

# 低温和高温超导统一理论

刘正荣

ZJL@CS.Stanford.EDU

此内容由人工智能(AI)辅助翻译,若未达意,请查阅[原文](#)

## 摘要

超导体在诸多领域具有巨大应用潜力,并可能对人类社会产生深远影响。尽管相关研究已广泛开展,至今仍未实现具备实用价值的室温超导体。BCS理论无法解释高温超导现象,这一难题或许源于传统模型错误地将导体中的电阻归因于电子流动过程中的粒子碰撞。本文提出一种替代理论加以解释。从剪切阻力的角度来看,物质可呈现固态或流体状态。类似地,在不同的温度与压力条件下,同一种物质的电阻状态也可表现为绝缘体、导体或超导体。这些状态主要由分子间作用力所形成的电子通道(electron tunnel)决定。电子可以通过这些等电势通道,跨越分子移动,从而形成电流。在导体中,电子受限于分子内部,处于低于电子轨道的位置;产生电流需将电子激发至电子通道中,因此需要能量,进而产生电阻。通过压缩分子间距,可以缩小价电子轨道与电子通道之间的差距,降低电阻。随着压力进一步增加,该差距可趋近于零,使价轨道与电子通道重回,电子无需额外能量即可进入通道,实现零电阻,进入超导状态。这解释了电阻率与压力呈反比关系的原因,也说明了为何许多高温超导体在高压条件下能实现。低温下,电子回归较低能级轨道,导致分子间距减小,进而降低分子间排斥力,产生类似压缩的效应。这进一步说明了电阻率随温度下降而减小的趋势,以及传统超导体主要出现在低温条件下的原因。而在绝缘体中,分子间距较大,导致电子通道不连通,电子无法自由移动。通过施加高压可减小分子间距,从而使电子通道重新连通,这解释了部分陶瓷材料在高压下转变为超导体的现象。该理论将绝缘体、导体与超导体统一为在不同压力与温度条件下物质所呈现的不同电阻率状态。这些状态的本质区别在于电子通道的连通程度,以及通道与价电子轨道之间的间隙大小。这一理论对合成室温超导体提出了关键启示:必须有效压缩分子间距。然而,目前通过施加高压实现超导的方式在实际应用中存在明显局限性,其主要障碍是分子间的强排斥力。一个可行的替代方案是通过分子结构设计,利用特定分子间的吸引力来克服排斥作用,从而在常压条件下构建稳定的电子通道,实现室温超导。

## 前言

自1911年超导现象首次发现以来,因其卓越的物理特性与广泛的应用前景,超导性始终是物理学研究的核心方向之一<sup>[1-2]</sup>。当前,能源短缺已成为制约经济增长的关键因素,人工智能模型的训练更凸显出能源瓶颈的影响。从宏观角度看,能源的获取能力决定了文明发展的上限。聚变反应被认为是未来最具前景的清洁能源方案,而托卡马克(Tokamak)聚变反应堆的关键在于利用强磁场约束高温等离子体中的带电粒子。若使用常规导体线圈产生磁场,将导致巨大能量损耗。因而,超导体是构建能量收支平衡的聚变反应堆的核心材料。

BCS(Bardeen-Cooper-Schrieffer)理论提出,超导性源于电子-声子相互作用所形成的库珀对(Cooper pairs)<sup>[3]</sup>。然而,该理论面临两项核心挑战。其一,在于理论假设:自由电子会吸引周围原子核,形成正电荷高密度区域,从而建立电子-声子耦合并促成库珀对。然而,现实中原子核被电子云包围,自由电子在短程内主要受到排斥力作用,反而会排斥附近原子核,形成低密度正电荷区域。这一现象与BCS理论的基本假设相矛盾,削弱了其物理基础。

其二，则来自高温超导现象。理论认为，电子-声子相互作用仅在低温下显著，高温下晶格热振动增强将破坏库珀对，导致超导消失。然而，自1986年以来，大量超导材料在远高于BCS理论预测温度下实现超导<sup>[4-8]</sup>。此外，许多高温超导体需在高压下才能表现出超导性，而BCS理论无法解释压力对超导性的积极作用。

BCS理论还难以解释大量实验中观察到的其他超导现象，本文将进一步探讨<sup>[9]</sup>。问题的根源或许在于BCS理论默认的Drude模型对电阻机制的错误假设。Drude模型认为，导体内存在自由电子形成的“电子海”，其在晶格中流动形成电流，电阻则源于电子与晶格的碰撞散射。BCS理论据此认为，库珀对可减少电子-晶格散射，从而降低电阻，实现超导。

但Drude模型的基本前提本身值得质疑。传统理论认为，电子海作为正离子（带正电的原子核）间的“粘合剂”形成所谓的金属键，维系导体结构稳定性。然而，若将电子海移除，这些正离子将因相互排斥而使晶格瓦解。也就是说，这种流动（不固定）的“粘合”理论难以解释导体在宏观层面表现出的高机械稳定性能。实际上，导体可承受较大的剪切和拉伸应力，这显然与电子海模型所预期的不稳定状态相冲突，进而也动摇了金属键传统理解的根基。

在高压条件下，Drude模型对于电阻的解释亦与实验不符。该模型认为，压力增大会导致原子间距缩小，电子与晶格碰撞频率升高，从而提高电阻<sup>[10]</sup>。然而实验表明，在所有类型材料中，无论是绝缘体、导体还是超导体，电阻率在压力增加时均呈下降趋势<sup>[11-13]</sup>。在某些材料中，电阻甚至可降至零，形成超导态。更有甚者，许多超导材料本身并非金属，如陶瓷类，在常压下为绝缘体，仅在高压下表现出超导。这些结果与Drude模型的预测完全相反，表明我们对电阻和超导的理解亟需更新。

这些理论在解释高压下电阻与超导特征方面的失效，并非偶然，很可能源于对电子-晶格碰撞机制和电子海假设的根本误解。这些错误认知可能误导研究方向，阻碍了室温超导体的理论突破与材料发现。

因此，我们认为：导致电阻与超导的本质并非两种不同的物理机制，而是源于相同机制下的不同表现。为此，本文引入“电子通道”（electron tunnel）概念，认为电子通道在分子间距足够接近时形成，是决定电流传导能力的关键因素。材料的电阻性由分子间距决定，而分子间距受温度和压力动态调控。因此，电阻率与温度、压力密切相关，而绝缘、导体和超导体只是材料在不同分子间距条件下的电学相态表现。

接下来的章节中，我们将通过简化模型阐述该理论的核心概念。通过分析简单分子的晶体结构，建立可预测电子通道形成与导电特性的数学模型。模型表明，超导性并非特殊现象，而是物质在特定条件下常见的电学相态，特别是在高压下。此外，超导、导电与绝缘三种电学状态，可视为分子间距随压力和温度条件变化所引发的相变结果。这为理解电阻机制提供了新视角，并为室温超导材料的理论设计提供方向。

需要说明的是，本文采用的模型经过简化处理，仅用于阐述新理论的基本思路。实际中，大分子体系中的电子通道结构可能远比模型复杂，数学建模难度更高。但理论框架仍具有良好的可扩展性，有助于室温超导体的设计与合成。

## 电子通道简介

电子通道是指导体中分子之间形成的电子路径网络，使电子能够在分子间以相同的电势（或能级）移动，从而形成电流。若电子的能级低于电子通道的能级，它将被局限在宿主原子或分子的轨道中，无法跃迁至其他分子，因此无法产生电流。要在导体中形成电流，电子必须获得足够的能量以进入电子通道。由此，导体中的空间可划分为两类区域：其一为分子间互联的电子通道网络，其二为围绕各原子或分子的局域轨道区域。在绝缘体中，由于分子间距较大或轨道重叠不足，电子通道不连通，无法形成连续的电流路径。

超导体则是一种特殊的导体，其价电子轨道延伸并与电子通道发生重叠。由于这种空间与能级上的对接，价电子无需额外激发能即可自然进入电子通道，实现无能量损耗的自由移动，表现出零电阻的超导特性。为进一步说明电子通道的概念，我们引入一个简化模型。如图0所示，将一个质子置于氢原子附近。当它们距离较远时，从量子力学角度来看，电子大概率分布在氢原子周围。随着两者距离减小，该分布概率逐渐变化，形成朝向质子的电子概率流。当距离达到某一临界值时，电子在两个质子之间的分布趋于均衡，意味着电子可以在二者之间有效地流动，这一现象正体现了电子通道的基本物理机制。

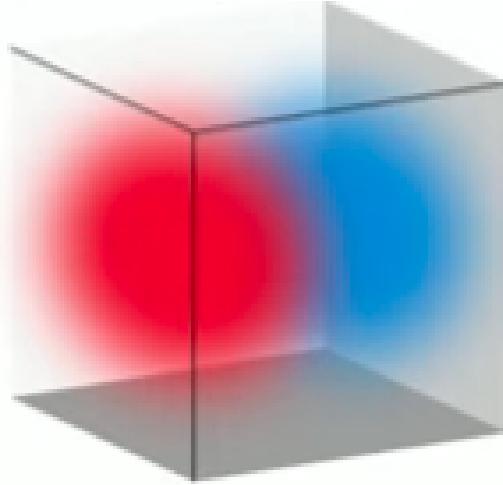


图0. 氢原子邻近质子的量子力学模型

当多个质子彼此足够靠近时，电子能够在它们之间自由移动，产生电流，进而使氢表现出超导特性。因此，氢分子中的共价键可以认为是两个质子间共享的电子的一条超导通道。电子在质子间的运动路径即为我们所称的“电子通道”。因此，氢分子本质上可视为超导体的微观单元。

在上述模型中，当邻近的质子足够接近时，氢原子中的电子会受到其吸引。一个关键问题是：这种吸引力从何种距离开始显现？这一距离决定了超导电子通道是否能形成。原则上，该临界距离可通过求解薛定谔方程获得；但当模型扩展至更复杂体系时，该方法将变得高度复杂且计算代价较高。因此，本文将采用基于经典物理的简化方法，以更直观地阐释电子通道的形成机制。

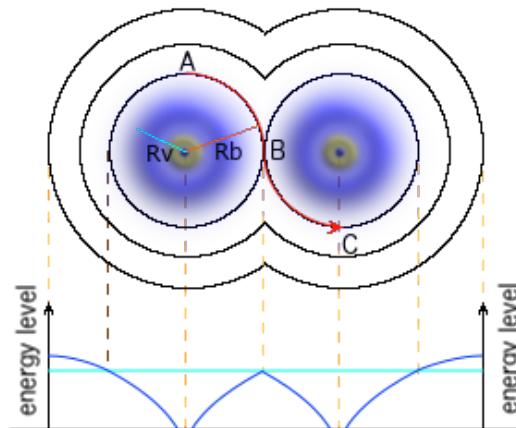


图1. 利用一个简化模型展示电子通道的概念，该模型由一个氢原子与其邻近的质子构成。在该模型中，价电子同时受到宿主原子核与邻近质子的吸引，二者之间形成的电子通道使电子能够在它们之间自由移动。图中，蓝色短线表示

价电子轨道的半径，记作 $R_v$ ；红色短线表示从氢原子核到氢原子与质子之间边界（即中点）的距离，记作 $R_b$ 。图中等高线表示不同能级下的轨道分布与通过两个质子中心的平面相交所形成的轮廓线。图下方的蓝色曲线显示了质子在空间中不同位置处的电势分布。电子通道中的电子可以沿等势能路径（例如路径A-B-C）在两个质子之间迁移，实现等势能态下的无能量损耗移动。这一模型形象地刻画了电子通道的形成机制和能量特性。

如图1所示， $R_b$ 表示从原子核中心到氢原子与质子之间边界（简化为中点）的距离； $R_v$ 则代表价电子轨道的半径，该值可能随温度变化而改变<sup>[14]</sup>。问题可简化为：当 $R_b$ 足够小，使电子受到邻近质子的吸引并发生跃迁，即可认为电子通道得以形成。

随着原子间距的进一步减小，电子云与轨道形状将发生畸变，进而在原子或分子之间诱导出局部电场和分子键。这种现象将在后续内容中探讨，尤其是在分析“压缩键”形成机制时。为了简化当前分析，暂忽略上述变形效应，并引入一个“吸引系数”以定量描述分子间不均匀引力场的作用。以后我们将通过分子键的作用强度构建电子通道模型。需要说明的是，本文所指的“价电子”，是指原子最外层的电子，其能级不一定处于基态。

为解答上述问题，我们需计算电子沿两个原子核连线，从其轨道位置 $r$ 跃迁到边界位置 $R_b$ 所需的能量。这一过程涉及电子在该路径上的总能量差。电子在该系统中同时受到宿主原子核与邻近质子的库仑吸引力，其能量变化可通过计算这两者作用下的势能差来获得：

$$(1) \quad F = \frac{Kq_1q_2}{d^2}$$

其中， $K$ 表示库仑常数，负值 $F$ 表示电荷 $q_1$ 与 $q_2$ 在距离 $d$ 处相互吸引力。沿质子与氢原子核中心连线方向，电子所受的库仑力 $F_e$ 可表示为：

$$(2) \quad F_e = KQe \left[ \frac{1}{r^2} - \frac{1}{(2R_b - r)^2} \right]$$

其中， $Q$ 表示质子的电荷， $e$ 为电子的电荷量， $r$ 表示价电子的轨道半径。电子的电势差 $E_u$ 即为在外力作用下将电子从轨道半径 $r$ 移动到边界位置 $R_b$ 所需做的功，可通过对库仑力 $F_e$ 在该距离区间上的积分来计算：

$$(3) \quad E_u = - \int_r^{R_b} F_e dx \\ = - \int_r^{R_b} KQe \left[ \frac{1}{x^2} - \frac{1}{(2R_b - x)^2} \right] dx \\ = - KQe \left[ \frac{1}{r} + \frac{1}{2R_b - r} - \frac{2}{R_b} \right]$$

当然，还需考虑电子动能的变化。当电子以距离其原子核为 $d$ 的轨道运动时，其所需的向心力为：

$$(4) \quad F_c = ma \\ = m \frac{v^2}{d}$$

其中,  $m$  表示电子的质量,  $a$  为加速度,  $v$  表示电子的速度, 向心力  $F_c$  由式(2)中的引力提供, 即  $F_c = -F_e$ 。式(2)中的负号表示该力为吸引力。电子在边界位置  $R_b$  处的动能为:

$$(5) \quad E_{R_b} = \frac{1}{2}mv^2 \\ = -\frac{KQe}{2} \left[ \frac{R_b}{R_b^2} - \frac{R_b}{(2R_b - R_b)^2} \right] \\ = 0$$

电子在轨道半径  $r$  处的动能为:

$$(6) \quad E_r = \frac{1}{2}mv^2 \\ = -\frac{KQe}{2} \left[ \frac{1}{r} - \frac{r}{(2R_b - r)^2} \right]$$

边界位置  $R_b$  与轨道位置  $r$  之间的动能差为:

$$(7) \quad E_k = E_{R_b} - E_r \\ = -\frac{KQe}{2} \left[ \frac{r}{(2R_b - r)^2} - \frac{1}{r} \right]$$

将电子从轨道位置  $r$  提升到边界位置  $R_b$  所需的总能量为:

$$(8) \quad E = E_k + E_u \\ = -\frac{KQe}{2} \left[ \frac{1}{r} + \frac{2}{2R_b - r} + \frac{r}{(2R_b - r)^2} - \frac{4}{R_b} \right]$$

方程(8)可被视为一个三维曲面, 展示了在  $r$ - $R_b$  平面上的需要提升电子的能量分布。对于固定的  $r$  值, 也可用二维曲线来描述提升能量随  $R_b$  的变化关系。为解答前述问题, 只需令方程(8)中的能量  $E=0$ , 并求解, 所得结果为:

$$(9) \quad R_b = \frac{3+\sqrt{5}}{2}r \\ \approx 2.618r$$

这表明, 当质子距离氢原子核中心约为  $5.236r$  (即  $2 \times 2.618r$ ) 时, 价电子能够被质子吸引并发生漂移。电子在轨道半径  $r$  处即可开始漂移, 这一距离远小于边界  $R_b = 2.618r$ 。轨道半径介于  $r$  与  $2.618r$  之间的区域即为漂移区。换句话说, 电子可以沿着宽度为  $3.236r$  的中心区域, 在两个质子间自由漂移, 这一区域即是质子之间电子通道的一部分。

如果在晶体中, 将这样的分子以此间距相互排列, 这些分子间的中心漂移区域将连成连续的通道, 使电子能够在相同能级上自由流动, 形成连贯的电子通道网络。

## Required Energy to Lift Electron to Border

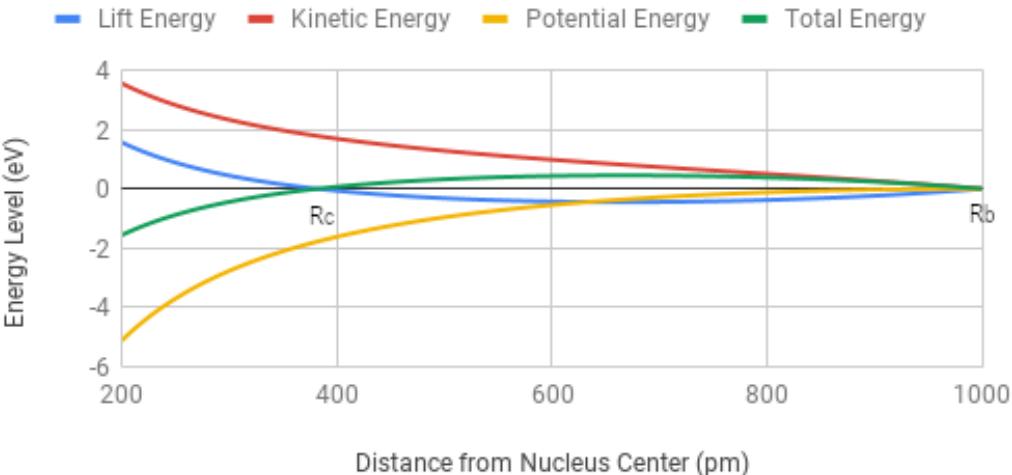


图2. 将氢原子中的电子提升至氢原子与质子之间边界所需的能量示意图(两者相距2000皮米)。蓝色曲线表示电子提升至两个核边界所需的能量, 横坐标从氢原子核中心延伸至右侧的质子位置。 $R_b$ 表示边界位置, 取值为1000皮米, 用于计算方程(8)中的提升能量。随着电子轨道半径接近边界, 提升能量由正值逐渐降低至零, 并在 $R_c$ 处变为负值, 表明电子开始脱离其原子核的束缚。提升能量为负的区域对应电子通道中质子之间的范围。图中仅展示氢原子一侧的能量分布, 整体对称于边界位置。图中还绘制了基于方程(7)计算的电子动能(红色)、根据方程(3)计算的势能(黄色)以及动能与势能之和的总能量(绿色)。总能量曲线与提升能量(蓝色曲线)呈反向关系。

另一种视角是将方程(8)看作一条曲线, 表示在固定 $R_b$ 条件下, 提升轨道半径为 $r$ 的电子至边界所需的能量, 如图2中蓝色曲线所示。曲线表明, 随着电子轨道半径增大, 提升能量逐渐下降, 并在某一临界半径 $R_c$ 处降为零。该临界半径 $R_c$ 可通过变换等式(9)获得:

$$(10) \quad R_c = \frac{3-\sqrt{5}}{2} R_b$$

方程(10)表明, 当电子的轨道半径超过 $R_c$ 时, 电子无需额外能量即可向质子方向漂移。这意味着价电子在达到或超过该半径时, 会倾向于脱离其宿主原子, 向质子移动, 从而有可能引发电流的产生。因此,  $R_c$ 被称为导电半径, 代表分子间电流开始流动的临界条件, 即:

$$(11) \quad R_v \geq R_c$$

其中,  $R_v$ 表示价电子的轨道半径。换个角度来说, 电子通道可定义为分子间高于导电半径 $R_c$ 的区域。由于图2仅展示了氢原子一侧的曲线,  $R_c$ 到 $R_b$ 之间的空间仅为电子通道宽度的一半。当价电子处于该区域, 意味着它们进入了电子通道, 能够在分子间自由漂移, 产生电流。

导电半径 $R_c$ 的关键作用是划分电子是否被束缚。当电子轨道半径小于 $R_c$ 时, 电子仍被限制在其宿主原子或分子的轨道内。此时电子可能受扰动, 轨道升高伴随势能增加和动能减少, 而动能的降低不足以抵消势能的升高(图2中绿色曲线的负值区域)。

因此，电子速度会减慢，趋于回归其轨道平衡位置。类似地，当电子进入较低能级时，势能下降转化为动能，动能过剩也会促使其回归轨道平衡位置。由此，没有获得足够能量的电子即使受扰动，仍局限于宿主轨道内。

反之，当价电子轨道半径大于 $R_c$ 时，电子不再受宿主原子核束缚。图中绿色曲线的正值表示动能过剩。当电子受到扰动时，会推动电子脱离原子核束缚，漂移向邻近质子。质子获得电子后变为氢原子，而原宿主氢核变为单质子，氢-质子结构关系反转。电子亦可漂移回初始氢核，形成两个质子间的共享电子，类似共价键。不同的是， $H_2$ 分子中的共价键电子被紧密束缚，无法逃逸产生电流，因此固态氢气非导体。

相比之下，氢-质子模型中被束缚的电子在存在多个邻近质子时（如金属氢中）可能不再受限。产生电流不仅需要两分子间的电子通道，还需周围分子间形成良好连接的电子通道网络。考虑含有多个质子的金属氢晶体，原子间的电子通道相互连通，形成电子流动网络。处于电子通道内的电子可沿等势能级跨越不同原子或分子漂移，而非局限于单个 $H_2$ 分子。电子在电子通道中的运动产生电流。电子通道的意义在于构建一个同能级电子路径的共享网络，促进电子在分子间顺畅流动。

孤立氢原子无邻近质子时，电子总能量为负，且随距离趋近于零。图2中出现的正能量源于邻近质子作用，说明电子通道由质子影响产生。

以上讨论聚焦于氢原子与邻近质子间的相互作用。类似地，带空穴的分子也能产生质子般的作用，与邻近分子形成电子通道。下文将进一步扩展该模型，涵盖更多典型分子间键的复杂相互作用。

## 压缩键

与孤立原子不同，分子的电子会受到邻近分子电场的影响，从而调整电子云并重新分布。电子分布的不均会产生局部电场，例如伦敦色散力<sup>[15]</sup>，进而在分子之间形成各种类型的分子键。在固体中，这些键将分子紧密结合；在液体中，它们体现为液体的粘性。分子间的吸引力具有普遍性，并有助于电子通道的形成，因此上文所提出的模型具备进一步扩展和推广的基础。

作为分子间作用力的一个例子，我们将探讨一种在高压条件下诱导产生的新型分子键——**压缩键**(compression bond)。这一概念最早在超流体研究中提出<sup>[16]</sup>。常压下，伦敦色散力会在普通氦分子之间产生吸引，从而形成具有粘性的液态氦。然而，当温度降低时，氦原子的电子跃迁至更低的轨道，伦敦色散力随之减弱，最终消失，如图3A所示。当分子间吸引力消失，液体不再具有粘性，氦分子因此表现出超流特性。可以说，所谓“超流体”实际上不是真正的流体，而是一种由完全不相互作用的独立分子构成的集合体。在此状态下，继续降温也无法使其凝固为固体，只有施加足够的压力，才能获得固态氦<sup>[17]</sup>。

在高压作用下，氦分子被压缩至极小间距。由于邻近分子的电排斥作用，每个氦分子的电子云沿穿过两个质子的轴线方向发生收缩，如图3B所示。由于电子在不同方向上的分布密度不均，形成了局部电场：在质子轴线方向上电子分布稀疏，表现为正极性，而在垂直于该轴线的平面边缘则负电荷分布密集，呈现负极性。

正负电场之间的吸引促使分子重新排列，以降低分子间的整体势能。最终，分子结构形成一种能量最小的稳定构型，如图3B所示，并由此形成压缩键。图中展示的是两个分子在压缩键作用下的最紧密排列形式。压缩键正是固态氦中分子结合的主要机制<sup>[18]</sup>。

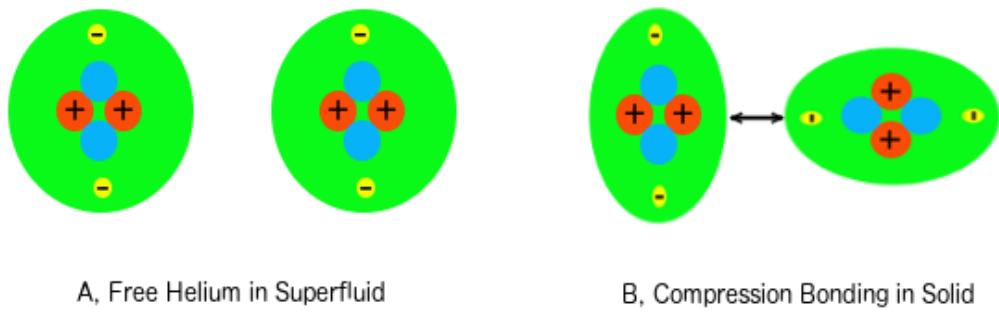


图3. 高压下氦分子间形成的压缩键。A) 在常压下, 通过降低温度可使液态氦转变为超流体, 此时伦敦色散力逐渐消失。然而, 与大多数物质不同, 氦无法通过进一步降温形成固体, 因为分子间缺乏足够的吸引力。要获得固态氦, 必须施加额外的压力。B) 在高压条件下, 氦分子的电子云沿质子连线方向发生收缩, 导致不同方向上的电子云密度分布不均, 进而形成局部电场。这种由压力诱导产生的分子间吸引作用被称为“压缩键”。固态氦即由这种压缩键将分子结合在一起。

在常态氢中,  $H_2$ 分子中两个氢原子之间的共价键可视为一个局部电子通道, 使电子能够在两原子之间自由移动。然而,  $H_2$ 分子间的排斥作用使它们保持较大的分子间距, 阻碍这些局部电子通道连接成连续网络。缺乏互联的电子通道, 电子便无法在不同 $H_2$ 分子之间迁移, 因此常态液态氢为绝缘体。然而在高压下, 氢会转变为金属态<sup>[18-19]</sup>。我们的研究认为, 原有的共价键在高压下转化为压缩键<sup>[16]</sup>, 从而形成分子间的电子通道网络, 使普通氢分子转变为金属氢。

在由单原子分子构成的物质中, 压缩键可能具有普遍性, 因为地球上的大多数物质都处于一定的环境压力之下。压缩键产生的分子间吸引力, 有助于电子通道的形成, 其机制与上文所述基本一致。多数导体和超导体中电子通道的形成, 可能与压缩键的存在密切相关。

### 电流、电阻与超导

要深入理解电流、电阻与超导现象, 首先必须纠正传统模型中对这些概念的一些误解, 尤其是电阻的碰撞模型。许多理论和模型的默认假设, 电流是电子在导体中分子间“自由空间”中的流动。然而, 这一假设是错误的, 因为导体分子之间的空间对电子来说从来不是真正的“自由空间”。

宏观上, 分子、原子整体上表现为电中性。但当分子之间距离足够接近时, 它们之间会产生电场, 引发各种相互作用力, 从而将它们结合在一起。如果分子之间不存在吸引力, 就不会有固体或液体的存在, 只有像超流体那样彼此分离的单个分子。大多数粘性液态或固态物质的存在, 正说明分子间的吸引力普遍性。因此, 分子之间的空间从不是真空, 而是充满了电场。

电子带负电, 会受到这些电场的影响, 因此通常既不能在单个原子或分子内部自由运动, 也不能在导体的分子之间自由穿行。在原子或分子内部, 电子受限于其轨道, 并在相应能级上运动。尽管轨道可能因扰动而发生变化, 但若不与外界交换能量(如吸收或释放光子), 电子无法跃迁到别的能级。

原子内部的电子由原子核产生的电场束缚，其轨道也因此定义。而所谓“电子通道”，可视为一种特殊的轨道，是跨越多个分子共享的电子路径。若电子要在电子通道中运动，必须具备与之相应的能量。低于该能量时，电子仍被束缚在其宿主分子、原子中；高于该能量后，电子脱离了宿主分子的控制，便可在电子通道中穿越不同分子自由运动，从而产生电流。

在导体中，电子可能沿电子通道从一个分子漂移到另一个分子，这种负电荷的迁移被称为“电子漂移(electrodrift)”。在漂移过程中，电子的能量水平保持不变。电子在漂移前，需先吸收额外能量，激发至电子通道中。当电子跃迁并漂移至下一个分子后，会在原位置留下一个电子空穴，该空穴可由后来其它电子填补。一系列电子空穴的迁移也可形成电流，表现为正电荷的流动，类似于阳离子的移动。因此，电流可由负电或正电荷的运动形成。

即使存在电子通道，在导体中通常也不会自发产生电流。这些通道并非空旷的空间，而是存在势垒，如图4A所示。若电子要从一个分子迁移到另一个分子，必须克服这些势垒。因此，电子必须获得额外能量，才能跃迁至电子通道，在分子之间形成电流。这种能量可以来自外加电场(如电压)或磁场(如发电机中)。

这部分激发电子的能量称“提升能”，本质上是对抗其宿主原子核库仑引力所需做的功。电子获得足够能量后，便可跃迁进入电子通道，在分子之间流动形成电流。但电子时常会回落至电子空穴中，其先前吸收的能量则以电磁波的形式发射。部分成为热量耗散。因此，电阻的根本来源是电子为克服库仑引力所需能量的耗散，而非传统模型中所认为的粒子之间的碰撞。

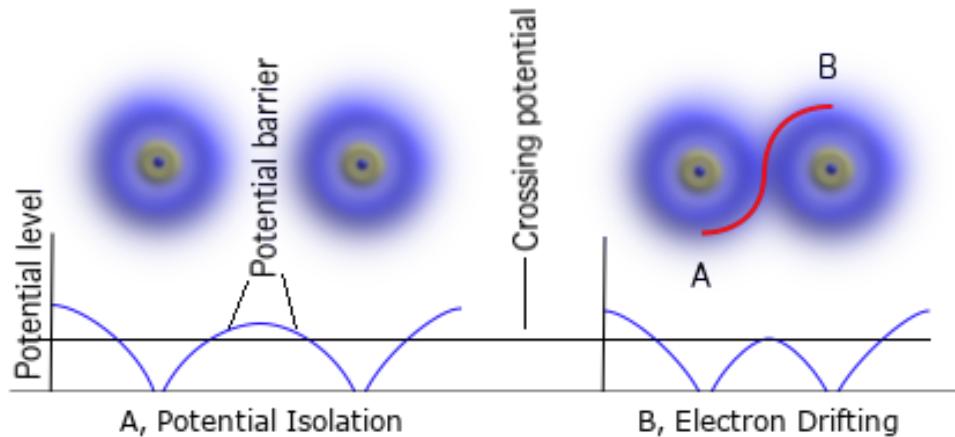


图4. 普通导体与超导体的区别。图中显示，每个原子核都会在周围产生电场，用以吸引电子。图下方的蓝色曲线表示电子的能量或电势分布，其中水平方向表示电子距各自原子核中心的距离，垂直方向表示势能的高低。A)当两个原子或分子之间的距离较大时，它们之间存在明显的能垒，电子必须获得额外能量才能提升到靠近边界处的电子通道，从而在分子间发生漂移。这种“提升能”是电子跨越能垒的能量来源，也是导体电阻的根本原因。B)在超导体中，分子间距离较小，价电子轨道与电子通道发生重叠，不再存在能垒。这种重叠可通过增加压力或降低温度实现，从而将电子通道压低至与价轨道重叠，使电子无需额外能量即可在分子间漂移，如红色路径A-B所示。因此，电子在超导体中可无阻力地流动，表现为零电阻。

与普通导体不同的是，在超导体中，价电子轨道与电子通道发生重叠，而非处于电子通道之下。这种重叠使得价电子无需额外提升能量即可进入电子通道，在分子之间自然漂移，如图4B所示。因此，电子在超导体中可无能耗地漂移，电阻降为零，表现出超导性。通过增加压力或降低温度，可动态地将电子通道压低至与价轨道重叠。这一机制将在下文进一步讨论。

绝对零度以上，任何物体都不断与周围环境交换能量。在热平衡状态下，净能量交换为零。此时，导体中的价电子平均能量应高于基态轨道，从基态轨道跃迁到电子通道所需的总能量 $E_t$ 可以分为两个部分： $E_v$ ，从基态轨道跃迁至价轨道所需的能量和 $E_c$ ，从价轨道提升到电子通道所需的能量：

$$(12) \quad E_t = E_v + E_c$$

在热平衡状态下， $E_v$ 由环境维持或提供，代表电子从基态跃迁至价轨道所需的能量。而 $E_c$ 是将电子从价轨道进一步提升至电子通道所需的额外能量，代表在导体中产生电流所需做的功，也正是导致电阻的部分。然而，在超导体中，价轨道与电子通道发生重叠，电子无需额外能量即可进入电子通道实现漂移，即 $E_c = 0$ 。因此，式(12)可简化为：

$$(13) \quad E_t = E_v$$

该公式表明，在超导体中，电子的总提升能量由环境提供并持续。这一机制预示了超导体的临界电流密度与其临界温度之间存在正相关关系，该关系将在后文“临界电流密度”一节中详细探讨。

从环境的角度来看，超导体在热平衡状态下会将损耗的能量通过辐射等形式补返回环境。因此，只要系统未从外部持续汲取更多的能量，整个系统就遵循能量守恒定律。也就是说，尽管超导体内部存在电流和磁场，但这些能量并不能被“免费”提取或利用。

理论上，当超导体处于绝对零度时，其与环境之间不再发生能量交换，价电子轨道回到基态水平。但方程(12)和(13)依然成立，这是因为：

$$(14) \quad E_t = E_v = E_c = 0$$

### 电子通道的扩展模型

上文提出的电子通道是基于一个简化的模型：一个氢原子邻近一个质子的相互作用下形成。然而，现实中电子通道可以在多种由分子键相互作用下形成。当分子间距离足够小，原子或分子的外层电子云会发生畸变，导致电场分布变化，从而诱发分子键。这些分子键对于电子通道的形成至关重要。需要特别指出的是，共价键等分子内键允许电子在单个分子内部的原子之间移动，但并不具备跨越不同分子传导电流的功能。而我们所关注的是分子键，如压缩键等，这类键可以通过在导体中建立互联的电子通道网络，使电子在分子之间实现漂移，从而形成电流。

为了研究键合强度对电子通道形成的影响，并估算电子通道在导体中的扩展程度，我们引入了一个新的概念：吸引系数，用符号 $c$ 表示。该系数量化了相邻分子对某一电子施加的吸引强度。假设电子受到其母体原子核的吸引力相当于来自一个电荷为 $Q$ 的中心，那么来自相邻分子（通过键合作用）的吸引力可以建模为来源于电荷为 $cQ$ 的虚拟点，其中 $c \leq 1$ 。利用该吸引系数，可以构建两个分子对电子的作用力，进而计算出电子的能级分布以及分子间中心轴线上的势能场。

为估算将一个电子从轨道半径 $r$ 提升至边界 $R_b$ 所需的能量，需要同时考虑来自两个相邻分子的合力。在原有模型的基础上，若引入吸引系数 $c$ ，我们可以对之前的方程(2)进行如下修正：

$$(15) \quad F_e = KQe \left[ \frac{1}{r^2} - \frac{c}{(2R_b - r)^2} \right]$$

其中,  $c \leq 1$  表示相邻分子之间的吸引系数。当  $c=1$  时, 模型描述的是一个普通分子邻接一个带有电子空穴的分子, 类似于之前方程 (2) 中所描述的“氢原子-质子”模型。当  $c=0$  时, 表示该分子周围不存在邻近分子的情形。而当  $c < 0$  时, 表示分子间存在排斥作用, 这种情况可能出现在绝缘体中的某些原子或分子之间。在  $0 < c < 1$  的范围内, 该系数模拟了分子间不同强度的键合力。实际上, 正如稍后将进一步阐述的那样, 吸引系数的数值决定了材料的电性状态: 绝缘体、导体还是超导体。当  $c$  较小时 (例如  $c < \frac{1}{4}$ ), 对应于较弱的分子间吸引力, 常见于绝缘体; 而当  $\frac{1}{4} < c < 1$  时, 则代表分子间具有不同强度的有效吸引力, 常见于导体和超导体中。

接下来, 我们将模型进一步拓展, 考虑晶格结构中两侧更远位置上的两个分子对电子的作用力。也就是说, 我们要引入来自第二层相邻分子的影响。相应地, 对原有的方程 (15) 进行修正如下:

$$(16) \quad F_e = KQe \left[ \frac{1}{r^2} - \frac{c}{(2R_b - r)^2} + \frac{c}{(2R_b + r)^2} - \frac{1}{(4R_b - r)^2} \right]$$

现在, 我们进一步考虑来自中心线上更远处分子的作用, 并将这种影响持续扩展。所有沿中心轴线排列的分子对电子施加的总作用力, 是每个分子通过库仑力产生的吸引力之累加和, 即:

$$(17) \quad F_e = KQe \sum_{i=0}^N \left[ \frac{c^{i \% 2}}{(2iR_b + r)^2} - \frac{c^{(i+1) \% 2}}{(2(i+1)R_b - r)^2} \right]$$

其中, 符号  $\%$  表示取模运算 (MOD),  $N$  表示沿直线排列的分子数量, 其大小应根据导体的维度而定。在导体的晶格中, 分子不仅沿该中心轴线排列, 还分布于其周围。然而, 对于足够大的导体来说, 来自周围分子的作用力可以近似认为相互抵消。因此, 我们仅需考虑沿该轴线排列的分子, 式 (17) 已足以用于建立该模型。此外, 该模型也可进一步推广至较大分子的情形, 此时  $Q$  可被理解为等效正电荷, 代表在考虑其他电子影响的前提下, 对电子施加库仑力的等效核电荷。

现在, 电子从轨道半径  $r$  移动至两分子之间的边界  $R_b$  所需的能量, 即势能差  $E_u$ , 可通过对式 (17) 中的作用在电子上的合力从  $r$  到  $R_b$  进行积分得到:

$$\begin{aligned} (18) \quad E_u &= - \int_r^{R_b} KQe \sum_{i=0}^N \left[ \frac{c^{i \% 2}}{(2iR_b + x)^2} - \frac{c^{(i+1) \% 2}}{(2(i+1)R_b - x)^2} \right] dx \\ &= - KQe \sum_{i=0}^N \left[ \frac{-c^{i \% 2}}{2iR_b + x} + \frac{-c^{(i+1) \% 2}}{2(i+1)R_b - x} \right]_r^{R_b} \\ &= - \frac{KQe}{2} \sum_{i=0}^N D_u(i) \end{aligned}$$

其中

$$(19) \quad D_u(i) = \frac{2c^{i \% 2}}{2iR_b + r} + \frac{2c^{(i+1) \% 2}}{2(i+1)R_b - r} - \frac{2c^{i \% 2} + 2c^{(i+1) \% 2}}{2iR_b + R_b}$$

电子在距离原子核r处的动能，也可由式(17)计算得到：

$$(20) \quad E_r = -\frac{KQe}{2} \sum_{i=0}^N \left[ \frac{rc^{i/2}}{(2iR_b+r)^2} - \frac{rc^{(i+1)/2}}{(2(i+1)R_b+r)^2} \right]$$

$R_b$ 与r之间的电子动能差为：

$$(21) \quad E_k = -\frac{KQe}{2} \sum_{i=0}^N D_k(i)$$

其中

$$(22) \quad D_k(i) = \frac{rc^{(i+1)/2}}{(2(i+1)R_b+r)^2} - \frac{(c^{(i+1)/2} - c^{i/2})R_b}{(2iR_b+R_b)^2} - \frac{rc^{i/2}}{(2iR_b+r)^2}$$

因此，将电子从轨道半径r提升至分子间边界 $R_b$ 所需的总能量 $E_c$ ，为式(18)与式(21)中估算的势能与动能之和，即：

$$(23) \quad E_c = E_u + E_k \\ = -\frac{KQe}{2} \sum_{i=0}^N [D_u(i) + D_k(i)]$$

需要注意的是，上述方程中的求和项体现了导体的两个微观特性：分子间的键合强度以及从价电子轨道到电子隧道的距离。这两个因素共同决定了导体的诸多宏观特性。为便于后续引用，我们将这一项称为“**电阻距**”。

$$(24) \quad D = \sum_{i=0}^N [D_u(i) + D_k(i)]$$

导体的电阻距决定了产生电流所需的能量，因此直接影响其电阻率。该术语集中反映了绝缘体、导体与超导体之间的本质差异。此外，电阻距还主导着导体在不同压力和温度条件下的动态行为。基于上文建立的概念和模型，接下来我们将通过实验观测数据对其进行应用与验证。下一节将重点探讨电阻距在预测和解释导体与超导体物理性质方面的作用。

### 电阻距与电阻率

导体的电阻遵循欧姆定律，这是一条通过实验得出的经验性规律。那么，究竟什么导体的微观性质导致了这一定律的成立？本节将探讨“电阻距”与导体电阻率的宏观性质之间的关系。

方程(23)估算的能量代表将价电子提升至电子通道以形成电流所需的最小能量。因此，电子的提升电势为：

$$(25) \quad v = \frac{E_c}{e}$$

其中,  $e$ 表示电子的电荷。假设在长度为 $L$ 、截面积为 $A$ 的导体两端施加总电压 $V$ , 该电压在时间 $T$ 内将 $n$ 个电子提升并驱动其通过导体。因此, 电压 $V$ 提供了驱动这 $n$ 个电子产生电流所需的总电势, 它与单个电子的提升电势 $v$ 相关联。在微观尺度上, 由电源(如电池)施加在导体上的电压 $V$ 是通过在导体两端积聚电荷实现的, 这些电荷提供了提升导体两端附近电子的电势。被提升的电子又在导体内部进一步形成电势场, 依次推动更深处的电子。因此, 电压 $V$ 应与提升电势 $v$ 和电子总数 $n$ 成正比, 并可通过一个系数 $p$ 来建立它们之间的关系:

$$(26) \quad V = pnv$$

因此, 根据电流定义, 电压 $V$ 所产生的电流 $I$ 为:

$$(27) \quad I = \frac{en}{T}$$

将公式(25)、(26)和(27)结合起来, 我们可以根据欧姆定律推导出电阻 $R$ 与电子提升能量 $E_c$ 之间的关系:

$$(28) \quad R = \frac{V}{I} = \frac{pTE_c}{e^2}$$

根据定义, 导体的电阻率为:

$$(29) \quad \rho = R \frac{A}{L} = \frac{pATE_c}{Le^2}$$

将公式(23)中的 $E_c$ 代入, 可得电阻率表达式如下:

$$(30) \quad \rho = -\frac{pATKQ}{2Le^2} D$$

注意, 电子在导体中漂移的速度:

$$(31) \quad s = \frac{L}{T}$$

这是不同导体特有的性质。通过引入一个等效系数 $u$ 来表示导体中分子的核电荷,  $Q$ 可表示为:

$$(32) \quad Q = ue$$

然后, 方程(30)可以简化为:

$$(33) \quad \rho = \frac{puAK}{2s} D$$

对于氢原子,  $u=1$ 。随着原子尺寸增大, 价电子受到主核的影响减弱, 因此  $u<1$ 。引入一个称为微观电阻率的性质参数  $Z$ , 可将库仑常数及导体特有的微观参数  $p$ 、 $u$  和  $s$  纳入其中, 定义为:

$$(34) \quad Z = \frac{puAK}{2s}$$

现在, 电阻率可以简化为:

$$(35) \quad \rho = ZD$$

这一公式表明, 导体的电阻率由其微观电阻率( $Z$ )和电阻距( $D$ )共同决定。其中,  $Z$ 代表导体在微观尺度上的电阻特征常数, 而  $D$  则反映了导体动态特征, 反应了导体的价电子轨道半径  $R_v$ 、边界半径  $R_b$  以及吸引系数  $c$ 。电阻距  $D$  主要取决于分子间距, 并随压力和温度的变化而变化。因此, 导体电阻率的动态变化特征, 与电阻距  $D$  密切相关, 且可通过电阻距加以分析和理解。

### 不同材料的电阻距

导体的电阻距( $D$ )既是公式(35)中影响电阻率的因素, 也是公式(23)中电子在导体中产生电流所需提升能量的体现。电阻距反映了绝缘体、导体与超导体之间的本质差异, 这将在后续内容中进行探讨。然而, 如公式(24)所示, 电阻距是一个庞大级数的和, 分析起来较为复杂。幸运的是, 可以证明该级数收敛迅速, 即使是无穷级数, 也因每项以  $O(n^{-2})$  的速度趋近于零而快速收敛。方程(22)中  $D_k(i)$  的每一项同样以  $O(n^{-2})$  速率收敛。此外, 我们还可以通过以下方式重写方程(19), 证明  $D_u(i)$  中的项也收敛:

$$(36) \quad D_u(i) = \frac{2c^{i\%2}(R_b-r)}{(2iR_b+r)(2iR_b+R_b)} + \frac{2c^{(i+1)\%2}(r-R_b)}{(2(i+1)R_b-r)(2iR_b+R_b)}$$

每一项的收敛速度均为  $O(n^{-2})$ 。数学家欧拉 (Leonhard Euler) 在著名的巴塞尔问题中证明了无穷级数  $\sum(1/n^2)$  的收敛性, 具体为  $\sum(1/n^2) = \pi^2/6$ 。因此, 该级数中的每一项最终将收敛为  $C \cdot \pi^2/6$ , 其中  $C$  是该项在特定  $c$  和  $R_b$  值下的常数部分。由此可知, 对于每组特定的  $c$  和  $R_b$  值, 该级数总和是有限的。这表明该模型预测了导体具有有限的电阻, 因此只需有限的能量即可将电子提升至电子通道, 从而产生电流。

然而, 直接使用公式(24)中的整个级数形式来分析阻碍距离并不容易。由于来自周围分子的作用力对电子的影响会随着距离迅速减弱, 即以  $O(n^{-2})$  的速度衰减, 因此级数中的首项  $d$  在分析中具有显著意义:

$$(37) \quad d = \frac{1}{r} + \frac{2c}{2R_b-r} + \frac{rc}{(2R_b-r)^2} - \frac{3c+1}{R_b}$$

确实, 数值模拟表明, 对于任意特定的  $c$  和  $R_b$  值,  $D/d$  的比值收敛迅速, 并被一个常数所界定。因此, 在分析电阻距时, 无需处理整个级数, 只需关注其首项  $d$ , 即可获得对整个阻碍距离系列的有效洞见。这一首项在定性和定量分析中都具有足够的指导意义。

Name	Symbol	Border Ra	Valence Ra	Resisting D (1/m)	Resistivity (m/MS)
Silicon	Si	210	111	5.37E+13	1.00E+03
Diamond	C	170	77	8.50E+11	1.00E+01
Aluminum	Al	125	118	1.87E+07	2.62E-02
Calcium	Ca	180	174	9.00E+06	3.45E-02
Iron	Fe	140	125	2.42E+08	1.00E-01
Copper	Cu	140	138	8.41E+05	1.69E-02
Platinum	Pt	175	128	1.50E+09	1.06E-01
Gold	Au	166	144	5.81E+07	1.61E-02
Mercury	Hg	155	149	3.49E+08	1.00E+00
c = 0.1		Radius in pm			

表1. 不同材料的电阻率与根据公式 (37) 估算的“电阻距”对比。表中 “Resisting D” 一栏表示通过公式 (37) 计算得出的各材料的电阻距(单位: m<sup>-1</sup>), 计算时统一假设吸引系数c=0.1。各材料的R<sub>v</sub>和R<sub>b</sub>值来源于[ptable](#)网站, 其中Valence Ra栏所用的R<sub>v</sub>为共价半径, Border Ra栏所用的R<sub>b</sub>为范德华半径, Ca、Fe和Al的数据则基于经验半径。为简化计算, 未在结果中包含常数因子Z。

首先, 我们来探讨R<sub>v</sub>和R<sub>b</sub>对电阻距的影响。公式(37)让我们能够利用导体的微观属性R<sub>v</sub>和R<sub>b</sub>以及分子键的吸引系数c来估算其电阻距。遗憾的是, 目前多数材料的c尚无实测值。为提供一个粗略的参考范围, 此处统一采用c=0.1的假设值, 对若干材料进行了电阻距的估算。我们使用ptable网站提供的R<sub>v</sub>和R<sub>b</sub>数据计算这些材料的电阻距, 并将结果列于表1 的“Resisting D”栏中。

即便采用了统一c=0.1的, 计算结果依然显示出材料的电阻率“Resistivity”栏与其电阻距“Resisting D”栏之间存在明显的相关性。如果能够获得各材料更为精确的c值, 预计预测结果将更加精准。值得注意的是, 非导体如硅和金刚石的电阻距远高于金属, 这也符合其绝缘体特征。从理论上讲, 只要有材料的精确微观参数Z、R<sub>v</sub>、R<sub>b</sub>和c, 就可以通过公式(35)计算其电阻率。因此, 这些初步结果为电阻距模型的合理性提供了一定的实证支持。

接下来, 我们进一步探讨吸引系数c对电阻距的影响。吸引系数c反映了分子键的吸引作用(或键合强度)的大小。根据公式(37), 当分子间不存在吸引力(即c=0)或键合强度较弱(例如c<%时, 其电阻距始终大于零, 如图5中的蓝色曲线所示。这表明材料中没有电子通道, 或通道彼此不连通, 这可能正是绝缘体的微观特征, 即某些分子之间的吸引力较弱。即使电子拥有较高能量而被激发出原子, 其周围也缺乏连续的电子通道供其顺畅移动。

## Resisting Distance at Different Coefficients

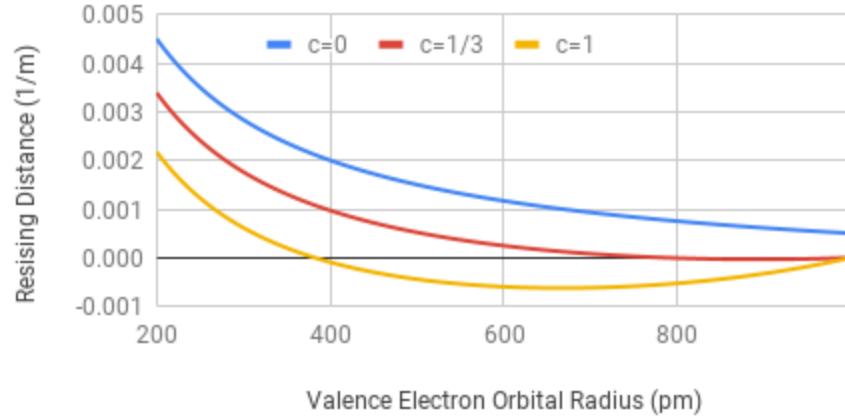


图5. 不同吸引系数c下的电阻距d(单位:m<sup>-1</sup>), 根据公式(37)计算, 假设分子间距为2000皮米, 且固定边界半径R<sub>b</sub>=1000皮米。图中曲线显示, 随着价电子轨道半径R<sub>v</sub>接近R<sub>b</sub>, 电阻距逐渐减小。各曲线与横轴的交点为零电阻距对应的轨道半径, 记为R<sub>c</sub>, 表示电子开始进入电子通道的临界点。电子通道的宽度随c值的增大而增加。当c=0时, 如蓝色曲线所示, 电阻距始终大于零, 意味着不存在电子通道, 这可能是绝缘体的典型特征。相较之下, 超导体是一种特殊的导体, 其价电子轨道半径R<sub>v</sub>满足R<sub>v</sub>≥R<sub>c</sub>, 即价轨道与电子通道发生重叠, 从而允许电子在分子间自由漂移。

当吸引系数较高(例如c>1/3)时, 材料中将开始出现电子通道。随着c的增大, 电子通道的宽度也相应增加。如, 当c=1/3时, 会出现较窄的电子通道, 如图5中红色曲线所示; 而当c=1时, 电子通道变得更宽, 如图中黄色曲线所示。

在普通导体中, 电子必须被激发到电子通道中。价电子轨道与电子通道的间距越大, 电子需要获得的能量就越多, 从而导致更高的电阻率。这意味着导体的电阻率通常随着c的增加而降低, 因为在较大的c值下, 电子通道较宽, 通常与价电子轨道之间的间距较小。当电子通道足够宽, 与价电子轨道重叠时, 价电子便可无需能量提升而自然进入并在电子通道中流动, 从而消除电阻, 实现超导。

接下来我们将探讨实现超导的条件。由于超导体中没有电阻, 即ρ=0, 根据公式(35)和(37), 超导条件可表示为:

$$(38) \quad \frac{1}{R_c} + \frac{2c}{2R_b - R_c} + \frac{cR_c}{(2R_b - R_c)^2} - \frac{3c+1}{R_b} = 0$$

这里, R<sub>c</sub>表示导电半径, 即价电子轨道开始与电子通道重叠的位置。在图5中, 这也是电阻距曲线与x轴相交的点, 或者说电阻距为零的点, 即D=0。因此, 当R<sub>v</sub>≥R<sub>c</sub>时, 即可实现超导。通过在不同的c值下求解方程(38)中的R<sub>c</sub>, 我们得到如下结果:

$$(39) \quad \begin{aligned} R_c &\approx 0.382R_b && \text{when } c = 1 \\ &\approx 0.621R_b && \text{when } c = \frac{1}{2} \\ &\approx 0.785R_b && \text{when } c = \frac{1}{3} \end{aligned}$$

这些结果表明，即使远低于边界，轨道中的电子也可能发生电漂移或形成电流。例如，当 $c=1/2$ 时，只要 $R_v > 0.621R_b$ ，价电子轨道就会与电子通道重叠，满足该情形下的超导条件。之所以可以在低于边界的位置发生电漂移，是因为来自相邻分子的引力作用。当分子间的吸引力足够强时，这种现象就会出现。

当 $c=1$ 时，价电子从相邻分子所受到的吸引力，与它在相同距离下从宿主分子所受的吸引力等效。这种情况可能出现在相邻分子具有电子空穴时，而电子空穴的形成通常是由于电漂移的发生。这意味着，只要一个价电子处于距离边界0.382倍或更远的轨道上，它就可以在不需要额外提升能量的情况下漂移到下一个分子。在典型的分子键中， $c$ 的值通常小于1。例如，当 $c=1/3$ 时，电子漂移会在距离边界0.785倍的位置发生。

因此，可以通过公式(38)的解来区分绝缘体、导体和超导体：对于以知 $c$ 值的材料，如果公式无实数解，该材料为绝缘体；如果存在实数解，则该材料为导体或超导体，具体取决于 $R_v < R_c$ (导体)还是 $R_v \geq R_c$ (超导体)。由此可见，基于其微观结构参数，电阻距模型为区分不同材料的导电性质提供了一种可量化的机制。

需要注意的是， $c$ 代表分子键强度。与分子间距一样，分子键强度对于特定物质而言并不是恒定的，而是一个受压力和温度影响的动态参数。因此，陶瓷材料在高压下也可能转变为超导体。我们将在下一节进一步探讨这一动态特性。

### 压力与温度对电阻率的动态响应

导体的电阻率通常随着温度的升高而增加，随着压力的增大而降低。传统超导体通常出现在低温环境下，而高温超导体则往往是在高压条件下实现的。以上这些动态趋势可以通过上文建立的电子通道模型进行解释。

根据式(35)，导体的电阻率与微观尺度上的电阻距成正比。因此，电阻率的行为取决于电阻距所包含的三个微观参数：吸引系数 $c$ 、价电子轨道半径 $R_v$ 和分界半径 $R_b$ 。而这三个参数又会受到温度与压力的动态影响。通过公式(24)中的电阻距模型，我们可以从 $c$ 、 $R_v$ 、 $R_b$ 对温度与压力变化的响应出发，深入理解电阻率的动态特征。

这种动态行为可通过分析 $c$ 、 $R_v$ 、 $R_c$ 和 $R_b$ 之间的关系加以理解。电子通道的宽度主要由分子键强度 $c$ 决定。在已知 $c$ 的情况下，传导半径 $R_c$ 与分界半径 $R_b$ 呈正相关。在分子间距 $R_b$ 固定时，若价电子轨道半径 $R_v$ 增大，将缩小 $R_v$ 与 $R_b$ 、 $R_v$ 与 $R_c$ 的距离，从而降低电阻距 $D$ ，进而降低电阻率，如图5所示。同理，在 $R_v$ 不变时，减小 $R_b$ 也会降低电阻率。在上述两种情况下，电阻率的降低都源于传导半径 $R_c$ 与价电子轨道半径 $R_v$ 之间差距的缩小，即电子通道与价电子轨道差距减小。基于这一原理，我们便可以更容易地理解电阻率随压力与温度变化而呈现的动态行为。

随着压力的升高，分子间距单调减小， $R_b$ 下降，而 $R_v$ 不变时， $R_c$ 也相应下降，使得 $R_c - R_v$ 的差距变小，最终使电阻距 $D$ 减小，电阻率降低。这正解释了为什么加压使材料的电阻率会降低，甚至一些原本为绝缘体的材料也可能在高压下转变为超导体。

此外，分子间距的缩小也会引发分子间作用力，如压缩键的形成。这会使吸引系数 $c$ 增大，从而拓宽电子通道的范围，进一步减小 $R_c - R_v$ ，降低电阻距和电阻率。

相对而言，轨道半径 $r$ 尤其是价电子轨道半径 $R_v$ ，对温度的变化更为敏感。温度升高时，价电子能量增加，跃迁到更高轨道，导致 $R_v$ 增大。这时加压限制分子间距(即 $R_b$ 维持不变或减小)时， $R_v$ 的增加将缩小与电子通道的差距，从而降低电阻距 $D$ 和电阻率。这也解释了为什么在高压下能够实现高温超导体。

然而，如不加压，温度升高会导致激发态电子之间的排斥增强，推动分子远离，从而使 $R_b$ 增加。在常压下，这种分子间的排斥通常大于价电子轨道半径 $R_v$ 的增长速度，因此 $R_c - R_v$ 增大，导致电阻距D上升，如图6所示。这也解释了为什么导体的电阻率随温度升高而增加，以及为什么传统超导体通常只能在低温下实现。

当温度降低时，电子趋于回归到较低轨道，分子间排斥力减弱，此时常压可被视为一种有效的“压缩效应”，使得 $R_b$ 减小， $R_c$ 快速下移，最终导致 $R_v$ 与电子通道重叠，从而实现超导。这说明了电阻率与温度呈正相关，而传统超导现象通常在低温下实现。换句话说，降低温度的效果等价于增大压力。

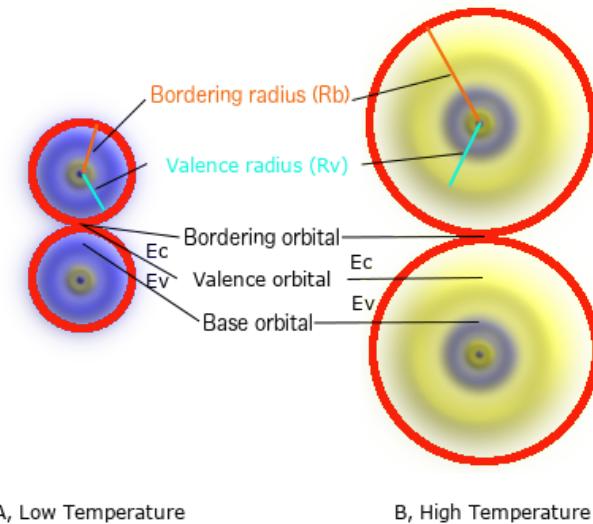


图6. 电阻态的相变过程。A) 在低温条件下，分子之间距离足够接近，使价电子无需额外提升能即可进入电子通道，自由发生电子漂移，从而实现传统超导现象。B) 随着温度升高，电子激发至更高轨道，导致分子间斥力增强，分子间距增加。此时传导半径 $R_c$ 增长的速度快于价电子轨道半径 $R_v$ ，最终导致价电子轨道低于电子通道，破坏了电子漂移条件，超导性因此消失。

总而言之，分子间距受压力和温度的共同影响，其中压力在决定分子间距方面起主导作用，而温度变化则可产生类似于压力的效果。分子间距决定了电子通道与价电子轨道的距离，并诱发分子键的形成。键强不仅决定电子通道的宽度，还进一步影响价电子轨道与电子通道之间的距离。该间距与导体的电阻密切相关，而在超导体中则不存在这种间隙。键强也是区分绝缘体与导体的关键因素。因此，材料的电阻态受压力和温度共同影响。

到此，电子通道理论为理解绝缘体、导体和超导体的本质区分提供了一个统一的框架。接下来的几个部分，我们将运用该理论来解释超导体中观察到的一系列现象。

### 迈斯纳效应的成因

超导体不仅仅是完美导体，更重要的是它表现出迈斯纳效应(Meissner Effect)，即在进入超导相时会排斥外部磁场<sup>[9]</sup>。值得注意的是，根据法拉第电磁感应定律<sup>[20-21]</sup>，磁场的感应需要依赖磁通量的变化。而迈斯纳效应则是在外部磁场存在的情况下，材料转变为超导态时发生的，即并没有磁通量的变化。

在普通导体中，价电子位于低于电子通道的能级，因此无法形成电流。而在材料转变为超导态之后，价电子轨道与电子通道发生重叠，价电子无需能量提升即可进入电子通道，在分子间自由流动，从而形成无电阻电流，即超导态。这些电子在通道中的随机运动会在内部磁场，并在局部相互抵消。然而，当存在外部磁场时，这些电流的方向会受到洛伦兹力的偏转：

$$(40) \quad F = q(E + v \times B)$$

其中， $q$ 表示电荷量， $v$ 是电荷的速度， $B$ 是磁场， $E$ 是电场， $F$ 是作用在电荷上的力<sup>[22-24]</sup>。沿着外加磁场的方向观察时，运动中的电子会因洛伦兹力而发生偏转，并呈顺时针方向旋转，从而在超导体内部产生一个磁场。这个磁场抵消了外加磁场在超导体内部的分量，并增强了其外部的磁场。整体结果表现为外加磁场被“排斥”出超导体之外。

在迈斯纳效应和法拉第感应现象中，磁场的产生本质上都源于电荷因洛伦兹力作用而产生的电流。因此，迈斯纳效应也可以视为一种感应现象。两者的主要区别在于：在超导体中，由于价电子已经处于电子通道中，因此自然存在自由电流；而在普通导体中，通常没有自由电流，必须通过外界能量将电子提升至电子通道才能产生电流。在一般的法拉第感应中，电子通过磁通量的变化被激发至电子通道，产生电流。然而，由于普通导体存在电阻，这种感应电流无法持续存在。而在超导体中，当外部磁场发生变化时，仍会发生感应过程。由于无电阻，感应电流可以持续变化以抵消外部磁场变化，直到达到超导体的临界电流密度为止，这将在下一节中进一步探讨。

### 临界电流密度的极限

临界电流密度是指超导体所能承受的最大电流密度。根据斯特藩-玻尔兹曼定律，黑体所辐射的功率 $P$ 与其绝对温度 $T$ 的四次方成正比：

$$(41) \quad P = \rho T^4$$

其中， $\rho$ 是斯特藩-玻尔兹曼常数。该定律也可通过对普朗克定律在频率和立体角上的积分推导得出。在热平衡状态下，物体吸收能量的速率等于其辐射的速率<sup>[14]</sup>。因此，物体从环境中吸收能量的速率也与其温度的四次方成正比。在超导中，电流密度对应于漂移电子(electrodrift)的密度。每一个电子漂移的产生，都源于电子受能激发。根据前述的式(13)，超导体中电子所需的能量由环境提供。因此，漂移电子密度(即电流密度)也应与温度的四次方成正比。如果引入一个能量转化效率系数 $C$ ，超导体中的电流密度 $J$ 可表示为：

$$(42) \quad J = CT^4$$

其中， $C$ 是超导材料相关参数。上述公式表明，超导体的最大电流密度与温度的四次方成正比，且受其限制。也就是说，临界温度决定了超导体的临界电流密度。这也解释了为何传统的低温超导体通常具有较低的临界电流密度，而高温超导体则往往表现出更高的临界电流密度。

### 受临界电流密度限制的临界磁场

当超导体受到外加磁场作用时，若该磁场强度超过某一特定值，会导致超导消失，这一特定值被称为临界磁场。在较低的磁场强度下，外加磁场会因迈斯纳效应而被超导体排斥。随着外场强度的增加，超导内部会产生相应的反向磁场来抵消外场。

超导体内部的磁场来源于其内部的反向电流，而磁场强度与这些反向电流的电流密度密切相关。如前一节所述，在特定温度下，超导体所能承受的最大电流密度存在上限。当外加磁场强度导致所需的电流密度超过这一临界值时，超导体内部无法完全抵消外场，从而使得迈斯纳效应失效，磁场无法再被完全排斥。

一旦电流密度超过临界值，流动的电荷（包括轨道电子）会在残余磁场中受到洛伦兹力的偏转。此时，原子周围的电子轨道会因磁场作用而发生变形，电子云沿外加磁场方向被压缩，或在垂直方向上被拉扁，如图7B所示。在所有电子中，价电子由于受宿主原子中其他电子干扰较少，在超导中起着主导作用，因此受影响最为显著。当外加磁场超过临界磁场后，价电子将退出电子通道，从而破坏超导态。

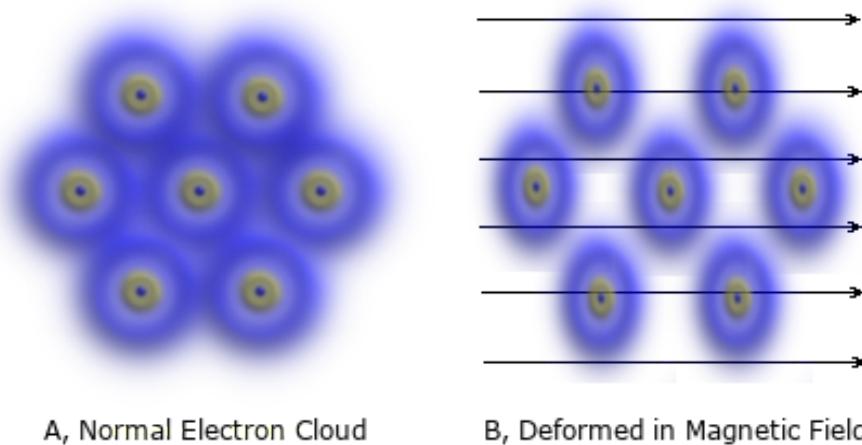


图 7. 超导性在超过临界强度的磁场中被破坏。A) 在弱磁场或无外加磁场的情况下，超导体内部可通过迈斯纳效应产生反向磁场，完全抵消外加磁场。此时，价电子的电子云正常延伸进入电子通道，保持超导状态。超导体能够承受的外加磁场具有上限，即临界磁场强度。B) 当外加磁场超过临界强度时，超导体内部的反向电流密度达到极限，无法完全抵消外场。剩余的磁场使轨道电子在洛伦兹力作用下发生偏转，其轨道面转向垂直于磁场方向，电子云被压缩，形如被挤扁的灯笼。轨道形变导致价电子退出电子通道，破坏超导态。

因此，超导性在超过临界磁场后失效的根本原因是临界电流密度的限制。正如公式(42)所预测的，温度越高，其对应的临界电流密度也越大。而更高的临界电流密度又能支撑更强的临界磁场。这就解释了临界温度与临界磁场之间的相关性。

## 分子结构影响二型超导体

二型超导体具有至少两个临界磁场： $B_{c1}$ 和 $B_{c2}$ <sup>[25-27]</sup>。当外加磁场低于 $B_{c1}$ 时，材料表现为正常超导；当磁场强度超过 $B_{c2}$ 时，超导性完全被破坏。在这两个临界值之间（即 $B_{c1} < B < B_{c2}$ ），超导性仅在材料的部分区域存在，其他区域则被破坏。这些非超导区域被称为磁通涡旋（magnetic vortices），其密度会随着外加磁场强度的增加而上升。二型超导体通常由合金或化合物构成。

图8展示了一种由两种不同类型分子构成的二型超导体的晶体结构。在外加磁场 $B < B_{c1}$ 的条件下，可观察到正常的超导现象，如图8A所示。这是因为外加磁场低于所有分子的临界磁场，每种分子都处于超导态。而在 $B > B_{c2}$ 的情况下，如图8C所示，超导性被完全破坏。 $B_{c2}$ 表示该超导体中所有材料的最大临界磁场，一旦外加磁场超过 $B_{c2}$ ，所有材料都无法保持超导性。

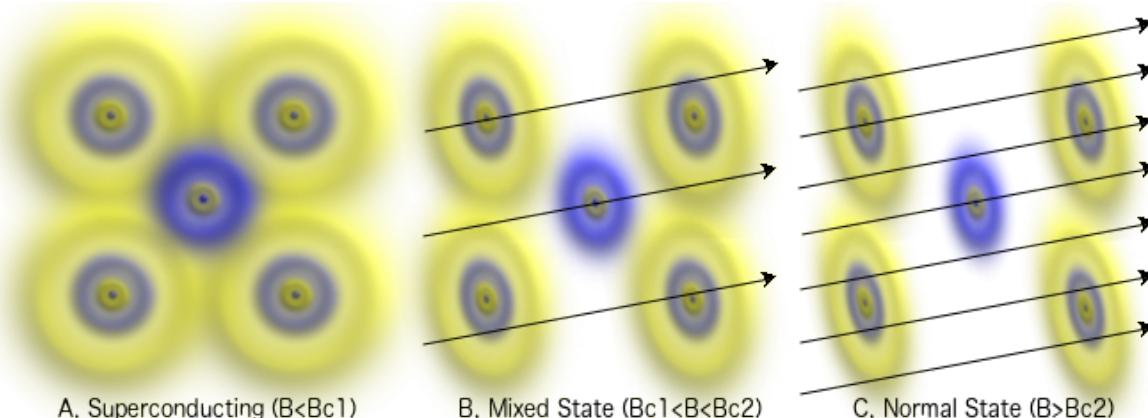


图8. 二型超导体对不同强度外加磁场的响应。A) 当磁场低于最小临界强度时, 所有分子之间的电子通道完全连接, 表现为完全超导性。B) 在介于最小和最大临界强度之间的磁场下, 部分价电子轨道与电子通道分离, 如图中中心的小分子所示, 导致混合态中围绕小分子的涡旋或超导空穴形成。C) 当磁场强度超过最大临界强度时, 所有价电子轨道均撤离电子通道, 超导性被完全破坏。此外, 电子云的变形受外加磁场方向影响, 这也解释了为什么二型超导体的临界磁场会随着外磁场方向的不同而有所变化。

在外加磁场强度介于 $B_{c1}$ 和 $B_{c2}$ 之间时, 如图8B所示, 中心分子的超导性被破坏, 而其周围的其他分子仍保持超导状态。中心区域形成非超导岛, 对应于磁通涡旋, 磁通得以穿透该区域, 产生磁通钉扎效应。

二型超导体的晶体结构通常在不同方向上分子的排列各异, 尤其是化合物超导体。外加磁场沿不同方向施加时, 会对电子云产生不同程度的偏转或压扁效应, 导致超导性在不同磁场强度下破坏, 具体取决于磁场的方向。这一现象同样在图8中得到了体现。当外加磁场以较小角度施加时, 会观察到两个临界磁场; 而当磁场来自其他方向时, 可能观测到不同的临界磁场。由于电子云形状随外加磁场方向变化, 价电子在不同方向上的电子通道中退出所需的磁场强度也不同。例如, YBCO超导体在磁场与 $\text{CuO}_2$ 平面(即YBCO晶体的a-b面)平行时, 能承受高达250特斯拉的外磁场; 而当磁场垂直于 $\text{CuO}_2$ 平面(即沿晶体c轴方向)施加时, 超导性则在120特斯拉时被破坏<sup>[28]</sup>。

超导性的破坏源于磁场作用下价轨道从电子通道中撤出。这一效应与特定的分子键相关, 并且会随磁场方向的不同而变化。二型超导体通常由合金或化合物组成, 其中每种类型的分子可在不同方向与邻近分子形成一种或多种键合。因此, 超导体的分子结构越复杂, 其临界破坏磁场的变化范围越大。

化合物的分子结构往往因不同方向的多种键合而呈现非对称性, 导致电子通道结构也随方向而异, 形成各向异性的临界磁场。文献中常提及的两个临界磁场, 很可能分别对应二型超导体内所有临界磁场的最小值和最大值。在混合态中, 超导性部分破坏的区域会形成磁通涡旋。随着外加磁场强度不断增强, 且逐渐超过不同的临界磁场, 涡旋密度也随之增加。

### 超导体、密度与相态之间的关系

根据本文所提出的理论, 超导性源于价轨道与电子通道的重叠, 而这种重叠往往与较小的分子间距及因此较高的密度相关。因此, 该理论预测超导性更有可能出现在高密度元素中。这个预测与周期表中已知的超导元素高度吻合。图9中以蓝色框标出的已知超导元素, 与图10中显示的高密度元素对应良好。

H		Sb temp	Atomic symbol Critical point, Tc (K)										He				
Li	Be 0.026		Superconductor														
Na	Mg									Al 1.175	B	C	N	O	F	Ne	
K	Ca	Sc	Ti 0.4	V 5.4	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn 0.85	Ga 1.10	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr 6.1	Nb 9.25	Mo 0.912	Tc 7.80	Ru 0.49	Rh 0.0003	Pd	Ag	Cd 0.517	In 3.4	Sn 3.72	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba		Hf 0.128	Ta 4.47	W 0.0154	Re 1.697	Os 0.66	Ir 0.113	Pt	Au	Hg 4.15	Tl 1.70	Pb 7.2	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra		Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og
			La 4.9	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
			Ac	Th 1.38	Pa 1.4	U 1.8	Np 0.075	Pu	Am 1.1	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

图9. 已知的超导元素(临界温度数据来源于[Peter J. Lee网页](#) )

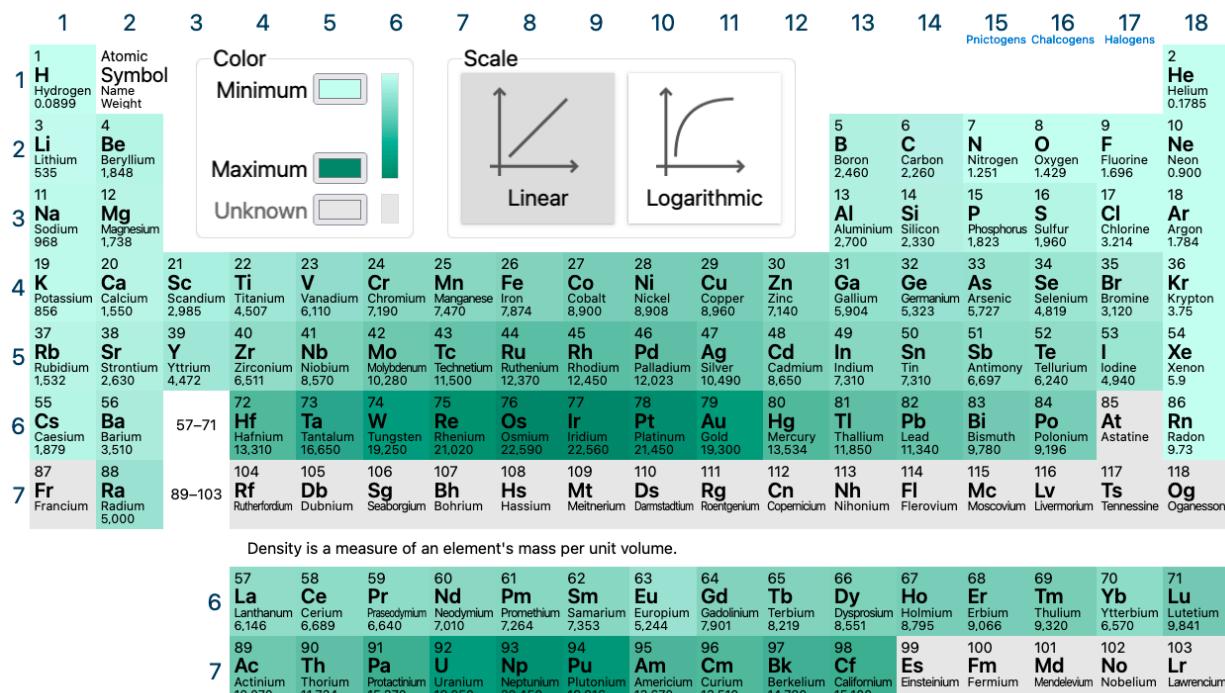


图10. 元素密度(截图来源于[ptable网站](#))

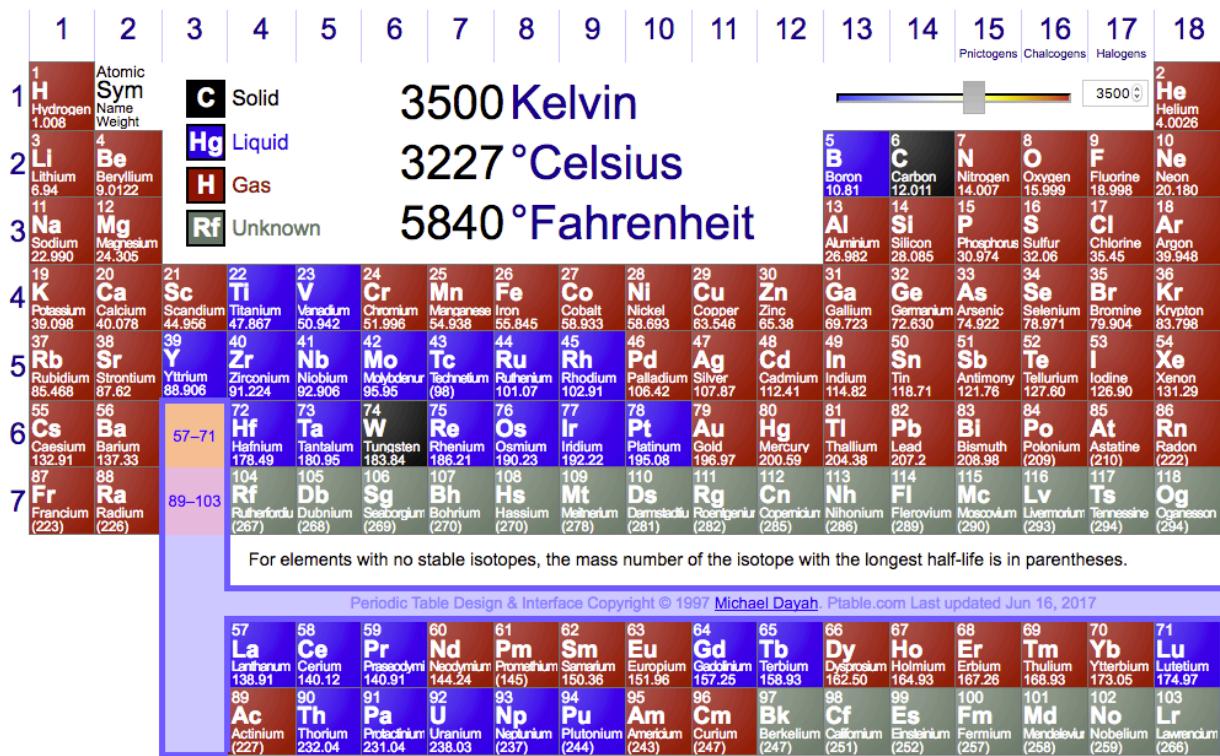


图11. 元素在3500 K时的状态(截图来源于[ptable](#)网站)

分子间排斥力较强时，分子倾向于相互排斥而彼此远离，导致较大的分子间距，因而更容易呈现气态。相反，分子间距较小通常意味着分子间排斥力较弱，表现为较低的挥发性以及较高的熔点和沸点。因此，本文提出的理论还预测超导元素往往与具有较高沸点的元素相关，这一预测同样得到了观察结果的支持。图11中标出了在3500K下仍保持固态或液态的元素，这与图9中所示的超导元素高度吻合。

### 磁通量子化的电子漂移解释

磁通量是测量穿过某一区域的总磁场。环形电流会产生磁通量，而磁通量的最小单位由单个电子环绕运动所产生，这使得磁通量呈现量子化。磁通量子 $\Phi_0$ 的数值可通过对薛定谔方程施加规范变换来确定。尽管波函数的相位依赖于规范选择，但物理预测结果不受影响，因此 $\Phi_0$ 是规范不变的量：

$$(43) \quad \Phi_0 = \frac{h}{2e}$$

其中， $h$ 是普朗克常数， $e$ 是电子电荷。该预测可通过环形超导体进行验证。

根据本文所提出的理论，超导体中的电流或电子漂移起源于电子轨道跃迁。一个电子跃迁同时产生一个激发电子和一个电子空穴，这两个电荷的漂移分别形成负电流和正电流。在环形超导体中，这两股电流朝相反方向流动，等价于两个电子沿同一方向环绕运动。因此，该理论预测环形超导体中的最小磁通量是两倍的磁通量子 $2\Phi_0$ 。这一预测已被B. S. Deaver和W. M. Fairbank<sup>[29]</sup>，以及R. Doll和M. N  bauer<sup>[30]</sup>的实验所证实。

## 物质电阻态的预测

如上所述，电阻率的变化受压力和温度的影响。这意味着材料可以在绝缘、导电和超导三种电阻态之间发生相变。例如，许多绝缘体在足够的压力下可转变为超导体；水银在常温下是导体，但在低温时会转变为超导体。正如物质的状态可以从固态转变为流态，帮我所提出的理论也预测了电阻态可随压力和温度的变化，在绝缘、导电和超导之间发生相变。

物质的电阻态相变与分子间电子通道的存在及连通性有关。电子通道的特征由分子间的吸引系数（分子键强度）决定，而该系数受压力和温度影响。因此，电阻态相变是压力和温度变化导致的结果，其相变边界也可用类似物态相变的图来表示。

压力对电阻相变的影响主要通过两方面实现：分子间距和分子键强度。压力增大使分子间距减小，诱导分子键产生和增强。分子间距的减小缩小了电子通道与价轨道之间的间隙，从而降低电阻率，甚至可能实现超导。在较近距离，电子云受邻近分子影响，重新分布并增强或形成新的分子键。

如图12所示，随着分子键强度（用吸引系数表示）增加，电子通道宽度增大，通常减小电子通道与价轨道之间的间隙。这两种效应都促进了材料电阻状态从绝缘向导电和超导的转变。另外，如前所述，降低温度相当于增加压力的作用，会引起压缩。因此，物质的电阻状态可随压力和温度变化，从一种状态转变为另一种状态。

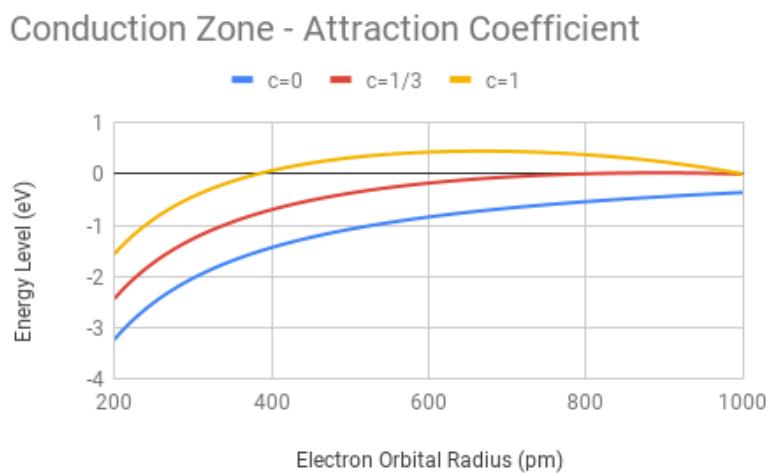


图12. 电子通道宽度与分子键强度之间的关系。图中使用两个分子相距2000皮米的模型来展示吸引系数c对电子通道宽度的影响。每条曲线表示在特定吸引系数下，电子能量随电子轨道半径的变化关系，基于固定 $R_b=1000$ 皮米利用公式(23)计算得出。横轴从一个分子中心开始，向右延伸至相邻分子方向。图中仅绘制了两个分子中左侧一部分区域。电子能级随着轨道半径从分子中心向边界方向增加而上升。当c=1时，如图中黄色曲线所示，电子能级从负值升高，并在半径为382皮米处变为正值。正能量表示电子已不再受限于其原子核束缚，可以在分子之间流动。因此，能量为正的区域表示电子通道的存在。注意，在c=1的情况下，曲线模拟了来自带电子空穴的相邻分子的吸引作用，形成了最宽的电子通道。当c=1/3时，如红色曲线所示，电子能级在785皮米处变为正值，表示电子通道较窄。而在c=0的情况下，如蓝色曲线所示，电子能级始终为负值，表示不存在电子通道。该图清晰展示了分子间吸引力增强（即吸引系数增加）如何扩大电子通道范围，从而降低电阻甚至实现超导的机制。

对于传统超导体而言，其临界点通常指的是在地表常压下观察到的超导相变温度。然而，对于同一种材料，在不同压力下可能会观察到多个临界温度。每一个临界温度都代表在特定压力下超导转变边界上的一个点。将这些临界点汇总起来，可以描绘出超导相变边界在相图中的整体形态，如图13中蓝色曲线所示。

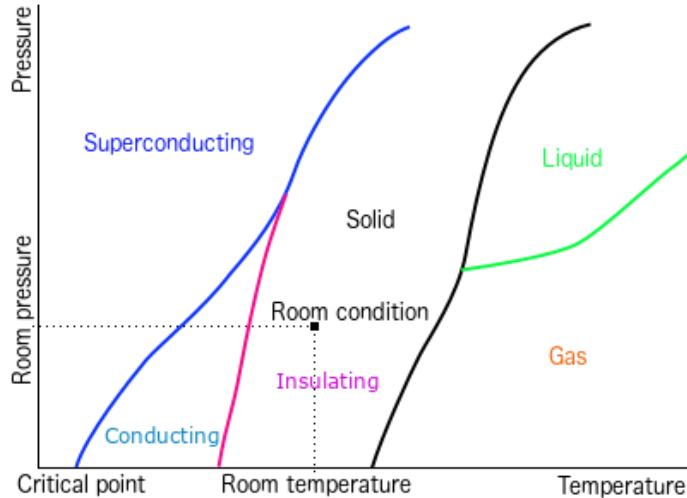


图13. 电阻状态相图，展示了超导体、导体和绝缘体之间的转变边界，同时也描绘了传统抗剪状态的相变边界。超导相变边界由一系列超导材料的临界温度与临界压力的组合点连接而成。对于大多数材料而言，该相变边界通常位于常温条件的高压和低温一侧，这也解释了为何室温超导体较为罕见，其在地表自然条件下难以形成。图中超导态与绝缘态边界的重叠区域表明，在某些条件下，材料可能会直接从绝缘态转变为超导态。

相变边界也可以通过电阻距模型从理论上加以预测。方程(35)可以理解为一个三维曲面，表示在不同压力与温度条件下材料的电阻率。在该曲面与电阻率为零的平面的交线即为超导转变边界(即 $\rho=0$ ，对应的方程 38)，在压力-温度平面上呈现为一条曲线。方程(38)的解可表示为如下形式：

$$(44) \quad R_c = f(c, R_b)$$

在此， $R_c(t,p)$ 、 $R_b(t,p)$ 和 $c(t,p)$ 各自为温度 $t$ 和压力 $p$ 的函数。方程(38)并不总是存在实数解，这种情况通常出现在分子吸引力较弱时，例如 $c < \frac{1}{2}$ ，对应绝缘相。然而，当对于某一已知的 $c$ 存在实数解时，解(44)中所有 $(t,p)$ 点便构成导体与超导体之间的相变边界。对于任意一点 $(t,p)$ ，若 $R_c(t,p) > R_b(t,p)$ ，则该点位于超导区域；反之，若 $R_c(t,p) < R_b(t,p)$ ，则位于导电区域。例如，在 $c=1$ 时，方程(38)的一组实数解为：

$$(45) \quad R_c = \frac{3-\sqrt{5}}{2} R_b \\ \approx 0.382 R_b$$

在这种情况下，当压力和温度条件使价电子轨道半径达到或超过其到边界距离的0.382倍时，该材料将具有超导性；否则，它表现为一般导体。

由于温度降低的效果等同于压力升高，相变边界通常会从低压低温区域延伸至高压高温区域，如图13中蓝色曲线所示。这也解释了为什么高温超导体通常需要在高压下才能实现。

对于导体,  $R_c(t,p)$ 与 $R_v(t,p)$ 之间的差值表示电子通道与价电子轨道之间的间隙, 该间隙决定了将价电子提升至电子通道所需的能量, 进而决定了电阻率。间隙越大, 所需能量越多, 电阻率也越高。

在绝缘体中, 当某些分子之间的分子键极其微弱, 当吸引系数c小于0.225时, 电子通道无法形成连续的网络。因此, 温度-压  
力平面上所有满足 $c(t,p)=0.225$ 的点构成了绝缘边界, 如图13中紫色曲线所示。这个边界一般位于超导边界的高温一侧。超  
导边界与绝缘边界可能存在交汇区域, 这部分交汇区域表示从绝缘体直接转变为超导体的相变边界。在图13所示的紫色与蓝  
色曲线交点处, 还可能存在一个三相点, 即导电、绝缘与超导三种电阻状态的交汇点。

关于电阻态相变的预测得到了大量实验观察的支持。例如,  $H_2S$  超导体的临界温度随压力升高而上升, 在100吉帕时为23K,  
而在200吉帕时升至150K<sup>[31]</sup>。只要具备适当设备和技术条件, 许多材料的相变边界都可以在高压实验室中测量或验证。

尽管理论上超导体被视为物质的一种普通电阻态, 但在地表并不常见, 这主要是因为地表的压力和温度不利于超导性的形  
成。然而, 理论上在高压条件下超导性更容易实现。因此, 在大行星内部, 超导体可能普遍存在, 这也可能是行星磁场形成的根本原因  
之一。事实上, 这可能解释了为何大型行星普遍具有磁场。由此, 我们提出一种假说: 地球的地磁场可能起源于地  
球内部的超导体<sup>[32]</sup>。

## 如何合成室温超导体

本文提出的理论仅为理解绝缘体、导体与超导体提供了统一的理论框架, 更重要的是, 它为超导体的合成提供了可操作的实  
践指导。理解了超导性的微观机制, 室温超导体的合成不再是随机尝试, 而成为可以工程化设计的任务。对于应用而言, 超  
导材料必须能在地表的常规条件下操作。而实现超导性的主要挑战在于分子间的排斥作用, 这种排斥力在温度升高时会显著  
增强, 特别是在对称分子之间更为明显。实现超导性的关键策略是压缩分子间距。压力不仅能减小分子之间的距离, 还能增  
强或促进分子键形成, 这两者对于形成电子通道和实现超导性都至关重要。以下原则可显著缩小寻找室温超导体的范围:

- 工程策略应利用分子引力来对抗排斥力, 而非单纯依赖外加压力。通过分子结构设计, 在特定原子之间引入吸引力, 有望  
将其拉近, 从而使价电子轨道能够延伸并重叠进入电子通道, 实现超导性。
- 电负性<sup>[33]</sup>是选择超导合成元素的重要参考指标。应避免使用电负性过强的元素, 这类元素对电子的束缚力太强, 会阻碍  
电子在分子间的自由流动, 从而难以形成连续的电子通道。但电负性过弱的元素又可能无法形成必要的分子引力, 导致  
通道太窄甚至无法形成。因此, 选择电负性处于适中范围的元素更为有利。特别是选用电负性相近的元素, 有助于维持电  
子通道的连续性和平衡的电势分布。
- 电子通道的连通性对超导性至关重要。过于复杂或体积庞大的分子结构可能会破坏电子通道的连通性, 尤其在晶体结构  
中不同区域存在不均匀电场强度的情况下, 可能导致电子通道断裂。如在许多绝缘体中所见, 微观势能的不连续性会阻  
断电子通道。因此, 保持通道在相同的能级和电势是电子自由流动的必要条件。
- 在复合物或合金中引入大小不一的原子, 可诱导非对称张力, 促进局部压缩与电子通道形成。小原子可对周围大原子施  
加强吸引力, 从而在某些区域引入压缩, 使价电子轨道更易延伸进入邻近电子通道。

## 总结

传统理论在解释高压下的电阻率与超导现象时所面临的挑战, 促使我们反思其在更深层次上所默认的一些基本前提。这些前  
提可能本身就存在误解, 而这些误解正是长期无法全面理解超导机制、阻碍寻找或合成室温超导体的原因之一。一旦走出这  
些理论误区, 我们就有可以另辟蹊径, 构建一套全新的理论框架。

本文所提出的理论从微观尺度揭示了电阻率与超导性的本质机制，系统性地解释了导体与超导体的各种特征。该理论通过电子通道的概念将不同的电阻态有机联系起来，为理解其相变提供了统一的理论基础。在这一框架中，超导性被视为物质的一种普通状态，尽管它在地表的常温常压下较为罕见。

该理论的最大意义，在于它不仅解释了现象，更提出了切实可行的工程指导方针，为合成室温超导体提供了科学依据。迄今为止，大多数超导体都是在极端条件下实现的，例如极低温或超高压，这样的超导难以实用。要想突破这一瓶颈，必须采取不同的策略：不再依赖外部压力，而是从分子结构设计出发，通过引导分子间的吸引作用来克服排斥力、实现分子间距的压缩，从而使价电子轨道与电子通道重叠，进而实现超导性。通过这种设计方法，有望在地表常规条件下获得稳定的超导体，从而使超导技术真正走向大规模应用。这种战略性转变不仅有助于实现室温超导的目标，也标志着我们对电性本质认知的重大飞跃。

## 致谢

特别感谢刘昱昊和周事为在本研究过程中所提供的深刻见解与建设性反馈。我们亦由衷感谢张玲在整个研究期间给予的坚定支持，这对于本研究的顺利完成起到了关键作用。我们诚挚感谢Peter J. Lee提供了元素周期表中超导元素的[临界温度数据](#)，同时感谢[ptable.com](#)授权使用其网站上的[元素密度和熔点数据](#)。

## 版本更新

- [06/02/2019: 本文在斯坦福初始发布](#)
- [01/16/2023: 电子通道与压缩键合概念介绍](#)
- [11/02/2025: 在Zenodo上发表](#)
- [12/18/2025: 增加相关文章摘要连接](#)

## 相关文章摘要链接

- <https://cs.stanford.edu/people/zjl/abstractc.html>, [PDF](#)
- <https://sites.google.com/view/zjlc/>, [PDF](#)
- <https://xenon.stanford.edu/~zjl/abstractc.html>, [PDF](#)
- <https://doi.org/10.5281/zenodo.17972005>, [PDF](#)

## 相关文献

- 热力学中的错误概念 ([PDF](#)) ([DOI](#)) ([中文](#): [DOI](#))
- 克鲁克斯辐射计旋转的驱动机制 ([PDF](#)) ([DOI](#)) ([中文](#): [DOI](#))
- 布朗运动的原动力 ([PDF](#)) ([DOI](#)) ([中文](#): [DOI](#))
- 温度是分子平均动能的标志吗? ([PDF](#)) ([DOI](#)) ([中文](#): [DOI](#))
- 绝对零度的本质 ([PDF](#)) ([DOI](#)) ([中文](#): [DOI](#))

- 能量转换三角 ([PDF](#)) ([DOI](#)) ([中文](#): [DOI](#))
- 热膨胀是由于粒子振动引起的吗? ([PDF](#)) ([DOI](#)) ([中文](#): [DOI](#))
- 超流体不是流体 ([PDF](#)) ([DOI](#)) ([中文](#): [DOI](#))
- 为什么相变温度保持恒定 ([PDF](#)) ([DOI](#)) ([中文](#): [DOI](#))
- 摩擦为何会产生热量? ([PDF](#)) ([DOI](#)) ([中文](#): [DOI](#))
- 简明熵概念 ([PDF](#)) ([DOI](#)) ([中文](#): [DOI](#))
- 熵可以减少 ([PDF](#)) ([DOI](#)) ([中文](#): [DOI](#))
- 回归原理 ([PDF](#)) ([DOI](#)) ([中文](#): [DOI](#))
- 金属中是否存在自由电子海? ([PDF](#)) ([DOI](#)) ([中文](#): [DOI](#))
- 电子通道: 导体超导统一论 ([PDF](#)) ([DOI](#)) ([中文](#): [DOI](#))
- 低温和高温超导统一理论 ([PDF](#)) ([DOI](#)) ([中文](#): [DOI](#))
- LK-99的局限和意义 ([PDF](#)) ([DOI](#)) ([中文](#): [DOI](#))
- 地球磁场超导起源说 ([PDF](#)) ([DOI](#)) ([中文](#): [DOI](#))
- 关于质量的本质问题 ([PDF](#)) ([DOI](#)) ([中文](#): [DOI](#))
- 从万有引力定律到广义相对论的演化 ([PDF](#)) ([DOI](#)) ([中文](#): [DOI](#))
- 爱因斯坦质能方程的最简单推导 ([PDF](#)) ([DOI](#)) ([中文](#): [DOI](#))
- 如何理解相对论 ([PDF](#)) ([DOI](#)) ([中文](#): [DOI](#))
- 数学并非科学 ([PDF](#)) ([DOI](#)) ([中文](#): [DOI](#))
- 潮汐能并非可再生能源 ([PDF](#)) ([DOI](#)) ([中文](#): [DOI](#))
- AI 知识污染 ([PDF](#)) ([中文](#))
- DeepSeek pk ChatGPT ([PDF](#)) ([中文](#))

## 参考文献

1. Onnes, H.K. (1911). "The resistance of pure mercury at helium temperatures". *Commun. Phys. Lab. Univ. Leiden.* **12**: 120.
2. Van Delft, D. & Peter Kes, P. (2010). "[The Discovery of Superconductivity](#)". *Physics Today.* **63** (9): 38–43. doi:[10.1063/1.3490499](#).
3. Bardeen, J.; et al. (1957). "[Theory of Superconductivity](#)". *Physical Review.* **108**. p. 1175. doi:[10.1103/physrev.108.1175](#).
4. Bednorz, J.G. & Müller, K.A. (1986). "Possible high  $T_c$  superconductivity in the Ba-La-Cu-O system". *Z. Phys. B.* **64** (1): 189–193. doi:[10.1007/BF01303701](#).
5. Wu, M.K.; et al. (1987). "Superconductivity at 93 K in a New Mixed-Phase Y-Ba-Cu-O Compound System at Ambient Pressure". *Physical Review Letters.* **58** (9): 908–910. doi:[10.1103/PhysRevLett.58.908](#). PMID [10035069](#).
6. Drozdov, A.; et al. (2015). "[Conventional superconductivity at 203 kelvin at high pressures in the sulfur hydride system](#)". *Nature.* **525** (2–3): 73–76. arXiv:[1506.08190](#).
7. Schilling, A.; et al. (1993). "Superconductivity above 130 K in the Hg–Ba–Ca–Cu–O system". *Nature.* **363** (6424): 56–58. doi:[10.1038/363056a0](#).
8. Takahashi, H.; et al. (2008). "Superconductivity at 43 K in an iron-based layered compound  $LaO_{1-x}F_xFeAs$ ". *Nature.* **453** (7193): 376–378. doi:[10.1038/nature06972](#). PMID [18432191](#).
9. Hirsch, J.E. (2012). "The origin of the Meissner effect in new and old superconductors". *Physica Scripta.* **85** (3): 035704. arXiv:[1201.0139](#). doi:[10.1088/0031-8949/85/03/035704](#).

10. Drude, P. (1900). "[Zur Elektronentheorie der Metalle](#)". Annalen der Physik. **306** (3): 566–613. doi:[10.1002/andp.19003060312](https://doi.org/10.1002/andp.19003060312).
11. Machado, A.; et al. (2012). "[Defect Structure Versus Superconductivity in MeB<sub>2</sub> Compounds \(Me = Refractory Metals\) and One-Dimensional Superconductors](#)", doi:10.5772/48625.
12. Vaidya, R.; et al. (2003). "[Effect of pressure on electrical resistance of WSe<sub>2</sub> single crystal](#)". Pramana -- Journal of Physics, Vol. 61, No. 1, pp. 183–186.
13. Souza, E.; et al. (2006). "[Improvement of metallic joint electrical conductivity using a novel conductive paste produced from recycled residues](#)". Rev. Esc. Minas Vol. 59, No. 2.
14. Liu, J.Z. (2022). "[Misconceptions in thermodynamics](#)". Stanford University. doi:[10.5281/zenodo.17508534](https://doi.org/10.5281/zenodo.17508534).
15. London, F. (1930), "Zur Theorie und Systematik der Molekularkräfte", *Zeitschrift für Physik*, **63** (3–4): 245, Bibcode:[1930ZPhy...63..245L](https://doi.org/10.1007/BF01421741), doi:[10.1007/BF01421741](https://doi.org/10.1007/BF01421741), S2CID [123122363](#). English translations in H. Hettema, ed. (2000), *Quantum Chemistry, Classic Scientific Papers*, Singapore: World Scientific, ISBN [981-02-2771-X](#), OCLC [898989103](#), OL [9194584M](#) which is reviewed in Parr, Robert G. (2001), "Quantum Chemistry: Classic Scientific Papers", *Physics Today*, **54** (6): 63–64, Bibcode:[2001PhT....54f..63H](https://doi.org/10.1063/1.1387598), doi:[10.1063/1.1387598](https://doi.org/10.1063/1.1387598).
16. Liu, J.Z. (2021). "[Superfluids are not Fluids](#)". Stanford University, ([PDF](#)). doi:[10.5281/zenodo.17504327](https://doi.org/10.5281/zenodo.17504327).
17. Pinceaux, J. P., Maury, J. P., Besson, J. M., [Solidification of helium at room temperature under high pressure](#). *Journal de Physique Lettres*. **40** (13), 307–308 (1979). doi:[10.1051/jphyslet:019790040013030700](https://doi.org/10.1051/jphyslet:019790040013030700).
18. Ashcroft, N. W., The hydrogen liquids. *Journal of Physics: Condensed Matter*. **12** (8A), A129–A137 (2000). Bibcode:[2000JPCM...12..129A](https://doi.org/10.1088/0953-8984/12/8A/314). doi:[10.1088/0953-8984/12/8A/314](https://doi.org/10.1088/0953-8984/12/8A/314).
19. Bonev, S. A.; et al, A quantum fluid of metallic hydrogen suggested by first-principles calculations. *Nature*. **431** (7009), 669–672 (2004). arXiv:[cond-mat/0410425](https://arxiv.org/abs/cond-mat/0410425). Bibcode:[2004Natur.431..669B](https://doi.org/10.1038/nature02850).
20. Souza, E.; et al. (2006). "[Improvement of metallic joint electrical conductivity using a novel conductive paste produced from recycled residues](#)". Rev. Esc. Minas Vol. 59, No. 2.
21. Faraday, M. & Day, P. (1999). "*The philosopher's tree: a selection of Michael Faraday's writings*". CRC Press. p. 71.
22. Huray, P.G. (2010). "[Maxwell's Equations](#)". Wiley-IEEE. p. 22.
23. Lorentz, H.A. (1895). "*Versuch einer Theorie der elektrischen und optischen Erscheinungen in bewegten Körpern*".
24. Chow, T.L. (2006). "[Electromagnetic theory](#)". Sudbury, MA: Jones and Bartlett. p. 395.
25. Hove, J.; et al. (2002). "[Vortex interactions and thermally induced crossover from type-I to type-II superconductivity](#)". Physical Review B. **66** (6): 064524. arXiv:[cond-mat/0202215](https://arxiv.org/abs/cond-mat/0202215).
26. Callaway, D.J.E. (1990). "On the remarkable structure of the superconducting intermediate state". Nuclear Physics B. 344 (3): 627–645. doi:10.1016/0550-3213(90)90672-Z.
27. Abrikosov, A.A. (2003). "[Type II Superconductors and the Vortex Lattice](#)". Nobel Lecture.
28. Sekitani, T.; et al. (2004). "Upper critical field for optimally-doped YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-δ</sub>". *Physica B: Condensed Matter*. 346–347: 319–324. Bibcode:[2004PhyB..346..319S](https://doi.org/10.1016/j.physb.2004.01.098). doi:[10.1016/j.physb.2004.01.098](https://doi.org/10.1016/j.physb.2004.01.098).
29. Deaver, B.S. & Fairbank, W.M. (1961). "[Experimental Evidence for Quantized Flux in Superconducting Cylinders](#)". *Physical Review Letters*. **7** (2): 43–46.
30. Doll, R. & Nähbauer, M. (1961). "[Experimental Proof of Magnetic Flux Quantization in a Superconducting Ring](#)". *Physical Review Letters*. **7** (2): 51–52.
31. Drozdov, A.; et al. (2014). "Conventional Superconductivity at 190 K at High Pressures". arXiv:[1412.0460](https://arxiv.org/abs/1412.0460), [cond-mat.supr-con](#).
32. Liu, J.Z. (2019). "[Superconductor Origin of Earth's Magnetic Field](#)". Stanford University. doi:[10.5281/zenodo.17507914](https://doi.org/10.5281/zenodo.17507914).

33. Jensen, W.B. (1996). "Electronegativity from Avogadro to Pauling: Part 1: Origins of the Electronegativity Concept". *Journal of Chemical Education*. 73 (1): 11-20. Bibcode:1996JChEd..73...11J. doi:10.1021/ed073p11.