H_3S 的电子结构理论：类平面波价态、态密度峰及其必然接近费米能级

Ryosuke Akashi[1*] *National Institutes for Quantum Science and Technology (QST), Ookayama, Meguro-ku, Tokyo 152-8550, Japan*（日期：2026年1月16日）

极端压力下硫超氢化物 H_3S 的超导性已得到理论解释，但该解释要求电子态密度（态密度）呈现峰状集中；第一性原理计算已发现这种现象。然而，尽管峰的形成机制对其高转变温度至关重要，这一机制却一直不明。我们通过详细分析第一性原理电子波函数来探究这一问题。研究表明，价态波函数具有显著的类平面波特征。通过对自洽势和原子赝势进行傅里叶模分析，我们提取出近似均匀模型；这些模型仅需极少参数，就能准确再现第一性原理能带结构。研究表明，态密度峰是特定平面波杂化的结果。我们提出，琼斯大区与平面波球形费米面的相邻关系，是多重平面波杂化、态密度峰形成及其接近费米能级的根本原因。本文提出的理论解决了 H_3S 电子态的最简建模问题，并揭示了一种可能有助于提高压力诱导超导体转变温度的机制。

arXiv:2601.10016v1 [cond-mat.supr-con] 15 Jan 2026

I. 引言

通过压缩富氢化合物实现高温超导性 [1–3] ，这一预测利用了巴丁–库珀–施里弗理论 [4] 中超导转变温度（T_c）公式

$$T_{\mathrm{c}} \propto \omega_{\mathrm{ph}} \exp\left[-\frac{1}{\lambda}\right]. \tag{1}$$

前因子 ω_{ph} 是介导电子配对的代表性声子频率，而 λ 是有效耦合强度。人们可以预期，通过采用轻元素使 ω_{ph} 最大化，便能获得较高的 T_{c} 。尽管这一设想起初颇为推测性，但后来已成为现实 [5–7]。硫化物的一种富氢相 H_3S 是开创性实例，其在超过 100 吉帕的压力下表现出 200 开尔文的超导转变温度（T_c） [5]。尽管这一纪录很快被 LaH_{10} [8, 9], YH_x [10, 11]、CaH_x [12–14], 等打破，但 H_3S 仍是代表性高 -T_c 氢化物之一：其合成已由多个研究团队重复实现 [15–17], ，而且研究人员已对该体系开展多种测量，以表征其标志性的超导体性质，例如磁场响应 [5, 18–22], 、同位素效应 [5, 23] 和超导能隙 [24, 25]。

从理论角度看，H_3S也颇具吸引力。迄今为止，在超过 200 K的家族中，它是唯一一个氢与电负性更大的原子结合的例子，因此著名的化学预压缩概念 [3]可能并不那么显而易见地适用。其 T_{c} 可由第一性原理计算很好地再现基于Eliashberg理论 [26–33]。在这类计算中，Kohn-Sham（KS）方程得出的态密度（DOS）中出现的显著峰起着至关重要的作用 [32, 34–37], ，因为公式（1）中的 λ 与费米能级处的态密度值成正比。这个峰很容易再现，但迄今尚未成功提炼出其形成原因的简单机制。Slater-Koster和Wannier模型的构建 [38–41]表明，精确的紧束缚建模需要大量跃迁参数，这意味着其机制在本质上可能很复杂。因此，作为高 T_{c}的关键因素，态密度峰的形成机制仍未明了。

在本研究中，我们从与紧束缚相反的视角，重新探讨了氢$_3$S电子结构的最简建模问题。作者最近指出，其能带结构与均匀电子系统 [43]相似。利用近似均匀电子模型，仅用三个经验参数便再现了能带结构中的多种重要特征，例如态密度峰。这表明，氢$_3$S中的能带结构形成可以用经典的近似均匀电子理论 [44]来理解。本文尝试从第一性原理推导这一涌现的近似均匀模型。我们分析第一性原理电子波函数，以揭示其类似平面波的特性。我们推导出近似均匀模型的参数，并展示如何对其进行优化，使之符合第一性原理能带结构，从而验证了近似均匀建模作为一种有效理论的合理性。根据这些结果，我们发现，Jones区激活机制 [45, 46] 可作为一种统一解释，说明为何态密度峰会出现在近似均匀系统中，以及为何它会被钉扎在费米能级附近。基于这种普适理论的成功解释消除了人们对理论态密度峰可能只是偶然产物的担忧，并为在受压金属

* akashi.ryosuke@qst.go.jp

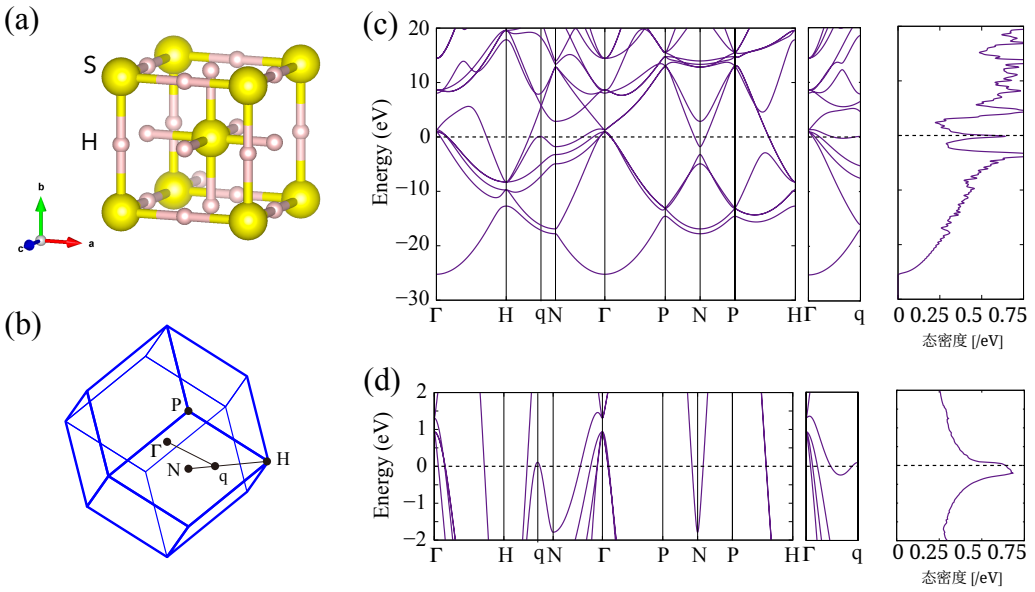


图 1。（a）使用 VESTA [42] 可视化的高压相 H_3S 晶体结构。（b）相应的体心立方布里渊区。为方便起见，我们标出了点 $\mathrm{q} = (2\pi/a) \times (2/3, 1/3, 0)$。（c）电子能带结构和态密度，以及（d）它们的局部放大图。沿 Γ–q 方向的最大值和最小值已被发现是其他方向上的鞍点 [41, 43]。虚线表示费米能级。

系统。

II. 计算细节

采用 QUANTUM ESPRESSO [47] 中实现的平面波赝势方法，计算了体心立方结构 H_3S 的第一性原理电子能带结构 [图 1(a)] 。交换关联泛函采用适用于固体的 Perdew-Burke-Ernzerhof 广义梯度近似（PBEsol [48]）[49]。使用了 PSEUDO DOJO [51] 提供的适用于氢和硫原子的优化范数守恒 Vanderbilt 赝势 [50]。波函数的平面波截断能设为 90 Ry。电荷密度通过 $8\times8\times8$**k**点自洽收敛。立方晶格常数 a 设为 5.6367 玻尔，据此计算得到的理论压力为 195 吉帕。

III. 结果

为便于后续讨论，我们先在图 1 中重述已确立的 H_3S 第一性原理能带结构。根据结构搜索，该体系稳定于体心立方晶体结构 [52], , 其硫原子位置已由 X 射线衍射实验确认 [53]。如图 (c) 所示，态密度在费米能级处呈现出著名的峰。峰的边缘对应于能量相近的范霍夫奇点 [40, 54]。该峰约占 E_{F} 处总态密度的一半，其来源是 **k** 空间中狭小线性区域内的布洛赫态 [41, 43]。在先前的工作中 [43], , 我们提出，这种集中源于多个平面波的杂化；这些平面波沿着某种布拉格平面的交线发生简并。我们在图 (c) 和 (d) 中展示了沿此类交线的能带色散，它经过Γ 和低对称点 $\mathrm{q} \equiv (2/3,\ 1/3,\ 0)$。确实，我们看到两个相邻的鞍点，它们对应于态密度峰的边缘 [图 1(d)]。通过引入使简并平面波发生杂化的衍射势，研究发现，近似均匀模型能够再现能带结构的整体特征 [43]。下文将考察第一性原理 KS 波函数，以验证该体系中电子态的平面波特征。

A. Kohn-Sham 态分析

满足布洛赫定理的 KS 态 [49] 由能带指标 n和晶体波数 **k** 标记，写作

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} c_{n\mathbf{k}}(\mathbf{k}+\mathbf{G}) e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}}, \tag{2}$$

其中，**G** 是相应晶格的倒易波数。利用平面波系数

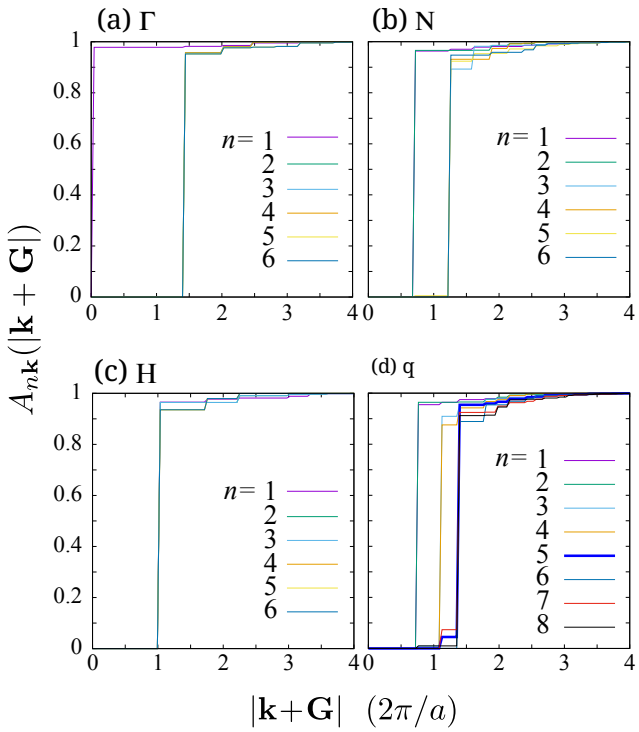


图 2. 在布里渊区选定点处，累积至绝对波数 $|\mathbf{k}+\mathbf{G}|$ 的平面波分量。能带序号按 Kohn-Sham 能量本征值从低到高排列。“q”处标记为“能带 5”的能带对应于导致态密度峰的能带。

$c_{n\mathbf{k}}(\mathbf{k}+\mathbf{G})$，我们计算了

$$A_{n\mathbf{k}}(|\mathbf{k}+\mathbf{G}|) = \sum_{\mathbf{G}'\text{s.t.}|\mathbf{k}+\mathbf{G}'|<|\mathbf{k}+\mathbf{G}|} |c_{n\mathbf{k}}(\mathbf{k}+\mathbf{G}')|^2, \quad (3)$$

这些分量揭示了平面波如何共同构成 KS 波函数。图 2 展示了若干选定$\mathbf{k}$点处最低能量的几个态的情况。几乎所有最低能态的 $\gtrsim$ 都在某些确定的$\mathbf{k}+\mathbf{G}$|处出现不连续跃增至 0.9，这表明相应的态近似为单个平面波，或是具有简并$\mathbf{k}+\mathbf{G}$|的平面波的混合。这一特征与典型分子固体形成鲜明对比；在分子固体中，局域键由局域轨道主导，其 $|c_{n\mathbf{k}}(\mathbf{k}+\mathbf{G})|^2$分布更宽。

通过谱函数将 Kohn-Sham 态展开到真实动量，也可以看出费米能级附近电子态的平面波特征

$$A(\mathbf{k}+\mathbf{G};E) = \sum_n |c_{n\mathbf{k}}(\mathbf{k}+\mathbf{G})|^2 \delta(E-\varepsilon_{n\mathbf{k}}), \quad (4)$$

其中显示了对能量为 E 的电子态有贡献的平面波模式。 $\varepsilon_{n\mathbf{k}}$ 表示 KS 能量本征值。我们在图 3 中绘制了该量在 $E = E_\mathrm{F}$ 处的情况。总体而言，谱集中在一个近似球形的表面区域上。这一结果表明，费米能级附近的第一性原理 KS 态，尽管在约化布里渊区表示中显得相当复杂，但大致是通过折叠自由电子能带 $E_0(\mathbf{k}) = k^2/2$ 形成的。

B. 平面波模型的提取

接下来，我们尝试以平面波为基底，构建一个简单的近似均匀模型。赝势方法中的 KS 能带结构是通过包含局域势和非局域势的单体 KS 哈密顿量计算得到的，但参考文献 [43] 中的经验模型计算表明，采用局域势进行有效建模是可行的。这里我们分析第一性原理势的各个分量，以推导出这样一个具有定量精度的模型。

经自洽循环收敛后的 KS 哈密顿量 [49] 如下：

$$H = -\frac{\nabla^2}{2} + V_\mathrm{ion} + V_\mathrm{Hxc}. \quad (5)$$

势的 Hartree-交换-关联部分 V_Hxc 是局域的，而离子赝势由局域项和非局域项组成： $V_\mathrm{ion}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = V_\mathrm{ion,L}(\mathbf{r})\delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}'} + V_\mathrm{ion,NL}(\mathbf{r},\mathbf{r}')$。由于总哈密顿量具有晶体的离散平移对称性，局域势可分解为傅里叶模式

$$V_\mathrm{Hxc}(\mathbf{r}) = \sum_\mathbf{G} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} \tilde{V}_\mathrm{Hxc}(\mathbf{G}), \quad (6)$$

$$V_\mathrm{ion,L}(\mathbf{r}) = \sum_\mathbf{G} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} \tilde{V}_\mathrm{ion,L}(\mathbf{G}), \quad (7)$$

而非局域势则表示为双重傅里叶分解形式：

$$V_\mathrm{ion,NL}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \sum_{\mathbf{k}\mathbf{G}\mathbf{G}'} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}} \tilde{V}_\mathrm{ion,NL}(\mathbf{k};\mathbf{G},\mathbf{G}') e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{G}')\cdot\mathbf{r}'}. \quad (8)$$

哈密顿量按晶体波数分块对角化，其在平面波表示中的$\mathbf{k}$块为

$$H_\mathbf{k} = \begin{pmatrix} E_0(\mathbf{k}-\mathbf{G}_0) & V_\mathbf{k}(\mathbf{G}_0,\mathbf{G}_1) & V_\mathbf{k}(\mathbf{G}_0,\mathbf{G}_2) & \cdots \\ V_\mathbf{k}(\mathbf{G}_1,\mathbf{G}_0) & E_0(\mathbf{k}-\mathbf{G}_1) & V_\mathbf{k}(\mathbf{G}_1,\mathbf{G}_2) & \cdots \\ V_\mathbf{k}(\mathbf{G}_2,\mathbf{G}_0) & V_\mathbf{k}(\mathbf{G}_2,\mathbf{G}_1) & E_0(\mathbf{k}-\mathbf{G}_2) & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (9)$$

其中 $E_0(\mathbf{k}) = k^2/2$ 和 $\{\mathbf{G}_0, \mathbf{G}_1, \cdots\}$ 为倒格矢。非对角矩阵元表示为

$$V_\mathbf{k}(\mathbf{G},\mathbf{G}') = \tilde{V}_\mathrm{Hxc}(\mathbf{G}-\mathbf{G}') + \tilde{V}_\mathrm{ion,L}(\mathbf{G}-\mathbf{G}') + \tilde{V}_\mathrm{ion,NL}(\mathbf{k};\mathbf{G},\mathbf{G}'). \quad (10)$$

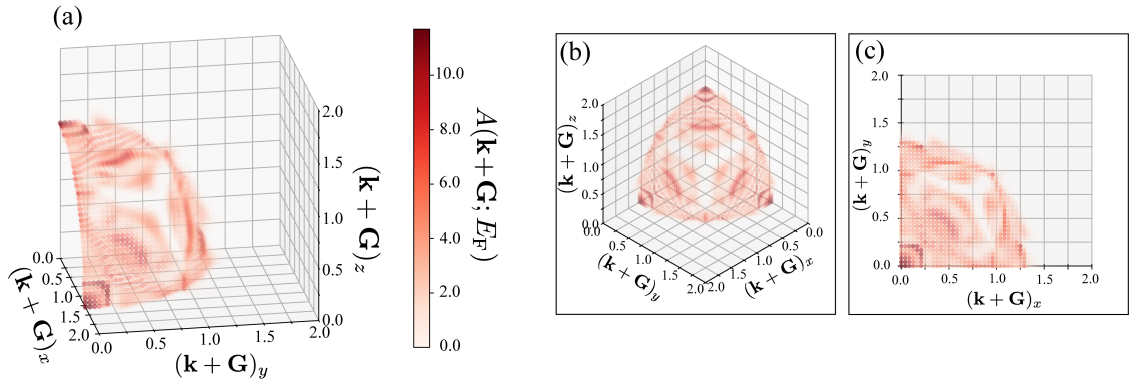


图 3. 平面波分辨谱函数 $A(\mathbf{k}+\mathbf{G};\ E_F)$ 在区域 $(\mathbf{k}+\mathbf{G})_i \geq 0\,(i=x,y,z)$ 中的绘图。式（4）中的 δ 函数 δ 近似为宽度为=0.02 哈特里的洛伦兹函数。我们将每个点的不透明度设为与函数值成正比。(a) 鸟瞰图，(b) 沿 (111) 轴观察，(c) 沿 (001) 轴观察。

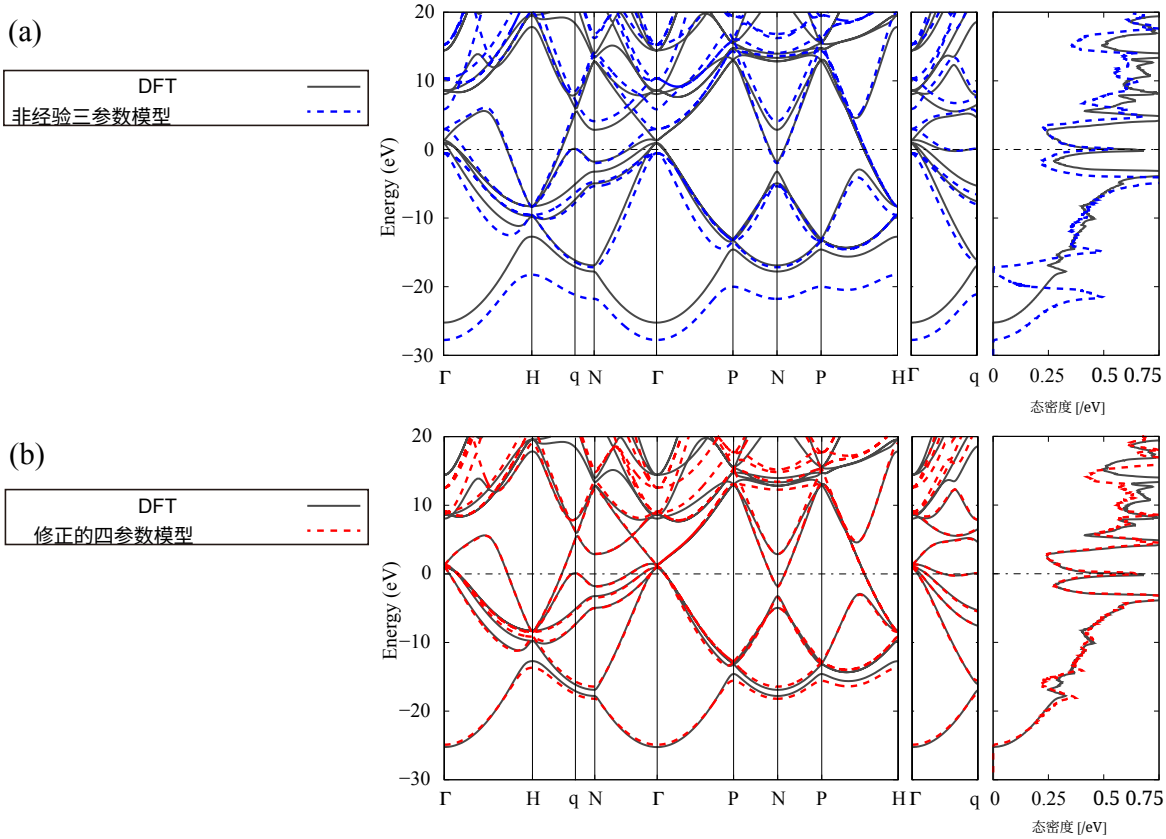


图 4. 第一性原理计算得到的能带结构与有效近均匀模型的结果对比。模型结果的费米能级经调整，以最佳拟合态密度峰附近的能带。(a) 与根据第一性原理势提取的三参数模型对比；(b) 与经手动优化以拟合第一性原理能带结构的四参数模型对比。

在前一项工作中，[43], 我们发现，通过假设局域势形式为 $V_{\mathbf{k}}(\mathbf{G},\mathbf{G}') = V(\mathbf{G}-\mathbf{G}')$，$\{V_1,V_2,V_3\}$ =仅用三个参数 $\{V(\mathbf{G})\}$，其中 $|\mathbf{G}| = \sqrt{2},2,\sqrt{6}$，便可得到与第一性原理结果惊人相似的能带结构。在这里，我们将这一经验建模与第一性原理自洽势进行定量关联。

˜利用自洽收敛的 V_{Hxc}，我们计算了局域部分 $V_{\mathrm{Hxc}}(\mathbf{G})+\tilde{V}_{\mathrm{ion,\,L}}(\mathbf{G})$以及非局域部分$V_{\mathrm{ion,\,NL}}(\mathbf{k};\,\mathbf{G},\,\mathbf{G}')$的傅里叶分量。晶格

表 I. 从第一性原理计算中提取的非经验衍射势参数（单位：哈特里）。$V_1 = V$（$|\mathbf{G}| = \sqrt{2}$）$V_2 = V$（$|\mathbf{G}| = 2$）$V_3 = V$（$|\mathbf{G}| = \sqrt{6}$。

	V_1	V_2	V_3
$V_{\text{ion,L}} + V_{\text{Hxc}}$	−0.1850	−0.1635	−0.0347
$V_{\text{ion,NL}}$	+0.1137	+0.1071	+0.1049
总计	−0.0713	−0.0564	+0.0702

后者可由KS计算所用的赝势通过以下方式计算

$$\tilde{V}_{\text{ion,NL}}(\mathbf{k};\mathbf{G},\mathbf{G}') = \sum_a \sum_{\mathbf{t}_a} e^{-i(\mathbf{G}-\mathbf{G}')\cdot\mathbf{t}_a} \sum_{\mu\nu} \tilde{\beta}_{a\mu}(\mathbf{k}-\mathbf{G}) D^a_{\mu\nu} \tilde{\beta}^*_{a\nu}(\mathbf{k}-\mathbf{G}'). \tag{11}$$

投影函数 $\beta_{a\mu}$ 和矩阵 $D^a_{\mu\nu}$ 从原子 $a = \{\mathrm{H}, \mathrm{S}\}$的赝势文件中读取。$\mathbf{t}_a$ 是晶胞中种类为 a的原子位置，而 μ 和 ν 是投影子的索引。我们发现，H 的贡献不超过 S 贡献的 3%。

基于这些计算，我们通过近似推导出了上述三个参数

$$V_{\text{ion,NL}}(\mathbf{k};\mathbf{G},\mathbf{G}') \approx V_{\text{ion,NL}}(\mathbf{k}_{\text{rep}};\mathbf{G},\mathbf{G}') \tag{12}$$

其中代表性$\mathbf{k}$点$\mathbf{k}^{\text{rep}}$ 设为 $\mathbf{G}$ 和$\mathbf{G}'$的中点。这样的$\mathbf{k}^{\text{rep}}$ 选择使得 $V_{\text{ion, NL}}$成为局域量：$V_{\text{ion, NL}}(\mathbf{k}^{\text{rep}};\mathbf{G},\mathbf{G}') = V_{\text{ion, NL}}(\mathbf{G}-\mathbf{G}')$。我们在表 I 中展示了总势能分量，并将其分解为来自 $V_{\text{ion, L}} + V_{\text{Hxc}}$ 和 $V_{\text{ion, NL}}$ 的贡献。利用提取出的参数，我们计算了式（9）中哈密顿量的能带结构，如图 4(a) 所示。第一性原理能带结构得到了非常准确的重现。特别是， Γ–q 路径上的色散，以及由此产生的费米能级附近的态密度峰——这正是本文关注的核心——都得到了恰当再现。这一结果表明，从第一性原理计算中提取的三个参数恰当地捕捉了 H_3S 电子结构的主要特征。

通过对 V_1–V_3 进行经验性调节，并略微修正电子有效质量，可以进一步减小与第一性原理能带结构之间的偏差：

$$E_0(\mathbf{k}) \to E'_0(\mathbf{k}) = \frac{k^2}{2m^*}. \tag{13}$$

这种处理旨在体现当前局域近似中被忽略的硫赝势的非局域性。所得能带结构如图 4(b) 所示，与第一性原理结果几乎完全一致。计算所得能带结构的参数汇总于表 II；我们认为这些参数最能代表受压氢$_3$S 的电子结构。

分解后的$V_{\text{ion, L}} + V_{\text{Hxc}}$ 和$V_{\text{ion, NL}}$ 的贡献有助于理解第一性原理电子态呈现的均匀类电子特性

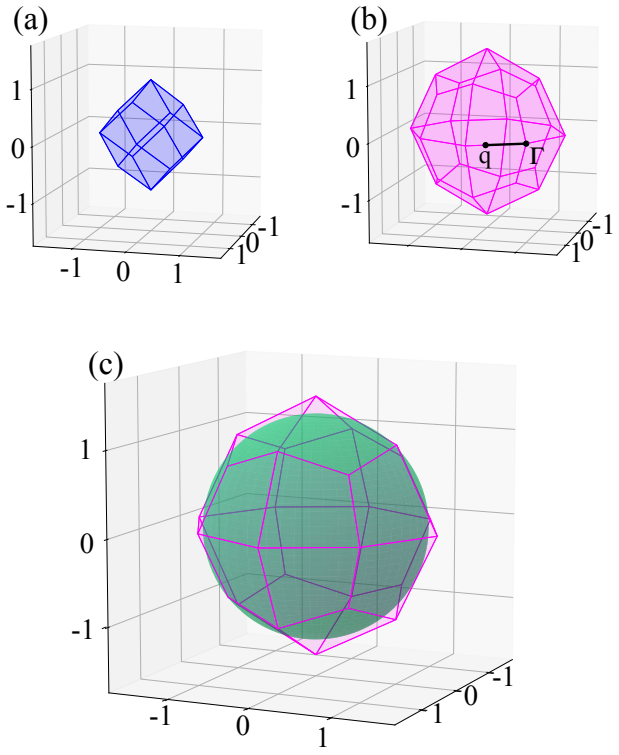


图 5. k 空间中的区域。(a) 体心立方布里渊区。(b) 由 (2 1 1) 面及其等价面构成的琼斯大区。图中展示了扩展区方案中的 Γ-q 路径 [，见图 1] 。(c) 琼斯区与同体积球体的叠加 $V = 9 \times$ ^{3} $(2\pi/a)$。

。前者对V_1 和 V_2的负贡献代表了完全吸引性的自洽势，理应倾向于形成类原子价电子波函数。然而，这些贡献在很大程度上被$V_{\text{ion, NL}}$抵消；后者使电子感受到的有效势趋于平坦，进而使所得 KS 态呈离域态。后一种势反映了硫离子的内层芯电子所导致的正交化。 V_3的较大正值会强烈混成其中涉及的平面波 [43]，，其主要由$V_{\text{ion, NL}}$决定。$V_{\text{ion, NL}}$ 的作用源于周期性排列的硫离子产生的非局域散射，无法从局域势分布中推断。因此，硫离子的芯电子在很大程度上导致了平面波状价电子态，以及费米能级附近的态密度峰。

IV. 讨论：琼斯区机制

因此，我们展示了压缩态 H_3S 中电子态的类平面波特征。由于芯电子导致的硫离子的非局域散射，以及重要的态密度峰，离域化得到了增强

表 II. a=5.6367 玻尔处近似均匀模型参数汇总，单位为哈特里 ee.

	V_1	V_2	V_3	m^*
非经验三参数模型	-0.0713	-0.0564	+0.0702	—
修正的四参数模型	-0.0322	-0.0401	+0.0715	1.087

该态密度峰通过多个平面波的杂化而出现。剩下的问题是，为什么态密度峰位于费米能级附近。作为对此的解释，我们提出了一种涉及琼斯 [45, 46]大区的机制。琼斯研究了由远离原点的布拉格平面在**k** 空间中形成的区的影响。自由费米面接近其中一个区面，应会通过相应的布拉格衍射促进区面处平面波的杂化，而能带反交叉则会降低电子能量。我们注意到，目前 $A(\mathbf{k}+\mathbf{G};E_{\mathrm{F}})$的球形分布与由(211)和等效布拉格平面形成的琼斯区显著重叠 [图5(c)]。这个(211)区[图5(b)] 接近该球体，其体积为 $9\times(2\pi/a)^3$, ，恰好可以容纳每个化学式单位 H_3S 中的9个价电子。在这个(211)区面上，排列成阵列的硫离子所产生的衍射诱导了平面波的杂化。在其边缘处，多条平面波分支通过(211)衍射以及(110)和(200)衍射发生杂化；我们记得它们分别对应于 V_3, V_1 和 V_2。由于体积匹配，杂化能带反交叉特征必然位于费米能级附近。

琼斯区边缘处的杂化会在三维空间中诱发鞍形范霍夫奇异点 [41, 54]。在边缘处，自由能带色散沿垂直于边缘的径向递增；而沿同时垂直于边缘和径向的方向则呈凸形。沿边缘方向，色散也呈凸形。如果区域足够大，这些凸形色散会相对平坦，因为它们与球形等能面相切。边缘处的弱杂化会使径向方向上的结构变为凹形，同时其他方向上的曲线仍保持凸形，从而形成沿边缘线性延伸的能带鞍点，表现为态密度的峰状聚集。这一一般情形适用于氢$_3$S。事实上，连续的鞍点沿着 $\Gamma-q$ 线 [43], 延伸，其平坦的色散会诱发态密度峰（图 1(d)），且 $\Gamma-q$ 线与 (211)区的边缘重合，如图 5(b) 所示。

因此，琼斯区机制解释了为何该系统中的异常态密度峰源自近乎均匀电子，并确保其位置接近费米能级。

V. 总结与结论

高压 H_3S 中的高-T_c 超导性堪称声子介导的超导的极端案例。对于其 T_c，尖锐的态密度峰一直被认为至关重要。第一性原理计算中稳健的峰表明，存在一种形成此类异常态密度结构的普遍机制。我们得出结论，这一切都源于平面波之间的相互作用。研究揭示，第一性原理 KS 波函数具有显著的类平面波特征。折叠布里渊区表示中复杂的费米面展开后大致呈球形。对局域势和非局域势的分析得出了一种仅需三四个参数的有效平面波建模。它与琼斯（211）区的接近，解释了为何新出现的态密度峰位于费米能级附近，这并非偶然。

在阿什克罗夫特的氢化物预压缩情景中，局域电子向共有能带态的转变，是相对低压下形成金属氢-1s 态的重要前兆。人们曾预期，伴随氢的原子会提供额外价电子，使金属能带中的有效压力增大。我们的赝势分析表明，硫原子还发挥着另一项重要作用：通过芯态正交化增强离域化。这一点似乎值得进一步研究，以深入探索如何在更低压力下找到金属氢化物。

最后，氢-1s电子态的离域化对于抑制铁磁自旋涨落，进而提升氢化物中的 T_c [55] 也很重要。琼斯区情景化解了态密度中存在窄峰这一现象与系统具有离域平面波特性之间的矛盾；通常，窄峰会与位点间跃迁较弱的局域轨道相关联。由于琼斯区机制原则上适用于一般的近乎均匀系统，这应有助于探索其他通过基于态密度的方式提升 T_c的高压超导体。

致谢

本研究获得日本学术振兴会（JSPS）JSPS KAKENHI项目（编号：23K03313）的资助。本研究的部分计算使用了东京大学固体物理研究所超级计算机中心的设施完成（ISSPkyodo-SC-2024-Ba-0020, 2025-Ba-0047）。

[1] N. W. Ashcroft, 《物理评论快报》**21**, 1748 (1968). [2] V. L. Ginzburg, 《统计物理学杂志》**1**, 3 (1969). [3] N. W. Ashcroft, 《物理评论快报》**92**, 187002 (2004). [4] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, 《物理评论》**108**, 1175 (1957). [5] A. P. Drozdov, M. I. Eremets, I. A. Troyan, V. Kseno- fontov, and S. I. Shylin, 《自然》**525**, 73 (2015). [6] J. A. Flores-Livas, L. Boeri, A. Sanna, G. Profeta, R. Arita, and M. Eremets, 《物理学报告》**856**, 1 (2020). [7] C. J. Pickard, I. Errea, and M. I. Eremets, Annual Re- view of Condensed Matter Physics **11**, 57 (2020). [8] M. Somayazulu, M. Ahart, A. K. Mishra, Z. M. Geballe, M. Baldini, Y. Meng, V. V. Struzhkin, and R. J. Hemley, 《物理评论快报》**122**, 027001 (2019). [9] A. P. Drozdov, P. P. Kong, V. S. Minkov, S. P. Besedin, M. A. Kuzovnikov, S. Mozaffari, L. Balicas, F. F. Bal- akirev, D. E. Graf, V. B. Prakapenka, E. Greenberg, D. A. Knyazev, M. Tkacz, and M. I. Eremets, 《自然》**569**, 528 (2019). [10] I. A. Troyan, D. V. Semenok, A. G. Kvashnin, A. V. Sadakov, O. A. Sobolevskiy, V. M. Pudalov, A. G. Ivanova, V. B. Prakapenka, E. Greenberg, A. G. Gavril- iuk, I. S. Lyubutin, V. V. Struzhkin, A. Bergara, I. Er- rea, R. Bianco, M. Calandra, F. Mauri, L. Monacelli, R. Akashi, and A. R. Oganov, 《先进材料》**33**, 2006832 2021( ). [11] P. Kong, V. S. Minkov, M. A. Kuzovnikov, A. P. Droz- dov, S. P. Besedin, S. Mozaffari, L. Balicas, F. F. Bal- akirev, V. B. Prakapenka, S. Chariton, D. A. Knyazev, E. Greenberg, and M. I. Eremets, 《自然·通讯》**12**, 5075 (2021). [12] L. Ma, K. Wang, Y. Xie, X. Yang, Y. Wang, M. Zhou, H. Liu, X. Yu, Y. Zhao, H. Wang, G. Liu, and Y. Ma, 《物理评论快报》**128**, 167001 (2022). [13] L. Ma, K. Wang, Y. Xie, X. Yang, Y. Wang, M. Zhou, H. Liu, X. Yu, Y. Zhao, H. Wang, G. Liu, and Y. Ma, 《物理评论快报》**129**, 269901 (2022). [14] Z. Li, X. He, C. Zhang, X. Wang, S. Zhang, Y. Jia, S. Feng, K. Lu, J. Zhao, J. Zhang, B. Min, Y. Long, R. Yu, L. Wang, M. Ye, Z. Zhang, V. Prakapenka, S. Chariton, P. A. Ginsberg, J. Bass, S. Yuan, H. Liu, and C. Jin, 《自然·通讯》**13**, 2863 (2022). [15] X. Huang, X. Wang, D. Duan, B. Sundqvist, X. Li, Y. Huang, H. Yu, F. Li, Q. Zhou, B. Liu, and T. Cui, 《国家科学评论》**6**, 713 (2019). [16] H. Nakao, M. Einaga, M. Sakata, M. Kitagaki, K. Shimizu, S. Kawaguchi, N. Hirao, and Y. Ohishi, 《日本物理学会杂志》**88**, 123701 (2019), https://doi.org/10.7566/JPSJ.88.123701. [17] I. Osmond, O. Moulding, S. Cross, T. Muramatsu, A. Brooks, O. Lord, T. Fedotenko, J. Buhot, and S. Friedemann, 《物理评论B》**105**, L220502 (2022). [18] I. Troyan, A. Gavriliuk, R. R¨uffer, A. Chumakov, A. Mironovich, I. Lyubutin, D. Perekalin, A. P. Droz- dov, and M. I. Eremets, 《科学》**351**, 1303 (2016), https://www.science.org/doi/pdf/10.1126/science.aac817

[19] S. Mozaffari、D. Sun、V. S. Minkov、A. P. Drozdov、D. Knyazev、J. B. Betts、M. Einaga、K. Shimizu、M. I. Eremets、L. Balicas 和 F. F. Balakirev，《自然》通讯 **10**，2522（2019年）。

[20] V. S. Minkov, V. Ksenofontov, S. L. Bud'ko, E. F. Talantsev 和 M. I. Eremets，《自然·物理》19, 1293（2023年）。[21] V. S. Minkov, S. L. Bud'ko, F. F. Balakirev, V. B. Prakapenka, S. Chariton, R. J. Husband, H. P. Lier- mann 和 M. I. Eremets，《自然·通讯》13, 3194（2022年）。[22] V. S. Minkov, E. F. Talantsev, V. Ksenofontov, S. L. Budko, F. F. Balakirev 和 M. I. Eremets，arXiv:2408.12675。[23] V. S. Minkov, V. B. Prakapenka, E. Greenberg 和 M. I. Eremets，《应用化学国际版》59, 18970（2020年）。[24] F. Capitani, B. Langerome, J.-B. Brubach, P. Roy, A. Drozdov, M. I. Eremets, E. J. Nicol, J. P. Carbotte 和 T. Timusk，《自然·物理》13, 859（2017年）。[25] F. Du, A. P. Drozdov, V. S. Minkov, F. F. Balakirev, P. Kong, G. A. Smith, J. Yan, B. Shen, P. Gegenwart 和 M. I. Eremets，《自然》641, 619（2025年）。[26] I. Errea, M. Calandra, C. J. Pickard, J. Nelson, R. J. Needs, Y. Li, H. Liu, Y. Zhang, Y. Ma 和 F. Mauri，《物理评论快报》114, 157004（2015年）。[27] R. Akashi, M. Kawamura, S. Tsuneyuki, Y. Nomura 和 R. Arita，《物理评论B辑》91, 224513（2015年）。[28] J. Flores-Livas, A. Sanna 和 E. K. U. Gross，《欧洲物理学杂志B辑》89, 63（2016年）。[29] T. Ishikawa, A. Nakanishi, K. Shimizu, H. Katayama- Yoshida, T. Oda 和 N. Suzuki，《科学报告》6, 23160（2016年）。[30] R. Akashi, W. Sano, R. Arita 和 S. Tsuneyuki，《物理评论快报》117, 075503（2016年）。[31] I. Errea, M. Calandra, C. J. Pickard, J. R. Nelson, R. J. Needs, Y. Li, H. Liu, Y. Zhang, Y. Ma 和 F. Mauri，《自然》532, 81（2016年）。[32] W. Sano, T. Koretsune, T. Tadano, R. Akashi 和 R. Arita，《物理评论B辑》93, 094525（2016年）。[33] R. Lucrezi, P. P. Ferreira, S. Hajinazar, H. Mori, H. Paudyal, E. R. Margine 和 C. Heil，《通讯物理》7, 33（2024年）。[34] D. A. Papaconstantopoulos, B. M. Klein, M. J. Mehl 和 W. E. Pickett，《物理评论B》91, 184511（2015年）。[35] A. Bianconi 和 T. Jarlborg，《新型超导材料》1（2015年），10.1515/nsm-2015-0006。[36] A. Bianconi 和 T. Jarlborg，《欧洲物理快报》112, 37001（2015年）。[37] T. Jarlborg 和 A. Bianconi，《科学报告》6, 24816 EP（2016年）。[38] N. Bernstein, C. S. Hellberg, M. D. Johannes, I. I. Mazin 和 M. J. Mehl，《物理评论B》91, 060511（2015年）。[39] L. Ortenzi, E. Cappelluti 和 L. Pietronero，《物理评论B》94, 064507（2016年）。[40] Y. Quan 和 W. E. Pickett，《物理评论B》93, 104526（2016年）。[41] R. Akashi，《物理评论B》101, 075126（2020年）。[42] K. Momma 和 F. Izumi，《应用晶体学杂志》44, 1272（2011年）。[43] R. Akashi，《物理评论研究》6, 033012（2024年）。[44] F. Herman，《现代物理学评论》30, 102（1958年）。[45] H. Jones，*The theory of Brillouin zones and electronic states in crystals* 1960（北荷兰出版社；阿姆斯特丹，）。

6.

[46] J. Feng, R. Hoffmann 和 N. W. Ashcroft, 《化学物理学杂志》**132**, 114106（2010年）。[47] P. Giannozzi, O. Andreussi, T. Brumme, O. Bunau, M. Buongiorno Nardelli, M. Calandra, R. Car, C. Cavaz- zoni, D. Ceresoli, M. Cococcioni, N. Colonna, I. Carn- imeo, A. Dal Corso, S. de Gironcoli, P. Delugas, R. A. DiStasio, A. Ferretti, A. Floris, G. Fratesi, G. Fugallo, R. Gebauer, U. Gerstmann, F. Giustino, T. Gorni, J. Jia, M. Kawamura, H.-Y. Ko, A. Kokalj, E. K¨u¸c¨ukbenli, M. Lazzeri, M. Marsili, N. Marzari, F. Mauri, N. L. Nguyen, H.-V. Nguyen, A. Otero-de-la Roza, L. Paulatto, S. Ponc´e, D. Rocca, R. Sabatini, B. Santra, M. Schlipf, A. P. Seitsonen, A. Smogunov, I. Timrov, T. Thonhauser, P. Umari, N. Vast, X. Wu 和 S. Baroni, 《物理学杂志：凝聚态物质》**29**, 465901（2017年）。

[48] J. P. Perdew、A. Ruzsinszky、G. I. Csonka、O. A. Vydrov、G. E. Scuseria、L. A. Constantin、X. Zhou 和 K. Burke, 《物理评论快报》**100**，136406（2008年）。[49] W. Kohn 和 L. J. Sham, 《物理评论》**140**，A1133（1965年）。[50] D. R. Hamann, 《物理评论B》**88**，085117（2013年）。[51] M. van Setten、M. Giantomassi、E. Bousquet、M. Verstraete、D. Hamann、X. Gonze 和 G.-M. Rignanese, 《计算物理学通信》**226**，39（2018年）。[52] D. Duan、Y. Liu、F. Tian、D. Li、X. Huang、Z. Zhao、H. Yu、B. Liu、W. Tian 和 T. Cui, 《科学报告》**4**，6968 EP（2014年）。[53] M. Einaga、M. Sakata、T. Ishikawa、K. Shimizu、M. I. Eremets、A. P. Drozdov、I. A. Troyan、N. Hirao 和 Y. Ohishi, 《自然·物理》**12**，835（2016年）。[54] L. Van Hove, 《物理评论》**89**，1189（1953年）。[55] S. Lu、R. Akashi、M. Kawamura 和 S. Tsuneyuki, 《物理评论B》**111**，134516（2025年）。