

Podjęcie z pierwszych zasad do skorelowanych molekularnych i atomowych płaszczyzn wodorowych: Rola oddziaływania wymiany i nadprzewodnictwo

Andrzej P. Kądzielawa^{1*}, Andrzej Biborski², Józef Spałek¹

¹Instytut Fizyki im. Mariana Smoluchowskiego, Uniwersytet Jagielloński, Kraków

²Akademickie Centrum Materiałów i Nanotechnologii, Akademia Górniczo-Hutnicza, Kraków

*andrzej.kadzielawa@uj.edu.pl



ACMiN
AGH



NARODOWE CENTRUM NAUKI

Krynica Morska, 9 października 2017

- 1 Wstęp
 - Wodór w mediach
 - Metalizacja - kontekst historyczny
 - Exact Diagonalization Ab Initio (EDABI)
- 2 Układy 2D: sieć kwadratowa
 - Model
 - Wyniki
- 3 Układy 2D: sieć trójkątna
 - Model
 - Wyniki: charakterystyka
 - Nadprzewodnictwo
- 4 Podsumowanie

R. P. Dias, I. F. Silvera, Science 10.1126/science.aal1579 (2017)



SCIENCE

Hydrogen Squeezed Into a Metal, Possibly Solid, Harvard Physicists Say

By KENNETH CHANG JAN. 26, 2017



Transfurter Allgemeine
Wissen

Wasserstoff zu Metall gequetscht?
NACHRICHTEN LINDENBERG

Ingeniøren

Nyheder Blogge Debatt Jævnfør Artikler Mere

HOME PICKS KUNSTIG INTELLIGENS 3D-PRINT DIESELSKANDALEN KAMPF FOR MILJØ

Metallisk hydrogen sætter forskerverdenen i kog

Påstand om fremstilling af metallisk hydrogen mødes med meget hård kritik fra forskere. Lige til skråledpenden, lyder det. Andre bakker dog de kritiserede forskere op.

af Jens Rasmussen 2. feb 2017 kl. 12:03

БЕСИМРУ Newsy Bazar Sentyabr Sentyabr

Сверхпроводники и изучение сверхпроводимости

Le Scienze

Le Scienze Mendeleevio | comportamento | epidemiologia | onde gravitazionali

12 gennaio 2017

Idrogeno solido metallico, un annuncio e molti dubbi

Due ricercatori hanno annunciato di aver prodotto per via teorica circa un grammo di un metallo che apre la strada a nuove applicazioni, dai superconduttori ai propellenti per razzi. Ma non pochi scienziati nutrono dubbi riguardo alla mobilità con cui è stato svolto l'perimento e dunque al suo risultato

NEW TODAY CONCLAVE 2017 ASSEMBLY ELECTIONS 2017 NEWS TODAY INDIA TODAY

World's first metallic hydrogen sample disappears

Last month physicists from Harvard University in the US had claimed to have successfully turned hydrogen into a metal - something researchers had been struggling to achieve for more than 80 years.

PR | Posted by Sigi Jose
Updated February 07, 2017 10:20:07

INDEPENDENT News Video Audio Images Text RSS Syndication Contact Us

World's only piece of a metal that could revolutionise technology has disappeared, scientists reveal

Exclusive: the world's only piece of metal that could revolutionise technology has disappeared, scientists reveal

REUTERS

TECHNOLOGY NEWS | Feb 01, 2017 | 12:00 GMT

U.S. scientists create metallic hydrogen, a possible superconductor, ending quest

FULL COVERAGE: INDIA ELECTIONS 2017

RMF 24 NAJBLIZIEJ FAKTOM

CIĘTY | OPAC | ANGLE RMF FM | RODZINA | ZŁĘCIA | FILMY

Proryw w fizyce? Twardy metaliczny wodor, возможно, стал реальностью

FOX NEWS Tech

Scientific breakthrough lost? Unique metallic hydrogen sample disappears

RMF 24 | Feb 1 | News | Technological breakthrough: world's first metallic hydrogen sample disappears

Metaliczny wodor, material marzeń, stał się rzeczywistością

Opublikowano: 26 stycznia 2017 r.

Jego istnienie fizycy przewidzieli od 80 lat. Teraz zostało stał się faktem. Naukowcy z Uniwersytetu Harvarda ogłosili sukces. W udało im się stworzyć metaliczny wodor, material a potencjalnie rewolucyjny materiał. Nie małe jego wytworzenie wymaga osiągnięcia niskiej temperatury i olbrzymiego ciśnienia, warunków, z jakimi nie są w stanie sobie poradzić, prócz skądś się stabilnie w normalnych warunkach, mógłby być w temperaturze pokojowej) nadaj przewodnikiem. To niecodziennie stworzenie w małej ilości, chociaż wymagających ogromnej energii. Prawdopodobnie w najgłębszym nieznanej obszarze "Science".

Metalizacja wodoru

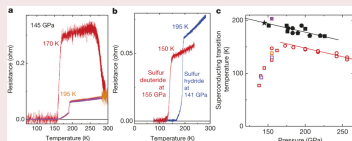
Stan metaliczny

E. Wigner i H. B. Huntington,
J. Chem. Phys. **3**, 764 (1935):

- odległość H – H (d_{HH}),
- promień Wignera-Seitza ($r_s \equiv (\frac{3}{4\pi n})^{1/3}$).

Metalizacja przy $p \approx 25 \text{ GPa}$:
 $2r_s > d_{HH}$.

Wodór w 2D, a nadprzewodnictwo



A. P. Drozdov et al., Nature **525**, 73 (2015)

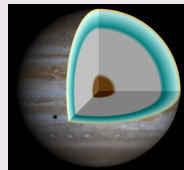
Stan nadprzewodzący

N. Ashcroft, PRL **21**, 1748 (1968)

$$T_C = \Theta_D \mathcal{F}(\lambda(r_s))$$

- Θ_D - temperatura Debye'go,
- λ - sprzężenie elektron-fonon.

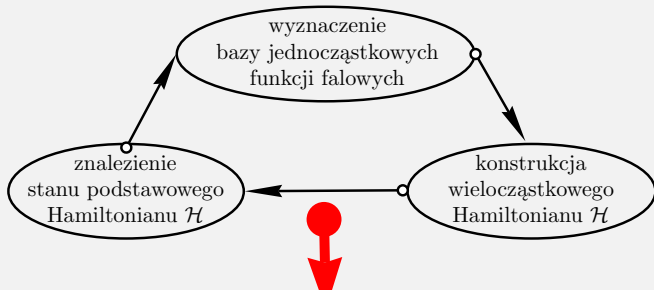
| | r_s (a_0) | T_C (K) |
|----------------------|-----------------|---------------------|
| powierzchnia Jowisza | 0.1 | 2×10^{-27} |
| jądro Jowisza | 0.8 | 283.4 |



en.wikipedia.org/wiki/Metallic_hydrogen

Jądro Jowisza:
nadprzewodzący wodór z $T_C \sim 300 \text{ K}$?

Metoda: Exact Diagonalization Ab Initio (EDABI)



- energia E_0 : $\mathcal{H} |\Phi_0\rangle = E_0 |\Phi_0\rangle$;
- N -cząstkowy stan podstawowy: $|\Phi_0\rangle \equiv \sum_i \mathcal{A}_i \left| c_{\pi_1(i)}^\dagger c_{\pi_2(i)}^\dagger \cdots c_{\pi_N(i)}^\dagger \right\rangle$;
- zrenormalizowany operator pola: $\hat{\Psi} \Rightarrow$ observable

Prace źródłowe

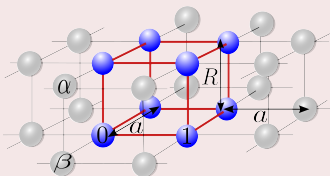
J. Spałek et al., Phys. Rev. B **61**, 15676 (2000);

APK et al., Eur. Phys. J. B **86**, 252 (2013);

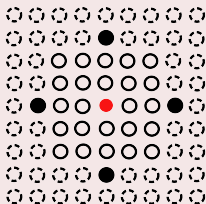
A. Biborski, APK, J. Spałek, Comput. Phys. Commun. **197**, 7 (2015);

Układ molekularny: sieć kwadratowa (SQ) – model

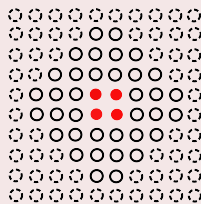
Dwuwymiarowy kryształ



schemat komórki



zasięg przeskoków



zasięg oddziaływań

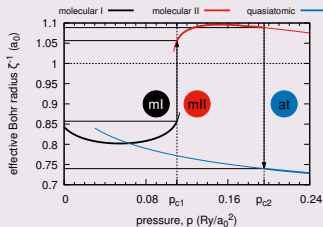
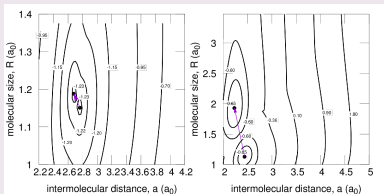
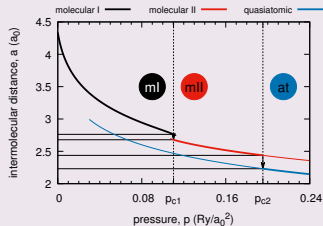
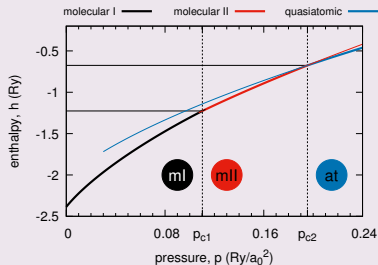
- periodyczne warunki brzegowe w płaszczyźnie xy
- 8 atomów w superkomórce
- rozszerzony model Hubbarda:

$$\mathcal{H} = \sum_i \epsilon_i (\hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow}) + \sum_{i \neq j} t_{ij} (\hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j\uparrow} + \hat{c}_{i\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j\downarrow}) + \sum_i U_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + \sum_{i \neq j} K_{ij} \hat{n}_i \hat{n}_j$$

- przeskoki t_{ij} do 13go sąsiada
- odpychanie kulombowskie K_{ij} do 13go sąsiada

Dwuetapowa atomizacja w 2D

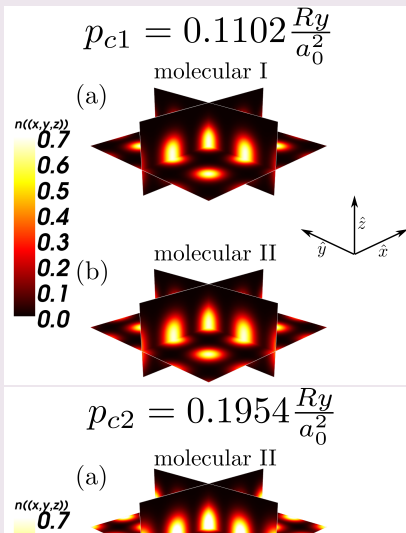
Entalpia i optymalne parametry sieci



A. Biborski, APK, J. Spałek, Phys. Rev. B 96, 085101 (2017) pp. 1-18

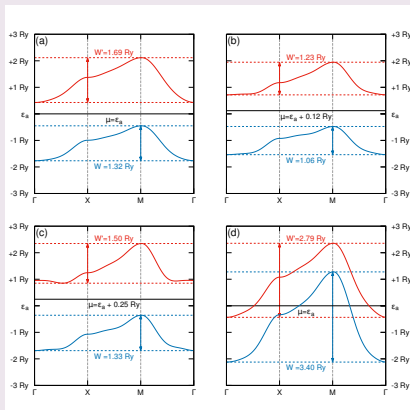
Dwuetapowa atomizacja w 2D

Gęstość prawdopodobieństwa elektronów w sieci

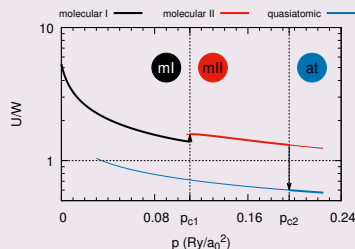
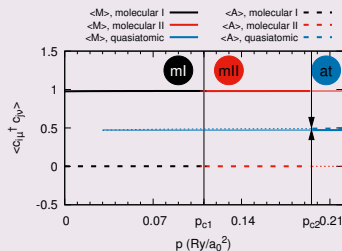


Dwuetałowa metalizacja w 2D

“Naga” relacja dyspersji i funkcje korelacji

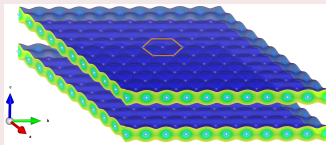
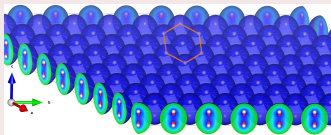


(a-b): przejście $MI \rightarrow MII$: faza molekularna I (a) i faza molekularna II (b)
 (c-d): przejście $MIII \rightarrow QA$: faza molekularna II (c) i faza kwaziatomowa (d)



Układ molekularny: sieć trójkątna (ST) – model

Dwuwymiarowy kryształ

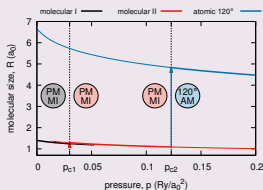
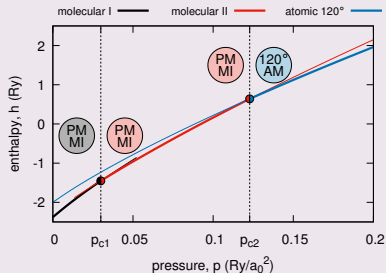
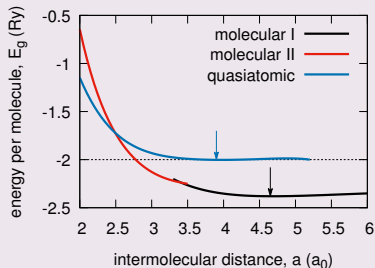


- periodyczne warunki brzegowe w płaszczyźnie xy
- 6 i 8 atomów w superkomórce
- rozszerzony model Hubbarda z oddziaływaniem wymiennym i przeskokami par: $\mathcal{H} = \sum_i \epsilon_i (\hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow}) + \sum_{i \neq j} t_{ij} (\hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i\uparrow} + \hat{c}_{i\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i\downarrow}) + \sum_i U_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + \sum_{i \neq j} K_{ij} \hat{n}_i \hat{n}_j - \sum_{i \neq j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{1}{4} \sum_{i \neq j} J_{ij} \hat{n}_i \hat{n}_j + \sum_{i \neq j} J_{ij} \hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j\downarrow} \hat{c}_{j\uparrow}$
- przeskoki t_{ij} do 10go sąsiada
- odpychanie kulombowskie K_{ij} do 10go sąsiada
- oddziaływanie wymiany J_{ij} do 3go sąsiada

Dwuetapowa atomizacja w 2D

Uwaga: Porządek Néela 90° jest niestabilny.

Entalpia i optymalne parametry sieci



Pytanie:

Co stanowi o "atomowości" struktury, skoro R_{eff} jest skończona?

Warunek atomowości

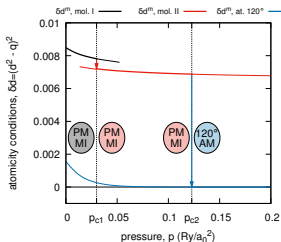
Warunek "naiwny"

Odległość międzypłaszczyznowa $R_{eff} \rightarrow \infty \Leftarrow$ **Nie działa!**
(oczekujemy oddziaływań typu van der Waalsa)

Propozycja

$$\delta d \equiv \left(P_a(\uparrow\downarrow)^2 - P_m \left(\begin{array}{c} \uparrow\downarrow \\ \uparrow\downarrow \end{array} \right) \right)^2 \equiv (d^2 - q)^2,$$

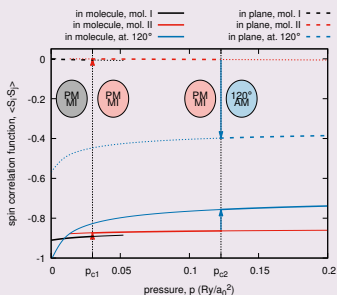
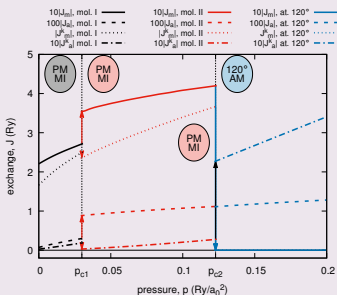
- $d \equiv P_a(\uparrow\downarrow)$
podwójne obsadzenie na **atomie**,
- $q \equiv P_m \left(\begin{array}{c} \uparrow\downarrow \\ \uparrow\downarrow \end{array} \right)$
poczwórne obsadzenie na **molekule**.



Faza jest atomowa, gdy z dokładnością numeryczną $\delta d \approx 0$.

Uporządkowanie magnetyczne

Funkcje korelacji spinowej

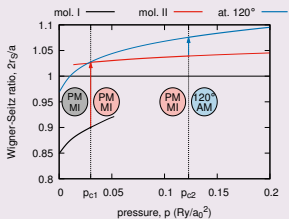
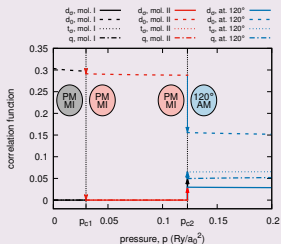


Wnioski

- AF J_{kin} dominuje FM J
- faza molekularna I: paramagnetyk
- faza molekularna II: paramagnetyk
- faza atomowa: dwie skorelowane płaszczyzny z porz. Néela 120°

Dwuetaпова metalizacja w 2D

Nowe dowody na metaliczność fazy atomowej



- $q \equiv P \begin{pmatrix} \uparrow\downarrow \\ \uparrow\downarrow \end{pmatrix}$
- $t_{\uparrow} \equiv P \begin{pmatrix} \uparrow \\ \uparrow\downarrow \end{pmatrix}$
- $t_{\downarrow} \equiv P \begin{pmatrix} \downarrow \\ \uparrow\downarrow \end{pmatrix}$

$$d_0 \equiv P \begin{pmatrix} \uparrow \\ \downarrow \end{pmatrix}$$

$$d_{\uparrow} \equiv P \begin{pmatrix} \uparrow \\ \uparrow \end{pmatrix}$$

$$d_{\downarrow} \equiv P \begin{pmatrix} \downarrow \\ \downarrow \end{pmatrix}$$

(góra):

średnie ilościowe związane z metalizacją

(dół):

warunek metalizacji Wignera-Seitza oparty o promień $r_s \equiv \left(\frac{3}{4\pi n}\right)^{1/3}$

Nadprzewodnictwo

$$r_S = r_S(V)$$

- objętość **molekuły** w fazie molekularnej:
 $V \equiv a^2(R + \frac{2}{\zeta})$,
- objętość **dwóch atomów** w fazie atomowej:
 $V = 2 \times a^2 \frac{2}{\zeta}$,

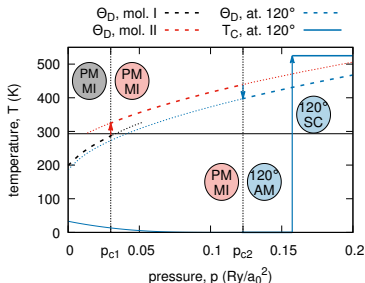
| article | method | r_S (a ₀) |
|---|------------|-------------------------|
| J. McMinis et al. (arXiv:1309.7051) | DMC | 2.27 |
| G. Mazzola et al. (Nat. Commun. 5, 3487 (2014)) | DMC | 1.28 |
| J.-L. Li et al. (Phys. Rev. B 66, 035102 (2002)) | LSDA | 2.78 |
| J.-L. Li et al. (Phys. Rev. B 66, 035102 (2002)) | GGA | 2.50 |
| B. I. Min et al. (Phys. Rev. B 33, 324 (1986)) | LMTO-LSDA | 2.85 |
| A. Svane et al. (Solid State Commun. 76, 851 (1990)) | SIC-LSDA | 2.45 |
| B. G. Pfommer et al. (Phys. Rev. B 58, 12680 (1998)) | GGA-PW91 | 2.5 |
| APK, AB, JS (Phys. Rev. B 96, 085101 (2017)) | EDABI | 1.265 |
| R. P. Dias et al. (Science: 10.1126/science.aal1579 (2017)) | experiment | 1.255 – 1.34 |

Zmodyfikowana formuła McMillana

T_C zależy od:

- Θ_D (temperatura Debye'go),
- $\alpha \approx 1.0$,
- $\lambda^2 \equiv 0.166 r_S$.

Stosujemy przybliżenie Ashcrofta sprzężenia elektron-fonon.



Wnioski

Fizyka układów wodorowych

- jednoczesna metalizacja i atomizacja;
- niezbędne dalekozasięgowe oddziaływania;
- bogactwo faz niezależnie od wymiarowości;
- wymagające metody numeryczne

(EDABI + );

Nadprzewodnictwo indukowane wodorem

- układ nie jest ani swobodny, ani silnie skorelowany;
- konieczne anharmoniczne fonony;
- nieznan mechanizm przejścia do fazy nadprzewodzącej (np. w H_3S);
- wymagane ekstremalne ciśnienia;
- perspektywiczne stany metastabilne przy niskich ciśnieniach;

Dziękuję za uwagę

