**Исследование сверхпроводимости под высоким давлением серии сплавов (La3,Y)H40 неупорядоченной структуры с помощью методов математического моделирования**

***Ван Сяоя***

*Студент (магистр)*

*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,*

*Институт русского языка и культуры, Москва, Россия*

*E–mail: 1804294439@qq.com*

Сверхпроводимость — это свойство некоторых материалов обладать строго нулевым электрическим сопротивлением (при постоянном токе), когда их температура достигает определённого значения, т.е. критической температуры.

Было установлено, что сверхпроводники делятся на два больших семейства: I типа (чистые металлы) и II типа (ими обычно являются сплавы разных металлов).

С помощью сверхпроводимости можно передавать ток без потерь и без связанного с этим выделения тепла. Благодаря свойству сверхпроводимости можно создавать мощные магнитные поля, если пропускать сильный ток по сверхпроводящей катушке. (Этот эффект применяют, например, в магнитно-резонансной томографии). Кроме медицины, сверхпроводники сегодня используются в науке, энергетике, транспорте.

Явление сверхпроводимости было открыто в 1911 г., когда изучали свойства ртути при температурах ниже 4,2 К. Самым «высокотемпературным» сверхпроводником оказался химический элемент ниобий, его критическая температура составляет 9К. [7,8] Однако таких температур очень трудно достичь на практике, поэтому ученые всегда мечтали научиться получать сверхпроводники при комнатной температуре.

Нулевое сопротивление — это не единственное особенное свойство. Одним из главных отличий сверхпроводников от идеальных проводников является эффект Мейснера, который открыли Вальтер Мейснер и Роберт Оксенфельд в 1933 году. [6]

Явление сверхпроводимости исчезает при сильных магнитных полях и высоких температурах.

Дальнейшие исследования показали, что свойством сверхпроводимости также обладают сложные соединения с ковалентной связью с критической температурой 40 К. С середины 90-х годов XX века, когда для синтеза сверхпроводников применили высокое давление, были получены сложные оксиды меди — купраты с критической температурой 165 К.

В это же время, с начала 2000-х, проводились исследования свойств водорода, который по теоретическим расчётам в металлической фазе должен быть сверхпроводником (согласно современным данным для этого нужно использовать давление 4,5 млн атм). Попытки получить такой водород оказались безуспешными, однако появилось предположение, что соединения водорода в определенных условиях тоже могут обладать сверхпроводимостью. Их дальнейшее изучение привело к получению устойчивого соединения $H\_{3}S$ с критической температурой 203 К [1,2,5]

Многочисленные эксперименты, которые проводились потом, и анализ их результатов помогли систематизировать все полученные данные в виде таблицы Менделеева, где для каждого элемента указана максимальная температура сверхпроводимости его гидридов. Выяснилось, что сверхпроводимость хорошо коррелирует с таблицей Менделеева и с наибольшей вероятностью свойством сверхпроводимости должны обладать соединения элементов, которые располагаются в таблице на линии литий -лантан.

 На сегодняшний день теоретически и экспериментально исследованы бинарные гидриды почти всех элементов периодической таблицы. По сравнению с ковалентными соединениями водорода гидриды металлов более разнообразны и многочисленны.

Самыми высокотемпературными сверхпроводниками среди гидридов металлов оказались соединения иттрия (224 K для гидрида YH6. [3]) и лантана (250-260 К для LaH10 [1,2,5]). Лантан и иттрий похожи по своим свойствам, а их гидриды отличаются: YH6 существует, а LaH6 нет, а для LaH10 и YH10 наоборот: LaH10 существует, а YH10 – нет.

Следующим шагом в изучении сверхпроводимости стали исследования сверхпроводимости тройных гидридов.

Тройные гидриды образуют сложные структуры благодаря различным строениям кристаллических решёток, которые обеспечивают скоординированный перенос заряда, сочетают преимущества различных элементов и могут индуцировать сильную электронно-фононную связь, что делает их перспективными объектами для изучения сверхпроводимости.

 В работе Kostrzewa[4] и др. были проведены теоретические расчёты, которые показали, что тернарный гидрид La-Y-H может иметь$ T\_{c}$до 274 K при 190 ГПа, это стало началом для других теоретических исследований тройных гидридов La-Y[3].

Цель данной работы— математическоемоделирование серии неупорядоченных сплавов с концентрацией 75% La и 25% Y-(La3,Y)H40 на основе структуры -LaH10 методом квазислучайной структуры (SQS) и исследование их сверхпроводимости .

Прогнозирование структуры кристаллов при высоком давлении — это исследование отбора и сравнения стабильных структур, которые существуют в кристаллах в условиях давления выше атмосферного. Высокое давление, как экстремальное условие, может эффективно изменять объем кристалла, а также расстояние между атомами, что, в свою очередь, приводит к изменениям в атомной структуре и вызывает структурные фазовые переходы.

В результате исследования было установлено, что фаза$ Pm\overline{3}m−$La3YH40 кинетически стабильна при 250 и 300 ГПа. Для альтернативного сплава (La0,75Y0,25)H10 предсказана температура сверхпроводящего перехода около 309 K (~ +36 °C) при 250 ГПа и около 295 K (~22°C) при 300 ГПа. Кинетика альтернативных сплавов (La2Y2H40,La3Y1H40,La1Y3H40) с соотношением атомных номеров La, Y= 1:1, 3:1, 1:3 стабильна при 300 ГПа, и все эти сплавы имеют температуру сверхпроводящего перехода при 300 ГПа немного выше комнатной.

Литература

1. Duan, D., Liu, Y., Tian, F., Li, D., Huang, X., Zhao, Z., Yu, H., Liu, B., Tian, W. and Cui, T. (2014) Pressure-Induced Metallization of Dense (H2S)2H2 with High-Tc Superconductivity. Scientific Reports, 2014, V.4(1), 6968. <https://doi.org/10.1038/srep06968>
2. Duan, D., Huang, X., Tian, F., Li, D., Yu, H., Liu, Y., Ma, Y., Liu, B. and Cui, T. (2015) Pressure-Induced Decomposition of Solid Hydrogen Sulfide. Physical Review B, 2015, V.91(18), 180502. <https://doi.org/10.1103/physrevb.91.180502>
3. Ivan A. Trojan, Dmitrii Semenok, Alexander G. Kvashnin , Andrey V. Sadakov at al ,Anomalous high-temperature superconductivity in YH6; June 2020, DOI:10.13140/RG.2.2.10308.86406//https://www.researchgate.net/publication/342130990\_Anomalous\_high-temperature\_superconductivity\_in\_YH6.
4. Kostrzewa, M., Szczęśniak, K. M., Durajski, A. P. & Szczęśniak, R. From LaH10 to room–temperature superconductors. 2020,V.10, P.1–8.
5. Liu H, Nanumov I I, Hoffmann R, et al. Potential high-Tc superconducting lanthanum and yttrium hydrides at high pressur [J]. Proceedings of the National Academy of Sciences, 2017, V.114(27) P. 6990-6995. DOI:10.1073/pnas.1704505114.
6. Meissner, W. and Ochsenfeld, R. (1933) Ein neuer Effekt bei eintritt der Supraleitfähigkeit. Naturwissenschaften, 21, 787-788. <http://dx.doi.org/10.1007/BF01504252>
7. Onnes H K. Leiden Comm. 1911, V.122b, 122 c
8. Oya G I, Saur E J. Preparation of Nb3Ge films by chemical transport reaction and their critical properties [J]. Journal of Low Temperature Physics, 1979, V. 34(5), P.569-583