



首页 概况简 师资队 科学研 人才培 校友专 人才招 党群工 对外交 行政工
介 伍 究 养 栏 聘 作 流 作

科学研究

科研动态

科研机构

学术活动

科技奖励

仪器共享平台

科研动态

当前位置: 首页 > 科学研究 > 科研动态 > 正文

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

时间: 2024-06-21 10:03:33 点击: 805

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

近年来，高压强极端条件下的富氢化合物
了多项突破性进展。值得指出的是，马琰铭院
年利用自主研发的CALYPSO结构预测方法与软
压下计算预测了首个氢笼合物结构 CaH_6 （
6463, 2012），在150GPa其超导温度高达235K
出在氢笼合物中寻找室温超导体的学术思想，
的实验证实。受该学术思想启发，后续利用
构预测方法与软件预测了一系列超导温度超
氢笼合物结构超导体（如 YH_6 、 YH_9 和 LaH_{10} 等；
6990, 2017; PRL 119, 107001, 2017等）被实
备，其中 LaH_{10} 的超导温度高达250–260K，是
的超导温度纪录，这为室温超导电性的研究开
了历史机遇。

马琰铭院士团队还将富氢高温超导体的研
体系拓展到了三元体系，目标是在三元体系中
不同金属元素进行协同调控，发现新型氢笼合
提升富氢体系的超导温度。如在实验上团队引

更轻的La，将CeH₉的超导温度提升了8 K (Commun. 13, 5952, 2022)。团队也利用CALYX预测方法与软件计算预测了氢笼合物结构Li₂MgH₁₆ (Commun. 123, 097001, 2019)，其理论超导温度在250 GPa下达到创纪录的~473K (~200℃)，进而在国际上首次提出了“热”超导体这一概念。尽管如此，计算表明该Li₂MgH₁₆为亚稳结构。因此，在高温热力学稳定的室温超导体是领域的关注焦点。富氢笼合物结构富氢高温超导体的研究进展见综述N. Rev. 11, nwad270, 2024)。

为解决上述提到的关键科学问题，本工作发现热力学稳定的三元氢化物室温超导体为研究。相比于La同族中最轻的元素Sc引入到La-H体系，降低体系的德拜温度，优化其超导温度。利用第一性原理预测方法与软件，计算发现LaSc₂H₂₄在167 GPa下热力学稳定的。该结构由La为中心的H₃₀笼子和Sc为中心的H₂₄笼子组成，理论超导温度可达室温(以前研究为在高压下实验发现新型室温超导体)。考。

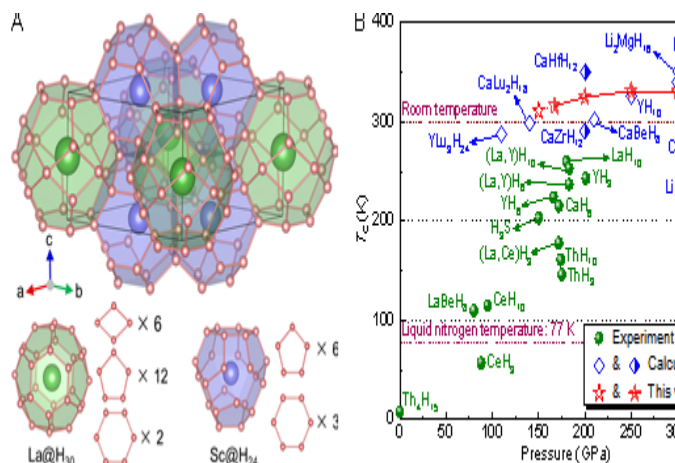


图1：（A）新型高温超导体LaSc₂H₂₄的晶体结构示意图。

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为本文的共同第一作者。物质模拟方法与软件点实验室刘寒雨教授为本文通讯作者。物质模拟软件教育部重点实验室谢禹教授、马琰铭院士、丁堡大学Hermann教授和美国科学院院士Hem的合作者。该研究工作得到了国家重点研发计划、自然科学基金等项目的资助。

全文链接：

<https://www.pnas.org/doi/10.1073/pnas.20121>

0121

