DOI：10.11858/gywlxb.20251257

高压下 H_2 分子型氢化物高温超导体的研究进展*

魏鑫苗[1]，刘召[1*]，崔田[1，2*]

（1. 宁波大学物理科学与技术学院高压物理科学研究院，浙江 宁波 315211；
2. 吉林大学物理学院，吉林 长春 130012）

摘要：室温超导体 $LaSc_2H_{24}$ 的合成标志着人类在高压超导研究领域迈入一个崭新的阶段。未来富氢高温超导体研究的核心挑战之一在于降低稳定其晶体结构所需的压力，从而为实现低压乃至常压室温超导提供坚实的理论基础与可行的技术路径。本文综述了近年来在氢化物超导体预测与实验合成方面的最新进展，重点探讨了一种实现低压高温超导的新策略—H_2 分子型氢化物，并重新审视了由 H_2 分子单元参与超导的起因，为理解声子介导的超导现象提供了新的视角。在 H_2 分子型氢化物中，明显观察到近似自由电子气的行为，这些自由电子气表现出金属键特性，同时分子氢结构未发生分解。这表明，超导转变的关键条件是存在形成库珀对的电子费米海，而非完全解离为原子态氢。H_2 分子型氢化物中自由电子气的形成机制可通过有限深势阱模型得到合理解释。此类材料在高压下的独特电子行为及其强电声耦合作用，为设计低压、高温甚至室温超导材料开辟了全新的范式。

关键词：高压；H_2 分子型氢化物；电声耦合；高温超导
中图分类号：O521.2　　　　**文献标识码：**A

自 1911 年 Kamerlingh Onnes 首次在汞中发现 4.2 K 的超导现象以来，室温超导材料的探索始终是凝聚态物理和材料科学领域的重大科学挑战之一[1]。随后，超导体的两个基本特征——零电阻和完全抗磁性（即迈斯纳效应）——被相继确立。根据超导机理的不同，超导体可分为常规超导体与非常规超导体两类：前者通常遵循声子介导的 Bardeen–Cooper–Schrieffer（BCS）理论框架，而后者的超导机理至今仍未得到统一的理论阐释[2]。目前，在常压条件下，铜氧化物超导体 $HgBa_2Ca_2Cu_3O_{8+\delta}$ 的最高临界转变温度（T_c）可达 133 K[3]，在 23 千兆帕（GPa）外加压力下可进一步提升至 164 K[4]。人们通常将 T_c 超过 40 K 的超导体叫高温超导体，时至今日，高温超导体的候选已经有很多，如何让 T_c 突破室温（298 K），是凝聚态物理领域长期关注的核心科学课题。

2014 年，高温超导研究取得重要突破：H_3S 的理论预测与实验验证表明，其在 155 GPa 下的超导转变温度可达 203 K[5, 6]。这一发现标志着氢化物超导体作为潜在室温超导材料的研究进入新阶段。此后，研究人员在金属超氢化物体系中相继观测到更高的超导转变温度，例如 LaH_{10} 在约 250 GPa 下表现出接近室温的超导行为[7-9]。在此过程中，压力作为一种重要的热力学参数，能够有效缩短原子间距、调控化学键合方式，并诱导新奇化学组分的形成，因而成为探索高温超导新材料的重要途径[10, 11]。图 1 展示了 1911 年至今，人类在超导转变温度上的突破。

*收稿日期：2025-11-11；修回日期：2025-12-08
基金项目：国家重点研发计划（2022YFA1402304，2023YFA1406200）；国家自然科学基金（12304021）
作者简介：魏鑫苗（1996－），女，博士，助理研究员，主要从事高压下物质的相变行为研究.
E-mail：weixinmiao@nbu.edu.cn
通讯作者：刘　召（1991－），男，博士，特聘研究员，主要从事高压下凝聚态物质结构与性质研究.
E-mail：liuzhao@nbu.edu.cn
通讯作者：崔　田（1964－），男，博士，教授，主要从事高压下凝聚态物质结构与性质研究. E-mail：cuitian@nbu.edu.cn

富氢材料主要可分为两类：原子型氢化物和 H_2 分子型氢化物。原子型氢化物包含由氢分子解离后形成的多中心键氢晶格，包括共价型、笼状、蜂窝状、类五角石墨烯型、分子团簇型、链状、管状以及 kagome 型等氢晶格[12]；而 H_2 分子型氢化物则主要由未完全解离的 H_2 单元，或混合 H_2 分子与原子氢的混合体系。研究表明，原子型氢化物，尤其是具有笼状结构氢化物，通常展现出更高的超导转变温度[13]。近期，马琰铭院士团队通过实验成功合成了室温超导体 $LaSc_2H_{24}$，该材料利用激光加热技术，在 250-260GPa 的压力下，通过金刚石对顶砧（DAC）对镧钪合金和硼氨烷混合物进行压缩制备而成[14]。同步辐射 X 射线衍射数据明确证实，其晶体结构与先前理论预测的 $LaSc_2H_{24}$ 笼型氢结构高度一致[15]。这一发现标志着人类在历经百余年探索后终于实现了室温超导的突破。然而，此类笼型氢化物需依赖极高压力以实现氢分子的完全解离，从而释放参与超导的自由电子（如图 2 所示），这严重制约了其在较低压力条件下的实际应用。因此，如何在更温和的压力环境下实现高温乃至室温超导，仍是当前凝聚态物理领域亟待解决的关键科学问题。

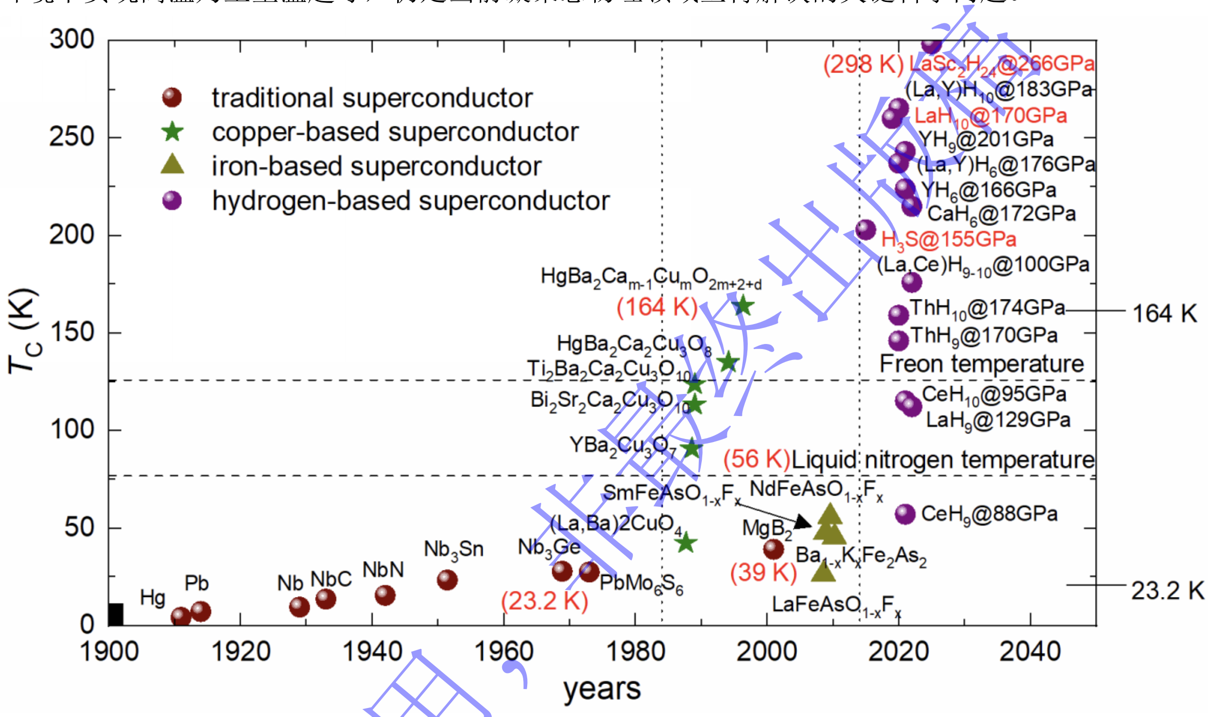

图 1 超导材料的临界温度随时间的演化。

Fig.1 The evolution of critical temperature of superconducting materials over time.

分子氢体系能够表现出与分子内强共价键相关的显著电声相互作用。已有研究表明 H_2 分子型氢化物可能具备高 T_c 超导性，例如理论预测 NaH_{10} 在高压下可实现约 270 K 的近室温超导[16]；$KNaH_{12}$ 预测出其在 60 GPa 下具有 245 K 的 T_c[17]；PbH_{12} 在 180 GPa 高压下预测出的 T_c 为 191 K[18]；CaH_{14} 展现出高达 204 K 的高 T_c[19]；以及先前提出的在 450 GPa 压强下 *Cmca* 相分子氢具有 242 K 的超导转变温度潜力[20]。最近的实验在 *C*2/*c*-BiH_4 中进一步观察到，在 170 GPa 压强下其 T_c 达到 91 K[21]，且其氢晶格被证实完全由 H_2 分子组成[21]。这些研究成果不仅深化了对以 H_2 分子单元为主导的超导机制的理解，也为揭示声子介导超导的微观机理提供了重要线索，同时为实现 H_2 分子型氢基材料中的室温超导开辟了广阔前景。

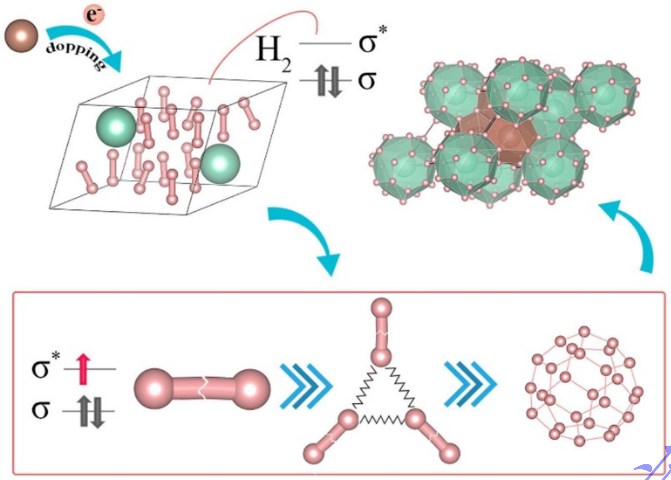

图 2 掺杂正电元素的多羟基化合物进行金属化并形成笼状氢结构的机制[12]。

Fig.2The mechanisms through which electropositive element-doped polyhydrides can undergo metallization and shape cage-like hydrogen structure.

1 从金属氢到氢化物

氢是宇宙中含量最丰富的元素，大约占宇宙总质量的 75%，在常压条件下，氢以 H_2 分子形式存在，表现为分子绝缘体。1935 年，Wigner 与 Huntington 受到 Bernal 提出的“所有物质在足够高的压力下均可发生金属化”这一假设的启发，首次从理论上预测氢在极高压力下将转变为金属态固体[22]。根据 BCS 理论，德拜温度Θ_D是决定金属材料超导转变温度 T_c 的关键参数之一：

$$T_c = 1.14\Theta_D \exp\left(-\frac{1}{N(0)V}\right) \tag{1}$$

其中，$N(0)$代表费米能级处电子态密度（DOS），V代表电声相互作用势（有效耦合常数）。对于德拜温度Θ_D，有：

$$\Theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B} \tag{2}$$

玻耳兹曼常数k_B，普朗克常数$\hbar$均为常数。因此，德拜温度Θ_D由德拜频率ω_D，即晶体中最高振动频率决定。德拜频率ω_D与原子质量 M 又有如下关系：

$$\omega_D = (6\pi^2 n)^{1/3}\sqrt{\frac{C}{nM}} \tag{3}$$

在大多数情况下，同一类晶体结构中不同原子的原子密度 n 与弹性常数 C 随原子质量 M 变化较小，因此原子的德拜频率ω_D近似与原子质量 M 的负二分之一次方成反比，即越轻的元素具有更高的最大振动频率，更有可能表现出较高的超导转变温度 T_c。氢作为最轻的元素，长期以来被视为实现室温超导最有潜力的候选元素。理论研究表明，纯金属氢在超高压下的 T_c 可达 356–760 K[23]。随着 DAC 实验技术的发展，研究人员已经逐步逼近实现金属氢所需的压力条件：在约 425 GPa 下观测到氢的带隙出现不连续减小[24]。然而，金属氢是否在 DAC 中实现仍存在争议。2001 年 MgB_2（T_c = 39 K）的发现重新激发了人们对传统超导体的兴趣[25]。在此基础上，Ashcroft 于 2004 年提出，可通过与其他元素形成以氢为主的化合物，利用“化学预压缩”策略降低氢金属化所需的压力（如图 3 所示），从而在较低压力下实现高温超导[26]。类似思想最早可以追溯到 1971 年，Gilman 在假想化合物 LiH_2F 中即提出了通过化学手段稳定高压氢态的构想[27]。早在 1970 年，Th_4H_{15} 在常压下表现出 8 K 的超导转变温度，成为首个被实验报道的超导氢化物[28]。这些进展表明，理论预测、计算模拟与实验验证的紧密结合显著推动了氢基超导体的发展进程。

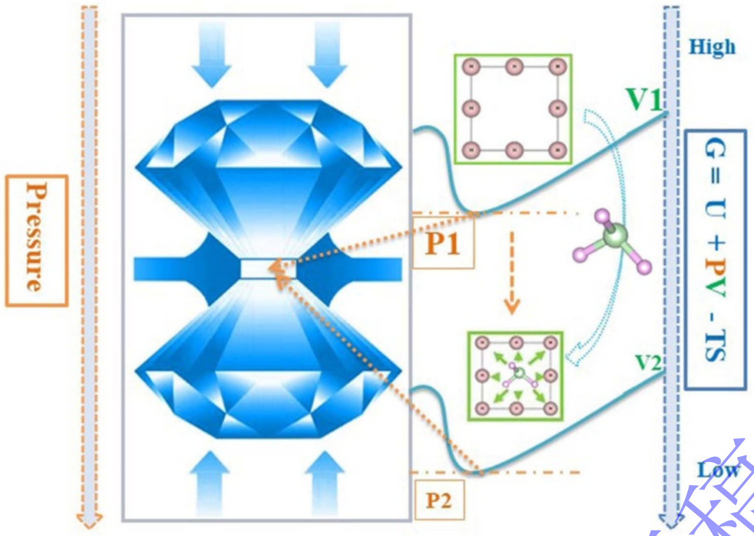

图 3 化学预压缩机制[12]。

Fig.3The mechanisms of chemicalpre-compression.

早期系统研究的氢化物主要集中于ⅣA 族元素体系，包括 SiH_4[29]、GeH_4[30-32]、SnH_4[33, 34]和 PbH_4[35]。随后，鉴于高氢含量在促进超导性方面的关键作用，富氢化物已成为当前最具潜力的高温超导材料体系之一。根据非氢元素在元素周期表中的位置，可将二元原子型富氢化合物超导体大致分为两个类别：第一类是 p 区元素与氢形成的共价键化合物，其化学计量比较为固定，其中最具代表性的体系为 H_3S——首个在实验上实现 T_c 突破 200K 的超导体[5, 6]。第二类主要包括电正性金属，其价电子可以转移至氢子晶格，形成三维笼状氢框架结构。典型例子包括 LaH_{10}[7-9]、YH_9[36, 37]及 CaH_6[38, 39]。这些几乎由类原子氢组成的笼状氢结构被认为是实现极高超导性的关键特征。然而，由于早期研究始终未能在包含 H_2 分子单元的化合物中发现或从理论揭示出类似原子氢的高温超导性，H_2 分子型氢化物的超导潜力长期悬而未知。

借鉴二元氢化物体系的成功经验，压力诱导的三元氢化物超导体研究迅速发展并取得了显著进展。例如，理论预测 Li_2MgH_{16} 在 250 GPa 下具有高达 473 K 的 T_c[40]；掺杂 P、C 或 Si 的 H_3S 体系计算显示 T_c 可超过 280 K[41, 42]。近期研究表明，具有萤石型 H–Be 骨架与笼状氢结构的 $LaBeH_8$，在约 80 GPa 压力下，其 T_c 具有 110 K[43, 44]。此外，在低于 130 GPa 的压力条件下，La-Ce-H 体系被成功合成出六方密堆结构的(La, Ce)$H_{9\text{-}10}$ 相，并在约 100 GPa 时表现出 176 K 的 T_c[45]。进一步研究发现，该体系在 164 GPa 下 T_c 提升至 223 K，其稳定相被确定为具有 $P6_3/mmc$ 空间群的六方结构[46]。

近期，马琰铭院士团队在高压条件下成功合成了具有室温超导特性的 La-Sc 合金氢化物。通过观测到的零电阻现象以及外加磁场对超导转变温度的抑制效应，确证了其最高 T_c 可达 298 K 的室温超导性[14]。X 射线衍射（XRD）分析结果表明，该合金氢化物与化学计量比为 $LaSc_2H_{24}$ 的结构一致，并能在约 194 GPa 以上的压力及室温条件下维持亚稳态。此项研究在凝聚态物理领域取得重要突破，不仅实现了具备明确晶体结构和可识别超导机制的室温超导体，而且进一步揭示了多元富氢化合物在实现高温超导方面的巨大潜力。

2 H_2 分子型氢化物中发现高温超导

理论预测表明，分子氢的 H-III相（*Cmca*-12）在 450 GPa 下的 T_c 约为 242 K[20]。然而，迄今为止，在 H_2 分子型氢化物中尚未实现近室温超导。实验合成的 BaH_{12} 只有 20 K 的临界温度[47]，SrH_{22} 更是表现出半导体特性[48]。因此，有观点认为，在含有 H_2 分子单元的结构中，大量的电子局域在了 H_2 单元中的 σ 键中，使得这些电子不再具有自由电子的特征，导致含有 H_2 分子单元的结构

不利于高温超导。但是，含有 H_2 单元的 *Ama*2-GeH_4 和 *P*6$_3$/*mmc*-SnH_4 相的 T_c 分别被预测为 57 K 和 62 K，H_2 单元被认为在增强电声耦合（EPC）方面起主要作用[32, 34]。此外，含有更多 H_2 分子的 $SiH_4(H_2)_2$ 和 $GeH_4(H_2)_2$ 已被合成，其理论预测的 T_c 分别为 107 K 和 90 K[49, 50]。能否在由 H_2 分子结构构成的氢化物中诱导出强电声耦合并实现室温超导仍是一个极具挑战性的难题。

传统观点认为含有 H_2 单元相的金属化过程可通过压缩碱金属多氢化物的研究来理解。在这些体系中，来自电正性金属的价电子转移至 H_2-σ^*轨道，从而部分填充 H_2-σ^*能带导致 *R*-3*m*-LiH_6 相在费米能级(E_F)处产生较高的态密度[51]。在 *Pm*-NaH_9 相中，H^-与 H_2-σ^*能带在压力诱导下展宽增大并重叠，从而实现金属化[52]。在 H_3^-阴离子与 H_2 分子共存的 KH_5 与 RbH_5 体系中，则通过压力诱导填充 H_3^-非键能带伸展并最终与金属 *d* 带重叠而实现金属化[53-55]。尽管声子介导的 H_2 分子型氢化物的潜在超导临界温度与费米能级处的态密度密切相关，但在由 H_2 单元构成的 SbH_4 电子结构中，总态密度与不同元素的分立态密度加和之间存在明显的不一致性[56]，这种差异引起新型“背景电荷”（background charge，电子在非轨道投影的分量）的发现[33]。研究背景电荷现象的出现是否能可作为自由电子参与电声耦合并诱导高温超导性的标志，对揭示 H_2 分子型氢化物中声子介导的超导机制具有重要意义。

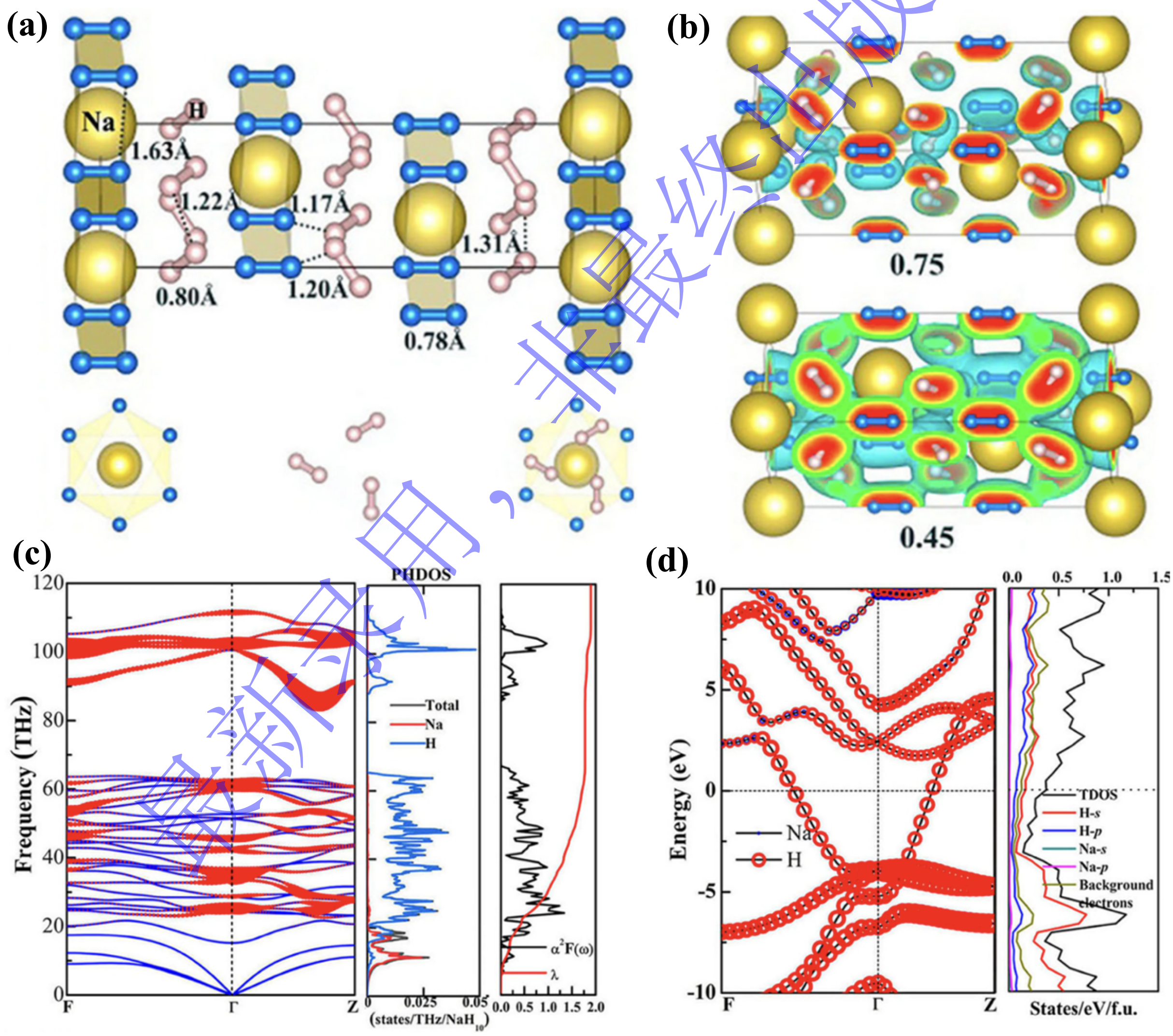

图 4 H_2 分子型氢化物 NaH_{10} 的(a)结构，(b)电子局域化函数（ELF）的三维等值面，(c)声子谱声子色散曲线、声子态密度（PHDOS）和 Eliashberg 谱函数 $\alpha^2F(\omega)$以及电声耦合常数的积分 $\lambda(\omega)$，(d)电子能带结构和投影态密度（PDOS）[16]。

Fig.4(a) Structure, (b) three-dimensional isosurface of the electron localization function (ELF), (c) phonon dispersion curves, phonon density of states (DOS), and Eliashberg spectral function $\alpha^2F(\omega)$ together with the integral $\lambda(\omega)$, (d)Electronic band structure and projected DOSof H_2-molecular-type hydridesNaH_{10}.

在此基础上，我们提出了一种基于识别费米能级附近是否存在背景电荷的简单高通量结构搜索方法，用于筛选 H_2 分子型氢化物，以快速锁定潜在的高 T_c 超导材料[16]。利用该方法，发现 NaH_{10}、TeH_4 和 SnH_{14} 等 H_2 分子型氢化物在费米能级附近均存在显著的背景电荷分布，进而成功确认了一种压力诱导形成的 H_2 分子型超导体——NaH_{10}，其在 400 GPa 下表现出高达 270 K 的近室温超导性。第一性原理计算表明，该体系中强大的电声耦合主要源于多种中频原子振动模式，并受到费米面嵌套（Fermi surface nesting）所引起的高频氢原子声子软化的协同增强作用，从而有效促使自由电子形成库珀对（Cooper pairs）。值得注意的是，体系中的传导电子主要表现为离域的背景电荷从而直接参与电声相互作用过程（见图 4）。为进一步验证 H_2 单元在超导性中的作用，我们通过在高压相 H-III中掺杂钠元素开展计算模拟，成功获得一种动力学稳定的 *R*-3*m*-NaH_{12} 结构，该结构在 150 GPa 下表现出 T_c = 154 K 的超导性。在该结构中，传导电子主要占据具有显著离域特征的 *sp* 杂化轨道。综合结果表明，H_2 分子型氢化物体系具备实现近室温超导的潜力。该发现突破了传统认为 H_2 单元不利于超导行为的认知局限，为理解分子氢基超导体中声子介导的超导机制提供了新的理论框架与研究路径。

3 低压高温超导的新途径

通常认为，原子型氢化物中出现高 T_c 超导性的原因在于：费米能级（E_F）处具有高的氢衍生电子态密度、较大的声子能量尺度以及由此增强的电声耦合强度[22]。因此，当前在不含分子氢（H_2）的原子型超氢化物中探索高 T_c 超导体已成为研究的主要指导原则。原因在于，分子氢中的电子主要占据能量较低的 σ 成键轨道[57]，这些轨道远离费米能级，难以有效参与导电和超导配对，因而被认为不利于实现高 T_c 超导[36]。传统观点下对该体系电子结构特征的认识深刻影响了对 H_2 分子型氢化物超导行为的认识。尽管在声子介导的 BCS 理论框架下，费米能级处的氢衍生 DOS 对实现高 T_c 至关重要，但仍需更系统的机理研究以构建清晰的物理图像深入揭示 H_2 分子型氢化物中超导性能的起源。目前，已有大量实验和理论研究发现支持分子氢化物中存在高 T_c 超导性，例如：上文提到的在 400 GPa 下，分子氢化物 NaH_{10} 中出现约 270 K 的近室温超导[16]；在 450 GPa 下，*Cmca* 相的分子氢表现出 242 K 的超导转变温度[20]。尤为重要的是，近期实验还在分子氢化物 *C*2/*c*-BiH_4 中观察到在 170 GPa 下 T_c 为 91 K 的超导转变，且结构分析证实其氢晶格完全由 H_2 分子构成[21]。然而，引起高温超导的机制仍不清晰。特别是，H_2 分子型化合物中超导性的微观起源及其自由电子形成机制仍缺乏清晰解释。

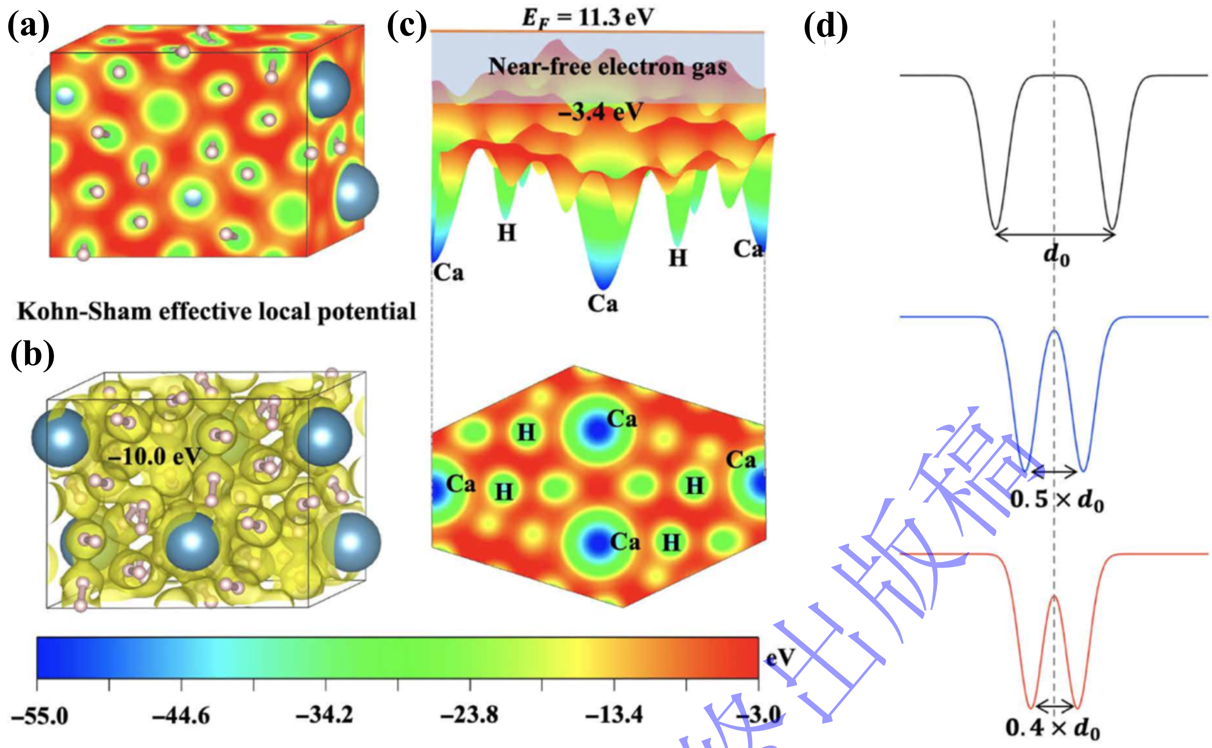

图 5 H_2 分子型氢化物 CaH_{14} 中 (a) Kohn-Sham 有效局域势的分布，以及 (b) -10.0 eV 处的等势面。(c) 选定钙原子的 3*d*（顶部）和 2*d*（底部）势面的截面。(d) 当两个有限势阱接近时，脊处电位降低的示意图，其中 d_0 是两个势阱之间的给定初始距离[19]。

Fig.5 (a) The distribution of Kohn-Sham effective local potential, (b) the equipotential surface at −10.0 eVin H_2-molecular-type hydridesCaH$_{14}$. (c) the section of 3d (top) and 2d (bottom) potential surface for selected Ca atoms. (d) Schematic illustration of potential decrease at the ridge as two finite potential wells approach, where d_0 is a given initial distance between two potential wells.

针对当前 H_2 分子型氢化物中高温超导机制所面临的关键科学挑战，我们预测出高压下 H_2 分子型氢化物 CaH_{14} 并以其为模型破解形成 Cooper pairs 的原因。CaH_{14} 结构具有 *C*2/*c* 空间群，其氢子晶格完全由 H_2 分子构成，并且形成焓计算表明其具备热力学稳定性[19]。基于电声耦合的计算结果表明，该结构在 300 GPa 下具有高达 204.0 K 的超导转变温度，在 200 GPa 下 T_c 为 192.6 K。为解释出现高温超导的原因，我们提出了一种有限深势阱模型，用以揭示近自由电子气的形成机制及其参与电声耦合的过程。如图 5 所示，（i）随着压力的施加，H_2 单元和 Ca 离子形成的有效势阱彼此移动，形成较低的有效势脊连接。（ii）由于强烈的泡利排斥效应，电子占据更高能级，其典型特征是高费米能级的形成。因此，由压力引起的电子动能的增加超过了 Ca 和 H_2 阳离子所形成的有效势阱的束缚，从而使电子从势阱中逸出，形成了类似于凝胶背景电荷上的自由电子气。第一性原理计算结果表明，这些近自由电子气通过与分子氢相关联的多样化振动模式来参与电声耦合，进而诱导出高 T_c。进一步分析显示，电声耦合的声子贡献主要源于中频分子氢振动模式所产生的大电声耦合矩阵元，而该效应又受到由费米面嵌套引起的声子软化的作用，从而更有效地散射近自由电子。此外，结构动力学研究表明，该氢化物能够将所需压力降至大腔体压机可实现的合成范围。并在 50 GPa 下仍可保持 60 K 的高温超导电性，80 GPa 下 T_c 可达 84 K，这一数值显著高于液氮温度（77 K）。该研究阐明了近自由电子气作为形成库珀对费米海的形成机制，揭示了 H_2 分子型氢化物中高温超导性的内在因果关系。研究结果建立了 H_2 分子型氢化物高温超导的研究范式，为在低压条件下进一步开展 H_2 分子型氢化物高温超导体的理论设计和实验制备开辟了新的方向。

4 结　论

原子型氢化物和 H_2 分子型氢基超导体的研究已经取得了显著的进展，并且在理论探索中揭示了氢化学构型与超导性之间的紧密关联，推动了一系列具有优异高压超导性能的氢化物的合成。然而，极高的稳定压力使得氢化物的实验研究只能局限于 DAC 内，样品量、调控方式、表征手段都受到极大限制，如何在大腔体压机的压力范围内实现高温超导是打破氢化物研究瓶颈的关键。高压下 NaH_{10} 和 CaH_{14} 等 H_2 分子型氢化物的发现重新激发了人们对分子氢超导行为的研究兴趣。这类材料中电子在高压下的独特行为，为探索低压室温超导材料提供了全新的研究范式。机器学习方法近年来在各学科领域大放异彩，结合现有实验数据或第一性原理计算数据训练机器学习原子间势，能大幅加快结构预测的速度，同时突破传统方法的瓶颈，处理更大体系。基于近年来的一系列突破性进展，未来对 H_2 分子型氢化物超导机制的理论研究将持续深化，有望通过机器学习算法与晶体结构预测技术相结合，指导实现低压高温超导的新型氢化物材料设计和实验合成。

参考文献

[1] KAMERLINGH ONNES H. The superconductivity of mercury [J]. Communications from the physical laboratory of the University of Leiden, 1911, 122: 122-4.

[2] BARDEEN J, COOPER L N, SCHRIEFFER J R. Microscopic Theory of Superconductivity [J]. Physical Review, 1957, 106(1): 162-4.

[3] SCHILLING A, CANTONI M, GUO J D, et al. Superconductivity above 130 K in the Hg–Ba–Ca–Cu–O system [J]. Nature, 1993, 363(6424): 56-8.

[4] GAO L, XUE Y Y, CHEN F, et al. Superconductivity up to 164 K in $HgBa_2Ca_{m-1}Cu_mO2_{m+2+delta}$ (m=1, 2, and 3) under quasihydrostatic pressures [J]. Physical Review B, 1994, 50(6): 4260-3.

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

[6] 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.

[7] LIU H Y, NAUMOV, Ⅱ, HOFFMANN R, et al. Potential high-Tc 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): 6990-5.

[8] 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.

[9] SOMAYAZULU M, AHART M, MISHRA A K, et al. Evidence for Superconductivity above 260 K in Lanthanum Superhydride at Megabar Pressures [J]. Physical Review Letters, 2019, 122(2): 6.

[10] 杜明阳, 张子涵, 段德芳, et al. 高压下氢基超导体的研究进展 [J]. 物理学进展, 2022, 42(5): 10.

[11] DU M, ZHAO W, CUI T, et al. Compressed superhydrides: the road to room temperature superconductivity [J]. Journal of Physics: Condensed Matter, 2022, 34: 173001.

[12] LIU P, WANG C, ZHANG D, et al. Strategies for improving the superconductivity of hydrides under high pressure [J]. Journal of Physics: Condensed Matter, 2024, 36(35): 353001.

[13] SUN Y, ZHONG X, LIU H, et al. Clathrate metal superhydrides under high-pressure conditions: enroute to room-temperature superconductivity [J]. National Science Review, 2023, 11(7).

[14] SONG Y, MA C, WANG H, et al. Room-Temperature Superconductivity at 298 K in Ternary La-Sc-H System at High-pressure Conditions [J/OL] 2025, arXiv:2510.01273

[15] HE X-L, ZHAO W, XIE Y, et al. Predicted hot superconductivity in $LaSc_2H_{24}$ under pressure [J]. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 2024, 121(26): e2401840121.

[16] LIU Z, LI J, ZUREK E, et al. Emergence of near room-temperature superconductivity in hydrides with H2 molecular units [J]. Physical Review B, 2024, 109(18): 180501.

[17] ZHAO W, ELLIS A, DUAN D, et al. Unlocking the Origin of High-Temperature Superconductivity in Molecular Hydrides at Moderate Pressures [J]. Advanced Functional Materials, 2025, 35(8): 2415910.

[18] YU J, YONG X, LIU H, et al. Prediction of enhanced superconductivity in cyclo-H_{12}Bi/Pb involving a resonant hydrogen structure [J]. Physical Review B, 2024, 110(22): 224507.

[19] LIU P, ZHUANG Q, XU Q, et al. Mechanism of high-temperature superconductivity in compressed H_2-molecular type hydride [J]. Science Advances, 2025, 11(13): eadt9411.

[20] 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.

[21] SHAN P, MA L, YANG X, et al. Molecular Hydride Superconductor BiH_4 with Tc up to 91 K at 170 GPa [J]. Journal of the American Chemical Society, 2025, 147(5): 4375-81.

[22] WIGNER E, HUNTINGTON H B. On the Possibility of a Metallic Modification of Hydrogen [J]. Journal of Chemical Physics, 1935, 3(12): 764-70.

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

[24] LOUBEYRE P, OCCELLI F, DUMAS P. Synchrotron infrared spectroscopic evidence of the probable transition to metal hydrogen [J]. Nature, 2020, 577: 631.

[25] NAGAMATSU J, NAKAGAWA N, MURANAKA T, et al. Superconductivity at 39 K in magnesium diboride [J]. Nature, 2001, 410(6824): 63-4.

[26] ASHCROFT N W. Hydrogen dominant metallic alloys: High temperature superconductors? [J]. Physical Review Letters, 2004, 92(18): 4.

[27] GILMAN J J. Lithium Dihydrogen Fluoride---An Approach to Metallic Hydrogen [J]. Physical Review Letters, 1971, 26(10): 546-8.

[28] SATTERTHWAITE C B, TOEPKE I L. Superconductivity of Hydrides and Deuterides of Thorium [J]. Physical Review Letters, 1970, 25(11): 741-3.

[29] EREMETS M I, TROJAN I A, MEDVEDEV S A, et al. Superconductivity in hydrogen dominant materials: Silane [J]. Science, 2008, 319(5869): 1506-9.

[30] LI Z, YU W, JIN C Q. First-principles calculation on phase stability and metallization in GeH_4 under pressure [J]. Solid State Communications, 2007, 143(6-7): 353-7.

[31] ZHANG H D, JIN X L, LV Y Z, et al. Investigation of stable germane structures under high-pressure [J]. Physical Chemistry Chemical Physics, 2015, 17(41): 27630-5.

[32] GAO G Y, OGANOV A R, BERGARA A, et al. Superconducting high pressure phase of germane [J]. Physical Review Letters, 2008, 101(10): 4.

[33] TSE J S, YAO Y, TANAKA K. Novel superconductivity in metallic SnH4 under high pressure [J]. Physical Review Letters, 2007, 98(11): 4.

[34] GAO G Y, OGANOV A R, LI P F, et al. High-pressure crystal structures and superconductivity of Stannane (SnH_4) [J]. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 2010, 107(4): 1317-20.

[35] ZELESKI-EJGIERD P, HOFFMANN R, ASHCROFT N W. High Pressure Stabilization and Emergent Forms of PbH4 [J]. Physical Review Letters, 2011, 107(3): 4.

[36] 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): 6.

[37] KONG 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.

[38] 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.

[39] 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.

[40] SUN Y, LV J, XE 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): 5.

[41] GE Y, ZHANG F, DIAS R P, et al. Hole-doped room-temperature superconductivity in $H_3S_{1-x}Z_x$ (Z=C, Si) [J]. Materials Today Physics, 2020, 15: 100330.

[42] GE Y, ZHANG F, YAO Y. First-principles demonstration of superconductivity at 280 K in hydrogen sulfide with low phosphorus substitution [J]. Physical Review B, 2016, 93: 224513.

[43] ZHANG Z, 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.

[44] SONG Y, BI J, NAKAMOTO Y, et al. Stoichiometric Ternary Superhydride LaBeH8 as a New Template for High-Temperature Superconductivity at 110 K under 80 GPa [J]. Physical Review Letters, 2023, 130(26): 266001.

[45] CHEN W, HUANG X, SEMENOK D V, et al. Enhancement of superconducting properties in the La–Ce–H system at moderate pressures [J]. Nature Communications, 2023, 14(1): 2660.

[46] CHEN S, QIAN Y, HUANG X, et al. High-temperature superconductivity up to 223 K in the Al stabilized metastable hexagonal lanthanum superhydride [J]. National Science Review, 2023, 11(1): nwad107.

[47] CHEN W, SEMENOK D V, KVASHNIN A G, et al. Synthesis of molecular metallic barium superhydride: pseudocubic BaH_{12} [J]. Nature Communications, 2021, 12(1): 273.

[48] SEMENOK D V, CHEN W, HUANG X, et al. Sr-Doped Superionic Hydrogen Glass: Synthesis and Properties of SrH_{22} [J]. Advanced Materials, 2022, 34(27): 2200924.

[49] STROBEL T A, SOMAYAZULU M, HEMLEY R J. Novel Pressure-Induced Interactions in Silane-Hydrogen [J]. Physical Review Letters, 2009, 103(6): 065701.

[50] STROBEL T A, CHEN X-J, SOMAYAZULU M, et al. Vibrational dynamics, intermolecular interactions, and compound formation in GeH_4-H_2 under pressure [J]. Journal of Chemical Physics, 2010, 133: 164512.

[51] SHAMP A, ZUREK E. Superconductivity in Hydrides Doped with Main Group Elements Under Pressure [J]. Novel Superconducting Materials, 2017, 3(1): 14-22.

[52] STRUZHKIN V V, KIM D Y, STAVROU E, et al. Synthesis of sodium polyhydrides at high pressures [J]. Nature Communications, 2016, 7: 8.

[53] ZUREK E, BI T G. High-temperature superconductivity in alkaline and rare earth polyhydrides at high pressure: A theoretical perspective [J]. Journal of Chemical Physics, 2019, 150(5): 13.

[54] BAETTIG P, ZUREK E. Pressure-Stabilized Sodium Polyhydrides: NaHn (n > 1) [J]. Physical Review Letters, 2011, 106(23): 4.

[55] HOOPER J, ZUREK E. Rubidium Polyhydrides Under Pressure: Emergence of the Linear H_3^- Species [J]. Chemistry-a European Journal, 2012, 18(16): 5013-21.

[56] FU Y H, DU X P, ZHANG L J, et al. High-Pressure Phase Stability and Superconductivity of Pnictogen Hydrides and Chemical Trends for Compressed Hydrides [J]. Chemistry of Materials, 2016, 28(6):

1746-55.

[57] LONIE D C, HOOPER J, ALTINTAS B, et al. Metallization of magnesium polyhydrides under pressure [J]. Physical Review B, 2013, 87(5): 8.

Research Progress on High-Temperature H_2-Molecular-Type Hydride under High Pressure

WEI Xinmiao[1], LIU Zhao[1*], CUI Tian[1, 2*]

(*1.Institute of High Pressure Physics, School of Physical Science and Technology, Ningbo University, Ningbo 315211, Zhejiang, China;*

2. College of Physics, Jilin University, Changchun 130012, Jilin, China)

Abstract: The synthesis of the room-temperature superconductor $LaSc_2H_{24}$represents a significant milestone in the field of superconductivity research. A central goal of subsequent studies is to lower the stabilization pressure required for hydrogen-rich superconductors, thereby establishing a theoretical foundation and technical pathway toward achieving low-pressure room-temperature superconductivity.This paper reviews recent advances in the prediction and experimental synthesis of hydride materials, with a particular focus on a promising strategy for realizing high-temperature superconductivity at reduced pressures—namely, H_2-molecular-typehydride. The superconducting mechanism dominated by molecular H_2 units is redefined, offering a new perspective for understanding phonon-mediated superconductivity.In H_2-molecular-typehydrides, a nearly free-electron gas behavior has been clearly observed. These delocalized electrons exhibit metallic bonding characteristics while retaining fragments of molecular hydrogen. This finding indicates that the essential condition for superconducting transition is the formation of a Fermi Sea hosting Cooper pairs, rather than complete dissociation into atomic hydrogen.The generation mechanism of the free-electron gas in these materials can be effectively explained using a finite potential well model. The distinctive electronic properties of these compounds under high pressure, combined with enhanced electron-phonon coupling, establish a novel paradigm for designing low-pressure, high-temperature, and potentially room-temperature superconductors.

Keywords: high pressure; hydrogen molecular hydrides; electron-phonon coupling; high-temperature superconductivity