

深圳先进院在新型高温低压超导材料探索和超导机理研究方面取得进展

近日，中国科学院深圳先进技术研究院材料所光子信息与能源材料研究中心在新型高温低压超导材料研究领域获新进展。理论预言指出铍掺杂的甲烷分子在低压下是一种金属并且具有超导电性，基于大量的计算数据揭示了铍掺杂的甲烷分子的超导电性规律。相关成果以Metallization and superconductivity in methane doped by beryllium at low pressure（《低压下铍掺杂甲烷的金属化和超导性》）为题发表在期刊Physical Chemistry Chemical Physics（2019，DOI：10.1039/C9CP06008A）上。

甲烷(CH_4)

作为最简单的有机材料之一，在超导体的研究中具有巨大的潜力。甲烷是由非常轻的元素组成的，根据BCS理论，如果它能转化成金属，将是一种潜在的高温超导体。

然而，纯 CH_4

在常压下是气体，且为宽带隙半导体，即使对其加压到500万个大气压，理论预测其仍不是金属态。这表明通过简单的加压使纯 CH_4 转变为金属面临巨大的挑战。

为解决上述问题，深圳先进院博士钟国华与其合作者基于粒子群优化、密度泛函理论和密度泛函微扰理论，提出了一种实现绝缘体到金属转变的新思路，即通过在甲烷分子中掺杂金属铍。研究人员考虑了铍掺杂甲烷分子的晶体结构、电子态和动力学性质以及

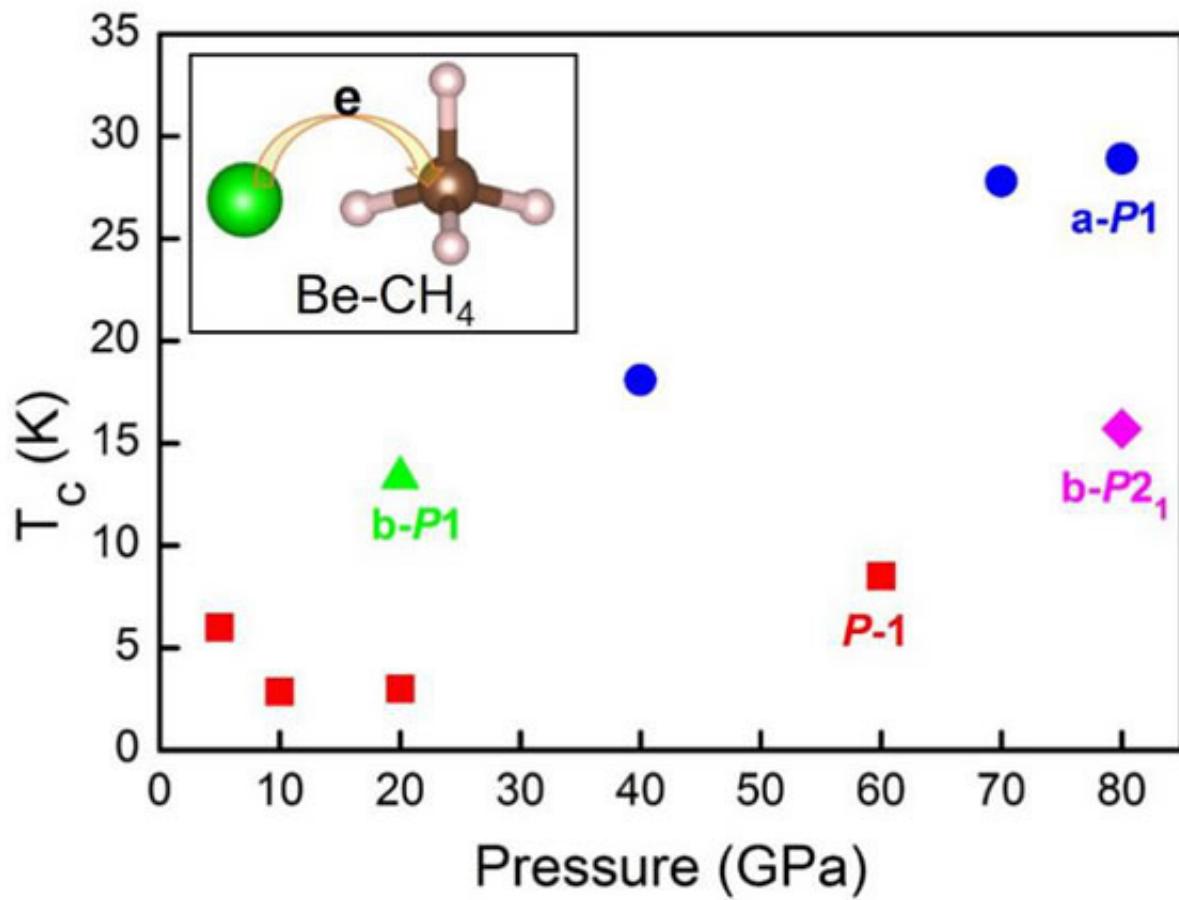
电子-

声子相互作用。结果显示，具有P-1空间群结构的 BeCH_4

在常压下就可以转变为金属态，并发生超导转变，随着压力的增加最高超导临界温度可以提高近30K。这说明电子掺杂的 CH_4

有望成为一种兼具低压和高临界温度的新型超导体。相关研究结果系统地揭示了这种新型超导体在不同压强下空间结构、金属环和超导电性的变化规律，对于探索新型高温低压超导体具有重要的指导意义。

该研究得到深圳市基础研究布局项目、孔雀计划、国家自然科学基金委联合基金和中国工程物理研究院项目等的资助。



预测的不同相BeCH₄的超导临界温度 T_c 随压强的变化

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/150020.html>