ششمین کنفرانس فیزیک ریاضی ایران
۱۷ – ۱۸ – ۱۹ بهمن ۱۴۰۰ دانشگاه صنعتی قم
6th Iranian Conference on Mathematical Physics

مطالعه‌ی اثر فشار بر القاء ابررسانایی در H_3S: با استفاده از نظریه‌ی تابعی چگالی

میلاد عطارسیاح
دانشجوی کارشناسی ارشد، گروه فیزیک، دانشگاه فردوسی مشهد
m.attarsayyah@yahoo.com

شعبان‌رضا قربانی
استاد، گروه فیزیک، دانشگاه فردوسی مشهد
sh.ghorbani@ferdowsi.um.ac.ir

محسن مدرسی
استادیار، گروه فیزیک، دانشگاه فردوسی مشهد
m.modarresi@um.ac.ir

چکیده

در این پژوهش خواص فونونی و ابررسانایی هیدروژن سولفید (H_3S) تحت فشار در محدوده فشار $P = ۲۹ - ۵۱۰\ GPa$ با استفاده از محاسبات اصول‌اولیه در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی بررسی می‌شود. از آن‌جا که هیدروژن سولفید یک ابررسانای متعارف فونون با زوج‌شدگی قوی است، در نتیجه برای مطالعه‌ی خصوصیات ابررسانایی آن از رهیافت الیاشبرگ استفاده می‌شود. با اعمال فشارهای مختلف بر روی این ترکیب مشاهده گردید که سیستم تنها در محدوده فشار $P = ۱۸۳ - ۵۱۰\ GPa$ پایدار می‌باشد. در نتیجه در این محدوده‌ی فشار، خواص ابررسانایی هیدروژن سولفید بررسی شد. محاسبه‌ی دمای بحرانی ابررسانایی نشان داد که هیدروژن سولفید تحت فشارهای بالا دارای دمای بحرانی بسیار بالایی در حدود دمای اتاق می‌باشد.

کلید واژه ها : ابررسانایی، فشار، نظریه‌ی تابعی چگالی، دمای بحرانی ابررسانایی، پتانسیل دافعه‌ی کولنی

Study of the effect of pressure on superconductivity induction in H_3S: using density functional theory

Attarsayyah, Milad; Ghorbani, Shaban Reza; Modarresi, Mohsen[1]

[1] *Department of Physics, Ferdowsi University of Mashhad*

Abstract

In this study, the phonon and superconducting properties of hydrogen sulfide (H_3S) are investigated under pressure in the pressure range of 29-510 GPa by using the first principle calculations in the framework of density functional theory. The hydrogen sulfide is a conventional superconducting with strong electron-phonon coupling, therefore, the Eliashberg approach is used to study its superconducting properties. By applying different pressures on this compound, it was observed that the system is stable only in the pressure range of 183-510 GPa. Therefore, in this pressure range, the superconducting properties of hydrogen sulfide were investigated. The results of superconducting critical temperature showed that the hydrogen sulfide under high pressure has a very high critical temperature, which is close to the room temperature.

Key words : Superconductivity; pressure; density functional theory; superconductivity critical temperature; coulomb repulsion potential

مقدمه

کاهش مقاومت الکتریکی از زمانی‌مورد توجه قرار گرفت که از فلزات رسانا برای برقراری جریان بارالکتریکی استفاده شد. در ادامه تلاش‌های بسیاری برای کاهش مقاومت الکتریکی فلزات صورت گرفت اما از بین بردن کامل آن محقق نشد. سرانجام در سال ۱۹۱۱ هایک کامرلینگ اونس[۱] فیزیکدان هلندی، با مشاهده‌ی افت مقاومت الکتریکی جیوه به صفر (در دمای ۴٫۲K) موفق به کشف پدیده‌ی ابررسانایی شد و افق تازه‌ای برای محققان آشکار شد.[۱] ابررسانایی یک تغییر فاز ترمودینامیکی و در واقع پدیده‌ای است که برای برخی از مواد رخ می‌دهد، به گونه‌ای که در این حالت ماده خاصیت دیامغناطیسی کامل پیدا می‌کند. پس از کشف پدیده‌ی ابررسانایی، بهبود افزایش دمای بحرانی در حدود ۷۰سال بسیار کند پیش می‌رفت تا اینکه سرانجام در سال ۱۹۸۶ بدنورز و مولر[۲] پدیده‌ی ابررسانایی دمای بالا را در یک ماده‌ی پرواسکایت بر پایه‌ی لانتانیوم ($LaBaCuO_4$) با دمای بحرانی ۳۵K گزارش نمودند.[۲] با کشف ابررساناهای دمای بالا، مطالعات گسترده‌ای برای بالابردن دمای بحرانی صورت گرفته است. یکی از روش‌هایی که محققین به کمک آن درصدد افزایش دمای بحرانی بوده‌اند، اعمال فشار بر ترکیبات مختلف بوده است.

هیدروژن سولفید به دلیل دارا بودن اتم هیدروژن یکی از بهترین ترکیب‌ها برای دستیابی به ابررساناهای فونونی با دمای بحرانی بالا است. این ماده براساس مطالعات نظری، یک ابررسانای متعارف فونون با زوج‌شدگی قوی است.[۳-۶] بنابراین حالت ابررسانایی آن را می‌توان در چارچوب نظریه‌ی ابررسانایی میگدال- الیاشبرگ[۳] که فراتر از مدل BCS است به طور دقیق بررسی کرد. درزدوف و همکارانش[۴] دمای بحرانی ۲۰۳K را برای این ترکیب در فشار ۱۵۵GPa گزارش کرده‌اند که بالاترین مقدار دمای بحرانی در میان تمام ابررساناها است.[۷] از طرفی نتایج پراش پرتو X نشان داد که H_3S دارای دوفاز ساختاری پایدار R3m مثلثی و Im3m مکعبی می‌باشد که اخیرا پایداری ساختار Im3m مکعبی توسط لی و همکارانش[۵] تایید شده است.[۴] بدین ترتیب در این مطالعه ساختار شبکه H_3S مکعبی مرکز دار در نظر گرفته شد.

روش‌های محاسباتی

محاسبات توسط کد محاسباتی کوانتوم اسپرسو[۶] انجام گردید.[۸] این کد، ساختار نواری را براساس نظریه‌ی تابعی چگالی[۷] DFT و خواص فونون را بر مبنای نظریه‌ی اختلال تابعی چگالی[۸] محاسبه می‌کند. لذا توانایی محاسبه‌ی قدرت برهمکنش الکترون- فونون و تابع طیف الیاشبرگ و ثابت زوج شدگی الکترون- فونون را دارد. سرانجام دمای بحرانی ابررسانایی براساس رابطه‌ی آلن- دنیس[۹] محاسبه می‌شود. در این محاسبات از شبه‌پتانسیل فوق نرم[۱۰] USPP و انرژی قطع ۸۰Ry[۱۱] استفاده شده است. برای تابع تبادلی- همبستگی[۱۲] نیز از تقریب شیب تعمیم یافته جامدات[۱۳] GGA به روش PBESOL استفاده شد. همچنین انتگرال‌گیری بر روی منطقه اول بریلوئن به روش مونخورست‌پک[۱۴] با مش بندی ۱۱×۱۱×۱۱ انجام گردید.

---

۱ Heike Kamerling Onnes
۲ Bednorz and Müller
۳ Migdal-Eliashberg
۴ Drozdov et al.
۵ Li et al.
۶ Quantum Espresso
۷ Density Functional Theory
۸ Density Functional Perturbation Theory DFPT
۹ Allen-Dynes
۱۰ Ultra-Soft Pseudopotential
۱۱ ecutwfc
۱۲ Exchange-Correlation Functional
۱۳ Generalized-Gradient Approximation
۱۴ Monkhorst Pack

نظریه‌ی الیاشبرگ

بر اساس نظریه‌ی الیاشبرگ می‌توان ثابت زوج شدگی الکترون–فونون و دمای بحرانی ابررسانایی را محاسبه نمود. تابع $\alpha^2F(\omega)$ به عنوان تابع طیف الیاشبرگ همسانگرد به صورت زیر است:

$$\alpha^2F(\omega)=\frac{1}{N(0)N_kN_q}\sum_{nk.mq.\nu}\left|g^{\nu}_{nk.mk+q}\right|^2\times\delta(\varepsilon_{nk})\delta(\varepsilon_{mk+q})\delta(\omega-\omega^{\nu}_q) \quad (۱)$$

که در آن $N(0)$ چگالی حالت‌های الکترونی در سطح فرمی، N_k و N_q به ترتیب کل تعداد نقاط k و q است. ویژه مقادیر انرژی الکترونی با اندیس نوار (m,n) و بردارهای موج $(k,k+q)$ تعیین می‌شوند و بسامدهای فونونی با اندیس مد ν و بردار موج q مشخص می‌شوند. $g^{\nu}_{nk.mk+q}$ عناصر ماتریس ضرایب برهمکنش الکترون–فونون می‌باشد. ثابت زوج شدگی الکترون– فونون نیز به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\lambda=\sum_{q\nu}W_q\lambda_{q\nu}=2\int d\omega\frac{\alpha^2F(\omega)}{\omega} \quad (۲)$$

معمولا در صورتی که مقدار این کمیت برای ماده ای بزرگ‌تر از یک باشد، به عنوان ماده‌ای با زوج شدگی قوی فونون شناخته می‌شود. درنهایت دمای بحرانی ابررسانایی از فرمول آلن–دنیس محاسبه می‌شود:

$$T_c=\frac{\omega_{log}}{1/2}\exp\left[-\frac{1/04(1+\lambda)}{\lambda-\mu^*(1+0/62\lambda)}\right] \quad (۳)$$

μ^* ثابت برهمکنش الکترون–الکترون موثر است. ω_{log} عبارت است از:

$$\omega_{log}=\exp\left[\frac{2}{\lambda}\int d\omega\ \log\omega\ \frac{\alpha^2F(\omega)}{\omega}\right] \quad (۴)$$

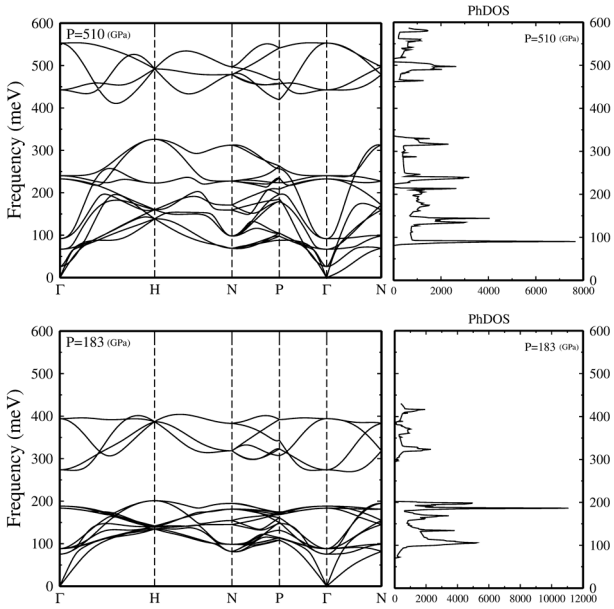
که این رابطه متوسط وزن داده شده از بسامدهای فونونی است.[۹]

خواص فونونی

شکل ۱ ساختار شبکه هیدروژن سولفید به همراه مسیرهای با تقارن بالا را نشان می‌دهد. ابتدا ساختار را در نقاط پرتقارن مورد بررسی قرار می‌دهیم.

شکل۱– الف) ساختار شبکه ترکیب H_3S. ب) مسیرهای پرتقارن در منطقه اول بریلوئن. b_1، b_2 و b_3 بردارهای شبکه وارون می‌باشند.

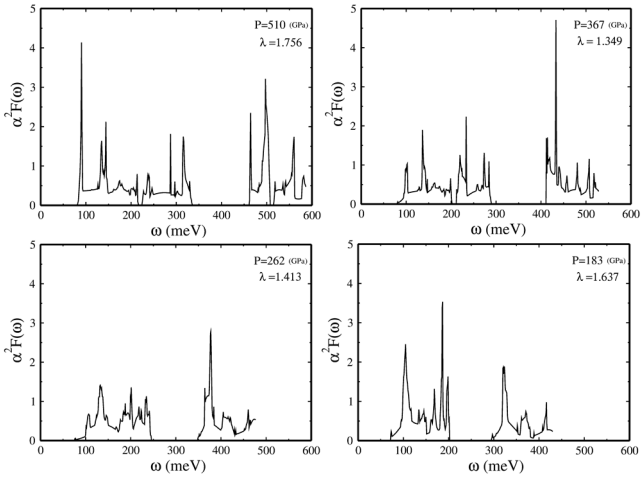
با محاسبه‌ی طیف پاشندگی فونونی و چگالی حالت‌های فونونی در محدوده‌ی فشار ذکر شده، مشاهده می شود که تنها در محدوده‌ی فشار P = ۱۸۳ - ۵۱۰ GPa هیچ بسامد منفی که بیانگر ناپایداری سیستم باشد، مشاهده نمی‌شود که نتایج مربوط به آن در در دو فشار ۱۸۳GPa و ۵۱۰GPa در شکل ۲ نشان داده شده است. از طرفی گاف بسامدی در این تصاویر مشاهده می‌شود. همچنین با کاهش فشار، مدهای فونونی و گاف نواری به سمت فرکانس‌های کمتر جابه‌جا می‌شود.



شکل۲– طیف پاشندگی و چگالی حالت‌های فونونی ترکیب H_3S در فشارهای ۱۸۳GPa و ۵۱۰GPa.

خواص ابررسانایی

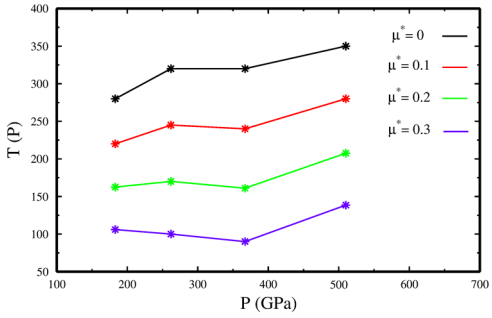
برای بررسی خصوصیات ابررسانایی، طیف تابع الیاشبرگ $\alpha^2F(\omega)$ و ثابت زوج شدگی الکترون– فونون λ در فشارهای مختلف محاسبه شد که نتایج آن در شکل ۳ نشان داده شده است.



شکل ۳- طیف تابع الیاشبرگ $\alpha^2F(\omega)$ و ثابت زوج شدگی الکترون- فونون λ در فشارهای مختلف

باتوجه به نتایج نشان داده شده در شکل ۳، سطح زیر طیف تابع الیاشبرگ با کاهش فشار به تدریج کاهش یافته و به سمت بسامدهای کمتر جابه‌جا می‌شود. لذا با کاهش فشار، ثابت زوج شدگی الکترون- فونون نیز در محدوده‌ی فشار $P = ۲۶۲ - ۵۱۰$ GPa کاهش می‌یابد. اما مشاهده شد که در فشارهای کمتر از $P = ۲۶۲$ GPa، ثابت زوج شدگی الکترون- فونون با کاهش فشار روند صعودی دارد. ثابت زوج‌شدگی الکترون- فونون بیشتر از یک این ترکیب بیانگر این است که H_3S یک ابررسانای با زوج‌شدگی قوی می‌باشد.

با استفاده از نتایج مربوط به ثابت زوج شدگی الکترون- فونون، دمای بحرانی ابررسانایی (T_C) با استفاده از رابطه آلن-دنیس برای برهمکنش‌های مختلف الکترون-الکترون برحسب فشار محاسبه گردید. نتایج به دست آمده برای دمای بحرانی در فشارهای مختلف در شکل ۴ نشان داده شده است.



شکل۴- دمای بحرانی ابررسانایی برحسب فشار در مقدارهای متفاوت پتانسیل کولنی

این نتایج نشان می‌دهد که با افزایش مقدار پتانسیل کولنی که باعث تشکیل کمتر زوج‌های کوپر می‌شود، دمای بحرانی ابررسانایی کاهش می‌یابد. در پتانسیل کولنی صفر با افزایش فشار، دمای بحرانی افزایش می‌یابد. به طوری‌که در فشارهای بیش از ۲۰۰ GPa، دمای بحرانی در حدود دمای اتاق است.

تحلیل نتایج

نتایج مربوط به اعمال فشارهای مختلف نشان داد که تنها در محدوده‌ی فشار $P = ۱۸۳ - ۵۱۰$ GPa سیستم پایدار می‌باشد. نتایج مربوط به مقدار ثابت زوج‌شدگی الکترون- فونون نیز نشان داد که مقدار آن بیشتر از یک است لذا این ترکیب یک ابررسانای با زوج‌شدگی قوی می‌باشد. سرانجام مشاهده شد که دمای بحرانی ابررسانایی با افزایش فشار در یک مقدار ثابت از پتانسیل کولنی افزایش می‌یابد و با افزایش مقدار پتانسیل کولنی، مقدار دمای بحرانی ابررسانایی کاهش می‌یابد.

مرجع‌ها

[۱] Cardwell, D. High-temperature superconducting materials. *Electronic Materials*: Springer; 1991. p. 417-30 .

[۲] Yin, Z. *Microscopic mechanisms of magnetism and superconductivity studied from first principle calculations*, 2009.

[۳] Errea, I., Calandra, M., Pickard, C J., Nelson, J., Needs, R J., Li, Y., Liu, H., Zhang, Y., Ma, Y., Mauri, F. High-pressure hydrogen sulfide from first principles: A strongly anharmonic phonon-mediated superconductor. Phys.Rev. Lett **114**, 157004 (2015).

[۴] Duan, D., Liu, Y., Tian, F., Li, D., Huang, X., Zhao, Z., Yu, H., Liu, B., Tian, W., Cui, T. Pressure-induced metallization of dense $(H_2S)_2H_2$ with high-T_C superconductivity. Sci. Rep **4**, 6968 (2014).

[۵] Liu, H., Li, Y., Gao, G., Tse, J S., Naumov, I I. Crystal structure and superconductivity of PH_3 at high pressures. J. Phys. Chem. C **120**, 3458 (2016).

[۶] Flores-Livas, J A., Amesler, M., Heil, C., Sanna, A., Boeri, L., Profeta, G., Wolverton, C., Goedecker, S., Gross, E. Superconductivity in metastable phases of phosphorus-hydride compounds under high pressure. Phys. Rev. B **93**, 020508 (2016).

[۷] Drozdov, A P., Eremets, M I., Troyan, I A., Ksenofontov, V., Shylin, S I. Conventional superconductivity at 203 kelvin at high pressures in the sulfur hydride system. Nature **525**, 73 (2015).

[۸] Giannozzi, P., Baroni, S., Bonini, N., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., Ceresoli, D., Chiarotti, G L., Cococcioni, M. Dabo, I. QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials, J. Phys.: Condens. Matter **21**, 395502 (2009).

[۹] ت.مرشدلو، بررسی امکان القاء ابررسانایی در نانو ساختارهای دوبعدی بر پایه‌ی محاسبات اصول اولیه، پایان‌نامه دوره دکترا، دانشگاه فردوسی مشهد، ۱۳۹۴