

ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРНЫХ ПАРАМЕТРОВ НА ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ПОВЕРХНОСТНЫХ СОСТОЯНИЙ MnBi_2Te_4

*Т. П. Макарова**, *А. М. Шижин*, *А. В. Ерыженков*, *А. В. Тарасов*

*Санкт-Петербургский государственный университет
198504, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 18 ноября 2022 г.,
после переработки 9 января 2023 г.
Принята к публикации 16 января 2023 г.

Экспериментальные исследования электронной структуры антиферромагнитного топологического изолятора MnBi_2Te_4 показывают, что величина энергетической запрещенной зоны для различных образцов кристалла может варьироваться в широком энергетическом диапазоне. В связи с тем, что величина запрещенной зоны является одним из ключевых параметров при использовании данной системы для разработки новых функциональных электронных устройств, вопросы о причинах вариации запрещенной зоны в точке Дирака для MnBi_2Te_4 и ее связи с магнитными взаимодействиями являются весьма важными и требуют всестороннего анализа. С целью выявления факторов, влияющих на величину запрещенной зоны, в данной работе проведен анализ изменений электронной структуры исследуемого топологического изолятора при вариации величины поверхностного ван-дер-ваальсова промежутка. Результаты расчетов показали, что при подобных структурных модификациях значение запрещенной зоны может меняться в широком диапазоне от 80–88 мэВ до 4–5 мэВ, что объясняется сильным пространственным перераспределением топологических поверхностных состояний между семислойными блоками MnBi_2Te_4 , имеющими противоположные направления магнитных моментов Mn. Полученные результаты позволяют предположить, что основным параметром, определяющим величину запрещенной зоны, является пространственная локализация топологических поверхностных состояний, на которую могут сильно влиять структурные изменения, происходящие на поверхности кристалла.

DOI: 10.31857/S0044451023050097
EDN: BENYOQ

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время в физике конденсированных сред повышенный интерес привлекает к себе детальный анализ электронной и спиновой структур, а также магнитных и электронных транспортных свойств магнитных топологических изоляторов (ТИ). Благодаря уникальной комбинации топологии и магнетизма эти материалы характеризуются новыми нетривиальными квантовыми эффектами, потенциально интересными для практических приложений. Наиболее впечатляющим проявлением таких эффектов является квантовый аномальный эффект Холла, основанный на квантовании холловской проводимости [1–5]. Благодаря нетривиальным топологическим свойствам магнитные ТИ являются чрез-

вычайно перспективными материалами для применения в современной нанoeлектронике и развивающейся двумерной [6–8] и антиферромагнитной [9–11] спинтронике.

Широкое изучение этих эффектов началось с открытия ТИ, легированных магнитными примесями [1–5, 12–17]. Магнитные примеси в ТИ нарушают симметрию обращения времени, что приводит к открытию энергетической запрещенной зоны (ЭЗЗ) в структуре топологических поверхностных состояний (ТПС) в точке Дирака [15–20]. В последние годы значительные усилия были направлены на изучение собственных магнитных ТИ, в которых магнитные атомы встроены непосредственно в структуру магнитного ТИ. Это обеспечивает упорядоченное расположение магнитных атомов внутри кристаллической решетки и позволяет значительно увеличить концентрацию магнитных атомов, а также величину ЭЗЗ в точке Дирака.

* E-mail: i@tmakarova.ru

Одним из таких собственных магнитных ТИ является антиферромагнитный (АФМ) ТИ со стехиометрией MnBi_2Te_4 [21–26], который, согласно теоретическим оценкам, характеризуется величиной ЭЗЗ порядка 88 мэВ [21]. Кроме того, для этого материала была показана возможность реализации квантового эффекта Холла как теоретически [27, 28], так и экспериментально [12, 28, 29], а для тонких слоев MnBi_2Te_4 недавно был реализован квантовый аномальный эффект Холла [12, 30]. Перечисленные выше факты значительно повышают прикладной интерес к изучению электронных и магнитных свойств этого материала.

Атомная структура АФМ ТИ MnBi_2Te_4 представляет собой упорядоченный вдоль оси c ряд семислойных блоков (СБ), которые состоят из пятислойных блоков Bi_2Te_3 с внедренным в них упорядоченным магнитным бислоем MnTe [21, 22]. Таким образом, АФМ ТИ MnBi_2Te_4 — это слоистое соединение, состоящее из последовательных СБ $\text{Te-Bi-Te-Mn-Te-Bi-Te}$, разделенных между собой ван-дер-ваальсовыми (вдВ) промежутками. Внутри каждого СБ атомы Mn связаны ферромагнитным (ФМ) взаимодействием. Вместе с тем взаимодействие магнитных атомов Mn , расположенных в соседних СБ, носит АФМ-характер [21, 22].

Согласно теоретическим оценкам, величина ЭЗЗ в точке Дирака для MnBi_2Te_4 должна составлять 80–88 мэВ [21, 22, 31]. Однако экспериментальные исследования показывают, что величина ЭЗЗ варьируется в широком диапазоне, в основном от 50–70 мэВ до 12–15 мэВ и даже меньше [21, 25, 31–34]. Более того, в литературе появился ряд работ [35–39], в которых методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением была показана возможность бесщелевой дисперсии ТПС. В то же время последние работы [31, 33, 34] показывают, что величина ЭЗЗ может значительно изменяться для различных образцов в зависимости от энергии фотонов и других факторов, таких как дефектность образцов, локальное изменение стехиометрии, модификация поверхностного магнитного упорядочения и т. д.

Для объяснения этих различий был выдвинут ряд идей. В частности, в ряде работ «отсутствие» ЭЗЗ в точке Дирака связывалось с модификацией магнитного порядка в поверхностном слое [35, 40]. В таком случае, согласно теоретическому моделированию [35], предполагается, что формирование бесщелевой дисперсии может происходить за счет магнитной перестройки поверхности, что приводит к эффективному уменьшению z -компоненты магнит-

ного момента, направленной перпендикулярно поверхности [35].

В то же время теоретические расчеты [33] показывают, что величина ЭЗЗ в точке Дирака для MnBi_2Te_4 также может изменяться из-за поверхностной релаксации вдВ-расстояний между первым и вторым СБ [33]. Смещение локализации ТПС в сторону второго СБ, который характеризуется противоположной ориентацией магнитных моментов Mn , может привести к компенсации эффективного магнитного момента (направленного перпендикулярно плоскости) в области локализации ТПС и соответствующему уменьшению ЭЗЗ. Аналогично изменение величины ЭЗЗ может происходить из-за наличия поверхностных дефектов различной концентрации [31, 34, 41, 42], включая возможную адсорбцию молекул остаточного газа, что может вызывать изменения в локализации ТПС, приводящие к модуляции ЭЗЗ [31, 34].

Из сказанного выше следует, что вопросы о причинах вариации ЭЗЗ в точке Дирака в MnBi_2Te_4 и ее связи с магнитными взаимодействиями остаются открытыми и требуют дальнейшего анализа. Важно отметить, что для решения проблемы высокотемпературного квантового аномального эффекта Холла необходимо исследовать образцы с большой ЭЗЗ в точке Дирака [12, 21, 28–30]. В свою очередь, образцы с малой величиной ЭЗЗ в точке Дирака, скорее всего, соответствуют точке топологического фазового перехода. Поэтому требуется выявить факторы, влияющие на реализацию в АФМ ТИ MnBi_2Te_4 как большой, так и малой ЭЗЗ, которая открывается в структуре ТПС в точке Дирака.

Данная работа посвящена исследованию модуляции ЭЗЗ в точке Дирака при изменении структурных параметров элементарной ячейки, включая варьирование вдВ-интервала между первым и вторым СБ. При этом будут проанализированы изменения в электронной структуре ТПС и ближайших состояниях зоны проводимости и валентной зоны в MnBi_2Te_4 , включая соответствующие изменения в распределении ТПС.

2. ВЛИЯНИЕ ВДВ-ПРОМЕЖУТКА НА ВЕЛИЧИНУ ЭЗЗ

В данной работе анализировались два типа структуры элементарной ячейки поверхности MnBi_2Te_4 , показанных на рис. 1. Первая из них представляет собой элементарную ячейку, использованную в работе [21], в которой впервые был представлен теоретический расчет электронной структуры MnBi_2Te_4 . Параметры данной ячей-

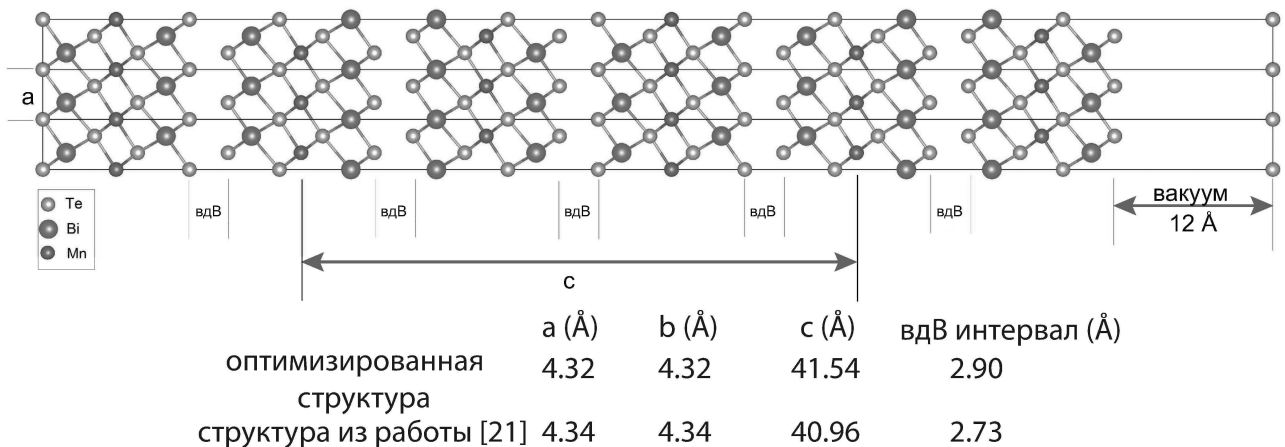


Рис. 1. Структура ячейки, использованная в расчетах. Представлены параметры кристаллической решетки и поверхностного вdB-интервала как для оптимизированной структуры, так и для структуры, взятой из работы [21]

ки соответствуют экспериментальным данным рентгеновской дифракции и наиболее часто используются в теоретических расчетах данной системы. Тем не менее нами было обнаружено, что данная структура не обладает абсолютным минимумом энергии и даже небольшое изменение структурных параметров может привести к ее заметному понижению. По этой причине мы осуществили подбор таких параметров ячейки, которые обеспечивали бы более устойчивое энергетическое положение изучаемой системы. Кроме того, помимо изменения параметров элементарной ячейки была подобрана оптимальная величина вdB-промежутка между всеми СБ. Полученные в результате такой процедуры структурные параметры в сравнении с параметрами ячейки из работы [21] показаны в таблице на рис. 1. При этом нами было проверено, что проведение расчетов методом DFT-D3 [43], учитывающих поправку для вdB-взаимодействий, не приводит к заметным изменениям полной энергии и зонного спектра изучаемой системы. По этой причине мы не использовали данную поправку в процедуре структурной оптимизации элементарной ячейки MnBi_2Te_4 .

Расчеты электронной структуры для обеих элементарных ячеек, результаты которых представлены на рис. 2, показали, что оптимизированная ячейка приводит к более выраженной конусоподобной форме нижней части состояний конуса Дирака (рис. 2б) по сравнению с ячейкой, представленной в работе [21], а также меньшей величине ЭЗЗ в точке Дирака. При этом стоит отметить, что электронная структура неоптимизированной ячейки (рис. 2е) совпадает с результатами расчетов, которые были проведены в работах [21, 31, 33, 34].

Известно, что релаксация поверхности может привести к изменению поверхностного вdB-интервала между первым и вторым СБ [21, 33, 34], например, в результате скола при подготовке чистой поверхности или других внешних воздействий. В настоящей работе для изучения влияния таких структурных изменений на электронную структуру ТПС (в особенности на величину ЭЗЗ в точке Дирака), а также других состояний валентной зоны и зоны проводимости были проведены расчеты для различных значений поверхностного вdB-интервала между первым и вторым СБ (измененного на относительную величину Δd , %). На рис. 2а–д показаны изменения электронной структуры при варьировании поверхностного вdB-интервала относительно его значения в объеме (обозначенного как 0 %) как при уменьшении (до -6%), так и при увеличении (до $+8\%$).

Сравнивая экспериментально измеренные дисперсии электронных состояний в работах [22, 23, 32–34] с результатами наших расчетов, стоит отметить, что электронная структура на рис. 2б, рассчитанная для системы с поверхностным вdB-интервалом, сжатым на -3.46% , и значением ЭЗЗ в точке Дирака, равным 58 мэВ, наиболее согласуется с экспериментальными дисперсиями для случая большой величины ЭЗЗ. Когда поверхностный вdB-интервал сжимается на -6% (при сохранении объемного вdB-интервала), рассчитанное значение ЭЗЗ увеличивается до 77 мэВ (рис. 2а), что близко к значению, рассчитанному в работах [21, 31, 33, 34]. По мере расширения поверхностного вdB-интервала величина ЭЗЗ, наоборот, уменьшается до минимального значения около 5 мэВ при увеличении поверхностного вdB-интервала на $+3.46\%$ (рис. 2г), а затем снова увеличивается до 20 мэВ при дальнейшем расширении этого

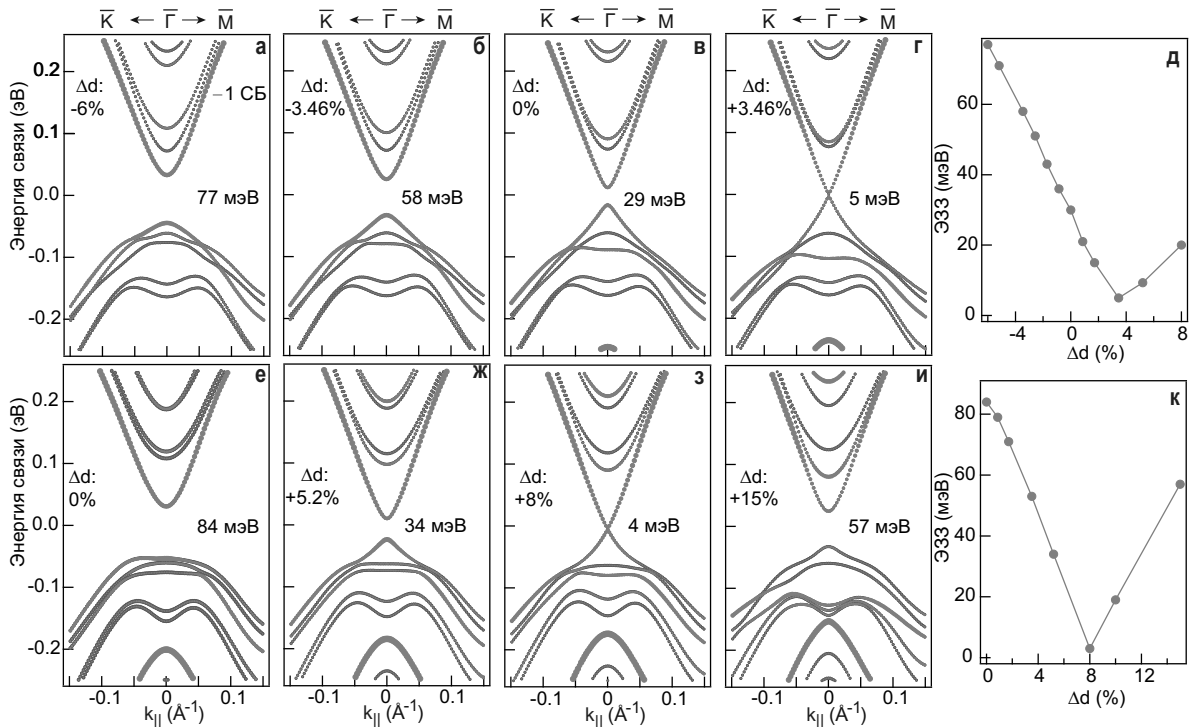


Рис. 2. (В цвете онлайн) *a–г, e–и*) Расчеты электронной структуры ТПС, а также состояний валентной зоны и зоны проводимости для различных значений вДВ-промежутка между первым и вторым СБ (Δd , %). Красными символами показаны состояния, локализованные в первом СБ. *д, к*) Зависимость величины ЭЗЗ в точке Дирака от относительного изменения вДВ-расстояния между первым и вторым СБ (Δd , %). Верхняя панель соответствует расчетам оптимизированной ячейки, нижняя панель — расчетам для структуры, взятой из работы [21]

интервала до +8%.

Полная рассчитанная зависимость величины ЭЗЗ в точке Дирака от значения поверхностного вДВ-интервала показана на рис. 2*д*. Отметим, что аналогичное поведение величины ЭЗЗ в точке Дирака при изменении поверхностного вДВ-интервала было представлено в работе [33], только со слегка смещенным положением минимума ЭЗЗ. Помимо дисперсий ТПС на рис. 2*а–г* также показаны краевые состояния валентной зоны и зоны проводимости.

Чтобы выделить вклады атомов, принадлежащих поверхностному СБ, на дисперсионных зависимостях электронных состояний, представленных на рис. 2*а–г*, были использованы символы красного цвета с размером, зависящим от величины локализации каждого электронного состояния в первом СБ. При этом становится видно, что для систем с большой ЭЗЗ ТПС локализованы в основном в области первого СБ. Таким образом, из рис. 2*а–г* следует, что с увеличением поверхностного вДВ-интервала локализация ТПС смещается в сторону нижележащих СБ, что будет более подробно исследовано в следующей части работы.

В дополнение к расчетам оптимизированной структуры на рис. 2*е–и* представлены дисперсии электронных состояний, смоделированные для структуры, взятой из работы [21], при изменении поверхностного вДВ-промежутка от 0 до 15%. В этом случае величина $\Delta d = 0\%$, относительно которой изменялся поверхностный вДВ-промежуток, соответствует значению 2.73 \AA . На рис. 2*е* показана электронная структура при $\Delta d = 0\%$, в этом случае величина ЭЗЗ составляет 84 мэВ, что очень близко к значению, полученному для данной структуры в работе [21].

По сравнению с рассмотренными ранее дисперсиями в случае оптимизированной структуры ячейки, конус Дирака для расчета с параметрами, взятыми из работы [21], характеризуется более платообразной формой нижней части конуса. При увеличении значения Δd до 8% величина ЭЗЗ практически линейно уменьшается до 4 мэВ, а при последующем увеличении Δd до 15% значение ЭЗЗ вновь начинает увеличиваться и достигает 57 мэВ. Так же, как и в предыдущем случае, на рис. 2*е–и* красными символами выделены вклады атомов из первого СБ. Стоит отметить, что при увеличении Δd вклад поверхностных атомов в верхний конус практиче-

ски не меняется, при этом вклад в нижнюю часть конуса смещается в нижележащие СБ. На рис. 2*ж* представлена зависимость величины ЭЗЗ от изменения поверхностного вДВ-промежутка, обозначенного как Δd , выраженного в процентах. Интересным является тот факт, что зависимость величины ЭЗЗ от вДВ-промежутка для данной структуры имеет более резкий характер, чем в случае оптимизированной структуры, а также более симметричный вид относительно точки минимума 8 %.

Важно отметить, что вариация вДВ-интервала между первыми двумя СБ в обоих рассматриваемых структурах MnBi_2Te_4 не приводит к полному закрытию ЭЗЗ. В точке минимума величины ЭЗЗ для оптимизированной и неоптимизированной структур имеют близкие малые значения, равные 5 и 4 мЭВ соответственно (рис. 2*г*, *з*).

3. ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЛОКАЛИЗАЦИИ ТПС

Для дальнейшего более детального анализа причин изменения величины ЭЗЗ в точке Дирака на рис. 3 и 4 представлены соответствующие пространственные распределения состояний нижней и верхней частей конуса Дирака в области четырех поверхностных СБ в зависимости от величины поверхностного вДВ-расстояния между первым и вторым СБ. На рис. 3 представлены результаты расчетов для структуры с оптимизированными параметрами, а рис. 4 соответствует результатам, полученным для структуры, взятой из работы [21]. Локализация ТПС на каждом атоме n представлена в виде суммы вкладов орбиталей $\phi_m(n)$ атома n в ТПС в данной \mathbf{k} -точке:

$$w_{\mathbf{k}}(n) = \sum_m |\langle \phi_m(n) | \text{ТПС}_{\mathbf{k}} \rangle|^2,$$

где индекс суммирования « m » пробегает орбитали атома n . При этом $|\text{ТПС}_{\mathbf{k}}\rangle$ идентифицировались как электронные состояния в объемной запрещенной зоне со значительной поверхностной локализацией. Относительная величина локализации ТПС $w(n)$ оценивалась как среднее значение $w_{\mathbf{k}}(n)$ по трем \mathbf{k} -точкам, ближайшим к точке Γ . На рис. 3 для каждого распределения ТПС показаны соответствующие величины изменений поверхностного вДВ-промежутка (по отношению к объемному значению).

Стоит отметить, что результаты расчетов, представленные на рис. 3 и рис. 4 для двух вариантов структурных ячеек MnBi_2Te_4 , имеют схожий вид. В отсутствие сильного растяжения вДВ-промежут-

ка ТПС (как верхней, так и нижней частей дираковского конуса) демонстрируют локализацию преимущественно в области первого СБ с некоторой долей в области второго СБ. При увеличении вДВ-промежутка ТПС постепенно перераспределяются в область второго и частично третьего СБ. В соответствии с зависимостями, представленными на рис. 2*д*, *к*, подобное перераспределение ТПС сопровождается уменьшением ЭЗЗ до точки минимума (при растяжениях 3.46 и 8 % для двух рассматриваемых элементарных ячеек), а затем сменяется ростом величины ЭЗЗ. При этом в точке минимума ЭЗЗ степени локализации ТПС в первом и втором СБ практически эквивалентны, а при дальнейшем увеличении вДВ-промежутка ТПС значительно перераспределяются в область третьего СБ.

Проведенный анализ позволяет предположить, что поведение зависимости ЭЗЗ при изменении величины поверхностного вДВ-промежутка может быть напрямую связано с перераспределением ТПС между СБ, имеющими противоположные направления магнитных моментов слоев Mn. Иначе говоря, когда плотность ТПС смещается в область второго СБ, который характеризуется противоположными магнитными моментами на атомах Mn по сравнению с первым СБ, обменное поле, действующее на ТПС, уменьшается, что сопровождается уменьшением величины ЭЗЗ. При дальнейшем смещении плотности ТПС в сторону третьего СБ, имеющего такое же направление магнитного момента, как и первый СБ, величина ЭЗЗ в точке Дирака снова увеличивается.

В качестве некоторого количественного показателя влияния локализации ТПС на величину ЭЗЗ в точке Дирака рассмотрим усредненную плотность ТПС, Δw , рассчитанную на основе локальной плотности состояний $w(n)$, умноженной на $(-1)^s$, где s — номер СБ (что учитывает разницу в направлениях магнитных моментов на атомах Mn в соседних СБ), и просуммированную по четырем поверхностным СБ для состояний нижней и верхней частей конуса Дирака по отдельности. На рис. 3*е* и рис. 4*е* представлены зависимости рассчитанного параметра Δw от величины первого вДВ-промежутка для оптимизированной ячейки и ячейки, взятой из работы [21], соответственно. На рис. 3*е* и рис. 4*е* видно, что зависимости Δw для состояний нижнего конуса для двух анализируемых элементарных ячеек демонстрируют схожий убывающий характер с увеличением Δd . Для состояний верхней части дираковского конуса в целом наблюдается постепенное достаточно слабое убывание величины Δw .

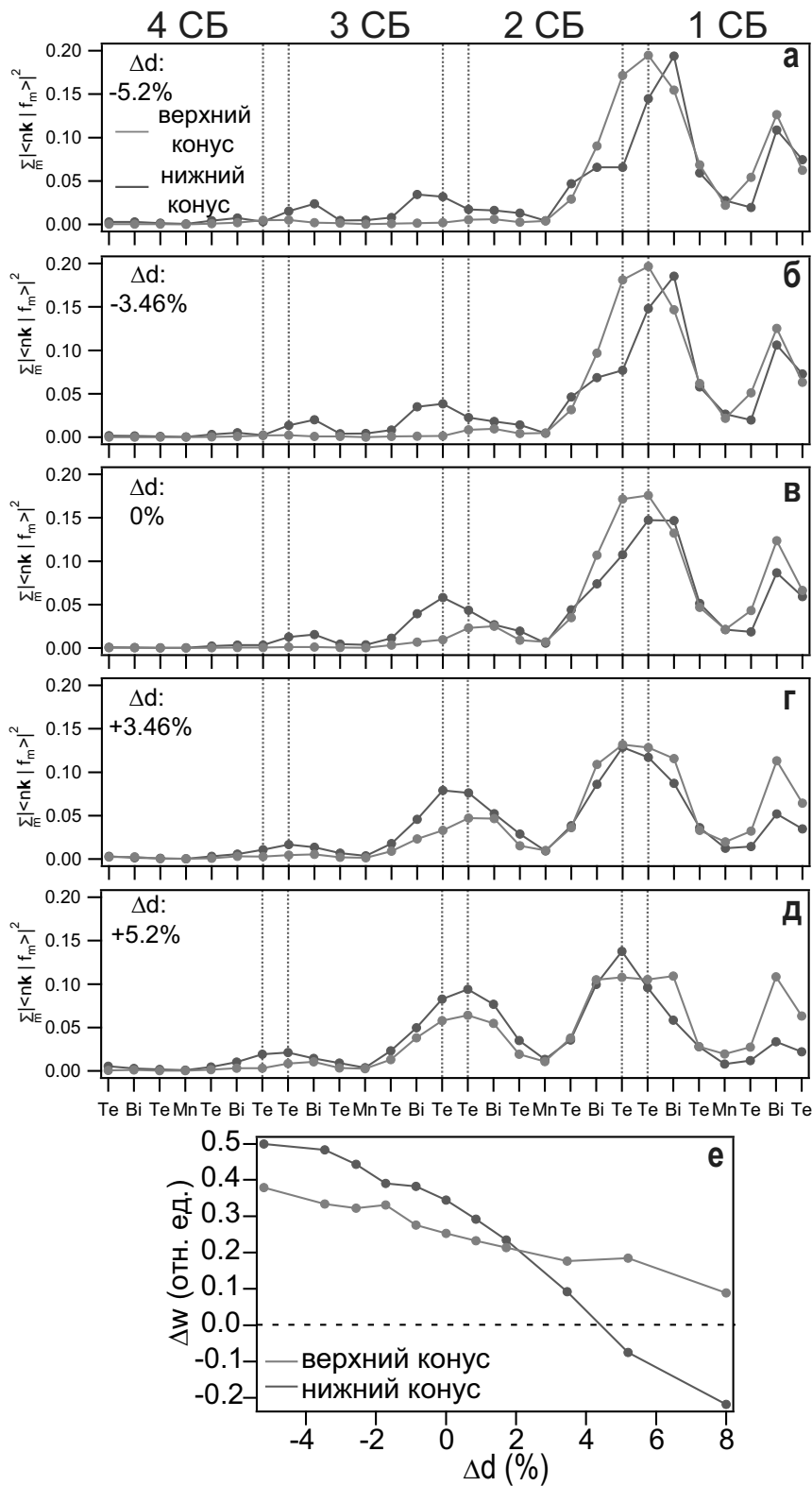


Рис. 3. (В цвете онлайн) *a-d*) Перераспределение плотности ТПС верхней и нижней частей (красный и синий цвета соответственно) конуса Дирака в области верхних четырех СБ в зависимости от модуляции вdB-расстояния между первым и вторым СБ. Здесь же отмечены величины изменений вdB-промежутка в процентах по отношению к объемному значению (2.896 Å). *e*) Изменения плотности ТПС, просуммированные по четырем поверхностным СБ для состояний верхней и нижней частей конуса Дирака (красный и синий цвета соответственно). Данные представлены для расчета структуры с оптимизированными параметрами

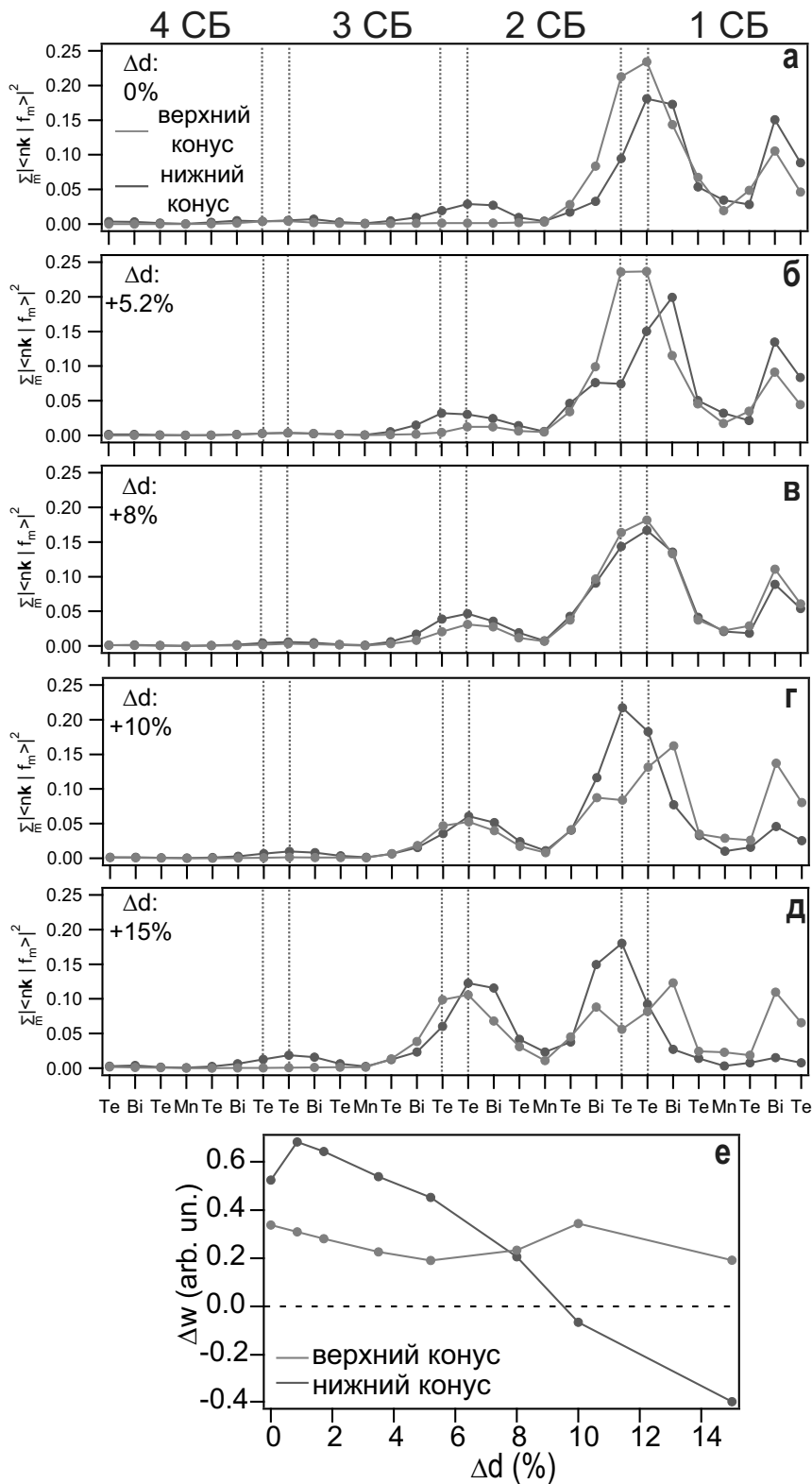


Рис. 4. (В цвете онлайн) *a–d*) Перераспределение плотности ТПС верхней и нижней частей (красный и синий цвета соответственно) конуса Дирака в области верхних четырех СБ в зависимости от модуляции вДВ-расстояния между первым и вторым СБ. Здесь же отмечены величины изменений вДВ-промежутка в процентах по отношению к объемному значению (2.731 Å). *e*) Изменения плотности ТПС, усредненные по четырем поверхностным СБ для состояний верхней и нижней частей конуса Дирака (красный и синий цвета соответственно). Данные представлены для расчета структуры, взятой из работы [21]

Интересно, что представленные зависимости показывают изменение знака Δw для нижней части состояний конуса Дирака, которые более чувствительны к изменениям поверхностного вДВ-интервала. В этом случае точка перехода через нуль для обеих структур приблизительно соответствует минимуму величины ЭЗЗ в точке Дирака на рис. 2*д, к*. Это можно объяснить тем, что в данной точке происходит изменение знака эффективного обменного поля, влияющего на ТПС. Небольшое несоответствие положения минимума ЭЗЗ и изменения знака обменного поля могут быть связаны с варьированием орбитального состава ТПС, которое вызвано изменением перекрытия орбиталей атомов Mn, Bi и Te при различных структурных модификациях элементарной ячейки.

4. МЕТОДЫ

Расчеты электронной структуры были проведены с использованием программного кода OpenMX, в котором реализован полностью релятивистский метод функционала электронной плотности с использованием псевдопотенциалов, сохраняющих норму [44], и псевдоатомных орбиталей в качестве базисных функций [45–47]. Расчеты проводились в рамках обобщенного градиентного приближения с использованием его PBE-версии [48]. Сетка интегрирования в прямом пространстве определялась энергией обрезания 450 Ry, а в обратном пространстве, для разбивки поверхностной зоны Бриллюэна, сетка задавалась как $5 \times 5 \times 5$ k -точек в случае расчетов объема кристалла и $5 \times 5 \times 1$ k -точек при наличии поверхности. Критерий сходимости по полной энергии был выбран равным $1 \cdot 10^{-6}$ эВ. Базисные функции задавались следующим образом: Bi 8.0 $s3p2d2f1$, Te 7.0 $s3p2d2f1$, Mn 6.0 $s3p2d1$. Состояния Mn $3d$ рассматривались в рамках подхода DFT+ U [49] в схеме Дударева с параметром $U = 5.4$ эВ [21]. Структурная оптимизация проводилась путем подбора параметров решетки a , b , c и относительных положений атомов внутри элементарной ячейки. При этом параметр c менялся путем изменения вДВ-промежутков между СБ. Элементарная ячейка поверхности MnBi_2Te_4 состояла из шести СБ и вакуумного слоя толщиной 12 Å.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе детально проанализированы возможные изменения в электронной структуре ТПС, а также ближайших состояний валентной зоны и зоны проводимости для АФМ ТИ MnBi_2Te_4

при вероятных структурных модификациях элементарной ячейки. Установлено, что вариация поверхностного вДВ-промежутка влияет на величину ЭЗЗ, открываемую в точке Дирака, в широком диапазоне от 80 до 4–5 мэВ.

Изменение величины поверхностного вДВ-промежутка приводит к значительному перераспределению ТПС между соседними СБ с противоположной ориентацией магнитных моментов на атомах Mn, которое в основном и определяет модуляцию величины ЭЗЗ. В этом случае рассчитанный немонотонный характер изменения величины ЭЗЗ связан с аналогичным поведением усредненной локальной плотности состояний ТПС. При этом минимум величины ЭЗЗ в точке Дирака соответствует точке изменения знака обменного поля, действующего на ТПС.

Расчеты для систем с различными структурами показали, что незначительная вариация параметров кристаллической решетки может привести к заметным изменениям в электронной структуре MnBi_2Te_4 . Было показано, что процедура структурной оптимизации элементарной ячейки MnBi_2Te_4 в рамках теории функционала плотности приводит к лучшему согласию с экспериментальными данными. Кроме того, полученные результаты позволяют нам сделать предположение о том, что наличие в литературных источниках различающихся экспериментальных данных о величине ЭЗЗ для ТПС в MnBi_2Te_4 может быть связано с возникновением различных структурных изменений поверхности кристалла.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Санкт-Петербургского государственного университета (грант № 94031444) и Российского научного фонда (грант № 18-12-00062).

ЛИТЕРАТУРА

1. X.-Li. Qi, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang, Phys. Rev. B **78**, 195424 (2008).
2. X.-L. Qi and S.-C. Zhang, Rev. Mod. Phys. **83**, 1057 (2011).
3. C.-Z. Chang, J. Zhang, X. Feng et al., Science **340**, 167 (2013).
4. Y. Tokura, K. Yasuda, and A. Tsukazaki, Nature Rev. Phys. **1**, 126 (2019).
5. C. Z. Chang, W. Zhao, D. Kim et al., Nature Mater. **14**, 473 (2015).

6. M. Gibertini, M. Koperski, A. F. Morpurgo et al., *Nature Nanotechn.* **14**, 408 (2019).
7. K. Burch, D. Mandrus, and J.-G. Park, *Nature* **563**, 47 (2018).
8. X. Lin, W. Yang, K.L. Wang et al., *Nature Electron.* **2**, 274 (2019).
9. T. Jungwirth, X. Marti, P. Wadley et al., *Nature Nanotechn.* **11**, 231 (2016).
10. L. Šmejkal, Y. Mokrousov, B. Yan et al., *Nature Phys.* **14**, 242 (2018).
11. V. Baltz, A. Manchon, M. Tsoi et al., *Rev. Mod. Phys.* **90**, 015005 (2018).
12. Y. Deng, Y. Yu, M. Z. Shi et al., *Science* **367**, 895 (2020).
13. A. Essin, J. Moore, and D. Vanderbilt, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 146805 (2009).
14. S. Coh, D. Vanderbilt, A. Malashevich et al., *Phys. Rev. B* **83**, 085108 (2011).
15. S.-Y. Xu, M. Neupane, C. Liu et al., *Nature Phys.* **8**, 616 (2012).
16. Y. L. Chen, J. H. Chu, J. G. Analytis et al., *Science* **329**, 659 (2010).
17. J. G. Checkelsky, J. Ye, Y. Onose et al., *Nature Phys.* **8**, 729 (2012).
18. A. M. Shikin, A. A. Rybkina, D. A. Estyunin et al., *Phys. Rev. B* **97**, 245407 (2018).
19. A. M. Shikin, D. A. Estyunin, Yu. I. Surnin et al., *Sci. Rep.* **9**, 4813 (2019).
20. J. Henk, A. Ernst, S. V. Eremeev et al., *Phys. Rev. Lett.* **108**, 206801 (2012).
21. M. M. Otrokov, I. I. Klimovskikh, H. Bentmann et al., *Nature* **576**, 416 (2019).
22. D. Zhang, M. Shi, T. Zhu et al., *Phys. Rev. Lett.* **122**, 206401 (2019).
23. J. Li, Y. Li, S. Du et al., *Science Advances* **5**, eaaw5685 (2019).
24. Y. Gong, J. Guo, J. Li et al., *Chin. Phys. Lett.* **36**, 076801 (2019).
25. S. H. Lee, Y. Zhu, Y. Wang et al., *Phys. Rev. Res.* **1**, 012011 (2019).
26. Z. S. Aliev, I. R. Amiraslanov, D. I. Nasonova et al., *J. Allows Comp.* **789**, 443 (2019).
27. M. M. Otrokov, I. P. Rusinov, M. Blanco-Rey et al., *Phys. Rev. Lett.* **122**, 107202 (2019).
28. C. Liu, Y. Wang, H. Li et al., *Nature Mater.* **19**, 522 (2020).
29. J. Ge, Y. Liu, J. Li et al., *Nat. Sci. Rev.* **7**, 1280 (2020).
30. A. Gao, Y.-F. Liu, C. Hu et al., *Nature* **595**, 52 (2021).
31. А. М. Шикин, Д. А. Естюнин, Н. Л. Зайцев и др., *ЖЭТФ* **161**, 126 (2022).
32. D. A. Estyunin, I. I. Klimovskikh, A. M. Shikin et al., *Appl. Phys. Lett. Mater.* **8**, 021105 (2020).
33. A. M. Shikin, D. A. Estyunin, I. I. Klimovskikh et al., *Sci. Rep.* **10**, 1 (2020).
34. A. M. Shikin, D. A. Estyunin, N. L. Zaitsev et al., *Phys. Rev. B* **104**, 115168 (2021).
35. Y.-J. Hao, P. Liu, Y. Feng et al., *Phys. Rev. X* **9**, 041038 (2019).
36. Y. J. Chen, L. X. Xu, J. H. Li et al., *Phys. Rev. X* **9**, 041040 (2019).
37. P. Swatek, Y. Wu, L. L. Wang et al., *Phys. Rev. B* **101**, 161109 (2020).
38. D. Nevola, H. X. Li, J.-Q. Yan et al., *Phys. Rev. Lett.* **125**, 117205 (2020).
39. C. Yan, S. Fernandez-Mulligan, R. Mei et al., *Phys. Rev. B* **104**, L041102 (2021).
40. B. A. Bernevig, C. Felser, and H. Beidenkopf, *Nature* **603**, 41 (2022).
41. M. Garnica, M. M. Otrokov, P. C. Aguilar et al., *Quant. Mater.* **7**, 1 (2022).
42. А. М. Шикин, Д. А. Естюнин, Д. А. Глазкова и др., *Письма ЖЭТФ* **115**, 241 (2022).
43. S. Grimme, J. Antony, S. Ehrlich et al., *J. Chem. Phys.* **132**, 154104 (2010).
44. N. Troullier and J. L. Martins, *Phys. Rev. B* **43**, 1993 (1991).
45. T. Ozaki, *Phys. Rev. B* **67**, 155108 (2003).
46. T. Ozaki and H. Kino, *Phys. Rev. B* **69**, 195113 (2004).
47. T. Ozaki and H. Kino, *Phys. Rev. B* **72**, 045121 (2005).
48. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
49. M. J. Han, T. Ozaki, and J. Yu, *Phys. Rev. B* **73**, 045110 (2006).