

PNAS | CALYPSO再立新功，马琰铭院士团队设计出热力学稳定的三元富氢室温超导高压相

吉大物理 吉林大学物理学院 2024年06月21日 13:27

PNAS

CALYPSO再立新功

马琰铭院士团队设计出热力学稳定的三元富氢室温超导高压相

日前，物质模拟方法与软件教育部重点实验室刘寒雨教授等在“高压下氢笼合物结构的富氢高温超导体”研究中获得新进展。相关研究成果以“Predicted hot superconductivity in $\text{LaSc}_2\text{H}_{24}$ under pressure”为题，于2024年6月20日在线发表于《美国科学院院刊》。

近年来，高压强极端条件下的富氢化合物研究取得了多项突破性进展。值得指出的是，马琰铭院士在2012年利用自主研发的CALYPSO结构预测方法与软件，在高压下计算预测了首个氢笼合物结构 CaH_6 (PNAS 109, 6463, 2012)，在150GPa其超导温度高达235K，明确提出在氢笼合物中寻找室温超导体的学术思想，并被后续的实验证实。受该学术思想启发，后续利用CALYPSO结构预测方法与软件预测了一系列超导温度超过200 K的氢笼合物结构超导体(如 YH_6 、 YH_9 和 LaH_{10} 等; PNAS 114 6990, 2017; PRL 119, 107001, 2017等)被实验成功制备，其中 LaH_{10} 的超导温度高达250-260K，是目前公认的超导温度纪录，这为室温超导电性的研究和发现带来了历史机遇。

马琰铭院士团队还将富氢高温超导体的设计从二元体系拓展到了三元体系，目标是在三元体系中利用两种不同金属元素进行协同调控，发现新型氢笼合物结构，提升富氢体系的超导温度。如在实验上团队引入相比Ce更轻的La，将 CeH_9 的超导温度提升了80% (Nat. Commun. 13, 5952, 2022)。团队也利用CALYPSO结构预测方法与软件计算预测了氢笼合物结构 $\text{Li}_2\text{MgH}_{16}$ (PRL 123, 097001, 2019)，其理论超导温度在250GPa压强条件下达到创纪录的~473K (~200°C)，进而在国际本领域首次提出了“热”超导体这一概念。尽管如此，热力学计算表明该 $\text{Li}_2\text{MgH}_{16}$ 为亚稳结构。因此，在高压下设计热力学稳定的室温超导体是领域的关注焦点(相关氢笼合物结构富氢高温超导体的研究进展见综述Nat. Sci. Rev. 11, nwad270, 2024)。

为解决上述提到的关键科学问题，本工作以计算发现热力学稳定的三元氢化物室温超导体为研究目标，将相比于La同族中最轻的元素Sc引入到La-H体系，进而降低体系的德拜温度，优化其超导温度。利用CALYPSO结构预测方法与软件，计算发现 $\text{LaSc}_2\text{H}_{24}$ 在167-300GPa是热力学稳定的。该结构由La为中心的 H_{30} 笼子和Sc为中心的 H_{24} 笼子组成，理论超导温度可达室温(见图1)。当前研究为在高压下实验发现新型室温超导体提供了参考。

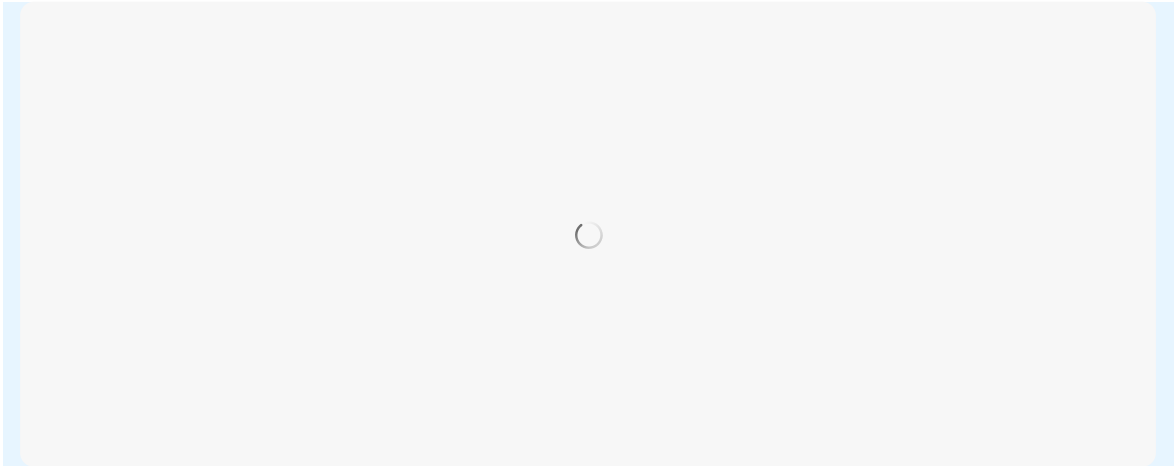
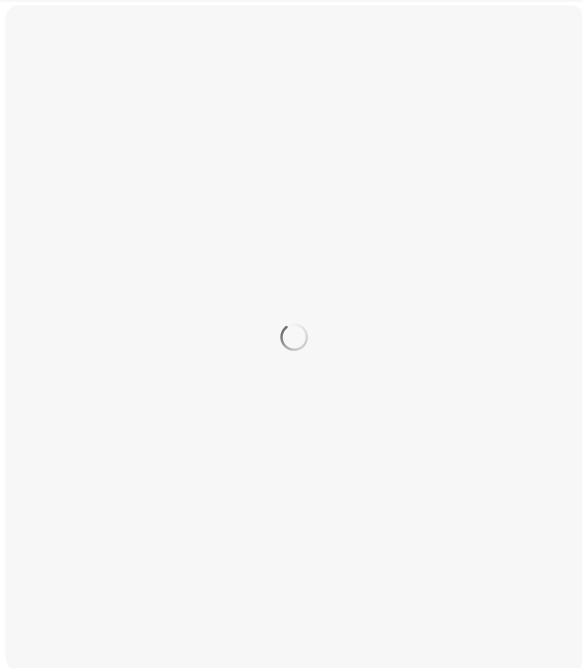
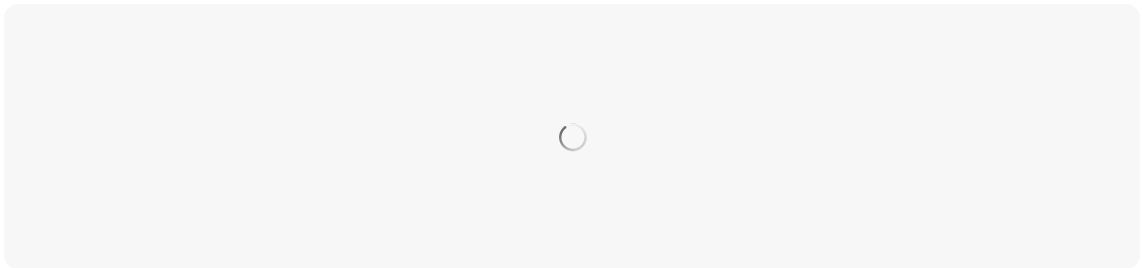
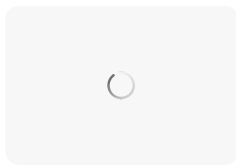


图1：(A) 新型高温超导体 $\text{LaSc}_2\text{H}_{24}$ 的晶体结构示意图。(B) 典型氢化物超导材料的超导温度与压强的关系，其中未填充和半填充的符号分别表示亚稳和稳定结构。

吉林大学鼎新学者何新玲博士和博士研究生赵文博为本文的共同第一作者。物质模拟方法与软件教育部重点实验室刘寒雨教授为本文通讯作者。物质模拟方法与软件教育部重点实验室谢禹教授、马琰铭院士、英国爱丁堡大学Hermann教授和美国科学院院士Hemley为本文的合作者。该研究工作得到了国家重点研发计划、国家自然科学基金等项目的资助。

全文链接:

<https://www.pnas.org/doi/10.1073/pnas.2401840121>



科技新闻 · 目录 ≡

◀ 上一篇

赵宏健教授等人在钪基铁电超晶格材料设计方面取得进展

下一篇 ▶

JHEP | 物理学院本科生毛薪澄在BMS场论领域取得重要进展