

Ванадий-содержащие планарные гетероструктуры на основе топологических изоляторов

Е. К. Петров^{+*1)}, И. В. Силкин⁺, В. М. Кузнецов⁺, Т. В. Меньщикова⁺, Е. В. Чулков^{×**+}

⁺Томский государственный университет, 634050 Томск, Россия

^{*}Санкт-Петербургский государственный университет, 198504 С.-Петербург, Россия

[×]Departamento de Polímeros y Materiales Avanzados: Física, Química y Tecnología, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad del País Vasco UPV/EHU, 20080 San Sebastián/Donostia, Basque Country, Spain

Поступила в редакцию 7 декабря 2022 г.

После переработки 22 декабря 2022 г.

Принята к публикации 23 декабря 2022 г.

Представлены результаты теоретического исследования V-содержащих гетероструктур, представляющих собой ультратонкую магнитную пленку на поверхности немагнитного топологического изолятора. Показана возможность управления смещением точки Дирака в k -пространстве, являющегося мерой протяженности особой плоской зоны, возникающей при формировании доменных стенок на поверхности антиферромагнитных топологических изоляторов. Смещение точки Дирака обратно пропорционально значению групповой скорости электронов в точке Дирака и пропорционально степени локализации топологического состояния в магнитной пленке. Управление смещением осуществляется путем подбора подложки с определенным значением работы выхода. Предложены конкретные системы для экспериментального исследования особенностей плоских зон в антиферромагнитных топологических изоляторах.

DOI: 10.31857/S1234567823030096, EDN: oxnfvk

1. Введение. Сочетание нетривиальной зонной топологии и обменного взаимодействия позволяет реализовать ряд перспективных с прикладной точки зрения физических эффектов, таких как квантовый аномальный эффект Холла [1–9] и топологический магнето-электрический эффект [4, 10, 11]. Кроме того, такое сочетание может приводить к возникновению новых состояний вещества, обладающих уникальными свойствами. Одним из таких состояний вещества является фаза антиферромагнитного топологического изолятора (АФМ ТИ) [5, 12–17]. В зависимости от направления вектора намагниченности (параллельно или перпендикулярно плоскости поверхности), в зонной структуре поверхности таких систем могут присутствовать как бесщелевые (подобно трехмерным топологическим изоляторам), так и обменно-расщепленные топологические поверхностные состояния. Это в сочетании с наличием возможности управления спин-зависимыми транспортными свойствами делает такие материалы особенно интересными для практического применения. Первым представителем класса АФМ ТИ является соединение MnBi_2Te_4 , свойства которого сначала были теоретически предсказаны, а после получили экс-

периментальное подтверждение [12]. Благодаря намагниченности перпендикулярно плоскости (0001) в тонких пленках MnBi_2Te_4 и системах на его основе удалось наблюдать квантовый аномальный эффект Холла [6, 7] и квантованную холловскую проводимость во внешнем магнитном поле [7, 18]. Открытие этого соединения спровоцировало рост как теоретических, так и экспериментальных исследований соединения MnBi_2Te_4 [6, 11, 19–33] и систем на его основе, в том числе тонких пленок [5, 14, 34], гетероструктур [35, 36] и сверхрешеток [37–40].

В недавней работе [17] теоретически было предсказано, что формирование магнитных неоднородностей может оказывать существенное влияние на электронные свойства АФМ ТИ. Так, наличие доменных стенок на поверхности планарных АФМ ТИ (с намагниченностью в плоскости (0001)) [26, 41, 42] приводит к появлению дополнительных специфических одномерных состояний, модифицирующих энергетический спектр поверхности [17, 27, 43, 44]. Эти одномерные состояния формируются за счет соединения двух точек Дирака от разных доменов и имеют вид плоских зон с высокой эффективной массой и плотностью состояний. Плоские зоны являются предметом интенсивного исследования [45–48] и могут проявлять себя в ряде таких важных физи-

¹⁾e-mail: evg.konst.petrov@gmail.com

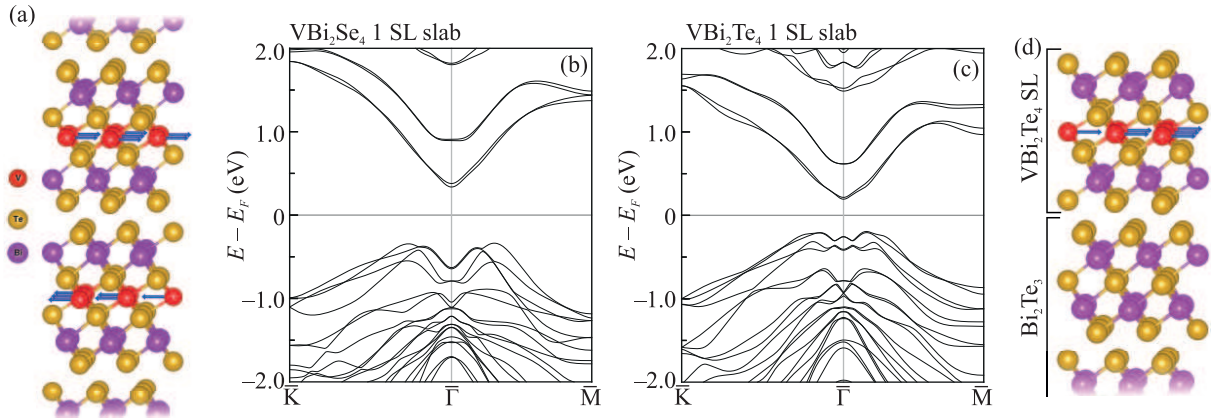


Рис. 1. (Цветной онлайн) (а) – Кристаллическая структура объема V-содержащих соединений на примере VBi_2Te_4 . (b), (c) – Зонные структуры изолированных SL VBi_2Se_4 и VBi_2Te_4 . (d) – Кристаллическая структура рассматриваемых гетероструктур на примере $\text{VBi}_2\text{Te}_4/\text{Bi}_2\text{Te}_3$. Синими стрелками показаны магнитные моменты

ческих эффектов, как орбитальный магнетизм [49], коррелированный изолятор [50], сверхпроводимость [49, 51, 52]. Необходимо отметить, что сверхпроводимость также наблюдается уже в немагнитных ТИ за счет эффекта близости [53–55].

Интенсивность связанных с плоской зоной эффектов пропорциональна протяженности плоской зоны, которая зависит от электронных и магнитных характеристик конкретного материала. В связи с этим в настоящей работе мы показываем эффективный способ увеличения протяженности плоской зоны путем формирования гетероструктур типа магнитного продолжения ТИ [56], представляющих собой ультратонкую магнитную пленку на поверхности ТИ. На основе полученных результатов мы также предлагаем системы для экспериментального наблюдения плоских зон в планарных топологических магнетиках.

2. Результаты и обсуждение. В зонной структуре поверхности (0001) планарных АФМ ТИ присутствует бесщелевое состояние (конус Дирака), точка Дирака которого смещена из точки $\bar{\Gamma}$ в направлении, перпендикулярном направлению намагниченности [17] аналогично другим магнитным системам на основе ТИ с намагниченностью в плоскости поверхности [3, 32, 57, 58]. Было показано, что для таких систем смещение точки Дирака приближенно описывается выражением [17]:

$$\Delta k = j \frac{M_0}{v}, \quad (1)$$

где j – энергия обменного взаимодействия, M_0 – намагниченность поверхности, v – групповая скорость электронов в точке Дирака. Протяженность плоской зоны, которая формируется при наличии

магнитной неоднородности в виде доменной стенки [17, 43, 44], составляет $2\Delta k$. В данной работе мы рассмотрели один из возможных вариантов увеличения Δk , а именно, путем варьирования групповой скорости электронов в точке Дирака v при фиксированной величине намагниченности M_0 . Такой вариант позволяет получить более “тонкую настройку” электронной структуры и может быть реализован с помощью конструирования магнитных гетероструктур в виде ультратонкой магнитной пленки на подложке ТИ. В таком подходе для гетероструктур с одинаковым типом магнитной пленки намагниченность M_0 поверхностных семислойных блоков, а также энергия обменного взаимодействия j будут одинаковыми, поскольку эти величины в основном будут определяться магнитной пленкой. Кроме того, дополнительным фактором, влияющим на величину смещения, является степень локализации топологического состояния в магнитной пленке.

В качестве материала для тонкой магнитной пленки были выбраны фрагменты недавно предсказанных тетрадимитоподобных межплоскостных планарных антиферромагнетиков VBi_2Se_4 (тривиальный изолятор) и VBi_2Te_4 (АФМ ТИ) (магнитные моменты на атомах V лежат в плоскости (0001), рис. 1а) [17]. Ультратонкие пленки этих соединений, состоящие из одного структурного блока толщиной семь атомных слоев (*septuple layer*, SL), являются двумерными ферромагнетиками, поскольку содержат только один атомный слой ванадия, и обладают полупроводниковой зонной структурой (рис. 1b, c). В качестве подложек для VBi_2Se_4 были выбраны тетрадимитоподобные ТИ Bi_2Se_3 и PbBi_2Se_4 , а для VBi_2Te_4 – Bi_2Te_3 , PbBi_2Te_4 , SnBi_2Te_4 и GeBi_2Te_4 (рис. 1d). Выбор материалов подложек

Таблица 1. Соотношение параметров решетки a_i , энергетических щелей ΔE_i и работ выхода Φ_i для свободного магнитного семислойника ($i = 1$) и подложки ($i = 2$), а также смещения точки Дирака Δk и значения групповой скорости v в точке Дирака для соответствующих гетероструктур

Гетероструктура	a_1/a_2 (Å)	$\Delta E_1/\Delta E_2$ (эВ)	Φ_1/Φ_2 (эВ)	$\Delta k \cdot 10^{-3}$ (Å ⁻¹)	v (эВ · Å)
VBi ₂ Te ₄ (поверхность)	—	—	—	3.38	1.92
VBi ₂ Te ₄ /GeBi ₂ Te ₄	4.338 / 4.323	0.34 / 0.15	5.00 / 4.70	2.20	1.76
VBi ₂ Te ₄ /SnBi ₂ Te ₄	4.338 / 4.395	0.34 / 0.02	5.00 / 4.76	4.00	1.73
VBi ₂ Te ₄ /Bi ₂ Te ₃	4.338 / 4.384	0.34 / 0.08	5.00 / 5.05	5.18	1.68
VBi ₂ Te ₄ /PbBi ₂ Te ₄	4.338 / 4.452	0.34 / 0.12	5.00 / 5.04	5.43	1.69
VBi ₂ Se ₄ (поверхность)	—	—	—	—	—
VBi ₂ Se ₄ /Bi ₂ Se ₃	4.078 / 4.114	0.67 / 0.31	5.62 / 5.42	5.34	2.16
VBi ₂ Se ₄ /PbBi ₂ Se ₄	4.078 / 4.160	0.67 / 0.32	5.62 / 5.37	5.64	2.12

обусловлен изоструктурностью подложки и VBi₂Se₄ или VBi₂Te₄, близостью значений параметров решетки и необходимым сочетанием работ выхода, входящих в гетероструктуру компонент (см. табл. 1) [56, 59].

Как видно из рис. 2, в энергетических спектрах чистых подложек присутствует характерное для ТИ бесщелевое поверхностное состояние (конус Дирака). Осаждение магнитного V-содержащего SL на поверхность ТИ приводит к модификации формы конуса за счет смещения точки Дирака как по энергии, так и в k -пространстве. В исследуемых гетероструктурах точка Дирака смещается по энергии вверх, что обусловлено соотношениями работ выхода и энергетических щелей V-содержащего SL и подложки (см. схемы на рис. 2 и табл. 1) – аналогично тому, как это было показано для немагнитных гетероструктур на основе ТИ [59]. В случае гетероструктур VBi₂Te₄/Bi₂Te₃, VBi₂Te₄/PbBi₂Te₄ и VBi₂Te₄/GeBi₂Te₄ энергетические щели магнитной пленки и подложки частично перекрыты. В остальных гетероструктурах объемная щель подложки полностью встраивается в соответствующую щель магнитной пленки. Подобное сочетание энергетических щелей обеспечивает значительную гибридизацию поверхностного состояния подложки с состояниями ванадий-содержащей магнитной пленкой, что приводит к смещению точки Дирака вверх по энергии [59]. Одновременно с этим наличие магнетизма индуцирует дополнительный сдвиг точки Дирака из центра двумерной зоны Бриллюэна (точки $\bar{\Gamma}$) в направлении, перпендикулярном намагниченности поверхности, на величину Δk (см. табл. 1).

Как видно из рис. 2 и табл. 1, для рассмотренных гетероструктур смещение точки Дирака из точки $\bar{\Gamma}$ подчиняется описанной выше зависимости: при уменьшении скорости Дирака v смещение точки Дирака Δk возрастает. Более того, можно заметить,

что в спектрах гетероструктур VBi₂Te₄/PbBi₂Te₄, VBi₂Te₄/Bi₂Te₃ и VBi₂Te₄/SnBi₂Te₄ полученное значение Δk больше, чем в спектре поверхности АФМ ТИ VBi₂Te₄. Дополнительной причиной такого эффекта может являться то, что в рассматриваемых гетероструктурах намагничен только поверхностный V-содержащий SL. В VBi₂Te₄, напротив, намагничен каждый SL, причем соседние SL упорядочены антиферромагнитно. Несмотря на то, что поверхностное состояние преимущественно локализовано в поверхностном SL, его волновая функция проникает и в более глубокий (приповерхностный) SL. Это приводит к тому, что в рассматриваемых гетероструктурах обменное взаимодействие с поверхностным состоянием сильнее, чем в VBi₂Te₄, поскольку не ослабляется антиферромагнитным межслоевым упорядочением. При этом величина Δk также зависит от степени локализации топологического состояния во внешнем магнитном блоке. Как видно из рис. 2, максимальное смещение среди рассмотренных гетероструктур с магнитной пленкой VBi₂Te₄ реализуется в VBi₂Te₄/PbBi₂Te₄, а минимальное – в VBi₂Te₄/GeBi₂Te₄. При этом полученные значения смещений Δk по величине сравнимы с экспериментально наблюдаемыми значениями протяженности плоских зон для систем на основе графена [60–64], что делает их потенциальными кандидатами для экспериментальных исследований плоских зон в планарных топологических магнетиках.

3. Заключение. В данной работе в рамках первопринципных методов расчета электронной структуры мы продемонстрировали возможность управления положением точки Дирака в гетероструктурах типа магнитного продолжения ТИ, состоящих из тонкой ванадий-содержащей магнитной пленки и подложки немагнитного ТИ. Показано, что смещение точки Дирака из центра зоны Бриллюэна, вызванное намагниченностью лежащей в плоскости (и,

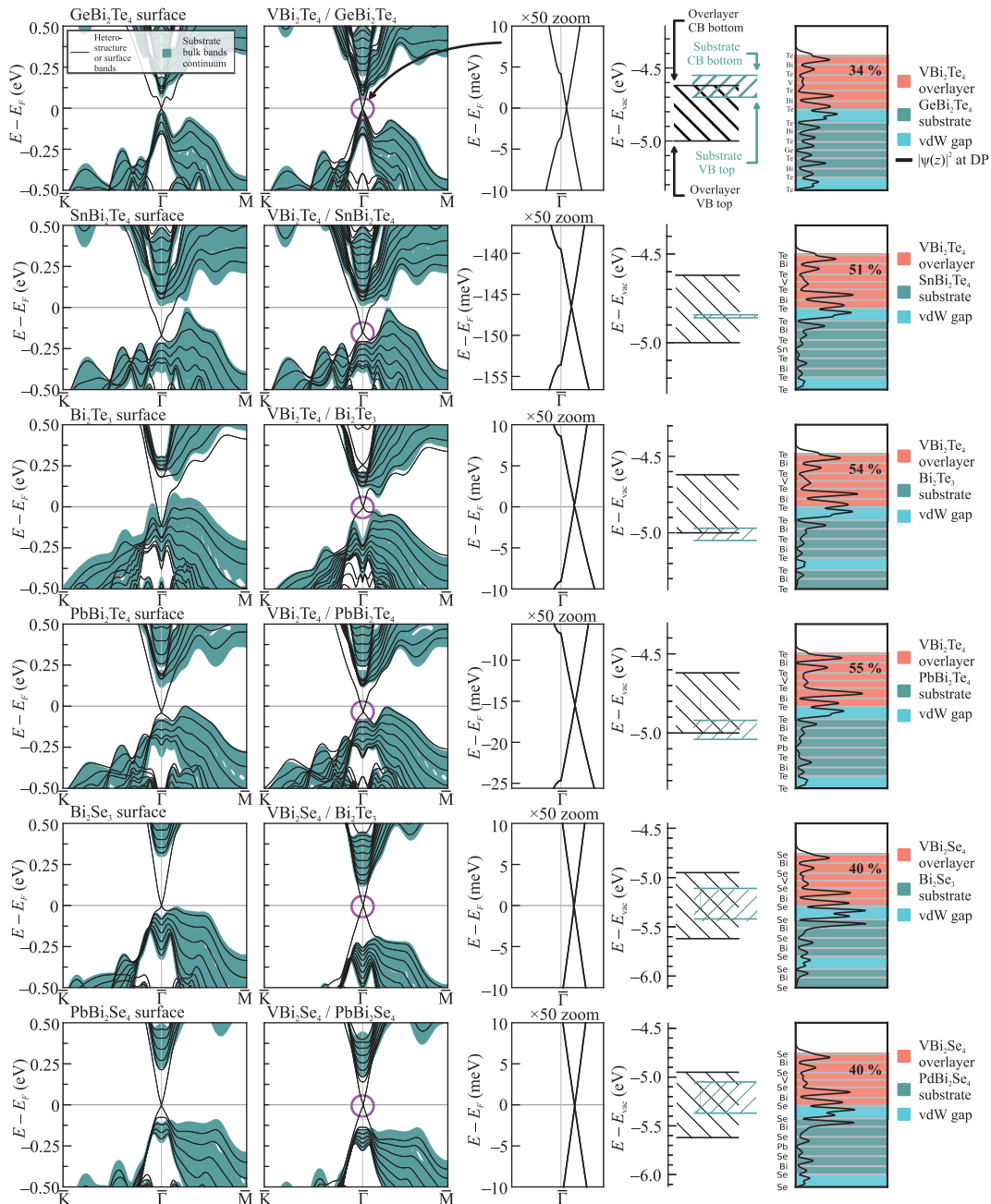


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зонные структуры рассмотренных гетероструктур вблизи уровня Ферми. Для каждой из рассмотренных гетероструктур показаны (слева направо): зонная структура поверхности подложки; зонная структура гетероструктуры; зонная структура гетероструктуры в окрестности точки Дирака (DP); схематичное положение энергетических щелей (дна зоны проводимости (conduction band, CB) и потолка валентной зоны (valence band, VB) тонкой пленки и подложки относительно друг друга; распределение парциальной зарядовой плотности в точке Дирака поверхностного состояния по глубине (для гетероструктуры), также показана доля (в %) зарядовой плотности в магнитном семислойном блоке

соответственно, протяженность плоской зоны на доменных стенках) существенным образом зависит от групповой скорости электронов в точке Дирака, а также степени локализации топологического состо-

яния в поверхностном блоке. Обнаруженные особенности и сделанные предсказания могут явиться стимулом для дальнейшего выращивания таких материалов. Рассмотренные в работе гетероструктуры яв-

ляются перспективными кандидатами для выращивания и проведения экспериментальных исследований по наблюдению плоских зон на доменных стенках в планарных топологических магнетиках.

4. Методы расчета. Расчеты проведены с использованием метода проекционных плоских волн (PAW) [65], реализованного в программном пакете VASP [66–68]. Обменно-корреляционные эффекты были учтены в рамках обобщенного градиентного приближения в форме PBE [69]. Для корректного описания ван-дер-ваальсовского взаимодействия использовался метод DFT-D3 [70]. Состояния $3d$ оболочек V были описаны с использованием подхода GGA + U [71] в рамках схемы Дударева [72]. Значения параметра U были рассчитаны методом линейного отклика [73] и составили 4.8 и 4.7 эВ для гетероструктур с VBi_2Se_4 и VBi_2Te_4 соответственно.

Исследуемые гетероструктуры симулировались в модели повторяющихся пленок с вакуумными промежутками 12 Å. Гетероструктуры состояли из подложки ТИ толщиной 45 (для гетероструктур с Bi_2Se_3 и Bi_2Te_3) или 49 (для гетероструктур с $PbBi_2Se_4$, $PbBi_2Te_4$, $GeBi_2Te_4$, $SnBi_2Te_4$) атомных слоев и двух семислойных блоков (SL) VBi_2Se_4 или VBi_2Te_4 (по одному на каждой из поверхностей подложки). Межплоскостные расстояния были оптимизированы таким образом, чтобы действующие на атомы силы не превышали 10^{-2} эВ/Å.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках госзадания # FSWM-2020-0033.

Расчеты проведены с использованием оборудования ресурсного центра Научного парка СПбГУ “Вычислительный центр”.

1. R. Yu, W. Zhang, H.-J. Zhang, S.-C. Zhang, X. Dai, and Z. Fang, *Science* **329**, 61 (2010).
2. C.-Z. Chang, J. Zhang, X. Feng, J. Shen, Z. Zhang, M. Guo, K. Li, Y. Ou, P. Wei, L.-L. Wang, Z.-Q. Ji, Y. Feng, S. Ji, X. Chen, J. Jia, X. Dai, Z. Fang, S.-C. Zhang, K. He, Y. Wang, L. Lu, X.-C. Ma, and Q.-K. Xue, *Science* **340**, 167 (2013).
3. T. Hirahara, S.V. Ereemeev, T. Shirasawa et al. (Collaboration), *Nano Lett.* **17**, 3493 (2017).
4. M. M. Otrokov, T. V. Menshchikova, M. G. Vergniory, I. P. Rusinov, A. Yu. Vyazovskaya, Y. M. Koroteev, G. Bihlmayer, A. Ernst, P. M. Echenique, A. Arnau, and E. V. Chulkov, *2D Materials* **4**, 025082 (2017).
5. M. M. Otrokov, I. P. Rusinov, M. Blanco-Rey, M. Hoffmann, A. Y. Vyazovskaya, S. V. Ereemeev, A. Ernst, P. M. Echenique, A. Arnau, and E. V. Chulkov, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 107202 (2019).
6. Y. Deng, Y. Yu, M. Z. Shi, Z. Guo, Z. Xu, J. Wang, X. H. Chen, and Y. Zhang, *Science* **67**, 895 (2020).
7. H. Deng, Z. Chen, A. Wołoś, M. Konczykowski, K. Sobczak, J. Sitnicka, I. V. Fedorchenko, J. Borysiuk, T. Heider, L. Pluciński, K. Park, A. B. Georgescu, J. Cano, and L. Krusin-Elbaum, *Nature Physics* **17**, 36 (2021).
8. V. N. Men'shov, I. Shvets, and E. V. Chulkov, *JETP Lett.* **110**(12), 771 (2019).
9. E. K. Petrov, I. V. Silkin, T. V. Menshchikova, and E. V. Chulkov, *JETP Lett.* **109**, 121 (2019).
10. J. Wang, B. Lian, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, *Phys. Rev. B* **92**, 081107 (2015).
11. D. Zhang, M. Shi, T. Zhu, D. Xing, H. Zhang, and J. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 206401 (2019).
12. M. M. Otrokov, I. I. Klimovskikh, H. Bentmann et al. (Collaboration), *Nature* **576**, 416 (2019).
13. R. S. K. Mong, A. M. Essin, and J. E. Moore, *Phys. Rev. B* **81**, 245209 (2010).
14. C. Liu, Y. Wang, H. Li, Y. Wu, Y. Li, J. Li, K. He, Y. Xu, J. Zhang, and Y. Wang, *Nat. Mater.* **19**, 522 (2020).
15. J. Wang, B. Lian, and S.-C. Zhang, *Phys. Rev. B* **93**, 045115 (2016).
16. S. V. Ereemeev, I. P. Rusinov, Y. M. Koroteev, A. Y. Vyazovskaya, M. Hoffmann, P. M. Echenique, A. Ernst, M. M. Otrokov, and E. V. Chulkov, *J. Phys. Chem. Lett.* **12**, 4268 (2021).
17. E. K. Petrov, V. N. Men'shov, I. P. Rusinov, M. Hoffmann, A. Ernst, M. M. Otrokov, V. K. Dugaev, T. V. Menshchikova, and E. V. Chulkov, *Phys. Rev. B* **103**, 235142 (2021).
18. J. Ge, Y. Liu, J. Li, H. Li, T. Luo, Y. Wu, Y. Xu, and J. Wang, *National Science Review* **7**, 1280 (2020).
19. Y. Gong, J. Guo, J. Li et al. (Collaboration), *Chin. Phys. Lett.* **36**, 076801 (2019).
20. A. M. Shikin, D. A. Estyunin, I. I. Klimovskikh et al. (Collaboration), *Sci. Rep.* **10**, 13226 (2020).
21. B. Li, J.-Q. Yan, D. M. Pajerowski, E. Gordon, A.-M. Nedić, Y. Sizyuk, L. Ke, P. P. Orth, D. Vaknin, and R. J. McQueeney, *Phys. Rev. Lett.* **124**, 167204 (2020).
22. D. A. Estyunin, I. I. Klimovskikh, A. M. Shikin, E. F. Schwier, M. M. Otrokov, A. Kimura, S. Kumar, S. O. Filnov, Z. S. Aliev, M. B. Babanly, and E. V. Chulkov, *APL Mater.* **8**, 021105 (2020).
23. R. C. Vidal, H. Bentmann, T. R. F. Peixoto et al. (Collaboration), *Phys. Rev. B* **100**, 121104 (2019).
24. J.-Q. Yan, Q. Zhang, T. Heitmann, Z. Huang, K. Y. Chen, J.-G. Cheng, W. Wu, D. Vaknin, B. C. Sales, and R. J. McQueeney, *Physical Review Materials* **3**, 064202 (2019).
25. S. H. Lee, Y. Zhu, Y. Wang, L. Miao, T. Pillsbury, H. Yi, S. Kempinger, J. Hu, C. A. Heikes, P. Quarterman,

- W. Ratchiff, J. A. Borchers, H. Zhang, X. Ke, D. Graf, N. Alem, C.-Z. Chang, N. Samarth, and Z. Mao, *Physical Review Research* **1**, 012011 (2019).
26. P. M. Sass, W. Ge, J. Yan, D. Obeysekera, J. J. Yang, and W. Wu, *Nano Lett.* **20**, 2609 (2020).
27. K. F. Garrity, S. Chowdhury, and F. M. Tavazza, *Physical Review Materials* **5**, 024207 (2021).
28. P. Swatek, Y. Wu, L.-L. Wang, K. Lee, B. Schrunk, J. Yan, and A. Kaminski, *Phys. Rev. B* **101**, 161109 (2020).
29. P. M. Sass, J. Kim, D. Vanderbilt, J. Yan, and W. Wu, *Phys. Rev. Lett.* **125**, 037201 (2020).
30. A. Zeugner, F. Nietschke, A. U. B. Wolter et al. (Collaboration), *Chem. Mater.* **31**, 2795 (2019).
31. H. Li, S.-Y. Gao, S.-F. Duan et al. (Collaboration), *Phys. Rev. X* **9**, (2019).
32. Y.-J. Hao, P. Liu, Y. Feng et al. (Collaboration), *Phys. Rev. X* **9**, 041038 (2019).
33. Y. J. Chen, L. X. Xu, J. H. Li et al. (Collaboration), *Phys. Rev. X* **9**, 041040 (2019).
34. B. Lian, Z. Liu, Y. Zhang, and J. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **124**, 126402 (2020).
35. T. Hirahara, M. M. Otrokov, T. T. Sasaki et al. (Collaboration), *Nat. Commun.* **11**, 4821 (2020).
36. E. D. L. Rienks, S. Wimmer, J. Sánchez-Barriga et al. (Collaboration), *Nature* **576**, 423 (2019).
37. Z. S. Aliev, I. R. Amiraslanov, D. I. Nasonova, A. V. Shevelkov, N. A. Abdullayev, Z. A. Jahangirli, E. N. Orujlu, M. M. Otrokov, N. T. Mamedov, M. B. Babanly, and E. V. Chulkov, *J. Alloys Compd.* **789**, 443 (2019).
38. C. Hu, K. N. Gordon, P. Liu et al. (Collaboration), *Nat. Commun.* **11**, 97 (2020).
39. Y. Gao, K. Liu, and Z.-Y. Lu, *Physical Review Research* **4**, 023030 (2022).
40. C. Hu, L. Ding, K. N. Gordon et al. (Collaboration), *Sci. Adv.* **6**, eaba4275 (2020).
41. K. Yasuda, M. Mogi, R. Yoshimi, A. Tsukazaki, K. S. Takahashi, M. Kawasaki, F. Kagawa, and Y. Tokura, *Science* **358**, 1311 (2017).
42. I. T. Rosen, E. J. Fox, X. Kou, L. Pan, K. L. Wang, and D. Goldhaber-Gordon, *Quantum Mater.* **2**, 69 (2017).
43. I. P. Rusinov, V. N. Men'shov, and E. V. Chulkov, *Phys. Rev. B* **104**, 035411 (2021).
44. V. N. Men'shov, I. P. Rusinov, and E. V. Chulkov, *JETP Lett.* **114**, 699 (2021).
45. K. Kim, A. DaSilva, S. Huang, B. Fallahzad, S. Larentis, T. Taniguchi, K. Watanabe, B. J. LeRoy, A. H. MacDonald, and E. Tutuc, *Proceedings of the National Academy of Sciences* **114**(13), 3364 (2017).
46. A. L. Sharpe, E. J. Fox, A. W. Barnard, J. Finney, K. Watanabe, T. Taniguchi, M. Kastner, and D. Goldhaber-Gordon, *Science* **365**(6453), 605 (2019).
47. H. Yoo, R. Engelke, S. Carr et al. (Collaboration), *Nat. Mater.* **18**(5), 448 (2019).
48. T. Wolf, J. L. Lado, G. Blatter, and O. Zilberberg, *Phys. Rev. Lett.* **123**(9), 096802 (2019).
49. X. Lu, P. Stepanov, W. Yang, M. Xie, M. A. Aamir, I. Das, C. Urgell, K. Watanabe, T. Taniguchi, G. Zhang, A. Bachtold, A. H. MacDonald, and D. K. Efetov, *Nature* **574**, 653 (2019).
50. Y. Cao, V. Fatemi, A. Demir, S. Fang, S. L. Tomarken, J. Y. Luo, J. D. Sanchez-Yamagishi, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Kaxiras, R. C. Ashoori, and P. Jarillo-Herrero, *Nature* **556**, 80 (2018).
51. M. Yankowitz, S. Chen, H. Polshyn, Y. Zhang, K. Watanabe, T. Taniguchi, D. Graf, A. F. Young, and C. R. Dean, *Science* **363**, 1059 (2019).
52. Y. Cao, V. Fatemi, S. Fang, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Kaxiras, and P. Jarillo-Herrero, *Nature* **556**, 43 (2018).
53. L. Fu and C. L. Kane, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 096407 (2008).
54. V. S. Stolyarov, S. Pons, S. Vlaic, S. V. Remizov, D. S. Shapiro, C. Brun, S. I. Bozhko, T. Cren, T. V. Menshchikova, E. V. Chulkov, W. V. Pogosov, Y. E. Lozovik, and D. Roditchev, *J. Phys. Chem. Lett.* **12**, 9068 (2021).
55. A. Kudriashov, I. Babich, R. A. Hovhannisyan, A. G. Shishkin, S. N. Kozlov, A. Fedorov, D. V. Vyalikh, E. Khestanova, M. Y. Kupriyanov, and V. S. Stolyarov, *Adv. Funct. Mater.* **32**, 2209853 (2022).
56. M. M. Otrokov, T. V. Menshchikova, I. P. Rusinov, M. G. Vergniory, V. M. Kuznetsov, and E. V. Chulkov, *JETP Lett.* **105**, 297 (2017).
57. J. Henk, M. Flieger, I. V. Maznichenko, I. Mertig, A. Ernst, S. V. Eremeev, and E. V. Chulkov, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 076801 (2012).
58. L.-X. Wang, Y. Yan, L. Zhang, Z.-M. Liao, H.-C. Wu, and D.-P. Yu, *Nanoscale* **7**(40), 16687 (2015).
59. T. V. Menshchikova, M. M. Otrokov, S. S. Tsirkin, D. A. Samorokov, V. V. Bebnava, A. Ernst, V. M. Kuznetsov, and E. V. Chulkov, *Nano Lett.* **13**, 6064 (2013).
60. S. Lisi, X. Lu, T. Benschop et al. (Collaboration), *Nature Phys.* **17**(2), 189 (2021).
61. M. I. B. Utama, R. J. Koch, K. Lee et al. (Collaboration), *Nature Phys.* **17**(2), 184 (2021).
62. D. Pierucci, H. Sediri, M. Hajlaoui, J.-C. Girard, T. Brumme, M. Calandra, E. Velez-Fort, G. Patriarche, M. G. Silly, G. Ferro, V. Soulière, M. Marangolo, F. Sirotti, F. Mauri, and A. Ouerghi, *ACS Nano* **9**(5), 5432 (2015).
63. D. Marchenko, D. Evtushinsky, E. Golias, A. Varykhalov, T. Seyller, and O. Rader, *Sci. Adv.* **4**(11), eaau0059 (2018).
64. H. Henck, J. Avila, Z. Ben Aziza et al. (Collaboration), *Phys. Rev. B* **97**, 245421 (2018).

65. P. E. Blöchl, Phys. Rev. B **50**(24), 17953 (1994).
66. G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B **47**(1), 558 (1993).
67. G. Kresse and J. Furthmüller, Phys. Rev. B **54**(16), 11169 (1996).
68. G. Kresse and J. Furthmüller, Comput. Mater. Sci. **6**(1), 15 (1996).
69. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. **77**(18), 4 (1996).
70. S. Grimme, J. Antony, S. Ehrlich, and H. Krieg, J. Chem. Phys. **132**(15), 154104 (2010).
71. V. I. Anisimov, J. Zaanen, and O. K. Andersen, Phys. Rev. B **44**(3), 943 (1991).
72. S. Dudarev, G. Botton, S. Savrasov, C. Humphreys, and A. Sutton, Phys. Rev. B **57**(3), 1505 (1998).
73. M. Cococcioni and S. De Gironcoli, Phys. Rev. B **71**(3), 035105 (2005).