

## РЕФЕРАТ

**Дипломна робота:** 71 сторінка, 11 рисунки, 7 таблиць, 48 літературних джерел.

**Мета роботи:** Використовуючи першопринципний підхід, змоделювати кристалічну структуру топологічного ізолятора на прикладі  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  та проаналізувати зонну структуру даного матеріалу на наявність зон, які не перекриваються у об'ємі, та зон, які перекриваються на поверхні.

**Об'єкт дослідження:** топологічний ізолятор на прикладі  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$

**Методи дослідження:** першопринципні розрахунки та теорія функціоналу щільності з програмним пакетом Virtual NanoLab.

**Наукова новизна:** підтверджено що структура  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  являє собою топологічний ізолятор, які в об'ємі є ізолятором а на поверхні провідником, завдяки жорсткої кореляції між електроном та напрямком його спіна, електрони не розсіюються на поверхневих неоднорідностях, отримані данні практично не відрізняються від експериментальних.

**Практичне значення:** отримані результати мають практичне значення при виготовлені топологічних ізоляторів та подальшого, а даний підхід можна використовувати для пошуку нових матеріалів, які мали б властивості топологічних ізоляторів.

ТОПОЛОГІЧНІ ІЗОЛЯТОРИ; VIRTUAL NANOLAB; ТЕОРІЯ ФУНКЦІОНАЛУ ЩІЛЬНОСТІ; МОДЕЛЮВАННЯ;  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  ; ПІДХІД КОНАШЕМА; ПЕРШОПРИНЦИПНІ РОЗРАХУНКИ