
电子科大镍基超导研究新突破：H元素的关键作用

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/22171.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

电子科大镍基超导研究新突破：H元素的关键作用。

3月2日，电子科技大学物理学院乔梁教授团队在超导新材料研究领域取得重大突破，发现了无限层镍氧化物超导体(镍基超导)超导电性的关键性元素(H)和奇异电子态(间隙位s轨道)，为镍基超导领域的发展开辟了崭新的思路。研究结果以Critical Role of Hydrogen for Superconductivity in Nickelates为题，在Nature杂志在线发表。丁翔、Charles C. Tam、隋雪蕾为该论文的共同第一作者，电子科技大学乔梁、英国Diamond光源周克瑾、北京计算科学研究中心黄兵等为论文的共同通讯作者。电子科技大学物理学院为第一完成单位，该研究还得到了来自成都大学、北京大学和澳大利亚新南威尔士大学等课题组的鼎力支持。

镍基超导是当前凝聚态物理的前沿领域，具有重要的科学意义。在当前基于铜氧化物的高温超导(铜基超导)研究陷入瓶颈的情况下，对类铜结构的无限层镍氧化物超导电性的深入研究，对于揭示高温超导的本征物理机制和新一代超导技术的发展具有重要推动作用。自2019年美国斯坦福大学Hwang教授课题组率先在基于无限层结构的镍氧化物外延薄膜($\text{Nd}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{NiO}_2$)中发现了超导电性以来，镍基超导领域的发展并不顺利。虽然镍基超导的一些新现象相继被报道，但其超导的起源之谜和样品制备难度大、不同课题组间的重现性差，成为困扰该领域的两大难题，制约着镍基超导领域的发展。

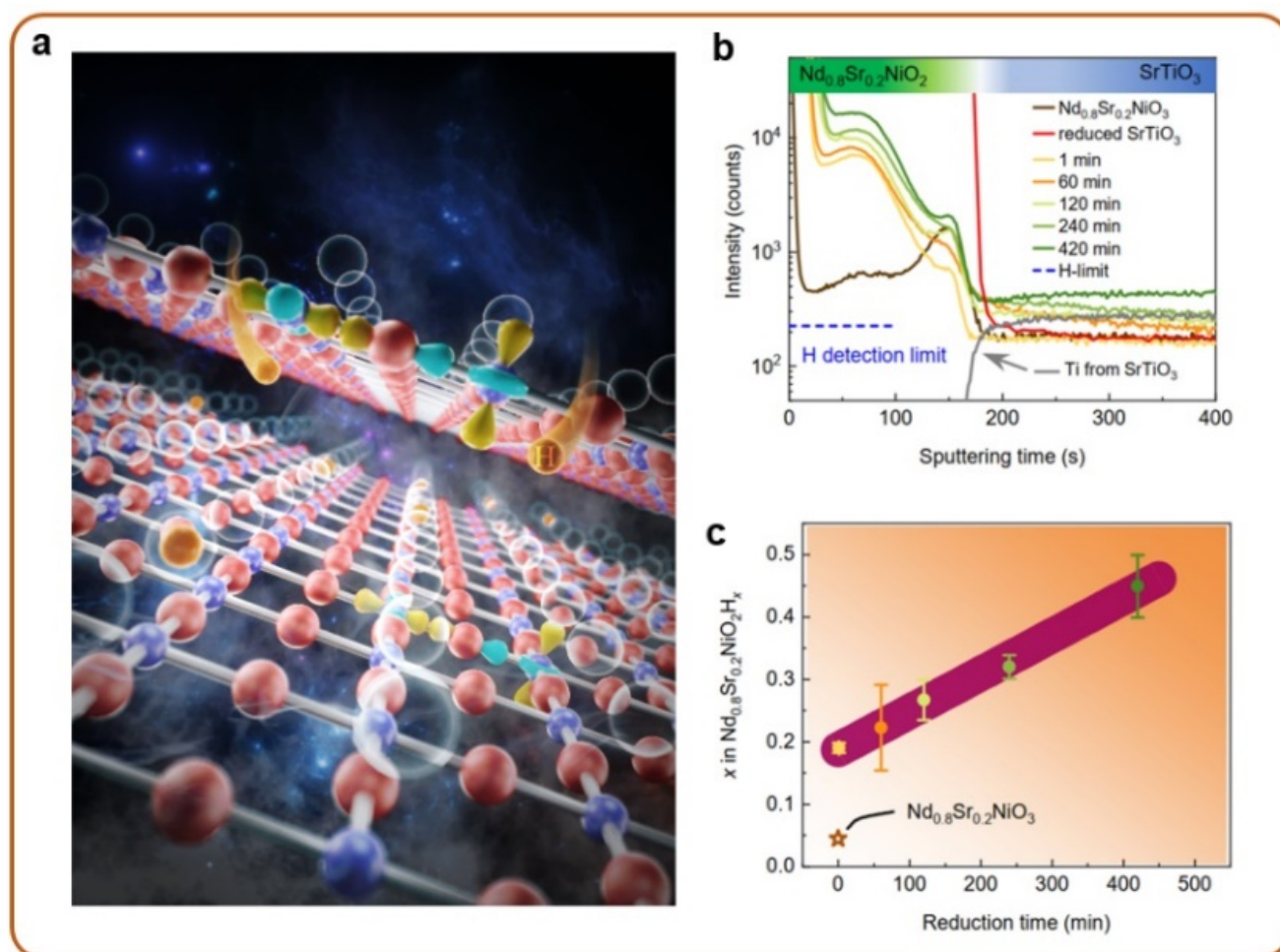


图1.

(a)镍基超导中H元素作用的示意图;(b)SIMS实验结果，证明H的存在;(c)H元素含量的有效调控

一般来说，物理规律是客观存在的。当不同科学家的课题组制备的材料样品频繁出现性能不能重现的问题时，第一直觉就是材料内部可能存在着不为人知的隐变量，从而悄悄改变了制备出的材料的物理性能。乔梁教授团队通过系统深入的研究，利用极高元素敏感性的飞行时间二次离子质谱(ToF-SIMS)发现镍基超导外延薄膜中存在大量的H元素(图1(b))，而且H元素自始至终存在于薄膜晶格外延生长和拓扑化学还原的过程(图1(c))。进一步结合基于量子力学第一性原理(DFT)的方法确定了H元素在材料内部的原子占据位置(八面体顶点氧的位置)。

作为自然界最简单的、元素周期表排名第一的元素，H原子具有最小的原子半径和原子质量，因此H与常规探测媒介(光子、电子等)相互作用弱、散射截面小，导致其很难被探测到。但H元素又是无处不在的，大部分的物理和化学合成过程，都会涉及H元素的参与。而且H在材料中可以取代、间隙等位置存在，有可能显著改变材料的电子结构和物质性质。

在科学历史上，H元素曾经制造过几起著名的悬疑事件。典型的例子就是基于GaN的蓝光二极管(LED)的故事。早在上世纪80年代，制造蓝光LED的主要技术限制是缺乏稳定且有效的P型GaN。在实验科学家们通过技术途径在Mg掺杂的GaN中实现了P型导电和蓝光LED后若干年，理论科学家才揭开了这个谜团：一方面，H通过形成MgGa-H缺陷对，有助于稳定P型掺杂GaN的晶格结构；另一方面，H离子的介入暗中补偿了MgGa缺陷诱导的空穴掺杂效果，导致P型掺杂的GaN不导电。

。而发现隐藏的H元素、并进一步克服H元素带来的问题，成为成功实现蓝光LED产业化的关键，也带我们进入了当今五彩缤纷的LED时代。

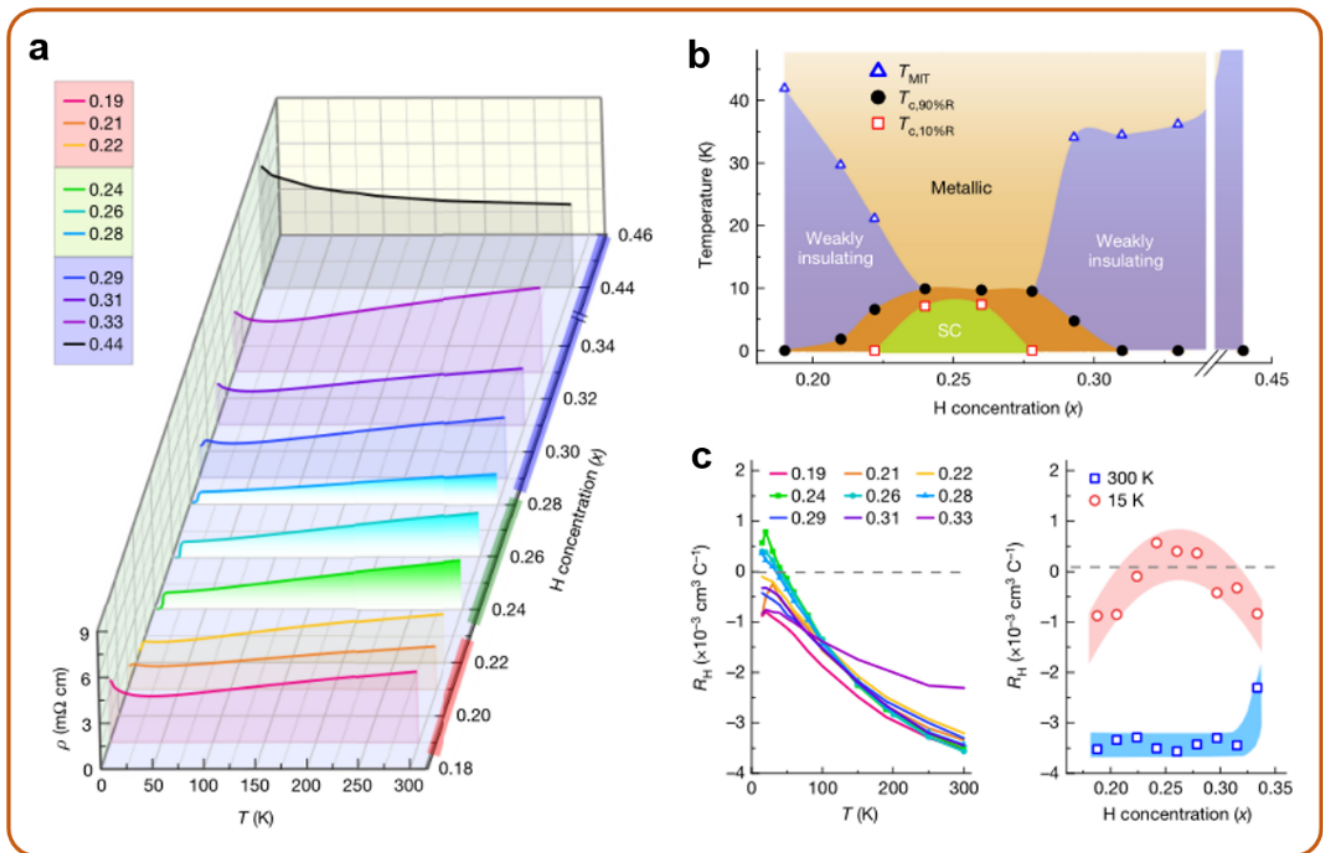


图2. $\text{Nd}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{NiO}_{2}\text{H}_x$ 薄膜的输运性质及其H含量相关的超导相图。

那么问题来了，H元素对无限层镍氧化物超导电性是否有影响呢？该团队通过极低温强磁场输运性质研究发现，在Sr含量不变的情况下，通过调控H元素的含量，可以实现弱绝缘→超导→弱绝缘的连续相变(图2)，说明H元素的确对超导电性的出现有关键的作用。进一步，这些结果可以解释为什么镍基超导外延薄膜的生长如此困难，在世界范围内仅有少数课题组可以成功制备零电阻超导样品，而且样品重复性差。主要原因就是之前不同课题组的实验，有可能没有考虑到H元素的存在对超导的影响，没有精确控制样品的H含量。

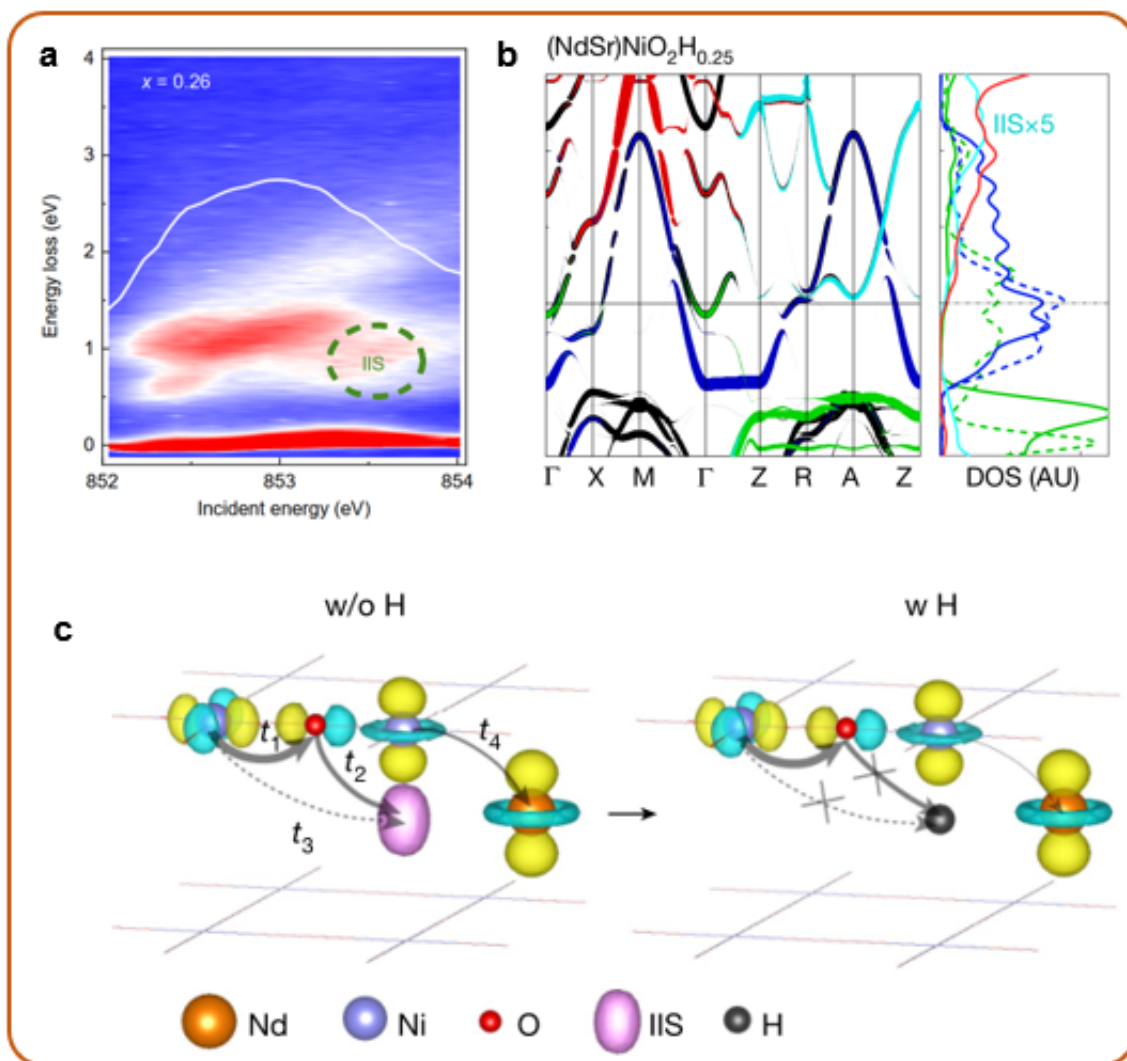


图3. (a)RIXS实验观测到的IIS轨道激发;(b)DFT理论计算的IIS轨道;(c)IIS轨道与Ni $3d_{x^2-y^2}$ 、Ni $3d_{z^2}$ 、Nd $5d_{z^2}$ 、O $2p$ 等轨道的杂化示意图。

为了进一步理解H元素究竟是怎样影响镍基材料超导电性的，并揭示其微观机制，该团队通过基于同步辐射的共振X射线非弹性散射(RIXS)技术和电子结构研究研究了镍基超导体费米面附近的电子结构。首次在实验上观察到了奇异电子态，即巡游的间隙位s轨道(IIS)，并结合理论发现H元素与IIS轨道的杂化，有利于降低Ni $3d$ -Nd $5d$ 和Ni $3d$ -IIS的轨道耦合，进而实现准二维 $3d_{x^2-y^2}$ 轨道主导的、类似于铜基超导的费米面电子结构，促进超导态的出现(图3)。

这表明，H元素就像一只看不见的手，在无限层结构镍基氧化外延单晶薄膜的制备过程中悄悄地起到改变费米面电子结构的作用，并在镍基材料超导电性的产生过程中扮演着关键性的角色。该研究结果纠正了我们对这类材料电子结构的认识，为理解镍基超导的物理起源提供了关键信息，也为未来的深入理解镍基超导的相关物理和材料性能，提供了准确的物理模型。

该研究受到了国家自然科学基金(12274061, 52072059, 11774044, 12088101, U2230402)、四川省科技厅(2021JDJQ0015, 2022ZYD0014)和澳大利亚科学基金(DP220103229, DP19013661)的支持。(来源：科学网)

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41586-022-05657-2>

作者：乔梁等 来源：《自然》

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发