

三元硼化物 W_2CoB_2 中鲁棒的拓扑性质*吴舒雯^{1)2)#} 袁丹文^{1)2)#} 岳长明³⁾ 胡岳芳¹⁾²⁾
陈巍^{4)5)†} 张坦^{6)‡} 张薇^{1)2)4)‡‡}

1) (福建师范大学物理与能源学院, 福建省量子调控与新能源材料重点实验室, 福州 350117)

2) (福建省太阳能转换与储能工程技术研究中心, 福州 350117)

3) (南方科技大学物理系, 量子功能材料全国重点实验室, 深圳 518055)

4) (福建师范大学碳中和研究院, 福州 350007)

5) (福建师范大学化学与材料学院, 福州 350007)

6) (中国科学院物理研究所, 北京 100190)

(2025 年 12 月 12 日收到; 2026 年 3 月 4 日收到修改稿)

拓扑材料中丰富的拓扑电子性质对材料的实际应用具有重要指导意义. 本文基于第一性原理计算, 研究了三元硼化物 W_2CoB_2 的拓扑电子结构性质. 计算结果表明, 在不考虑自旋-轨道耦合作用时, W_2CoB_2 是拓扑节线半金属, 其布里渊区内存在分别由镜面对称性以及空间反演和时间反演对称性联合保护的两种节线. 这些节线在自旋-轨道耦合作用下全部打开了能隙, 体系由节线半金属转变为 Z_2 拓扑指标为 (1; 000) 的强拓扑绝缘体, 并且在 $(\bar{1}10)$ 面上出现了一个受拓扑保护的无能隙表面狄拉克锥. 该材料的拓扑相在应变下始终稳定, 当对体系施加 -5%—5% 的大范围等轴应变时, 在不考虑自旋-轨道耦合作用时, 体系依旧呈现出节线半金属相且节线的形状和数量保持不变. 当考虑自旋-轨道耦合作用时, 体系仍保持强拓扑绝缘体相, 其 $\Gamma \rightarrow X$ 方向上狄拉克锥处的能隙大小随着应变的增大而先减小后增大. 当应变增大至 5% 时, 该能隙增大至最大值 15 meV. 本研究系统揭示了三元硼化物 W_2CoB_2 中鲁棒的非平庸拓扑电子结构性质, 为拓扑节线半金属的研究以及低能耗自旋电子器件设计提供了良好的基础.

关键词: 拓扑节线半金属, 拓扑绝缘体, 应变**DOI:** 10.7498/aps.75.20251711**CSTR:** 32037.14.aps.75.20251711

1 引言

近年来, 拓扑量子材料成为备受关注的研究方向之一^[1-4]. 继成功实现二维拓扑绝缘体并观测量子自旋霍尔效应之后, 三维拓扑绝缘体的理论预测与实验验证成为拓扑电子材料研究的又一重大突

破^[5-7]. 三维拓扑绝缘体在体能隙中存在无能隙的二维拓扑表面态, 根据表面态的性质, 三维拓扑绝缘体可以进一步分为强、弱拓扑绝缘体^[8]. 强拓扑绝缘体 (strong topological insulator, STI) 在任意表面均存在自旋分辨的、具有狄拉克型线性色散关系的表面态. 这种表面态对保持时间反演对称性的无序扰动展现出鲁棒性^[9]. 而弱拓扑绝缘体 (weak

* 国家自然科学基金 (批准号: 12374159, 11974076, 1247041908)、福建省自然科学基金重点项目 (批准号: 2021J02012, 2024J01289) 和福建师范大学碳中和研究院研究基金 (批准号: TZH2022-05) 资助的课题.

同等贡献作者.

† 通信作者. E-mail: chenwei@fjnu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: tanzhang2016@outlook.com

‡‡ 通信作者. E-mail: zhangw721@163.com

topological insulator, WTI) 因依赖于晶体平移对称性而易受无序影响, 其表面态只出现在特定表面上, 实验观测难度较大^[10,11]. 因此, STI 在自旋电子器件和量子计算领域更具应用潜力. 随后, 研究者将拓扑的概念推广至半金属体系, 由此产生了拓扑半金属. 拓扑半金属包括狄拉克半金属 (Dirac semimetal, DSM)^[12–16]、外尔半金属 (Weyl semimetal, WSM)^[17–22] 和节线半金属 (nodal line semimetal, NLSM)^[23–26] 等. 与具有离散能带交点的 DSM 和 WSM 不同, NLSM 费米能级附近的能带交点在布里渊区 (Brillouin zone, BZ) 内连续分布形成节线. 当体系中同时存在多个节线时, 节线间可能相互连接形成节链^[27]、节网^[28] 等复杂结构. 目前已有研究报道了多种材料在不考虑自旋-轨道耦合 (spin-orbit coupling, SOC) 作用时, 具有由不同对称性保护的节线, 这些节线通常会受 SOC 的影响而退化成节点或完全打开能隙^[18,21,29–31]. 例如, Yu 等^[21] 提出 HfC 中受镜面对称性保护的节环在考虑 SOC 的作用后退化成 30 对外尔点; Chang 等^[31] 提出 Mg₃Bi₂ 中存在由空间反演对称性 (space-inversion symmetry, P) 和时间反演对称性 (time-reversal symmetry, T) 共同保护的节环, 该节环在 SOC 作用下完全打开能隙. 此外, Chan 等^[32,33] 的研究表明 NLSM 有望表现出表面磁性或超导性^[32] 以及长程库仑相互作用^[33] 等新奇的物理特性, 已引起众多研究人员的关注.

近年来, 三元硼化物 W₂CoB₂ 凭借极高的硬度^[34]、出色的导热性^[35] 和良好的化学稳定性^[36] 等性能已作为耐磨材料广泛应用, 但其独特的电子结构和潜在的非平庸拓扑性质仍有待深入探索^[37]. 本文通过第一性原理计算, 详细探讨了三元硼化物 W₂CoB₂ 的电子结构与拓扑性质. 计算结果表明, 在不考虑 SOC 的情况下, W₂CoB₂ 呈现 NLSM 相, 在其 BZ 中存在由镜面对称性和 PT 对称性两种不同对称性保护的节线. 考虑 SOC 后, 这些节线打开能隙, 体系转变为 Z₂ 拓扑指标为 (1; 000) 的 STI, 并在 (110) 面上存在一个受拓扑保护的无能隙表面狄拉克锥. 目前已有多项研究表明, 施加应变是调控材料电子结构的有效方法之一^[38–41], 同时也可作为材料的实际应用提供理论预测与指导. 因此, 本文进一步研究了对体系施加-5%—5% 范围内的等轴应变时的情况. 当对体系施加应变且不考虑 SOC 时, 体系保持 NLSM 相且节线的形状、

数量均未发生变化. 考虑 SOC 后, 节线依旧打开了能隙, 其中 $\Gamma \rightarrow X$ 方向上狄拉克锥处的能隙大小随着应变的增大而先减小后增大, 当拉伸应变增大至 5% 时, 该能隙增大至最大值 15 meV. 与此同时, 体系在-5%—5% 的应变范围内依旧保持 STI 相, 展现出鲁棒的拓扑性质. 本研究表明 W₂CoB₂ 可作为研究多类型节线结构的良好材料平台, 同时也在自旋电子学中具有潜在的应用价值.

2 计算方法

本文计算通过 VASP (Vienna *ab initio* simulation package) 软件包^[42,43] 完成. 计算中采用投影缀加平面波 (projector-augmented wave, PAW)^[44,45] 方法处理电子-离子相互作用, 通过广义梯度近似 (generalized gradient approximation, GGA) 下的 PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) 泛函描述电子间相互作用的交换关联能^[46]. 在自洽计算中, 平面波截止能量为 400 eV, 并采用以 Γ 点为中心的 24×24×24 的 k 点网格. 为探究体系的基态, 分别使用 LDA 和 PBE 泛函对 Co 原子 3d 轨道进行 Hubbard U 计算测试^[47]. 为研究体系的拓扑性质, 以 W 原子和 Co 原子的 d 轨道、B 原子的 p 轨道为基矢构造出最大局域化 Wannier 函数 (maximally localized Wannier functions, MLWF)^[48,49], 并通过 WannierTools^[50] 进一步计算体系的表面态等拓扑性质. 等轴应变定义为 $\varepsilon = (l - l_0)/l_0 \times 100\%$, l 和 l_0 分别表示施加和未施加应变时体系在 3 个方向上的晶格常数, $\varepsilon > 0$ 时为拉伸应变, $\varepsilon < 0$ 时为压缩应变.

3 结果与讨论

3.1 晶体结构

如图 1(a), (b) 所示, 三元硼化物 W₂CoB₂ 属于体心正交结构, 其对应的空间群为 *Immm* (No.71). 体系具有空间反演对称性和分别垂直于 x , y , z 轴的镜面对称性. W 原子位于 4f (0.205, 0.5, 0), Co 原子位于 2a (0, 0, 0), B 原子位于 4h (0, 0.3, 0.5). W₂CoB₂ 已在实验上成功制备, 本文在计算中采用其实验晶格参数: $a = 7.075 \text{ \AA}$, $b = 4.564 \text{ \AA}$, $c = 3.177 \text{ \AA}$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ ^[35,51,52]. 图 1(c) 所示为 W₂CoB₂ 的第一 BZ, (110) 和 (001) 面的投影表面 BZ.

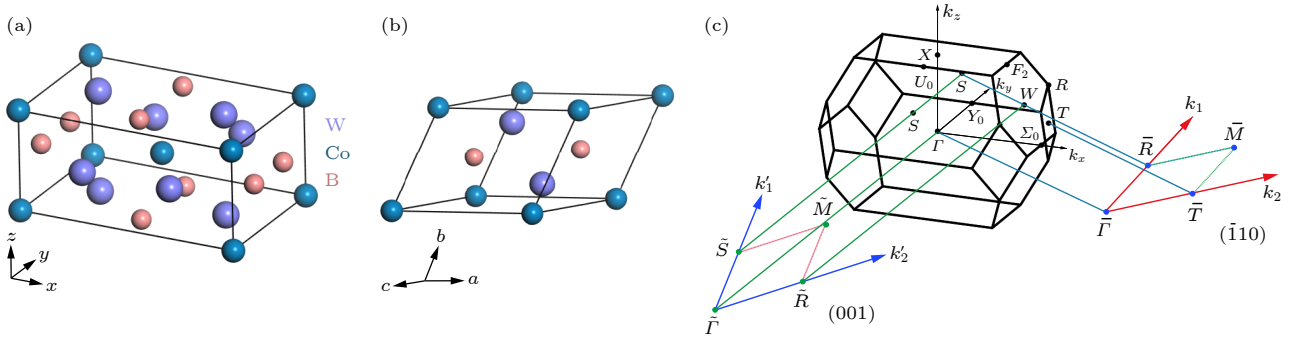


图 1 三元硼化物 W_2CoB_2 的 (a) 晶胞; (b) 原胞; (c) 第一 BZ, $(\bar{1}10)$ 和 (001) 表面 BZ; k_1, k_2 和 k'_1, k'_2 分别为 $(\bar{1}10)$ 和 (001) 表面 BZ 的倒格子基矢

Fig. 1. (a) The conventional cell and (b) primitive cell of the ternary boride W_2CoB_2 ; (c) the first BZ, $(\bar{1}10)$ and (001) surface BZ; the k_1, k_2 and k'_1, k'_2 are the primitive reciprocal vectors of the $(\bar{1}10)$ and (001) surface BZ.

3.2 能带结构

为探究体系的基态, 分别使用 LDA 和 PBE 泛函对 Co 原子的 3d 轨道进行了 Hubbard U 计算测试. 当考虑 SOC 时, 体系在不同计算方法及参数下 (LDAUTYPE = 1, $U = 3, 4$ eV, $J = 1$ eV 以及 LDAUTYPE = 2, $U = 0, 2, 3$ eV, $J = 0$ eV) 处于非磁 (NM)、铁磁 (FM) 和反铁磁 (AFM) 构型, 初始磁矩为 $4\mu_B$ 且方向分别沿 x, y, z 轴方向时计算得到的总磁矩和能量的计算结果如附录表 A1 所示. 附录图 A1 展示了当初始磁矩沿 z 轴时, W_2CoB_2 的不同磁构型. 从表 A1 可以看出, 采用 LDA 泛函时, 体系的总磁矩十分接近 0; 而采用 PBE 泛函时, 体系处于 NM, FM 和 AFM 等不同磁构型下的能量差异极小, 且总磁矩均小于 $1\mu_B$ 此外, 通过对现有文献的调研, 我们注意到目前尚无关于 W_2CoB_2 磁性的实验报道, 且在本文中 U 值并未影响体系的基态以及拓扑性质. 结合以上计算以及实验结果, 在本文的计算中选择基于不考虑 U 值的 PBE 泛函计算所得到的 NM 态结果作为体系的基态, 以进一步研究其电子结构与拓扑性质.

本文首先探讨了未施加应变时 W_2CoB_2 的能带结构. 如图 2(a) 所示, 当不考虑 SOC 时, 体系的能带在 $\Gamma \rightarrow X \rightarrow F_2$, $\Gamma \rightarrow Y_0$, $U_0 \rightarrow X$ 和 $R \rightarrow W$ 方向线性交叉, 形成了 5 个 I 型狄拉克点, 这些狄拉克点分别用蓝色、粉色和绿色点标记在图中, 此时体系表现出半金属的特征. 通过计算轨道分辨能带结构发现, 这些狄拉克点主要由 Co 的 d 轨道和 W 的 d 轨道构成. 此外, 波函数分析表明, 沿着 $\Gamma \rightarrow X \rightarrow F_2$, $\Gamma \rightarrow Y_0$ 和 $U_0 \rightarrow X$ 方向的狄拉克点由 C_{2v} 点

群保护, 而沿着 $R \rightarrow W$ 方向上的狄拉克点则由 C_2 点群保护, 具体的不可约表示已标记在图 2(a) 中. 当考虑 SOC 后, 如图 2(b) 所示, 这些交点打开了能隙, 体系可以看作是定义在弯曲费米面上的绝缘体, 其中 $\Gamma \rightarrow X$ 方向上狄拉克锥处的直接能隙值为 5.6 meV. 此时体系转变为三维 STI.

对体系施加 -5%—5% 等轴应变的结果如图 2(c)—(h) 所示. 从图 2(c), (e), (g) 可以看出, 当不考虑 SOC 时, 体系沿着 $\Gamma \rightarrow X \rightarrow F_2$, $\Gamma \rightarrow Y_0$, $U_0 \rightarrow X$ 以及 $R \rightarrow W$ 方向的能带依旧相交, 且形成交点能带的不可约表示与未施加应变时相同, 体系依旧呈现半金属相. 当考虑 SOC 之后, 如图 2(d), (f), (h) 所示, 这些交点依旧打开了能隙, 其中 $\Gamma \rightarrow X$ 方向上狄拉克锥处的能隙随着应变的增大而先减小后增大. 如图 2(f) 所示, 当施加 -2.2% 的应变时该能隙达到最小值 0.63 meV, 而当应变增大至 5% 时, 从图 2(h) 可以看出, 该能隙增大至最大值 15 meV. 与此同时, 体系在 -5%—5% 的大范围应变内依旧保持三维 STI 相, 展现出了鲁棒的拓扑性质.

3.3 节线结构

当不考虑 SOC 时, W_2CoB_2 在费米能级附近存在多个能带交点, 这意味着此时体系中可能存在节线结构. 在对能带进行详细计算之后, 我们发现 W_2CoB_2 的 BZ 中存在许多不同形状和不同对称性保护的拓扑节线, 结果如图 3(a)—(d) 所示. 图 2(a) 中蓝色, 粉色和绿色交点分别位于图 3 中对应颜色的节线上. 从图 3 可以看出, 位于 $k_x = 0$ 面的 2 个粉色节环和位于 $k_y = 0$ 面上的蓝色节环,

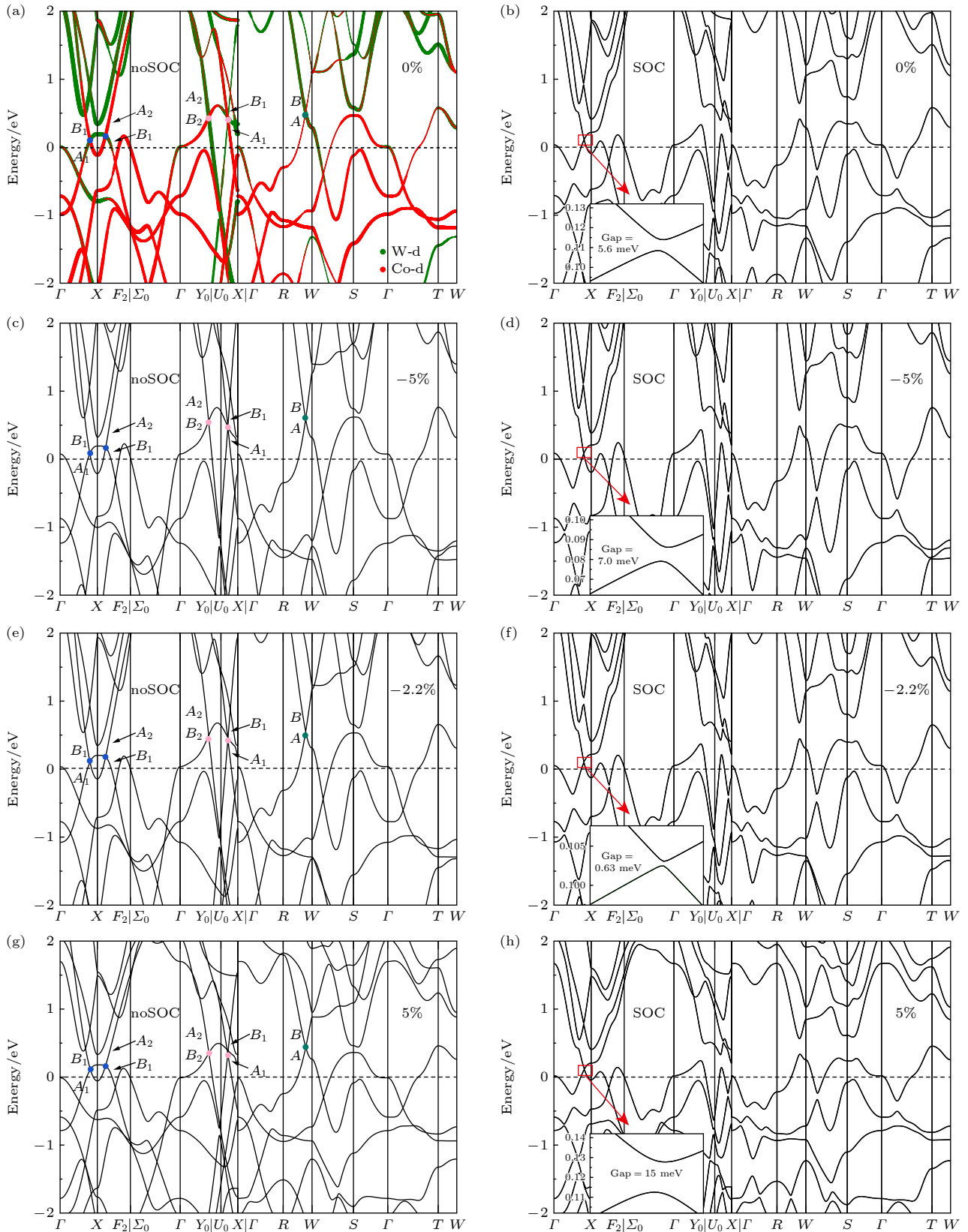


图2 处于不同应变下 W_2CoB_2 的能带结构 未施加应变 (a) 不考虑SOC的轨道分辨能带图和 (b) 考虑SOC时的能带结构; 处于-5%应变下 (等轴压缩) (c) 不考虑SOC和 (d) 考虑SOC的能带结构; 处于-2.2%应变下 (等轴压缩) (e) 不考虑SOC和 (f) 考虑SOC的能带结构; 处于5%应变下 (等轴拉伸) (g) 不考虑SOC和 (h) 考虑SOC的能带结构

Fig. 2. Band structures of W_2CoB_2 under different strain: (a) Non-SOC orbital-resolved band structure and (b) SOC band structure without strain; (c) non-SOC and (d) SOC band structures with -5% strain (equiaxial compression); (e) non-SOC and (f) SOC band structures with -2.2% strain (equiaxial compression); (g) non-SOC and (h) SOC band structures with 5% strain (equiaxial tension).

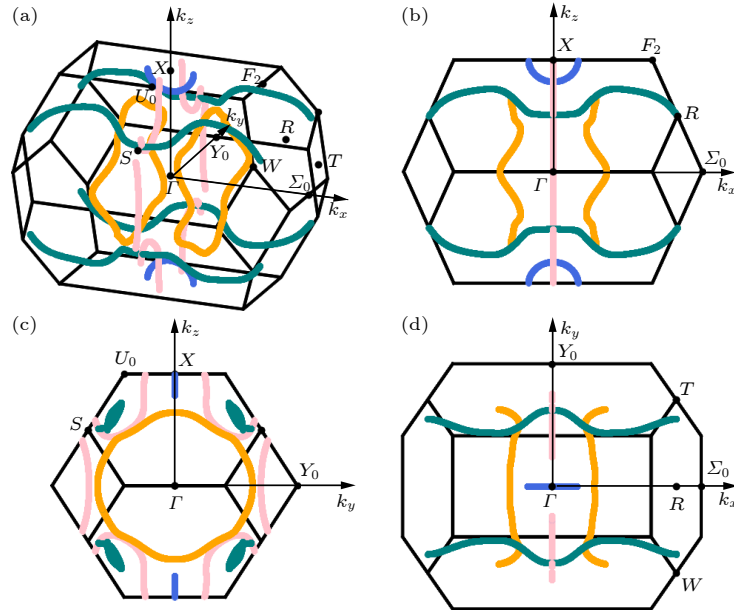


图 3 不考虑 SOC 时, W_2CoB_2 第一 BZ 中节线结构 (a) 三维视图; (b) 沿 k_y 轴侧视图; (c) 沿 k_x 轴的侧视图; (d) 沿 k_z 轴的俯视图; 粉色和蓝色节环分别由 M_x 和 M_y 镜面对称性保护, 橙色节环和绿色节线则由 PT 对称性保护

Fig. 3. In the absence of SOC, the nodal line structures in the first BZ of W_2CoB_2 : (a) 3D view; side views along the (b) k_y axis and (c) k_x axis; (d) top view along the k_z axis; the pink and blue nodal rings are protected by the M_x and M_y mirror symmetry respectively, while the orange nodal rings and green nodal lines are protected by PT symmetry.

分别由 M_x 和 M_y 镜面对称性保护. 2 个橙色节环和沿 x 方向延伸穿越整个 BZ 的 4 条绿色节线虽然相对于 3 个镜面对称, 但是它们在 BZ 中是起伏的, 并不位于任何一个平面上, 这些节线受到 PT 对称性的保护. 值得注意的是, 绿色节线和粉色节环在 $k_x = 0$ 的平面上相交形成节链结构. 此外, 我们还研究了当对体系施加 -5% — 5% 等轴应变时的节线结构. 计算结果表明, 当对体系施加应变时, 节线的形状和数量与未施加应变时相比均未发生变化 (附录图 A2), 这表明 W_2CoB_2 中的节线结构具有鲁棒性.

3.4 拓扑性质

我们进一步绘制了当考虑 SOC 之后 $\Gamma \rightarrow X$ 方向上狄拉克锥处的能隙随应变的变化情况, 结果如图 4(a) 所示. 从图 4 可以看出, 能隙大小随着应变的增大而先减小后增大. 当施加 -5% 应变时, 体系的能隙为 7.0 meV; 当应变增至 -2.2% 时, 能隙减小至最小值 0.63 meV; 而当应变进一步增大至 5% 时, 能隙增大到最大值 15 meV. 我们计算并绘制了体系总能随等轴应变的变化曲线, 从附录图 A3 中可以看到, 体系处于自由状态时总能最低, 且总能随应变的变化呈现出抛物线型曲线, 并且在 -2.2% 应变值附近, 曲线光滑连续, 这排除了计算

误差导致在该应变下出现最小能隙的可能性. 为了对该能隙的变化进行进一步分析, 我们绘制了体系在 -5% — 0% 应变下在 $\Gamma \rightarrow X$ 方向上狄拉克锥处能带的轨道投影能带图, 结果如附录图 A4 所示. 从图中可以看到, 随着应变从 -5% 增大至 -2.2% 时, 狄拉克锥的价带顶附近代表 W 原子的 $d_{x^2-y^2}$ 轨道的绿色圆圈逐渐变大, 而代表 Co 原子的 d_{yz} 轨道的红色圆圈逐渐变小, 且绿色和红色圆圈之间的重叠部分逐渐减小, 这意味着这两个轨道之间的杂化逐渐减弱; 当应变从 -2.2% 进一步增大时, 绿色圆圈逐渐变小, 红色圆圈逐渐变大, 并且绿色和红色圆圈的重叠部分逐渐增加, 这说明这两个轨道间的杂化逐渐增强. 因此, 应变改变了 W 原子的 $d_{x^2-y^2}$ 和 Co 原子的 d_{yz} 轨道间的杂化强弱, 从而导致了能隙的变化.

由于 W_2CoB_2 具有空间反演对称性且在考虑 SOC 之后体系中的节线打开了能隙, 因此可以通过计算 8 个时间反演不变动量点上占据态的宇称乘积来确定其 Z_2 拓扑不变量^[5], 时间反演不变动量点的位置由 3 个原胞倒格子基矢确定, 计算结果如图 4(b) 所示. 从图中可以看出处于不同应变下的 W_2CoB_2 的 Z_2 拓扑指标始终为 (1; 000), 这表明在 -5% — 5% 的大应变范围内, 体系均保持 STI 相, 展现出鲁棒的拓扑性质.

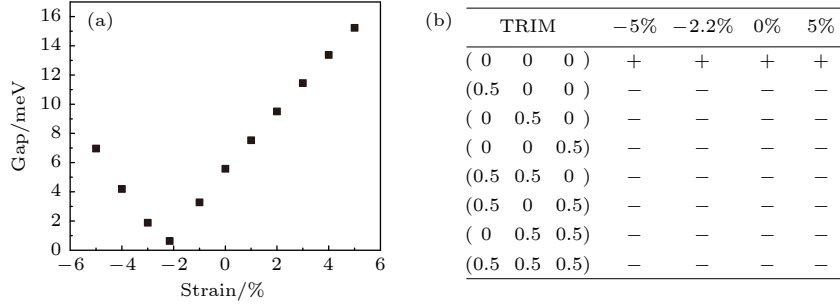


图 4 (a) 考虑 SOC 时, W_2CoB_2 在 $\Gamma \rightarrow X$ 方向上狄拉克锥处的能隙随应变的变化图; (b) 处于 -5% (等轴压缩), -2.2% (等轴压缩), 0% (未施加应变) 和 5% (等轴拉伸) 应变下的 W_2CoB_2 在时间反演不变动量点 (TRIM) 处占据态的宇称乘积

Fig. 4. (a) Variation of band gap at Dirac cone along the $\Gamma \rightarrow X$ direction vs. strain for W_2CoB_2 with SOC; (b) parity product of occupied states at the time-reversal invariant momenta (TRIM) for W_2CoB_2 under strains of -5% (equiaxial compression), -2.2% (equiaxial compression), 0% (without strain) and 5% (equiaxial tension).

为了进一步验证体系的拓扑性质, 通过 Wilson loop^[53,54] 方法计算了体系在未施加应变时 Wannier 电荷中心 (WCC) 在 $g_3 = 0$ 和 $g_3 = \pi$ 平面上的演化情况. 从图 5(a), (b) 可以看出, WCC (黑线) 在 $g_3 = 0$ 和 $g_3 = \pi$ 平面上分别与红色参考线相交奇数次和偶数次, 这表明体系的 Z_2 拓扑指标为 (1; 000), 与通过宇称计算得到的结果相同, 证实了体系此时确实是 STI.

我们分别计算了 W_2CoB_2 在 $(\bar{1}10)$ 和 (001) 面上的表面态. 从图 5(c), (d) 可以看出, 体系在 $(\bar{1}10)$ 面的 $\bar{\Gamma}$ 处出现了一个受拓扑保护的表面狄拉克锥, 在 (001) 面的 \tilde{S} , $\tilde{\Gamma}$ 和 \tilde{R} 处各出现了一个狄拉克锥, 这与 STI 的表面态具有奇数个狄拉克锥的特点相符^[8]. 这些狄拉克锥的两个分支分别连接价带和导带, 形成了无能隙的表面态. 这再次证明了体系此时确实处于拓扑非平庸的 STI 相. 接下来

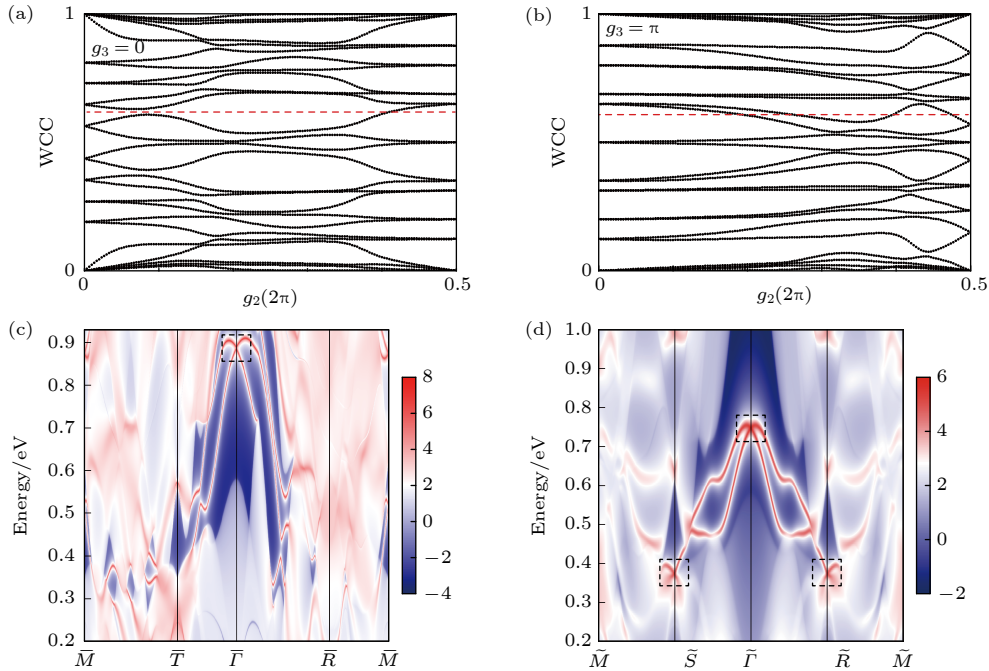


图 5 考虑 SOC 时, 未施加应变时 W_2CoB_2 中的拓扑性质 Wannier 电荷中心 (WCC) 在 (a) $g_3 = 0$ 和 (b) $g_3 = \pi$ 平面上的演化, g_2 和 g_3 分别代表原胞的倒格子基矢; (c) $(\bar{1}10)$ 面的表面态, 在 $\bar{\Gamma}$ 处出现了一个受拓扑保护的表面狄拉克锥 (以黑色虚线方框标记); (d) (001) 面的表面态, 在 \tilde{S} , $\tilde{\Gamma}$ 和 \tilde{R} 处各出现了一个受拓扑保护的表面狄拉克锥 (以黑色虚线方框标记)

Fig. 5. The topological properties of W_2CoB_2 without strain in the presence of SOC: Evolution of the Wannier charge centers (WCC) in (a) $g_3 = 0$ and (b) $g_3 = \pi$ planes, where g_2 and g_3 stand for reciprocal vectors of the primitive lattice; (c) the $(\bar{1}10)$ surface states, a topologically protected surface Dirac cone appears at the $\bar{\Gamma}$ point (marked by a black dotted square); (d) the (001) surface states, a topologically protected surface Dirac cone appears at each of the \tilde{S} , $\tilde{\Gamma}$ and \tilde{R} points (marked by black dotted squares).

我们计算了 (010), (100), (001), ($\bar{1}10$) 面的解理能, 结果如附录表 A2 所示. 从表中可以看到, ($\bar{1}10$) 面和 (001) 面的解理能比其余两个面的解理能更低, 相较之下这两个面将更易于在实验上解理. 此外, 通过文献调研我们发现 ($\bar{1}10$) 和 (001) 面的解理能数值低于 α - Al_2O_3 ($10\bar{1}0$) 面解理能的理论计算值 (7.18 J/m^2)^[55], 且已有研究表明 α - Al_2O_3 的 ($10\bar{1}0$) 面能通过双悬臂梁解理技术获得^[56], 这意味着 W_2CoB_2 的 ($\bar{1}10$) 面和 (001) 面有望在实验上解理.

为了进一步考虑非等轴应变对体系拓扑性质的影响, 我们计算了沿 z 轴方向对体系施加 -5% — 5% 单轴应变时的情况. 考虑 SOC 之后的能带结果如附录图 A5 所示. 从图 A5(a)—(c) 中可以看出, 当对体系施加 5% — 3.99% 的应变时, 体系在 X 点处的能隙逐渐减小, 此时体系保持与未施加应变时相同的 STI 相; 当处于 -3.99% 的应变时, X 点处的能隙闭合, 这意味着此时体系处于拓扑相变的临界点; 而当应变进一步减小时, X 点处的能隙逐渐增大, 此时体系转变为 WTI. 为了全面地展示体系拓扑相变的过程, 我们绘制了 X 点处能隙随应变的变化情况以及对应的拓扑相图, 结果如图 A5(d) 所示. 从图中可以看到, 体系在 -3.99% — 5% 的压力范围内始终保持 STI 相, 这表明体系具有鲁棒的拓扑性质.

4 结论

本文通过第一性原理计算, 对三元硼化物 W_2CoB_2 的电子结构和拓扑性质进行深入研究. 计算结果表明, W_2CoB_2 在不考虑 SOC 时呈现 NLSM 相, 其 BZ 中存在分别由镜面对称性和 PT 对称性保护的两种节线且部分节线相交形成节链结构. 在考虑 SOC 后, 这些节线打开了能隙, 体系转变为 Z_2 拓扑指标为 (1; 000) 的 STI, 并在 ($\bar{1}10$) 面上存在一个无能隙表面狄拉克锥. 当对体系施加 -5% — 5% 的等轴应变且不考虑 SOC 时, 体系依旧呈现 NLSM 相且节线的形状和数量均保持不变. 当考虑 SOC 后, 这些节线打开了能隙, 其中 $\Gamma \rightarrow X$ 方向上狄拉克锥处的能隙大小随着应变的增大而先减小后增大. 当应变增大至 5% 时, 该能隙增大至最大值 15 meV . 宇称计算结果表明, 体系在 -5% — 5% 的较大等轴压力范围内始终保持 STI 相, 而对体系施加沿 z 轴方向单轴应变的计算也表明体系在 -3.99% — 5% 的压力范围内始终保持 STI 相, 展现出鲁棒的非平庸拓扑性质. 本研究深化了对三元硼化物 W_2CoB_2 拓扑性质的理解, 为其后续的理论探索与实际应用提供了新的研究思路与方向.

附录 A

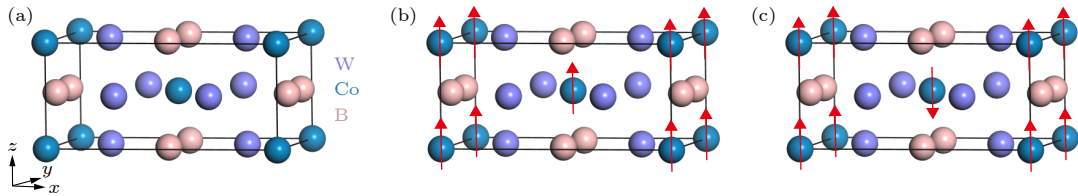


图 A1 初始磁矩沿 z 轴方向时 W_2CoB_2 不同磁构型示意图 (a) NM; (b) FM; (c) AFM

Fig. A1. Schematic of different magnetic configurations of W_2CoB_2 with the initial magnetic moment along the z axis: (a) NM; (b) FM; (c) AFM.

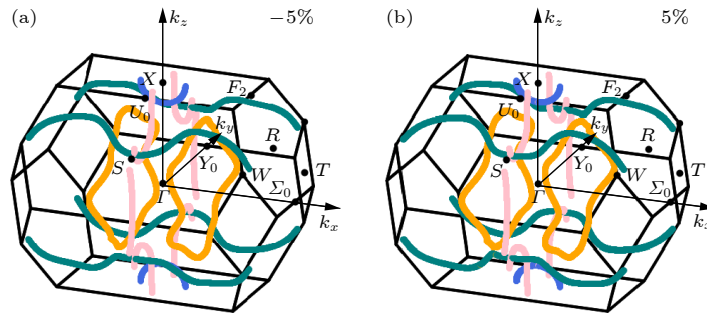


图 A2 不考虑 SOC 时, 处于 (a) -5% (等轴压缩) 和 (b) 5% (等轴拉伸) 应变的 W_2CoB_2 第一 BZ 中节线结构的三维视图

Fig. A2. When SOC is excluded, the 3D views of the nodal line structures in the first BZ of W_2CoB_2 under (a) -5% (equiaxial compression) and (b) 5% (equiaxial tension) strain.

表 A1 使用 LDA 以及 PBE 泛函计算得到的 W_2CoB_2 初始磁构型为 AFM, FM 构型与 NM 构型的自洽总磁矩及总能量差
Table A1. Self-consistent total magnetic moments and the total energy differences between the AFM, FM, and NM initial configurations for W_2CoB_2 , calculated using the LDA and PBE functions.

Parameters	Magnetic configuration		LDA		PBE		
			Magnetic moment/ μ_B	$\Delta E/eV$	Magnetic moment/ μ_B	$\Delta E/eV$	
No U	NM	—	0	0	0	0	
		$s // x$	0	1.0×10^{-8}	0	-1.0×10^{-8}	
	FM	$s // y$	0	1.0×10^{-8}	0	0	
		$s // z$	0	1.0×10^{-8}	0	-1.0×10^{-8}	
	AFM	$s // x$	0	1.0×10^{-8}	0	0	
		$s // y$	0	1.0×10^{-8}	0	0	
		$s // z$	0	1.0×10^{-8}	0	0	
	LDAUTYPE = 2 $J = 0$ eV	NM	—	0	0	0	0
			$s // x$	0	0	0	-1.0×10^{-8}
		FM	$s // y$	0	1.0×10^{-8}	0	0
$s // z$			0	3.0×10^{-8}	0.01	6.0×10^{-8}	
AFM		$s // x$	0	1.0×10^{-8}	0	-2.0×10^{-8}	
		$s // y$	0	0	0	-1.0×10^{-8}	
		$s // z$	0	0	0	-6.0×10^{-8}	
$U = 2$ eV		NM	—	0	0	0	0
			$s // x$	0.06	-5.1×10^{-5}	0.54	-7.6×10^{-4}
		FM	$s // y$	0.06	-5.5×10^{-5}	0.55	-1.4×10^{-3}
	$s // z$		0.06	-7.7×10^{-5}	0.76	-2.4×10^{-3}	
	AFM	$s // x$	0	1.0×10^{-8}	0	-2.0×10^{-6}	
		$s // y$	0	0	0	-1.7×10^{-6}	
$U = 3$ eV	NM	—	0	0	0	0	
		$s // x$	0	1.0×10^{-8}	0	-2.0×10^{-6}	
	FM	$s // y$	0	0	0	-1.7×10^{-6}	
		$s // z$	0	2.0×10^{-8}	0	-2.5×10^{-6}	
	AFM	$s // x$	0	1.0×10^{-8}	0	-2.0×10^{-6}	
		$s // y$	0	0	0	-1.7×10^{-6}	
LDAUTYPE = 1 $J = 1$ eV	NM	—	0	0	0	0	
		$s // x$	0	0	0	0	
	FM	$s // y$	0	-1.0×10^{-8}	0	0	
		$s // z$	0	0	0.01	-3.0×10^{-8}	
	AFM	$s // x$	0	-1.0×10^{-8}	0	-1.5×10^{-7}	
		$s // y$	0	0	0	-1.4×10^{-7}	
		$s // z$	0	0	0	-2.2×10^{-7}	
	$U = 3$ eV	NM	—	0	0	0	0
			$s // x$	-0.05	-2.8×10^{-5}	0.78	-3.4×10^{-3}
		FM	$s // y$	-0.05	-3.0×10^{-5}	0.75	-4.2×10^{-3}
$s // z$			-0.05	-2.7×10^{-5}	0.81	-5.4×10^{-3}	
AFM		$s // x$	0	3.0×10^{-8}	0	-2.7×10^{-5}	
		$s // y$	0	2.0×10^{-8}	0	-2.0×10^{-5}	
$U = 4$ eV	AFM	$s // z$	0	2.0×10^{-8}	0	-1.8×10^{-5}	
		$s // z$	0	2.0×10^{-8}	0	-1.8×10^{-5}	

表 A2 W_2CoB_2 不同表面的解理能
Table A2. Cleavage energies of W_2CoB_2 for different surfaces.

Surface	$E_{cl}/(J \cdot m^{-2})$	Surface	$E_{cl}/(J \cdot m^{-2})$
(010)	8.36	(100)	7.20
(001)	7.08	($\bar{1}10$)	7.08

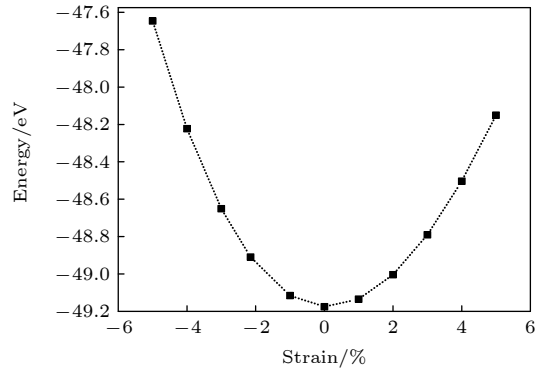


图 A3 体系总能量随应变的变化情况

Fig. A3. Total energy of the system as a function of strain.

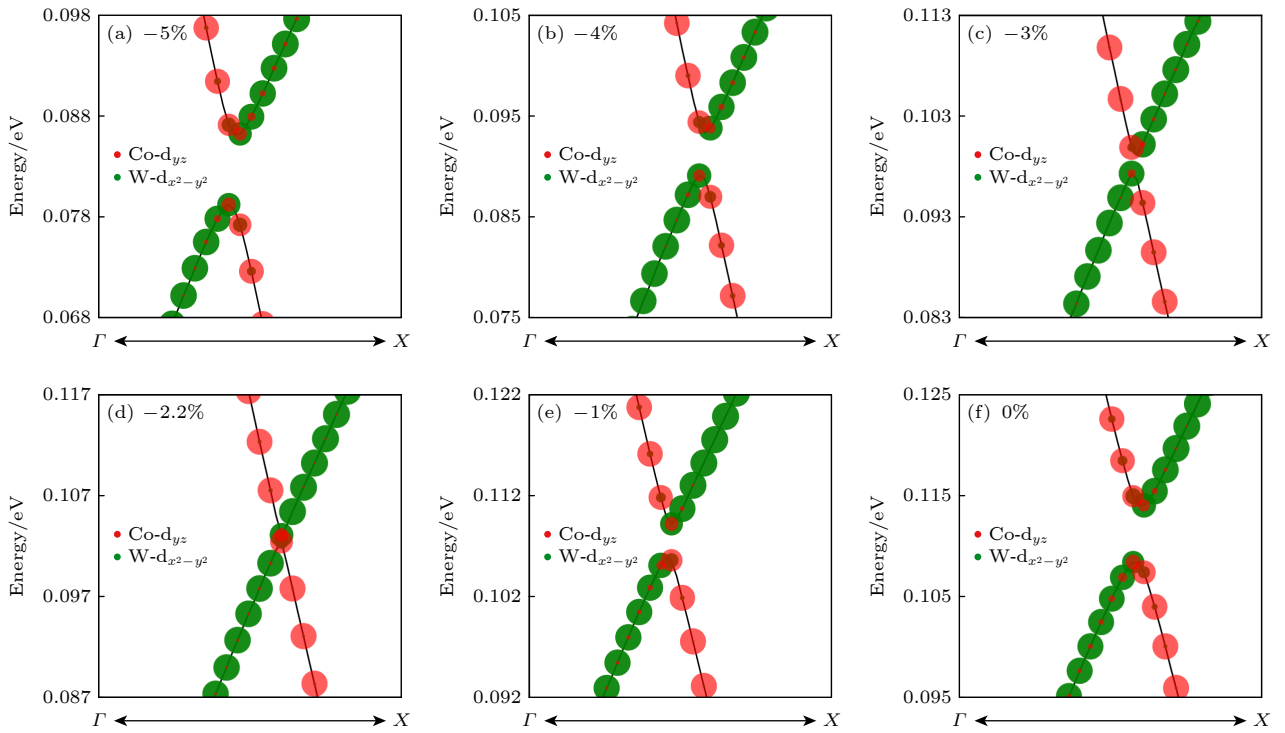
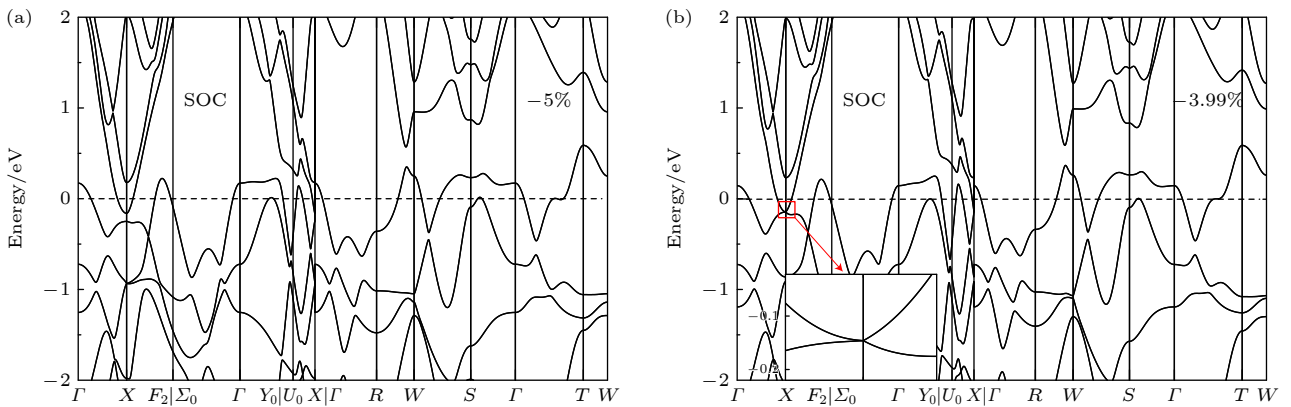


图 A4 当考虑 SOC 时, 处于不同应变下的 W_2CoB_2 在 $\Gamma \rightarrow X$ 方向上的轨道投影能带图

Fig. A4. When SOC is included, the orbital-projected band structures of W_2CoB_2 along the $\Gamma \rightarrow X$ direction under different strains.



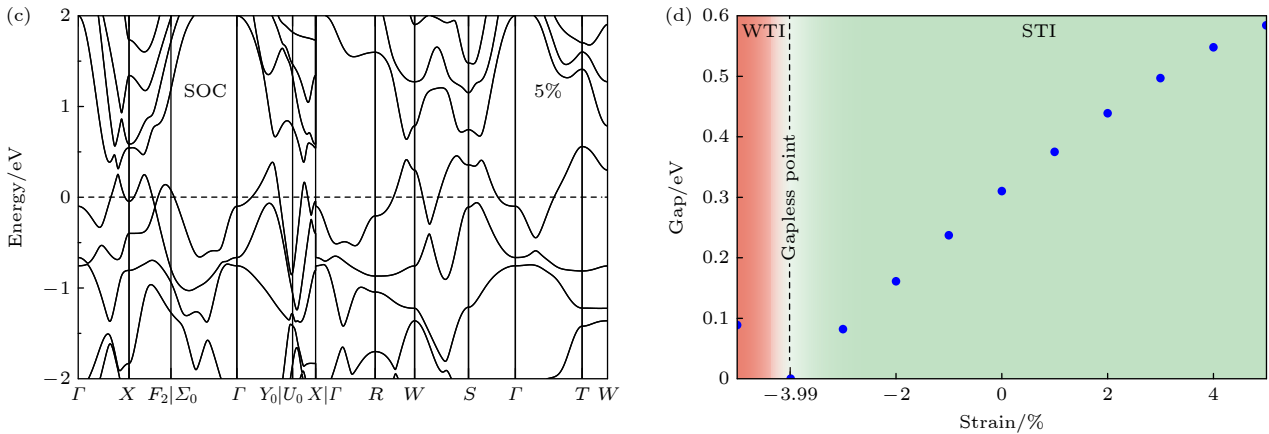


图 A5 考虑 SOC 时, W_2CoB_2 处于 (a) -5%; (b) -3.99%; (c) 5% 单轴应变时的能带结构; (d) 单轴应变驱动的拓扑相变图, 蓝色点代表 X 点处的能隙随压力的变化

Fig. A5. The SOC band structures of W_2CoB_2 under (a) -5%; (b) -3.99%; (c) 5% uniaxial strain; (d) topological phase transition diagram driven by uniaxial strain, the blue dots represent the variation of the gap at the X point with strain.

参考文献

- [1] Hasan M Z, Kane C L 2010 *Rev. Mod. Phys.* **82** 3045
- [2] Weng H M, Dai X, Fang Z 2016 *J. Phys. : Condens. Matter* **28** 303001
- [3] Yuan D W, Zhang S, Chen J, Weng H M, Zhang W 2025 *Phys. Rev. B* **112** 085122
- [4] Hu Y F, Shao D X, Yuan D W, Zhang W 2025 *Phys. Scr.* **100** 035913
- [5] Fu L, Kane C L 2007 *Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys.* **76** 045302
- [6] Zhang H J, Liu C X, Qi X L, Dai X, Fang Z, Zhang S C 2009 *Nat. Phys.* **5** 438
- [7] Xia Y, Qian D, Hsieh D, Wray L, Pal A, Lin H, Bansil A, Grauer D, Hor Y S, Cava R J, Hasan M Z 2009 *Nat. Phys.* **5** 398
- [8] Fu L, Kane C L, Mele E J 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 106803
- [9] Yan B, MÜchler L, Felser C 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 116406
- [10] Lee K, Lange G F, Wang L L, Kuthanazhi B, Trevisan T V, Jo N H, Schrumk B, Orth P P, Slager R J, Canfield P C, Kaminski A 2021 *Nat. Commun.* **12** 1855
- [11] Grinberg I H, Lin M, Benalcazar W A, Hughes T L, Bahl G 2020 *Phys. Rev. Appl.* **14** 064042
- [12] Young S M, Zaheer S, Teo J C Y, Kane C L, Mele E J, Rappe A M 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 140405
- [13] Wang Z J, Sun Y, Chen X Q, Franchini C, Xu G, Weng H M, Dai X, Fang Z 2012 *Phys. Rev. B* **85** 195320
- [14] Wang Z J, Weng H M, Wu Q S, Dai X, Fang Z 2013 *Phys. Rev. B* **88** 125427
- [15] Xiong J, Kushwaha S K, Liang T, Krizan J W, Hirschberger M, Wang W D, Cava R J, Ong N P 2015 *Science* **350** 413
- [16] Ma W, Yang Z, Ma D P, Lv Z H, Liu Z F 2025 *Phys. Rev. B* **112** 094111
- [17] Xu G, Weng H M, Wang Z J, Dai X, Fang Z 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 186806
- [18] Weng H M, Fang C, Fang Z, Bernevig B A, Dai X 2015 *Phys. Rev. X* **5** 011029
- [19] Son D T, Spivak B Z 2013 *Phys. Rev. B* **88** 104412
- [20] Huang X C, Zhao L X, Long Y J, Wang P P, Chen D, Yang Z H, Liang H, Xue M Q, Weng H M, Fang Z, Dai X, Chen G F 2015 *Phys. Rev. X* **5** 031023
- [21] Yu R, Wu Q S, Fang Z, Weng H M 2017 *Phys. Rev. Lett.* **119** 036401
- [22] Ogorzałek Z, Lee C C, Domagala J Z, Zajkowska-Pietrzak W, Kret S, Bożek R, Pacuski W, Lutsyk I, Ryś W, Kowalczyk P J, Tokarczyk M, Polakowski M, Wasik D, Sadowski J, Huang B H, Lin H, Gryglas-Borysiewicz M 2025 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **17** 51386
- [23] Fang C, Weng H M, Dai X, Fang Z 2016 *Chin. Phys. B* **25** 117106
- [24] Li S, Yu Z M, Liu Y, Guan S, Wang S S, Zhang X M, Yao Y G, Yang S A 2017 *Phys. Rev. B* **96** 081106
- [25] Bian G, Chang T R, Sankar R, Xu S Y, Zheng H, Neupert T, Chiu C K, Huang S M, Chang G Q, Belopolski I, Sanchez D S, Neupane M, Alidoust N, Liu C, Wang B K, Lee C C, Jeng H T, Zhang C L, Yuan Z J, Jia S, Bansil A, Chou F C, Lin H, Hasan M Z 2016 *Nat. Commun.* **7** 10556
- [26] Zhang Y, Zhang Q M, Qian S F, Yang X X, Sheng X W 2025 *Phys. Rev. B* **112** 214428
- [27] Bzdušek T, Wu Q S, Rüttig A, Sigrist M, Soluyanov A A 2016 *Nature* **538** 75
- [28] Feng X, Yue C M, Song Z D, Wu Q S, Wen B 2018 *Phys. Rev. Mater.* **2** 014202
- [29] Yamakage A, Yamakawa Y, Tanaka Y, Okamoto Y 2016 *J. Phys. Soc. Jpn.* **85** 013708
- [30] Yu R, Weng H M, Fang Z, Dai X, Hu X 2015 *Phys. Rev. Lett.* **115** 036807
- [31] Chang T R, Pletikosic I, Kong T, Bian G, Huang A, Denlinger J, Kushwaha S K, Sinkovic B, Jeng H T, Valla T, Xie W, Cava R J 2019 *Adv. Sci.* **6** 1800897
- [32] Chan Y H, Chiu C K, Chou M Y, Schnyder A P 2016 *Phys. Rev. B* **93** 205132
- [33] Huh Y, Moon E G, Kim Y B 2016 *Phys. Rev. B* **93** 035138
- [34] Takagi K I 2001 *Mater. Chem. Phys.* **67** 214
- [35] Yang G Q, Yin H Q, Xu Z F, Zhang T, Yang J, Gao F M, Zheng Q J, Qu X H 2019 *J. Alloys Compd.* **791** 761
- [36] Shi Z T, Yin H Q, Xu Z F, Zhang T, Yang G Q, Zheng Q J, Rao R S, Yang J, Gao F M, Wu M, Qu X H 2019 *Intermetallics* **114** 106573
- [37] Yuan D W, Yue C M, Hu Y F, Zhang W 2024 *Chin. Phys. Lett.* **41** 037304
- [38] Xu S L, Hu Y F, Yuan D W, Chen W, Zhang W 2023 *Acta. Phys. Sin.* **72** 127102 (in Chinese) [徐诗琳, 胡岳芳, 袁丹文, 陈

- 巍, 张薇 2023 *物理学报* **72** 127102]
- [39] Yuan D W, Hu Y F, Yang Y M, Zhang W 2021 *Chin. Phys. Lett.* **38** 117301
- [40] Wu J Y, Wang J Q, Sun B Z, Wu M S, Xu B, Liu G 2025 *Acta. Phys. Sin.* **74** 176801 (in Chinese) [吴俊宇, 万佳琦, 孙宝珍, 吴木生, 徐波, 刘刚 2025 *物理学报* **74** 176801]
- [41] Wang Y T, Hu Y F, Yuan D W, Chen W, Zhang T, Zhang W 2026 *Acta. Phys. Sin.* **75** 060714 (in Chinese) [王娅童, 胡岳芳, 袁丹文, 陈巍, 张坦, 张薇 2026 *物理学报* **75** 060714]
- [42] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Comput. Mater. Sci.* **6** 15
- [43] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 11169
- [44] Blöchl P E 1994 *Phys. Rev. B* **50** 17953
- [45] Kresse G, Joubert D 1999 *Phys. Rev. B* **59** 1758
- [46] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [47] Dudarev S L, Botton G A, Savrasov S Y, Humphreys C J, Sutton A P 1998 *Phys. Rev. B* **57** 1505
- [48] Marzari N, Vanderbilt D 1997 *Phys. Rev. B* **56** 12847
- [49] Souza I, Marzari N, Vanderbilt D 2001 *Phys. Rev. B* **65** 035109
- [50] Wu Q S, Zhang S N, Song H F, Troyer M, Soluyanov A A 2018 *Comput. Phys. Commun.* **224** 405
- [51] Rieger W, Nowotny H, Benesovsky F 1966 *Monatsh. Chem.* **97** 378
- [52] Saad A, Gao Y, Ramiere A, Chu T Z, Yasin G, Wu Y Y, Ibraheem S, Wang M, Guo H C, Tsiakaras P, Cai X K 2022 *Small* **18** 2201067
- [53] Yu R, Qi X L, Bernevig A, Fang Z, Dai X 2011 *Phys. Rev. B* **84** 075119
- [54] Grusdt F, Abanin D, Demler E 2014 *Phys. Rev. A* **89** 043621
- [55] Manassidis I, Gillan M J 1994 *J. Am. Ceram. Soc.* **77** 335
- [56] Wiederhorn S M 1969 *J. Am. Ceram. Soc.* **52** 485

Robust topological properties in ternary boride W_2CoB_2 *

WU Shuwen^{1)2)#} YUAN Danwen^{1)2)#} YUE Changming³⁾ HU Yuefang¹⁾²⁾
 CHEN Wei^{4)5)†} ZHANG Tan^{6)‡} ZHANG Wei^{1)2)4)††}

1) (*College of Physics and Energy, Fujian Normal University, Fujian Provincial Key Laboratory of Quantum Manipulation and New Energy Materials, Fuzhou 350117, China*)

2) (*Fujian Provincial Engineering Technology Research Center of Solar Energy Conversion and Energy Storage, Fuzhou 350117, China*)

3) (*State Key Laboratory of Quantum Functional Materials, Department of Physics, Southern University of Science and Technology, Shenzhen 518055, China*)

4) (*Academy of Carbon Neutrality of Fujian Normal University, Fuzhou 350007, China*)

5) (*College of Chemistry and Materials Science, Fujian Normal University, Fuzhou 350007, China*)

6) (*Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China*)

(Received 12 December 2025; revised manuscript received 4 March 2026)

Abstract

Topological electronic materials have become a prominent research frontier in condensed matter physics. Using first-principles calculations, we study the topological electronic properties of the ternary boride W_2CoB_2 . After detailed Hubbard U calculation tests, we select the non-magnetic state as the ground state of the system. Firstly, we calculate the band structures of this material. When the spin-orbit coupling (SOC) is ignored, several nodal lines appear in the first Brillouin zone of W_2CoB_2 , and the material shows a topological nodal line semimetal phase. These nodal lines are protected by the mirror symmetry or the combined space-inversion and time-reversal symmetry. Some nodal lines form closed nodal rings, which intersect with the infinite nodal lines extending throughout the whole Brillouin zone, forming nodal chains. All of the nodal lines are gapped when

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12374159, 11974076, 1247041908), the Key Project of Natural Science Foundation of Fujian Province, China (Grant Nos. 2021J02012, 2024J01289), and the Research Foundation of the Academy of Carbon Neutrality of Fujian Normal University, China (Grant No. TZH2022-05).

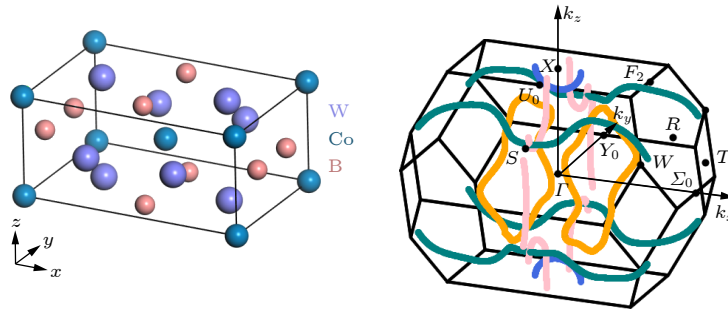
These authors contributed equally.

† Corresponding author. E-mail: chenwei@fjnu.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: tanzhang2016@outlook.com

†† Corresponding author. E-mail: zhangw721@163.com

SOC is included, and the system transitions into a strong topological insulator with Z_2 invariant of (1; 000). An odd number of gapless surface Dirac cones appear on the both $(\bar{1}10)$ and (001) surfaces, with the two branches connecting the valence and conduction bands respectively, confirming the nontrivial topological properties of W_2CoB_2 . The cleavage energies of these two surfaces are approximately 7.08 J/m^2 , indicating the potential of these surfaces for experimental cleavage. The topological phase of this material remains stable under strain. After applying -5% to 5% equiaxial strain, the shape and number of nodal lines are not affected, and the system still shows the topological nodal line semimetal phase in the absence of SOC. When SOC is considered, the system remains in the strong topological insulator phase. Specifically, the band gap at the Dirac point along the $\Gamma \rightarrow X$ direction first decreases and then increases with increasing strain. It decreases to a minimum value of 0.63 meV under the strain of -2.2% and then reaches the maximum value of 15 meV when the strain increases to 5% . The band gap variation is attributed to the hybridization between the W- $d_{x^2-y^2}$ and Co- d_{yz} orbitals. This hybridization initially weakens as the strain increases from -5% to -2.2% , but strengthens as the strain is further increased. Furthermore, when the uniaxial strain along z -axis ranging from 5% to -3.99% is applied, the band gap at the X point gradually decreases, and the system remains the strong topological insulator phase. When the uniaxial strain reaches -3.99% , the band gap at the X point closes, indicating the topological phase transition critical point. With the further decrease of strain, this band gap opens again, and the system transitions into a weak topological insulator. This study systematically reveals the robust nontrivial topological electronic properties in the ternary boride W_2CoB_2 , laying the foundation for the research on topological nodal line semimetal and the design of low-dissipation spintronic devices.



Keywords: topological nodal line semimetal, topological insulator, strain

DOI: [10.7498/aps.75.20251711](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251711)

CSTR: [32037.14.aps.75.20251711](https://cstr.net.cn/32037.14.aps.75.20251711)



三元硼化物 W_2CoB_2 中鲁棒的拓扑性质

吴舒雯 袁丹文 岳长明 胡岳芳 陈巍 张坦 张薇

Robust topological properties in ternary boride W_2CoB_2

WU Shuwen YUAN Danwen YUE Changming HU Yuefang CHEN Wei ZHANG Tan ZHANG Wei

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 110705 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20251711

CSTR: 32037.14.aps.75.20251711

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251711>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

磁性拓扑绝缘体中的量子输运现象

Quantum transport phenomena in magnetic topological insulators

物理学报. 2023, 72(17): 177301 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230690>

应变调控下Zr掺杂石墨烯中鲁棒的拓扑性质

Robust topological properties in Zr-doped graphene under strain regulation

物理学报. 2026, 75(6): 177301 <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251487>

应变调控下 $Tl_2Ta_2O_7$ 中的拓扑相变

Topological phase transitions in $Tl_2Ta_2O_7$ under strain regulation

物理学报. 2023, 72(12): 127102 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230043>

拓扑绝缘体中量子霍尔效应的研究进展

Research progress of quantum Hall effect in topological insulator

物理学报. 2023, 72(17): 177302 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230698>

节线半金属 AlB_2 水环境下发生吸附后拓扑表面态变化

Variations of topological surface states of nodal line semimetal AlB_2 after adsorption in aqueous environment

物理学报. 2024, 73(12): 127101 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240404>

单层二维量子自旋霍尔绝缘体 $1T'-WTe_2$ 研究进展

Research progress of two-dimensional quantum spin Hall insulator in monolayer $1T'-WTe_2$

物理学报. 2022, 71(12): 127308 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220100>