

一维 M_6Q_6 ($M = \text{Mo}, \text{W}; Q = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$) 纳米线的电声耦合超导机制*

郑晶晶¹⁾ 杨金文¹⁾ 马荣荣²⁾ 袁志红²⁾ 李静玉^{3)†}
刘鹏飞⁴⁾⁵⁾ 马江将^{2)‡}

1) (太原师范学院物理系, 晋中 030619)

2) (山西师范大学物理与电子工程学院, 太原 030031)

3) (东莞理工学院, 中子散射与先进光源中心, 东莞 523000)

4) (中国科学院高能物理研究所, 北京 100049)

5) (散裂中子源科学中心, 东莞 523803)

(2025年12月30日收到; 2026年1月20日收到修改稿)

一维过渡金属硫族化合物为研究低维量子现象提供了典型模型, 然而以 M_6Q_6 ($M = \text{Mo}, \text{W}; Q = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$) 为代表的一维材料体系超导特性仍缺乏系统性的报道. 本工作基于第一性原理计算, 系统分析了一维 M_6Q_6 纳米线的电子结构、晶格动力学及电子-声子耦合 (electron-phonon coupling, EPC) 特性. 结果表明, 该系列材料表现出显著的成分依赖性, 含较轻硫族元素的化合物呈金属性, 费米能级附近出现“平带-陡带”并存的色散特征; 而含较重碲 (Te) 成分的纳米线则表现出半导体特性. 计算进一步证明, 所有金属性纳米线在动力学上稳定且具有超导性, 预测的超导转变温度 T_c 介于 0.1—3.6 K 之间. 值得注意的是, Mo_6S_6 纳米线由于存在明显的 Kohn 反常及过渡金属低频振动主导的声子模式, 导致显著的电子-声子耦合, 其预测 T_c 可达 3.6 K. M_6Q_6 纳米线构成了一类结构稳定且具有超导性的低维材料体系, 研究结果为设计高性能低维超导器件提供了新的理论依据与设计思路.

关键词: 超导, 电声耦合, 过渡金属硫族化合物, 第一性原理

DOI: 10.7498/aps.75.20251790

CSTR: 32037.14.aps.75.20251790

1 引言

近年来, 低维材料的兴起为探索新颖物理现象及开发新型电子器件提供了前所未有的机遇. 受显著量子限域效应及高比表面积的共同作用, 低维材料往往展现出迥异于其块体材料的物理性质^[1-3]. 这些独特特性可诱发丰富而新奇的电子、磁学、光

学现象以及超导行为, 使其在微纳电子学、光电子学、电催化、量子计算及高精度传感等下一代信息与能源技术领域中展现出广阔的应用前景^[4-10]. 过渡金属二硫族化合物 (transition metal dichalcogenides, TMDCs) 化学通式为 MQ_2 (其中 M 为过渡金属元素, 如 Mo, W, Nb; Q 为硫族元素, 如 S, Se, Te), 已成为研究低维体系物理性质的重要材料平台^[9,11-17]. 该类材料呈现出高度多样化的电子

* 山西省回国科教创新资助项目 (批准号: 2025-198)、国家自然科学基金 (批准号: 12204292) 和山西省基础研究计划 (批准号: 202203021221215, 202203021222228, 202403021221164) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: lijingyu@dgut.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: majiangjiang@sxnu.edu.cn

行为, 涵盖超导体、金属、半导体及绝缘体等多种物态, 并且对化学成分、晶体对称性以及维度的变化高度敏感. TMDCs 在不同维度下所表现出物理性质的多样性已得到广泛验证.

在三维及二维体系中, TMDCs 是研究超导性、电荷密度波 (charge density wave, CDW) 以及拓扑相变等基础物理问题的重要模型体系^[12]. 例如, 2H 相 NbSe₂^[18], NbS₂^[19], TaS₂^[20,21], 以及 2M-WS₂ 相^[22,23] 均为典型的块体超导体, 其超导态通常与 CDW 序之间存在竞争或共存关系. 与此同时, 二维 TMDCs 单层材料在其他研究领域亦取得了重要突破, 如单层 MoS₂ 因其显著的自旋-谷耦合效应而受到广泛关注, 成为谷电子学与光电子学研究中的核心材料体系^[24-26]. 值得注意的是, 当体系维度降低至二维时, 往往会诱导出全新的物理现象. 近期研究表明, 在多种二维 TMDCs 体系中可实现或诱导超导行为, 包括 2H-TaS₂^[27], 转角双层 WSe₂^[28,29]、特定结构的单层 WS₂^[30] 以及单层 WTe₂^[31] 等. 这些研究成果充分揭示了量子限域效应与结构调控对 TMDCs 电子基态的深刻影响, 并进一步激发了人们向更低维度体系持续探索的研究兴趣.

相较于二维体系, 一维极限下的强量子限域效应与结构重构往往会引发进一步的电子结构重整, 从而导致体系物性发生根本性变化. 化学通式为 M_6Q_6 ($M = \text{Mo}, \text{W}; Q = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$) 的过渡金属硫族化合物纳米线是一类典型的一维材料体系, 蕴含着 CDW, Tomonaga-Luttinger 液体行为以及超导电性等多种奇异的量子物态^[32-36]. 通常情况下, 单层 TMDCs 材料多表现为半导体, 而在一维体系中, 极端的量子限域效应与原子结构重排则倾向于驱动体系向金属态转变^[9,34,37-39]. 例如, M_6Q_6 纳米线普遍呈现出金属性^[39,40]. 但同族体系也会表现出其他电子性质, 如 Cr₆Te₆, Mo₆Te₆ 及 W₆Te₆ 等纳米线被理论预测为间接带隙半导体^[9,40-42].

此外, 一维过渡金属硫族化合物 (transition metal chalcogenides, TMCs) 在超导领域展现出独特的潜在优势, 其中亚纳米尺度的 Mo₆S₆ 纳米线为其超导性的存在提供了有力证据^[36]. 该体系不仅表现出可观的超导转变温度 ($T_c = 3.6 \text{ K}$), 而且在外加应变调控下, 其 T_c 可显著提升至 13.6 K. 相关研究表明, 这种高度可调的超导行为与其中心 Mo₆

八面体结构单元密切相关. 该结构单元在电子-声子相互作用及超导配对机制中发挥着关键作用, 这一点亦在相关的三维超导体中得到了验证, 例如 Tl₂Mo₆Se₆ ($T_c = 4.2 \text{ K}$)^[43], In₂Mo₆Se₆ ($T_c = 2.85 \text{ K}$)^[43] 以及典型的 Chevrel 相 PbMo₆S₈ ($T_c = 18.8 \text{ K}$)^[44,45]. 这种从一维到三维体系中延续存在的结构共性, 强烈表明对 TMCs 纳米线的系统研究对于理解超导机理及开发下一代高性能低维超导器件具有重要意义.

然而, 目前关于一维 Mo₆S₆, W₆S₆ 及 W₆Se₆ 纳米线超导行为的研究报道仍然十分有限, 这在很大程度上源于一维体系中超导电性的实验测量所面临的固有挑战. 基于此, 本文采用第一性原理计算方法, 对一维 M_6Q_6 ($M = \text{Mo}, \text{W}; Q = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$) 纳米线的电子结构及超导特性进行系统研究. 计算结果表明, 所有金属性纳米线均表现出与平带特征密切相关的超导行为, 其预测的超导转变温度 T_c 分布在 0.1—3.6 K 范围内. 尽管一维 Mo₆S₆ 纳米线的电子-声子耦合强度相对较弱, 其 T_c 仍可达到 3.6 K, 这与已有理论研究结果相一致^[36]. 此外, 本文还对半导体型 Mo₆Te₆ 和 W₆Te₆ 纳米线的电子结构及动力学稳定性进行分析. 研究结果不仅揭示了 TMCs 纳米线体系中潜在的超导特性, 也进一步阐明了低维体系中维度效应、平带特征与超导电性之间的内在关联与复杂相互作用.

2 计算方法

本文的计算工作基于密度泛函理论 (density functional theory, DFT), 采用 Quantum ESPRESSO 软件包完成^[46-48]. 交换-关联能采用广义梯度近似 (generalized gradient approximation, GGA) 框架下的 PBE(Perdew-Burke-Ernzerhof) 泛函进行描述^[49]. 电子-离子相互作用通过优化的模守恒 Vanderbilt 赝势加以处理^[50]. 平面波基组中, 波函数与电荷密度的能量截断分别设置为 80 Ry (1 Ry = 13.6056 eV) 和 320 Ry. 电子占据数的展宽采用 Methfessel-Paxton 一阶展宽方案, 展宽宽度为 0.01 Ry^[51].

在原子结构弛豫过程中, 采用以 Γ 点为中心的 $1 \times 1 \times 12$ 的 k 点网格进行布里渊区采样, 力的收敛判据设定为小于 10^{-6} Ry/Bohr, 能量的收敛

判据设定为 10^{-7} Ry. 为消除周期性边界条件下相邻镜像之间的相互作用, 在 a 和 b 方向引入 15 \AA 的真空层. 声子色散关系及电子-声子耦合性质通过基于密度泛函微扰理论 (density functional perturbation theory, DFPT) 的 Phonon 模块计算获得^[52]. 为确保计算结果的可靠性与可重复性, 本文对平面波截断能、静态自洽计算的 k 点网格密度, 以及电子-声子耦合计算涉及的 k 点和 q 点网格进行了系统的收敛性测试. 如附录图 A1(a), (b) 所示, 当平面波截断能高于 80 Ry 、 k 点网格取为 $1 \times 1 \times 12$ 时, 体系总能量已达到收敛精度. 图 A1(c) 展示了超导转变温度 T_c 随 k 点及 q 点采样密度的收敛行为. 计算结果表明, 在基于 DFPT 的 EPC 性质计算中, 当自洽部分的 k 点网格设为 $1 \times 1 \times 32$ 、相应的声子布里渊区采用 $1 \times 1 \times 6$ 的 q 点网格时, T_c 值已达到良好收敛. 接下来, 本文将采用以上计算参数对超导性质进行预测. 超导转变温度 T_c 通过 McMillan-Allen-Dynes 经验公式计算^[53]:

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

其中, μ^* 表示库仑赝势, λ 为电子-声子耦合 (EPC) 常数, ω_{\log} 为声子频率对数平均值. 半经验库仑参数 μ^* 取值区间通常为 0.05 — 0.2 ^[54-59]. 参数 λ 和 ω_{\log} 定义如下:

$$\lambda(\omega) = 2 \int_0^\omega \frac{\alpha^2 F(\omega')}{\omega'} d\omega', \quad (2)$$

$$\omega_{\log} = \exp \left[\frac{2}{\lambda} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} \alpha^2 F(\omega) \log \omega \right]. \quad (3)$$

EPC 常数 λ 可通过对 Eliashberg 谱函数 $\alpha^2 F(\omega)$ 积分获得, 其定义为

$$\alpha^2 F(\omega) = \frac{1}{2\pi N(E_F)} \sum_{q\nu} \frac{\gamma_{q\nu}}{\omega_{q\nu}} \delta(\omega - \omega_{q\nu}), \quad (4)$$

其中 $N(E_F)$ 是费米能级处的电子态密度, $\omega_{q\nu}$ 是声子频率, $\gamma_{q\nu}$ 是声子线宽.

$$\lambda_{q\nu} = \frac{\gamma_{q\nu}}{\pi N(E_F) \omega_{q\nu}^2},$$

式中 $\lambda_{q\nu}$ 为模式分辨的电声耦合强度 (mode-resolved EPC strength).

3 结果与讨论

过渡金属硫族化合物纳米线 M_6Q_6 ($M = \text{Mo},$

$\text{W}; Q = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$) 具有典型的一维亚纳米结构, 如图 1 所示. M_6Q_6 晶胞由以 6 个 Q 阴离子包围的 M_6 八面体单元构成, 每个 Q 原子与 4 个金属原子配位, 形成稳固的骨架结构. 沿纳米线轴向, M_6 八面体通过面共享方式周期性堆垛, 从而保证了一维链状结构的连续性与构型稳定性. 结构优化后, 得到的晶格常数约为 4.5 \AA , 纳米线直径范围为 4.97 — 5.72 \AA , 具体数值随金属与硫族元素的组合而异, 相关结构参数列于表 1. 可以看出, 本文计算结果与实验及理论报道结果^[9,36,39,60-62] 一致, 相对误差均在 6.1% 以内, 进一步验证了本文所选赝势及计算参数在描述 M_6Q_6 体系时的准确性. 具体地, Mo_6Q_6 中 M — Q 键长 ($Q = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$) 分别为 2.52 \AA , 2.62 \AA 和 2.86 \AA ; 而 W_6Q_6 中对应键长为 2.51 \AA , 2.67 \AA 和 2.86 \AA .

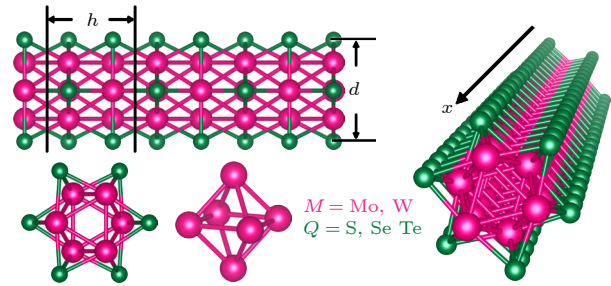


图 1 一维 M_6Q_6 ($M = \text{Mo}, \text{W}; Q = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$) 纳米线的晶体结构示意图, 由 M_6 八面体构成的内部骨架结构 (红色球表示 M , 绿色球表示 Q)

Fig. 1. Crystal structure of the 1D M_6Q_6 ($M = \text{Mo}, \text{W}; Q = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$) nanowires, illustrating the internal backbone formed by M_6 octahedral cages (M : red spheres, Q : green spheres).

为揭示一维 M_6Q_6 纳米线的电子性质, 我们计算并分析了轨道投影能带结构、总态密度 (total density of states, TDOS) 与分波态密度 (partial density of states, PDOS), 结果如图 2 所示. 电子结构呈现出显著的硫族元素依赖性: 较轻硫族元素 ($Q = \text{S}, \text{Se}$) 对应的 Mo_6S_6 , Mo_6Se_6 , W_6S_6 与 W_6Se_6 均表现出金属性, 存在多条能带穿越费米能级 (Fermi level, E_F). DFT 结果表明, 此类金属性主要源于过渡金属 d 轨道与硫族元素 p 轨道之间的强烈杂化, 从而在 E_F 处形成类自由电子的能带. 与之相反, 较重的碲化物 Mo_6Te_6 与 W_6Te_6 呈现窄带隙半导体行为, 其计算得到的间接带隙约为 0.32 eV 与 0.05 eV , 与已有工作一致^[40-42]. 该差异进一步凸显了电子性质对化学成分与低维限域的高度敏感性.

表 1 计算得到的一维 M_6Q_6 ($M = \text{Mo}, \text{W}; Q = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$) 纳米线的晶格常数 h (Å)、直径 d (Å) 及超导相关参数, 总电子-声子耦合常数 λ 、态密度 $N(E_F)$ (States/eV)、对数平均声子频率 ω_{\log} (K) 以及在库仑赝势 $\mu^* = 0.1$ 下由 Allen-Dynes 公式估算的临界温度 T_c (K), 表中同时列出了文献值与计算结果对比

Table 1. The calculated lattice constant (h in Å), diameter (d in Å), and superconducting properties of 1D M_6Q_6 ($M = \text{Mo}, \text{W}; Q = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$) nanowires, including data of total EPC constant λ , $N(E_F)$ (in States/eV), logarithmic averaged phonon frequency (ω_{\log} in K), and estimated critical temperatures calculated by the Allen-Dynes formula (T_c in K) with $\mu^* = 0.1$, reference values from previous studies are also included for comparison.

System	$h/\text{Å}$	$d/\text{Å}$	λ	$N(E_F)/(\text{States}\cdot\text{eV}^{-1})$	ω_{\log}/K	T_c/K
Mo_6S_6	4.35	4.97	0.56	8.68	192.7	3.6
	4.10—4.35 ^[36, 39-40, 60-61]	4.97 ^[36]	0.54 ^[36]			
Mo_6Se_6	4.45	5.23	0.43	7.12	198.0	1.2
	4.40 ^[39] , 4.44 ^[40]					
Mo_6Te_6	4.58	5.63	—	0	—	—
	4.60 ^[39] , 4.58 ^[40]					
W_6S_6	4.36	5.02	0.42	12.6	186.3	1.0
	4.35 ^[40]					
W_6Se_6	4.44	5.30	0.34	11.8	182.2	0.2
	4.44 ^[40]					
W_6Te_6	4.56	5.72	—	0	—	—
	4.55 ^[40]					

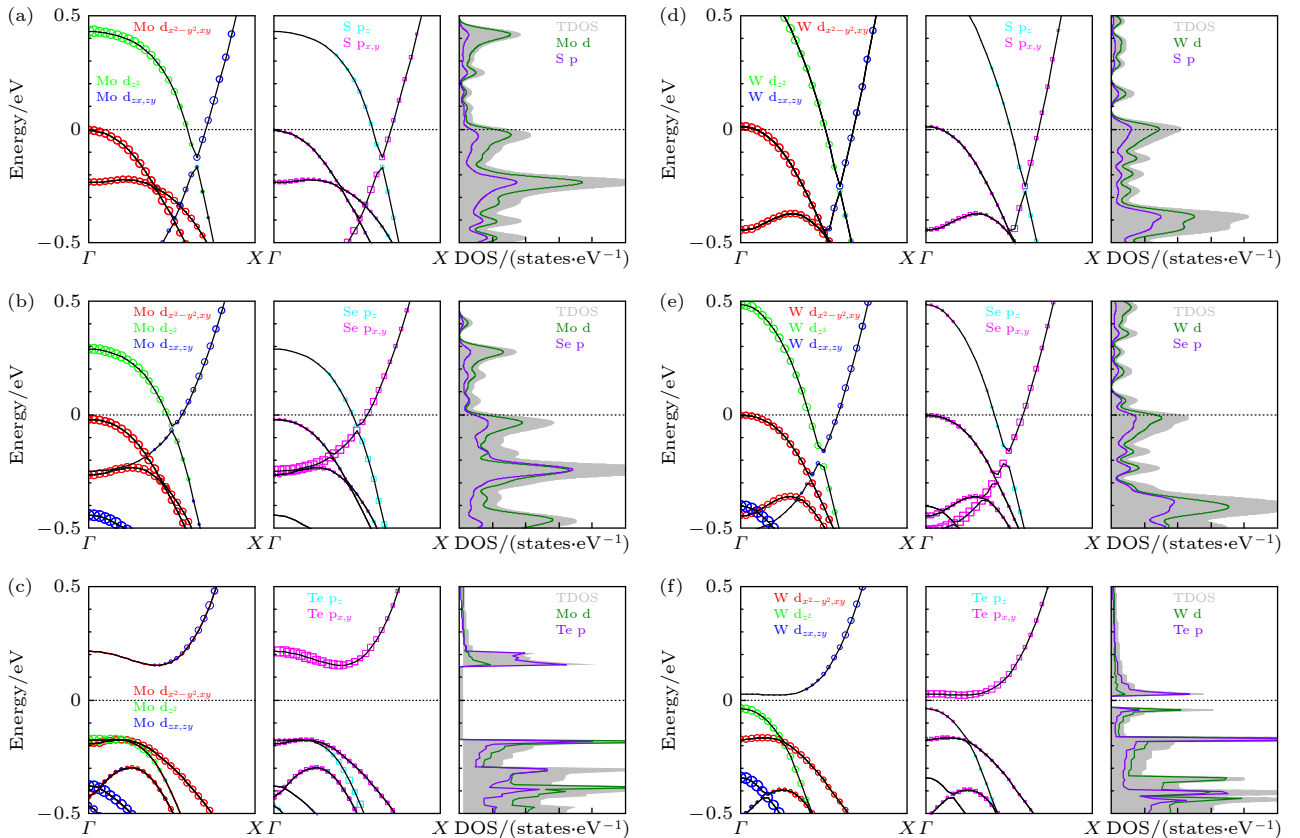


图 2 计算得到的一维纳米线的轨道投影能带结构、总电子态密度与分波电子态密度 (a) Mo_6S_6 ; (b) Mo_6Se_6 ; (c) Mo_6Te_6 ; (d) W_6S_6 ; (e) W_6Se_6 ; (f) W_6Te_6 . 虚线表示费米能级, 设其值为 0 eV

Fig. 2. Calculated orbital-resolved band structures, the total electronic density of states (TDOS), as well as the partial electronic density of states (PDOS) of 1D nanowires: (a) Mo_6S_6 ; (b) Mo_6Se_6 ; (c) Mo_6Te_6 ; (d) W_6S_6 ; (e) W_6Se_6 ; (f) W_6Te_6 . The Fermi level indicated by the dotted line is set to 0 eV.

对 E_F 附近态的轨道组成分析显示, Mo_6S_6 , Mo_6Se_6 与 W_6Se_6 的电子态主要由金属原子的 d_{z^2} 与 $d_{xz, zy}$ 轨道贡献, 并呈现出典型的“平带-陡带”并存色散特征, 即一条较为局域化的平带与一条巡游性较强的陡带同时穿越 E_F . 平带与陡带共存的电子构型可显著增强电子-声子耦合强度, 从而使这些体系成为一维超导候选材料^[59,63-66]. 这种电子构型增强电子-声子耦合的理论基础可归纳为: 1) 平带在费米能级附近诱导产生局域态密度峰值, 根据 BCS/Eliashberg 理论, 这直接提升了超导配对的可能性; 2) 与平带相关的电子态通常具有更强的波函数局域性, 这种局域性有利于电子波函数与特定晶格振动模式在实空间中的有效重叠. W_6S_6 在 Γ 点附近额外出现由 W 原子的 $d_{x^2-y^2, xy}$ 轨道主导的能带, 进一步丰富了其金属行为. 对于碲化物体系, 价带以金属 d 轨道为主, 而导带主要由 Te 的 $p_{x, y}$ 轨道贡献. 计算得到的金属型 M_6Q_6 纳米线在 E_F 处的总态密度 $N(E_F)$ 较高 (见表 1), 其范围为 7.12—12.6 states/eV, 高 $N(E_F)$ 同样意味着可

能存在显著的多体相互作用与关联现象; 反观 Te 基纳米线, 因存在带隙, $N(E_F) = 0$, 其 EPC 被抑制. 通过用 Mo 取代 W 或改变硫族元素成分, 可有效调制能带结构并进而调整超导性质. 综上, 含较轻硫族元素且以 Mo 为中心的金属型 M_6Q_6 纳米线结构稳定、电子态丰富, 为研究低维超导与关联电子态提供了良好的平台, 并为通过化学成分调控以期实现更高的超导转变温度 T_c 指明了可行路径, 对基础研究及微纳电子与量子器件的应用均具有重要意义.

图 3 给出了沿 Γ -X 高对称路径计算得到的 M_6Q_6 纳米线声子色散. 6 种体系的声子谱均不含虚频, 证明了其动力学稳定性. 由于原胞包含 12 个原子, 故声子谱包含 36 支声子模式 (其中 3 条声学支与 33 条光学支), 频率分布覆盖 0—48 meV. 比较不同化学成分可见, 声子频率对原子质量高度敏感: 以较重硫族元素 (Se, Te) 替代 S 可导致声子谱明显红移 (软化). 尤其值得注意的是, 在低能区 (10—20 meV), S 基金属纳米线的光学声子支

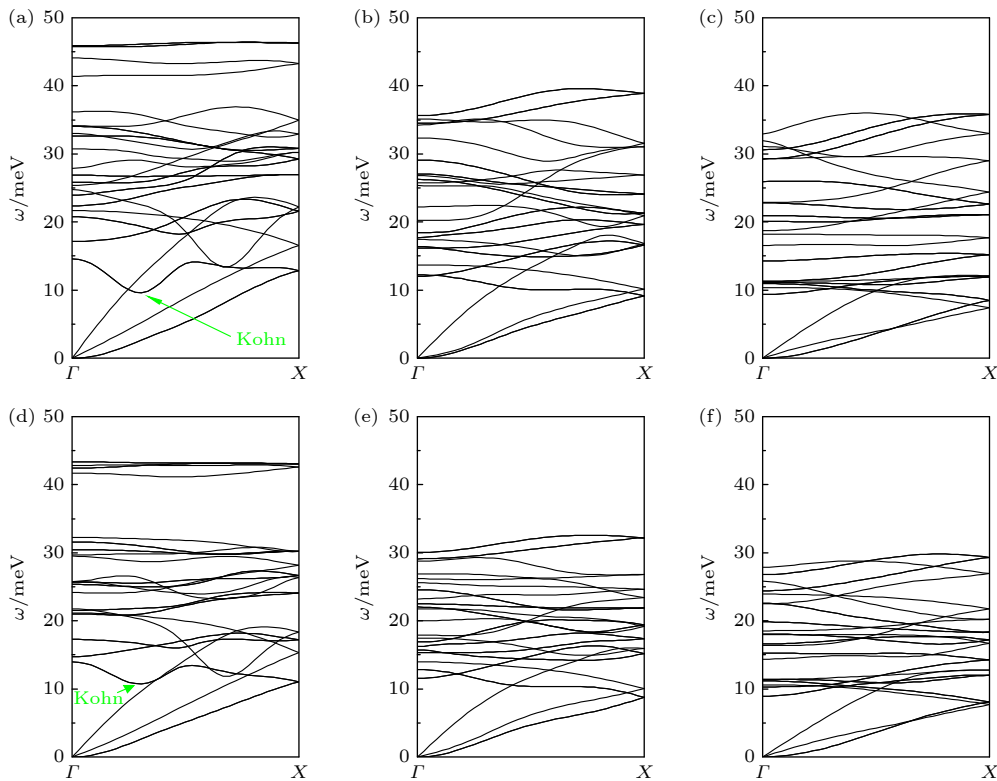


图 3 计算得到的一维纳米线的声子色散关系 (a) Mo_6S_6 ; (b) Mo_6Se_6 ; (c) Mo_6Te_6 ; (d) W_6S_6 ; (e) W_6Se_6 ; (f) W_6Te_6 . 绿色箭头标注了 Kohn 反常 (声子软化) 的位置

Fig. 3. Calculated phonon dispersions of 1D nanowires: (a) Mo_6S_6 ; (b) Mo_6Se_6 ; (c) Mo_6Te_6 ; (d) W_6S_6 ; (e) W_6Se_6 ; (f) W_6Te_6 . Kohn anomaly (phonon softening) marked by green arrows.

在特定 q 向量处出现明显的异常软化, 如图 3(a), (d) 中绿色箭头所示. 该软化行为显著偏离了声子色散的常规演化趋势, 是 Kohn 反常的典型特征. 这一现象通常被视为强电子-声子相互作用引发晶格软化的典型征兆 [58,67-71]. 基于以上动力学与电子结构判定, 本研究重点针对 4 种动力学稳定且呈金属性的纳米线 (Mo_6S_6 , Mo_6Se_6 , W_6S_6 , W_6Se_6) 展开后续电子-声子耦合与超导性质分析.

为量化 EPC 强度并评估超导性能, 计算了总声子态密度 (phonon density of states, PhDOS)、原子投影声子态密度、Eliashberg 频谱函数 $\alpha^2F(\omega)$ 及其积分形式的耦合参数 $\lambda(\omega)$, 如图 4 所示. 结果表明, 约 9.5 meV 以下的声子模式对总耦合的贡献可以忽略不计. 不同声子频率范围对总电声耦合常数 λ 的贡献通过 Eliashberg 函数的累积积分函数 $\lambda(\omega)$ 来定量表征. 各能量区间及特定模式的贡献百分比定义为该能量区间内的积分值与全能域总积分值之比. 通过这种频率分辨的积分方法, 可以精确评估不同振动模式对超导耦合强度的具体权重. S 基纳米线的耦合机制表现为由过渡金属低频振动主导的强局域耦合: 对于 Mo_6S_6 , 总 EPC 参数 $\lambda = 0.56$, 其中约 75.4% 的贡献来自 24.0 meV 以下的 Mo 原子主导振动模式, 有 68.4% 与所观测

到的 Kohn 反常直接相关; 对于 W_6S_6 , $\lambda = 0.42$, 约 83.7% 的 EPC 来自 25.0 meV 以下的 W 原子振动, 高达 72.1% 的 EPC 与声子谱中观察到的显著 Kohn 反常密切相关. 此类反常现象本质上起源于特定波矢 q 处的费米面嵌套 (FSN) 增强, 进而诱发相关声子频率 ω_{qv} 发生了软化. 鉴于模式分辨的耦合强度 λ_{qv} 与 ω_{qv}^2 成反比, 这种由 Kohn 反常引起的晶格不稳定性成了电声相互作用的主要增强通道, 并在声子谱上体现为软化点处声子线宽 γ_{qv} 的显著峰值. 为了定量刻画该物理机制, 图 5 给出了 S 基纳米线声子线宽及模式分辨的电子-声子耦合强度 λ_{qv} 的分布图. 结果表明, 在发生声子软化的波矢区域, 声子模式呈现出线宽和 λ_{qv} 同步增大的特征, 直接反映了电声耦合作用在该动量点处的显著增强. 通过对 Kohn 反常区域进行动量空间求和分析, 我们定量证实了这种晶格畸变倾向是导致该材料展现出强电声耦合特性的微观物理起源. 进一步地, 为了深度揭示上述 Kohn 反常的微观驱动力, 结合电子磁化率 $\chi''(q)$ 确立了 FSN 的驱动作用. 计算发现, 在 Γ 点附近存在显著的嵌套特征 (图 5(c), (f)), 这反映了一维体系中强烈的长波电子极化屏蔽效应. 这种屏蔽效应直接诱导了特定 q 矢量处声子频率的剧烈软化, 并伴随声子线宽 γ_{qv}

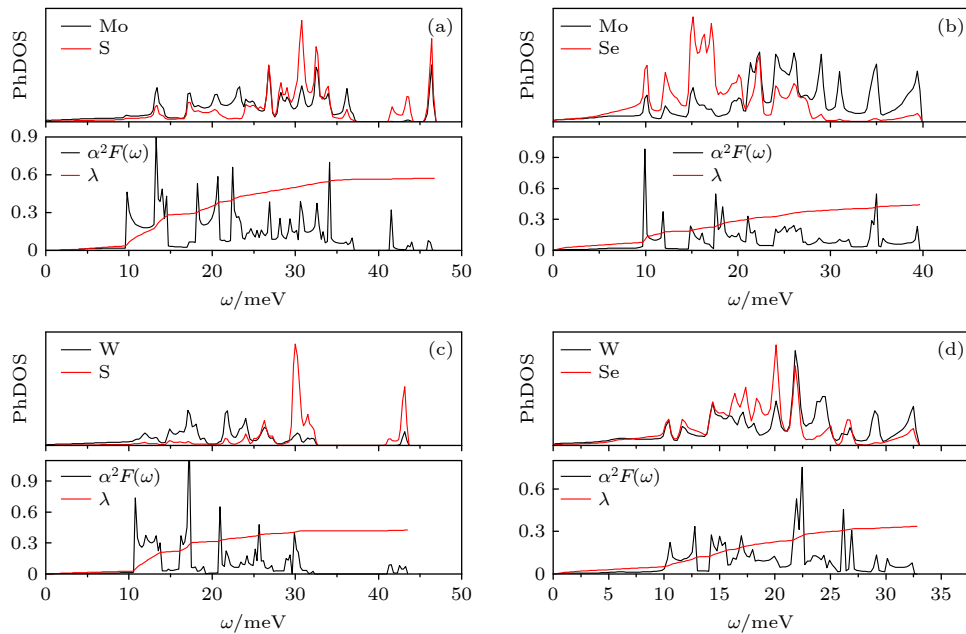


图 4 计算得到的一维纳米线的声子态密度 (PhDOS)、Eliashberg 频谱函数 $\alpha^2F(\omega)$ 及积分得到的频率依赖电子-声子耦合参数 $\lambda(\omega)$ (a) Mo_6S_6 ; (b) Mo_6Se_6 ; (c) W_6S_6 ; (d) W_6Se_6

Fig. 4. Calculated phonon density of states (DOS), Eliashberg spectral function $\alpha^2F(\omega)$ and cumulative frequency dependence of EPC $\lambda(\omega)$ for 1D nanowires: (a) Mo_6S_6 ; (b) Mo_6Se_6 ; (c) W_6S_6 ; (d) W_6Se_6 .

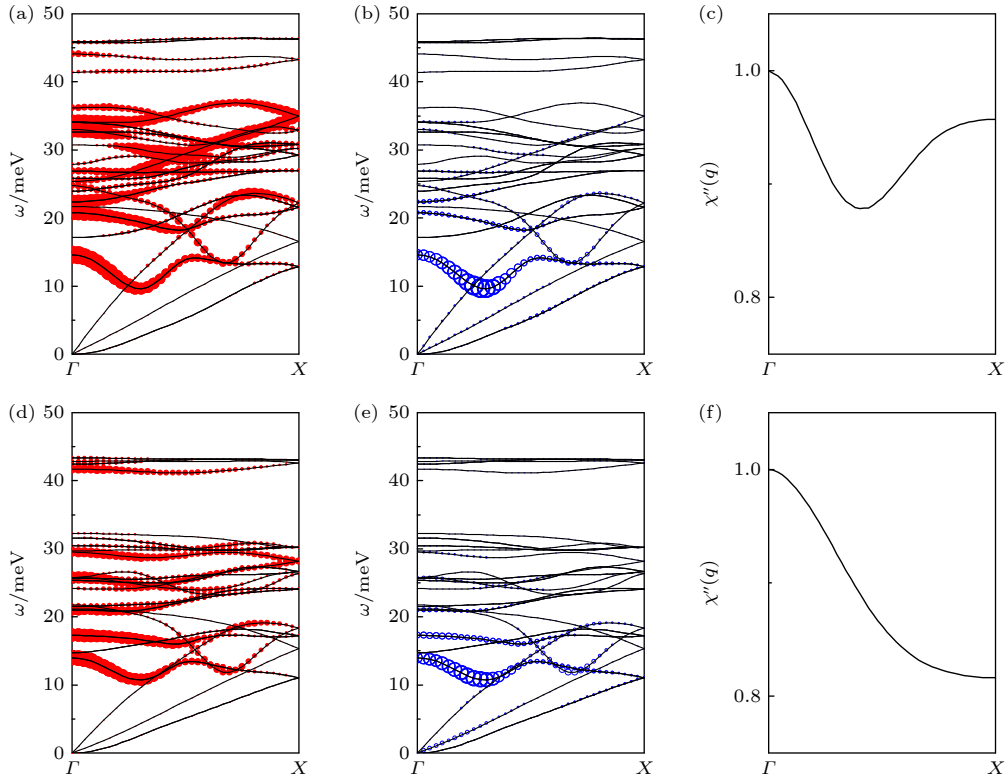


图 5 一维纳米线 Mo_6S_6 的 (a) 声子线宽的数值相对大小, (b) 模式分辨的电声耦合强度 λ_{qv} 以及 (c) 费米面嵌套; 相应的 W_6S_6 计算结果呈现在 (d)–(f) 中; (a), (b), (d), (e) 中圆圈的大小与数值大小成正比

Fig. 5. Calculated (a) relative phonon linewidths γ_{qv} , (b) mode-resolved EPC strength λ_{qv} , and (c) Fermi surface nesting function $\chi''(q)$ for 1D Mo_6S_6 nanowire; the corresponding results for W_6S_6 are shown in panels (d)–(f); the sizes of the circles in (a), (b), (d), (e) are proportional to the respective physical values.

(声子谱函数虚部) 的异常展宽 (图 5(a), (d)). 这种“频率下凹”与“线宽峰值”在动量空间的高度重合, 定量证实了该模式与费米面附近电子态的强烈散射. 最终, 这些反常模式在模式分辨的耦合强度 λ_{qv} 中表现出与 FSN 高度一致的分布特征 (图 5(b), (e)), 从而清晰地构建了从“费米面嵌套诱发 Kohn 反常”到“晶格软化显著增强电声耦合”的完整物理图像, 为该 S 基体系的耦合超导机制提供了严密的理论支撑.

相较之下, Se 基对应物的总耦合强度明显较小: Mo_6Se_6 的 $\lambda = 0.43$, 其累积 $\lambda(\omega)$ 饱和值较 Mo_6S_6 低; W_6Se_6 则表现出最低的总耦合强度 $\lambda = 0.34$. 以 Mo_6Se_6 为例, 总 EPC 主要由与较重硫族元素相关的低频模式驱动: 20.8 meV 以下以 Se 振动为主的模态贡献了约 68.2% 的 λ ; 20.8–22.8 meV 的中间能区中 Mo 与 Se 的贡献相当, 但总量仅约 4.5%; 而高频 Mo 振动 (>22.8 meV) 仍贡献了约 27.3%. 在 W_6Se_6 中, 低频区 (≤ 15.9 meV) 贡献了约 51.5%, 中间区 (15.9–21.0 meV) 以 Se 为主 (约

18.2%), 高频 W 振动 (>21.0 meV) 则提供了 30.3% 的次要贡献. 这些成分分布揭示了不同化学组成下耦合源的差异性, 即 S 基体系中以金属低频振动为主, 而 Se 基体系中硫族原子振动的相对贡献提升.

基于上述计算获得的 EPC 参数 λ 以及 Eliashberg 频谱函数, 并采用 McMillan-Allen-Dynes 公式估算了超导转变温度 T_c . 为评估库仑赝势参数 μ^* 取值对超导转变温度预测的影响, 系统考察了 $\mu^* = 0.10$ – 0.13 区间内 T_c 的变化情况. 如图 6 所示, 一维金属纳米线 Mo_6S_6 , Mo_6Se_6 , W_6S_6 , W_6Se_6 的 T_c 分别变化于 3.6–2.4 K, 1.2–0.6 K, 1.0–0.5 K 及 0.2–0.1 K 范围内. T_c 的绝对数值随 μ^* 增大而单调降低, 但各体系的变化趋势保持一致, 未改变对其超导行为的定性判断. 值得注意的是, 在 $\mu^* = 0.10$ 时, 我们得到的 Mo_6S_6 的 T_c 为 3.6 K, 与已有文献 [36] 结果一致. 鉴于一维体系易受 Peierls 不稳定性及热/量子涨落的影响, 上述 T_c 值尤为值得关注; 结果表明, “平带-陡带”共存的电子构型在增强 EPC、抑制不利涨落并稳定超导态方面起到了

核心作用. 在微观增强机制上, 具有较高有效质量的平带贡献了较大的费米面态密度, 为强 EPC 奠定了物理基础; 与此同时, 具有高费米速度的陡带电子通过跨带散射有效增强了电子巡游性, 在维持强耦合强度的同时克服了纯平带体系中常见的电子局域化障碍^[72-74]. 此外, 该构型有效地抑制了低维体系中常见的不利涨落, 即强烈的 Peierls 不稳定性及其驱动的电荷载密度波 (CDW) 竞争序. 平带与陡带的共存破坏了单一能带的理想嵌套几何, 使费米面嵌套函数的奇异性发生弥散, 从而防止了体系因打开 CDW 能隙而压制超导配对^[75,76]. 最终, 该构型利用陡带主导的机制有效抑制了相位涨落, 实现了超导态的稳定, 并确保了体系在强耦合区间

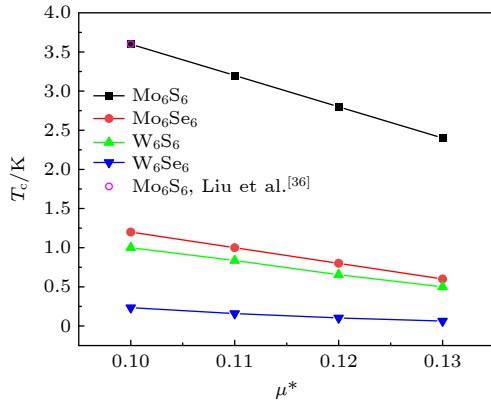


图 6 一维 M_6Q_6 ($M = Mo, W$; $Q = S, Se$) 纳米线的超导转变温度 T_c 随 μ^* 取值的演化, 图中同时展示了本工作与前人理论研究结果^[36] 的对比

Fig. 6. Calculated superconducting transition temperature T_c of 1D M_6Q_6 ($M = Mo, W$; $Q = S, Se, Te$) nanowires as a function of μ^* , the previous T_c value from the Ref.[36] is included for comparison.

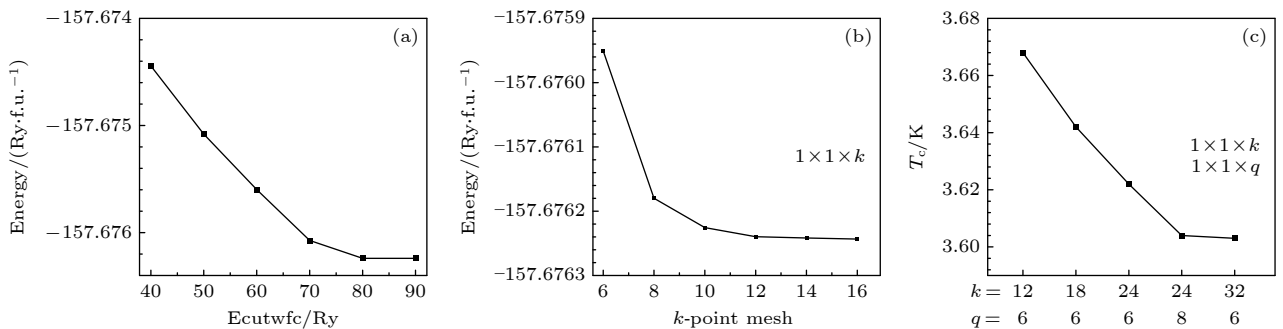


图 A1 一维 Mo_6S_6 计算参数的收敛性测试 (a) 体系总能量随平面波截断能 Ecutwfc 的变化曲线; (b) 体系总能量随自洽计算 k 点网格采样密度的变化曲线; (c) 超导转变温度 T_c 随电声耦合计算中 k 点网格及 q 点网格采样密度的变化关系 ($\mu^* = 0.10$)

Fig. A1. Convergence tests for computational parameters: (a) Total energy as a function of the plane-wave cutoff energy; (b) total energy as a function of the k -point mesh density for self-consistent field calculations; (c) superconducting transition temperature T_c as a function of the k -point and q -point grid densities for EPC calculations for 1D Mo_6S_6 ($\mu^* = 0.10$).

下的动力学稳定性^[77]. 本研究系统揭示了通过化学成分调控可实现对声子谱及电子-声子耦合的显著调整, 进而影响一维 M_6Q_6 纳米线的超导性能. 化学成分、声子软化与 EPC 增强之间的内在关联为定向设计具有目标 T_c 与特定量子态的低维材料提供了可操作的理论策略, 并为在低维限域下实现高性能超导器件的工程化开发奠定了基础.

4 结 论

综上所述, 本工作基于第一性原理计算系统证明了一维 M_6Q_6 ($M = Mo, W$; $Q = S, Se, Te$) 纳米线在结构上动力学稳定且在电子性质上表现出显著的成分依赖性. 具体而言, 较轻硫族元素 ($Q = S, Se$) 对应的体系呈金属性, 具有较高的 $N(E_F)$ 并显示出典型的“平带-陡带”共存能带结构, 而含 Te 的体系则表现为窄带隙半导体. 电子-声子耦合 (EPC) 计算表明, 所有金属型纳米线均具备超导潜力, 预测的转变温度 T_c 分布于 0.1—3.6 K 范围内; 其中 Mo_6S_6 因与 Kohn 反常相关的低能过渡金属振动引发的强 EPC 而表现出最高的预测 T_c (3.6 K). 研究还明确了化学成分、声子软化与 EPC 增强之间的内在关联, 证明通过成分调控与声子工程可实现对一维体系超导转变温度及关联量子相的设计. 该结果不仅为理解一维低维量子现象提供了理论依据, 也为基于 M_6Q_6 纳米线的低维超导器件设计与功能化开发奠定了可操作的策略.

附 录

参考文献

- [1] Wang H, Liu B T, Qiao S X, Jiao N, Yu G L, Zhang P, Ting S C, Lu H Y 2025 *Chin. Phys. Lett.* **43** 010706
- [2] Yang Q P, Jiang X, Zhao J J 2023 *Chin. Phys. Lett.* **40** 107401
- [3] Yin Z Z, Wang H, Wang Q H, Jiao N, Ni M Y, Zheng M M, Lu H Y, Zhang P 2023 *Chin. Phys. Lett.* **40** 097404
- [4] Tang Z K, Zhang L, Wang N, Zhang X X, Wen G H, Li G D, Wang J N, Chan C T, Sheng P 2001 *Science* **292** 2462
- [5] Li Y, Zhu L, Zhang C, Li L, Zeng C 2025 *ActaPhys. Sin.* **74** 147302 (in Chinese) [李渝豪, 朱丽君, 张弛, 李林, 曾长淦 2025 物理学报 **74** 147302]
- [6] Wang X H, Wang H, Ma L, Zhang L B, Yang Z L, Dong D X, Chen X, Li H C, Guan Y Q, Zhang B, Chen Q, Shi L L, Li H, Qin Z, Tu X C, Zhang L J, Jia X Q, Chen J, Kang L, Wu P H 2023 *Nat. Commun.* **14** 4282
- [7] Lin Y C, Torsi R, Younas R, Hinkle C L, Rigosi A F, Hill H M, Zhang K, Huang S, Shuck C E, Chen C, Lin Y H, Maldonado-Lopez D, Mendoza-Cortes J L, Ferrier J, Kar S, Nayir N, Rajabpour S, Duijn A C T, Liu X, Jariwala D, Jiang J, Shi J, Mortelmans W, Jaramillo R, Lopes J M J, Engel-Herbert R, Trofe A, Ignatova T, Lee S H, Mao Z, Damian L, Wang Y, Steves M A, Knappenberger K L Jr, Wang Z, Law S, Bepete G, Zhou D, Lin J X, Scheurer M S, Li J, Wang P, Yu G, Wu S, Akinwande D, Redwing J M, Terrones M, Robinson J A 2023 *ACS Nano* **17** 9694
- [8] Li K, Cui G L, Liu M Z, Xu X Z 2025 *Acta Phys. Sin.* **74** 226401 (in Chinese) [李宽, 崔国梁, 刘美壮, 徐小志 2025 物理学报 **74** 226401]
- [9] Shang C J, Fu L, Zhou S, Zhao J J 2020 *JACS Au* **1** 147
- [10] Cignarella C, Campi D, Marzari N 2024 *ACS Nano* **18** 16101
- [11] Giri A, Park G, Jeong U 2023 *Chem. Rev.* **123** 3329
- [12] Qiu D, Gong C, Wang S, Zhang M, Yang C, Wang X, Xiong J 2021 *Adv. Mater.* **33** 2006124
- [13] Wang Q H, Kalantar-Zadeh K, Kis A, Coleman J N, Strano M S 2012 *Nat. Nanotechnol.* **7** 699
- [14] Zhao B, Shen D Y, Zhang Z C, Lu P, Hossain M, Li J, Li B, Duan X D 2021 *Adv. Funct. Mater.* **31** 2105132
- [15] Gupta S, Zhang J J, Lei J, Yu H, Liu M, Zou X, Yakobson B I 2025 *Chem. Rev.* **125** 786
- [16] Joseph S, Mohan J, Lakshmy S, Thomas S, Chakraborty B, Thomas S, Kalarikkal N 2023 *Mater. Chem. Phys.* **297** 127332
- [17] Xiao Y, Xiong C, Chen M M, Wang S, Fu L, Zhang X 2023 *Chem. Soc. Rev.* **52** 1215
- [18] Méasson M A, Gallais Y, Cazayous M, Clair B, Rodiere P, Cario L, Sacuto A 2014 *Phys. Rev. B* **89** 060503
- [19] Heil C, Poncé S, Lambert H, Schlipf M, Margine E R, Giustino F 2017 *Phys. Rev. Lett.* **119** 087003
- [20] Freitas D, Rodière P, Osorio M, Navarro-Moratalla E, Nemes N M, Tissen V G, Cario L, Coronado E, García-Hernández M, Vieira S, Núñez-Regueiro M, Suderow H 2016 *Phys. Rev. B* **93** 184512
- [21] Kvashnin Y, VanGennep D, Mito M, Medvedev S, Thiagarajan R, Karis O, Vasiliev A, Eriksson O, Abdel-Hafez M 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 186401
- [22] Fang Y Q, Pan J, Zhang D Q, Wang D, Hirose H T, Terashima T, Uji S, Yuan Y H, Li W, Tian Z, Xue J M, Ma Y H, Zhao W, Xue Q K, Mu G, Zhang H J, Huang F Q 2019 *Adv. Mater.* **31** 1901942
- [23] Li Y, Zheng H, Fang Y, Zhang D, Chen Y, Chen C, Liang A, Shi W J, Pei D, Xu L X, Liu S, Pan J, Lu D H, Hashimoto M, Barinov A, Jung S W, Cacho C, Wang M X, He Y, Fu L, Zhang H J, Huang F Q, Yang L X, Liu Z K, Chen Y L 2021 *Nat. Commun.* **12** 2874
- [24] Mak K F, Lee C, Hone J, Shan J, Heinz T F 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 136805
- [25] Liu P F, Zhou L, Frauenheim T, Wu L M 2016 *Nanoscale* **8** 4915
- [26] Kang M, Jung S W, Shin W J, Sohn Y, Ryu S H, Kim T K, Hoesch M, Kim K S 2018 *Nat. Mater.* **17** 676
- [27] Navarro-Moratalla E, Island J O, Manas-Valero S, Pinilla-Cienfuegos E, Castellanos-Gomez A, Queda J, Rubio-Bollinger G, Chirrolli L, Silva-Guillén J A, Agraït N, Steele G A, Guinea F, van der Zant H S J, Coronado E 2016 *Nat. Commun.* **7** 11043
- [28] Guo Y, Pack J, Swann J, Holtzman L, Cothrine M, Watanabe K, Taniguchi T, Mandrus D G, Barmak K, Hone J, Millis A J, Pasupathy A, Dean C R 2025 *Nature* **637** 839
- [29] Zhu J, Chou Y Z, Xie M, Sarma S D 2025 *Phys. Rev. B* **111** L060501
- [30] Ding D D, Qu Z Z, Han X R, Han C, Zhuang Q, Yu X L, Niu R R, Wang Z Y, Li Z X, Gan Z Z, Wu J S, Lu J M 2022 *Nano Lett.* **22** 7919
- [31] Hsu Y T, Cole W S, Zhang R X, Sau J D 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 097001
- [32] Lin X Y, Deng J H, Bai Y S, Huo D, Zhu C, Pan Z M, Jian T, Liu C S, Zhang C D 2024 *ACS Nano* **18** 13241
- [33] Hasan M, Montano P, Isaacs E, Shen Z X, Eisaki H, Sinha S, Islam Z, Motoyama N, Uchida S 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 177403
- [34] Xia Y P, Wang B, Zhang J Q, Jin Y J, Tian H, Ho W K, Xu H, Jin C H, Xie M H 2020 *Nano Lett.* **20** 2094
- [35] Li Y, Wu D, Wang D, Zhang Y, Min T, Pan Y 2023 *Adv. Mater. Interfaces* **10** 2202043
- [36] Liu Y, Cui T, Li D 2025 *Phys. Rev. B* **111** 195401
- [37] Venkataraman L, Lieber C M 1999 *Phys. Rev. Lett.* **83** 5334
- [38] Kibsgaard J, Tuxen A, Levisen M, Lægsgaard E, Gemming S, Seifert G, Lauritsen J V, Besenbacher F 2008 *Nano Lett.* **8** 3928
- [39] Lin J, Cretu O, Zhou W, Suenaga K, Prasai D, Bolotin K I, Cuong N T, Otani M, Okada S, Lupini A R, Idrobo J C, Caudel D, Burger A, Ghimire N J, Yan J, Mandrus D G, Pennycook S J, Pantelides S T 2014 *Nat. Nanotechnol.* **9** 436
- [40] Cakir D, Durgun E, Gülseren O, Ciraci S 2006 *Phys. Rev. B* **74** 235433
- [41] Deng J H, Huo D, Bai Y S, Guo Y P, Pan Z M, Lu S Z, Cui P, Zhang Z Y, Zhang C D 2020 *Nano Lett.* **20** 8866
- [42] Zhao Y Y, Qu H W, Zhao J J, Kang L X, Zhou S 2025 *Nano Lett.* **25** 1108
- [43] Petrović A, Lortz R, Santi G, Decroux M, Monnard H, Fischer O, Boeri L, Andersen O, Kortus J, Salloum D, Gougeon P, Potel M 2010 *Phys. Rev. B* **82** 235128
- [44] Marini G, Sanna A, Pellegri C, Bersier C, Tosatti E, Profeta G 2021 *Phys. Rev. B* **103** 144507
- [45] Chen J, Millis A J, Reichman D R 2018 *Phys. Rev. Mater.* **2** 114801
- [46] Giannozzi P, Baroni S, Bonini N, Calandra M, Car R, Cavazzoni C, Ceresoli D, Chiarotti G L, Cococcioni M, Dabo I, Corso A D, de Gironcoli S, Fabris S, Fratesi G, Gebauer R, Gerstmann U, Gougoussis C, Kokalj A, Lazzeri M, Martin-Samos L, Marzari N, Mauri F, Mazzarello R, Paolini S, Pasquarello A, Paulatto L, Bracciaci C, Scandolo S, Schlauro G, Seitsonen A P, Smogunov A, Umari P, Wentzcovitch R M 2009 *J. Phys.: Condens. Matter* **21** 395502
- [47] Giannozzi P, Andreussi O, Brumme T, Bunau O, Nardelli M

- B, Calandra M, Car R, Cavazzoni C, Ceresoli D, Cococcioni M, Colonna N, Carnimeo I, Corso A D, de Gironcoli S, Delugas P, Jr DiStasio R A, Ferretti A, Floris A, Fratesi G, Fugallo G, Gebauer R, Gerstmann U, Giustino F, Gorni T, Jia J, Kawamura M, Ko H Y, Kokalj A, Küçükbenli E, Lazzeri M, Marsili M, Marzari N, Mauri F, Nguyen N L, Nguyen H V, Otero-de-la-Roza A, Paulatto L, Poncé S, Rocca D, Sabatini R, Santra B, Schlipf M, Seitsonen A P, Smogunov A, Timrov I, Thonhauser T, Umari P, Vast N, Wu X, Baroni S 2017 *J. Phys.: Condens. Matter* **29** 465901
- [48] Giannozzi P, Barone S, Corso A D, Giannozzi P 2001 *Rev. Mod. Phys.* **73** 515
- [49] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [50] Hamann D R 2013 *Phys. Rev. B* **88** 085117
- [51] Monkhorst H J, Pack J D 1976 *Phys. Rev. B* **13** 5188
- [52] Allen P B, Dynes R C 1975 *Phys. Rev. B* **12** 905
- [53] Zheng J J, Margine E R 2016 *Phys. Rev. B* **94** 064509
- [54] Zheng J J, Margine E R 2017 *Phys. Rev. B* **95** 014512
- [55] Lin J H, Cui J H, Zhang Q 2025 *Acta Phys. Sin.* **74** 137401 (in Chinese) [林建华, 崔佳浩, 庄全 2025 物理学报 **74** 137401]
- [56] Liu P F, Zheng F, Li J, Si J G, Wei L, Zhang J, Wang B T 2022 *Phys. Rev. B* **105** 245420
- [57] Li J, Guo M, Si J, Shi L, Shi X, Ma J J, Zhang Q, Singh D J, Liu P F, Wang B T 2023 *Mater. Today Phys.* **38** 101257
- [58] Zheng J J, Li J, Ma R R, Guo F, Ma J J, Liu P F 2025 *Phys. Rev. B* **112** 195405
- [59] Popov I, Yang T, Berber S, Seifert G, Tománek D 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 085503
- [60] Popov I, Gemming S, Okano S, Ranjan N, Seifert G 2008 *Nano Lett.* **8** 4093
- [61] Souza D F, Rosa A L, Venezuela P, Padilha J E, Fazzio A, Pontes R B 2019 *Phys. Rev. B* **100** 235416
- [62] Ding S, Zhu L, Zhang X, Liu Y, Zhou X F, Yang G 2024 *Inorg. Chem.* **63** 18781
- [63] Khasanov R, Ruan B B, Shi Y Q, Chen G F, Luetkens H, Ren Z A, Guguchia Z 2024 *Nat. Commun.* **15** 2197
- [64] Deng C, Wang M, Huang H, Xu M, Zhao W, Du M, Song H, Cui T 2024 *Phys. Rev. B* **109** 184516
- [65] Li B, Fan Y, Yin C, Zhai J, Zhu C, Cao Z, Cheng J, Liu S 2025 *Phys. Rev. B* **111** 014510
- [66] Kohn W 1959 *Phys. Rev. Lett.* **2** 393
- [67] Liu H D, Wang B T, Fu Z G, Lu H Y, Zhang P 2024 *Phys. Rev. Res.* **6** 033241
- [68] Li J, Wei L, Shi X, Shi L, Si J, Liu P F, Wang B T 2024 *Phys. Rev. B* **109** 174516
- [69] Zhang W Y, Bergara A, Wang S, Li F, Zhang X H, Yang G C 2025 *Phys. Rev. B* **112** 024511
- [70] Qiao S X, Han Y L, Jiang K Y, Jiao N, Si C, Lu H Y, Zhang P 2025 *Adv. Funct. Mater.* **35** 2502257
- [71] Aoki H 2020 *J. Supercond. Nov. Magn.* **33** 2341
- [72] Deng S, Simon A, Köhler J 2003 *J. Supercond.* **16** 477
- [73] Heikkilä T T, Volovik G E 2016 *Basic Physics of Functionalized Graphite* (Berlin: Springer) pp123–143
- [74] Johannes M D, Mazin I I 2008 *Phys. Rev. B* **77** 165135
- [75] Gabovich A M, Voitenko A I, Ausloos M 2002 *Phys. Rep.* **367** 583
- [76] Emery V J, Kivelson S A 1995 *Nature* **374** 434

Electron-phonon coupling superconductivity in one-dimensional M_6Q_6 ($M = \text{Mo}, \text{W}$; $Q = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$) nanowires*

ZHENG Jingjing¹⁾ YANG Jinwen¹⁾ MA Rongrong²⁾ YUAN Zhihong²⁾

LI Jingyu^{3)†} LIU Pengfei⁴⁾⁵⁾ MA Jiangjiang^{2)‡}

1) (Department of Physics, Taiyuan Normal University, Jinzhong 030619, China)

2) (School of Physics and Electronic Engineering, Shanxi Normal University, Taiyuan 030031, China)

3) (Center for Neutron Scattering and Advanced Light Sources, Dongguan University of Technology, Dongguan 523000, China)

4) (Institute of High Energy Physics, Chinese Academy of Sciences (CAS), Beijing 100049, China)

5) (Spallation Neutron Source Science Center, Dongguan 523803, China)

(Received 30 December 2025; revised manuscript received 20 January 2026)

Abstract

One-dimensional (1D) transition metal chalcogenides (TMCs) have emerged as a unique frontier for exploring low-dimensional quantum phenomena and developing next-generation nanoscale devices. Among them, the M_6Q_6 family of nanowires is of particular interest due to its potential to host exotic states such as charge density waves and superconductivity. However, systematic theoretical understanding of the superconducting

properties across the M_6Q_6 family remains limited. In this work, we perform a comprehensive first-principles investigation into the electronic structure, lattice dynamics, and electron-phonon coupling (EPC) of 1D M_6Q_6 ($M = \text{Mo, W}$; $Q = \text{S, Se, Te}$) nanowires to elucidate their physical properties and superconducting potential. Structural optimization reveals that the 1D nanowires are constructed from face-sharing M_6 octahedral clusters encapsulated by chalcogen atoms, forming a rigid linear backbone. Our electronic structure analysis demonstrates a strong compositional dependence on the electronic ground state. The lighter chalcogenides ($Q = \text{S, Se}$) exhibit robust metallic behavior characterized by a high density of states (DOS) at the Fermi level (E_F), ranging from 7.12 to 12.6 states/eV. A distinctive feature of these metallic wires is the presence of a “flat-step” band dispersion near E_F , originating from the hybridization of transition metal d-orbitals (specifically d_{z^2} and $d_{xz,zy}$) and chalcogen p-orbitals. In contrast, the Te-based nanowires (Mo_6Te_6 and W_6Te_6) are identified as semiconductors with narrow indirect band gaps of 0.32 eV and 0.05 eV, respectively, driven by the distinct orbital interactions of the heavier chalcogen. Phonon dispersion calculations confirm that all metallic nanowires are dynamically stable, showing no imaginary frequencies. Notably, the S-based nanowires exhibit a pronounced Kohn anomaly in the low-frequency optical branches (10–20 meV), indicating significant phonon softening induced by strong electron-phonon interactions. The EPC analysis reveals that superconductivity in these systems is primarily driven by low-energy vibrational modes associated with the transition metal atoms. Specifically, for the Mo_6S_6 nanowire, which shows the strongest coupling ($\lambda = 0.56$), approximately 75.4% of the total EPC contribution arises from Mo vibrations below 24.0 meV. Based on the calculated EPC parameters, we predict intrinsic superconductivity in all metallic M_6Q_6 nanowires, with T_c values ranging from 0.1 K to 3.6 K. The Mo_6S_6 nanowire stands out with the highest T_c of 3.6 K, attributed to the synergistic effect of the “flat-step” band structure and the phonon softening associated with the Kohn anomaly. The heavier Se-based wires exhibit weaker coupling and consequently lower T_c values. These findings establish the 1D M_6Q_6 nanowires as a structurally stable and electronically tunable platform, offering significant promise for the engineering of high-performance low-dimensional superconducting devices.

Keywords: superconductivity, electron-phonon coupling, transition metal chalcogenides, first-principles

DOI: [10.7498/aps.75.20251790](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251790)

CSTR: [32037.14.aps.75.20251790](https://cstr.cn/32037.14.aps.75.20251790)

* Project supported by the Shanxi Scholarship Council of China (Grant No. 2025-198), the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12204292), and the Fundamental Research Program of Shanxi Province, China (Grant Nos. 202203021221215, 202203021222228, 202403021221164).

† Corresponding author. E-mail: ljingyu@dgut.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: majiangjiang@sxnu.edu.cn



一维 M_6Q_6 ($M = \text{Mo}, \text{W}; Q = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$)纳米线的电声耦合超导机制

郑晶晶 杨金文 马荣荣 袁志红 李静玉 刘鹏飞 马江将

Electron–phonon coupling superconductivity in one–dimensional M_6Q_6 ($M = \text{Mo}, \text{W}; Q = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$) nanowires

ZHENG Jingjing YANG Jinwen MA Rongrong YUAN Zhihong LI Jingyu LIU Pengfei MA Jiangjiang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 080715 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20251790

CSTR: 32037.14.aps.75.20251790

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251790>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

芳香超导体: 电–声耦合与电子关联

Aromatic superconductors: Electron–phonon coupling and electronic correlations

物理学报. 2023, 72(23): 237403 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20231751>

双轴应变对单层Janus过渡金属硫族化合物热输运和热电性能的影响

Influence of biaxial strain effects on thermal transport and thermoelectric performance of Janus transition metal dichalcogenide monolayers

物理学报. 2025, 74(13): 137202 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250295>

高压调控过渡金属硫族化合物及异质结构的光电性质

Optoelectronic properties of high pressure regulated transition metal chalcogenides and their heterostructures

物理学报. 2025, 74(17): 176802 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250498>

新型四元硫族化合物光伏特性的高通量筛选和第一性原理研究

Photovoltaic properties of novel quaternary chalcogenides based on high–throughput screening and first–principles calculations

物理学报. 2024, 73(17): 176301 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240795>

过渡金属硫族化合物模所有Davydov组分的室温拉曼检测

Room–temperature Raman detection of all Davydov components of mode in transition metal dichalcogenides

物理学报. 2025, 74(20): 206301 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250960>

金属Sc修饰 Ti_2CO_2 吸附气体分子的第一性原理研究

First–principles study on adsorption of gas molecules by metal Sc modified Ti_2CO_2

物理学报. 2024, 73(7): 073101 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231432>