arXiv:2601.01100v1 [cond-mat.supr-con] 3 Jan 2026

二维碳同素异形体中应变触发的高温超导转变

Tian Yan[1] Ru Zheng[1] Jin-Hua Sun[1] Fengjie Ma[2] Xun-Wang Yan[3] Miao Gao[1], * Tian Cui[1], † 和 Zhong-Yi Lu[4], ‡[1]宁波大学物理科学与技术学院物理系，浙江 315211，中国[2]北京师范大学先进量子研究中心和物理系，北京 100875，中国[3]曲阜师范大学物理与工程学院，山东 273165，中国[4]中国人民大学物理系，北京 100872，中国（日期：2026年1月6日）

通过特定调控使非超导材料进入超导态，是超导领域的一个重要研究方向。压力是一种有效手段，可使三维（3D）材料在非超导态与超导态之间转换。在二维（2D）情况下，应变工程发挥着类似于压力的作用。然而，纯粹由应变诱导的二维系统超导性仍极为罕见。通过第一性原理计算，我们证明，在二维碳同素异形体 THO-石墨烯中，仅施加双轴拉伸应变即可诱导超导转变。THO-石墨烯由三角形、六边形和八边形构成。自由支撑THO-石墨烯不具有超导性。令人惊讶的是，受应变的 THO-石墨烯中的电子-声子耦合显著增强，足以使电子配对并实现超导，最高超导转变温度可达 45 K。这项工作不仅展示了仅通过应变调控二维系统金属-超导体转变的一个重要实例，也创下了二维元素超导体超导转变温度的新纪录。

一、引言

施加压力被视为一种洁净且可逆的方法，无需引入杂质即可在三维量子材料中诱导超导性。移除压力后，化合物总能恢复到初始的非超导态。锂元素晶体在48 GPa压力下变为超导体，超导转变温度（T_c）达到20 K [1]。黑磷在5 GPa压力下由正交晶系A17相转变为菱方A7相，同时出现超导性 [2]。对莫特绝缘体$BaFe_2S_3$ 施加压力，可破坏其条纹型反铁磁序；在13.5 GPa压力下，T_c 达到17 K [3]。立方碱金属富勒烯化物Cs_3C_{60} 在接近1 GPa的压力下可转变为高T_c 超导体[4]。新型富氢化合物的发现令人振奋，例如H_3S [5, 6],LaH_{10} [7–10],CeH_{10} [11], CaH_6 [12–14],$(Ca,Y)H_6$ [15–17],$LaBe_2H_8$ [18, 19], LaB_2H_8 [20],和$LaSc_2H_{24}$ [21, 22], , 为在高压条件下实现室温超导性开辟了途径。笼目金属ATi_3Bi_5 （A=Cs、Rb）在常压下并不具有超导性，但这两种化合物在压力下均表现出双穹顶超导性 [23]。最近，在双层镍酸盐$La_3Ni_2O_7$, 中，14 GPa压力触发了从常压Amam相到高压Fmmm相或I4/mmm相的结构相变，使其进入超导态，并在18 GPa压力下达到80 K的T_c [24–26]。

在二维系统中，应变工程发挥着类似于三维情形中压力的作用，可调控面内晶格参数及相关电子性质，为超导性的出现或增强提供了机会。

性。沉积在 $SrTiO_3$ 衬底上的 FeSe薄膜的 T_c [27]显著升高，这与 FeSe 电子和衬底高频光学声子之间的晶格失配、电荷转移及界面耦合密切相关[28, 29]。不同于高压，通过施加外延压缩应变，$La_3Ni_2O_7$,$La^{2.85}Pr^{0.15}Ni_2O_7$, 和 $La_2PrNi_2O_7$ 薄膜在常压下实现了超导转变 [30–32]。由臭氧退火和界面扩散引入的空穴掺杂导致费米面上形成 γ 口袋，这对诱导超导性至关重要[33, 34]。对于无限层铜氧化物 $Sr_{1-x}Eu_xCuO^{2+y}$，T_c随 Eu 掺杂水平变化的穹顶形曲线明显受到 $KTaO_3$ 衬底施加的拉伸应变调制[35]。显然，除应变外，掺杂效应对于实现或调控在特定衬底上制备的薄膜超导性也至关重要。因此，寻找新型二维材料非常有意义，其中超导转变可以在无掺杂的情况下完全通过应变工程进行调控。

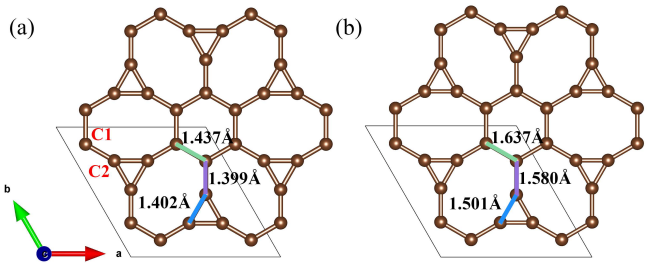


图1. THO-石墨烯的晶体结构。(a) 自由支撑THO-石墨烯，其中两个不等价碳原子分别标记为C1和C2。(b) 处于12%双轴拉伸应变下的THO-石墨烯。三种不同的碳碳键以不同颜色表示，键长标注在碳碳键旁。晶胞以黑色实线表示。

在本研究中，我们聚焦于一种理论上提出的二维碳

* gaomiao@nbu.edu.cn
† cuitian@nbu.edu.cn
‡ zlu@ruc.edu.cn

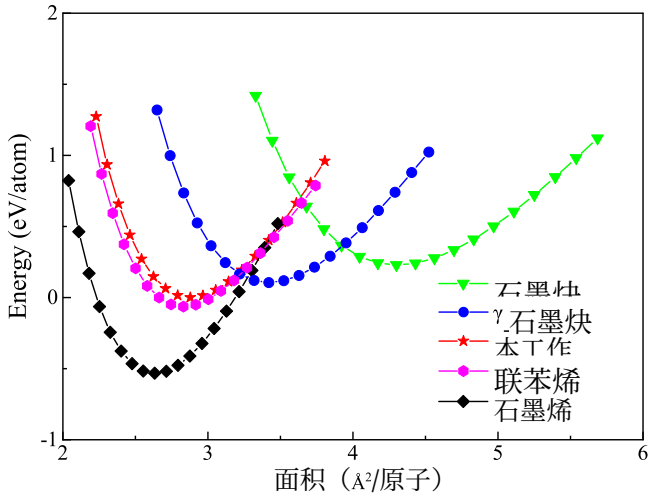


图2. 五种不同二维碳同素异形体的总能量比较，能量随每个原子所占面积的变化而变化。此处将优化后的 THO-石墨烯的总能量设为零。

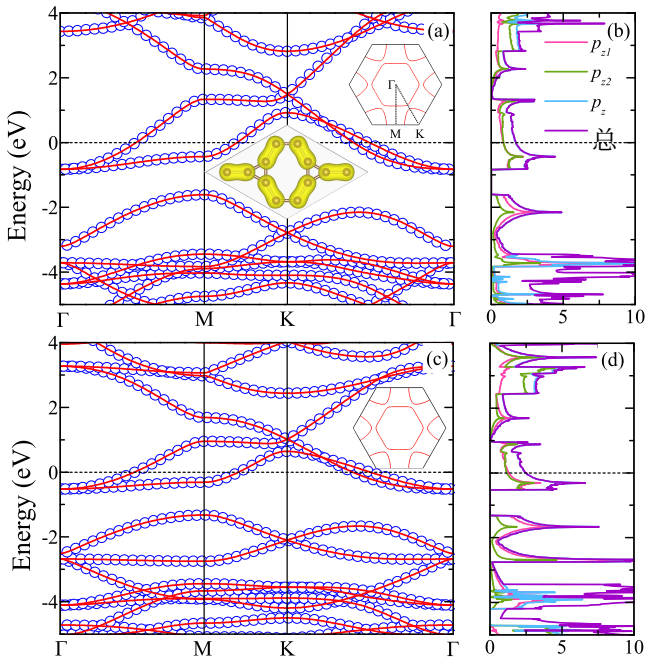


图3. THO-石墨烯的电子结构。(a) 和 (c) 分别为双轴拉伸应变=0和12% 下 THO-石墨烯的能带结构。红线和蓝色圆圈分别表示通过第一性原理计算和最大局域化Wannier函数插值获得的能带结构。费米能级设为零。(b) 和 (d) 分别为 THO-石墨烯在双轴拉伸应变下的总态密度和p_z轨道分辨态密度（态/电子伏特/晶胞），对应双轴拉伸应变=0 和 12%。p_{z1} 和 p_{z1} 分别表示图 p_z 1 中标记的不等价碳原子的轨道。

二维碳同素异形体 THO-石墨烯，由于其与鸢尾科花朵的相似性，也被称为鸢尾石墨烯 [36]。基于密度泛函理论第一性原理计算，我们发现自由支撑THO-石墨烯的电子-声子耦合过弱，无法诱导超导性。在施加双轴拉伸应变（BTS）后，电子-声子耦合逐渐增强。当 BTS 达到 8% 时，THO-石墨烯发生超导转变，其 T_c 为 1.7 K。进一步将 BTS 增加至 12% 后，电子-声子耦合常数 λ 显著提升至 1.07，这是由于声子软化以及费米能级处态密度（DOS）增大所致，同时 T_c 大幅升高至 45 K。本文展示了 12% 应变THO-石墨烯的详细电子结构、晶格动力学、电子-声子耦合及超导性质。计算中使用的参数见附录A。

II. 结果与讨论

THO-石墨烯结晶于空间群 *P6/mmm*，其中一个规则六边形被六个八边形环绕，如图 1 所示。对于自由悬置的情况，面内晶格常数优化为 6.315 Å。两个不等价碳原子位于 Wyckoffpositions 6*l* (0.869, 0.737, 0.000) 和 6*l*(0.741, 0.481, 0.000)。三种不同类型的碳-碳键分别连接三对特定的多边形：八边形与六边形、两个八边形，以及八边形与三角形。键长分别为 1.402 Å、1.437 Å 和 1.399 Å。THO-石墨烯在失去动力学稳定性之前，能够承受最大 12% 的双轴拉伸应变，此时晶格常数为 7.073 Å。在这一临界双轴拉伸应变下，两个不等价碳原子的坐标略微移动至 6*l* (0.866, 0.733, 0.000) 和 6*l*(0.737, 0.475, 0.000)。三种碳碳键分别拉长至 1.637 Å、1.580 Å 和 1.501 Å，增幅为 13.92%，12.94% 和 7.06%，相较于无应变情况。

为确定是否有可能通过实验获得 THO-石墨烯，我们将其总能量与四种已合成的二维碳层进行比较 [图 2]，即石墨烯[37], 石墨炔 [38, 39], γ-石墨炔 [40, 41],和联苯烯 [42]。尽管 THO-石墨烯的稳定性不如石墨烯和联苯烯，但其形成能低于 γ-石墨炔和石墨炔，能量优势分别为 105.5 meV/原子和 228.3 meV/原子。这强烈表明，实验上有可能获得 THO-石墨烯。

自由支撑THO-石墨烯及其处于12%临界双轴拉伸应变下的电子结构如图3所示。THO-石墨烯具有金属性，其有两条能带穿过费米能级 [图3（a）]，形成了费米面，该费米面由靠近 Γ 点的六边形电子费米片和围绕*K* 点的空穴费米片组成 [，见图3（a）]中的插图。在费米能级附近，态密度主要由碳原子的p_z 轨道贡献 [，如图3（b）]所示。这意味着与面内sp^2杂化键相关的态收缩至远低于费米能级处，对电导率没有贡献。为明确确定THO-石墨烯在费米能级附近的成键性质，我们进一步计算了从−0.1 eV到0.1 eV的积分局域态密度。结果表明，费米面态源于围绕 π三角形的π成键态

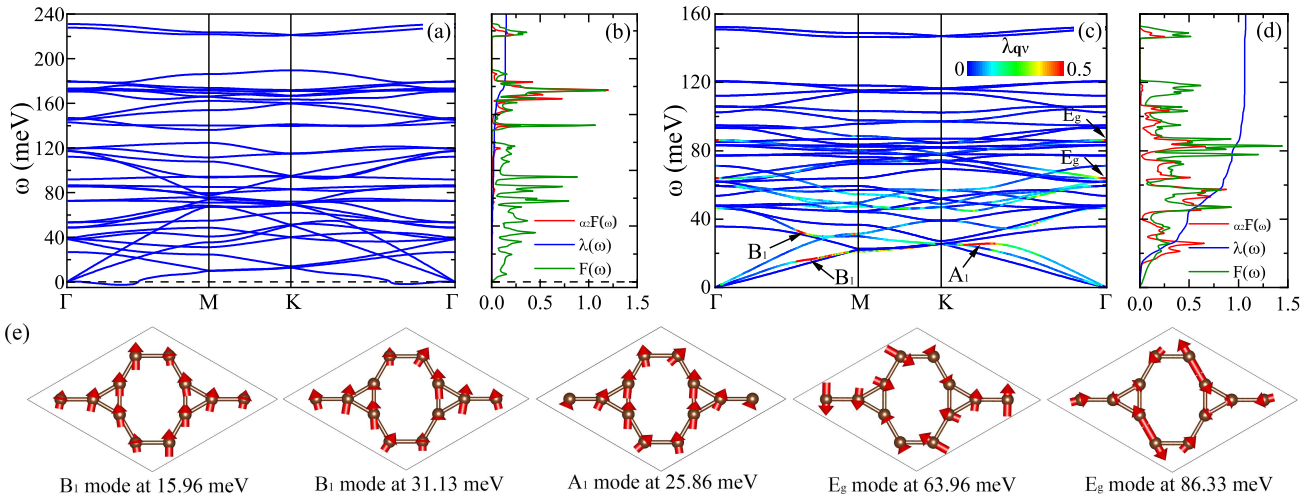


图4. THO-石墨烯的晶格动力学。(a)和(c) 双轴拉伸应变为=0和12%时THO-石墨烯的声子谱。每个声子模qν 的 $\lambda_{\mathbf{q}\nu}$ 强度以不同颜色表示。(b)和(d) 双轴拉伸应变为=0 和12%时的声子态密度F(ω)（模/meV）、Eliashberg谱函数α^2F(ω)，以及求和后得到的 $\lambda(\omega)$。这里，$\lambda(\omega) = 2\mathrm{R}\int_0^{\omega'} \alpha^2F(\omega')\,\omega'\,\mathrm{d}\omega'$。(e) 五种强耦合声子模的声子位移。红色箭头的长度表示振动振幅。

因此，两个不等价碳原子在费米能级附近的态密度权重几乎相同 [图3（b）]。在双轴拉伸应变下，尽管费米面几乎没有变化 [图3（c）], 带宽显著变窄，导致态密度增大 [图3（d）]。例如，N（0）即费米能级处的态密度，与无应变情况相比增加了45.6%，这可能有利于超导性。

无应变和12%应变THO-石墨烯的声子谱和态密度 $F(\omega)$如图4(a)-图4(d)所示。尽管在自由支撑THO-石墨烯中， Γ 点附近观察到几个微弱的虚频 [图4(a)], , 但在应变情况下这些虚频消失 [图4(c)]。除这些虚频模外，其他声子模的频率均为正值。这种现象并不意味着晶格存在动力学不稳定性 [43], , 在硼烯等二维材料的模拟中也很常见 [44–46], 砷烯 [47, 48],以及第四族元素和III-V族二元化合物的蜂窝结构中也存在这种现象[49]。无应变THO-石墨烯的最高声子频率达到231.05 meV，甚至高于石墨烯[50, 51]。这可能与碳三角形中较短的键长有关。由于双轴拉伸应变导致原子间力常数减弱，当双轴拉伸应变为12%时，最高声子频率降至152.44 meV，表明声子明显软化。同样，声子态密度峰值从171.37 meV移至83.93 meV。

为研究电子-声子耦合特性，我们计算了 Eliashberg 谱函数 $\alpha^2F(\omega)$。如图 $\alpha^2F(\omega)$ 所示4(b)，在自由支撑THO-石墨烯中，只有能量高于 130 meV 的高频声子对电子-声子耦合有贡献。高频区域内 $\alpha^2F(\omega)$ 与 $F(\omega)$ 的一致性表明，这些声子的电子-声子耦合矩阵元几乎均匀分布。然而，高频强耦合声子总会导致电子-声子耦合常数降低

电子-声子耦合常数 λ，因为 $\lambda = 2\mathrm{R}\int \alpha^2F(\omega)\,\omega\,\mathrm{d}\omega$。因此，未应变的THO-石墨烯中 λ 等于 0.15。将库仑赝势 μ^* 设为 0.1 时，未发现超导性。有趣的是，施加 12% 双轴拉伸应变后， α^2F(ω) 明显红移。若干声子模对电子-声子耦合有显著贡献，包括声学 B_1 和 A_1 模，以及能量约为 63.96 meV 和 86.33 meV 的两个光学 E_g 模[（图 4(d)）]。这些强耦合声子模的声子位移如图 4(e) 所示，对应于碳原子的面内振动。得益于声子软化，电子-声子耦合常数 λ 显著增大至 1.07，约为未应变情况下的七倍。尽管对数平均频率 $\omega_{\log}$ 降至 39.47 meV，超导转变温度 T_c 仍升至 35.2 K，这是依据 McMillan-Allen-Dynes 公式（T_c^{MAD}）粗略估算的。在中等双轴拉伸应变下，电子-声子耦合常数 λ、$\omega_{\log}$、T MAD$_c$的计算值分别为：8% 双轴拉伸应变时为 0.35、85.56 meV、1.7 K；10% 双轴拉伸应变时为 0.51、66.35 meV、10.5 K。

我们进一步求解各向异性 Eliashberg 方程，以获得合理的 T_c 值，并深入了解双轴拉伸应变为 12% 时超导能隙的分布。这里，将对 Matsubara 频率求和时的截断频率 ω_c 选为 1.5 eV，约为双轴拉伸应变为 12% 时 THO-石墨烯最高声子频率的 10 倍。图 5(a) 展示了不同温度下归一化超导能隙 $\Delta_{n\mathbf{k}}$ 的分布。超导能隙聚集在一起，表明其具有单能隙特征。计算得到， $\Delta_{n\mathbf{k}}$未消失时的最高温度（即 T_c）为 45 K。在 10 K 时，THO-石墨烯的平均超导能隙$\Delta_{n\mathbf{k}}^{\mathrm{ave}}$为 7.17 meV。超导能隙各向异性比 Δ^{aniso} nk 定义为 ($\Delta_{n\mathbf{k}}^{\mathrm{max}}$-$\Delta_{n\mathbf{k}}^{\mathrm{min}}$)/$\Delta_{n\mathbf{k}}^{\mathrm{ave}}$=，其值为 (7.22-7.09)/7.17=1，即 1.81%。准粒子态密度 $N_s(\omega)$/N(0) [也证实了单能隙特征，见图 5(c)]。超导能隙的分布

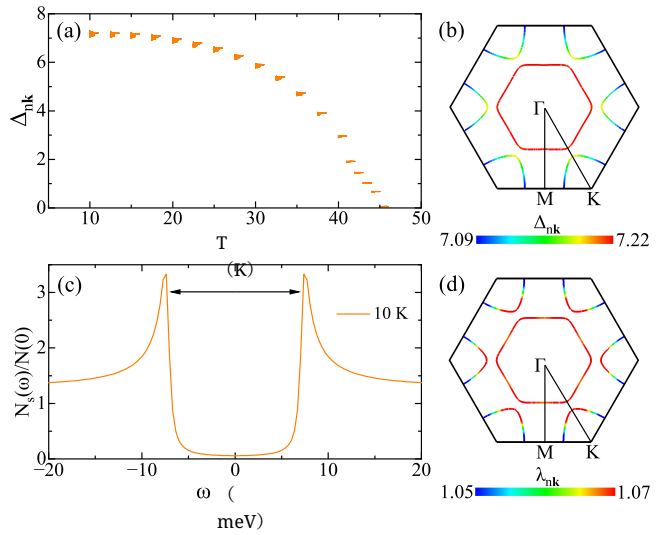


图5. (a) 不同温度下费米面上超导能隙值 Δ_{nk} 的温度依赖性。(b) 10 K时费米面上超导能隙 Δ_{nk} 的分布。(c) 10 K时的准粒子态密度。(d) 费米面上电子-声子耦合强度 λ_{nk} 的分布。这里，n和k分别表示电子态的能带指标和动量。

超导能隙 Δ_{nk} 在 10 K 时费米面上的分布如图 5(b) 所示，其中 Γ 点附近六边形费米面上的能隙略大。费米面上 λ_{nk} 的分布 [见图 5(d)]。

关于理论预测，应变诱导非超导相向超导相转变的报道较少。应变调控有助于提高理论提出的二维本征超导体的T_c 。在4%拉伸应变下，单层MgB_2 的转变温度从20 K升至50 K [52]。氢化后，由于硼 σ能带中的电子占据减少，单层MgB_2 的T_c 进一步升至67 K；通过应变调控，温度可高达100 K [53]。夹心式三层薄膜由两层六角形BC层和夹在中间的插层金属层构成，例如LiB_2C_2 和NaB_2C_2, , 是颇具前景的二维高T_c 超导体，在双轴拉伸应变下最高T_c 可达150 K [54–57]。应变增强了空穴掺杂六角形单层氮化硼的电子-声子耦合强度，使其在17.5%应变下的T_c最高达到41.6 K [58]。研究提出，氢化LiBC在3.59%拉伸应变下可实现T_c 超过120 K的三能隙超导 [59]。氢化Janus 2H-MoSH的本征T_c 为26.8 K，通过应变和掺杂可调至36.7 K [60]。因此，THO-石墨烯可被视为一个卓越的平台，能够通过施加应变有效调控金属-超导体转变。

寻找高温二维元素超导体是一个有趣的课题。目前，二维碳层中的超导性已得到广泛探索。据报道，扭转双层石墨烯处于绝缘态，但在静电掺杂下会出现超导性，T_c 可达 1.7 K [61]。根据理论计算，石墨烯在 ~4×10^{14} cm^{-2} 的空穴掺杂和 16.5% 的双轴拉伸应变[62]下，T_c 可达 30 K。T-石墨烯是一种由四元环和八元环构成的碳层，也称为八角烯，有研究认为它是一种本征元素超导体，T_c 最高可达 20.8 K [63]。通过电子掺杂破坏完美的费米面嵌套和长程磁有序，八角烯可能基于自旋涨落呈现非常规 $s^{\pm}$ 超导性 [64, 65]。研究人员考察了联苯烯中的常规和非常规超导性，其 T_c 分别为 3.0 K 和 1.7 K[66]。其他经理论研究的二维元素超导体，包括硅烯[67], 、磷烯 [68], 、硼烯 [44–46], 和砷烯 [48], , 预测的 T_c 均不超过 31 K。在实验中，通过三维超导贵金属生长薄膜结构，是获得二维元素超导体的另一种策略，例如铌 [69], 、铅 [70, 71], 和镓 [72] 薄膜。但其转变温度在某种程度上与块体材料相近。显然，本研究预测的 THO-石墨烯的 T_c 为二维元素超导体创下了新纪录。

III. 结论

总之，本研究展示了应变工程作为一种强大且清洁的手段，在诱导二维元素材料产生超导性方面具有非凡潜力。通过系统的第一性原理计算，我们证明，由三角形、六边形和八边形组成的金属碳单层 THO-石墨烯，在施加双轴拉伸应变后，会从非超导态显著转变为稳定的超导体。超导性的出现主要由应变引起的电子和声子性质变化的协同效应驱动：费米能级处的态密度显著增加，特定面内振动模式大幅软化。这些变化共同增强了电子-声子耦合强度，从而促成库珀对形成。值得注意的是，在 12% 的应变下，计算得到的 T_c 达到 45 K，这是迄今报道的纯元素二维超导体中预测的最高温度。这一发现树立了新的标杆，并凸显了碳基纳米结构对机械形变的独特响应。此外，相较于其他已合成的碳同素异形体，THO-石墨烯在能量上具有可行性，这表明其有望通过实验实现。

致谢

本工作得到了国家重点研发计划（资助编号：2024YFA1408601和2023YFA1406201）、国家自然科学基金（资助编号：12434009、12274255、12074040和12104247）、浙江省自然科学基金（资助编号：LMS26A040005和LMS26A040006）、浙江省科技创新团队计划（资助编号：2021R01004）以及宁波市青年科技创新领军人才计划（资助编号：2023QL016）的支持。F. M还得到了北京师范大学唐氏学者项目的支持。

附录A：计算方法

在我们的计算中，采用了第一性原理平面波程序QUANTUM-ESPRESSO [73]。沿c 轴方向加入了20 Å厚的真空层，以避免相邻THO-石墨烯层之间的耦合。我们使用Perdew-Burke-Ernzerhof公式的广义梯度近似（GGA） [74] 和优化的守恒范数Vanderbilt赝势 [75]计算电子态。经过充分的收敛性测试后，动能截断和电荷密度截断分别设为80 Ry和320 Ry。采用未平移的 24×24×1点网格，并使用Methfessel-Paxton展宽[76] 0.02 Ry。动力学矩阵和微扰势在密度泛函微扰理论框架下，于 Γ中心网格 8×8×1 上计算[77]。

在布里渊区的 8×8×1 网格上构建应变 THO-石墨烯的最大局域Wannier函数（MLWFs） [78]。我们使用 30 个 Wannier 函数描述 THO-石墨烯费米能级附近的能带结构。具体而言，12 个 Wannier 函数对应碳原子的 p_z 轨道，另外 18 个 Wannier 函数则是局域在碳—碳键中间的 σ类态。经过最小化后，这些 MLWFs 的最大空间延展小于 1.1 $Å^2$, , 表现出极佳的局域性。我们采用精细的电子（160×160×1）和声子（80×80×1）网格，使用 Wannier90 和 EPW代码[79]对 EPC 常数进行插值。电子和声子的狄拉克 δ函数分别用宽度为 20 和 0.5 meV 的展宽函数替代。通过求解各向异性 Eliashberg 方程[79] , 研究了双轴拉伸应变=12% 下 THO-石墨烯的超导性质；电子和声子均采用 80×80×1网格。

[1] K. Shimizu、H. Ishikawa、D. Takao、T. Yagi 和 K. Amaya，《压缩锂在 20 K 时的超导性》，《自然》（伦敦）419，597（2002）。[2] X. A. Li、J. Sun、P. Shahi、M. Gao、A. H. MacDonald、Y. Uwatoko、T. Xiang、J. B. Goodenough、J. Cheng 和 J. Zhou，《压力诱导的黑磷单晶相变与超导性》，《美国国家科学院院刊》115，9935（2018）。[3] H. Takahashi、A. Sugimoto、Y. Nambu、T. Yamauchi、Y. Hirata、T. Kawakami、M. Avdeev、K. Matsubayashi、F. Du、C. Kawashima、H. Soeda、S. Nakano、Y. Uwatoko、Y. Ueda、T. J. Sato 和 K. Ohgushi，《压力诱导铁基梯状材料 $BaFe_2S_3$, 中的超导性》，《自然·材料》14，1008（2015）。[4] Y. Takabayashi、A. Y. Ganin、P. Jeglič、D. Arčon、T. Takano、Y. Iwasa、Y. Ohishi、M. Takata、N. Takeshita、K. Prassides 和 M. J. Rosseinsky，《无序自由的非 BCS 超导体 Cs_3C_{60} 源自反铁磁绝缘体母态》，《科学》323，1585（2009）。[5] D. F. Duan、Y. X. Liu、F. B. Tian、D. Li、X. L. Huang、Z. L. Zhao、H. Y. Yu、B. Liu、W. J. Tian 和 T. Cui，《高温超导性致密（H_2S）$_2H_2$ 的压力诱导金属化》，Sci. Rep. 4，6968（2014）。[6] A. P. Drozdov、M. I. Eremets、I. A. Troyan、V. Ksenofontov 和 S. I. Shylin，《硫氢化物体系在高压下于 203 K 实现常规超导》，《自然》（伦敦）525，73（2015）。[7] H. Liu、I. I. Naumov、R. Hoffmann、N. W. Ashcroft 和 R. J. Hemley，《高压下可能具有高温超导性的镧氢化物和氢化钇》，《美国国家科学院院刊》114，6990（2017）。[8] F. Peng、Y. Sun、C. J. Pickard、R. J. Needs、Q. Wu 和 Y. M. Ma，《高压下稀土氢化物中的氢笼形结构：实现室温超导性的可能途径》，《物理评论快报》119，107001（2017）。[9] A. P. Drozdov、P. P. Kong、V. S. Minkov、S. P. Besedin、M. A. Kuzovnikov、S. Mozaffari、L. Balicas、F. F. Balakirev、D. E. Graf、V. B. Prakapenka、E. Greenberg、D. A. Knyazev、M. Tkacz 和 M. I. Eremets，《高压下镧氢化物在 250 K 时的超导性》，《自然》（伦敦）569，528 2019年( )。

[10] F. Hong, L. X. Yang, P. F. Shan, P. T. Yang, Z. Y. Liu, J. P. Sun, Y. Y. Yin, X. H. Yu, J. G. Cheng, and Z. X. Zhao, 采用标准四探针配置研究高压下镧超氢化物的超导性，《中国物理快报》37, 107401 (2020年). [11] W. H. Chen, D. V. Semenok, X. L. Huang, H. Y. Shu, X. Li, D. F. Duan, T. Cui, and A. R. Oganov, 铈超氢化物中高温超导相的临界温度最高达115 K，压力低于1兆巴，《物理评论快报》127, 117001 (2021年). [12] H. Wang, J. S. Tse, K. Tanaka, T. Iitaka, and Y. Ma, 高压下的超导类方钠石笼状氢化钙，《美国国家科学院院刊》109, 6463 (2012年). [13] L. Ma, K. Wang, Y. Xie, X. Yang, Y. Y. Wang, M. Zhou, H. Liu, X. H. Yu, Y. S. Zhao, H. B. Wang, G. T. Liu, and Y. Ma, 笼状氢化钙 CaH_6 的高温超导相在172吉帕压力下最高可达215 K，《物理评论快报》128, 167001 (2022年). [14] Z. W. Li, X. He, C. L. Zhang, X. C. Wang, S. J. Zhang, Y. T. Jia, S. M. Feng, K. Lu, J. F. Zhao, J. Zhang, B. S. Min, Y. W. Long, R. C. Yu, L. H. Wang, M. Y. Ye, Z. S. Zhang, V. Prakapenka, S. Chariton, P. A. Ginsberg, J. Bass, S. H. Yuan, H. Z. Liu, and C. Q. Jin, 在钙超氢化物中发现200 K以上的超导性，《自然·通讯》13, 2863 (2022年). [15] X. W. Liang, A. Bergara, L. Y. Wang, B. Wen, Z. S. Zhao, X. F. Zhou, J. L. He, G. Y. Gao, and Y. J. Tian, 压力下CaYH12中潜在的高温超导性，《物理评论B辑》99, 100505 (2019年). [16] H. Xie, D. F. Duan, Z. J. Shao, H. Song, Y. C. Wang, X. H. Xiao, D. Li, F. B. Tian, B. B. Liu, and T. Cui, 高压下三元笼状氢化物 $YCaH_{12}$ 中的高温超导性，《物理学杂志：凝聚态》31, 245404 (2019年). [17] K. X. Zhang, J. N. Guo, Y. L. Wang, X. Y. Wu, X. L. Huang, and T. Cui, 三元氢化物Im $\bar{3}$ $_6$ **42**, m（Y, 110704 2025 Ca）H在减压过程中的稳健超导稳定性，《中国物理快报》（）. [18] Z. H. Zhang, T. Cui, M. J. Hutcheon, A. M. Shipley, H. Song, M. Y. Du, V. Z. Kresin, D. F. Duan, C. J. Pickard, and Y. S. Yao, 中等压力下具有氢基合金骨架的高温超导体设计原则，《物理评论快报》128, 047001 (2022年).

[19] Y. G. Song, J. K. Bi, Y. Nakamoto, K. Shimizu, H. Y. Liu, B. Zou, G. T. Liu, H. B. Wang, and Y. M. Ma, 化学计量三元超氢化物$LaBeH_8$：一种新型模板，可在80 GPa下实现110 K高温超导, 《物理评论快报》130, 266001 (2023年). [20] X. X. Song, X. K. Hao, X. D. Wei, X. L. He, H. Y. Liu, L. Ma, G. T. Liu, H. B. Wang, J. Y. Niu, S. J. Wang, Y. P. Qi, Z. Y. Liu, W. T. Hu, B. Xu, L. Wang, G. Y. Gao, and Y. J. Tian, 兆巴压力以下非笼形三元硼氢化镧中105 K以上的超导性, 《美国化学会志》146, 13797 (2024年). [21] Y. G. Song, C. H. Ma, H. B. Wang, M. Zhou, Y. P. Qi, W. Z. Cao, S. R. Li, H. Y. Liu, G. T. Liu, and Y. M. Ma, 高压条件下三元La-Sc-H体系在298 K时的室温超导性, arXiv:2510.01273 (2024年). [22] X. L. He, W. B. Zhao, Y. Xie, A. Hermann, R. J. Hemley, H. Y. Liu, and Y. M. Ma, 压力下$LaSc_2H_{24}$中预测的热超导, 《美国国家科学院院刊》121, e2401840121 (2024年). [23] J. Y. Nie, X. F. Yang, K. Y. Chen, X. Q. Liu, W. Xia, J. Wang, R. Zhang, D. Z. Dai, C. C. Zhao, C. P. Tu, H. L. Dong, X. B. Jin, J. K. Deng, X. Zhang, Y. F. Guo, and S. Y. Li, 笼目金属ATi_3Bi_5（A = Cs, Rb）中的压力诱导双穹顶超导性, 《中国物理快报》42, 070713 (2025年). [24] H. L. Sun, M. W. Huo, X. W. Hu, J. Y. Li, Z. J. Liu, Y. F. Han, L. Y. Tang, Z. Q. Mao, P. T. Yang, B. S. Wang, J. G. Cheng, D. X. Yao, G. M. Zhang, and M. Wang, 高压下镍酸盐中接近80 K的超导性迹象, 《自然》（伦敦）621, 493 (2023年). [25] J. Hou, P. T. Yang, Z. Y. Liu, J. Y. Li, P. F. Shan, L. Ma, G. Wang, N. N. Wang, H. Z. Guo, J. P. Sun, Y. Uwatoko, M. Wang, G. M. Zhang, B. S. Wang, and J. G. Cheng, 加压$La_3Ni_2O_7$晶体中高温超导相的出现, 《中国物理快报》40, 117302 (2023年). [26] Y. N. Zhang, D. J. Su, Y. E. Huang, Z. Y. Shan, H. L. Sun, M. W. Huo, K. X. Ye, J. W. Zhang, Z. H. Yang, Y. K. Xu, Y. Su, R. Li, M. Smidman, M. Wang, L. Jiao, and H. Q. Yuan, $La_3Ni_2O_{7-\delta}$中的高温超导性、零电阻及奇异金属行为, 《自然·物理》20, 1269 (2024年). [27] Q. Y. Wang, Z. Li, W. H. Zhang, Z. C. Zhang, J. S. Zhang, W. Li, H. Ding, Y. B. Ou, P. Deng, K. Chang, J. Wen, C. L. Song, K. He, J. F. Jia, S. H. Ji, Y. Y. Wang, L. L. Wang, X. Chen, X. C. Ma, and Q. K. Xue, $SrTiO_3$, 上单晶胞FeSe薄膜中的界面诱导高温超导, 《中国物理快报》29, 037402 (2012年). [28] K. Liu, Z. Y. Lu, and T. Xiang, $SrTiO_3$ (001)上FeSe单层和双层薄膜的原子与电子结构：第一性原理研究, 《物理评论B辑》85, 235123 (2012年). [29] M. D. Zhang, R. C. Shi, R. Wu, X. T. Jiao, M. X. Shi, J. X. Liu, Y. B. Wang, W. F. Dong, C. Ding, T. X. Qin, H. Y. Liu, L. L. Wang, Z. Y. Zhang, P. Gao, Q. K. Xue, and Q. H. Xiong, Nb掺杂$SrTiO_3$, 上单晶胞FeSe薄膜中界面相干电子-声子耦合的直接证据, 《物理评论快报》135, 126903 (2025年). [30] E. K. Ko, Y. J. Yu, Y. D. Liu, L. Bhatt, J. R. Li, V. Thampy, C. T. Kuo, B. Y. Wang, Y. Lee, K. Lee, J. S. Lee, B. H. Goodge, D. A. Muller, and H. Y. Hwang, La3 638, 935 2 7, 2025 Ni O薄膜中常压超导性的迹象, 《自然》（伦敦）（）. [31] G. D. Zhou, W. Lv, H. Wang, Z. H. Nie, Y. Q. Chen, Y. Y. Li, H. L. Huang, W. Q. Chen, Y. J. Sun, Q. K. Xue, and Z. Y. Chen, $(La,Pr)_3Ni_2O_7$ 薄膜中高于40 K的常压超导起始温度, 《自然》（伦敦）640, 641 (2025年). [32] Y. D. Liu, E. K. Ko, Y. J. Tarn, L. Bhatt, J. R. Li, V. Thampy, B. H. Goodge, D. A. Muller, S. Raghu, Y. J. Yu, and H. Y. Hwang, 压缩应变 $La_2PrNi_2O_7$ 薄膜中的超导性和正常态输运, 《自然·材料》24, 1221（2025年）。[33] P. Li, G. D. Zhou, W. Lv, Y. Y. Li, C. M. Yue, H. L. Huang, L. Z. Xu, J. C. Shen, Y. Miao, W. H. Song, Z. H. Nie, Y. Q. Chen, H. Wang, W. Q. Chen, Y. B. Huang, Z. H. Chen, T. Qian, J. H. Lin, J. F. He, Y. J. Sun, Z. Y. Chen, and Q. K. Xue, 超导 $(La,Pr)_3Ni_2O_7$/$SrLaAlO_4$ 异质结构的角分辨光电子能谱, 《国家科学评论》12, nwaf205（2025年）。[34] H. L. Shi, Z. H. Huo, G. L. Li, H. Ma, T. Cui, D. X. Yao, and D. F. Duan, 载流子掺杂和厚度对 $La_3Ni_2O_7$ 薄膜电子结构的影响, 《中国物理快报》42, 080708（2025年）。[35] Z. X. Deng, H. Yan, B. J. Wu, Y. J. Li, J. C. Zhang, Z. W. Zhu, C. L. Song, X. C. Ma, and Q. K. Xue, 拉伸应变对 $Sr_{1-x}Eu_xCuO^{2+y}$ 薄膜中超导性和热激活涡旋运动的影响, 《量子前沿》4, 18（2025年）。[36] M. L. Pereira J´unior, W. F. da Cunha, W. F. Giozza, R. T. de Sousa Junior, and L. A. Ribeiro Junior, 铱烯：一种新型二维碳同素异形体, 《FlatChem》37, 100469（2023年）。[37] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, 原子级薄碳膜中的电场效应, 《科学》306, 666 2004（）。[38] J. A. Marsden and M. M. Haley, 基于脱氢苯并轮烯的碳网络。5. 石墨炔纳米结构中二维共轭的扩展, 《有机化学杂志》70, 10213（2005年）。[39] G. X. Li, Y. L. Li, H. B. Liu, Y. B. Guo, Y. J. Li, and D. B. Zhu, 石墨炔纳米尺度薄膜的构筑, 《化学通讯》46, 3256（2010年）。[40] Q. D. Li, Y. Li, Y. Chen, L. L. Wu, C. F. Yang, and X. L. Cui, 通过机械化学合成 γ石墨炔及其电子结构, 《碳》136, 248（2018年）。[41] V. G. Desyatkin, W. B. Martin, A. E. Aliev, N. E. Chapman, A. F. Fonseca, D. S. Galv˜ao, E. R. Miller, K. H. Stone, Z. Wang, D. Zakhidov, F. T. Limpoco, S. R. Almahdali, S. M. Parker, R. H. Baughman, and V. O. Rodionov, 多层 γ石墨炔的可规模化合成与表征：具有小直接带隙的新型碳晶体, 《美国化学会志》144, 17999（2022年）。[42] Q. T. Fan, L. H. Yan, M. W. Tripp, O. Krej˘c´ı, S. Dimosthenous, S. R. Kachel, M. Chen, A. S. Foster, U. Koert, P. Liljeroth, and J. M. Gottfried, 联苯烯网络：一种非苯型碳同素异形体, 《科学》372, 852（2021年）。[43] F. Liu, P. B. Ming, and J. Li, 张力下石墨烯理想强度和声子不稳定性的第一性原理计算, 《物理评论B辑》76, 064120（2007年）。[44] E. S. Penev, A. Kutana, and B. I. Yakobson, 二维硼能否超导? 《纳米快报》16, 2522（2016年）。[45] M. Gao, Q. Z. Li, X. W. Yan, and J. Wang, 对硼烯中声子介导超导性的预测, 《物理评论B辑》95, 024505（2017年）。[46] M. Gao, X. W. Yan, J. Wang, Z. Y. Lu, and T. Xiang, 生长于Al(111) 表面的蜂窝状硼烯中的电子-声子耦合, 《物理评论B辑》100, 024503（2019年）。[47] C. Kamal and M. Ezawa, 砷烯：二维起伏和褶皱蜂窝状砷体系, 《物理评论B辑》91, 085423 2015（）。[48] X. Kong, M. Gao, X. W. Yan, Z. Y. Lu, and T. Xiang, 电子掺杂砷烯中的超导性, 《中国物理B》27, 046301（2018年）。

[49] H. S¸ahin, S. Cahangirov, M. Topsakal, E. Bekaroglu, E. Ak- turk, R. T. Senger, and S. Ciraci, 第四族元素和III-V族二元化合物的单层蜂窝结构：第一性原理计算，《物理评论B辑》80, 155453（2009年）。[50] J. Maultzsch, S. Reich, C. Thomsen, H. Requardt, and P. Or- dej ´ **92**, o 075501 2004 n, 石墨中的声子色散，《物理评论快报》（）。[51] N. Bonini, M. Lazzeri, N. Marzari, and F. Mauri, 石墨和石墨烯中的声子非谐性，《物理评论快报》99, 176802 2007（）。[52] J. Bekaert, A. Aperis, B. Partoens, P. M. Oppeneer, and M. V. Milo˘sevi´c, 原子级薄极限下多能隙超导性的演变：应变增强的单层MgB_2, 三能隙超导，《物理评论B辑》96, 094510（2017年）。[53] J. Bekaert, M. Petrov, A. Aperis, P. M. Oppeneer, and M. V. Milo˘sevi´c, 氢诱导二维材料高温超导：以氢化单层MgB_2, 为例，《物理评论快报》123, 077001（2019年）。[54] M. Gao, X. W. Yan, Z. Y. Lu, and T. Xiang, LiB2 101, 094501 2 2020 C三层薄膜中的强耦合超导，《物理评论B辑》（）。[55] L. Liu, X. Liu, P. Song, L. Zhang, X. Huang, W. Zhang, Z. Zhang, and Y. Jia, 层状$Ca_nB_{n+1}C_{n+1}$ 薄膜中的高临界温度表面超导，《纳米快报》23, 1924（2023年）。[56] Y. M. Zhang, J. Y. Chen, J. Hao, M. L. Xu, and Y. W. Li, 金属化二维金属硼碳化物中由 σ带驱动的常规高温超导，《物理评论B辑》110, 064513（2024年）。[57] W. X. Chen, Z. T. Liu, Z. H. Huo, G. Y. Dong, J. L. Cai, and D. F. Duan, 单层$Na(BC)_2$ 和$K(BC)_2$, 中临界温度$_c$ 高于100 K的高温声子介导超导，《中国物理快报》41, 117403（2024年）。[58] X. T. Jin, X. W. Yan, and M. Gao, 单层六方氮化硼的第一性原理计算：超导的可能性，《物理评论B辑》101, 134518（2020年）。[59] H. D. Liu, B. T. Wang, Z. G. Fu, H. Y. Lu, and P. Zhang, 氢化二维单层LiBC中临界温度$_c$ 高于80 K的三能隙超导，《物理评论研究》6, 033241（2024年）。[60] R. Q. Ku, L. Yan, J. G. Si, S. Y. Zhu, B. T. Wang, Y. D. Wei, K. J. Pang, W. Q. Li, and L. J. Zhou, 二维Janus 2H/1T-MoSH单层中电荷密度波和超导性的从头算研究，《物理评论B辑》107, 064508（2023年）。[61] Y. Cao, V. Fatemi, A. Demir, S. Fang, S. L. Tomarken, J. Y. Luo, J. D. Sanchez-Yamagishi, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Kaxi- ras, R. C. Ashoori, and P. Jarillo-Herrero, 魔角石墨烯超晶格半填充时的关联绝缘体行为，《自然》556, 80（2018年）。[62] C. Si, Z. Liu, W. H. Duan, and F. Liu, 掺杂和双轴拉伸应变对石墨烯电子-声子耦合影响的第一性原理计算，《物理评论快报》111, 196802 2013（）。[63] Q. Y. Gu, D. Y. Xing, a nd J. Sun, 超导单层T-石墨烯及新型合成路线，《中国物理快报》36, 097401 2019（）。[64] Y. T. Kang, C. Lu, F. Yang, and D. X. Yao, 方形-八角形晶格中单轨道实现高温$s^{\pm}$ 波超导，《物理评论B辑》99, 184506（2019年）。[65] Y. Yao, J. Li, J. Ye, F. Yang, and D. X. Yao, 双层八角石墨烯中的电场诱导超导，《中国物理快报》42, 067504（2025年）。[66] J. C. Ye, J. Li, D. Y. Zhong, and D. X. Yao, 可能的超导 联苯烯中的电导率，《中国物理快报》40，077401（2023年）。[67] W. H. Wan、Y. F. Ge、F. Yang 和 Y. G. Yao，基于第一性原理密度泛函计算预测硅烯中的声子介导的超导性，《欧洲物理快报》104, 36001（2013年）。[68] Y. F. Ge、W. H. Wan、F. Yang 和 Y. G. Yao，磷烯超导性的应变效应：第一性原理预测，《新物理学杂志》17，035008（2015年）。[69] L. P. Zhang、Z. Y. Xu、X. J. Li、X. Zhang、M. Y. Qin、R. Z. Zhang、J. Xu、W. X. Cheng、J. Yuan、H. B. Wang、A. V. Silhanek、B. Y. Zhu、J. Miao 和 K. Jin，柔性铌薄膜中涡旋运动的级联激发与再入超导性，《中国物理B》32, 047302（2023年）。[70] Y. Guo、Y. F. Zhang、X. Y. Bao、T. Z. Han、Z. Tang、L. X. Zhang、W. G. Zhu、E. G. Wang、Q. Niu、Z. Q. Qiu、J. F. Jia、Z. X. Zhao 和 Q. K. Xue，受量子尺寸效应调控的超导性，《科学》306，1915（2004年）。[71] T. Nishio、T. An、A. Nomura、K. Miyachi、T. Eguchi、H. Sakata、S. Lin、N. Hayashi、N. Nakai、M. Machida 和 Y. Hasegawa，采用扫描隧道显微镜和光谱学研究铅岛纳米结构的超导性，《物理评论快报》101, 167001（2008年）。[72] H. M. Zhang、Y. Sun、W. Li、J. P. Peng、C. L. Song、Y. Xing、Q. H. Zhang、J. Q. Guan、Z. Li、Y. F. Zhao、S. H. Ji、L. L. Wang、K. He、X. Chen、L. Gu、L. S. Ling、M. L. Tian、L. Li、X. C. Xie、J. P. Liu、H. Yang、Q. K. Xue、J. Wang 和 X. Ma，在生长于半导体 GaN(0001) 上的六方镓薄膜双原子层中发现超导相，《物理评论快报》114，107003（2015年）。[73] P. Giannozzi、S. Baroni、N. Bonini、M. Calandra、R. Car、C. Cavazzoni、D. Ceresoli、G. L. Chiarotti、M. Cococcioni、I. Dabo、A. Dal Corso、S. de Gironcoli、S. Fabris、G. Fratesi、R. Gebauer、U. Gerstmann、C. Gougoussis、A. Kokalj、M. Lazzeri、L. Martin-Samos、N. Marzari、F. Mauri、R. Mazzarello、S. Paolini、A. Pasquarello、L. Paulatto、C. Sbraccia、S. Scandolo、G. Sclauzero、A. P. Seitsonen、A. Smogunov、P. Umari 和 R. M. Wentzcovitch，QUANTUM ESPRESSO：用于材料量子模拟的模块化开源软件项目，《物理学杂志：凝聚态》21，395502（2009年）。[74] J. P. Perdew、K. Burke 和 M. Ernzerhof，简单易用的广义梯度近似，《物理评论快报》77，3865（1996年）。[75] D. R. Hamann，优化的范德瓦尔斯范数守恒赝势，《物理评论B辑》88，085117（2013年）。[76] M. Methfessel 和 A. T. Paxton，用于金属布里渊区积分的高精度采样，《物理评论B辑》40，3616（1989年）。[77] S. Baroni、S. de Gironcoli、A. Dal Corso 和 P. Giannozzi，密度泛函微扰理论中的声子及相关晶体性质，《现代物理评论》73，515（2001年）。[78] G. Pizzi、V. Vitale、R. Arita、S. Bl¨ugel、F. Freimuth、G. G´eranton、M. Gibertini、D. Gresch、C. Johnson、T. Koretsune、J. Iba˜nez-Azpiroz、H. Lee、J. M. Lihm、D. Marchand、A. Mar-razzo、Y. Mokrousov、J. I. Mustafa、Y. Nohara、Y. Nomura、L. Paulatto、S. Ponc´e、T. Ponweiser、J. Qiao、F. Th¨ole、S. S. Tsirkin、M. Wierzbowska、N. Marzari、D. Vanderbilt、I. Souza、A. A. Mostofi 和 J. R. Yates，Wannier90作为社区代码：新功能与应用，《物理学杂志：凝聚态》32，165902（2020年）。[79] H. Lee、S. Ponc´e、K. Bushick、S. Hajinazar、J. Lafuente-Bartolome、J. Leveillee、C. Lian、J. M. Lihm、F. Macheda、H. Mori、H. Paudyal、W. H. Sio、S. Tiwari、M. Zacharias、X. Zhang、N. Bonini、E. Kioupakis、E. R. Margine 和 F. Giustino，使用EPW代码从第一性原理研究电子-声子物理，《npj计算材料》9，156（2023年）。