

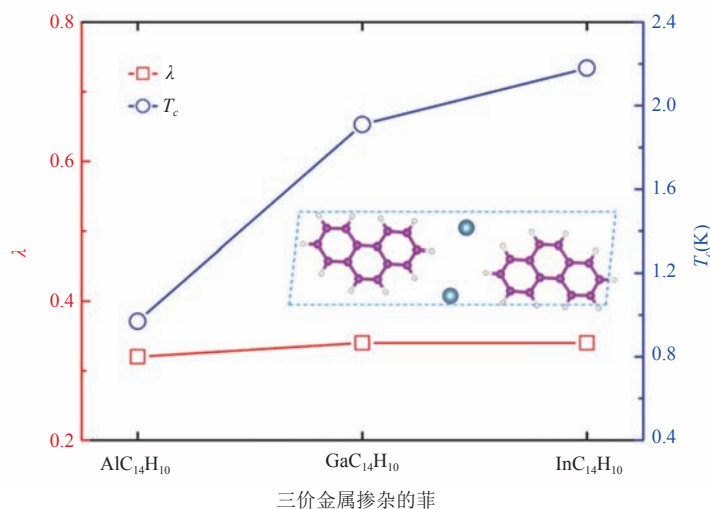
钟国华副研究员团队在金属掺杂芳香有机体系(菲)研究取得进展

中国科学院深圳先进技术研究院光子信息与能源材料中心钟国华副研究员与陈明副研究员团队主导的研究在金属掺杂芳香有机体系(菲)取得进展。相关成果为“Lv HY, Zhong GH, Chen M, et al. Structure, charge transfer, and superconductivity of M-doped phenanthrene (M=Al, Ga, and In): a comparative study of K-doped cases [J]. Science China Physics, Mechanics & Astronomy, 2019, 62: 957412 (与钾掺杂体系的比较研究: 金属(铝、镓、铟)掺杂菲后的结构、电荷转移和超导性)”。

在钾掺杂的芳香有机体系(如菲)中, 观察到了超导性, 其中钾的浓度为 3, 即每 1 个有机分子对应 3 个钾原子。那么能不能用 1 个三价金属(铝、镓、铟)原子代替 3 个钾原子掺杂到菲中? 同时, 三价金属掺杂菲后, 体系的晶体结

构、电荷转移和超导性是怎么样的? 为此, 该文采用基于粒子群方法的 CALYPSO 软件搜索掺杂后的晶体结构, 采用基于密度泛函理论和微扰密度泛函理论的方法研究了电荷转移特征、能带结构和超导性。

结果显示, 与钾掺杂菲相比, 三价金属掺杂时金属原子易进入有机分子间隙区, 使得电荷很难从三价金属原子向有机分子转移。三价金属掺杂后体系的形成能升高, 表明体系的稳定性比钾掺杂弱。尽管没有电荷转移发生, 但在三价金属掺杂的菲中观察到了带隙态, 因此体系仍然表现出了金属特征。最终发现三价金属掺杂的菲具有超导性, 且该超导性机制不同于钾掺杂的菲。该研究从电荷转移的角度指出了三价金属替代钾掺杂菲的困难性, 且揭示了一种新的有机超导性机制带隙态。



电-声耦合常数(红色)和超导转变温度(蓝色)图(插图为掺杂后的晶体结构)