REVISTA
ORINOQUIA
CIENCIA Y SOCIEDAD

Vol. III - 2019
ISSN 2422-2917 Digital
2422-197X Impreso
Artículo de Divulgación

Unitrópico en la frontera científica de la superconductividad

José A. Camargo Martínez[1]*, Guillermo I. González Pedreros[2]

Resumen
La determinación de la temperatura crítica de un material superconductor y el establecimiento de los mecanismos y variables que la afectan, es un problema abierto de gran interés científico. Actualmente Unitrópico, a través del Grupo de investigación en Ciencias Básicas, Aplicación e Innovación – CIBAIN, junto con investigadores de la Universidad Militar y el Cinvestav-México hacen parte del equipo que desarrolla un importante estudio de frontera científica en física del estado sólido sobre superconductividad.

Palabras claves
Superconductividad — Temperatura crítica — Presión —H_3S

[1] *Grupo de Investigación en Ciencias Básicas, Aplicación e Innovación - CIBAIN, Unitrópico, Yopal, Colombia*
[2] *Departamento de Física, Universidad Militar Nueva Granada, Bogotá, Colombia*
***Autor para correspondencia**: jcamargo@unitropico.edu.co

Introducción

La superconductividad se puede entender, en una primera escala, como la pérdida total de la resistividad eléctrica de un material, por debajo de su temperatura de transición al estado superconductor (Baquero y Navarro, 2007). Este es un estado físico cuyas aplicaciones apuntan a una posible nueva revolución tecnológica e industrial. El objetivo final de las investigaciones en esta temática es lograr que la temperatura, en la cual se induce el estado superconductor (conocida como temperatura crítica superconductora, Tc), sea mayor o igual a la temperatura ambiente, para hacer viable su aplicación a gran escala.

Importantes propuestas teóricas sobre posibles mecanismos microscópicos que expliquen la transición del estado normal al superconductor han sido discutidas por la comunidad científica. El mecanismo electrón-fonón tiene la más larga historia y probablemente es el matemáticamente más fundamentado. En la famosa teoría BCS de Bardeen-Cooper-Schrieffer, la atracción efectiva entre electrones se genera por la interacción entre los electrones y las vibraciones de la red (interacción electrón-fonón) (J. Bardeen, L. Cooper, y J. Schrieffer, 1957), esta teoría pudo explicar con muy buena aproximación el fenómeno en materiales con temperaturas críticas por debajo de los 77 K. Materiales superconductores con Tc's mayores a 77 K son denominados superconductores de alta temperatura crítica (SATEC), para los cuales la teoría BCS no ofrece una exacta explicación. Una teoría más elaborada que incluye detalles microscópicos es la teoría de Migdal-Eliashberg, ME, (Eliashberg, 1960). Con la teoría ME ha sido posible estudiar y describir el comportamiento superconductor de numerosos elementos y aleaciones (J. P. Carbotte, 1990; F. Marsiglio y J. Carbotte, 2008). Que la superconductividad sea debida a las vibraciones de la red de átomos es la característica fundamental de los llamados superconductores convencionales.

Actualmente la determinación de la temperatura crítica de un material superconductor y el establecimiento de los mecanismos y variables que la afectan, es un problema abierto de gran interés científico. En particular, la temperatura crítica de los materiales superconductores depende de la presión al punto de existir materiales no superconductores a presión ambiente que revelan superconductividad bajo intervalos específicos de presión (González-Pedreros, 2018). Está claro, soportado por numerosa evidencia experimental (Levy y Olsen, 1964; Chen *et al.*, 2010) qué, en superconductores convencionales, la presión afecta al espectro vibracional, induciendo típicamente un corrimiento hacia mayores frecuencias (endurecimiento), aunque el Niobio presenta regiones anómalas en donde se observa corrimiento hacia baja energía (suavizamiento), induciendo cambios (incremento o disminución) en la Tc. De igual forma la interacción electrón-fonón es afectada por la presión (González-Pedreros y Baquero, 2018).

Existen diversos métodos teóricos para el cálculo de la Tc, los cuales requieren del conocimiento de la interacción electrón-fonón, el espectro vibracional, la densidad de estados y las fluctuaciones de espín. Dentro de estos métodos están; McMillian (McMillian, 1968) y Allen-Dynes (Allen y Dynes, 1975), la teoría de Eliashberg y la teoría del funcional de la densidad para superconductores (SCDFT). El cálculo preciso de la función espectral de Eliasberg $\alpha^2F(\omega)$ y del acoplamiento electrón-fonón son cruciales para el cálculo de la Tc (González, 2018). Estos métodos requieren en algunos casos del ajuste del parámetro conocido como el pseudopotencial coulombiano μ^*, sobre cuyo valor no hay consenso en la literatura. Recientemente González-Pedreros

y Baquero (2018) publicaron el denominado Método de Derivada Funcional (MDF) el cual, usando los formalismos de la Teoría del Funcional de la Densidad, la Teoría de perturbación y la teoría de Migdal-Eliashberg, y tomando como punto de partida un valor de Tc experimental, permite calcular la Tc en función de la presión. Dicho método fue aplicado y probado en el estudio del Niobio, Aluminio y Estaño, logrando buen acuerdo con los reportes experimentales (González-Pedreros y Baquero, 2018).

1. H_3S superconductor

El Trihidruro de Azufre (H_3S) es un compuesto químico de la familia de los hidruros no metálicos, el cual alcanzó el estado superconductor bajo condiciones de alta presión, logrando la mayor temperatura crítica experimental reportada en la literatura, 203 K a 155 GPa (Drozdov et al, 2015). A dicha presión el compuesto presentó una estructura cristalina cubica con grupo espacial *Im-3m* (ver Figura 1). Desde dicho histórico reporte, se generó un aumento e interés significativo por profundizar el estudio tanto teórico como experimental de dicho superconductor convencional y similares, buscando reproducir y dar luces sobre la explicación a su comportamiento. Hasta la fecha no hay una ilustración física exacta sobre las características o mecanismos microscópicos específicos que inducen al H_3S a revelar dicho extraordinario comportamiento y su relación con la presión.

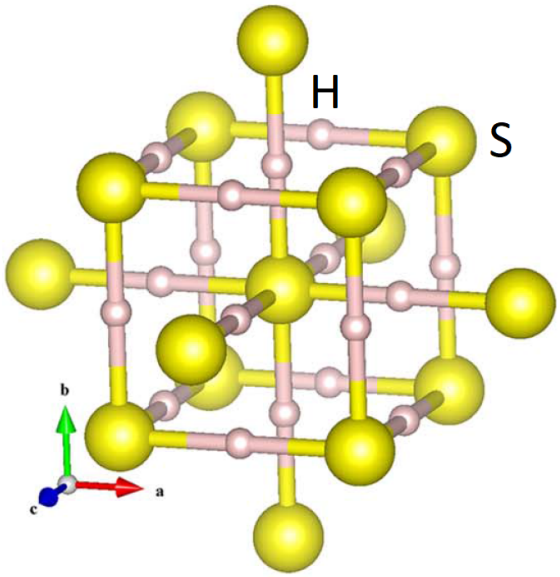

Figura 1. Estructura cúbica H_3S *Im-3m*, tomado de Duan *et al.* (2014).

La significancia de dicho resultado puede entenderse desde una perspectiva histórica (ver Figura 2). Inicialmente, desde el descubrimiento de la superconductividad en el Mercurio (Hg) en 1911, la denominada superconductividad convencional solo se enfocaba en metales y compuestos simples. El hallazgo de los superconductores de alta Tc en 1987 cambio dicho enfoque, centrando las investigaciones principalmente en sistemas de mayor complejidad; materiales cerámicos (cupratos). Ahora, la existencia de un compuesto simple, como el H_3S, con una temperatura crítica 50 K por encima del record anterior (150 K), reabre una importante línea de investigación en los superconductores convencionales. La energía de vibraciones iónica (red cristalina) en el hidrógeno es mucho mayor, lo cual, incluso con una moderada interacción electrón-ion, podría generar las condiciones físicas necesarias para alcanzar una Tc (Yao y Tse, 2017).

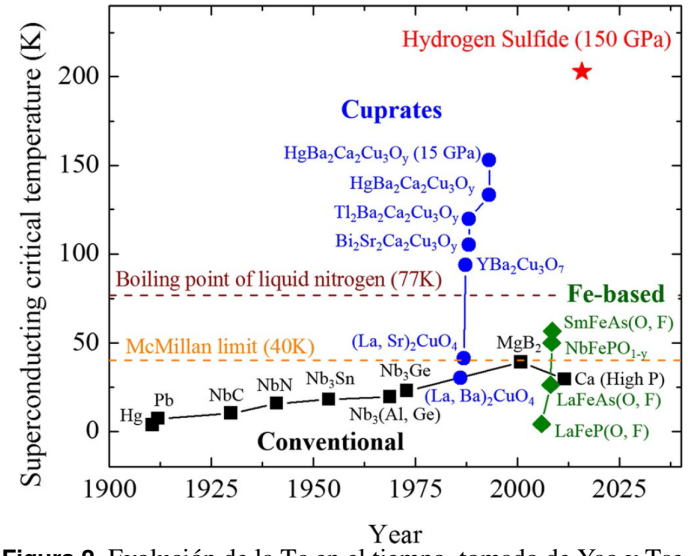

Figura 2. Evolución de la Tc en el tiempo, tomado de Yao y Tse (2017).

Desde 2004 se ha venido explorando la idea de la metalización de materiales ricos en hidrogeno como el $(H_2S)_2H_2$ o H_3S, los cuales eran potenciales superconductores de alta temperatura crítica (Ashcroft, 2004). Un estudio teórico sobre H_3S, en un rango de presiones de 20 GPa a 300 GPa, reportó una buena metalización con fases *R3m* y *Im-3m* por arriba de 111 GPa, donde también se calculó una Tc de 191-204 K en la fase *Im-3m* a 200 GPa (Duan *et al.*, 2014).

En la Tabla 1 se presenta la relación de algunos trabajos publicados sobre cálculos de la temperatura crítica del H_3S bajo presión. En general se observan diferencias entre 20 K hasta 110 K, con respecto al valor experimental, es decir no hay un consenso en la validez y precisión de un método que permita una buena reproducción de los experimentos.

Tabla 1. Trabajos publicados sobre cálculo de la temperatura crítica del H_3S bajo presión.

Referencia	Tc (K) a 250 GPa
Duan *et al.*, 2014	184
Errea *et al.*, 2015	190
Komelj y Krakauer, 2015	271-201 (200 GPa)
Flores-Livas *et al.* 2016	180 (200 GPa)
Akashi *et al.* 2016	211
Sano *et al.* 2016	181
Experimento Drozdov et al, 2015	160

2. Cálculo de temperatura crítica y Unitrópico

La temperatura de transición superconductora, o como ya se dijo temperatura crítica Tc, depende directamente de la interacción efectiva debido al fonón (vibración de la red) de intercambio. La función espectral de Eliashberg $\alpha^2F(\omega)$ y la correspondiente derivada funcional $\delta Tc/\delta\alpha^2F(\omega)$ muestran las frecuencias donde la Tc es sensible a cambios con $\alpha^2F(\omega)$. Esto permite desarrollar un método elegante (Bergmann y Rainer, 1973), denominado por Mitrovic (2004) como herramienta de diagnóstico, para analizar el comportamiento de la Tc.

Específicamente la derivada funcional $\delta Tc/\delta\alpha^2F(\omega)$ provee el cambio en la temperatura crítica, ΔTc, cuando $\alpha^2F(\omega)$ cambia en una pequeña cantidad $\Delta\alpha^2F(\omega)$ (Bergmann y Rainer, 1973);

$$\Delta Tc = \frac{\delta Tc}{\delta\alpha^2F(\omega)}\Delta\alpha^2F(\omega)d\omega \quad (1)$$

Los cambios en la función de Eliashberg se pueden inducir mediante la aplicación de presión, por variación en aleaciones o por pequeños cambios de concentración. En este estudio la variable externa que genera los cambios en la función de Eliashberg será la presión.

El cálculo de la temperatura crítica superconductora en función de la presión, partiendo de un único valor de Tc experimental reportada, está sustentado en el método de cálculo de temperatura crítica en función de cambios de la función de Eliashberg propuesto por Bergmann y Rainer (Bergmann y Rainer, 1973). A continuación, se resume el método de cálculo propuesto por González-Pedreros y Baquero (2018).

2.1 Método de Derivada Funcional (MDF) para el cálculo de la Tc en función de la presión

Se inicia con un valor conocido de Tc = T_i experimental correspondiente al valor de presión P_i que está en el intervalo de presiones en donde se está interesado en calcular la Tc en función de la presión. Se calculan las funciones de Eliashberg $\alpha^2F_i(\omega)$ y $\alpha^2F_{i+1}(\omega)$ correspondientes a las presiones P_i y P_{i+1} desde primeros principios usando teoría del funcional de la densidad. Con éstas se obtiene el cambio en la función de Eliashberg $\Delta\alpha^2F_i(\omega) = \alpha^2F_{i+1}(\omega) - \alpha^2F_i(\omega)$.

A continuación, se calcula la derivada funcional a presión P_i, $\delta Tc/\delta\alpha^2F_i(\omega)$. Para solucionar de las ecuaciones linealizadas de Eliashberg, es necesario restringir la suma hasta una frecuencia de corte ω_{cut} la cual es tomada como diez veces la mayor frecuencia en el intervalo de frecuencias en donde se obtuvo la función de Eliashgerg $\delta\alpha^2F_i(\omega)$. El pseudopotencial μ^* requerido en ésta parte del cálculo se obtiene al ajustarlo de tal forma que la solución de las ecuaciones linealizadas de Eliashberg estén restringidas al valor Tc = T_i.

Se sustituyen $\Delta\alpha^2F_i(\omega)$ y $\delta Tc/\delta\alpha^2F(\omega)$ en la ecuación (1), obteniéndose el cambio en la temperatura crítica ΔT_i. El valor de la temperatura crítica a presión P_{i+1} se obtiene así: $T_{i+1} = T_i + \Delta T_i$. Conocido ahora T_{i+1} correspondiente a la presión P_{i+1}, se repite este procedimiento para obtener T_{i+2}, luego T_{i+3} y así sucesivamente.

Para un detalle teórico más profundo, en la referencia (González-Pedreros, 2018) se presenta una concisa descripción de la teoría del funcional de la densidad (DFT), de la teoría de Eliashberg, y de la interacción electrón fonón, al igual que la solución de las ecuaciones linealizadas de Eliashberg y su derivada funcional.

Esta es una línea de trabajo desarrollada por los investigadores Dr. Rafael Baquero Parra (Cinvestav - México) y el Dr. Iván González (U. Militar - Colombia). Su último progreso fue la propuesta y publicación de un nuevo método para el cálculo de propiedades superconductoras bajo efectos de la presión (González-Pedreros y Baquero, 2018), con la cual se han llevado a cabo estudios sobre Niobio (Nb), Aluminio (Al), Hidruro de Paladio PdH(D).

Actualmente Unitrópico, a través del Dr. José Camargo del Grupo de investigación CIBAIN, en colaboración con el Dr. González-Pedreros y el Dr. Baquero, participa activamente en el estudio teórico de los efectos de la presión sobre la Tc del H_3S, haciendo uso del equipo de súper cómputo del Cinvestav – México y del equipo de cómputo de Unitrópico. Parte de este estudio teórico que se adelanta en Unitrópico, explora la naturaleza superconductora de una estructura de interés de frontera científica, posicionando a Unitrópico, a través de la colaboración interinstitucional e internacional, en el panorama científico mundial.

Bibliografía

Akashi R., Kawamura M., Tsuneyuki S., Nomura Y. y Arita R. (2015). First-principles study of the pressure and crystal-structure dependences of the superconducting transition temperature in compressed sulfur hydrides. Phys. Rev. B 91, 224513.

Allen P. B. y Dynes R. C. (1975). Transition temperature of strong-coupled superconductors. Phys. Rev. B 12, 905.

Ashcroft, N. W. (2004). Hydrogen dominant metallic alloys: high temperature superconductors? Phys. Rev. Lett. 92, 187002.

Bardeen J., Cooper L., y Schrieffer J. (1957). Theory of Superconductivity. Phys. Rev. 108, 1175.

Baquero, R. y Navarro, O. (2007). Ideas Fundamentales de la Superconductividad. México, Morelia: UNAM.

Bergmann G. y Rainer D. (1973). The sensitivity of the transition temperature to changes in $\alpha^2F(\omega)$. Z. Physik 263, 59.

Carbotte J. P. (1990). Properties of boson-exchange superconductors. Rev. Mod. Phys. 62, 1027.

Chen X.J., Struzkin V.V., Yu Y., Goncharov A.F., Lin C.T., kwang Mao H. y Hem- ley R.J. (2010). Enhancement of superconductivity by pressure-driven competition in electronic order. Nature 449, 95.

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

Duan D., Liu Y., Tian F. Li D., Huang X., Zhao Z., Yu H., Liu B., Tian W. y Cui T. (2014). Pressure-induced metallization of dense (H2S)2H2 with high-Tc superconductivity. Scientific Reports 4, 6968.

Eliasberg G. M. (1960). Interactions between Electrons and Latti-

ce Vibrations in a Superconductor. Sov. Phys. JETP 11, 696.
Flores-Livas J. A., Sanna A. y Gross E. K. U. (2016). High temperature superconductivity in sulfur and selenium hydrides at high pressure. Euro. Phys. J. B 89, 63.
González-Pedreros G.I. (2018). Aplicación de un nuevo método para calcular la temperatura crítica superconductora bajo presión (Tesis doctoral). Cinvestav, Ciudad de México.
González-Pedreros G.I., Baquero R. (2018). Superconducting critical temperature under pressure. Physica C: Superconductivity and its applications 548, 132.
Komelj M. y Krakauer H. (2015). Electron-phonon coupling and exchange-correlation effects in superconducting H_3S under high pressure. Physical Review B 92, 205125.
Levy M. y Olsen J.L. (1964). Can pressure destroy superconductivity in aluminum? Solid St. Commun. 2, 137.
Marsiglio F. y Carbotte J. (2008). Electron - Phonon Superconductivity, edited by Bennemann K. and Ketterson J., Vol. 1 Springer, Berlin.
McMillian W. L. (1968). Transition Temperature of Strong-Coupled Superconductors. Phys. Rev. 167, 331.
Mitrovic B. (2004). Functional derivatives of Tc for a two-band superconductor: application to MgB2. Eur. Phys. J. B. 38, 451.
Sano W., Koretsune T., Tadano T., Akashi R. y Arita R. (2016). Effect of Van Hove singularities on high-Tc superconductivity in H_3S. Physical Review B 93, 094525.
Yao, Y. and Tse, J. S. (2018), Frontispiece: Superconducting Hydrogen Sulfide. Chem. Eur. J. 24, 1769.