

超导三元氢化物 CaYH_{12} 电子及空穴掺杂调控的第一性原理研究*

林建华 崔佳浩 庄全†

(内蒙古民族大学化学与材料学院, 通辽 028000)

(2025 年 2 月 14 日收到; 2025 年 4 月 16 日收到修改稿)

近年来, 高压下的富氢化合物被认为是室温超导体的最佳候选体系之一, 如何降低富氢化合物稳定所需压力并保持其优异超导电性是目前该领域重要的科学问题. 研究利用第一性原理计算方法探索了电子及空穴掺杂对三元氢化物 $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 动力学稳定性和超导电性的调控作用. 结果表明, 空穴掺杂可在晶格中产生“化学预压缩”效应, 消除其在较低压力下的虚频声子, 使其在较低压力下保持动力学稳定. 当空穴掺杂浓度达到 1.1 e/cell 时, $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 的动力学稳定压力由 180 GPa 降至 70 GPa, 且同时可以保持约 194 K 的超导转变温度. 由此可见, 空穴掺杂是一种实现 $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 超导电性优化 (低稳定压力、高温超导) 的有效策略. 本工作为三元氢化物在较低压力下实现高温超导提供了新途径, 并为相关实验研究提供了理论支撑.

关键词: 超导三元氢化物, 第一性原理计算, 空穴掺杂, 稳定压力调控**PACS:** 74.70.-b, 74.72.Ek, 74.72.Gh, 74.25.Kc**DOI:** 10.7498/aps.74.20250180**CSTR:** 32037.14.aps.74.20250180

1 引言

自 1911 超导体被发现以来, 寻找室温超导体一直是凝聚态物理和材料科学等领域的研究热点之一. 根据 BCS 理论 (Bardeen-Cooper-Schrieffer theory), 金属氢因其高德拜温度和强电子-声子耦合而被认为是潜在的高温甚至室温超导体^[1]. 然而固体金属氢的实现需要高达 400 GPa 的极端压力, 这对实验来说是一个巨大的挑战^[2]. Ashcroft^[3]提出的化学预压缩作用指出以氢为主导的富氢化合物可以在较低的压力实现金属化, 并且也具有高温超导性. 这一理论激发了人们在富氢化合物中寻找室温超导体的热情, 重新点燃了实现室温超导的希望.

从自然界中存在的氢化物到高压下的非化学计量比氢化物, 越来越多的二元氢化物在理论和实验中被陆续发现. 如 CaH_6 , H_3S , MgH_6 , YH_6 , YH_9 , YH_{10} , LaH_{10} , LuH_6 等一系列二元氢化物被预测具有超过 200 K 的超导转变温度 (T_c)^[4-12]. 其中 H_3S 中 200 K 和 LaH_{10} 中 257 K 的高温超导电性已被后续的实验所验证, 先后刷新了高温超导的记录, 具有重要的里程碑意义^[13,14]. 此外, CeH_9 , YH_6 , YH_9 , BaH_{12} , CaH_6 , EuH_6 等一系列二元氢化物也在理论预测基础上, 陆续被高压实验合成^[15-22]. 尽管这些二元氢化物的稳定压力远低于实现金属氢的压力, 但是超 MPa 级的高压仍然面临巨大的实验挑战.

近年来, 科研工作者们已经探索了新的路径, 以寻找性能更为优异的高温超导体. 相比于二元氢化物, 三元体系的氢化物具有更为丰富的化学组成和

* 国家自然科学基金 (批准号: 12264038, 11904187) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zhuangquan21@outlook.com

结构,因而可能具备更为新颖的性能^[23-27]. Zhang 等^[28]从理论上设计了一系列具有萤石骨架的 AXH_8 型三元氢化物 ($A = \text{Sc, Ca, Y, Sr, La, Ba, X} = \text{Be, B, Al}$), 并预测出上述化合物在高压下具有较高的超导转变温度 (T_c), 其中 LaBeH_8 已经被后续实验证实可在 80 GPa 压力下呈现出高达 110 K 的 T_c ^[29]. Sun 等^[30]通过将 Li 原子掺杂到二元超导体 MgH_{16} 中, 使 $\text{Li}_2\text{MgH}_{16}$ 在 250 GPa 压力下 T_c 达到 473 K. 此外, Xie 等^[31]和 Liang 等^[32]分别在 Ca-Y-H 体系中, 预测了具有 $Pm\bar{3}m$ 和 $Fd\bar{3}m$ 空间群的 CaYH_{12} 化合物, 其中 $Pm\bar{3}m$ 相在 180 GPa 的压力下, T_c 为 230 K. 此外, La-B-H, K-B-H, Li-Na-H, La-Ce-H, Y-Ce-H, La-Y-H 等诸多三元氢化物也被进行了深入的探索^[33-37]. 然而, 如何实现富氢化合物在较低压力动力学稳定并保持良好超导电性, 有待进一步探索.

电子和空穴掺杂已经被证明是调控材料电子结构与超导电性的一种有效手段^[38,39]. 最近, Wang 等^[40]对在实验上 100 GPa 压力下合成的 CeH_9 进行理论模拟, 通过空穴掺杂成功使费米能级 (E_F) 下移 1.6 eV, 从而使费米能级处出现了范霍夫奇点, 最终将 CeH_9 的 T_c 由 74 K 提升至 136 K. 此外, Chen 等^[41]通过对 $P6_3/mmc(\text{ZrH}_{10})$ 和 $P6_3/mmc(\text{HfH}_{10})$ 进行电子和空穴掺杂, 成功使它们的动力学稳定压力由 300 GPa 降至 200 GPa, 同时保持了优异的超导性. 根据 Xie 等^[31]的报道, 高压下具有高温超导电性的 $Pm\bar{3}m(\text{CaYH}_{12})$ 在压力降低到 180 GPa 以下时, 最低一支声学支会出现虚频, 导致该结构动力学不稳定, 这与二元氢化物 $P6_3/mmc(\text{ZrH}_{10})$ 和 $P6_3/mmc(\text{HfH}_{10})$ 低压下声子虚频振动情况类似, 因此电荷掺杂有望对 $Pm\bar{3}m(\text{CaYH}_{12})$ 中的动力学稳定压力实现有效调控, 进而可为三元氢化物在低压下实现高温超导电性的调控策略提供理论指导.

本研究以在 180 GPa 高压下具有 230 K 超导转变温度的 $Pm\bar{3}m(\text{CaYH}_{12})$ 为研究对象, 系统分析了电子和空穴掺杂对 $Pm\bar{3}m(\text{CaYH}_{12})$ 的动力学稳定性和超导电性的调控作用. 结果表明, 电子掺杂会导致 $Pm\bar{3}m(\text{CaYH}_{12})$ 在低压力下虚频声子软化程度增大, 而空穴掺杂可在其晶格中产生“化学预压缩”效应, 消除其在较低压力下的虚频声子, 实现较低压力下的动力学稳定. 在 1.1 e/cell 的空穴掺杂条件下, $Pm\bar{3}m(\text{CaYH}_{12})$ 动力学稳定所需

压力降低至 70 GPa, 同时其 T_c 仍可达 194 K, 因此空穴掺杂是实现 $Pm\bar{3}m(\text{CaYH}_{12})$ 超导电性优化 (低压力、高 T_c) 的一种潜在的有效策略.

2 计算参数

使用基于密度泛函理论的 QE (Quantum Espresso) 软件^[42]进行结构驰豫、电子能带结构与态密度、声子色散曲线、声子态密度及电-声子耦合等计算. 交换关联泛函选用梯度校正 (GGA) 下的 PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) 方法进行处理^[43]. 为保证能量的收敛优于每个原子 1 meV, 将平面波截断能设置为 80 Ry, K 网格密度设置为 $12 \times 12 \times 12$ (对应的精度为 $2\pi \times 0.025 \text{ \AA}^{-1}$). 通过线性响应理论结合 QE 软件包计算了声子色散曲线和电声耦合作用, 其中自洽计算部分的 K 网格密度设置为 $24 \times 24 \times 24$, 声子计算中第一布里渊区的 q 点网格选取为 6 网格选取. 计算中选用超软赝势, Ca 原子 Y 原子和 H 原子的价电子分别为 $3s^2 4s^2 3p^6$, $4s^2 5s^2 4p^6 5d^1, 1s^1$. 此外, 利用 VASP 软件包^[43]进行晶体轨道哈密顿布局分析 (COHP)^[44], 计算中使用投影缀加平面波 (PAW) 赝势, 截断能设置为 700 eV.

为了确保计算的准确性, 我们针对 K 点网格密度、 q 点网格密度、截断能和库仑相互作用进行测试. 如图 1(a), (b) 所示, 在截断能和 K 网格分别高于 60 Ry 和 10 Ry 断能的条件下, 总能达到收敛, 因此将截断能和 K 网格分别设置为 80 Ry 和 12 Ry 是合理的. 图 1(c) 给出了 Γ 点 ($q = (0, 0, 0)$) 处 λ 值随 q 网格变化趋势, 很明显, 高于 $5 \times 5 \times 5$ 网格密度的条件下达到了收敛, 因此我们选取的 q 点 ($6 \times 6 \times 6$) 网格是合理的. 此外, 测试了库仑相互作用对计算结果的潜在影响, 通过 Hubbard U 来描述原子上的库仑相互作用 ($U_{\text{eff}} = U - J$), 对 Y 的 4d 电子的 U_{eff} 值分别设置为 2.0 eV 和 4.0 eV^[45]. 基于 PBE 和 PBE+ U 计算了 $Pm\bar{3}m(\text{CaYH}_{12})$ 在 200 GPa 压力下的电子结构, 由图 1(d), (e) 明显看出, $U_{\text{eff}} = 2.0 \text{ eV}$ 和 $U_{\text{eff}} = 4.0 \text{ eV}$ 的能带均与 PBE 计算结果很接近, 说明库仑相互作用对 CaYH_{12} 计算结果影响很小.

计算超导转变温度采用 Allen-Dynes 修正的 McMillan 方程^[46]:

$$T_c = \frac{\omega_{\log}}{1.2} \exp \left[-\frac{1.04(1 + \lambda)}{\lambda - \mu^*(1 + 0.62\lambda)} \right], \quad (1)$$

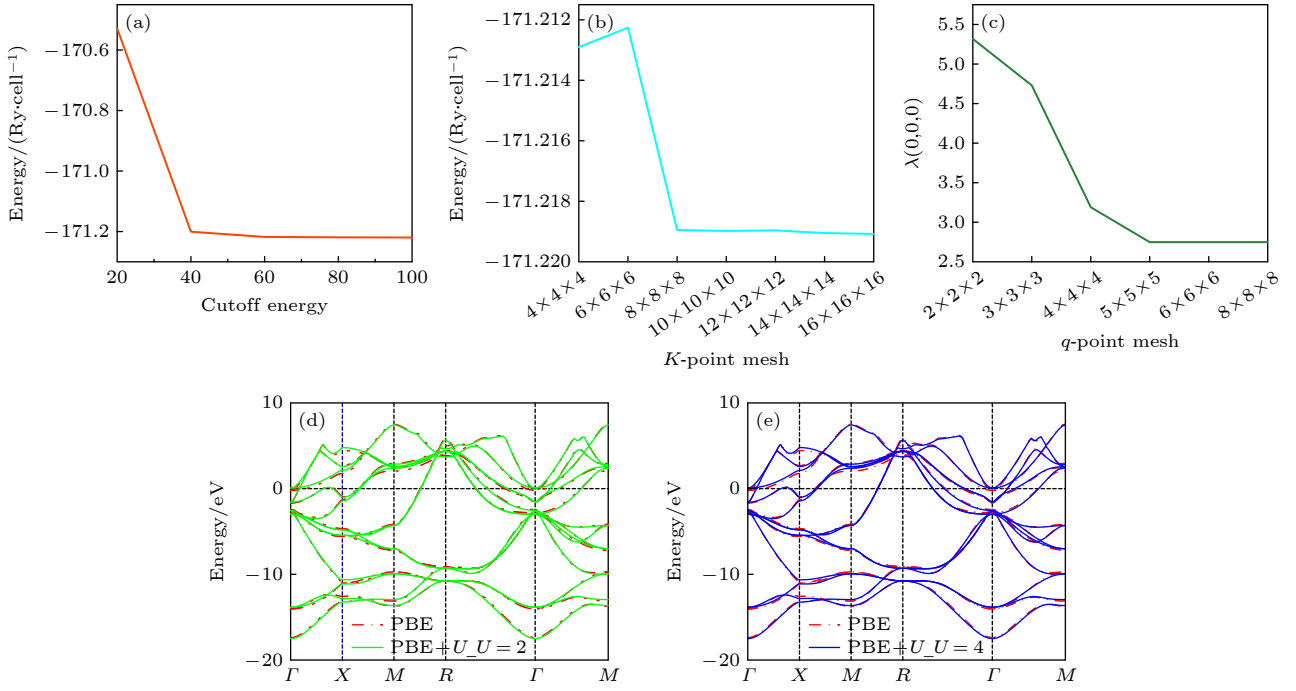


图1 (a)–(c) 截断能、 K 网格、 q 网格收敛性测试; 基于 PBE 与 (d) PBE+ U ($U=2$) 和 (e) PBE+ U ($U=4$) 计算的 $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 在 200 GPa 压力下能带对比图

Fig. 1. (a)–(c) Convergence test of cutoff energy, K -point mesh and q -point mesh; the comparison of band structure for $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) at 200 GPa based on PBE and (d) PBE+ U ($U=2$) and (e) PBE+ U ($U=4$).

其中, λ 是电子-声子耦合 (electron-phonon coupling, EPC) 常数, μ^* 是屏蔽库仑势, $\omega_{\log}$ 是声子频率算术平均. 根据 Ashcroft^[3] 的建议, 屏蔽库仑势 μ^* 一般选择为 0.1–0.13, 本文计算中均选用 $\mu^* = 0.1$. λ 可以用下面积分得到:

$$\lambda = 2 \int_0^\infty \frac{\alpha^2 F(\omega)}{\omega} d\omega. \quad (2)$$

声子频率算术平均 $\omega_{\log}$ 定义为^[47]

$$\omega_{\log} = \exp \left(-\frac{2}{\lambda} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} \alpha^2 F(\omega) \ln \omega \right), \quad (3)$$

其中 $\alpha^2 F(\omega)$ 是 Eliashberg 谱函数, 表达式为^[48]

$$\alpha^2 F(\omega) = \frac{1}{2\pi N(\varepsilon_F)} \sum_{qv} \frac{\gamma_{qv}}{\omega_{qv}} \delta(\omega - \omega_{qv}), \quad (4)$$

其中, q 表示声子波矢, 第 v 支声子在 q 点处的频率表示为 ω_{qv} , 声子线宽 γ_{qv} 表示为

$$\gamma_{qv} = \pi \omega_{qv} \sum_{mn} \sum_k |g_{mn}^v(k, q)|^2 \delta(\varepsilon_{m, k+q} - \varepsilon_F) \times \delta(\varepsilon_{n, k} - \varepsilon_F). \quad (5)$$

以声子线宽 γ_{qv} 的形式, 总 EPC 的 λ 可以表示为

$$\lambda = \sum_{qv} \frac{\gamma_{qv}}{\pi N(\varepsilon_F) \omega_{qv}^2}. \quad (6)$$

3 结果与讨论

3.1 高压下未掺杂的 CaYH_{12} 超导电性

首先, 依据文献^[31] 中的报道, 建立了 $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 的结构模型, 并利用 QE 软件在 200 GPa 压力下对其进行结构弛豫, 晶体结构如图 2(a) 所示. $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 可以看作是由 YH_6 和 CaH_6 嵌套而成的复合结构. 其中 Ca, Y, H 分别占据晶体学 $1a$ (0, 0, 0), $1b$ (0.5, 0.5, 0.5), $12h$ (0.24373, 0.5, 0) 位置.

随后计算了 $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 在 200 GPa 压力下的能带结构和电子态密度, 如图 2(b) 所示. 结果表明, 在费米能级处, 导带和价带之间存在显著重叠, 说明 CaYH_{12} 呈现金属性. 与文献^[31] 对比发现, CaYH_{12} 的费米能级附近的电子结构与 YH_6 和 CaH_6 的电子性质相似, 且氢原子对费米能级处的电子态密度贡献超过 50%, 说明了 CaYH_{12} 潜在的超导电性.

随后, 我们计算了 $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 在 200 GPa 压力下的声子谱、投影声子态密度、Eliashberg 声子谱函数 $\alpha^2 F(\omega)$ 以及积分 $\lambda(\omega)$, 如图 3 所示. 声子谱表明 CaYH_{12} 没有任何的虚频振动, 这说明其在

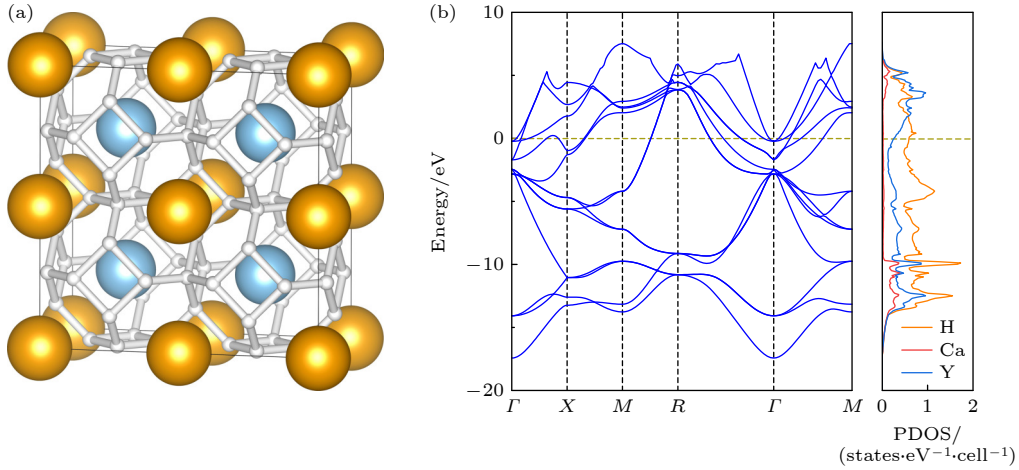


图 2 $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 在 200 GPa 压力下 (a) 晶体结构, 橙色代表 Ca 原子, 蓝色代表 Y 原子, 白色代表 H 原子; (b) 能带结构和电子态密度

Fig. 2. The $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) at 200 GPa: (a) Crystal structure, where the orange spheres represent Ca atoms, the blue spheres represent Y atoms, and the white spheres represent H atoms; (b) band structure and electronic density of states.

表 1 高压下 $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 超导电性相关参数, 费米面处电子态密度 $N(\varepsilon_F)$ (states/spin/eV/cell)、声子频率算术平均值 $\omega_{\log}$ (K)、原子平均声子频率 $\langle\omega^2\rangle^{1/2}$ (THz)、平均电声耦合矩阵元 $\langle I^2 \rangle$ (eV/Å)²、电声耦合常数 λ 以及超度转变温度 T_c (K)

Table 1. Superconducting parameters of $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) under high pressures, the parameters include the electronic density of states at the Fermi level $N(\varepsilon_F)$ (states/spin/eV/cell), logarithmic average of phonon frequencies $\omega_{\log}$ (K), average phonon frequency $\langle\omega^2\rangle^{1/2}$ (THz), average electron-phonon coupling matrix element $\langle I^2 \rangle$ (eV/Å)², electron-phonon coupling constant λ , and superconducting transition temperature T_c (K).

P/GPa	$N(\varepsilon_F)$	$\omega_{\log}$	$\langle\omega^2\rangle^{1/2}$	$\langle I^2 \rangle$	λ	T_c
180	7.05	1051.69	186.40	20.20	2.48	217
200	7.03	1227.12	205.10	20.72	2.09	218

200 GPa 的压力条件下是动力学稳定的, 这与文献 [31] 报道结果一致. 从声子谱和声子态密度可以看出, 由于相对原子质量的差异, 声子谱和声子态密度在 15 THz 处明显被分成两个部分. 在声子态密度中, 相对原子质量较大的 Ca 和 Y 在低频区占据主导地位, 而相对原子质量小的 H 原子分布在高频区. 从 Eliashberg 声子谱函数可以看出, $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 在 200 GPa 压力下的电声耦合常数 λ 为 2.09, 15 THz 以上的晶格振动对电声耦合常数 λ 贡献了 17.7%, 而低频区 (< 15 THz) 贡献了 82.3%.

利用 Allen-Dynes 修正的 McMillan 方程计算了 $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 的超导转变温度, 计算结果见表 1. 屏蔽库仑赝势 $\mu^* = 0.1$, 结合其在 200 GPa 下的声子频率对数的平均值 $\omega_{\log}$ (1227 K), 可计算得其 T_c 为 218 K. 压力降低至 180 GPa 时, $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 仍能保持动力学稳定, 其 λ 为 2.48, $\omega_{\log}$ 为 1051 K, 可估算其超导转变温度为 217 K. 相关计算结果与文献 [31] 中报道基本一致.

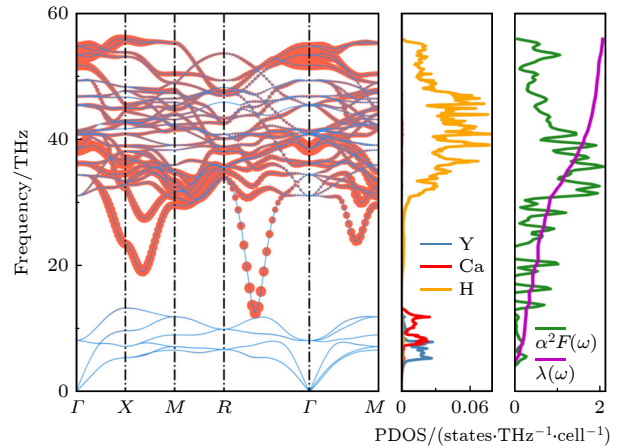


图 3 $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 在 200 GPa 压力下声子谱、声子态密度、Eliashberg 声子谱函数 $\alpha^2 F(\omega)$ 以及积分 $\lambda(\omega)$. 红色圆圈的大小代表声子线宽的数值相对大小

Fig. 3. Phonon spectrum, phonon density of states, Eliashberg phonon spectral function $\alpha^2 F(\omega)$, and the integral $\lambda(\omega)$ of $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) at 200 GPa. The size of the red circles represents the relative magnitude of the phonon linewidth.

3.2 CaYH_{12} 动力学稳定性的掺杂调控

基于上述 200 GPa 压力下稳定的 $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}), 系统地研究了压力条件下电子和空穴对于 CaYH_{12} 的动力学稳定性的调控作用. 未掺杂条件下, 在压力低于 180 GPa 时, $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 会出现虚频振动. 为了探索 $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 动力学稳定所需压力大幅降低所需的掺杂条件, 我们重点在 100 GPa 压力条件附近对 $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 进行电子与空穴掺杂调控模拟. 以 130 GPa, 100 GPa, 70 GPa 为例, 未掺杂的 $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 的声子谱中出现虚频震动, 并沿 X - M , R - Γ 和 Γ - M 高对称点路径上出现较大的虚频 (图 4(a)–(c)), 这表明其在较低压力下是动力学不稳定的.

首先对 130 GPa 的 $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 进行空穴掺杂, 掺杂浓度为 0.9 e/cell 时, 虚频声子模消失. 随后继续对 100 GPa $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 进行空穴掺杂, 空穴掺杂浓度为 0.8 e/cell 时, 也达到动力学稳定. 为了探究电子和空穴掺杂对振动稳定性的影响, 随后对 70 GPa 的 $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 进行电子和空穴的掺杂, 图 4(d) 为其在 R - Γ 和 Γ - M 高

对称点路径上最低声子频率的变化情况. 随着电子掺杂浓度的增大, R - Γ 和 Γ - M 高对称点路径上的虚频声子模进一步软化, 虚频逐渐增大. 而随着空穴浓度的增大, 虚频声子模逐渐硬化. 当空穴掺杂浓度为 1.1 e/cell 时, R - Γ 和 Γ - M 高对称点路径上的虚频声子模消失, 实现了动力学稳定.

随后, 我们探究了空穴掺杂对其晶格动力学稳定性的影响机理. 首先, 以 130 GPa 压力下 $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 虚频声学支为例, 探究空穴掺杂对成键强度的影响作用. 结合图 3 和图 7 中的声子谱和声子态密度可以看出, 与氢原子有关的振动频率主要集中在高频光学支区域, 结合虚频声学支对应的原子位移矢量图 (图 5(a), (b)), 可以发现最低声学支虚频模式并不涉及到 Ca-Y 原子之间的相对位移, 而是对应于 Ca-H 和 Y-H 之间的相对运动. 图 5(c), (d) 中给出了相应的晶体轨道哈密顿布局分析 (COHP), 并利用积分 COHP (ICOHP) 来定量描述成键强度, ICOHP 绝对值越大说明成键越强. 在 130 GPa 压力下未掺杂时, 最低一支声学支在 X - M 和 R - Γ 路径出现了虚频, 此时 Ca-H 间的 ICOHP

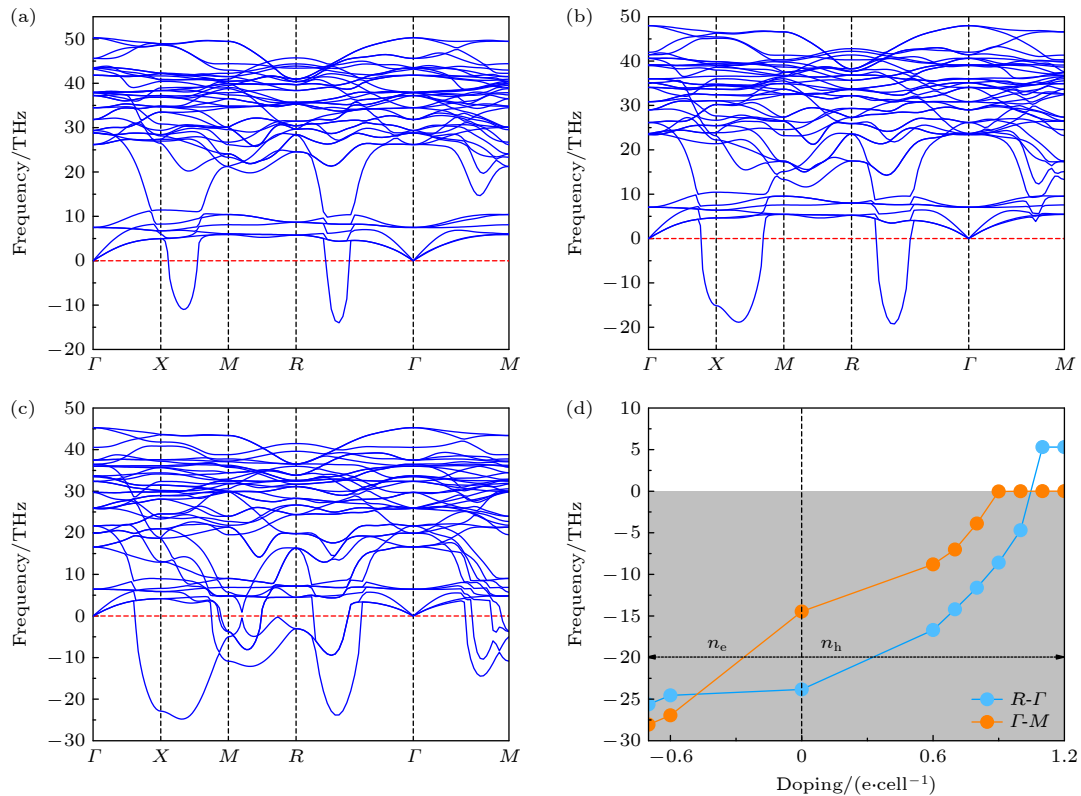


图 4 $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 在 (a) 130 GPa, (b) 100 GPa 和 (c) 70 GPa 压力下的声子谱; (d) 70 GPa 下 $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 沿着 R - Γ 和 Γ - M 处最低声子频率随掺杂浓度变化

Fig. 4. Phonon spectrum of $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) at (a) 130 GPa, (b) 100 GPa, and (c) 70 GPa; (d) variation of the lowest phonon frequency along the R - Γ and Γ - M paths with respect to doping concentration at 70 GPa.

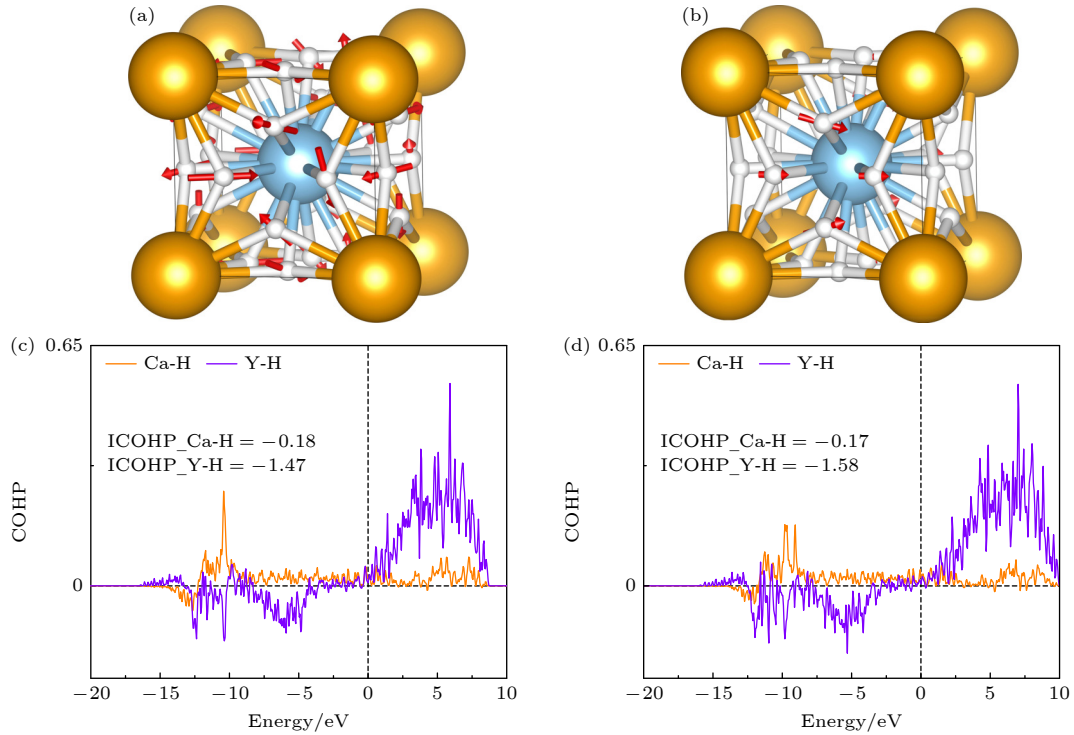


图 5 $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 在 130 GPa 压力下的 (a), (b) 虚频声学支对应的原子位移矢量图和 (c), (d) 晶体轨道哈密顿布局分析图, 其中 (a) 对应的是 R - Γ 路径之间的 q 点 (0.3333, 0.3333, 0.3333), (b) 对应的是 X - M 路径之间的 q 点 (0.5, 0.25, 0)

Fig. 5. (a), (b) Atomic displacements corresponding to the imaginary acoustic phonon mode and (c), (d) crystal orbital Hamilton population analyses for $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) at 130 GPa, where (a) corresponds to the q point (0.3333, 0.3333, 0.3333) between the R - Γ path, and (b) corresponds to the q point (0.5, 0.25, 0) between the X - M path.

仅为-0.18, 而 Y-H 之间的 ICOHP 为-1.47. 掺杂 0.8 空穴后, Ca-H 之间的 ICOHP 仅为-0.17, 无明显变化, 而 Y-H 间 ICOHP 增强至-1.58, 说明空穴掺杂导致 Y-H 之间成键增强, 进而消除其虚频, 产生“化学预压缩”效应, 使其在低压下保持动力学稳定.

此外, 我们还探究了电子和空穴掺杂对 $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 晶胞体积的影响. 如图 6 所示, 电子和空穴掺杂对于晶胞体积的影响类似于施加静水压. 空穴掺杂能够减小晶胞的体积, 这与施加静水压效果相似, 产生“化学预压缩”效应. 结合成键分析和晶胞体积变化可以看出, 适当的空穴掺杂有助于消除虚频声子, 从而能够使 $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 在较低压力下保持动力学稳定.

$Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 在 70 GPa 压力下达到动力学稳定所需空穴掺杂浓度为 1.1 e/cell, 对应的载流子体密度和面密度分别为 $2.38 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ 和 $8.55 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$, 该浓度的载流子掺杂在实验上是可行的. 比如 Ueno 等 [49] 和 Ding 等 [50] 分别关于单晶 SrTiO_3 和单层 WS_2 的研究工作中, 掺杂载流子面密度均达到了 10^{14} cm^{-2} 量级. Pei 等 [51] 关于 BiCuSeO 的研究结果显示, 在掺杂条件下, $\text{Bi}_{0.75}$

$\text{Ba}_{0.25}\text{CuSeO}$ 的载流子浓度可达到 $5.0 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$. 我们前期与 Liu 等 [52] 关于氢基 kagome 的理论研究表明, 可以通过 C 元素替换 P 元素实现对 Li_5PH_3 中 1.0 e/cell 的空穴掺杂, 得到的 Li_5CH_3 在较低压力下便保持动力学稳定且有 36 K 的 T_c . 此外, Wang 等 [40] 对实验上 100 GPa 压力下合成的 CeH_9 进行了理论模拟, 通过 1.0 e/cell 的空穴掺杂使 CeH_9

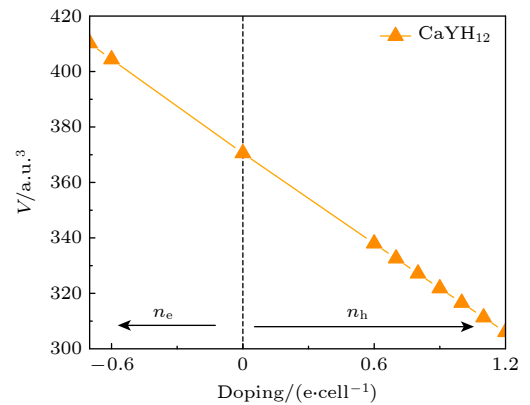


图 6 $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 在 70 GPa 压力下晶胞体积随掺杂浓度的变化

Fig. 6. The unit cell volumes of $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) as a function of doping concentration at 70 GPa.

的超导转变温度由 74 K 提升至 136 K, 并且他们还指出实验上的空穴掺杂有望通过 Ce^{3+} 对 Ce 原子替换实现. 因此, 本文中模拟的 1.1 e/cell 掺杂浓度, 实验上有望通过离子或其他原子替换掺杂等手段实现.

3.3 CaYH_{12} 超导电性的掺杂调控

基于空穴掺杂对 $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 动力学稳定性的调控作用, 我们研究了 $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 在 130 GPa, 100 GPa, 70 GPa 压力下空穴掺杂后的超导电性, 计算了不同压力下和不同空穴掺杂浓度下的声子谱、声子态密度、Eliashberg 声子谱函数 $\alpha^2 F(\omega)$, 以及积分 $\lambda(\omega)$, 如图 7 所示. 在中低频区 (0—40 THz) 的声子表现出较高的电声耦合强度. 随后, 利用 McMillan 强耦合理论修正的 Allen-Dynes

方程计算了 $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 在 130 GPa 下掺杂 0.9 e/cell 空穴、100 GPa 下掺杂 0.8 e/cell 空穴以及 70 GPa 掺杂 1.1 e/cell 和 1.2 e/cell 空穴情况下的超导转变温度. 计算结果表明, 它们的声子频率算术平均 ω_{log} 分别为 1061.31, 944.21, 661.71 和 630.92 K. 选取屏蔽库仑赝势 μ^* 为 0.1, 代入 Allen-Dynes 方程后, 计算得到, $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 在 130 GPa 下掺杂 0.9 e/cell 和 100 GPa 下掺杂 0.8 e/cell 空穴 T_c 分别为 194 K 和 209 K. 在 70 GPa 压力下, $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 掺杂 1.1 e/cell 空穴和掺杂 1.2 e/cell 空穴的 T_c 分别为 194 K 和 189 K (见表 2).

通过表 2 可以看到, 在 70 GPa 压力下, 随着空穴掺杂浓度的增大, T_c 呈现下降的趋势, 声子频率算术平均 ω_{log} 也呈现降低的趋势, 而电声耦合常

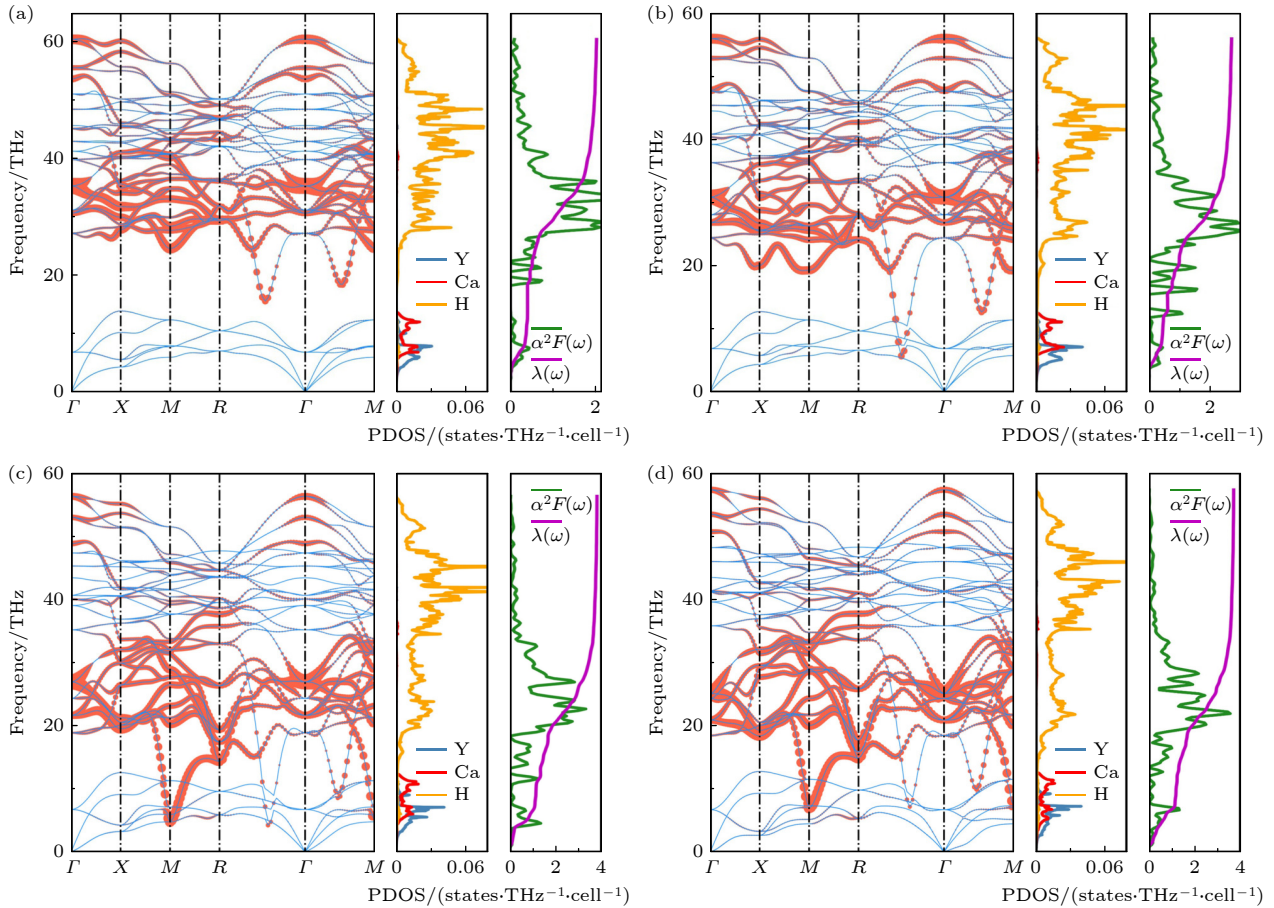


图 7 声子谱、声子态密度、Eliashberg 声子谱函数 $\alpha^2 F(\omega)$, 以及积分 $\lambda(\omega)$ (a) $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 在 130 GPa 下掺杂 0.9 e/cell 空穴; (b) $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 在 100 GPa 下掺杂 0.8 e/cell 空穴; (c) $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 在 70 GPa 下掺杂 1.1 e/cell 空穴; (d) $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 在 70 GPa 下掺杂 1.2 e/cell 空穴, 其中红色圆圈的大小代表声子线宽的数值相对大小

Fig. 7. Phonon spectrum, phonon density of states, Eliashberg phonon spectral function $\alpha^2 F(\omega)$, and the integral $\lambda(\omega)$: (a) $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) doped with 0.9 e/cell holes at 130 GPa; (b) $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) doped with 0.8 e/cell holes at 100 GPa; (c) $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) doped with 1.1 e/cell holes at 70 GPa; (d) $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) doped with 1.2 e/cell holes at 70 GPa; the size of the red circles represents the relative magnitude of the phonon linewidth.

表 2 CaYH_{12} 掺杂超导电性相关参数, $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 在不同空穴掺杂浓度下的费米面处电子态密度 $N(\varepsilon_F)$ (states/spin/eV/cell), 声子频率算术平均值 $\omega_{\log}$ (K), 原子平均声子频率 $\langle\omega^2\rangle^{1/2}$ (THz), 平均电声耦合矩阵元 $\langle I^2 \rangle$ ($\text{eV}/\text{\AA}^2$), 电声耦合常数 λ , 及超度转变温度 T_c (K)

Table 2. Superconducting parameters of doped $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) at high pressures, the electronic density of states at the Fermi level $N(\varepsilon_F)$ (states/spin/eV/cell), logarithmic average of phonon frequencies $\omega_{\log}$ (K), average phonon frequency $\langle\omega^2\rangle^{1/2}$ (THz), average electron-phonon coupling matrix element $\langle I^2 \rangle$ ($\text{eV}/\text{\AA}^2$), electron-phonon coupling constant λ , and superconducting transition temperature T_c (K).

Phases	Doped	$N(\varepsilon_F)$	$\omega_{\log}$	$\langle\omega^2\rangle^{1/2}$	$\langle I^2 \rangle$	λ	T_c
130 GPa	0.9	5.18	1106.31	187.84	23.19	2.06	194
100 GPa	0.8	5.25	944.21	159.34	21.44	2.68	209
70 GPa	1.1	5.18	661.71	130.23	20.44	3.78	194
	1.2	5.13	630.92	128.94	20.86	3.89	189

数 λ 随着空穴掺杂浓度增大而升高, 因此 $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 中 T_c 随着掺杂浓度变化的趋势主要是 $\omega_{\log}$ 所主导的. 掺杂 1.1 e/cell 空穴时较高 T_c 主要归因于较强的声子频率算术平均 $\omega_{\log}$. 电声耦合常数 λ 随空穴变化趋势可以用 McMillan-Hopfield 形式的公式进行分析:

$$\lambda = \frac{\eta}{M\langle\omega^2\rangle} = \frac{N(\varepsilon_F)\langle I^2 \rangle}{M\langle\omega^2\rangle}, \quad (7)$$

其中, M 是原子质量, $N(\varepsilon_F)$ 是费米面处电子态密度, $\langle I^2 \rangle$ 是费米面处平均电声耦合矩阵元的平方, 这个值是通过表 2 中给出的 λ , $N(\varepsilon_F)$, $\langle\omega^2\rangle^{1/2}$ 代入 (7) 式反推求解得到. 相关数值均列于表 2 中. 将 (7) 式两边同时取对数, 并且减去相应参数在掺杂 1.1 e/cell 时的值, 可以得到如下等式:

$$\ln \frac{\lambda}{\lambda_{1.1}} = \ln \frac{N(\varepsilon_F)}{N(\varepsilon_F)_{1.1}} + \ln \frac{\langle I^2 \rangle}{\langle I^2 \rangle_{1.1}} + \ln \frac{\langle\omega^2\rangle}{\langle\omega^2\rangle_{1.1}}, \quad (8)$$

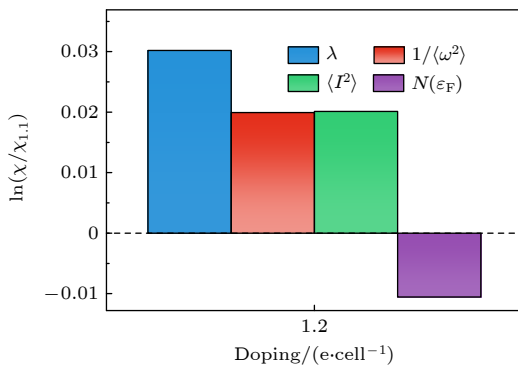


图 8 $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 中电声耦合相关参数, 空穴掺杂浓度增加后 $\langle I^2 \rangle$, $N(\varepsilon_F)$, λ , $\langle\omega^2\rangle$ 参数的变化情况, 图中下标 1.1 表示对应参数在掺杂 1.1 e/cell 空穴下的值

Fig. 8. Electron-phonon coupling parameters in $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}), variation of parameters $\langle I^2 \rangle$, $N(\varepsilon_F)$, λ , $\langle\omega^2\rangle$ with increasing hole doping concentration in $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}), the subscript 1.1 in the figure denotes the corresponding values at 1.1 e/cell hole doping.

其中下标 1.1 表示对应的参数在掺杂 1.1 e/cell 时的值. 各个参数与 1.1 e/cell 参数值的比值的对数变化如图 8 所示. 结合表 2 和图 8 可以发现, 空穴浓度增大后, 尽管费米面处电子态密度 $N(\varepsilon_F)$ 对 λ 起到负贡献, 但其贡献相对较小, 而电声耦合矩阵元 $\langle I^2 \rangle$ 和平均声子频率 $\langle\omega^2\rangle^{1/2}$ 对 λ 的正贡献较大, 最终导致 λ 随着空穴掺杂浓度的增大而上升的趋势.

4 结 论

本文利用第一性原理计算方法探究了电子与空穴掺杂对 $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 动力学稳定性和超导电性的调控作用. 结果表明, 在压力低于 180 GPa 的条件下, $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 会出现声子虚频, 电子掺杂会使虚频声子软化程度增加, 而适度的空穴掺杂能够消除虚频声子, 在晶格中产生“化学预压缩”效应, 最终实现其在较低压力下的动力学稳定性. 此外, 空穴掺杂后, $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 在较低的稳定压力下仍具有较高的超导转变温度. 当空穴掺杂浓度达到 1.1 e/cell 时, $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) 在 70 GPa 的压力下, 超导转变温度 (T_c) 可达 194 K. 在空穴掺杂浓度为 1.2 e/cell 时, 其 T_c 有略微降低 (189 K), 这主要是其 $\omega_{\log}$ 比 1.1 e/cell 时低所致.

参考文献

- [1] McMahon J M, Ceperley D M 2011 *Phys. Rev. B* **84** 144515
- [2] Loubeyre P, Occelli F, Dumas P 2020 *Nature* **577** 631
- [3] Ashcroft N W 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 187002
- [4] Wang H, Tse J S, Tanaka K, Itaka T, Ma Y 2012 *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **109** 6463
- [5] Duan D F, Liu Y X, Tian F B, Li D, Huang X L, Zhao Z L, Yu H Y, Liu B B, Tian W J, Cui T 2014 *Sci. Rep.* **4** 6968
- [6] Feng X L, Zhang J R, Gao G Y, Liu H Y, Wang H 2015 *RSC Adv.* **5** 59292
- [7] Li Y W, Hao J, Liu H Y, Tse J S, Wang Y C, Ma Y M 2015

- Sci. Rep.* **5** 9948
- [8] Liu H, Naumov, II, Hoffmann R, Ashcroft N W, Hemley R J 2017 *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **114** 6990
- [9] Peng F, Sun Y, Pickard C J, Needs R J, Wu Q, Ma Y 2017 *Phys. Rev. Lett.* **119** 107001
- [10] Duan D, Ma Y B, Shao Z J, Xie H, Huang X L, Liu B B, Cui T 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 036102 (in Chinese) [段德芳, 马艳斌, 邵子霁, 谢慧, 黄晓丽, 刘冰冰, 崔田 2017 物理学报 **66** 036102]
- [11] Song H, Zhang Z H, Cui T, Pickard C J, Kresin V Z, Duan D F 2021 *Chin. Phys. Lett.* **38** 107401
- [12] Sun Y, Liu H Y, Ma Y M 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 017407 (in Chinese) [孙莹, 刘寒雨, 马琰铭 2021 物理学报 **70** 017407]
- [13] Drozdov A P, Erements M I, Troyan I A, Ksenofontov V, Shylin S I 2015 *Nature* **525** 73
- [14] Drozdov A P, Kong P P, Minkov V S, Besedin S P, Kuzovnikov M A, Mozaffari S, Balicas L, Balakirev F F, Graf D E, Prakapenka V B, Greenberg E, Knyazev D A, Tkacz M, Erements M I 2019 *Nature* **569** 528
- [15] Salke N P, Davari Esfahani M M, Zhang Y, Kruglov I A, Zhou J, Wang Y, Greenberg E, Prakapenka V B, Liu J, Oganov A R, Lin J F 2019 *Nat. Commun.* **10** 4453
- [16] Li X, Huang X, Duan D, Pickard C J, Zhou D, Xie H, Zhuang Q, Huang Y, Zhou Q, Liu B, Cui T 2019 *Nat. Commun.* **10** 3461
- [17] Chen W, Semenok D V, Kvashnin A G, Huang X, Kruglov I A, Galasso M, Song H, Duan D, Goncharov A F, Prakapenka V B, Oganov A R, Cui T 2021 *Nat. Commun.* **12** 273
- [18] Kong P, Minkov V S, Kuzovnikov M A, Drozdov A P, Besedin S P, Mozaffari S, Balicas L, Balakirev F F, Prakapenka V B, Chariton S, Knyazev D A, Greenberg E, Erements M I 2021 *Nat. Commun.* **12** 5075
- [19] Ma L, Zhou M, Wang Y Y, Kawaguchi S, Ohishi Y, Peng F, Liu H Y, Liu G T, Wang H B, Ma Y M 2021 *Phys. Rev. Research* **3** 043107
- [20] Ma L, Wang K, Xie Y, Yang X, Wang Y Y, Zhou M, Liu H Y, Yu X H, Zhao Y S, Wang H B, Liu G T, Ma Y M 2022 *Phys. Rev. Lett.* **128** 167001
- [21] Li Z W, He X, Zhang C L, Wang X C, Zhang S J, Jia Y T, Feng S M, Lu K, Zhao J F, Zhang J, Min B S, Long Y W, Yu R C, Wang L H, Ye M Y, Zhang Z S, Prakapenka V, Chariton S, Ginsberg P A, Bass J, Yuan S H, Liu H Z, Jin C Q 2022 *Nat. Commun.* **13** 2863
- [22] Wang Y Y, Wang K, Sun Y, Ma L, Wang Y C, Zou B, Liu G T, Zhou M, Wang H B 2022 *Chin. Phys. B* **31** 106201
- [23] Zhang X H, Zhao Y P, Yang G C 2022 *Wires Comput. Mol. Sci.* **12** e1582
- [24] Liu P Y, Wang C, Zhang D Y, Wang X, Duan D F, Liu Z, Cui T 2024 *J. Phys. Condens. Matter* **36** 353001
- [25] Sun Y, Zhong X, Liu H, Ma Y 2024 *Natl. Sci. Rev.* **11** nwad270
- [26] Zhao W, Huang X, Zhang Z, Chen S, Du M, Duan D F, Cui T 2024 *Natl. Sci. Rev.* **11** nwad307
- [27] Li B, Yang Y Q, Fan Y X, Zhu C, Liu S L, Shi Z X 2023 *Chin. Phys. Lett.* **40** 097402
- [28] Zhang Z, Cui T, Hutcheon M J, Shipley A M, Song H, Du M, Kresin V Z, Duan D F, Pickard C J, Yao Y 2022 *Phys. Rev. Lett.* **128** 047001
- [29] Song Y G, Bi J K, Nakamoto Y, Shimizu K, Liu H Y, Zou B, Liu G T, Wang H B, Ma Y M 2023 *Phys. Rev. Lett.* **130** 266001
- [30] Sun Y, Lü J, Xie Y, Liu H Y, Ma Y M 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 097001
- [31] Xie H, Duan D F, Shao Z J, Song H, Wang Y C, Xiao X H, Li D, Tian F B, Liu B B, Cui T 2019 *J. Phys. Condens. Matter* **31** 245404
- [32] Liang X W, Bergara A, Wang L Y, Wen B, Zhao Z S, Zhou X F, He J L, Gao G Y, Tian Y J 2019 *Phys. Rev. B* **99** 100505(R)
- [33] Liang X W, Bergara A, Wei X D, Song X X, Wang L Y, Sun R X, Liu H Y, Hemley R J, Wang L, Gao G Y, Tian Y J 2021 *Phys. Rev. B* **104** 134501
- [34] Gao M, Yan X W, Lu Z Y, Xiang T 2021 *Phys. Rev. B* **104** L100504
- [35] Chen L C, Luo T, Cao Z Y, Dalladay-Simpson P, Huang G, Peng D, Zhang L L, Gorelli F A, Zhong G H, Lin H Q 2024 *Nat. Commun.* **15** 1809
- [36] An D, Conway L J, Duan D, Zhang Z, Jiang Q, Song H, Huo Z, Pickard C J, Cui T 2024 *Adv. Funct. Mater.* **35** 2418692
- [37] Yan X Z, Zhou X Z, Liu C F, Xu Y L, Huang Y B, Sheng X W, Chen Y M 2024 *Chin. Phys. B* **33** 086301
- [38] Kong X, Gao M, Yan X W, Lu Z Y, Xiang T 2018 *Chin. Phys. B* **27** 046301
- [39] Wang M, Wen H H, Wu T, Yao D X, Xiang T 2024 *Chin. Phys. Lett.* **41** 077402
- [40] Wang C Z, Liu S Y, Jeon H, Yi S, Bang Y Y, Cho J H 2021 *Phys. Rev. B* **104** L020504
- [41] Yu H L, Chen Y 2022 *Phys. Rev. B* **106** 024515
- [42] Giannozzi P, Baroni S, Bonini N, Calandra M, Car R, Cavazzoni C, Ceresoli D, Chiarotti G L, Cococcioni M, Dabo I 2009 *J. Phys. Condens. Matter* **21** 395502
- [43] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [44] Dronskowski R, Blöchl P E 1993 *J. Phys. Chem.* **97** 8617
- [45] Nazarov M V, Leng L, Leong Y, Chen L, Arellano-Ramirez I D 2014 *Mold. J. Phys. Sci.* **13** 106
- [46] McMillan W L 1968 *Phys. Rev.* **167** 331
- [47] Chan K T, Malone B D, Cohen M L 2013 *Phys. Rev. B* **88** 064517
- [48] Allen P B 1972 *Phys. Rev. B* **6** 2577
- [49] Ueno K, Nakamura S, Shimotani H, Ohtomo A, Kimura N, Nojima T, Aoki H, Iwasa Y, Kawasaki M 2008 *Nat. Mater.* **7** 855
- [50] Ding D D, Qu Z Z, Han X Y, Han C R, Zhuang Q, Yu X L, Niu R R, Wang Z Y, Li Z X, Gan Z, Wu J S, Lu J M 2022 *Nano Lett.* **22** 7919
- [51] Pei Y L, Wu H, Wu D, Zheng F, He J 2014 *J. Am. Chem. Soc.* **136** 13902
- [52] Liu Z, Liu Z H, Zhuang Q, Ying J J, Cui T 2024 *npj Comput. Mater.* **10** 281

First-principles study of regulation of electron and hole doping in superconducting ternary hydride CaYH_{12} *

LIN Jianhua CUI Jiahao ZHUANG Quan†

(College of Chemistry and Materials Science, Inner Mongolia Minzu University, Tongliao 028000, China)

(Received 14 February 2025; revised manuscript received 16 April 2025)

Abstract

In the past few decades, achieving room-temperature superconductivity has become an unrelenting pursuit of scientists. Guided by the “chemical precompression” theory, hydrogen-rich compounds have emerged as the main candidates for high-temperature superconductors, positioning them at the forefront of superconducting materials research. Extensive computational studies have identified numerous binary hydrides with predicted superconducting transition temperatures (T_c) exceeding 200 K, such as CaH_6 , H_3S , MgH_6 , YH_6 , YH_9 , YH_{10} , and LaH_{10} . Significantly, the high- T_c super-conductivities of H_3S , LaH_{10} , CaH_6 , YH_6 , YH_9 have been experimentally confirmed. Compared with binary hydrides, ternary hydrides offer more diverse chemical compositions and structures, potentially leading to enhanced properties. Zhang et al. [Zhang Z, Cui T, Hutcheon M J, et al. 2022 *Phys. Rev. Lett.* **128** 047001] theoretically designed a series of AXH_8 -type ($A = \text{Sc, Ca, Y, Sr, La, Ba}$; $X = \text{Be, B, Al}$) ternary hydrides with “fluorite-type” backbone, which were predicted to have high- T_c values under moderate pressure. Among those ternary hydrides, LaBeH_8 has been experimentally confirmed to achieve a T_c value of 110 K at 80 GPa. The T_c values of ternary clathrate hydrides of $\text{Li}_2\text{MgH}_{16}$ and $\text{Li}_2\text{NaH}_{17}$ have been predicted to greatly exceed the room temperature, while the required stabilization pressures all exceeded 200 GPa. Xie et al. [Xie H, Duan D F, Shao Z J, et al. 2019 *J. Phys. Condens. Matter.* **31** 245404] and Liang et al. [Liang X W, Bergara A, Wang L Y, et al. 2019 *Phys. Rev. B* **99** 100505(R)] independently predicted CaYH_{12} compounds with $Pm\bar{3}m$ and $Fd\bar{3}m$ space groups, both of which exhibited high- T_c above 200 K at about 200 GPa. Other ternary hydrides, such as La-B-H , K-B-H , La-Ce-H , and Y-Ce-H , have also been extensively investigated. At current stage, a major focus of superconducting hydrides is to achieve high-temperature superconductivity at lower pressures. In this study, taking $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) as a representative, we systematically investigate the effects of electron and hole doping on the dynamical stability and superconductivity in ternary hydride by first-principal calculations. The $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) exhibits a T_c value of 218 K at 200 GPa, which is consistent with that reported previously. When decompressing to below 180 GPa, imaginary phonons emerge. The analysis of doping simulations demonstrates that the electron doping exacerbates the softening of the imaginary phonons, whereas hole doping eliminates the imaginary frequencies. At the pressures of 130, 100 and 70 GPa, the $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) phase can be stabilized by hole doping at the concentrations of 0.9, 0.8, and 1.1 e/cell, respectively. Further electron-phonon coupling calculations show that the T_c values of $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) at 130, 100 and 70 GPa are 194, 209, and 194 K at the corresponding doping level, which are only 10–20 K less than the T_c at 200 GPa. At the pressure of 70 GPa, T_c slightly decreases to 189 K at a doping level of 1.2 e/cell, primarily due to the reduced $\omega_{\log}$ compared with that in the case of 1.1 e/cell. And the enhanced λ at 1.2 e/cell is mainly contributed by the average electron-phonon coupling matrix element $\langle I^2 \rangle$ and average phonon frequency $\langle \omega^2 \rangle^{1/2}$, rather than the electronic density of states at the Fermi level $N(\varepsilon_F)$. These results indicate that hole doping represents a promising and effective strategy for optimizing the superconductivity of $Pm\bar{3}m$ (CaYH_{12}) by maintaining high- T_c at low pressures. Our study paves an avenue for realizing high-temperature superconductors at low pressure.

Keywords: superconducting ternary hydride, first-principles calculations, hole doping, stabilization pressure regulation

PACS: 74.70.-b, 74.72.Ek, 74.72.Gh, 74.25.Kc

DOI: 10.7498/aps.74.20250180

CSTR: 32037.14.aps.74.20250180

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12264038, 11904187).

† Corresponding author. E-mail: zhuangquan21@outlook.com



超导三元氢化物 CaYH_{12} 电子及空穴掺杂调控的第一性原理研究

林建华 崔佳浩 庄全

First-principles study of regulation of electron and hole doping in superconducting ternary hydride CaYH_{12}

LIN Jianhua CUI Jiahao ZHUANG Quan

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 137401 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20250180

CSTR: 32037.14.aps.74.20250180

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250180>

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

Er^{3+} 掺杂 TiO_2 的局域结构及电子性质的第一性原理研究

First-principles calculations of local structure and electronic properties of Er^{3+} -doped TiO_2

物理学报. 2022, 71(24): 246102 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221847>

锂离子电池富锂锰基三元材料中氧空位簇的形成: 第一原理计算

Formation of oxygen vacancy clusters in Li-rich Mn-based cathode Materials of lithium-ion batteries: First-principles calculations

物理学报. 2023, 72(7): 078201 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20222300>

SrSnO_3 作为透明导电氧化物的第一性原理研究

First-principles study of SrSnO_3 as transparent conductive oxide

物理学报. 2023, 72(1): 013101 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20221544>

稀土掺杂对 LiFePO_4 性能影响的第一性原理研究

First-principles study of properties of rare-earth-doped LiFePO_4

物理学报. 2021, 70(15): 158203 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210227>

CuBiI 三元化合物晶体结构预测及光电性能第一性原理研究

Structure prediction of CuBiI ternary compound and first-principles study of photoelectric properties

物理学报. 2021, 70(20): 207305 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210145>

基于机器学习和第一性原理计算的Janus材料预测

Prediction of magnetic Janus materials based on machine learning and first-principles calculations

物理学报. 2024, 73(23): 230201 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20241278>