

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОСВЯЗИ ТОПОЛОГИЧЕСКОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА, АКСИОНО-ПОДОБНОГО СОСТОЯНИЯ И МАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА В АНТИФЕРРОМАГНИТНОМ ТОПОЛОГИЧЕСКОМ ИЗОЛЯТОРЕ MnBi_2Te_4

А. М. Шикин ^{a*}, Т. П. Естюнина ^a, А. В. Ерыженков ^a, Н. Л. Зайцев ^b, А. В. Тарасов ^a

^a Санкт-Петербургский государственный университет
198504, Санкт-Петербург, Россия

^b Институт физики молекул и кристаллов
Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук
450075, Уфа, Россия

Поступила в редакцию 14 ноября 2023 г.,
после переработки 4 декабря 2023 г.
Принята к публикации 4 декабря 2023 г.

Методом теории функционала плотности проведены расчеты, показывающие возможность реализации топологического фазового перехода (ТФП) из топологического в тривиальное состояние и связи данного перехода с формированием аксионо-подобного состояния в антиферромагнитном топологическом изоляторе MnBi_2Te_4 путем анализа измененной электронной и спиновой структур топологических поверхностных состояний (ТПС) и величины энергетической запрещенной зоны (ЭЗЗ) в точке Дирака при вариации величины спин-орбитального взаимодействия. Анализ показал, что данный ТФП соответствует минимуму ЭЗЗ, открываемой в точке Дирака, и характеризуется инверсией p_z^- -состояний Те и p_z^+ -состояний Вi с различной четностью на краях формируемой ЭЗЗ, что соответствует изменению знака ЭЗЗ области ТФП между топологической и тривиальной фазами. В точке перехода имеют место инверсия внеплоскостной спиновой поляризации для состояний нижней и верхней частей конуса Дирака и пространственное перераспределение состояний, формирующих ТПС между поверхностью и объемом. При этом ТФП происходит без полного закрытия ЭЗЗ с «перескоком» через нуль и образованием ненулевой ЭЗЗ, что мы связываем с образованием аксионо-подобного состояния, которое обусловлено нетривиальной взаимосвязью немагнитного (спин-орбитального) и магнитного взаимодействий на границе между топологической и тривиальной фазами для системы с параметрами, близкими к ТФП. Предложено комплексное представление такой взаимосвязи в области ТФП, когда аксионный член изменяется между квантованными значениями π и 0, характерными для топологической и тривиальной фаз, что приводит к их взаимосвязи в области ТФП и определяет ненулевую ЭЗЗ в точке Дирака. Приложение электрического поля перпендикулярно поверхности к системе, находящейся в состоянии ТФП, приводит к изменению электронной и спиновой структур и переходу из топологического в тривиальное состояние системы и наоборот при смене направленности приложенного поля и показывает возможность реализации топологического магнитоэлектрического эффекта в области ТФП.

DOI: 10.31857/S0044451024040096

1. ВВЕДЕНИЕ

Одной из наиболее интересных особенностей магнитных аксионных топологических изоляторов (ТИ), наиболее ярким представителем которых является недавно синтезированный антиферромагнитный (АФМ) ТИ MnBi_2Te_4 , является топологический квантовый магнитоэлектрический (МЭ) эф-

* E-mail: ashikin@inbox.ru

факт, реализация которого определяется так называемым аксионным членом θ , который разделяет между собой топологические и тривиальные изоляторы и определяет многие уникальные свойства ТИ (см., например, обзоры [1–5]). Первоначально понятие аксиона (и аксионного поля) пришло в физику конденсированного состояния [1–12] из физики элементарных частиц и топологической теории поля [13, 14] для описания МЭ-отклика (статического и динамического) на внешнее электромагнитное воздействие посредством введения в лагранжиан системы дополнительного аксионного члена

$$S_\theta = \frac{\theta}{2\pi} \frac{e^2}{\hbar c} \int d^3x dt \mathbf{E} \cdot \mathbf{B},$$

определяемого псевдоскалярным полем θ , величина которого может варьироваться в зависимости от типа симметрии системы [1–5]. Здесь

$$\frac{e^2}{\hbar c} = \alpha$$

— постоянная тонкой структуры, \mathbf{E} и \mathbf{B} — электрическое и магнитное поля. При наличии симметрии обращения времени и пространственной симметрии аксионный член θ принимает квантованное значение $\theta = \pi$ для топологических сред и $\theta = 0$ в тривиальных средах [1–5], тем самым вводя различие в МЭ-отклике между топологической и тривиальной средой и обуславливая квантованность МЭ-эффекта, а также возможность реализации квантового аномального эффекта Холла в магнитных ТИ. На границе между топологической и тривиальной средами (вакуум рассматривается как тривиальный изолятор) θ изменяется в пределах от π в ТИ и до 0 в вакууме. С другой стороны, в настоящее время понятие аксиона (α) рассматривается более широко, в том числе как результат взаимодействия фермиона и антифермиона противоположной хиральности [15]

$$f + f^* \rightarrow \alpha,$$

что сопровождается открытием запрещенной зоны в формируемых дисперсионных соотношениях (т. е. появлением массы) при таких взаимодействиях, в основном между топологической и тривиальной фазами. Или же понятие аксиона можно рассматривать как результат взаимодействия обычного и виртуального (темного) фотона ($\gamma + \gamma^* \rightarrow \alpha$) — представителей безмассовых фермионов, с нарушением симметрии обращения времени и четности, что и обуславливает формирование массы аксиона и тем самым определяет значительный интерес к пробле-

ме аксиона в космологии, астрофизике и теории суперструн [15–18]. При этом аксион как гипотетическая частица (с малой массой) является также возможным компонентом во взаимодействии с темной материей [17, 18]. При этом во многих моделях для описания аксионного поля вводится комплексное поле $\Phi = \chi e^{i\theta}$, которое характеризуется ненулевым средним вакуумным значением (аксионным потенциалом), зависящим от киральной симметрии системы. В физике конденсированного состояния понятие аксиона было введено именно на основании подобия МЭ-отклика в ТИ при внешнем электромагнитном воздействии.

При этом на основании этих корреляций в физике конденсированного состояния было введено понятие аксионного изолятора как магнитного ТИ, характеризующегося противоположной внеплоскостной (out-of-plane) спиновой ориентацией (перпендикулярно поверхности ТИ) на противоположных поверхностях. Именно такого типа аксионный изолятор характеризуется квантованным топологическим МЭ-откликом (пропорциональным $\pm(1/2)e^2/\hbar c$) и соответствующим квантованным значением поверхностной проводимости, что определяется квантованной величиной аксионного члена $\theta/2\pi$ (при $\theta = \pi$) в соответствующем выражении для лагранжиана [3, 4, 6–12, 19–22]. В этом случае именно изменение θ на π на границе топологической и тривиальной сред (т. е. на θ -границе) обеспечивает реализацию топологического квантованного МЭ-эффекта и квантового полуполого эффекта Холла на данной θ -границе, т. е. на поверхности такого аксионного изолятора.

Первоначально идея аксионного изолятора интенсивно развивалась в работах [19–22], где аксионный изолятор строился на базе слоистой топологической структуры, в которой слои Cr- и V-допированных магнитных ТИ (Bi,Sb)₂Te₃ с различной коэрцитивной силой и противоположной ориентацией магнитных моментов взаимодействовали через слой немагнитного ТИ. Именно для подобного типа аксионного изолятора впервые был продемонстрирован квантовый аномальный эффект Холла с нулевым исходным плато и предполагалась реализация топологического МЭ-эффекта. Однако в последнее время был синтезирован новый тип собственного магнитно-упорядоченного АФМ ТИ с естественной (природной) противоположной ориентацией магнитных моментов в соседних магнитных слоях, который может являться хорошей перспективной платформой [23–32] для реализации аксионо-подобного состояния и его исследования более естественным и оптимальным образом. В на-

стоящее время существует целая серия работ по анализу возможности реализации состояния аксионного изолятора и динамического аксионного эффекта в соединениях на основе MnBi_2Te_4 , а также ТИ из семейства $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)_m(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_n$ и предполагаемых новых соединений типа $\text{Mn}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ или $\text{Mn}_2\text{Bi}_6\text{Te}_{11}$ [8, 10–12], где была показана возможность модуляции АФМ-взаимодействия и величины спин-орбитального (СО) взаимодействия, приводящая к эффективному формированию спиновых АФМ-флуктуаций и соответствующей динамической модуляции аксионного поля $\delta\theta(r, t)$, что подразумевает возможность более детального изучения свойств аксионного состояния в физике конденсированного состояния.

Несмотря на то что эти соединения, включая также аналогичное соединения $\text{Mn}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ [33], характеризуются более сложной структурой (для $\text{Mn}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ и $\text{Mn}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ с двумя слоями атомов Mn в элементарной ячейке [12, 33]), они также являются аксионными АФМ-изоляторами, в которых может реализоваться динамический аксионный эффект, причем, возможно, даже в большей степени [10], вследствие большей концентрации магнитных атомов Mn в элементарной ячейке.

АФМ ТИ MnBi_2Te_4 представляет собой слоистое соединение, состоящее из семислойных блоков (СБ) $\text{Te-Bi-Te-Mn-Te-Bi-Te}$, разделенных вандерваальсовыми промежутками [23–32, 34–37]. При этом атомы Mn в магнитном слое внутри каждого формируемого СБ расположены в одной плоскости и связаны между собой ферромагнитным взаимодействием, а взаимодействие между соседними СБ и соответствующими магнитными Mn-слоями имеет АФМ характер [23–32, 34]. При этом для АФМ ТИ, несмотря на нарушение как симметрии обращения времени, так и пространственной симметрии (и четности), их комбинация в случае послойного АФМ-упорядочения сохраняет топологический инвариант [23–26]. Было показано, что данный АФМ ТИ действительно является аксионным изолятором с противоположной ориентацией магнитных моментов на противоположных поверхностях (при условии четности числа слоев, составляющих систему), где каждая из поверхностей характеризуется вкладом в проводимость, равным половине кванта проводимости, но с противоположным знаком $\pm(1/2)e^2/hc$, тем самым компенсируя друг друга, что является основой квантового аномального эффекта Холла с нулевым исходным плато и необходимым условием для реализации аксионного состояния, а также возможности эффективной реализации динамического акси-

онного поля (эффекта) [1–5, 8–12, 19–22].

Необходимо отметить, что идея аксиона была первоначально введена и исследована в физике конденсированного состояния именно при анализе возможного проявления динамического аксионного эффекта в магнитных ТИ [8–12], т. е. возбуждения динамического аксионного поля под действием электромагнитного излучения (при наличии магнитного поля), которое может быть зарегистрировано экспериментально путем возбуждения аксионного поляритона [8]. При этом было введено понятие статической (θ_0) и динамической ($\delta\theta$) частей аксионного члена (аксионного поля): $\theta(r, t) = \theta_0 + \delta\theta(r, t)$. Статическая часть может рассматриваться как безразмерный псевдоскалярный параметр (или псевдоскалярное аксионное поле). Динамическая часть, зависящая от времени, обусловлена изменением θ , создаваемым внешним воздействием (внешним электромагнитным полем в сочетании с приложенным магнитным полем, нарушающим симметрию обращения времени), что и приводит к модуляции величины θ по отношению к $\theta_0(r) = \pi$ [1, 4, 8–12]. В результате проведенных исследований было показано, что максимально эффективная реализация динамического аксионного эффекта может быть достигнута, когда система характеризуется минимальной величиной энергетической запрещенной зоны (ЭЗЗ), определяемой в первую очередь изменением величины СО-взаимодействия, и находится по параметрам в области топологического фазового перехода (ТФП) от топологического к тривиальному состоянию, когда θ изменяется от π до 0. При этом в точке ТФП величина ЭЗЗ проходит через минимум с инверсией состояний с различной четностью на краях ЭЗЗ, т. е. с изменением знака формируемой ЭЗЗ [1–4, 8–12].

Исходя из представлений об аксионе (или аксионо-подобном состоянии), отмеченных выше, как результата взаимодействия двух дираковских фермионов с линейной дисперсией противоположной хиральности, $f + f^* \rightarrow \alpha$, мы будем искать и анализировать аксионо-подобное состояние, реализуемое в АФМ ТИ MnBi_2Te_4 , путем анализа изменений электронной и спиновой структур топологических поверхностных состояний (ТПС) как состояний с исходной линейной дисперсией в области ТФП от топологического к тривиальному состоянию (т. е. при изменении $\theta = \pi \rightarrow 0$) и изменений величины ЭЗЗ в точке Дирака (при модуляции величины СО-взаимодействия), обусловленных взаимосвязью (как будет показано ниже) немагнитных (СО) и магнитных взаимодействий на θ -границе

между топологической и тривиальной фазами. Анализ будет проводиться на основе расчетов электронной и спиновой структур методом теории функционала плотности в слэбе (пластине образца) различной толщины при модуляции величины СО-взаимодействия λ_{SOC} в области ТФП, когда величина ЭЗЗ в точке Дирака достигает минимума, а сама ЭЗЗ изменяет свой знак (вследствие инверсии состояний с различной четностью (p_z^+ -состояний Bi и p_z^- -состояний Te)) при переходе системы из топологического состояния в тривиальное.

Особое внимание будет уделяться исследованию условий достижения минимума ЭЗЗ в точке Дирака, инверсии вкладов состояний на краях формируемой дираковской ЭЗЗ и изменений спиновой структуры в точке минимума ЭЗЗ, а также анализу параметров, которые могут влиять на величину ЭЗЗ в области ее минимального значения при модификации величины λ_{SOC} . В конце работы будут приведены результаты расчетов влияния электрического поля противоположной направленности, приложенного перпендикулярно поверхности, и возможности стимулированного полем управляемого перехода между топологическим и тривиальным состояниями системы.

2. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В предыдущих публикациях, посвященных изучению электронной структуры $MnBi_2Te_4$, было показано, что для различных образцов данного ТИ возможно формирование как большой ЭЗЗ в точке Дирака (80–90 мэВ из теоретических оценок [23, 25, 26] или 50–60 мэВ из экспериментальных исследований [27–32, 34]), так и малой ЭЗЗ (до 5–10 мэВ и ниже вплоть до бесщелевых дисперсий), открываемой в структуре ТПС [35–37]. При этом было показано, что если модулировать (уменьшать) величину эффективного СО-взаимодействия λ_{SOC} в исходном АФМ ТИ $MnBi_2Te_4$, то это будет приводить к существенному изменению (уменьшению) величины объемной запрещенной зоны в такой модельной системе [25, 26], вплоть до реинверсии p_z^+ -состояний Bi и p_z^- -состояний Te на границах зоны и переходу системы из топологического в тривиальное состояние. При этом точка инверсии данных состояний как раз и соответствует точке ТФП. Аналогичные изменения при вариации λ_{SOC} имеют место (как мы далее покажем) и для ЭЗЗ в структуре ТПС в точке Дирака, см. также [34]. При этом, что важно, именно минимум объемной запрещенной зоны

(как мы отмечали выше), а также дираковской ЭЗЗ (как мы покажем ниже) как раз и соответствует в наибольшей степени условиям реализации аксионоподобного состояния на границе между топологической и тривиальной фазами.

2.1. Влияние модуляции величины СО-взаимодействия в АФМ ТИ $MnBi_2Te_4$ на изменение электронной структуры ТПС и модуляцию величины ЭЗЗ в точке Дирака. Роль топологического фазового перехода

На рис. 1a1 схематически представлена диаграмма изменений энергетического положения уровней, которые формируют валентную зону и зону проводимости (при «включенном» и «выключенном» СО-взаимодействии λ_{SOC}), а также соответствующей инверсии p_z^+ -состояний Bi и p_z^- -состояний Te, которые локализуются на краях формируемой объемной запрещенной зоны. Данная диаграмма позволяет качественно предполагать изменения величины и знака формируемой объемной запрещенной зоны, которые будут иметь место при переходе между топологическим и тривиальным состояниями системы при вариации λ_{SOC} в объеме $MnBi_2Te_4$ (взято из работы [26]). Знаки «+» и «-» соответствуют четности состояний. Показаны энергетические распределения электронных p_z^- -состояний Te и p_z^+ -состояний Bi на краях формируемой запрещенной зоны при «включенном» и «выключенном» СО-взаимодействии во всем объеме кристалла (взято из [26]). Из представленной диаграммы следует, что если уменьшать величину λ_{SOC} в кристалле от значения, характерного для топологической фазы ($\lambda_{SOC} = 1$) до нулевого значения ($\lambda_{SOC} = 0$), то при определенных значениях λ_{SOC} можно достичь точки, характеризующейся минимумом величины запрещенной зоны и инверсией p_z^+ -состояний Bi и p_z^- -состояний Te с различной четностью, формирующих края запрещенной зоны, которая будет соответствовать ТФП между тривиальным и топологическим состояниями системы. В данной работе будут проанализированы более детально соответствующие изменения дисперсионной зависимости ТПС для $MnBi_2Te_4$ при изменении величины λ_{SOC} для слэба различной толщины (от 6 до 24 СБ). На практике возможность изменения величины λ_{SOC} предполагается при замене (полной или частичной) атомов тяжелых металлов (Te, Bi) на атомы более легких элементов (Se, S, Sb). В работах [38–40] анализируются изменения электронной структуры соединений $MnSb_2Te_4$, $MnBiSe_4$ и др., в которых атомы Bi и Te заменяются на ато-

мы Sb и Se. Результаты работ показывают, что эти соединения, ввиду меньшей величины атомного СО-взаимодействия замещающих атомов, действительно находятся ближе к области ТФП и в зависимости от особенностей структурных параметров и приложенного давления могут переходить из фазы АФМ ТИ в тривиальную или ферромагнитную фазу. Более того, в работе [41] показано, что постепенное замещение атомов Те на атомы Se действительно приводит к модуляции величины запрещенной зоны и ТФП в тривиальное состояние для соединений со стехиометрией, близкой к $\text{MnBi}_2\text{Te}_2\text{Se}_2$.

На рис. 1а2–а5 представлены изменения дисперсионной зависимости ТПС (и соответствующие изменения величины ЭЗЗ в точке Дирака), а также ближайших состояний валентной зоны и зоны проводимости для слэба толщиной 18 СБ при вариации λ_{SOC} (относительно исходной величины λ_{SOC} , характерной для MnBi_2Te_4 , принятой за 1) для атомов в рассчитываемом слэбе. Аналогичного типа зависимости изменения величины ЭЗЗ в точке Дирака для толщины рассчитываемого слэба 12 СБ представлены в работе [41], которые различаются достижимой величиной ЭЗЗ в точке Дирака. Представленные результаты показывают, что при уменьшении λ_{SOC} (ниже $\lambda_{\text{SOC}} = 1$) величина ЭЗЗ в точке Дирака также уменьшается и доходит до минимума. После прохождения точки минимума величина дираковской ЭЗЗ опять начинает возрастать. Именно этот минимум в дираковской ЭЗЗ (как мы покажем ниже) соответствует области ТФП между тривиальным и топологическим состояниями системы.

На рис. 1а6–а9 показана более детально дисперсионная зависимость ТПС в точке минимума дираковской ЭЗЗ для всех толщин рассчитываемого слэба (6, 12, 18, 24 СБ), а на рис. 1а10 для сравнения показаны соответствующие изменения величины дираковской ЭЗЗ при вариации λ_{SOC} (как выше, так и ниже области минимальной ЭЗЗ) для всех толщин рассчитываемого слэба. Рассчитанные величины минимальной ЭЗЗ в точке Дирака для различных толщин слэба составляют 19 мэВ для 6 СБ, 9.5 мэВ для 12 СБ, 6.5 мэВ для 18 СБ и 4.2 мэВ для 24 СБ. Цветовая гамма на представленных дисперсиях на рис. 1а1–а5 и 1а6–а9 соответствует разности вкладов p_z^- -состояний Т и p_z^+ -состояний Вi в формируемую электронную структуру. Красный (синий) цвет соответствует преобладанию вклада p_z^- -состояний Те (p_z^+ -состояний Вi). Из анализа представленных вкладов видно, что как ТПС на краях дираковской ЭЗЗ, так и состояния на краях объемной запрещенной зоны пока-

зывают явную инверсию вкладов p_z^- -состояний Те (p_z^+ -состояний Вi) в области точки Г при переходе между топологическим и тривиальными состояниями системы. Такая инверсия, с одной стороны, подтверждает наличие ТФП из топологического в тривиальное состояние (и наоборот) при изменении λ_{SOC} , а с другой стороны, это свидетельствует об инверсии знака ЭЗЗ при ТФП. Тривиальному состоянию системы соответствует ЭЗЗ положительного знака, а топологической фазе – ЭЗЗ отрицательного знака [1, 4, 10–12, 34, 42, 43].

Отмеченные выше изменения величины ЭЗЗ для различных толщин слэба можно было бы попытаться объяснить влиянием корреляционных эффектов между ТПС на краях слэба (эффекты конечных размеров слэба). Хорошо известно, что уменьшение толщины рассчитываемого слэба ниже определенных пределов может приводить к увеличению корреляционных эффектов между состояниями на краях слэба [10, 44, 45]), что может сопровождаться увеличением рассчитанного значения дираковской ЭЗЗ. Но при этом считается, что влияние корреляционных эффектов проявляется в значительной степени для толщин слэба менее 4–6 СБ, и при толщине слэба более 6–12 СБ роль корреляционных эффектов перестает оказывать заметное влияние на изменение электронной структуры. При этом необходимо отметить, что изменения дисперсионной зависимости ТПС наблюдаются только для состояний в области минимума дираковской ЭЗЗ. При этом на другие состояния валентной зоны и зоны проводимости изменение толщины слэба выше 6 СБ практически не сказывается. Здесь следует отметить, что аналогичные расчеты, проведенные нами для немагнитного ТИ Bi_2Te_3 с толщиной рассчитываемого слэба 12 СБ, показывают, что величина ЭЗЗ в точке Дирака для данной системы не превышает величины $2 \cdot 10^{-2}$ мэВ. Таким образом, из данного сравнения можно сделать вывод, что минимальная величина ЭЗЗ для АФМ ТИ MnBi_2Te_4 при прохождении области ТФП имеет явно ненулевое значение и не может быть обусловлена численной погрешностью производимых расчетов.

Таким образом, из изложенного выше можно сделать вывод, что при теоретическом изменении величины λ_{SOC} в АФМ ТИ MnBi_2Te_4 (в слэбе толщиной от 6 до 24 СБ) в системе наблюдается ТФП из топологического в тривиальное состояние с инверсией состояний на краях дираковской ЭЗЗ в точке ТФП. Но при этом переход происходит не с непрерывным уменьшением величины ЭЗЗ до нуля в точке ТФП, а с «перескоком» величины дираковской ЭЗЗ через

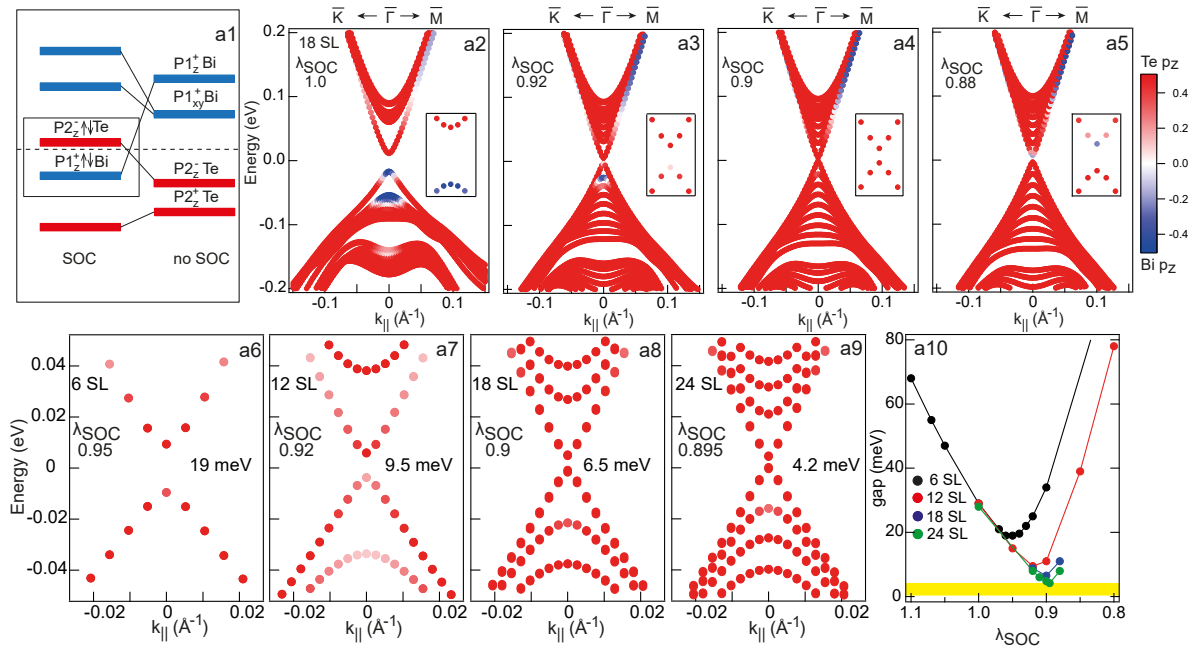


Рис. 1. (В цвете онлайн) Схематическое представление [26] инверсии p_z^+ -состояний Bi и p_z^- -состояний Te при учете и без учета СО-взаимодействия во всем объеме кристалла (a1). Изменения электронной структуры ТПС для слэба толщиной 18 СБ при вариации λ_{SOC} вблизи минимума ЭЗЗ в точке Дирака (a2–a5). Более детальная электронная структура ТПС в точке минимума дираковской ЭЗЗ для толщин рассчитываемого слэба 6, 12, 18, 24 СБ (a6–a9). Соответствующие изменения величины дираковской ЭЗЗ при вариации λ_{SOC} в слэбе как выше, так и ниже области минимальной величины ЭЗЗ для всех толщин рассчитываемого слэба (a10). Цветовая гамма на представленных дисперсиях на рис. a1–a5 соответствует разности вкладов p_z^- -состояний Te и p_z^+ -состояний Bi в формируемую электронную структуру. Красный (синий) цвет соответствует превалированию вклада p_z^- -состояния Te (p_z^+ -состояний Bi)

нуль. В точке ТФП формируется ненулевая ЭЗЗ, величина которой для слэба толщиной 24 СБ составляет 4.2 мэВ. Аппроксимация величины ЭЗЗ в точке Дирака на бесконечные толщины с использованием имеющихся значений для различных толщин слэба дает минимальное значение 3.5 мэВ.

Именно ненулевое значение дираковской ЭЗЗ в точке ТФП мы будем ассоциировать с формированием аксино-подобного состояния на границе между топологической и тривиальной фазами, обусловленного градиентом θ на данной границе и приводящего к взаимосвязи немагнитных (СО) вкладов и магнитных вкладов на θ -границе в точке ТФП (см. далее).

2.2. Модификация спиновой структуры в точке ТФП при вариации величины СО-взаимодействия

На рис. 2 представлены изменения спиновой структуры с ориентацией спина параллельно (in-plane, S_x) и перпендикулярно (out-of-plane, S_z) поверхности, взятые из работы [41], при вариации величины λ_{SOC} в области значений, соответствующих

ТФП выше ($\lambda_{SOC} = 0.95$) и ниже ($\lambda_{SOC} = 0.85$) точки ТФП, а также непосредственно в точке ТФП ($\lambda_{SOC} = 0.92 = \lambda_0$), рассчитанные для слэба толщиной 12 СБ. На рис. 2a1, b1, c1 представлены спиновые проекции S_x , а на рис. 2a2, b2, c2 — соответствующие спиновые проекции S_z . Здесь же на вставках показаны более детально области точки Дирака и соответствующей ЭЗЗ, открывающейся в точке Дирака. В точке ТФП величина дираковской ЭЗЗ минимальна и соответствует для данной толщины слэба значению 9.5 мэВ. Красные и синие символы соответствуют противоположной спиновой ориентации как для S_x -, так и для S_z -компонент. Дисперсионные зависимости на рис. 2a1, a2 соответствуют топологической фазе ($\lambda_{SOC} > \lambda_0$), а на рис. 2c1, c2 — тривиальной фазе ($\lambda_{SOC} < \lambda_0$). Анализ показывает, что во всех случаях S_x -компонента характеризуется геликоидальной структурой (противоположные знаки спиновой ориентации для $+k_{||}$ и $-k_{||}$), симметричной относительно точки Γ ($k_{||} = 0$), что типично для ТИ. Подобный характер спиновой структуры сохраняется как для топологической, так и тривиальной фазы вблизи точки Дирака. При этом S_z -

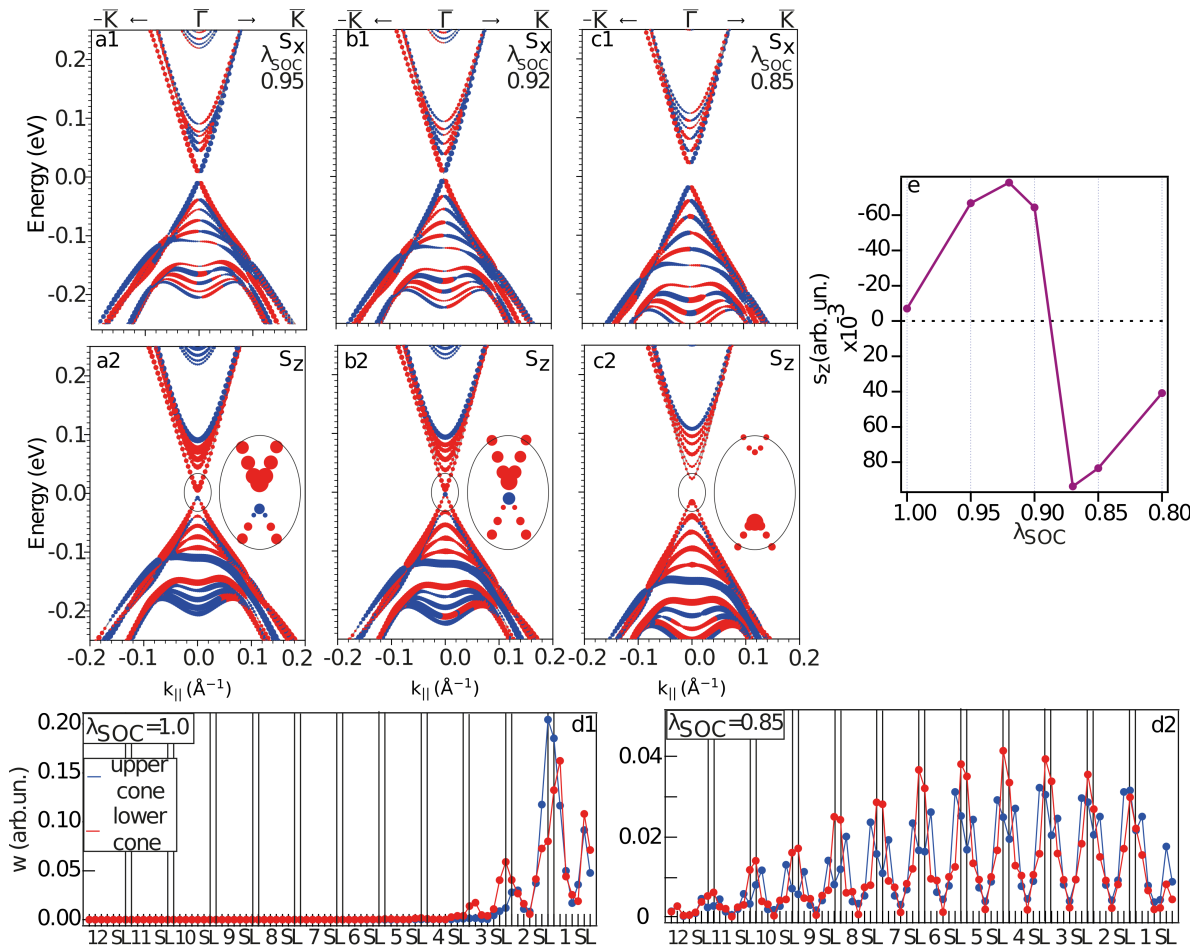


Рис. 2. (В цвете онлайн) Модификация спиновой структуры ТПС для АФМ ТИ MnBi_2Te_4 с ориентацией спина параллельно поверхности (in-plane, S_x) (a1,b1,c1) и перпендикулярно поверхности (out-of-plane, S_z) (a2,b2,c2), рассчитанная для слэба толщиной 12 СБ в области Γ -точки для состояний верхней и нижней частей дираковского конуса (красные и синие точки), при значениях λ_{SOC} в области ТФП для случаев выше точки перехода (a1,a2) при $\lambda_{\text{SOC}} = 0.95$; в точке ТФП (b1, b2) при $\lambda_{\text{SOC}} = 0.92$ и ниже ТФП (c1, c2) при $\lambda_{\text{SOC}} = 0.85$. На вставках показано более детальное представление S_z -спиновой структуры непосредственно в области точки Дирака. (d1,d2) — соответствующие изменения в локализации ТПС относительно поверхности для значений λ_{SOC} выше ($\lambda_{\text{SOC}} = 1.0$) и ниже ($\lambda_{\text{SOC}} = 0.85$) точки ТФП. (e) — изменение величины S_z -поляризации для состояний нижней части дираковского конуса в области ЭЗЗ при вариации λ_{SOC} в области ТФП (из работы [41])

структура характеризуется явной инверсией спиновой ориентации в точке Γ для состояния топологической фазы ($\lambda_{\text{SOC}} > \lambda_0$), рис. 2a1,a2, и отсутствием спиновой инверсии в тривиальном состоянии ($\lambda_{\text{SOC}} < \lambda_0$), рис. 2c1,c2. Данные изменения спиновой S_z -поляризации свидетельствуют о модуляции АФМ-порядка при вариации λ_{SOC} в области ТФП.

На рис. 2d1,d2 показаны изменения локализации ТПС относительно поверхности для значений λ_{SOC} выше ($\lambda_{\text{SOC}} = 1.0$) и ниже ($\lambda_{\text{SOC}} = 0.85$) точки ТФП, рассчитанные для слэба толщиной 12 СБ. Представленные результаты показывают, что для λ_{SOC} выше точки ТФП, когда система находится

в состоянии ТИ, поверхностные ТПС локализованы вблизи поверхности, а для λ_{SOC} ниже точки ТФП, когда система находится в состоянии тривиального изолятора, данные состояния уже распределены по всему объему. Их локализация в этом случае соответствует локализации объемных состояний. Эти изменения также соответствуют переходу системы из топологического в тривиальное состояние.

На рис. 2e представлены изменения величины спиновой S_z -поляризации для состояний нижней части дираковского конуса в области ЭЗЗ (синие точки на рис. 2b2) при изменении λ_{SOC} в области ТФП, которые показывают, что максимальная степень S_z -

поляризации достигается именно в области ТФП (при подходе со стороны топологического состояния). Данный результат свидетельствует, с одной стороны, о взаимосвязи немагнитных (СО) и магнитных взаимодействий в области ТФП (т.е. в области минимальной ЭЗЗ). При этом следует отметить, что в реальной системе изменение величины СО-взаимодействия обусловлено изменением внутриаомного и поверхностного градиентов электростатического потенциала. А с другой стороны, это может свидетельствовать о том, что именно в точке ТФП эта взаимосвязь проявляется в максимальной степени. Таким образом, минимум в ненулевой величине ЭЗЗ коррелирует с усиленной взаимосвязью немагнитных (СО) и магнитных взаимодействий в области ТФП, что является важным аргументом в пользу возможности реализации аксионо-подобного состояния в данной системе (см. ниже).

Теперь необходимо прояснить вопрос, каким образом ненулевая минимальная величина ЭЗЗ в точке ТФП связана с взаимовлиянием немагнитных (СО) и магнитных взаимодействий и изменением величины $\theta = \pi \rightarrow 0$ в области ТФП, что и предполагается основой формирования аксионо-подобного состояния на θ -границе между топологической и тривиальной фазами.

2.3. Связь точки минимума ЭЗЗ в точке Дирака в области ТФП с возможностью реализации аксионо-подобного состояния на θ -границе между топологической и тривиальной фазами

Если резюмировать результаты представленных расчетов, то вариация (уменьшение) величины λ_{SOC} в АФМ ТИ $MnBi_2Te_4$ сопровождается изменением (уменьшением) величины дираковской ЭЗЗ, величина которой доходит до минимума, а затем начинает опять возрастать. В точке минимума ЭЗЗ система испытывает ТФП из топологического в тривиальное состояние. Данный ТФП сопровождается инверсией вкладов p_z^- -состояний Te и p_z^+ -состояний Bi (с различной четностью) на краях формируемой дираковской ЭЗЗ, что может свидетельствовать об изменении знака ЭЗЗ, что и является индикатором ТФП. При этом в точке ТФП происходят также инверсия спиновой S_z -ориентации состояний верхнего и нижнего конусов Дирака на краях дираковской ЭЗЗ и переход в точке ТФП от поверхностной локализации состояний, формирующих ТПС, к объемной локализации во всем слэбе. При этом величина спиновой S_z -компоненты для

состояний нижней части дираковского конуса в области ТФП достигает максимальных значений, что свидетельствует об усиленной взаимосвязи немагнитных (СО) и магнитных взаимодействий именно в области ТФП.

Представленные изменения величины и знака дираковской ЭЗЗ и их зависимость от немагнитных (СО) и магнитных взаимодействий в рамках представления дираковской четырехзонной модели [4] соответствуют изменениям величин m_4 и m_5 (см. ниже в данном разделе). При этом, как показали расчеты в данной работе, в точке ТФП уменьшение величины и инверсия знака дираковской ЭЗЗ (определяемые величиной и знаком m_4 в дираковском представлении) при изменении λ_{SOC} происходят не непрерывно, а с перескоком через нуль. (В наших расчетах в точке ТФП при толщине слэба 24 СБ величина ЭЗЗ в точке Дирака составляла 4.2 мэВ.) Формирование ненулевой дираковской ЭЗЗ в точке ТФП в нашем рассмотрении ассоциируется с формированием аксионо-подобного состояния на границе между топологической и тривиальной фазами, которое и обуславливает взаимосвязь между немагнитными и магнитными взаимодействиями на θ -границе между данными фазами. Такое предположение коррелирует с тем, что согласно работам [8, 10–12, 43] точка минимума ЭЗЗ в области ТФП как раз и должна соответствовать наиболее эффективной реализации динамического аксионного возбуждения.

Здесь следует отметить, что все упомянутые выше изменения в точке ТФП проявляются именно на границе между топологической и тривиальной фазами, т.е. для данной системы — на границе между кристаллом и вакуумом (где величина θ изменяется от π до 0). Именно градиент аксионного поля на границе между топологической и тривиальной фазами в точке ТФП (при $\theta \neq \pi$ или 0 ($\pi \rightarrow 0$)), когда нарушается как симметрия обращения времени, так и пространственная инверсия, является ответственным за нетривиальную взаимосвязь между немагнитными (СО) и магнитными взаимодействиями на θ -границе, обуславливающую формирование ненулевой дираковской ЭЗЗ в точке ТФП, что и является индикатором формирования аксионо-подобного состояния.

Данную взаимосвязь можно визуализировать, используя комплексное представление аксионного поля $\Phi = \chi e^{i\theta}$ посредством введения изменения (взаимодействия) немагнитного (в основном СО) и магнитного вкладов (аналогично работам [41, 43]). При этом изменение величины СО-взаимодействия

определяется в первую очередь изменением величины электростатического внутриатомного градиента потенциала. В этом случае, если перейти к зависимости величины ЭЗЗ в точке Дирака, то θ можно представить как фазовую переменную для комплексного представления массового члена $m = \rho e^{i\theta}$ [4, 14, 17, 41, 43], как это показано на рис. 3. Возможность комплексного представления массового члена при изменении аксионного поля было отмечено еще в пионерской работе [14]. При таком представлении действительная и мнимая части могут быть представлены как m_4 и m_5 в выражении

$$m = m_4 + im_5.$$

Здесь

$$m_4 = \rho \cos \theta, \quad m_5 = \rho \sin \theta$$

с величиной модуля

$$|m| = |\rho| = \sqrt{m_4^2 + (im_5)^2}.$$

Член m_4 соответствует вкладу немагнитных (в основном СО) взаимодействий в четырехзонной модели Дирака [4, 10–12], которые сохраняют симметрию обращения времени и пространственной инверсии, а m_5 соответствует вкладу АФМ-взаимодействий (АФМ-порядку), приводящих к нарушению симметрии обращения времени и пространственной инверсии. В этом представлении топологическому состоянию соответствует левая точка на окружности с радиусом

$$\rho = |m| = \sqrt{m_4^2 + (im_5)^2}$$

на оси m_4 (точка $\theta = \pi$) на рис. 3, которая характеризуется отрицательным знаком ЭЗЗ в точке Дирака. Тривиальному состоянию соответствует правая точка на данной окружности (точка $\theta = 0$), которая характеризуется положительным знаком дираковской ЭЗЗ.

Данное представление демонстрирует взаимосвязь между немагнитными (СО) и магнитными вкладами при переходе $\theta = \pi \rightarrow 0$, когда значение θ отличается от квантованных значений π и 0 , и их возможную взаимную трансформацию в точке ТФП. Аналогичные представления об изменении θ при переходе между топологической и тривиальной фазами без нарушения и с нарушением симметрии обращения времени и пространственной симметрии представлены в работах [46, 47], где также показано, что этот переход в области изменения θ (между квантованными значениями π и 0 , когда симметрии нарушены) происходит без закрытия ЭЗЗ в точке

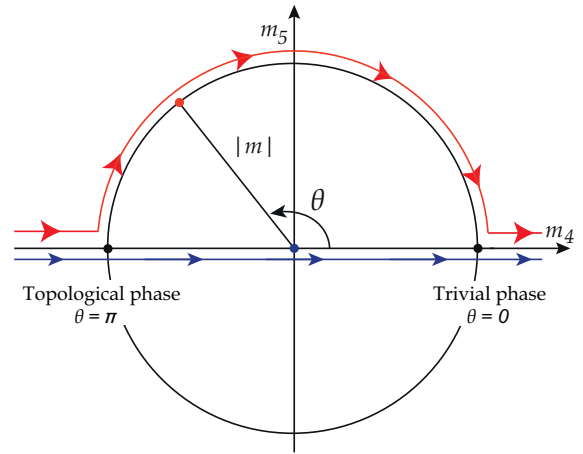


Рис. 3. (В цвете онлайн) Схематическое комплексное представление взаимосвязи между аксионным полем θ и немагнитным порядком, описываемым величиной m_4 (в основном за счет СО-связи), и АФМ-порядком, описываемым m_5 , в области ТФП в пределах изменения $\theta = \pi \rightarrow 0$. Здесь топологическому состоянию соответствует левая точка на окружности (радиусом $\rho = \sqrt{m_4^2 + (im_5)^2}$ на оси m_4 ($\theta = \pi$)), которая характеризуется отрицательной дираковской ЭЗЗ ($m_4 < 0$). Тривиальное состояние соответствует правой точке окружности ($\theta = 0$), которая характеризуется положительным знаком ЭЗЗ в точке Дирака ($m_4 > 0$). Для АФМ ТИ MnBi_2Te_4 переход из топологического в тривиальное состояние происходит по радиусу окружности, что показано красными стрелками (без закрытия дираковской ЭЗЗ). Для немагнитных ТИ топологический переход происходит вдоль оси m_4 (при $m_5 = 0$) без открытия ЭЗЗ, что показано синими стрелками (из работы [41])

ТФП. На рис. 3 — это переход по красным стрелкам. Для немагнитного ТИ, когда переход происходит исключительно по горизонтальной оси (изменение m_4), где симметрия сохраняется, θ переходит от значения π до 0 непосредственно в точке ТФП (по окружности с нулевым радиусом). В этом случае ТФП происходит с нулевой ЭЗЗ, что показано синими стрелками.

Если мы будем теоретически уменьшать значение λ_{SOC} (что соответствует уменьшению m_4) для АФМ MnBi_2Te_4 (на рис. 3 это движение слева направо вдоль оси m_4), то при значениях λ_{SOC} , соответствующих области перехода от топологического к тривиальному состоянию вклада m_4 и m_5 становятся сравнимыми (левая точка на окружности на рис. 3). В этом случае условие сохранения комбинированного топологического инварианта для MnBi_2Te_4 (характеризуемого значением $\theta = \pi$) нарушается. Значение θ начинает изменяться в преде-

лах между π и 0 , тем самым воздействуя на взаимосвязь между m_4 и m_5 , в соответствии с данным комплексным представлением, и система переходит из топологического состояния ($\theta = \pi$) в состояние тривиального изолятора ($\theta = 0$) с другой четностью и противоположным знаком ЭЗЗ в точке Γ (уже с неинвертированными поверхностными состояниями на краях ЭЗЗ, т.е. с положительным знаком ЭЗЗ). Этот переход можно описать вращением вектора с модулем $|m|$ в данном комплексном представлении (показано красными стрелками на рис. 3). Именно инвариантность модуля $|m|$ при изменении λ_{SOC} в области ТФП и определяет наличие ЭЗЗ и ее неизменность при таком переходе. В этом случае размер ЭЗЗ соответствует выражению

$$E_{gap} = \sqrt{m_4^2 + (im_5)^2}$$

в точке ТФП (см. также [10]).

Аналогичная ситуация имеет место и при увеличении величины СО-взаимодействия от малых значений, соответствующих тривиальной фазе, (начиная от правой точки на комплексном представлении на рис. 3). В этом случае данная взаимосвязь проявляет себя явным образом только при превышении определенного порога внутриатомного градиента потенциала (т.е. в области ТФП).

При этом следует отметить, что в соответствии с расширенным законом Гаусса с введенным аксионным членом [4, 14, 48–50]

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \rho - \frac{\alpha}{4\pi^2} \nabla \theta \cdot \mathbf{B},$$

именно градиент θ на границе между топологической и тривиальной фазами вызывает соответствующую взаимосвязь между электрическими и магнитными полями (или СО (m_4) и магнитными (m_5) вкладками) на θ -границе в области ТФП, что и обуславливает формирование аксионо-подобного состояния на границе между топологической и тривиальной средами, которое проявляется, в том числе, в формировании ненулевой ЭЗЗ в точке Дирака при ТФП и соответствующего топологического МЭ-эффекта (для системы с параметрами, близкими к ТФП). Подобное представление в какой-то мере коррелирует с эффектом аксионной нестабильности, анализируемым в работах [43, 51, 52]. В рамках данного эффекта, когда электрическое поле, приложенное к системе, превышает определенный уровень E_{crit} , электрическое поле начинает экранироваться, что приводит к возникновению локальной

плотности магнитного потока в области θ -границы за счет МЭ-эффекта [43]

$$B(\theta) = 4\pi\mu M_\theta = \frac{\alpha}{\pi} \mu \theta E(\theta).$$

Другими словами, эффект аксионной нестабильности можно также рассматривать как эффект уникальной взаимосвязи между электрическими и магнитными полями в области изменения θ .

2.4. Модуляция электронной и спиновой структур при приложении электрического поля для системы на основе АФМ ТИ MnBi_2Te_4 с параметрами, соответствующими ТФП

Интересно, что если приложить электрическое поле перпендикулярно к поверхности (или внешний градиент электростатического потенциала) для системы на основе АФМ ТИ MnBi_2Te_4 , характеризующейся величиной λ_{SOC} в области ТФП, то в зависимости от полярности приложенного электрического поля (направления градиента) это приведет к трансформации системы либо в топологическую, либо в тривиальную фазу.

На рис. 4 (в качестве дальнейшего развития идей, представленных в работах [41, 43]) показаны изменения S_z -спиновой структуры с детализацией спин-зависимых дисперсионных зависимостей ТПС в области точки Дирака при приложении внешнего градиента потенциала путем введения в расчет граничных условий «вакуум–слэб–металл» с добавлением дополнительного заряда в систему [53], находящуюся по параметрам в области ТФП ($\lambda_{SOC} = 0.92$). Красные и синие символы соответствуют противоположным направлениям спиновой ориентации. Расчеты проведены для слэба толщиной 12 СБ. Количественные изменения величины S_z для состояний нижней части дираковского конуса при приложении электрического поля противоположной полярности для различных значений величины градиента приложенного поля относительно точки ТФП ($\lambda_{SOC} = 0.92$) представлены на рис. 4b. Из рассмотрения видно, что при приложении поля положительной полярности внеплоскостная спиновая S_z -компонента в точке Дирака показывает явно увеличивающуюся степень спиновой S_z -поляризации, что соответствует переходу системы в топологическое состояние, причем с величиной спиновой S_z -поляризации даже большей, чем для топологической фазы без приложенного электрического поля. С другой стороны, при приложе-

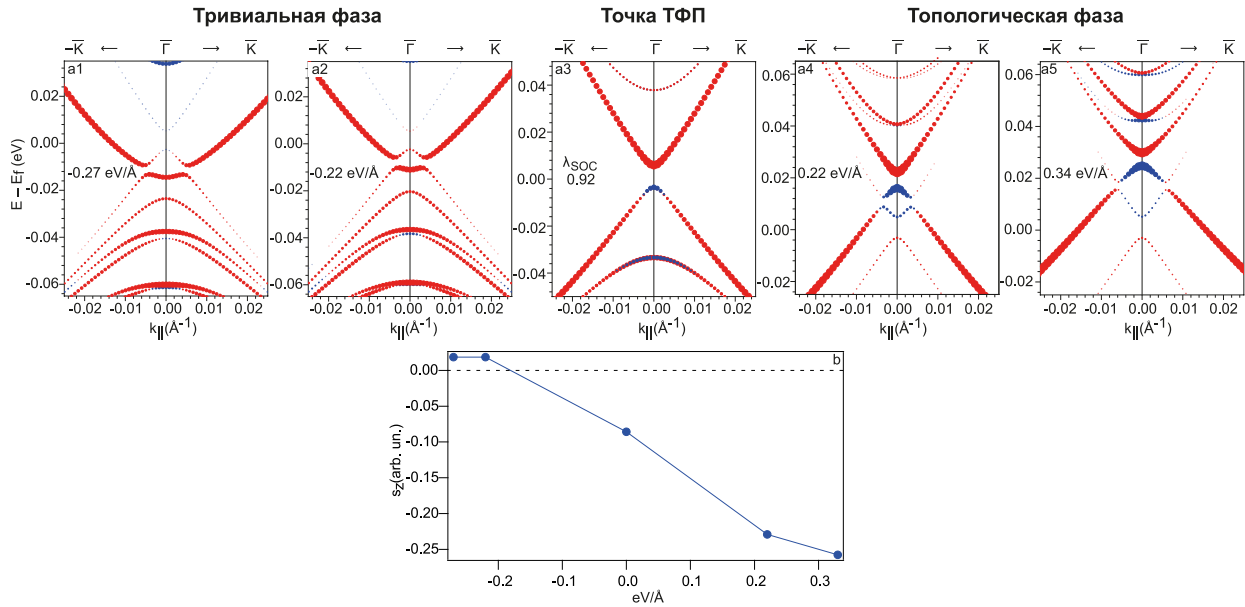


Рис. 4. (В цвете онлайн) (a1–a5) — Изменения внеплоскостной (S_z) спиновой структуры с детализацией дисперсионных зависимостей ТПС в области точки Дирака при приложении электрического поля (перпендикулярно поверхности) противоположной полярности по отношению к системе, находящейся по параметрам в области ТФП ($\lambda_{SOC} = 0.92$). Величины напряженности приложенного поля представлены на соответствующих вставках. Красные и синие символы соответствуют противоположным направлениям спиновой ориентации. Расчеты проведены для слэба толщиной 12 СБ. (b) — Изменения величины S_z для состояний нижней части дираковского конуса при приложении электрического поля противоположной полярности для различных значений величины градиента приложенного поля относительно точки ТФП ($\lambda_{SOC} = 0.92$)

нии поля отрицательной полярности система переходит в тривиальное состояние уже без соответствующей инверсии спиновых состояний на краях ЭЗЗ в точке Дирака.

Результаты данных расчетов показывают, что, с одной стороны, для системы, находящейся по параметрам в области ТФП, можно легко переводить систему из топологического в тривиальное состояние и наоборот, прикладывая перпендикулярно поверхности электрическое поле противоположной направленности, т. е. управлять ТФП. А с другой стороны, эти расчеты показывают взаимосвязь электрических и магнитных взаимодействий в области ТФП. Электрическое поле, приложенное перпендикулярно поверхности, вызывает внеплоскостную (S_z) спиновую поляризацию, свидетельствующую о формировании локального магнитного поля перпендикулярно поверхности, что соответствует возможности реализации топологического МЭ-эффекта в области ТФП.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С целью анализа возможности реализации топологического фазового перехода и связи данного

перехода с формированием аксионо-подобного состояния, локализованного на границе между топологической и тривиальной фазами методом теории функционала плотности проведены сравнительные расчеты и анализ изменений электронной и спиновой структур в системах на основе АФМ ТИ $MnBi_2Te_4$ в слэбе различной толщины (6, 12, 18, 24 СБ)) при вариации величины СО-взаимодействия в области ТФП между топологическим и тривиальным состояниями системы.

Расчеты показали, что в точке ТФП величина дираковской ЭЗЗ достигает своего минимума при уменьшении величины λ_{SOC} (для слэба толщиной 24 СБ величина минимальной ЭЗЗ составляет 4.2 мэВ), а затем после прохождения через точку ТФП при дальнейшем уменьшении λ_{SOC} вновь начинает возрастать при переходе в тривиальное состояние. Одновременно в точке ТФП происходит инверсия вкладов p_z^+ -состояний Bi и p_z^- -состояний Te с разной четностью на краях дираковской ЭЗЗ, имеющая место в области точки ТФП, что свидетельствует об инверсии знака формируемой ЭЗЗ. При этом в точке ТФП имеет место инверсия внеплоскостной (S_z) спиновой поляризации в точке Γ для состояний нижней и верхней частей конуса Дирака.

Переход от топологического к тривиальному состоянию системы при изменении λ_{SOC} происходит без закрытия дираковской ЭЗЗ, т. е. с «перескоком» через 0 и образованием ненулевой дираковской ЭЗЗ при таком переходе, что является индикатором взаимосвязи немагнитных электрических (СО) и магнитных взаимодействий в области ТФП и формирования аксионо-подобного состояния на θ -границе между топологической и тривиальной фазами.

При этом именно градиент θ ($\theta = \pi \rightarrow 0$) на границе между топологической и тривиальной средами вызывает нетривиальную взаимосвязь между немагнитными (СО) и магнитными взаимодействиями на θ -границе в точке ТФП, т. е. формирование аксионо-подобного состояния, которое проявляется, в том числе, в формировании ненулевой дираковской ЭЗЗ при ТФП.

Предложено комплексное представление такой взаимосвязи при значениях величины λ_{SOC} , соответствующих области ТФП, на θ -границе, где аксионный член изменяется между квантованными значениями в пределах от π до 0. В точке ТФП система переходит из топологического состояния ($\theta = \pi$) в тривиальное изолирующее состояние ($\theta = 0$) с другой четностью и противоположным знаком ЭЗЗ в точке Γ путем взаимного преобразования между электрическим и магнитным вкладами в пределах изменения $\theta = \pi \rightarrow 0$, что определяет ненулевую ЭЗЗ при ТФП.

Приложение электрического поля перпендикулярно поверхности к системе на основе АФМ ТИ $MnBi_2Te_4$, находящейся по параметрам, близким к состоянию ТФП, позволяет управлять переходом из топологического в тривиальное состояние и наоборот при смене направленности приложенного электрического поля, что показывает взаимосвязь электрических и магнитных вкладов в области ТФП и возможность реализации топологического МЭ-эффекта в области ТФП.

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 [54] и псевдоатомных орбиталей в качестве базисных функций [55–57]. Расчеты проводились в рамках обобщенного градиентного приближения с использованием его PBE-версии [58]. Сетка интегри-

рования в прямом пространстве определялась энергией отсечки 450 Ry, а в обратном пространстве, для разбивки 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. Проверка показала, что дальнейшее увеличение плотности k -сетки приводит лишь к очень слабым изменениям в электронной структуре. Критерий сходимости по полной энергии был выбран равным $1 \cdot 10^{-6}$ эВ. Базисные функции задавались следующим образом: $Bi8.0-s3p2d2f1$, $Te7.0-s3p2d2f1$, $Mn6.0-s3p2d1$. Состояния $Mn3d$ рассматривались в рамках подхода DFT + U [59] в схеме Дударева с параметром $U = 5.4$ эВ [23]. Расчетная ячейка поверхности $MnBi_2Te_4$ включала вакуумный слой толщиной 12 Å. Внешний градиент электростатического потенциала вдоль нормали к поверхности задавался путем размещения электрического заряда с одной стороны слэба в рамках метода эффективной экранирующей среды [53] с граничными условиями «вакуум–слэб–металл»

Финансирование. Работа проведена в рамках и при поддержке Российского научного фонда (грант № 23-12-00016) и Санкт-Петербургского государственного университета (грант № 94031444).

ЛИТЕРАТУРА

1. X.-L. 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. D. M. Neno, C. A. C. Garcia, J. Gooth et al., Nature Rev. Phys. **2**, 682 (2020).
4. A. Sekine and K. Nomura, J. Appl. Phys. **129**, 141101 (2021).
5. C.-Z. Chang, C.-X. Liu, and A. H. MacDonald, Rev. Mod. Phys. **95**, 011002 (2023).
6. A. Essin, J. Moore, and D. Vanderbilt, Phys. Rev. Lett. **102**, 146805 (2009).
7. Y. Zhao and Q. Liu, Appl. Phys. Lett. **119**, 060502 (2021).
8. R. Li, J. Wang, X.-L. Qi et al., Nature Phys. **6**, 284 (2010).

9. Y. Xiao, H. Wang, D. Wang et al., *Phys. Rev. B* **104**, 115147 (2021).
10. T. Zhu, H. Wang, H. Zhang et al., *npj Comput. Mat.* **7**, 121 (2021).
11. H. Wang, D. Wang, Z. Yang et al., *Phys. Rev. B* **101**, 081109 (2020).
12. J. Zhang, D. Wang, M. Shi et al., *Chinese Phys. Lett.* **37**, 077304 (2020).
13. R. D. Peccei and H. R. Quinn, *Phys. Rev. Lett.* **38**, 1440 (1977).
14. F. Wilczek, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 1799 (1987).
15. N.V. Mikheev and L.A. Vassilevskaya, *Phys. Lett. B* **410**, 203 (1997).
16. J. Preskill, M. B. Wise, and F. Wilczek, *Phys. Lett. B* **120**, 127 (1983).
17. L. D. Duffy and K. van Bibber, *New J. Phys.* **11**, 105008 (2009).
18. F. Chadha-Day, J. Ellis, and D. J. E. Marsh, *Sci. Adv.* **8**, eabj3618 (2022).
19. J. Wang, B. Lian, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, *Phys. Rev. B* **92**, 081107 (2015).
20. T. Morimoto, A. Furusaki, and N. Nagaosa, *Phys. Rev. B* **92**, 085113 (2015).
21. M. Mogi, M. Kawamura, R. Yoshimi et al., *Nature Mater.* **16**, 516 (2017).
22. M. Mogi, M. Kawamura, A. Tsukazaki et al., *Sci. Adv.* **3**, eaao1669 (2017).
23. M. M. Otrokov, I. I. Klimovskikh, H. Bentmann et al., *Nature* **576**, 416 (2019).
24. Z. S. Aliev, I. R. Amiraslanov, D. I. Nasonova et al., *J. Alloys Comp.* **789**, 443 (2019).
25. J. Li, Y. Li, S. Du et al., *Sci. Adv.* **5**, eaaw5685 (2019).
26. D. Zhang, M. Shi, T. Zhu et al., *Phys. Rev. Lett.* **122**, 206401 (2019).
27. Y. Gong, J. Guo, J. Li et al., *Chin. Phys. Lett.* **36**, 076801 (2019).
28. D. A. Estyunin, I. I. Klimovskikh, A. M. Shikin et al., *APL Mater.* **8**, 021105 (2020).
29. A. M. Shikin, D. A. Estyunin, N. L. Zaitsev et al., *Phys. Rev. B* **104**, 115168 (2021).
30. A. M. Shikin, D. A. Estyunin, I. I. Klimovskikh et al., *Scient. Rep.* **10**, 13226 (2020).
31. А. М. Шикин, Д. А. Естюнин, Н. Л. Зайцев и др., *ЖЭТФ* **161**, 126 (2022) [A. M. Shikin, D. A. Estyunin, N. L. Zaitsev et al., *JETP* **134**, 103 (2022)].
32. M. Garnica, M. M. Otrokov, P. C. Aguilar et al., *npj Quant. Mater.* **7**, 7 (2022).
33. S. V. Ereameev, M. M. Otrokov, A. Ernst et al., *Phys. Rev. B* **105**, 195105 (2022).
34. A. M. Shikin, T. P. Makarova, A. V. Eryzhenkov et al., *Physica B* **649**, 414443 (2023).
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. S. V. Ereameev, I. P. Rusinov, Yu. M. Koroteev et al., *J. Phys. Chem. Lett.* **12**, 4268 (2021).
39. H. Zhang, W. Yang, Y. Wang et al., *Phys. Rev. B* **103**, 094433 (2021).
40. L. Zhou, Z. Tan, D. Yan et al., *Phys. Rev. B* **102**, 085114 (2020).
41. A. M. Shikin, T. P. Estyunina, A. V. Eryzhenkov et al., *Sci. Rep.* **13**, 16343 (2023).
42. В. А. Волков, В. В. Еналдиев, *ЖЭТФ* **149**, 702 (2016) [V. A. Volkov and V. V. Enaldiev, *JETP* **122**, 608 (2016)].
43. T. Imaeda, Y. Kawaguchi, Y. Tanaka et al., *J. Phys. Soc. Jpn* **88**, 024402 (2019).

44. M. M. Otrokov, I. P. Rusinov, M. Blanco-Rey et al., *Phys. Rev. Lett.* **122**, 107202 (2019).
45. Y. Li, Y. Jiang, J. Zhang et al., *Phys. Rev. B* **102**, 121107 (2020).
46. S. Coh, D. Vanderbilt, A. Malashevich et al., *Phys. Rev. B* **83**, 085108 (2011).
47. N. P. Armitage and L. Wu, *SciPost Phys.* **6**, 046 (2019).
48. G. Rosenberg and M. Franz, *Phys. Rev. B* **82**, 035105 (2010).
49. N. Yamamoto, *Phys. Rev. D* **93**, 085036 (2016).
50. F. S. Nogueira, Z. Nussinov, and J. van den Brink, *Phys. Rev. D* **94**, 085003 (2016).
51. J. Wang, B. Lian, and S.-C. Zhang, *Phys. Rev. B* **93**, 045115 (2016).
52. H. Ooguri and M. Oshikawa, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 161803 (2012).
53. M. Otani and O. Sugino, *Phys. Rev. B* **73**, 115407 (2006).
54. N. Troullier and J. Martins, *Phys. Rev. B* **43**, 1993 (1991).
55. T. Ozaki, *Phys. Rev. B* **67**, 155108 (2003).
56. T. Ozaki and H. Kino, *Phys. Rev. B* **69**, 195113 (2004).
57. T. Ozaki and H. Kino, *Phys. Rev. B* **72**, 045121 (2005).
58. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
59. M. J. Han, T. Ozaki, and J. Yu, *Phys. Rev. B* **73**, 045110 (2006).