

Artur Durajski - popularnonaukowe streszczenie projektu

Materiał, który byłby w stanie przewodzić prąd z absolutnie zerową rezystancją w temperaturze pokojowej jest niczym *Święty Graal* od ponad 100 lat poszukiwany przez naukowców. Jego odkrycie niewątpliwie mogłoby doprowadzić do rewolucji w elektronice, energetyce, transporcie i wielu innych dziedzinach naszego życia. Do niedawna najwyższą temperaturą krytyczną równą 164 K (-109°C) charakteryzował się związek tlenowo-miedziowy na bazie rtęci (HgBaCaCuO). Po 20 latach od jego odkrycia, w grudniu 2014 roku zaprezentowano pierwsze wyniki eksperymentalne (zaktualizowane w czerwcu 2015 roku oraz potwierdzone w maju 2016 roku), które dowodzą, że związek H_2S umieszczony pod wysokim ciśnieniem posiada ekstremalnie wysokie wartości temperatury krytycznej. W szczególności, w zakresie ciśnień od 115 GPa do 200 GPa, temperatura krytyczna rośnie od 31 K do 150 K. Dodatkowo należy podkreślić fakt, że zaobserwowano silny efekt izotopowy, co wyraźnie sugeruje elektronowo-fononowe pochodzenie stanu nadprzewodzącego. Co ciekawe, w skutek dysocjacji wyjściowego związku ($3\text{H}_2\text{S} \rightarrow 2\text{H}_3\text{S} + \text{S}$), wyindukował się stan nadprzewodzący o temperaturze krytycznej wynoszącej aż 203 K (-70°C) pod ciśnieniem 150 GPa. Z fizycznego punktu widzenia uzyskany rezultat oznacza, że odkryto nadprzewodnik o najwyższej, jak dotąd znanej wartości temperatury krytycznej. Poza tym, że zamiast ciekłego azotu do jego schłodzenia wystarczy suchy lód, charakteryzuje się on również tym, że jest łatwy i tani w produkcji. Problem związany jest jedynie z wysokim ciśnieniem wymaganym do metalizacji oraz przejścia siarkowodoru w stan nadprzewodzący. Z aplikacyjnego punktu widzenia pożądanym jest więc znalezienie sposobu na obniżenia ciśnienia do wartości atmosferycznej.

W świetle powyższych faktów eksperymentalnych naturalnym kierunkiem dalszych prac naukowych jest poszerzenie wiedzy na temat stanu nadprzewodzącego w rodzinie związków bogatych w wodór. Moje dotychczasowe badania teoretyczne dotyczące właściwości termodynamicznych wspomnianych materiałów bazowały na formalizmie równań Eliashberga, stanowiącym uogólnienie teorii Bardeena-Coopera-Schrieffera (teoria BCS) na układy charakteryzujące się silnym sprzężeniem elektron-fonon. Przeprowadzona analiza pozwoliła na ilościowe wyznaczenie wartości temperatury krytycznej, różnicy energii swobodnej pomiędzy stanem normalnym i nadprzewodzącym, termodynamicznego pola krytycznego, ciepła właściwego dla stanu nadprzewodzącego oraz wartości przerwy energetycznej na poziomie Fermiego i masy efektywnej elektronu. Poprzez uogólnienie uzyskanych wyników, oszacowałem zakres wartości temperatury krytycznej możliwy do zaobserwowania w związkach typu H_nS , gdzie $n = \{1, 2, 3\}$. W wyniku powyższej analizy stwierdzono, że maksymalna wartość temperatury krytycznej może wynosić aż 290 K (17°C) co daje nadzieje na kolejny przełom i sugeruje eksperymentatorom dalsze poszukiwania.

W ramach niniejszego projektu przeprowadzone zostaną poszukiwania mające na celu określenie czy w wyniku domieszkowania związku H_3S pierwiastkami *bloku p* lub *bloku s* układu okresowego jest możliwość obniżenia ciśnienia i podwyższenia temperatury krytycznej do poziomu umożliwiającego aplikacyjne wykorzystanie badanych materiałów. Przy użyciu oprogramowania Quantum-Espresso wykonane zostaną niezbędne obliczenia *ab-initio* struktury elektronowej, fononowej oraz sprzężenia-elektron fonon. Poza wpływem koncentracji domieszek na stabilność stanu nadprzewodzącego badany będzie również wpływ kompresji komórki elementarnej oraz występujące w jej wyniku przejścia strukturalne. Przeprowadzenie kompleksowych badań teoretycznych jest istotne z punktu widzenia przyszłych badań eksperymentalnych. O słuszności powyższego stwierdzenia może świadczyć fakt, że pierwsze eksperymentalne badania związku siarki z wodorem zostały poprzedzone i bezpośrednio zainspirowane obliczeniami *ab-initio* przeprowadzonymi przez Yinwei Li i współpracowników.