奇特的压力驱动碳链填充的 KFI 沸石带隙增宽及其通向高压半导体电子学与高温超导性的途径

[1]C.T.Wat，[1]K.C.Lam，[1]W.Y.Chan，[1]C.P.Chau，[1]S.P.Ng，[1]W.K.Loh，[2]L.Y.F.Lam，[2] X.Hu，[1]C.H.Wong*

[1]香港理工大学专业教育及行政发展学院科学、工程与健康研究部，中国香港

[2]香港科技大学化学与生物工程系，中国香港

电子邮箱：roy.wong@cpce-polyu.edu.hk

摘要：

半导体器件在高压下运行始终面临挑战，因为能带理论预测，材料在压缩作用下会转变为更具金属性的状态。然而，我们对 KFI 基底中碳链的研究发现，这一规律存在有条件的偏离。我们不仅观察到聚炔（半导体）在中等压力下转变为累积烯（金属），还观察到聚炔在高压下意外地重新出现，此时聚炔的带隙会随压力增加。此外，在探索高温有机超导的过程中，合成长累积烯链一直是一项长期挑战。我们确定了在沸石骨架内合成延展累积烯链的关键条件，凸显了非常规电荷密度波与显著扭转之间的相互作用。KFI沸石能够促进形成超过 5,000 个原子的碳链，这与大约 100 种其他沸石形成鲜明对比，后者仅限于 ~10 个原子。累积烯@KFI 体系的超导转变温度达到 ~62 K，超过了块体铁基超导体已报道的最高值。这种碳结构与超导性之间的相互作用不仅推进了我们对电荷密度波的理解，也开启了新型应用研究的新时代

关键词：碳链、电荷密度波、高压半导体器件、超导性、沸石。

1. 引言：

得益于碳的独特性质，碳基电子学已成为一个重要的研究领域[1]，，这些性质包括物质拓扑态、半导体特性和超导性等。然而，大多数材料无论是否以碳为基础，在高压下都会转变为金属态。这一现象长期以来一直是高压半导体器件发展面临的挑战，因为根据能带理论，在这种条件下维持或增大带隙值十分困难。另一方面，有机超导体的超导转变温度一直落后于其他非常规超导体[2-3]。尽管碳链已成为一种颇具潜力的

挑战这一观点的候选对象，这主要归因于电子态密度中存在范霍夫奇点，以及约为 3000 K 的高德拜温度[4-6], 碳链主要以聚炔相存在。该相的特征是单键和三键交替排列，因此形成带隙较大的半导体，阻碍了库珀对形成。若能实现碳链中的金属性累积烯相，其特征是连续的双键 [9,10], ，便可解决这一问题。然而，无论在实验上还是理论上，长累积烯链的形成仍是一个尚未解决的重大挑战。尽管全球理论文献中已有关于长累积烯链的研究，但相关分析受限于对双键的手动指定，而非使其自然形成。形成长累积烯链所需的有利条件仍是一个未解问题，高温有机超导性的探索亦然。累积烯链需要足够长，否则便无法充分利用电子态密度中的范霍夫奇点来构建强库珀对。

触发累积烯链上的电荷调制，可能产生类似于聚炔中观察到的周期性电荷调制效应。在碳材料中，如何在费米面处形成电荷密度波是一项复杂挑战，因为此类现象通常需要强烈的电子-电子相互作用，例如重元素复合材料 [11,12]。然而，将碳链封装在氮化硼纳米管（BNT）中，宿主产生的周期性电场可能会诱发一种非常规电荷密度波，同时减轻磁阻挫 [13]。然而，这种非常规电荷密度波并不会使 BNT 宿主中的内部碳链转变为累积烯相，这表明尽管这种波可能是必要条件，其强度也是实现累积烯相的另一项障碍。

一种涉及不同原子的类似主体系统可能是沸石，其孔隙可充当纳米反应器。这些结构可提供有利的范德华力和异质相互作用，影响碳链，并可能促使其形成

累积烯链。从制造角度来看，碳链通常不超过10个原子[7]，除非找到合适的宿主，例如碳纳米管[8]。确定哪些沸石体系能够促进此类长碳链的形成，是另一个尚未解决的问题。

历史上，关于碳链长度的预测主要依赖于经验实验。然而，在2017年，C.H. Wong等人提出了线性碳链阵列模型，用以预测碳链阵列的截断长度与其磁性之间的关系[14]。我们的研究表明，0.5 nm的横向距离显著提高了形成碳链平行阵列的可能性，预期长度约为50个原子[14], ，这一发现在2018 [15]中得到了实验验证。2023年，C.H. Wong等人通过用碳纳米管取代相邻链，进一步改进了LCC阵列模型[16]。LCC@CNT模型表明，一条稳定的~5700个原子长的碳链可以存在于(6,4)碳纳米管中，实验结果确认了~6400 个原子的长度纪录[16]。受这一进展启发，我们正在开发LCC@Zeolite模型，以预测哪些沸石能够促成长碳链的形成。随后，我们将阐明这些碳链以累积烯相存在、同时表现出非常规电荷密度波和高温超导性的潜力[17]。

2. 方法

填充到 100 多种沸石基底（补充材料）中的碳链重复单元，分别在 0 K 下采用 GGA-PBE 泛函通过第一性原理软件（CASTEP）构建 [19], 。采用密度混合法，自洽场循环设置为 5000。使用超软赝势，并采用有限位移法 [20]估算声子。随后在不同压力下再次对原子坐标进行几何优化，以考察压缩应变的影响。然而，由于实际中的碳链并非无限长，因此必须考虑尺寸效应。这些 C-

链@沸石基底将进行蒙特卡罗模拟，以预测截止链长（300开尔文）。

在蒙特卡罗模拟中，将宿主替换为沸石基底[13,16], ，我们构建了 C链@沸石模型，其哈密顿量为:

$$H = e^{-T/T_{bj}}\left(\sum_{n=1,3,5}^{N}\left|E_{n,j}-E_1\right|e^{-\frac{\ell_n-\ell_{n,j}^{eq}}{0.5\ell_{n,j}^{eq}}}+\sum_{n=2,4,6}^{N}\left|E_{n,j}-E_3\right|e^{-\frac{\ell_n-\ell_{n,j}^{eq}}{0.5\ell_{n,j}^{eq}}}\right)+e^{-T/T_{bj}}\sum_{n=1,2,3}^{N}J_A e^{-\frac{\ell_n-\ell_{n,j}^{eq}}{0.5\ell_{n,j}^{eq}}}\left(\cos\theta+1\right)^2$$

$$-4\varphi\sum_{\phi=0}^{2\pi}\sum_{n=1}^{N}\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^6-\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12}\right]$$

该模型定义了多个结构参数：相邻键之间的距离（ ）以及线性碳链（LCC）与沸石中 包围原子之间的横向间距[13,16]。这里，j 表示键的类型及其对应的能量：1 表示单键（E_1= 348 kJ/mol，= 154 pm），2 表示双键（E_2 = 614 kJ/mol，= 134 pm），3 表示三键（E_3 = 839 kJ/mol，= 120 pm）[13,16]。索引 n 指定碳链中碳原子的位置。因此，符号 $E_{n,j}$ 表示第 th 个原子与其前一个原子（第 th 个原子）之间的键能。给定键类型的特征解离温度可表示为 $T_{bj} = E_{n,j} / k_B$，其中 k_B 为玻尔兹曼常数。

$$\ell_{3n}^{eq,}$$

$$n \qquad (1)n -$$

为评估受限碳链的热力学稳定性，引入了链稳定性因子 [13,16]。主体-链相互作用通过沿横向平面的范德华（VDW）势项进行明确建模 。该势由常数 和参数化，这些常数分别根据已知等温压缩率和特征系统长度尺度在内的物理性质推导得到 [13,16]。此外，角弯曲势为$J_A \approx 600$ kJ/mol

$$= -4\varphi\sum_{\phi=0}^{2\pi}\sum_{=1}\left[\left(\frac{\sigma}{}\right)^6-\left(\frac{\sigma}{}\right)^{12}\right]$$ N 范德华

nE r r

σ φ

决定了碳原子转折点处偏离线性所对应的能量代价角度（θ）沿链骨架 [13,16]。

采用蒙特卡罗方法模拟封装碳链的动态行为。该方法在有限温度下，通过随机改变碳链的原子坐标和共价键类型，迭代采样构型空间。每个蒙特卡罗步（MCS）均按照以下算法进行，该算法改编自协议 [13,16]。

1. 选择：随机选取碳链中的一个原子。2. 能量评估：根据哈密顿量计算该几何构型下碳链的总能量。3. 试探移动生成：通过为所选原子引入随机空间位移和/或随机改变其局部键类型，提出一个新的试探态（参见补充材料——A 部分和 B 部分）

4. 试探能量计算：针对所提出的试探构型重新计算哈密顿量。

5. 判据：如果试探态能降低总能量，则接受该试探态。也可以通过将 0 到 1 之间的概率与玻尔兹曼因子进行比较，来接受能量有所增加的试探态，，其中 ΔE 为能量差，k_B 为玻尔兹曼常数，T为温度。否则，系统将恢复到先前状态。蒙特卡罗模拟以迭代方式进行，直至系统达到热力学平衡；实际操作中，当总能量随蒙特卡罗步数（MCS）的变化趋于平稳时，即认为系统达到平衡。根据先前研究已确立的收敛情况[13,16], ，通常经过~150,000 个 MCS 后即可达到平衡。

在沸石基底中寻找累积烯相长碳链的工作将继续进行。同时，将评估电子和声子的性质，以预测超导性。T_c将基于电子-声子耦合 进行计算，采用麦克米兰T_c公式[21], 其中 α 是电子-声子散射矩阵，而 F(ω) 是以振动频率为自变量的声子态密度，其形式为艾利亚什伯格函数[21]。如果电子-声子耦合λ 超过 1，通常会采用重整化方法，将其除以 1+ λ [22]。相同的重整化因子（1+ λ）也可用于赝势 μ[22]。

$$\lambda = 2\int \frac{\alpha^2 F(\omega)}{\omega} d\omega$$

3. 结果与讨论。

3.1. 沸石中长碳链生长的特征

我们在补充材料（C 部分）中给出了 100 多种沸石的晶格参数。在评估了 100 多种不同的碳链@沸石基底的稳定性后（补充材料——C 部分），我们发现，如图 1 所示，KFI沸石有望在环境条件下稳定长度达 ~5500 个原子的碳链，而其他所有沸石基底都无法稳定长度超过 10 个原子的碳链。我们的 MCS 步骤足够长，能够使 KFI沸石内的碳链充分弛豫，因为其链长略短于 (6,4)碳纳米管中的链长。对于碳链@(6,4)碳纳米管，MCS 仅为150,000 [13]。因此，本项目选择的 MCS 值是合适的。由于长碳链具有稳定的特性，链内部并未明显形成自由基电子。

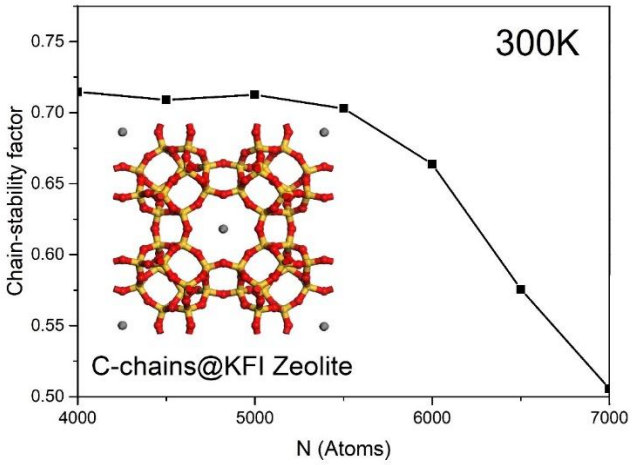

图 1：无外部压力时 KFI沸石内部碳链的链稳定性因子。内部链的截断长度为 ~5500 个原子长。插图显示了重复单元的侧视图。灰色球体为碳原子。黄色和红色球体构成 KFI沸石。横向链-孔间距为 ~0.54 nm。横向链-链间距为 ~1.3 nm。

无论通过实验发现还是理论方案，寻找适合宿主来生长如此长的碳链都颇具挑战。KFI沸石这一独特发现引发了我们对其能够制备长碳链原因的好奇。KFI沸石在 x、y 和 z 轴方向具有相同的晶格参数和晶体角度。在补充材料（C 部分）中，我们确定了八种表现出相似行为的沸石（绿色）。然而，CHA沸石的角度为 94.2 度，因此未被纳入第二轮候选名单。由此还剩下七种候选沸石（见补充材料——D 部分）。(6,4)碳纳米管中已实现长达 6400 个碳原子的创纪录链长，其管半径为 ~0.37 nm。我们在 KFI沸石中观察到了类似特征，其孔半径为 0.35 nm，与 (6,4)碳纳米管的半径十分接近。这种关联阐明了在 KFI沸石中制备长碳链的原因。

总结了三个原因来解释这条长链的形成。首先，(6,4)碳纳米管的半径与 KFI 沸石孔道的半径相近。其次，KFI 沸石沿 x、y、z 轴的晶格参数均匀。第三，晶格中的晶体角度均为 90 度。孔道的这种对称性有助于防止非对称晶格膨胀，因为它可能阻碍链增长。值得注意的是，只有 C-

所考察的沸石中，KFI 基底内的碳链~100 具备这三种特征。

3.2：应力对带隙的非常规影响

为促成超导性的形成，我们探寻将其转变为累积烯相的方法，因此估算了C-chains@KFI沸石的带隙。5500个原子的截断链长足以在第一性原理计算中视为一个体相单元。在引入碳链之前，原始KFI沸石的带隙高于4 eV，数值较大。乍看之下，将带隙降至零似乎在技术上颇具挑战，因为半导体的带隙难以大幅调控。令人惊讶的是，在KFI沸石中填入碳链后，复合材料的带隙骤降了一个数量级，至0.47 eV。带隙降低了90%，这一出乎意料的结果使人们看到了一种可能：施加压力后，材料可转变为金属相（累积烯）。更令人振奋的发现接踵而至。通常，施加压力会使原子彼此靠近，按照能带理论，这往往会缩小带隙。然而，对复合材料施加最高达4%的压缩应变时，带隙却意外增大至0.83 eV，如图2a所示。有趣的是，应变约为5%时，材料转变为金属相，带隙随之消失。与此同时，碳链转变为累积烯相。更令人惊讶的是，我们原本预计，随着键长对称缩短，金属态累积烯在压缩应变超过5%时仍会保持。然而，实际情况却是复合材料重新转变为半导体态，并伴随着聚炔相的再现。

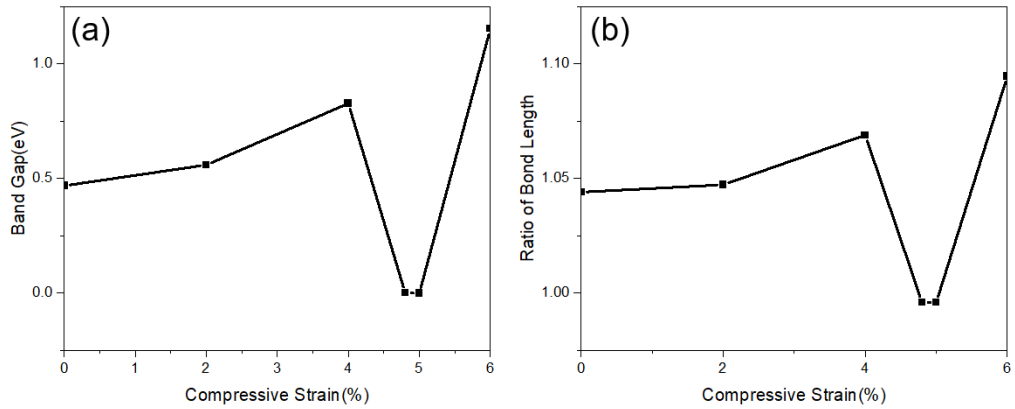

图 2：(a) KFI 基底中碳链的带隙。施加最高达 4% 的压缩应变会导致带隙反常增大。在约 5% 应变时，带隙降至零，促使累积烯结构形成。令人惊讶的是，施加超过 5% 的压缩应变会使材料重新转变为聚炔相。(b) 单键与三键键长之比随压力呈现反常增大，但由于发生相变，该比值在约 5% 压缩应变时达到 1。

这一系列结果揭示了压力对碳链电子性质产生的极不寻常且复杂的影响，为解决一个长期存在的难题带来了新见解：如何在低压和高压电子学中提高带隙值。为方便起见，我们对横向轴和纵向轴施加了相同的压缩应变，因为我们发现C-chains @KFI沸石的带隙对横向压力并不十分敏感。带隙与压力之间这种奇特的关系在其他DFT设置下也同样成立，例如PW91、局域密度近似、守恒范数赝势以及不同的自洽场循环等。用Dmol3软件替代CASTEP，得到的带隙值也相近。

带隙与压力呈反比关系，这可能归因于碳链内部异常强的共价键[23] 以及沸石带来的内部相互作用。与许多传统半导体不同，传统半导体的带隙通常会因施加压力而减小，而碳链（被认为是已知最强的材料）则表现出独特特性。尽管 KFI沸石中碳链的平均原子间距会随外部压力增大而缩短，碳原子仍保持其偏好的单键与三键交替键长。碳链中的强共价键使其能够在压力作用下容纳更大的键长比，而不是发生

向更具金属性的相转变，如图2b所示。相比之下，其他半导体，尤其是具有光学模的半导体，鲜有报道具有同样的特性。这些材料通常键合较弱，缺乏足够的共价键强度，无法在平均原子间距缩短时支撑光学模。因此，压力往往会促使这些普通半导体转变为更具金属性的状态，导致带隙减小。

3.3：电荷密度波诱导的聚炔向累积烯转变

如图3a所示，在中等压力（压缩应变 ~5%）下，KFI沸石中的聚炔相意外转变为累积烯相，这一现象引人入胜。与预期相反，转变为累积烯相可能会失去共享电子云之间周期性电荷调制所带来的优势。然而，耐人寻味的是，图3b显示，累积烯链的费米面上出现了电荷密度波，这与传统预测相悖。这些电荷密度波不仅仅是存在而已，它们还复现了聚炔相特有的周期性电荷调制[16]，使碳链即使处于累积烯相，也能间接重新获得这一有利特征。这种出乎意料的行为不仅稳定了累积烯相，也挑战了我们对单原子材料中电荷动力学的理解。形成累积烯相的另一个重要原因是，如图2b所示，单键与三键的比例趋近于1，这使聚炔相难以稳定。转变为累积烯相后，系统便能受益于连续且均匀的键长。更有趣的是，我们在累积烯链中观察到显著的扭转效应；如图3a所示，扭转角（或扭曲角）最大可达90度。这超出了以往对碳科学的认知，尤其考虑到仅凭沸石的范德华力，就能使这种最坚固的材料——碳链——扭转90度，实属非凡。

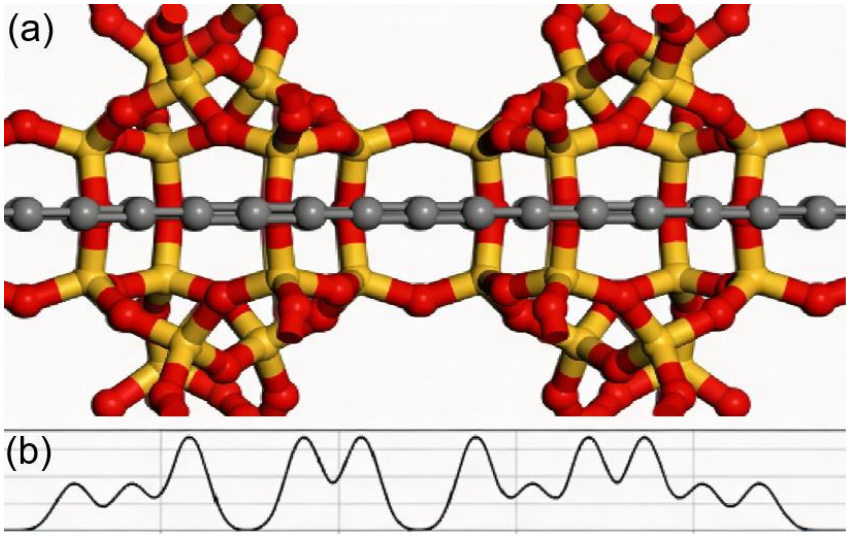

图 3：（a）在约 5% 压缩应变下，KFI沸石中累积烯链重复单元的放大视图。仅凭范德华力的作用，内部累积烯链（灰色球体）自然形成的扭转角可高达 90 度。（b）沿链轴方向，内部累积烯的费米能级处电子态密度增加，数值以任意单位表示。图中叠加了振幅和波长各异的电荷密度波，振幅的最大变化约为 4%。

3.4：KFI沸石中累积烯超导性的研究

由于半导体带隙的存在，在碳链中实现超导性一直面临挑战。然而，在中等压力下，C-chains@KFI沸石中的带隙消失，这促使我们探究累积烯在这一基质中的超导转变温度（T_c）能够达到多高。我们计算得出，孤立累积烯链的德拜温度高达 2700 K [6]。研究结果表明，尽管在累积烯链中引入扭转角会使德拜温度略微降低约 10%，但其仍保持在约2500 K的惊人高值。这一较高的德拜温度可有力地支持 Bardeen- Cooper-Schrieffer（BCS）配对[4]。

我们先前的实验分析表明，基底不会改变纳米线的超导转变温度[24]。为精简计算方法，我们在从头算计算中去除 KFI 基底，同时保持累积烯链的原子坐标和扭转角固定，以便开展裸电子-声子

耦合评估。BCS框架似乎仍然有效，无需考虑自旋-轨道耦合、各向异性费米面或复合系统中磁涨落的复杂性[4]。尽管存在电荷密度波，其调制极小，使我们能够近似该链的平均场电子态密度。原则上，我们可以采用针对电荷密度波的变量线性分离法，考察其对电子-声子耦合的影响，该方法已成功用于铁基超导体和铜酸盐超导体[25-29]，以改进我们的计算。然而，此处影响要小得多，因为电荷密度波振幅显著小于非常规超导体中的振幅。此外，此处电荷密度波主要起到消除半导体带隙的作用，而电子-声子耦合仍是驱动超导性的核心机制。

我们的计算得出电子-声子耦合常数（λ）为 1.42，经重整化后可达到 $\lambda/(1+\lambda)=0.58$。赝势（μ）根据德拜温度、费米能级、电子态密度、托马斯因子及电子浓度 [22]，确定，其值为 0.15，经重整化后可能达到 $\mu/(1+\lambda)=0.06$。根据 McMillan T_c公式 [30]，累积烯链的超导转变温度约为 62 K，超过了块体铁基超导体此前创下的 55 K 纪录 [31], ；而这一结果并不需要向列性、自旋轨道耦合、多带相互作用、自旋密度波等高 Tc 指标 [31]。

此外，在紧密排列的纳米线阵列中，电阻消失不仅需要形成库珀对，还需要发生BKT转变[24,32,33]。要发生这种 BKT转变，超导体的相干长度必须大于链之间的横向间距。由长超导累积烯链构成的阵列可使超导涡旋和反涡旋以更有序的方式配对，从而增强 BKT相互作用。BCS框架 [4] 预测的理论相干长度为 ~10 nm，约为链-链间距的八倍

在 KFI沸石中。这表明，我们复合材料中的超导性确实可能促成电阻完全降至零，并为实际应用铺平道路。

3.5：科学影响

该项目带来了若干值得关注的新见解。首先，在单原子一维极限下，我们发现，只要键强度保持稳固，光学模就能够抵抗压力下向更具金属性状态的转变。这一新发现为单原子材料领域提供了全新视角，偏离了传统预期。在这一局域区域内，有条件地偏离能带理论，可能会推动发展一种专为单原子一维极限定制的非常规能带理论。带隙与压力之间这种不同寻常的关系，也为设计高压半导体应用带来了创新机遇

此外，我们还揭示了碳链中累积烯相的非凡形成过程。我们的项目发现了一种生成累积烯相的迷人新机制，尤其是与 C-chains@BNT [16]的行为相比更是如此。在 BNT 宿主中，碳链的电荷密度波似乎受到硼原子与氮原子之间电场相互作用的影响 [16], 从而产生更加规则的波调制。相比之下，C-chains@KFI沸石中的电荷密度波也可能与巨大扭转效应有关。由于 BNT 内碳链的电荷密度波远强于 KFI 沸石中观察到的电荷密度波 [16], 我们新发现的科学现象表明，尽管电荷密度波促动了向累积烯相的转变，但这种波的调制幅度不能过大。

尽管纳米线通过扭转效应展现独特性质的可能性颇具吸引力[23], ，但纳米镊子这一概念在技术上似乎遥不可及。令人惊讶的是，涉及 KFI 沸石的范德华相互作用揭示了其在几何优化后沿碳纳米线诱导巨大纳米镊子效应的意外能力，其中碳纳米线的扭转角可达 90 度

无需外部电场或磁场！据我们所知，在这一程度上碳结构中扭转角的自然形成尚未见报道，这为通过不同的沸石组合触发其他扭曲有机纳米线的新颖性质提供了重要见解。

此外，我们确定了在沸石体系中合成长碳链的三项关键标准，并在 100 多种沸石基底中验证了这些标准。在 (6,4)碳纳米管宿主中，管对称性使碳链能够嵌入其中而不承受非对称内部压力，从而促进链增长。值得注意的是，我们发现碳链与沸石孔道之间的横向距离约为 0.3–0.4 nm，这与碳纳米管中的实验观测结果一致 [8]。相比之下，在 C-chains@BNT 情况下 [16], , 管在弛豫后呈非对称结构，且碳链与 BNT 管之间的横向距离远超 1 nm。因此，我们的 LCC@BNT 模型预测截断长度约为 10 个碳原子 [16], ；由于未能满足这三项关键条件，其短链特征与补充材料中讨论的其他沸石体系相似。这些发现为调控其他沸石以满足这三项条件铺平了道路，从而促进长链碳材料的制造，以期开发出更多新颖的性质。

4. 结论

本项目揭示了单原子碳纳米线奇异行为及其在高压半导体电子学与高温超导性方面潜力的重要见解。我们的研究结果表明，在极强共价键作用下，光学模会随压力增大带隙，这暗示着对能带理论中普遍认识的有条件偏离。对碳链中累积烯相的识别凸显了巨大扭转效应与电荷密度波之间的复杂关系，而碳的扭转效应此前尚未在这一层面上被报道。碳链@BNT与C-chains@KFI沸石体系中电荷密度波生成的对比机制，使人更深入地理解了

其中起作用的链稳定性，并为探索其他有机材料中的累积烯相开辟了途径。我们的工作进一步加深了对其奇异性质的认识，并为超导及半导体碳基复合材料的未来创新铺平了道路。

作者贡献

概念构思，C.H.W. C.T.W.,；方法学，C.H.W.；验证，C.H.W., C.T.W, K.C.L；形式分析，C.H.W., C.T.W.；数据整理，C.T.W, K.C.L.；写作，C.H.W.,C.T.W.；编辑，C.H.W, C.T.W, K.C.L；可视化，C.H.W, C.T.W, W.Y.C. 资源，C.H.W., W.K.L, S.P.Ng, C.P.C, K.C.L, X.Hu, L.Y.F.L.

数据可用性声明

如有合理请求，可提供数据。

利益冲突

作者声明不存在利益冲突

致谢

我们感谢香港理工大学工业与系统工程系对第一性原理软件的支持。我们感谢香港科技大学化学与生物工程系在计算方面提供的协助。

经费来源

Th本文所述工作部分由研究资助局提供的资助支持，

该研究资助局隶属于中国香港特别行政区（UGC/FDS24/E02/25 ）

参考文献

[1] Avouris, P 等，《碳基电子学》，《自然·纳米技术》，第 2 卷，第 605–615 页（2007）

[2] Li, T. 铜氧化物超导研究最新进展简述 -《中国物理 B》，30，100508，（2021）。

[3] Li, F. 等。 加压镍酸盐单晶中高达 96 K 的体超导 s. 《自然》 1–8（2025年）

[4] Bardeen, J., Cooper, L. N. 和 Schrieffer, J. R.《超导理论》。《物理评论》 108, 1175–1204（1957年）。

[5] Lim, S. 等 笼目金属 RbV_3Sb_5 中准一维范霍夫奇点的出现。纳米快报（2025年）

[6] Wang, M. & Lin, S. 卡拜和累积烯中的弹道热输运及具有微米级谱声学声子平均自由程的研究。*Sci Rep* 5, 18122（2015年）。

[7] Patrick, C. W. 等 用于合成穿线碳链的掩蔽炔烃。自然·化学16, 193–200（2024年）。

[8] Shi, L. 等 以受限线性碳链为路径制备体相卡拜。自然·材料 15, 634–639（2016年）。

[9] Tang, J. 等 由硼氧键形成驱动的无机累积烯复分解化学。化学科学 16, 2231–2237（2025年）。

[10] Xu, W. 等 累积烯分子导线中电导的异常长度依赖性。德国应用化学国际版 58, 8378–8382（2019年）。

[11] Watson, L. 等 拓扑绝缘体单层WTe2中电荷密度波激子序参量的观测。*ACS Nano*（2025年）

[12] Lian, C.-S.、Si, C.与Duan, W. 揭示二维NbSe2中的电荷密度波、超导性及其竞争本质。纳米快报（2018年）

[13] Wong, C. H. 等 调控封装于氮化硼纳米管中的碳纳米线的电荷密度波与磁开关。材料视界 12, 8205–8215（2025年）。

[14] Wong, C. H.、Buntov, E. A.、Rychkov, V. N.、Guseva, M. B.与Zatsepin, A. F. 碳链中化学键分布与相变的模拟。碳 114, 106– 110（2017年）。

[15] Wong, C. H. 等人 碳链中的室温 p轨道磁性及第IV、V、VI和VII族掺杂剂的作用。纳米尺度 10, 11186–11195（2018年）。

[16] Wong, C. H. 等人 外部和内部参数对合成含有6000多个原子的卡拜的影响模拟：实现碳纳米管基晶体管中连续可调的能垒。纳米材料 13,（2023年）。

[17] Li, S.-A. 三维碳结构中超过 100 K 的常压高温超导性。《物理评论*B*》 111, (2025年)。

[18] Du, F. 等压力下 $LaAuSb_2$ 中电荷密度波序与超导性的相互作用。《物理评论*B*》 102, 144510 (2020年)。

[19] Henderson, T. M., Janesko, B. G. & Scuseria, G. E. 范围分离杂化泛函的广义梯度近似模型交换空穴。《化学物理杂志》 128, 194105 (2008年)。

[20] Benítez, P. 等极性电子-声子耦合驱动的非谐钙钛矿型半导体带隙可调性。《美国化学会志》(2025年)

[21] Sadovskii, M. V. 绝热近似之外的 Eliashberg–McMillan理论中的电子-声子耦合。《实验与理论物理学杂志》 128, 455–463 (2019年)。

[22] Weng, K.-C. 和 Hu, C. D. Rashba相互作用存在下二维电子气中的p波超导性。*Sci Rep* 6, 29919（2016年）。

[23] Liu, M.、Artyukhov, V. I.、Lee, H.、Xu, F. 和 Yakobson, B. I. 第一性原理研究卡拜因：碳原子链、纳米棒还是纳米绳。*ACS Nano*（2013年）

[24] He, M. 等超导超薄铅纳米线阵列中上临界场的“巨大”增强及体相临界温度以上的涨落。美国化学会出版部（2013年）[25] Wong, C. H. & Lortz, R. 解析122型铁基超导体：对相图和转变温度的全面模拟。《物理评论研究》6，013121（2024年）。

[26] Wong, C. H. & Lortz, R. 铁基超导体中纳入能隙各向异性、反铁磁自旋和电荷密度波，并考虑自旋轨道耦合的相图模拟。iScience 27，110204（2024年）。

[27] Wong, C.H. & Lortz, R. 探究非常规电子分布模式：使用从头算方法比较 FeSe 与 FeSe/STO。《Materials》17, 5204（2024年）。

[28] Wong, C. H. & Lortz, R. 电子差分声子在 YBa2Cu3Ox 超导性建模中的异常影响。《iScience》28, （2025年）。

[29] Wong, C. H. & Lortz, R. NaFeAs、LiFeAs、FeSe 和纳米结构 FeSe/SrTiO3 超导体中铁基超导性的初步 T_C 计算。《Materials》，16(13), 4674（2023年）。

[30] Dynes, R. C. McMillan方程与超导体的*T*c。《Solid State Communications》10, 615–618（1972年）。

[31] Zhi-An, R. E. N. 等 铁基掺氟层状四元化合物 Sm[$O_{1-x}F_x$]FeAs 中 55K 的超导性。*Chin. Phys. Lett* 25, 2215–2216（2008年）。

[32] He, M. 等。准一维碳化物超导体 Sc3CoC4 超导转变中的一维到三维维度交叉。J. Phys.: Condens. Matter 27, 075702（2015）。

[33] Zhang, Y. 等。Sn 单晶纳米线阵列中超导性的显著增强。Sci Rep 6, 32963（2016年）。

补充材料

A：试验共价键的选择 [13,14,16]

对于初始键类型 [=C=]，向试探键的转变由三个随机数范围决定：

- 当 $0 \le R < 0.33$ 时，试探键以相同概率为 [−C≡] 或 [≡*C*−] 。• 当 $0.33 \le R < 0.66$ 时，试探键以相同概率变为 [=*C*−] 或 [−C=] 。• 当 $0.66 \le R \le 1$ 时，试探键仅为 [−C−]。

对于初始键类型 [−C≡] 或 [≡*C*−]，转变规则如下：

- $0 \le R < 0.33$ 生成试探键 [=C=]。• 0。$33 \le R < 0.66$ 以相同概率生成试探键 [=*C*−] 或 [−C=] 。• 0。$66 \le R \le 1$ 生成试探键 [−C−]。

对于初始键类型 [−C−]，转变规则如下：

- $0 \le R < 0.33$ 以相同概率生成试探键 [−C≡] 或 [≡*C*−] 。• 0。$33 \le R < 0.66$ 以相同概率生成试探键 [=C−] 或 [−C=] 。• 0。$66 \le R \le 1$ 生成试探键 [=*C*=]。

最后，对于初始键类型 [=C−] 或 [−C=]，规则如下：

- $0 \le R < 0.33$ 以相同概率生成试探键 [−C≡] 或 [≡*C*−]。• 0。$33 \le R < 0.66$ 生成试探键 [=C=]。• 0。$66 \le R \le 1$ 生成试探键 [−C−]。

B：试验动力学 [13,14,16]

在随机游走模拟中，单个碳原子沿 x、y、z 轴的潜在运动通过以下公式计算，这些公式涉及其胡克因子、自由粒子速度 、平均散射时间~10^{-13}、随机数（R_c）以及单键、双键和三键能的平均值 $\sqrt{\frac{k}{M}}$

$$Tv = \sqrt{\frac{k}{M}}$$

t

1 2 3E E E

< + + >

c x v t Rδ = ± < δ

$$\delta y = \delta z \sim \frac{k_B T}{< E_1 + E_2 + E_3 >} \delta x$$

C：沸石表格，含晶格参数（摘自 Materials Studio 数据库 e)

	a(Å)	b(Å)	c(Å)	α(度)	β(度)	γ(度)
ABW	10.311	8.2	4.995	90	90	90
ACO	9.905	9.905	9.905	90	90	90
AEI	13.7114	12.7	18.57	90	90.01	90
AEL	13.472	18.7	8.443	90	90	90
AEN	18.531	13.4	9.636	90	90	90
AET	33.29	14.8	8.257	90	90	90
AFG	12.604	12.6	21.28	90	90	120
AFI	13.726	13.7	8.484	90	90	120
AFN	14.02	13.5	10.2	90	107.239	90
AFO	9.72	25.8	8.36	90	90	90
AFR	21.941	13.7	7.124	90	90	90
AFS	13.225	13.2	26.89	90	90	120
AFT	13.73	13.7	28.95	90	90	120
AFX	13.674	13.7	19.7	90	90	120
AFY	12.748	12.7	9.014	90	90	120
AHT	16.184	9.91	8.134	90	90	90
ALPO4-8	33.29	14.8	8.257	90	90	90
ALPO4-18	13.711	12.7	18.57	90	90	90
ALPO4-31	20.827	20.8	5.003	90	90	120
ALPO4-41	9.72	25.8	8.36	90	90	90
ANA	13.73	13.73	13.73	90	90	90
APC	19.82	10	8.94	90	90	90
APD	19.197	8.58	9.8	90	90	90
AST	13.38	13.38	13.38	90	90	90
ATN	13.09	13.1	5.18	90	90	90
ATO	20.827	20.8	5.003	90	90	120
ATS	13.1483	21.6	5.164	90	91.86	90
ATT	10.333	14.6	9.511	90	90	90
ATV	9.449	15.2	8.408	90	90	90
AWO	9.101	15	19.24	90	90	90
AWW	13.628	13.6	15.46	90	90	90
BEA	12.6614	12.7	26.41	90	90	90
BETAPA	12.661	12.7	26.41	90	90	90
BETAPB	17.897	17.9	14.33	90	114.80299	90
BIK	8.607	4.95	7.597	89.9	114.437	89.988
BOG	20.236	23.8	12.8	90	90	90
BPH	12.58	12.6	12.45	90	90	120
BRE	6.767	17.5	7.729	90	94.4	90
CAN	12.678	12.7	5.179	90	90	120
CAS	13.828	16.8	5.021	90	90	90
CFI	13.961	5.26	25.97	90	90	90

CGF	15.501	16.9	7.273	90	96.07	90
CGS	8.444	14.1	15.93	90	90	90
CHA	9.42	9.42	9.42	94.2	94.2	94.2
CHI	8.729	31.3	4.903	90	90	90
CLO	51.71	51.71	51.71	90	90	90
CON_	22.5949	13.3	12.37	90	68.852	90
CZP	9.355	9.36	14.86	90	90	120
DAC	18.73	10.3	7.54	90	90	107.89997
DDR	13.86	13.9	40.89	90	90	120
DFO	22.351	22.4	43.28	90	90	120
DFT	7.075	7.08	9.023	90	90	90
DOH	13.783	13.8	11.19	90	90	120
DON	18.89	23.4	8.469	90	90	90
EAB	13.28	13.3	15.21	90	90	120
EDI	9.55	9.67	6.523	90	90	90
EMT	17.449	17.4	28.46	90	90	120
EPI	9.101	17.7	10.23	90	124.66	90
ERI	13.252	13.3	14.81	90	90	120
ESV	9.686	12.2	22.84	90	90	90
EUO	13.695	22.3	20.18	90	90	90
FAU	25.03	25.03	25.03	90	90	90
FAU1	25.028	25	25.03	90	90	90
FER	19.156	14.1	7.489	90	90	90
FER_confA	19.156	14.1	7.489	90	90	90
FER_confB	19.156	14.1	7.489	90	90	90
GIS	9.843	10	10.62	90	90	92.417
GME	13.756	13.8	10.06	90	90	120
GOO	7.401	17.4	7.293	90	105.43998	90
HEU	17.77	18	7.435	90	116.46002	90
hypABCB	17.426	17.4	56.86	90	90	120
hypBEB	17.8965	17.9	14.33	90	114.80331	90
IFR	18.628	13.4	7.629	90	102.322	90
ISV	12.874	12.9	25.67	90	90	90
ITE	20.753	9.8	20.01	90	90	90
JBW	16.426	15	5.224	90	90	90
KFI	18.671	18.671	18.671	90	90	90
LAU	7.549	14.7	13.07	90	90	111.89995
LEV	13.338	13.3	23.01	90	90	120
LIO	12.5179	12.5	15.5	90	90	120
LOS	12.906	12.9	10.54	90	90	120
LOV	39.58	6.93	7.15	90	90	90
LTL	18.466	18.5	7.476	90	90	120

MAPO-39	13.09	13.1	5.18	90	90	90
马里科帕石	19.434	19.7	7.538	90	90	90
MAZ	18.392	18.4	7.646	90	90	90
MEI	13.175	13.2	15.85	90	90	120
MEL	20.067	20.1	13.41	90	90	90
MEP	13.44	13.44	13.44	90	90	90
MER	14.116	14.2	9.946	90	90	90
MFI	20.022	19.9	13.38	90	90	90
MFS	7.451	14.2	18.77	90	90	90
MON	7.141	7.14	17.31	90	90	90
MOR	18.094	20.5	7.524	90	90	90
MSO	17.165	17.2	19.79	90	90	120
MTF	9.629	30.4	7.249	90	90.45	90
MTT	5.01	21.5	11.13	90	90	90
MTW	24.863	5.01	24.33	90	107.72202	90
MWW	14.1145	14.1	24.88	90	90	120
NAT	18.326	18.7	6.601	90	90	90
NES	14.324	22.4	25.09	90	151.51505	90
NON	22.232	15.1	13.63	90	90	90
OFF	13.291	13.3	7.582	90	90	120
OSI	18.506	18.5	5.268	90	90	90
PAR	21.555	8.76	9.304	90	91.55	90
PHI	9.865	14.3	8.668	90	124.19999	90
ROG	18.332	18.3	9.161	90	90	90
RON	18.33	18.3	9.16	90	90	90
RSN	7.238	40.6	7.308	90	91.8	90
RTE	14.098	13.7	7.431	90	102.421	90
RTH	9.762	20.5	9.996	90	96.897	90
RUT	13.112	12.9	12.41	90	113.5	90
SAO	13.439	13.4	21.86	90	90	90
SAT	12.871	12.9	30.58	90	90	120
SBE	18.534	18.5	27.13	90	90	90
SBS	17.193	17.2	27.33	90	90	120
SBT	17.191	17.2	41.03	90	90	120
SFE-UDUD	8.4	14.2	20.14	90	90	90
SFE-UUDD	14.24	20.1	8.4	90	90	90
SFF	11.454	21.7	7.227	90	93.154	90
SGT	10.239	10.2	34.38	90	90	90
SOD	8.89	8.89	8.89	90	90	90
STF	14.104	18.2	7.477	90	98.989	90
STI	13.64	18.2	11.27	90	127.99991	90
STT	13.573	21.9	16.6	90	129.95983	90

苏州大学-4	18.915	14.2	7.442	90	90	90
TER	9.807	23.6	20.24	90	90	90
THO	13.088	13.1	13.23	90	90	90
TON	13.859	17.4	5.038	90	90	90
VET	13.048	13	4.948	90	90	90
VFI	18.975	19	8.104	90	90	120
VNI	10.002	10	34.14	90	90	90
VSV	7.179	7.18	40.62	90	90	90
WEI	11.897	9.71	9.633	90	95.76	90
WEN	13.511	13.5	7.462	90	90	120
YUG	6.73	14	10.03	90	111.49997	90
YUG1	6.73	14	10.03	90	111.49997	90
磷酸锌	10.409	10.4	15.22	90	90	120
锌硅酸盐	10.0676	14	7.067	90	90	90
ZON	6.918	14.9	17.24	90	90	90

D：入围沸石表及其晶格参数

	a(Å)	b(Å)	c(Å)	α（度）	β（度）	γ(度)	Pore 半径(Å)
ACO	9.905	9.905	9.905	90	90	90	1.8
ANA	13.73	13.73	13.73	90	90	90	1.6
AST	13.384	13.384	13.384	90	90	90	1.8
CLO	51.712	51.712	51.712	90	90	90	4.3
FAU	25.028	25.028	25.028	90	90	90	1.9
KFI	18.671	18.671	18.671	90	90	90	3.4
MEP	13.436	13.436	13.436	90	90	90	2.3