

Магнитное продолжение как эффективный способ получения фазы квантового аномального эффекта Холла в топологических изоляторах

М. М. Отроков^{*+}, Т. В. Меньщикова^{*1)}, И. П. Русинов^{*+}, М. Г. Вергниори^{□2)}, В. М. Кузнецов^{*},
Е. В. Чулков^{*+△}

^{*}Томский государственный университет, 634050 Томск, Россия

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

[□]Department of Applied Physics II, Faculty of Science and Technology, University of the Basque Country UPV/EHU, Apdo. 644, 48080 Bilbao, Spain

[△]Departamento de Física de Materiales UPV/EHU, Centro de Física de Materiales CFM-MPC and Centro Mixto CSIC-UPV/EHU, 20080 San Sebastián/Donostia, Spain

Поступила в редакцию 1 ноября 2016 г.

После переработки 9 января 2017 г.

Предложен новый и эффективный способ наведения магнетизма на поверхности топологического изолятора, заключающийся в нанесении на нее тонкой пленки изоструктурного магнитного изолятора, имеющего атомный состав, максимально схожий с топологическим материалом. Такой дизайн позволяет избежать формирования сильного интерфейсного потенциала между подсистемами, вследствие чего топологическое состояние свободно проникает в магнитную область, где взаимодействует с обменным полем и испытывает значительное расщепление в точке Дирака. Показано, что применение данного подхода к тонким пленкам тетрадимитоподобного топологического изолятора позволяет реализовать фазу квантового аномального эффекта Холла с размером запрещенной щели в несколько десятков миллиэлектронвольт.

DOI: 10.7868/S0370274X17050058

Открытие топологических изоляторов (ТИ) [1–7] обусловило огромный интерес к поиску эффективных способов индуцирования намагниченности в этих материалах без приложения внешнего магнитного поля, что является необходимым условием для наблюдения таких явлений, как квантовый аномальный эффект Холла (КАЭХ) [8–10] или топологический магнитоэлектрический эффект [11]. На сегодняшний день предложено несколько способов получения магнитного порядка в ТИ. Один из них – допирование магнитными атомами поверхности [12, 13], приповерхностной области [14–16] или объема [17–19] ТИ. Другим способом является создание эффекта магнитной близости [20, 21]. Однако экспериментально реализовать КАЭХ при температурах выше 2 К на данный момент не удалось [22–25]. Основной проблемой в случае магнитного допирования объема ТИ является неоднородность взаимодействия топологического поверхностного состояния с магнитными моментами примесных атомов, приводящая к флукту-

ациям ширины обменной щели по образцу (от 10 до 50 мэВ для $\text{Cr}_x(\text{Bi}_{1-y}\text{Sb}_y)_{2-x}\text{Te}_3$ [19]), причем температура КАЭХ определяется минимальной шириной щели. В результате такая флуктуация приводит к уменьшению эффективного энергетического барьера термической активации носителей, определяющего верхнюю границу температурного интервала наблюдения КАЭХ. В недавней работе [9], идеология которой восходит к экспериментальному исследованию [25], было показано, что существует оптимальное расположение допированного блока, соответствующее локализации максимума волновой функции топологического поверхностного состояния и дающее наибольший эффект при реализации КАЭХ. Действительно, в работе [25] было обнаружено, что максимальная температура 2 К наблюдается для пленок ТИ, в которых магнитному допированию подвергался только второй блок от поверхности. Однако проблема, связанная с неоднородностью распределения магнитных атомов, приводящей в свою очередь к флуктуациям ширины обменной щели по образцу, в этом случае также не решается [25]. Что касается эф-

¹⁾e-mail: menshikova_t@mail.ru

²⁾M. G. Vergniory.

фекта магнитной близости, то, согласно имеющимся на сегодняшний день данным [20, 26], серьезный недостаток этого метода заключается в наличии резкой границы раздела (интерфейса) между топологическим и магнитным изоляторами, что приводит к возникновению сильного интерфейсного потенциала. Так, в случае гетероструктуры $\text{MnSe}/\text{Bi}_2\text{Se}_3$ [20], следствием этого является, с одной стороны, перераспределение топологического состояния во второй от интерфейса пятислойный блок Bi_2Se_3 , что приводит к весьма незначительному расщеплению точки Дирака (8.5 мэВ), а с другой – появление интерфейсных состояний. Последнее приводит к металлизации спектра системы и, как следствие, может обуславливать возникновение диссипативных токов в транспортных экспериментах.

В данном письме предложен лишенный вышеописанных недостатков альтернативный способ организации ферромагнитного (ФМ) порядка на поверхности топологических изоляторов или в их тонких пленках. Этот способ заключается в нанесении на поверхность ТИ ультратонкой пленки такого ферромагнитного изолятора, который имел бы одинаковую кристаллическую структуру и близкий атомный состав с данным ТИ. Следствием такого выбора будет отсутствие резкого интерфейса и, соответственно, интерфейсного потенциала в области контакта ТИ и магнитной пленки. Ранее в работе [27] было показано, что конструирование немагнитных систем типа [ультратонкая пленка тривиального изолятора]/ТИ, имеющих сходные кристаллическую структуру и атомный состав, приводит к проникновению топологического состояния в область тривиального материала. Наши первопринципные расчеты показывают, что “магнитное продолжение” поверхности ТИ также благоприятствует проникновению топологического состояния в магнитную пленку, где его взаимодействие с сильным обменным полем приводит к открытию большой запрещенной щели без ее флуктуации по образцу. В случае тетрадимитоподобных ТИ [4–6, 28, 29] предлагаемый метод магнитного продолжения позволяет избежать появления тривиальных поверхностных состояний Шоклиевского типа благодаря химической инертности магнитной пленки. Еще одним достоинством указанного метода является легкость выращивания подобных структур, например, с помощью молекулярно-лучевой эпитаксии.

В настоящей работе в качестве магнитной пленки используется недавно синтезированный слоистый халькогенид MnBi_2Te_4 (MBT) [30]. Данный материал обладает тетрадимитоподобной кристаллической

структурой (пространственная группа $R\bar{3}m$), представляющей собой чередование семислойных блоков (SL) вдоль гексагональной оси c . Согласно [30], MBT является полупроводником с постоянной решетки 4.334 Å. В соответствии с вышеописанными критериями, идеальной подложкой для MBT является ТИ GeBi_2Te_4 (GBT) [31], поскольку их кристаллические структуры одинаковы, атомный состав близок, и, наконец, GBT имеет практически тот же параметр решетки (4.323 Å).

На примере системы MBT/GBT мы показываем, что нанесение магнитного семислойного блока MBT на поверхность тетрадимитоподобного ТИ приводит к открытию эффективной щели в дираковском состоянии ~ 40 мэВ. Такое расщепление возникает за счет существенного перераспределения топологического состояния в область магнитного полупроводника, которое обусловлено изоструктурностью и схожим атомным составом ТИ-подложки и магнитной пленки. Более того, применение метода магнитного продолжения к тонким пленкам GeBi_2Te_4 приводит к формированию фазы КАЭХ с размером запрещенной щели вплоть до 35 мэВ.

Расчеты электронной структуры были проведены в рамках формализма функционала электронной плотности, реализованного в программном коде VASP [32]. Для описания взаимодействия между ионными остовами и валентными электронами использован метод проекционных плоских волн [33]. Для построения обменно-корреляционного потенциала применено обобщенное градиентное приближение (GGA) [34]. В гамильтониан были включены скалярно-релятивистские поправки, а спин-орбитальное взаимодействие учитывали по методу второй вариации [35]. Электронная структура исследуемых систем была рассчитана с использованием экспериментальных параметров решетки a и оптимизированных межплоскостных расстояний с учетом поправок на ван-дер-ваальсово взаимодействие (метод DFT-D3 [36, 37]). Сильно коррелированный характер $3d$ -состояний Mn учитывался с помощью метода $\text{GGA}+U$ [38] в рамках схемы Дударева [39]. Эффективный параметр $U_{\text{eff}} = U - J$ для $3d$ -состояний Mn был выбран равным 5.34 эВ. Исследуемые в работе поверхность и тонкие пленки были построены в рамках модели повторяющихся пленок, вакуумный промежуток между которыми составлял 10 Å.

Расчет числа Черна проведен в рамках модели сильной связи на основе вычислений поля Берри. Тензор кривизны Берри был рассчитан с помощью формулы Кубо [40, 41] в рамках метода сильной

связи с использованием гамильтониана H в базисе функций Ванье:

$$\Omega_{n,\alpha\beta}(\mathbf{k}) = -\text{Im} \sum_{v \neq n} \frac{\langle n | \nabla_{\alpha} H(\mathbf{k}) | v \rangle \langle v | \nabla_{\beta} H(\mathbf{k}) | n \rangle}{(E_n(\mathbf{k}) - E_v(\mathbf{k}))^2}, \quad (1)$$

где $\nabla_{\alpha} H$ – оператор скорости; $|n\rangle$, $|v\rangle$ – Блоховские состояния с энергиями $E_n(\mathbf{k})$ и $E_v(\mathbf{k})$ соответственно. Полная кривизна Берри была получена путем суммирования по всем занятым состояниям: $\Omega_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \sum_n f_n \Omega_{n,\alpha\beta}(\mathbf{k})$ (f_n – распределение Ферми–Дирака). Компоненты калибровочного магнитного поля определяются как $\Omega_{\gamma}(\mathbf{k}) = \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \Omega_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$. Здесь $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$ – трехкомпонентный асимметричный тензор Леви–Чивита. Число Черна вычисляли как поток калибровочного поля Берри по двумерной зоне Бриллюэна: $C = 1/(2\pi) \int_S \Omega_z(\mathbf{k}) dk^2$ (S – площадь двумерной зоны Бриллюэна, $\Omega_z(\mathbf{k})$ – нормальная компонента кривизны Берри).

Необходимым условием открытия щели в дираковском конусе на поверхности ТИ является наличие ферромагнитного состояния, в котором обменное поле направлено вдоль нормали к плоскости образца [12]. Поэтому изучим сначала магнитное основное состояние в исследуемых системах. В случае свободного семислойного блока MBT, взятого с параметром решетки GBT, расчет полных энергий в ФМ- и антиферромагнитном (АФМ) состояниях показал энергетическую выгодность ферромагнетизма (12 мэВ на пару Mn). Более того, энергия магнитной анизотропии, рассчитанная с учетом как зонного, так и диполь-дипольного вкладов, составляет 0.15 мэВ, что указывает на то, что ось легкого намагничивания направлена перпендикулярно поверхности MBT.

При осаждении семислойного блока MBT на поверхность GBT (рис. 1а) ферромагнитный порядок в нем становится более устойчивым: выгодность по сравнению с АФМ-состоянием увеличивается до 14 мэВ на пару Mn. Также усиливается и магнитная анизотропия (на 24%), что происходит за счет увеличения зонного вклада. Отметим также, что в случае тонких пленок типа $[\text{MnBi}_2\text{Te}_4]_{1\text{SL}}/[\text{GeBi}_2\text{Te}_4]_{1\text{SL}}/[\text{MnBi}_2\text{Te}_4]_{1\text{SL}}$ и $[\text{MnBi}_2\text{Te}_4]_{1\text{SL}}/[\text{GeBi}_2\text{Te}_4]_{2\text{SL}}/[\text{MnBi}_2\text{Te}_4]_{1\text{SL}}$ (MBT-GBT-MBT и MBT-GBT-GBT-MBT соответственно) особый интерес представляет межслоевая ФМ-конфигурация (локальные моменты в обоих блоках направлены в одну сторону), так как в этом случае возможно возникновение фазы квантового аномального эффекта Холла. Наличие в кристаллической структуре ван-дер-ваальсовых промежутков приводит к тому, что межслоевое

обменное взаимодействие через немагнитную прослойку практически отсутствует, в результате чего всегда можно ориентировать намагниченности соседних слоев Mn параллельно друг другу с помощью внешнего магнитного поля [25]. Поэтому ниже приводятся результаты только для случая межслоевого ФМ-упорядочения в тонких пленках $[\text{MnBi}_2\text{Te}_4]_{1\text{SL}}/[\text{GeBi}_2\text{Te}_4]_{n\text{SL}}/[\text{MnBi}_2\text{Te}_4]_{1\text{SL}}$.

Электронная структура изолированного семислойного блока MBT характеризуется щелью 260 мэВ и работой выхода 4.94 эВ; полная намагниченность блока равна $5\mu_B$ на формульную единицу ($4.6\mu_B$ на атоме Mn в сфере Вигнера–Зейца). Соединение GBT является топологическим изолятором с объемной щелью ~ 80 мэВ и работой выхода 4.7 эВ. Как видно из рис. 1b, поверхностная электронная структура GBT характеризуется глубоколокализованным топологическим состоянием (рис. 1b, вставка) с точкой Дирака на уровне Ферми.

При нанесении семислойного блока MBT на поверхность GBT зонный спектр последнего претерпевает значительные изменения. Как видно из рис. 1с, точка Дирака испытывает обменное расщепление ~ 40 мэВ. При этом нижняя часть конуса подложки смещается в область объемных состояний валентной зоны и трансформируется в резонанс. В то же время верхняя часть конуса модифицируется в параболическую зону, образованную (как показал анализ работ выхода) в результате гибридизации дна зоны проводимости MBT с верхней частью дираковского конуса подложки. Отметим, что глобальная щель в системе составляет 19 мэВ. Ее нижний край формируется объемными состояниями валентной полосы, а верхний – минимумом параболической зоны (см. рис. 1с).

Причиной возникновения большого расщепления в точке Дирака является значительное проникновение топологического состояния в магнитный семислойный блок (см. вставки к рис. 1b, c), где оно приобретает заметный вес на марганцевом слое. Такое перераспределение плотности топологического состояния напрямую связано с особенностями кристаллической структуры системы MBT/GBT. Формально, интерфейс между семислойником MBT и подложкой GBT располагается в разделяющем их ван-дер-ваальсовом промежутке, очень близком по своему размеру и характеру к таковому между соседними семислойными блоками в GBT. Поскольку атомный состав слоев вблизи “интерфейса” MBT/GBT совпадает вплоть до третьего слоя включительно (см. рис. 1а), это позволяет рассматривать MBT как магнитное продолжение GBT. Как показывает ана-

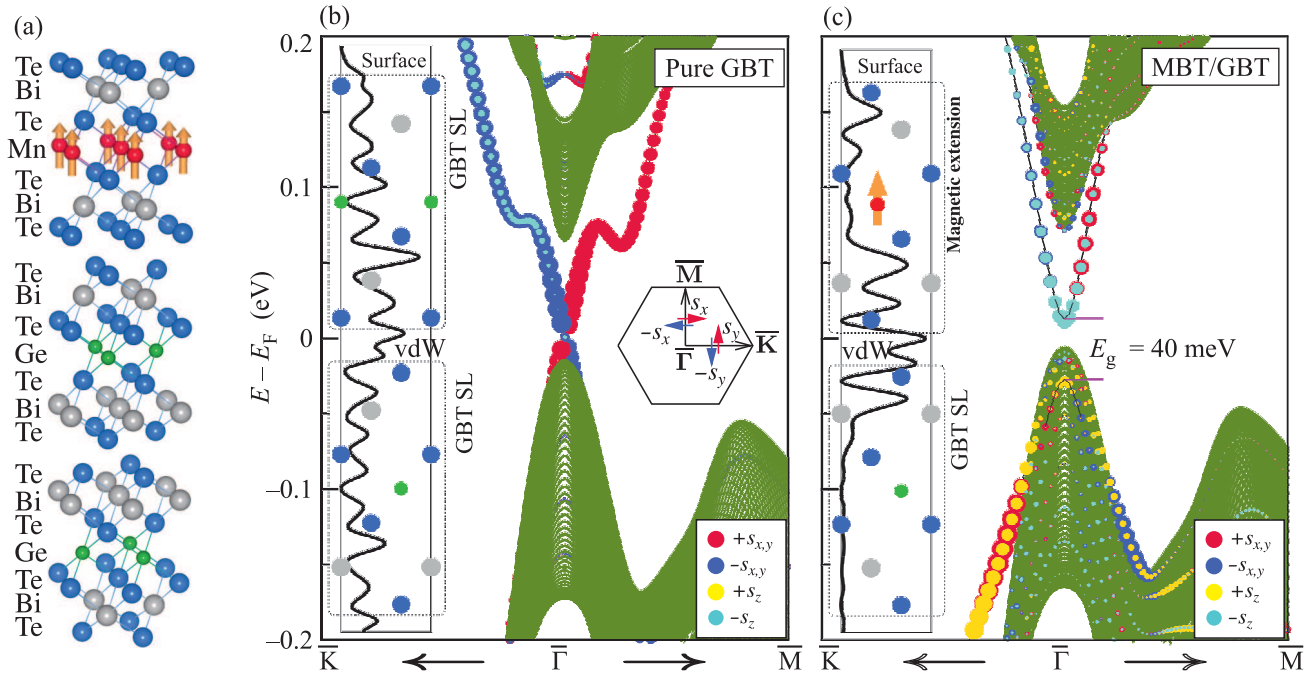


Рис. 1. (Цветной онлайн) (a) – Атомная структура MBT/GBT. Оранжевые стрелки указывают ориентацию магнитных моментов атомов Mn. Разрешенная по спину поверхностная электронная структура GBT (b) и MBT/GBT (c). Размер и цвет кружков отражает, соответственно, величину и знак проекции вектора спина на картезианские оси. Красный (синий) цвет соответствует положительному (отрицательному) значению планарных проекций спина S_x или S_y , желтый (бирюзовый) – положительному (отрицательному) значению вертикальной проекции спина S_z . Зеленым цветом изображена проекция объемных состояний на двумерную зону Бриллюэна. Вставки на панелях (b), (c) показывают проинтегрированную по плоскости ab зарядовую плотность топологического состояния для GBT и MBT/GBT соответственно

лиз работ выхода MBT и GBT, объемная щель подложки частично перекрывается со щелью магнитного семислойного блока таким образом, что потолок валентной зоны MBT лежит намного ниже такового для GBT. В результате тривиальные состояния магнитного семислойного блока в глобальной щели отсутствуют.

Перекрытия обменной щели с объемными состояниями GBT можно в значительной степени избежать, применив метод магнитного продолжения к тонким пленкам GBT. Электронная структура тонкой пленки MBT-GBT-MBT изображена на рис. 2. В отсутствие спин-орбитального взаимодействия (СОВ) тонкая пленка MBT-GBT-MBT представляет собой прямозонный полупроводник с шириной щели ~ 545 мэВ (рис. 2a). При этом потолок валентной зоны вблизи точки $\bar{\Gamma}$ сформирован состояниями со спином вниз ($-S_z$), а дно зоны проводимости – состояниями со спином вверх ($+S_z$). Учет СОВ приводит к уменьшению щели до 35 мэВ и, как видно из рис. 2b, к смене знака спиновой поляризации краев щели на обратную. Это, в свою очередь, может являться указанием на нетривиальность то-

пологии системы, т.е. на инвертирование краев щели. Для верификации топологической фазы был проведен расчет числа Черна в рамках метода сильной связи, а также с использованием метода, основанного на гибридных функциях Ванье (код Z2Pack [42]). На рис. 2c представлена электронная структура пленки MBT-GBT-MBT, рассчитанная в рамках метода сильной связи, которая хорошо согласуется с таковой, полученной из первых принципов (рис. 2b). Интегрирование рассчитанной кривизны Берри (показана на рис. 2d) дает число Черна $C = -1$, что подтверждает нетривиальность электронной структуры $[\text{MnBi}_2\text{Te}_4]_{1\text{SL}}/[\text{GeBi}_2\text{Te}_4]_{1\text{SL}}/[\text{MnBi}_2\text{Te}_4]_{1\text{SL}}$. Тот же результат для числа Черна был получен с использованием кода Z2Pack. Такие системы, также называемые изоляторами Черна, демонстрируют КАЭХ, характеризуемый наличием бездиссипативной, 100 %-спин-поляризованной краевой моды [10].

Для MBT-GBT-MBT магнитное продолжение также приводит к топологическому переходу в фазу КАЭХ, характеризующуюся числом Черна $C = -1$. При этом щель уменьшается до 24 мэВ

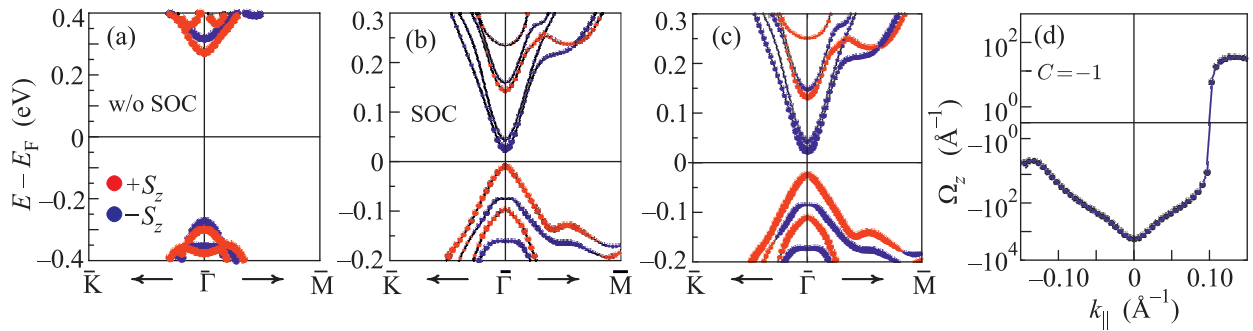


Рис. 2. (Цветной онлайн) Электронная структура пленки MBT-GBT-MBT, рассчитанная без учета (a) и с учетом СОВ (b). (c) – Зонный спектр MBT-GBT-MBT, полученный в модели сильной связи. Размер и цвет кружков отражает соответственно величину и знак проекции вектора спина на ось z (S_z). Красный (синий) цвет соответствует положительному (отрицательному) значению S_z . (d) – Проекция вектора кривизны Берри на ось z (Ω_z)

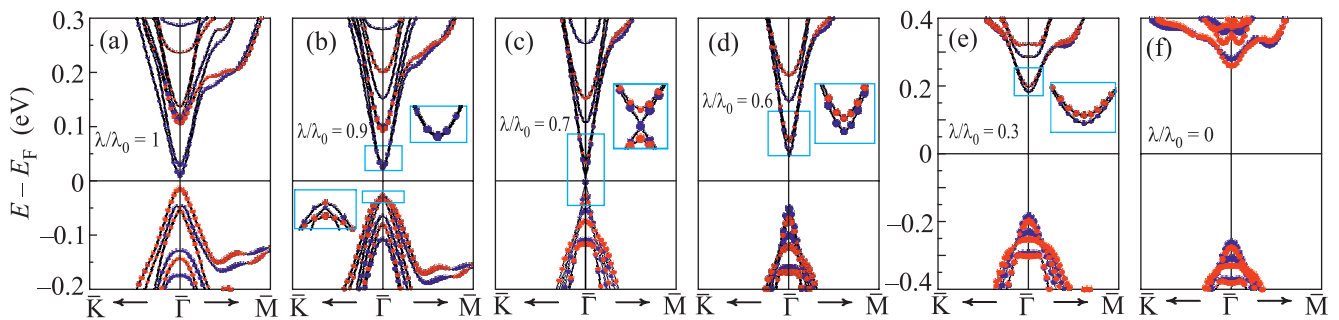


Рис. 3. (Цветной онлайн) (a–f) – Электронная структура пленки MBT-GBT-GBT-MBT в зависимости от силы спин-орбитального взаимодействия в диапазоне от истинного значения λ_0 до нуля. Размер и цвет кружков обозначает то же, что и на рис. 2

(рис. 3a), оставаясь прямой, как и в случае MBT-GBT-MBT. На примере системы MBT-GBT-GBT-MBT мы проследили особенности инвертирования краев щели при варьировании константы СОВ λ от ее истинного значения λ_0 до нуля. Как видно из рис. 3b, при уменьшении λ/λ_0 от 1 до 0.9 происходит небольшое увеличение щели, сопровождаемое уменьшением области $\mathbf{k}$, в которой инвертирован верхний край валентной зоны, а также уменьшением значения z компоненты спина. Вблизи $\lambda/\lambda_0 = 0.7$ происходит закрытие щели, сопровождающееся образованием конуса. При $\lambda/\lambda_0 \leq 0.7$ щель открывается уже в неинвертированном режиме, что означает топологический фазовый переход. λ/λ_0 . При этом потолок валентной зоны меняет знак S_z компоненты спина с положительного на отрицательный, в то время как дно зоны проводимости все еще имеет отрицательную проекцию z -компоненты спина, $-S_z$, как и при $\lambda/\lambda_0 = 1$. Только при $\lambda/\lambda_0 \leq 0.3$ два нижних состояния в зоне проводимости меняют знаки на противоположный, оставаясь неизменными по знаку до $\lambda/\lambda_0 = 0$.

Таким образом, в данном письме мы предложили новый и эффективный метод индуцирования магнетизма на поверхности топологического изолятора – метод “магнитного продолжения”. Он заключается в нанесении на поверхность топологического изолятора тонкой пленки изоструктурного магнитного изолятора, максимально сходного по атомному составу с самим топологическим материалом. На примере GeBi_2Te_4 мы продемонстрировали расщепление в топологическом состоянии на величину 40 мэВ при нанесении семислойного блока магнитного изолятора MnBi_2Te_4 на поверхность данного ТИ. Такое расщепление возникает вследствие проникновения топологического состояния в область магнитного продолжения. Более того, мы показали, что данное свойство может быть эффективно использовано для реализации фазы квантового аномального эффекта Холла и предложили тонкопленочные магнитные системы с запрещенными щелями вплоть до 35 мэВ, что заметно превышает величины запрещенных щелей, достигаемые в экспериментально изучаемых системах, демонстрирующих этот эффект. Данное

обстоятельство позволяет надеяться на существенное расширение температурного интервала наблюдений квантового аномального эффекта Холла. Отметим, что в свете работ [9, 25] формирование системы $\text{MnBi}_2\text{Te}_4/\text{GeBi}_2\text{Te}_4/\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ может формально рассматриваться как дельта-легирование крайних семислойных блоков пленки GeBi_2Te_4 атомами Mn ($\text{Ge}_0\text{Mn}_1\text{Bi}_2\text{Te}_4$). Однако подход, предлагаемый в нашей работе, также предполагает возможность рассмотрения систем типа $\text{MnBi}_2\text{Te}_4/\text{ТИ}/\text{MnBi}_2\text{Te}_4$, где в роли ТИ могут выступать другие соединения из семейств $(\text{A}^{\text{IV}}\text{B}^{\text{VI}})_{n>1} \cdot (\text{A}_2^{\text{V}}\text{B}_3^{\text{VI}})_{m>1}$ и $\text{A}_2^{\text{V}}\text{B}_3^{\text{VI}}$ ($\text{A}^{\text{V}} = \text{Sb, Bi}$; $\text{B}^{\text{VI}} = \text{Se, Te}$) [6]. Очевидно, что такой дизайн не следует из работ [9, 25] и не может быть представлен как дельта-легирование. Так, в рамках предложенного в данной работе подхода темой отдельного исследования может стать случай контакта MnBi_2Te_4 и Bi_2Te_3 . С одной стороны, в данной системе можно ожидать большую глобальную щель: атомный состав двух подсистем вблизи интерфейса идентичен, что обеспечит магнитное продолжение, однако, в отличие от случая $\text{MnBi}_2\text{Te}_4/\text{GeBi}_2\text{Te}_4$, соотношение работ выхода MnBi_2Te_4 и Bi_2Te_3 таково, что обменная щель в точке Дирака будет встраиваться в фундаментальную щель топологического изолятора. С другой стороны, особый интерес привлекают тонкие пленки такой системы. Ранее в [43] было показано, что Bi_2Te_3 в двумерном пределе демонстрирует осцилляции перехода в квантовую спин-Холловскую фазу в зависимости от толщины пленки. Наличие осцилляций в фазе квантового аномального эффекта Холла не исключено и в тонких пленках системы $\text{MnBi}_2\text{Te}_4/\text{Bi}_2\text{Te}_3$.

Данное исследование выполнено при поддержке Программы “Научный фонд им. Д.И. Менделеева Томского государственного университета” в 2015 г. (# 8.1.05.2015), гранта СПбГУ # 15.61.202.2015, а также гранта # 3.8895.20171/П220. Численные расчеты были частично проведены в РЦ “Вычислительный Центр СПбГУ” (<http://cc.spbu.ru>).

1. C. L. Kane and E. J. Mele, Phys. Rev. Lett. **95**, 146802 (2005).
2. B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S. C. Zhang, Science **314**, 1757 (2006).
3. M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, Science **318**, 766 (2007).
4. D. Hsieh, D. Qian, L. Wray, Y. Xia, Y. S. Hor, R. J. Cava, and M. Z. Hasan, Nature **452**, 970 (2008).
5. H. Zhang, C.-X. Liu, X.-L. Qi, X. Dai, Z. Fang, and S. C. Zhang, Nature Phys. **5**, 438 (2009).
6. S. V. Eremeev, G. Landolt, T. V. Menshchikova et al. (Collaboration), Nature Commun. **3**, 635 (2012).
7. I. V. Silkin, T. V. Menshchikova, M. M. Otrokov, S. V. Eremeev, Y. M. Koroteev, M. G. Vergniory, V. M. Kuznetsov, and E. V. Chulkov, JETP Lett. **96**, 322 (2012).
8. V. N. Men'shov, V. V. Tugushev, and E. V. Chulkov, EPL (Europhysics Lett.) **114**, 37003 (2016).
9. В. Н. Меньшов, В. В. Тугушев, Е. В. Чулков, Письма в ЖЭТФ **104**, 480 (2016).
10. X.-L. Qi, Y.-S. Wu, and S.-C. Zhang, Phys. Rev. B **74**, 085308 (2006).
11. A. M. Essin, J. E. Moore, and D. Vanderbilt, Phys. Rev. Lett. **102**, 146805 (2009).
12. Q. Liu, C.-X. Liu, C. Xu, X. L. Qi, and S. C. Zhang, Phys. Rev. Lett. **102**, 156603 (2009).
13. V. N. Men'shov, V. V. Tugushev, and E. V. Chulkov, JETP Lett. **94**, 629 (2011).
14. J. Henk, M. Flieger, I. V. Maznichenko, I. Mertig, A. Ernst, S. V. Eremeev, and E. V. Chulkov, Phys. Rev. Lett. **109**, 076801 (2012).
15. J. Henk, A. Ernst, S. V. Eremeev, E. V. Chulkov, I. V. Maznichenko, and I. Mertig, Phys. Rev. Lett. **108**, 206801 (2012).
16. A. Polyakov, H. L. Meyerheim, E. D. Crozier, R. A. Gordon, K. Mohseni, S. Roy, A. Ernst, M. G. Vergniory, X. Zubizarreta, M. M. Otrokov, E. V. Chulkov, and J. Kirschner, Phys. Rev. B **92**, 045423 (2015).
17. Y. L. Chen, J.-H. Chu, J. G. Analytis et al. (Collaboration), Science **329**, 659 (2010).
18. M. G. Vergniory, M. M. Otrokov, D. Thonig, M. Hoffmann, I. V. Maznichenko, M. Geilhufe, X. Zubizarreta, S. Ostanin, A. Marmodoro, J. Henk, W. Hergert, I. Mertig, E. V. Chulkov, and A. Ernst, Phys. Rev. B **89**, 165202 (2014).
19. I. Lee, C. K. Kim, J. Lee, S. J. L. Billinge, R. Zhong, J. A. Schneeloch, T. Liu, G. Gu, and J. C. S. Davis, Proc. Nat. Acad. Sci. **112**, 1316 (2015).
20. S. V. Eremeev, V. N. Men'shov, V. V. Tugushev, and E. V. Chulkov, Phys. Rev. B **88**, 144430 (2013).
21. V. N. Men'shov, V. V. Tugushev, S. V. Eremeev, P. M. Echenique, and E. V. Chulkov, Phys. Rev. B **88**, 224401 (2013).
22. C.-Z. Chang, J. Zhang, X. Feng et al. (Collaboration), Science **340**, 167 (2013).
23. J. G. Checkelsky, R. Yoshimi, A. Tsukazaki, K. S. Takahashi, Y. Kozuka, J. Falson, M. Kawasaki, and Y. Tokura, Nat. Phys. **10**, 731 (2014).
24. X. Kou, S.-T. Guo, Y. Fan, L. Pan, M. Lang, Y. Jiang, Q. Shao, T. Nie, K. Murata, J. Tang, Y. Wang, L. He, T.-K. Lee, W.-L. Lee, and K. L. Wang, Phys. Rev. Lett. **113**, 137201 (2014).

25. M. Mogi, R. Yoshimi, A. Tsukazaki, K. Yasuda, Y. Kozuka, K.S. Takahashi, M. Kawasaki, and Y. Tokura, *Appl. Phys. Lett.* **107**, 182401 (2015).
26. W. Luo and X.-L. Qi, *Phys. Rev. B* **87**, 085431 (2013).
27. T. V. Menshchikova, M. M. Otrokov, S. S. Tsirkin, D. A. Samorokov, V. V. Bebnova, A. Ernst, V. M. Kuznetsov, and E. V. Chulkov, *Nano Lett.* **13**, 6064 (2013).
28. P. Sessi, M. M. Otrokov, T. Bathon, M. G. Vergniory, S. S. Tsirkin, K. A. Kokh, O. E. Tereshchenko, E. V. Chulkov, and M. Bode, *Phys. Rev. B* **88**, 161407(R) (2013).
29. S. Roy, H. L. Meyerheim, K. Mohseni, A. Ernst, M. M. Otrokov, M. G. Vergniory, G. Mussler, J. Kampmeier, D. Grützmacher, C. Tusche, J. Schneider, E. V. Chulkov, and J. Kirschner, *Phys. Rev. B* **90**, 155456 (2014).
30. D. S. Lee, T.-H. Kim, C.-H. Park, C.-Y. Chung, Y. S. Lim, W.-S. Seo, and H.-H. Park, *Cryst. Eng. Comm.* **15**, 5532 (2013).
31. K. Okamoto, K. Kuroda, H. Miyahara, K. Miyamoto, T. Okuda, Z. S. Aliev, M. B. Babanly, I. R. Amiraslanov, K. Shimada, H. Namatame, M. Taniguchi, D. A. Samorokov, T. V. Menshchikova, and E. V. Chulkov, *Phys. Rev. B* **86**, 195304 (2012).
32. G. Kresse and J. Furthmüller, *Comput. Mater. Sci.* **6**, 15 (1996).
33. G. Kresse and D. Joubert, *Phys. Rev. B* **59**, 1758 (1998).
34. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
35. D. D. Koelling and B. N. Harmon, *J. Phys. C* **10**, 3107 (1977).
36. S. Grimme, J. Antony, S. Ehrlich, and H. Krieg, *J. Chem. Phys.* **132**, 154104 (2010).
37. S. Grimme, S. Ehrlich, and L. Goerigk, *J. Comp. Chem.* **32**, 1456 (2011).
38. V. I. Anisimov, J. Zaanen, and O. K. Andersen, *Phys. Rev. B* **44**, 943 (1991).
39. S. L. Dudarev, G. A. Botton, S. Y. Savrasov, C. J. Humphreys, and A. P. Sutton, *Phys. Rev. B* **57**, 1505 (1998).
40. D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 405 (1982).
41. Y. Yao, L. Kleinman, A. H. MacDonald, J. Sinova, T. Jungwirth, D.-s. Wang, E. Wang, and Q. Niu, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 037204 (2004).
42. A. A. Soluyanov and D. Vanderbilt, *Phys. Rev. B* **83**, 235401 (2011).
43. G. Bihlmayer, Yu. M. Koroteev, T. V. Menshchikova, E. V. Chulkov, and S. Blügel, *Topological Insulators: Fundamentals and Perspectives*, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim., 2015, Part II, Chapter 5. P. 124.