高压物理学报

高压下$LuThH_{10}$的晶体结构和超导性质

邓雨欣 王泽茜 李天缘 王世达 王金华

Crystal Structure and Superconducting Properties of $LuThH_{10}$ at High Pressure

DENG Yuxin, WANG Zexi, LI Tianyuan, WANG Shida, WANG Jinhua

引用本文:
邓雨欣, 王泽茜, 李天缘, 等. 高压下$LuThH_{10}$的晶体结构和超导性质[J]. 高压物理学报, 2025, 39(6):061101. DOI: 10.11858/gywlxb.20240906
DENG Yuxin, WANG Zexi, LI Tianyuan, et al. Crystal Structure and Superconducting Properties of $LuThH_{10}$ at High Pressure[J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2025, 39(6):061101. DOI: 10.11858/gywlxb.20240906

在线阅读 View online: https://doi.org/10.11858/gywlxb.20240906

第 39 卷　第 6 期
2025 年 6 月

高　压　物　理　学　报
CHINESE JOURNAL OF HIGH PRESSURE PHYSICS

Vol. 39, No. 6
Jun. , 2025

DOI: 10.11858/gywlxb.20240906

高压下 $LuThH_{10}$ 的晶体结构和超导性质

邓雨欣, 王泽茜, 李天缘, 王世达, 王金华

（天津职业技术师范大学理学院, 天津　300222）

摘要: 采用粒子群优化算法和第一性原理计算方法, 系统地研究了高压下三元氢化物 $LuThH_{10}$ 的晶体结构、电子性质和超导性能, 发现了 $LuThH_{10}$ 的热力学稳定的 $C2/m$ 相和 $Cmmm$ 相。谱函数和电声耦合计算结果表明: 在 200 GPa 下, $LuThH_{10}$ 的 $C2/m$ 相和 $Cmmm$ 相的超导转变温度分别为 65.8 和 70.7 K; 在 300 GPa 下, $C2/m$ 相的超导转变温度为 60.0 K。进一步研究表明, 氢原子在 $LuThH_{10}$ 的超导中起关键作用, 高频氢原子的振动有助于提高超导转变温度。

关键词: 氢化物; 高压; 第一性原理计算; 超导电性

中图分类号: O521.2　　　　**文献标志码:** A

1911 年, 荷兰低温物理学家 Onnes 发现金属汞的电阻在 4.2 K 的低温条件下会突然降为零[1], 这种在一定临界温度(T_c)下电阻突然变为零的现象被称为超导, Onnes 因其在低温物理上的突出贡献获得了诺贝尔物理学奖。自此以后, 如何提高超导材料的超导转变温度一直是凝聚态物理领域的热点问题。然而, 提高超导转变温度 T_c 的过程却非常缓慢, 其中的一个关键原因是人们难以清晰地理解超导的微观机制, 进而阻碍了高温超导体的实现。1957 年, 美国 3 位物理学家 Bardeen、Cooper 和 Schrieffer 提出了 BCS 理论[2], 这是常规超导理论的重要里程碑。BCS 理论表明, 原子质量轻的元素具有较高的德拜频率, 德拜频率与 T_c 成正比, 因此, 原子质量轻的元素是高温超导的理想候选元素。氢是元素周期表中最轻的元素, 被预测其超导温度可能达到室温。尽管氢在常压时是绝缘体, 但在高压环境下将逐渐转变成具有导电性质的金属。1935 年, 物理学家 Wigner 等[3] 提出: 在 25 GPa 下, 氢原子核会失去对电子的束缚能力, 电子脱离原子轨道成为自由电子, 从而产生金属氢。大量理论研究表明, 在不同压强下, 金属氢的 T_c 可达到 100～760 K[4–5]。令人遗憾的是, 在高达 495 GPa 的实验中, 仍未观察到金属氢的确切证据[6]。在金属氢化物中寻找高温超导体成了替代方案。2004 年, Ashcroft[7] 提出了“化学预压缩”原理, 开启了富氢高温超导时代。根据氢原子的成键特征, 高压下的富氢化合物可分为 3 类: 含有原子氢(H)的富氢化合物、含有 H_2 分子单元的富氢化合物和含有 H_3 分子单元的富氢化合物[8]。在富氢多元化合物中实现室温超导的关键是富氢化合物中全部氢的原子化: 对于含氢分子的体系, 非氢元素的电子转移促使氢分子解离为类原子氢, 使得氢的导电性增强, 从而增强富氢化合物的导电性和超导性能; 对于不含氢分子的体系, 氢原子直接以非分子形式稳定存在, 通过非氢元素的几何约束(如笼状或四面体结构)使氢原子紧密排布, 这样无需经历解离过程即可展现出优异的超导性能。

2012 年, Wang 等[9] 首次提出了一种 H 原子以类方钠石分布的笼状富氢化合物 CaH_6(H_{24} 笼结构), 在 150 GPa 下的 T_c 在 220～235 K 区间。2022 年, Ma 等[10] 成功合成了 CaH_6, 实验观测到 CaH_6 在 172 GPa

*　**收稿日期:** 2024-09-24; **修回日期:** 2024-11-07
基金项目: 天津市级大学生创新创业训练计划项目(202310066098); 吉林大学超硬材料国家重点实验室开放课题(202307)

作者简介: 邓雨欣(2003—), 女, 本科, 主要从事高压下材料计算与模拟研究. E-mail: dengyuxin211@gmail.com
通信作者: 王金华(1981—), 女, 博士, 副教授, 主要从事高压下材料计算与模拟研究.
E-mail: wangjinhua0626@126.com

下具有 215 K 的超导转变温度。2014 年，Duan 等[11]设计了共价型富氢超导体 H_3S，其在 200 GPa 下的理论 T_c 约为 200 K，与之后德国 Drozdov 等[12]的实验结果一致。H_3S 的发现是探索富氢高温超导体的一个标志性事件，引发了人们对其他富氢高温超导体系的研究热潮。2017 年，Peng 等[13]和 Liu 等[14]预言具有氢笼合物结构的稀土富氢化合物 LaH_{10}、YH_6、YH_9、YH_{10} 是近室温富氢超导体，其理论 T_c 分别达 288、264、276 和 303 K。基于理论预测，人们在实验室合成了 LaH_{10}、YH_6、YH_9，并分别在 260、224 和 243 K 下观测到了高温超导电性[15–16]。在 LaH_{10} 氢笼合物中，邻近 H 原子之间形成弱共价键，构成氢笼合物的主体结构，La 原子作为客体位于氢笼中心，并转移电子给氢笼，与氢笼形成离子键。以 LaH_{10} 为代表的高温超导材料展示出其 T_c 接近室温的优异超导性能，激发了人们在氢笼合物结构的富氢化合物中寻找室温超导体的热情[17]。

与金属氢相比，尽管氢笼合物的富氢高温超导材料的合成压强已大幅降低，但仍普遍超过 150 GPa，这种较为苛刻的制备条件使得人们在围绕超导性质开展实验表征和潜在应用时遭遇较大阻碍。当下，高压下的高温超导研究已经迈入新阶段，该阶段聚焦优化富氢超导材料，即兼顾高温超导电性和制备所需的压强条件。事实上，在二元氢化物中加入额外元素，可以提高体系的自由度，这为超导富氢材料的筛选提供了种类更丰富、数量更多的结构原型。一方面，第 3 种元素的加入在很大程度上扩展了新的相空间，提升了找到高温超导体的可能性；另一方面，不同化学配比的元素组合可以在很大程度上降低合成该化合物所需的压力。2019 年，Sun 等[18]通过计算预测了三元氢笼合物 Li_2MgH_{16} 在 250 GPa 压强条件下的理论超导温度可达 473 K，在国际上首次提出“热”超导体这一概念。此外，理论和实验研究已经表明，对于 $LaBeH_8$[19]、H_6SX（X = Cl, Br）[20]、A-Th-H（A = La, Ac, Y）[21]和 La-B-H 体系[22–23]，通过调控多元富氢化合物中金属元素的组合，可以实现更优异的超导性质。2023 年，Song 等[24]在实验室合成了 $LaBeH_8$，并在 80 GPa 下测量得到其 T_c 为 110 K。最近，Song 等[25]在实验室合成了 LaB_2H_8，观测到 LaB_2H_8 在 90 GPa 下的 T_c 为 106 K。此外，理论预测三元氢化物 KB_2H_8 的动力学稳定压力可降至 12 GPa，其 T_c 处于 134～146 K 区间[26]。尽管三元氢化物的部分预测结构为亚稳结构，但其理论预测结果为设计热力学稳定的室温超导材料提供了重要参考。

如今，氢基超导体研究聚焦在兼顾低稳定压力和高临界温度上。Du 等[27]提出了一种在一系列中等压力下保持稳定的氢基室温超导体，他们将具有更大化学预压缩作用的重稀土元素 Yb/Lu 掺入半径及电负性相近的 Ca、Sc、Y 的六氢化物，研究结果表明，Lu 原子的引入显著改善了这些六氢化物的临界温度，同时，这些超导体在较低的压力下也是稳定的。该成果为实现常压下的室温超导迈出了重要的一步。此后不久，高压下的 La-Th-H 体系被预测具备高温超导电性[28–29]。通过对元素周期表的各个元素进行分析，可以发现具有更大化学预压缩作用的 Lu 与 Th 具有相近的原子半径和电负性。鉴于此前二元氢化物 ThH_{10} 的超导电性已被实验[30–31]证实，本研究将基于粒子群优化算法和第一性原理计算方法，对 Lu-Th-H体系进行结构预测，分析具有低焓值结构的电子结构和超导性质，以探寻具有更优异性能的高温超导体以及在尽可能低的压力下稳定的室温超导体，为未来实验提供参考。

1　计算细节

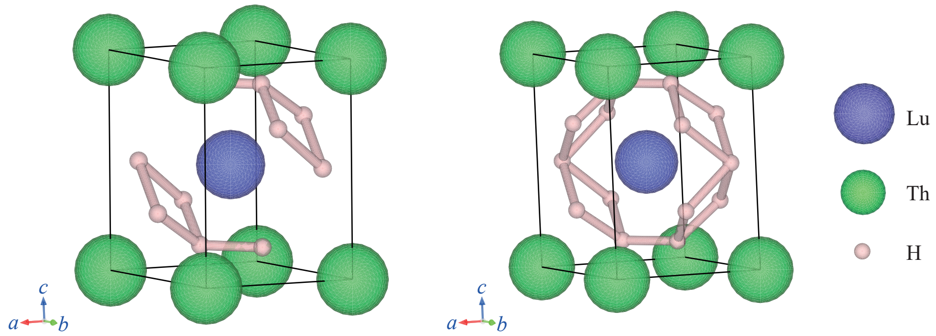
首先，采用晶体结构搜索软件 CALYPSO（crystal structural anlysis by particle swarm optimization）[32–34]对 Lu-Th-H 体系开展高压下化学配比为 1∶1∶10 的定组分结构预测，设置生成的结构数量不低于 600。然后，通过焓值排序，得到 $LuThH_{10}$ 的稳定结构。接着，采用第一性原理计算模拟软件 VASP（Vienna *ab-initio* simulation package）[35]对稳定结构进行更加精细的结构优化和电子性质计算。计算过程采用密度泛函理论（density functional theory, DFT）[36]投影缀加平面波（projector augmented wave, PAW）方法[37]，交换关联泛函采用广义梯度近似（generalized gradient approximation, GGA）[38–39]的 PBE（Perdew-Burke-Ernzerhof）[35, 40]。Lu 的 $5p^6 6s^2 5d^1$、Th 的 $6p^6 7s^2 6d^2$ 和 H 的 $1s^1$ 作为价电子处理，优化过程中截断能选取 800 eV。对于 *Cmmm* 相，选取的 *K* 点网格尺寸为 12×15×12；对于 *C*2/*m* 相，选取的 *K* 点网格尺寸为 7×10×8。这些参数设定可以确保焓值收敛在 0.001 eV/atom 以内。此外，采用基于密度泛函微扰理论的

Quantum-ESPRESSO 软件[41] 计算预测稳定结构的声子谱、电声耦合性质以及超导性质。采用超软赝势，平面波截断和电荷密度截断分别选为 80 Ry 和 800 Ry，使用 20×20×12 的 K 点网格计算自洽电荷密度，声子谱和电声耦合参数计算使用 5×5×3 的 Q 点网格。

2　结果与讨论

2.1　晶体结构

首先对 Lu-Th-H 体系在 300 GPa 下进行化学配比为 1∶1∶10 的定组分结构预测，设置生成的结构数量不低于 600。结构预测显示，*C*2/*m*、*Cmmm* 相的焓值较低，因而，对其进行了系统研究。图 1 显示了 $LuThH_{10}$ 的 *C*2/*m* 相和 *Cmmm* 相的结构。从图 1 可以看出，Lu 原子和 Th 原子附近都存在大量 H 原子，但是不存在 H_2 分子单元。高压下具有较高超导转变温度的富氢化合物均具有以下特点[14, 42]：(1) 结构具有高对称性；(2) 氢元素倾向于以原子的形式存在，不存在 H_2、H_3 分子单元；(3) 费米面处 H 的电子态密度占比高；(4) 费米面处电子与高频声子强耦合。结构预测结果表明：200 和 300 GPa 下 *C*2/*m* 结构最近邻的 H-H 间距分别为 1.183 和 1.147 Å，200 GPa 下 *Cmmm* 结构中最近邻的 H-H 间距为 1.173 Å，均大于分子氢中的最短 H-H 间距 0.740 Å，因此，结构中不具有 H_2、H_3 分子单元。高压下 $LuThH_{10}$ 的 *C*2/*m* 相和 *Cmmm* 相的 H-H 间距接近超导氢笼化合物中的 H—H 键长，因此，两者均可能具有较高的超导转变温度 T_c。



(a) *C*2/*m*　　(b) *Cmmm*

图 1　$LuThH_{10}$ 体系中的稳定晶体结构

Fig. 1　Stable crystal structure of the $LuThH_{10}$ system

2.2　电子性质

为研究 $LuThH_{10}$ 体系的电子性质，计算了 200 和 300 GPa 下 *C*2/*m* 相和 *Cmmm* 相的电子能带结构和态密度（density of states, DOS），结果如图 2 所示，其中，TDOS（total density of states）代表总态密度。

在富氢体系中，H—H 键长的增加有助于破坏氢分子的共价结构，促进金属化的形成和超导性的出现。图 2 中的电子能带结构显示，200 和 300 GPa 下的 *C*2/*m* 相、200 GPa 下的 *Cmmm* 相均有多条能带穿过费米能级，表明它们在对应的压强下具有金属性，同时，在 Γ 点附近有导带穿过费米能级，形成电子口袋。图 2 中的电子态密度给出了金属 Lu 原子、金属 Th 原子和 H 原子对总电子态密度的贡献，可以看出，在费米面处 H 原子有较高的电子态密度，可能暗示该结构具有良好的超导电性。

2.3　超导性质

McMillan 公式可以用于计算大部分物质的超导性质，但不适用于电声耦合较强（电声耦合常数 λ>1）的体系。1957 年，Allen 等[43] 对 McMillan 方程进行了修正，得到

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

式中：μ^* 为库伦作用势，$\omega_{\log}$ 为声子频率的对数平均值。

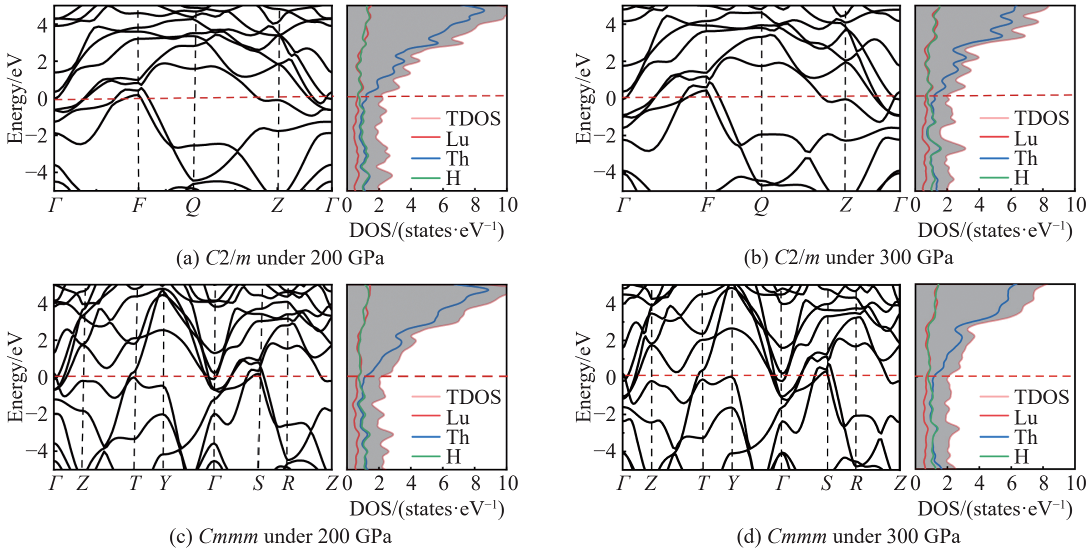


图 2　$LuThH_{10}$ 的 *C*2/*m* 相和 *Cmmm* 相的能带结构和态密度

Fig. 2　Energy band and DOS for *C*2/*m* and *Cmmm* phases of $LuThH_{10}$

对于$\lambda > 1.5$的体系，Allen 等[43] 加入了 2 个修正因子进行进一步修正

$$T_c = \frac{f_1 f_2 \omega_{\log}}{1.2} \exp\left[-\frac{1.04(1+\lambda)}{\lambda-\mu^*(1+0.62\lambda)}\right] \tag{2}$$

其中

$$f_1 = \sqrt[3]{1+\left[\frac{\lambda}{2.46(1+3.8\mu^*)}\right]^{\frac{3}{2}}} \tag{3}$$

$$f_2 = 1+\frac{\left(\frac{\overline{\omega}_2}{\omega_{\log}}-1\right)\lambda^2}{\lambda^2+\left[1.82(1+6.3\mu^*)\frac{\overline{\omega}_2}{\omega_{\log}}\right]^2} \tag{4}$$

$$\overline{\omega}_2 = \sqrt{\frac{2}{\lambda}\int \alpha^2 F(\omega)\,\omega\,\mathrm{d}\omega} \tag{5}$$

$$\omega_{\log} = \exp\left(\frac{2}{\lambda}\int_0^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{\omega}\alpha^2F(\omega)\ln\omega\right) \tag{6}$$

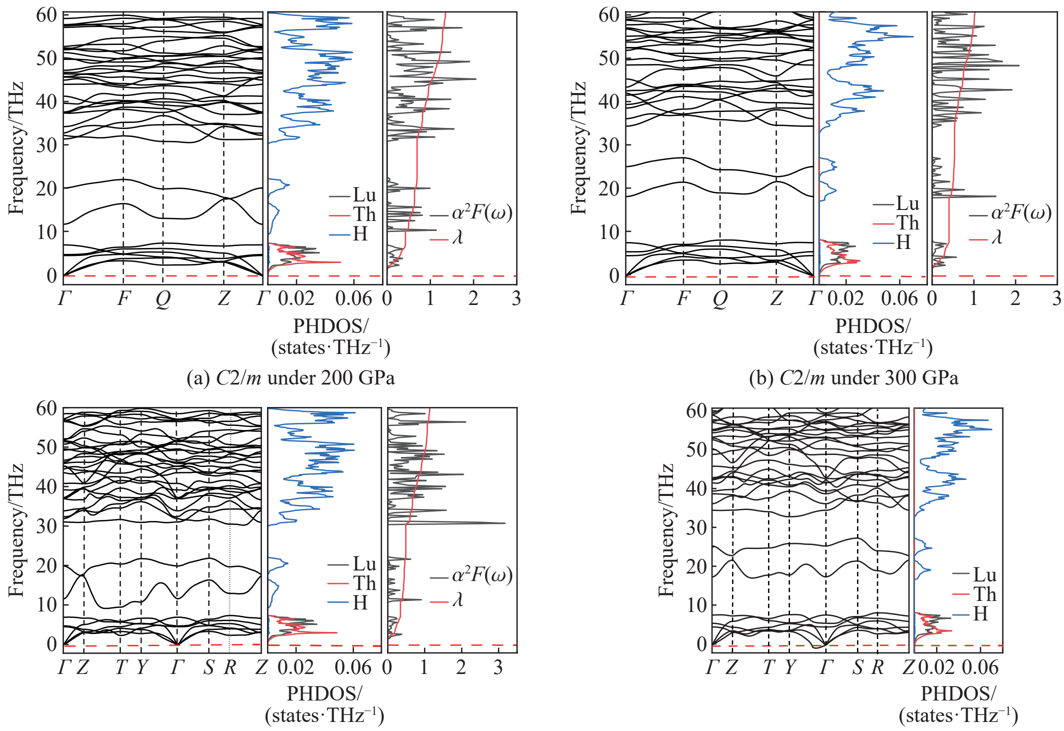
$$\lambda = 2\int_0^{\infty}\frac{\alpha^2F(\omega)}{\omega}\mathrm{d}\omega \tag{7}$$

式中：$F(\omega)$ 为声子的态密度函数，$\alpha^2F(\omega)$ 表示声子与电子相互作用的强度，即谱函数；$\overline{\omega}_2$为声子频率平方的平均值。

针对 $LuThH_{10}$ 的 *C*2/*m* 相和 *Cmmm* 相，计算其声子谱、声子态密度、谱函数和电声耦合常数λ（如存在），结果如图 3 所示，其中，PHDOS（phonon density of states）表示声子态密度。对于富氢化合物，μ^*通常在 0.10～0.13 区间，本研究取μ^*=0.13，计算得到的 T_c 见表 1。

由表 1 可知：在 200 GPa 下，*Cmmm* 相和 *C*2/*m* 相均具有较高的 T_c；在 300 GPa 下 *C*2/*m* 相也具有较高的 T_c。由于结构中不存在 H_2 分子单元，H—H 键长的变化对声子的振动特性和电子-声子耦合强度有直接影响，从而影响材料的超导性质，这可能是产生较高 T_c 的原因。为进一步揭示 $LuThH_{10}$ 的超导机制，结合图 3 的声子谱、谱函数和电声耦合常数进行深入分析。200 GPa 下，*C*2/*m* 相和 *Cmmm* 相的声子谱显示，整个布里渊区都没有虚频模式，满足动力学稳定条件；在 300 GPa 下，*C*2/*m* 相满足动力学稳

定条件，而 *Cmmm* 相的声子谱中出现了负值，不满足动力学稳定条件。$LuThH_{10}$ 的 *C*2/*m* 相和 *Cmmm* 相中质量较重的 Lu、Th 原子占据振动的低频区间，而质量较轻的 H 原子主要占据振动的中频和高频区间。在 0～30 THz 的低频区，H 原子的振动模式较少，Lu 原子和 Th 原子的振动模式较多。在高频区，仅有 H 原子的振动模式，且随着 H 原子振动频率的增大，λ 也随之增大。因此，电声耦合强度主要由 H 原子贡献，表明高频 H 原子对 $LuThH_{10}$ 的超导临界温度 T_c 的提高起着决定性作用。此外，λ 的计算结果表明，*C*2/*m* 相在 300 GPa 下的 λ 小于其在 200 GPa 下的 λ，主要是因为 300 GPa 下的声子态密度比 200 GPa 下的声子态密度小，进而 λ 的数值减小。随着压强升高，H-H 最近邻间距从 1.183 Å减小到 1.147 Å，H—H 键的伸缩振动频率增加，键强增强，抑制电子-声子耦合强度，导致临界温度 T_c减小。



(a) *C*2/*m* under 200 GPa　　(b) *C*2/*m* under 300 GPa

(c) *Cmmm* under 200 GPa　　(d) *Cmmm* under 300 GPa

图 3　高压下 $LuThH_{10}$ 的 *C*2/*m* 相和 *Cmmm* 相的声子谱、声子态密度、谱函数和电声耦合常数

Fig. 3　Phonon spectra, PHDOS, spectral functions and electroacoustic coupling constants for *C*2/*m* and *Cmmm* phases of $LuThH_{10}$ under high pressures

表 1　$LuThH_{10}$ 的 *C*2/*m* 相和 *Cmmm* 相在高压下的超导转变温度、声子频率的对数平均值和电声耦合常数

Table 1　Superconducting transition temperature, logarithmic average of phonon frequency, electroacoustic coupling constant for *C*2/*m* and *Cmmm* phases of $LuThH_{10}$ at high pressures

Phase	Pressure/GPa	T_c/K	ω_{log}/K	λ
*C*2/*m*	200	65.8	778.752	1.248
Cmmm	200	70.7	837.101	1.256
*C*2/*m*	300	60.0	763.235	1.191

3　结　论

采用基于密度泛函理论的第一性原理计算方法，在 300 GPa 下对 Lu-Th-H 体系按照 1∶1∶10 的化学配比进行结构搜索，获得了焓值低且满足动力学稳定条件的 *C*2/*m* 相和 *Cmmm* 相。电声耦合计算结果表明，$LuThH_{10}$ 的 *C*2/*m* 相和 *Cmmm* 相在 200 GPa 压力下分别具有 65.8 和 70.7 K 的超导转变温度，

*C*2/*m* 相在 300 GPa 压力下具有 60.0 K 的超导转变温度。深入分析发现，$LuThH_{10}$ 的 *Cmmm* 相和 *C*2/*m* 相中 H 原子影响超导电性，其中，H 原子的高频振动模式对电声耦合参数有重要贡献，有助于提高 $LuThH_{10}$ 的超导转变温度。

参考文献：

[1] 罗会仟. 超导与诺贝尔奖 [J]. 自然杂志, 2017, 39(6): 427–436.
LUO H Q. Nobel Prize in superconductivity research [J]. Chinese Journal of Nature, 2017, 39(6): 427–436.

[2] COOPER L N. Microscopic quantum interference in the theory of superconductivity [J]. Science, 1973, 181(4103): 908–916.

[3] WIGNER E, HUNTINGTON H B. On the possibility of a metallic modification of hydrogen [J]. The Journal of Chemical Physics, 1935, 3(12): 764–770.

[4] MCMAHON J M, CEPERLEY D M. High-temperature superconductivity in atomic metallic hydrogen [J]. Physical Review B, 2011, 84(14): 144515.

[5] CUDAZZO P, PROFETA G, SANNA A, et al. *Ab initio* description of high-temperature superconductivity in dense molecular hydrogen [J]. Physical Review Letters, 2008, 100(25): 257001.

[6] DIAS R P, SILVERA I F. Observation of the Wigner-Huntington transition to metallic hydrogen [J]. Science, 2017, 355(6326): 715–718.

[7] ASHCROFT N W. Hydrogen dominant metallic alloys: high temperature superconductors? [J]. Physical Review Letters, 2004, 92(18): 187002.

[8] 段德芳, 马艳斌, 邵子霁, 等. 高压下富氢化合物的结构与奇异超导电性 [J]. 物理学报, 2017, 66(3): 036102.
DUAN D F, MA Y B, SHAO Z J, et al. Structures and novel superconductivity of hydrogen-rich compounds under high pressures [J]. Acta Physica Sinica, 2017, 66(3): 036102.

[9] WANG H, TSE J S, TANAKA K, et al. Superconductive sodalite-like clathrate calcium hydride at high pressures [J]. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 2012, 109(17): 6463–6466.

[10] MA L, WANG K, XIE Y, et al. High-temperature superconducting phase in clathrate calcium hydride CaH_6 up to 215 K at a pressure of 172 GPa [J]. Physical Review Letters, 2022, 128(16): 167001.

[11] DUAN D F, LIU Y X, TIAN F B, et al. Pressure-induced metallization of dense $(H_2S)_2H_2$ with high-T_c superconductivity [J]. Scientific Reports, 2014, 4: 6968.

[12] DROZDOV A P, EREMETS M I, TROYAN I A, et al. Conventional superconductivity at 203 kelvin at high pressures in the sulfur hydride system [J]. Nature, 2015, 525(7567): 73–76.

[13] PENG F, SUN Y, PICKARD C J, et al. Hydrogen clathrate structures in rare earth hydrides at high pressures: possible route to room-temperature superconductivity [J]. Physical Review Letters, 2017, 119(10): 107001.

[14] LIU H Y, NAUMOV I I, HOFFMANN R, et al. Potential high-T_c superconducting lanthanum and yttrium hydrides at high pressure [J]. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 2017, 114(27): 6990–6995.

[15] DROZDOV A P, KONG P P, MINKOV V S, et al. Superconductivity at 250 K in lanthanum hydride under high pressures [J]. Nature, 2019, 569(7757): 528–531.

[16] KONG P P, MINKOV V S, KUZOVNIKOV M A, et al. Superconductivity up to 243 K in the yttrium-hydrogen system under high pressure [J]. Nature Communications, 2021, 12(1): 5075.

[17] 孙莹, 刘寒雨, 马琰铭. 高压下富氢高温超导体的研究进展 [J]. 物理学报, 2021, 70(1): 017407.
SUN Y, LIU H Y, MA Y M. Progress on hydrogen-rich superconductors under high pressure [J]. Acta Physica Sinica, 2021, 70(1): 017407.

[18] SUN Y, LV J, XIE Y, et al. Route to a superconducting phase above room temperature in electron-doped hydride compounds under high pressure [J]. Physical Review Letters, 2019, 123(9): 097001.

[19] ZHANG Z H, CUI T, HUTCHEON M J, et al. Design principles for high-temperature superconductors with a hydrogen-based alloy backbone at moderate pressure [J]. Physical Review Letters, 2022, 128(4): 047001.

[20] HUO Z H, DUAN D F, JIANG Q W, et al. Cubic H_3S stabilized by halogens: high-temperature superconductors at mild

pressure [J]. Science China Physics, Mechanics & Astronomy, 2023, 66(11): 118211.

[21] CHEN W X, MA T C, HUO Z H, et al. High-temperature superconductivity in clathrate thorium-doped hexahydrides $A_{1-x}Th_xH_6$ (A = La, Ac, and Y) at moderate pressure [J]. Physical Review B, 2024, 109(22): 224505.

[22] LIANG X W, BERGARA A, WEI X D, et al. Prediction of high-T_c superconductivity in ternary lanthanum borohydrides [J]. Physical Review B, 2021, 104(13): 134501.

[23] DI CATALDO S, HEIL C, VON DER LINDEN W, et al. $LaBH_8$: towards high-T_c low-pressure superconductivity in ternary superhydrides [J]. Physical Review B, 2021, 104(2): L020511.

[24] SONG Y G, BI J K, NAKAMOTO Y, et al. Stoichiometric ternary superhydride $LaBeH_8$ as a new template for high-temperature superconductivity at 110 K under 80 GPa [J]. Physical Review Letters, 2023, 130(26): 266001.

[25] SONG X X, HAO X K, WEI X D, et al. Superconductivity above 105 K in nonclathrate ternary lanthanum borohydride below megabar pressure [J]. Journal of the American Chemical Society, 2024, 146(20): 13797–13804.

[26] GAO M, YAN X W, LU Z Y, et al. Phonon-mediated high-temperature superconductivity in the ternary borohydride KB_2H_8 under pressure near 12 GPa [J]. Physical Review B, 2021, 104(10): L100504.

[27] DU M Y, SONG H, ZHANG Z H, et al. Room-temperature superconductivity in Yb/Lu substituted clathrate hexahydrides under moderate pressure [J]. Research, 2022: 9784309.

[28] LIU P Y, ZHAO W D, LIU Z, et al. High-temperature superconductivities and crucial factors influencing the stability of $LaThH_{12}$ under moderate pressures [J]. Physical Chemistry Chemical Physics, 2024, 26(10): 8237–8246.

[29] SONG P, DURAJSKI A P, HOU Z F, et al. $(La, Th)H_{10}$: potential high-T_c (242 K) superconductors stabilized thermodynamically below 200 GPa [J]. The Journal of Physical Chemistry C, 2024, 128(6): 2656–2665.

[30] SEMENOK D V, KVASHNIN A G, IVANOVA A G, et al. Superconductivity at 161 K in thorium hydride ThH_{10}: synthesis and properties [J]. Materials Today, 2020, 33: 36–44.

[31] YAO S C, WANG C Z, LIU S Y, et al. Formation mechanism of chemically precompressed hydrogen clathrates in metal superhydrides [J]. Inorganic Chemistry, 2021, 60(17): 12934–12940.

[32] WANG Y C, LV J, ZHU L, et al. Crystal structure prediction via particle-swarm optimization [J]. Physical Review B, 2010, 82(9): 094116.

[33] WANG Y C, LV J, ZHU L, et al. CALYPSO: a method for crystal structure prediction [J]. Computer Physics Communications, 2012, 183(10): 2063–2070.

[34] GAO B, GAO P Y, LU S H, et al. Interface structure prediction via CALYPSO method [J]. Science Bulletin, 2019, 64(5): 301–309.

[35] KRESSE G, FURTHMÜLLER J. Efficient iterative schemes for *ab initio* total-energy calculations using a plane-wave basis set [J]. Physical Review B, 1996, 54(16): 11169–11186.

[36] HOHENBERG P, KOHN W. Inhomogeneous electron gas [J]. Physical Review, 1964, 136(3B): B864–B871.

[37] BLÖCHL P E. Projector augmented-wave method [J]. Physical Review B, 1994, 50(24): 17953–17979.

[38] PERDEW J P, WANG Y. Pair-distribution function and its coupling-constant average for the spin-polarized electron gas [J]. Physical Review B, 1992, 46(20): 12947–12954.

[39] PERDEW J P, BURKE K, ERNZERHOF M. Generalized gradient approximation made simple [J]. Physical Review Letters, 1996, 77(18): 3865–3868.

[40] KRESSE G, HAFNER J. *Ab initio* molecular dynamics for open-shell transition metals [J]. Physical Review B, 1993, 48(17): 13115–13118.

[41] GIANNOZZI P, BARONI S, BONINI N, et al. QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials [J]. Journal of Physics: Condensed Matter, 2009, 21(39): 395502.

[42] 郭鉴宁, 王煜龙, 朱程程, 等. 高压下二元富氢超导体的实验研究进展 [J]. 高压物理学报, 2024, 38(2): 020102.
GUO J N, WANG Y L, ZHU C C, et al. Progress of experimental research on binary hydride superconductors under high pressure [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2024, 38(2): 020102.

[43] ALLEN P B, DYNES R C. Transition temperature of strong-coupled superconductors reanalyzed [J]. Physical Review B, 1975, 12(3): 905–922.

Crystal Structure and Superconducting Properties of $LuThH_{10}$ at High Pressure

DENG Yuxin, WANG Zexi, LI Tianyuan, WANG Shida, WANG Jinhua

(*School of Science*, *Tianjin University of Technology and Education*, *Tianjin* 300222, *China*)

Abstract: Using particle swarm optimization and first-principles calculations, the crystal structures, electronic properties, and superconducting behavior of the ternary hydride $LuThH_{10}$ under high pressure are investigated. Our study uncovers two thermodynamically stable phases with space group symmetries of *C*2/*m* and *Cmmm*. Spectral function and electron-phonon coupling calculations show superconducting transition temperatures (T_c) of 65.8 K and 70.7 K under 200 GPa for the *C*2/*m* and *Cmmm* phases of $LuThH_{10}$, respectively. At 300 GPa, the T_c of the *C*2/*m* phase reaches 60.0 K. Further analysis reveals that the H atoms make critical contributions to the superconducting properties of $LuThH_{10}$, by which the high-frequency vibration of the H atoms enhances T_c.

Keywords: hydride; high pressure; first principles; superconductivity