, таким как искажения решётки и немагнитные примеси. В статье [11] обсуждается несколько методов расчёта энергетического спектра топологических изоляторов, в основном, с помощью расчётов из первых принципов. Эти методы включают оценку Z_2 -инвариантов с использованием собственных значений чётности в инвариантные к обращению времени моменты для соединений с симметрией инверсии. Для соединений без симметрии инверсии предлагаются альтернативные подходы. В статье [11] подчёркивается важность этих расчётов для прогнозирования топологических изоляторов и понимания их электронной структуры и топологических свойств. В статье [12] используются как аналитические, так и методы для расчёта энергетического спектра топологических изоляторов. Для изучения влияния поверхностного потенциала на топологические связанные состояния используется континуальная модель полубесконечного трёхмерного топологического изолятора. Кроме того, для учёта специфики материалов гетероструктур, образованных обычными и топологическими изоляторами, используются расчёты зонной структуры, в частности, теория функционала плотности, что обеспечивает комплексное понимание энергетического спектра. В статье [13] спектр и волновая функция бесщелевых краевых мод выводятся аналитически для модели сильной связи топологических изоляторов на квадратной решётке, а ключевой метод заключается в идентификации операторов, которые объединяются для уничтожения краевого состояния в эффективной одномерной модели с импульсом вдоль края. В статье [13] используется модель сильной связи для вывода энергетического спектра бесщелевых краевых мод в топологических изоляторах. В статье [13] определяются операторы, которые уничтожают краевое состояние в эффективной одномерной модели, с упором на геометрии краёв, такие как прямые (1,0) и зигзагообразные (1,1) края. Спектр анализируется с помощью условий существования действительных решений и преобразований, которые раскрывают нечётную функцию природы спектра краевых мод, обеспечивая понимание уровней энергии на основе параметров системы. Эти разнообразные методологии в совокупности улучшают понимание и моделирование энергетических спектров в топологических изоляторах, облегчая разработку нанoeлектронных устройств на основе этих материалов.

Топологические изоляторы типа Bi_2Se_3 демонстрируют нетривиальные поверхностные состояния. На основе анализа литературы приведём формулы, позволяющие рассчитать энергетический спектр носителей электрического заряда в плёнке из топологических изоляторов.

Энергетический спектр носителей заряда в трёхмерном топологическом изоляторе вычисляется по формуле [14]:

$$E_{\pm}(k_{\parallel}) = E_0 - Dk_{\parallel}^2 \pm \sqrt{(v_F \hbar k_{\parallel})^2 + \left(\frac{\Delta}{2} - Bk_{\parallel}^2\right)^2}, \quad (1)$$

где v_F – скорость Ферми, $\hbar$ – постоянная Планка.

Энергетический спектр носителей заряда в трёхмерном топологическом изоляторе с учётом спиновой поляризации вычисляется по формуле [14]:

$$E_{\sigma\pm}(k_{\parallel}) = E_0 - Dk_{\parallel}^2 \pm \sqrt{(|V'| + \sigma v_F \hbar k_{\parallel})^2 + \left(\frac{\Delta}{2} - Bk_{\parallel}^2\right)^2}, \quad (2)$$

где σ – параметр спиновой поляризации, принимающий значения $\sigma = \pm 1$.

Представим результаты численных расчётов энергетического спектра носителей заряда в плёнке топологического изолятора.

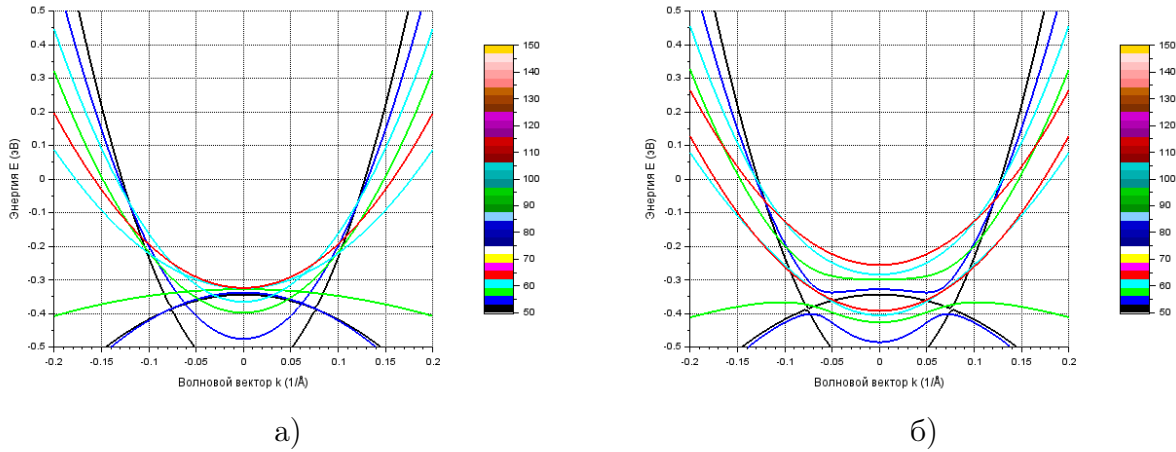


Рис. 1. Энергетический спектр топологического изолятора при различных значениях толщины плёнки топологического изолятора. а) $E_{\pm}(k_{\parallel})$, б) $E_{\sigma\pm}(k_{\parallel})$.

На рис. 1 изображён энергетический спектр топологического изолятора при различных значениях толщины плёнки топологического изолятора. Значения энергии представлены в электрон-вольтах.

Параметры энергетического спектра для плёнки топологического изолятора толщиной 50 Å принимают следующие значения: $E_0 = -0.470$ эВ, $D = -14.4$ эВ·Å², $\Delta = 0.252$ эВ, $B = 21.8$ эВ·Å², $v_F = 4.71 \cdot 10^5$ м/с, $|V'| = 0$ эВ, $\alpha_R = 0$ эВ·Å².

Параметры энергетического спектра для плёнки топологического изолятора толщиной 75 Å принимают следующие значения: $E_0 = -0.407$ эВ, $D = -9.7$ эВ·Å², $\Delta = 0.138$ эВ, $B = 18.0$ эВ·Å², $v_F = 4.81 \cdot 10^5$ м/с, $|V'| = 0.038$ эВ, $\alpha_R = 0.71$ эВ·Å².

Параметры энергетического спектра для плёнки топологического изолятора толщиной 100 Å принимают следующие значения: $E_0 = -0.363$ эВ, $D = -8.0$ эВ·Å², $\Delta = 0.070$ эВ, $B = 10.0$ эВ·Å², $v_F = 4.48 \cdot 10^5$ м/с, $|V'| = 0.053$ эВ, $\alpha_R = 1.27$ эВ·Å².

Параметры энергетического спектра для плёнки топологического изолятора толщиной 125 Å принимают следующие значения: $E_0 = -0.345$ эВ, $D = -15.3$ эВ·Å², $\Delta = 0.041$ эВ, $B = 5.0$ эВ·Å², $v_F = 4.53 \cdot 10^5$ м/с, $|V'| = 0.057$ эВ, $\alpha_R = 2.42$ эВ·Å².

Параметры энергетического спектра для плёнки топологического изолятора толщиной 150 Å принимают следующие значения: $E_0 = -0.324$ эВ, $D = -13.0$ эВ·Å², $\Delta = 0.0$ эВ, $B = 0.0$ эВ·Å², $v_F = 4.52 \cdot 10^5$ м/с, $|V'| = 0.068$ эВ, $\alpha_R = 2.78$ эВ·Å².

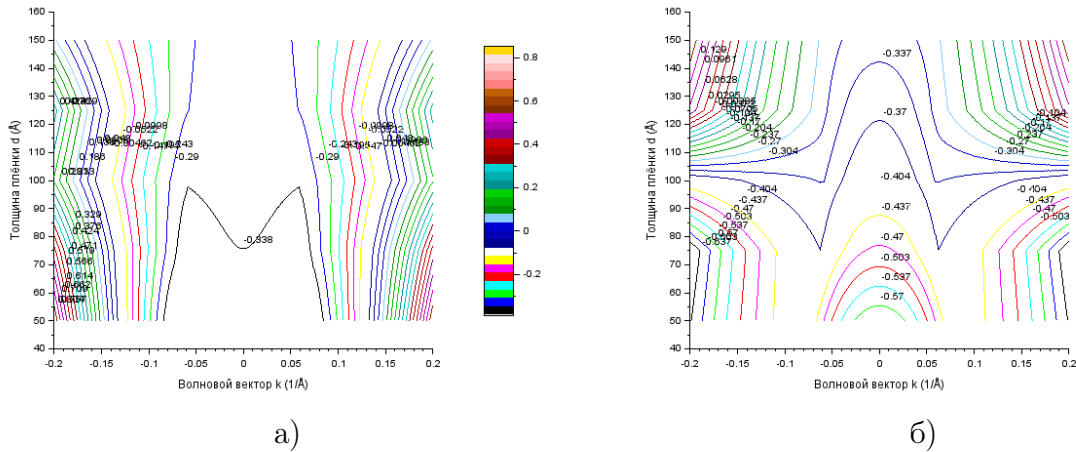


Рис. 2. Контурный график зависимости энергии носителей заряда $E_{\pm}(k_{||})$ от волнового вектора и толщины плёнки топологического изолятора. а) $E_{+}(k_{||})$, б) $E_{-}(k_{||})$.

На рис. 2 изображён контурный график зависимости энергии носителей заряда $E_{\pm}(k_{||})$ от волнового вектора и толщины плёнки топологического изолятора. Значения энергии представлены в электрон-вольтах.

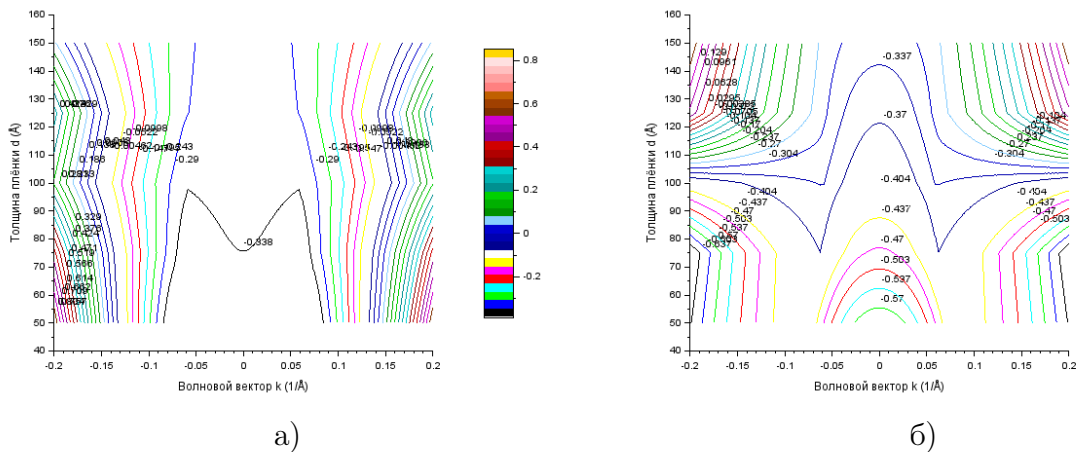


Рис. 3. Контурный график зависимости энергии носителей заряда $E_{\sigma\pm}(k)$ от волнового вектора и толщины плёнки топологического изолятора. а) $E_{\sigma+}(k_{||})$, б) $E_{\sigma-}(k_{||})$.

На рис. 3 изображён контурный график зависимости энергии носителей заряда $E_{\sigma\pm}(k_{||})$ от волнового вектора и толщины плёнки топологического изолятора. Значения энергии представлены в электрон-вольтах.

В результате численных расчётов получены энергетические спектры носителей электрического заряда в плёнках из топологических изоляторов толщиной от 50 Å до 150 Å. В результате численных расчётов показано, что носители электрического заряда локализуются на поверхности и границах раздела плёнки из топологического изолятора.

Заключение

Исследованы физические свойства плёнок из топологических изоляторов. В работе проведены численные расчёты энергетического спектра носителей электрического заряда в плёнках на основе топологических изоляторов в терагерцовом диапазоне при различных толщинах плёнок топологических изоляторов.

Выводы по работе можно сформулировать следующим образом:

1. разработанная теоретическая модель позволяет адекватно описывать энергетический спектр носителей электрического заряда в плёнках топологических изоляторов с учётом топологических поверхностных состояний,
2. предложенная теоретическая модель позволяет вычислять энергетический спектр носителей электрического заряда в плёнках топологических изоляторов различной толщины.

В ходе работы раскрыт новый аспект вопроса о свойствах плёнок из топологических изоляторов. Нелинейные эффекты усиливаются в терагерцовом диапазоне из-за топологической защиты поверхностных состояний. Полученные формулы могут быть использованы для расчёта параметров устройств на основе топологических изоляторов. Результаты работы могут быть использованы для создания прототипов терагерцовых модуляторов и датчиков.

Список использованных источников

1. Tiwari Anil. Topological insulators: novel phases of matter with unique electronic properties // International journal for research in applied science and engineering technology. — 2024. — mar. — Vol. 12, no. 3. — P. 1210–1216. — URL: <http://dx.doi.org/10.22214/ijraset.2024.59039>.
2. Feng Zhiying. Research and application of topological insulators // 2nd International conference on mechanical, electronics, and electrical and automation control (METMS 2022) / Ed. by Xuexia Ye. — SPIE, 2022. — apr. — P. 150. — URL: <http://dx.doi.org/10.1117/12.2635158>.
3. Zhang Yiqi, Kartashov Yaroslav V. Nonlinear higher-order topological states and higher-order topological solitons // 2024 International conference laser optics (ICLO). — IEEE, 2024. — jul. — P. 281–281. — URL: <http://dx.doi.org/10.1109/iclo59702.2024.10624200>.
4. Ando Yoichi. Topological insulators // Wide bandgap semiconductor spintronics. — Jenny Stanford Publishing, 2016. — mar. — P. 97–120. — ISBN: 9780429154775. — URL: <http://dx.doi.org/10.1201/b20038-8>.
5. Using topological insulators properties to improve electronic and spintronic devices / Firas Mahmood Mustafa [et al.] // Radioelectronics. Nanosystems. Information technologies. — 2024. — sep. — Vol. 16, no. 6. — P. 721–730. — URL: <http://dx.doi.org/10.17725/j.rensit.2024.16.721>.
6. Li Dikun, Lu Hua, Zhao Jianlin. Topological insulator-based nonlinear optical effects and functional devices // Journal of nonlinear optical physics and materials. — 2023. — feb. — Vol. 32, no. 04. — URL: <http://dx.doi.org/10.1142/s0218863523300025>.
7. Computing spectral properties of topological insulators without artificial truncation or supercell approximation / Matthew J. Colbrook [et al.] // IMA Journal of applied mathematics. — 2023. — jan. — Vol. 88, no. 1. — P. 1–42. — URL: <http://dx.doi.org/10.1093/imamat/hxad002>.
8. Discovering two-dimensional topological insulators from high-throughput computations / Thomas Olsen [et al.] // Physical Review Materials. — 2019. — feb. — Vol. 3, no. 2. — P. 024005. — URL: <http://dx.doi.org/10.1103/PHYSREVMATERIALS.3.024005>.

9. DFT-1/2 method applied to 3D topological insulators / Tulio Mota [et al.] // Journal of physics: condensed matter. — 2022. — sep. — Vol. 34, no. 46. — P. 465501. — URL: <http://dx.doi.org/10.1088/1361-648X/ac8fd2>.
10. Low-energy modeling of three-dimensional topological insulator nanostructures / Eduard Zsurka [et al.] // Physical review materials. — 2024. — aug. — Vol. 8, no. 8. — URL: <http://dx.doi.org/10.1103/physrevmaterials.8.084204>.
11. Zhang Haijun, Zhang Shou-Cheng. Topological insulators from the perspective of first-principles calculations // physica status solidi (RRL) - Rapid research letters. — 2012. — nov. — Vol. 7, no. 1–2. — P. 72–81. — URL: <http://dx.doi.org/10.1002/PSSR.201206414>.
12. Modelling near-surface bound electron states in a 3D topological insulator: analytical and numerical approaches / V. N. Men'shov [et al.] // Journal of physics: condensed matter. — 2014. — oct. — Vol. 26, no. 48. — P. 485003. — URL: <http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/26/48/485003>.
13. Analytic theory of edge modes in topological insulators / Shijun Mao [et al.] // Journal of the physical society of Japan. — 2010. — dec. — Vol. 79, no. 12. — P. 124709. — URL: <http://dx.doi.org/10.1143/JPSJ.79.124709>.
14. Crossover of the three-dimensional topological insulator Bi₂Se₃ to the two-dimensional limit / Yi Zhang [et al.] // Nature physics. — 2010. — jun. — Vol. 6, no. 8. — P. 584–588. — URL: <http://dx.doi.org/10.1038/NPHYS1689>.

Сведения об авторах:

Анастасия Денисовна Селюкова — студент факультета физико-математического и технологического образования ФГБОУ ВО «Ульяновский государственный педагогический университет имени И. Н. Ульянова», Ульяновск, Россия.

E-mail: selyukova2003810@gmail.com

ORCID iD  0009-0003-6886-9490

Web of Science ResearcherID  ISA-2143-2023

Original article
 PACS 31.15.-p
 OCIS 310.6870
 MSC 00A79

Investigation of physical properties of topological insulators

A. D. Selyukova 

Ulyanovsk State Pedagogical University, 432071, Ulyanovsk, Russia

Submitted May 20, 2025
 Resubmitted May 23, 2025
 Published June 14, 2025

Abstract. The results of the study of energy characteristics of topological insulators in microstructural systems in the terahertz range are presented. A theoretical model for calculating the energy spectrum of electric charge carriers in films based on topological insulators in the terahertz range is developed. Numerical modeling of the energy spectrum of electric charge carriers in films based on topological insulators in the terahertz range is carried out.

Keywords: topological insulator, terahertz range, energy spectrum, electric charge carrier, film, model, electronic properties, microstructural system

References

1. Tiwari Anil. Topological insulators: novel phases of matter with unique electronic properties // International journal for research in applied science and engineering technology. — 2024. — mar. — Vol. 12, no. 3. — P. 1210–1216. — URL: <http://dx.doi.org/10.22214/ijraset.2024.59039>.
2. Feng Zhiying. Research and application of topological insulators // 2nd International conference on mechanical, electronics, and electrical and automation control (METMS 2022) / Ed. by Xuexia Ye. — SPIE, 2022. — apr. — P. 150. — URL: <http://dx.doi.org/10.1117/12.2635158>.
3. Zhang Yiqi, Kartashov Yaroslav V. Nonlinear higher-order topological states and higher-order topological solitons // 2024 International conference laser optics (ICLO). — IEEE, 2024. — jul. — P. 281–281. — URL: <http://dx.doi.org/10.1109/iclo59702.2024.10624200>.
4. Ando Yoichi. Topological insulators // Wide bandgap semiconductor spintronics. — Jenny Stanford Publishing, 2016. — mar. — P. 97–120. — ISBN: 9780429154775. — URL: <http://dx.doi.org/10.1201/b20038-8>.
5. Using topological insulators properties to improve electronic and spintronic devices / Firas Mahmood Mustafa [et al.] // Radioelectronics. Nanosystems. Information technologies. — 2024. — sep. — Vol. 16, no. 6. — P. 721–730. — URL: <http://dx.doi.org/10.17725/j.rensit.2024.16.721>.

6. Li Dikun, Lu Hua, Zhao Jianlin. Topological insulator-based nonlinear optical effects and functional devices // Journal of nonlinear optical physics and materials. — 2023. — feb. — Vol. 32, no. 04. — URL: <http://dx.doi.org/10.1142/s0218863523300025>.
7. Computing spectral properties of topological insulators without artificial truncation or supercell approximation / Matthew J. Colbrook [et al.] // IMA Journal of applied mathematics. — 2023. — jan. — Vol. 88, no. 1. — P. 1–42. — URL: <http://dx.doi.org/10.1093/imamat/hxad002>.
8. Discovering two-dimensional topological insulators from high-throughput computations / Thomas Olsen [et al.] // Physical Review Materials. — 2019. — feb. — Vol. 3, no. 2. — P. 024005. — URL: <http://dx.doi.org/10.1103/PHYSREVMATERIALS.3.024005>.
9. DFT-1/2 method applied to 3D topological insulators / Tulio Mota [et al.] // Journal of physics: condensed matter. — 2022. — sep. — Vol. 34, no. 46. — P. 465501. — URL: <http://dx.doi.org/10.1088/1361-648X/ac8fd2>.
10. Low-energy modeling of three-dimensional topological insulator nanostructures / Eduard Zsurka [et al.] // Physical review materials. — 2024. — aug. — Vol. 8, no. 8. — URL: <http://dx.doi.org/10.1103/physrevmaterials.8.084204>.
11. Zhang Haijun, Zhang Shou-Cheng. Topological insulators from the perspective of first-principles calculations // physica status solidi (RRL) - Rapid research letters. — 2012. — nov. — Vol. 7, no. 1–2. — P. 72–81. — URL: <http://dx.doi.org/10.1002/PSSR.201206414>.
12. Modelling near-surface bound electron states in a 3D topological insulator: analytical and numerical approaches / V. N. Men'shov [et al.] // Journal of physics: condensed matter. — 2014. — oct. — Vol. 26, no. 48. — P. 485003. — URL: <http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/26/48/485003>.
13. Analytic theory of edge modes in topological insulators / Shijun Mao [et al.] // Journal of the physical society of Japan. — 2010. — dec. — Vol. 79, no. 12. — P. 124709. — URL: <http://dx.doi.org/10.1143/JPSJ.79.124709>.
14. Crossover of the three-dimensional topological insulator Bi₂Se₃ to the two-dimensional limit / Yi Zhang [et al.] // Nature physics. — 2010. — jun. — Vol. 6, no. 8. — P. 584–588. — URL: <http://dx.doi.org/10.1038/NPHYS1689>.

Information about authors:

Anastasia Denisovna Selyukova — student of the Faculty of Physics, Mathematics and Technological Education of the Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education “Ulyanovsk State Pedagogical University”, Ulyanovsk, Russia.

E-mail: selyukova2003810@gmail.com

ORCID iD  0009-0003-6886-9490

Web of Science ResearcherID  ISA-2143-2023