

**ПОТЕНЦИАЛЬНО ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНАЯ СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ В $K_1 - xB_6$:
ПРЕДСКАЗАНИЕ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ**

Ишмухаметова Карина Фаритовна

Гайнуллина Наталья Романовна

**POTENTIALLY HIGH-TEMPERATURE SUPERCONDUCTIVITY IN $K_1 - xB_6$: A FIRST-
PRINCIPLES PREDICTION**

Karina Ishmukhametova

student, Kazan National Research Technical University named after A. N. Tupolev — KAI, Russian, Kazan

Natalia Gaynullina

candidate of Technical Sciences, associate Professor, Kazan National Research Technical University named after A. N. Tupolev — KAI, Russian, Kazan

Аннотация. На основе расчетов из первых принципов были получены электронная структура, динамика решетки и сверхпроводящие свойства для KB_6 . Стехиометрические KB_6 имеют слабое электрон-фононное взаимодействие. Полученная сила электрон-фононного взаимодействия λ и температура сверхпроводящего перехода T_c для KB_6 составляет всего 0,22 и 0,14 К ($\mu^* = 0,1$) соответственно. Однако дырочное легирование может значительно увеличить прочность электрон-фононного взаимодействия для KB_6 . Для $K_{1-x}B_6$ сила связи электронно-фотонной λ и T_c может достигать 1,13 и 65,3 К соответственно. Это указывает на то, что $K_{1-x}B_6$ является потенциально высокотемпературным сверхпроводником.

Abstract. Based on calculations from first principles, the electronic structure, lattice dynamics, and superconducting properties for KB_6 were obtained. Stoichiometric KB_6 have a weak electron-phonon interaction. The obtained force of the electron-phonon interaction λ and the temperature of the superconducting transition T_C for KB_6 is only 0.22 and 0.14 K ($\mu^* = 0.1$), respectively. However, hole doping can significantly increase the strength of the electron-phonon interaction for KB_6 . For K_{1-x}B_6 , the coupling strength of the electron-phonon λ and T_C can reach 1.13 and 65.3 K, respectively. This indicates that K_{1-x}B_6 is a potentially high-temperature superconductor.

Ключевые слова: сверхпроводники; электрон-фононные взаимодействия; первые принципы.

Keywords: superconductors; electron-phonon interactions; first-principles.

Открытие высокотемпературной сверхпроводимости около 40 K в MgB_2 [1] возобновило интерес к поиску электрон-фононных (ЭФ) проводников с боридами. Высокое значение T_C в MgB_2 обусловлено сильной связью между электронами в σ -состояниях и плоскими колебательными модами колебаний от светового элемента B [2–5]. Второе по величине значение T_C в боридах составляет 7,2 K в сильнопарном сверхпроводнике YB_6 . Экспериментальные [6] и теоретические [7, 8] исследования показали, что спаривающиеся электроны в основном опосредованы низколежащими Y-фононными колебаниями. Однако, согласно теории сверхпроводимости BCS, более тяжелые атомы Y препятствуют усилению T_C . Значения T_C могут возрасти для других гексаборидов более легких металлов.

По сравнению с Y калий K имеет меньшую атомную массу. KB_6 – это один из гексаборидов металлов с нечетным числом валентных электронов на элементарную ячейку, такой же, как у YB_6 . Ожидалось, что KB_6 будет металлическим, однако он обладает плохой проводимостью [9]. Предположительно, низкая проводимость в KB_6 получилась из-за возникновения локализации электронов из локальных ЭФ взаимодействий, приводящих к биполяронам [10]. Исходя из этого, синтезировали порошкообразное анизотропное распределение вакансий K-местоположения KB_6 , и была упомянута возможность управления электронной структурой для сверхпроводимости путем введения дефицита K-местоположения [11]. Однако это не было основано на количественных расчетах фононной дисперсии и связи ЭФ.

Расчетная часть.

Наши расчеты проводились в приближении локальной плотности [12] к теории функционала плотности [13], как это реализовано в коде ABINIT [14]. Полностью электронные потенциалы заменялись псевдопотенциалами, сохраняющими норму, как это было сгенерировано в схеме Трулье – Мартинса [15]. Легирование имитировалось в приближении жестких зон. Плоская волна обрезалась при значении равном 70 Ry, и для полной структурной релаксации интегрирование в k-пространстве (электроны) аппроксимировалось суммированием по равномерной сетке $8 \times 8 \times 8$ в обратном пространстве [16]; гораздо более точная ($16 \times 16 \times 16$) сетка использовалась для оценки электронной плотности состояний и ЭФ. Структурная оптимизация была выполнена с использованием минимизации Бройдена – Флетчера – Гольдфарба – Шанно [17], модифицированной для учета как полной энергии, так и градиентов. Колебательные свойства рассчитывались с использованием теории возмущений с функционалом плотности [18–20]. Динамические матрицы и ширины линий ЭФ рассчитывались на равномерной сетке $4 \times 4 \times 4$ в q-пространстве; дисперсии фононов и плотности состояний фононов были затем получены с помощью фурье-интерполяции динамических матриц, а спектральная функция Элиашберга $\alpha^2F(\omega)$ и полная сила связи ЭФ λ были рассчитаны путем суммирования по отдельным ширинам линий и фононам. Метод тетраэдра использовался для интегрирования поверхности Ферми для ЭФ величин.

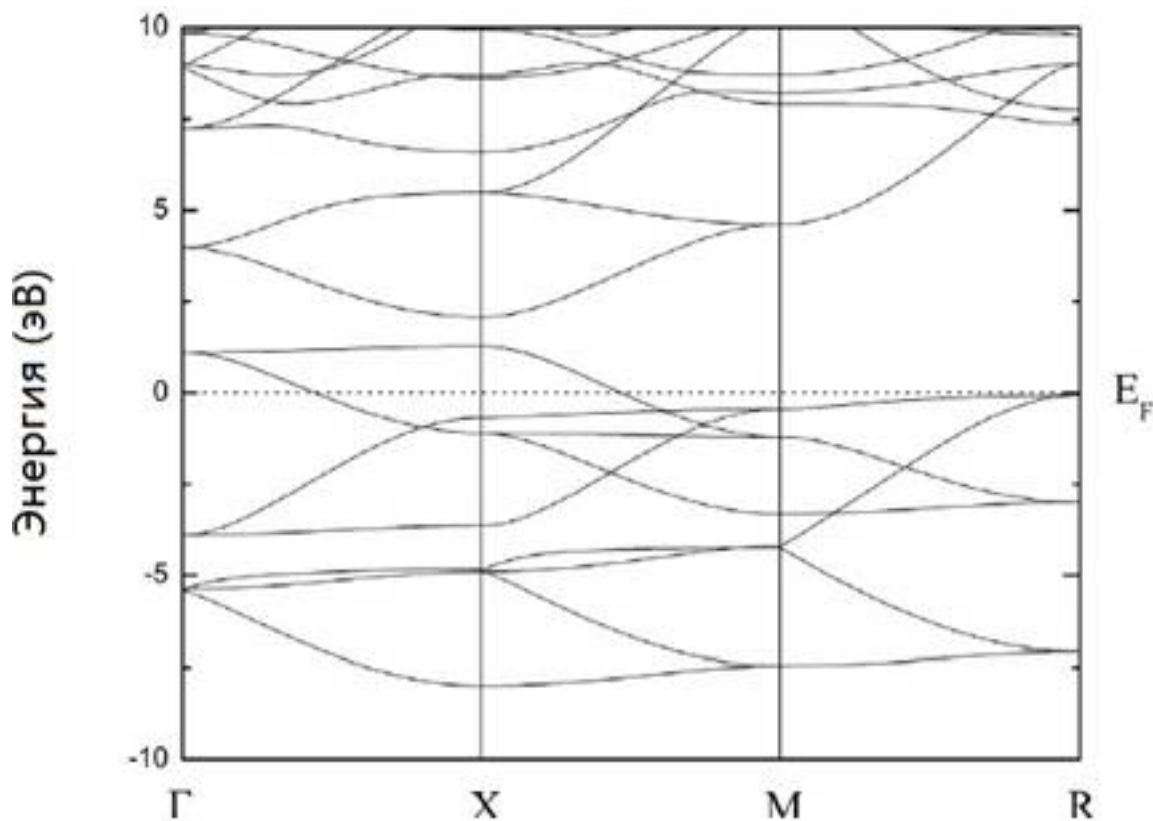


Рисунок 1. Электронная ленточная структура KV_6 . Уровень Ферми (E_F) установлен на ноль

Таким образом, мы представляем исследование потенциальной сверхпроводимости KV_6 и $K_{1-x}V_6$ на основе расчетов из первых принципов. ЭФ связь в KV_6 в основном происходит из колебательных мод В. Полученная сила сцепления ЭФ λ и температура T_C сверхпроводящего перехода для KV_6 составляет всего 0,22 и 0,14 К соответственно, что указывает на то, что это сверхпроводник с низким T_C . Однако для $KV_6^{(-0,1)}$ прогнозируется, что λ и T_C составят 1,13 и 65,3 К соответственно. Следовательно, $K_{1-x}V_6$ является потенциально высокотемпературной сверхпроводящей.

Список литературы:

1. Nagamatsu J. et al. Superconductivity at 39 K in magnesium diboride //nature. – 2001. – Т. 410. – №. 6824. – С. 63.
2. An J.M., Pickett W.E. Superconductivity of MgB_2 : covalent bonds driven metallic // Physical Review Letters. – 2001. – Т. 86. – №. 19. – С. 4366.
3. Bohnen K.P., Heid R., Renker B. Phonon dispersion and electron-phonon coupling in MgB_2 and AlB_2 //Physical review letters. – 2001. – Т. 86. – № 25. – С. 5771.
4. Kortus J.J. Kortus, II Mazin, KD Belashchenko, VP Antropov, and LL Boyer, Phys. Rev. Lett. 86, 4656 (2001) // Phys. Rev. Lett. – 2001. – Т. 86. – С. 4656.
5. Choi H.J. et al. First-principles calculation of the superconducting transition in MgB_2 within the anisotropic Eliashberg formalism // Physical Review B. – 2002. – Т. 66. – № 2. – С. 020513.
6. Lortz R. et al. Superconductivity mediated by a soft phonon mode: Specific heat, resistivity, thermal expansion, and magnetization of YB_6 // Physical Review B. – 2006. – Т. 73. – № 2. – С.

7. Schell G. et al. Electronic structure and superconductivity in metal hexaborides // Physical Review B. – 1982. – T. 25. – № 3. – C. 1589.
8. Xu Y. et al. First-principles study of the lattice dynamics, thermodynamic properties and electron-phonon coupling of Y B 6 // Physical Review B. – 2007. – T. 76. – № 21. – C. 214103.
9. Naslain R., Etourneau J., Hagenmuller P. Alkali metal borides // Boron and refractory borides. – Springer, Berlin, Heidelberg, 1977. – C. 262-292.
10. Ammar A. et al. Investigation of the electronic and structural properties of potassium hexaboride, KB6, by transport, magnetic susceptibility, EPR, and NMR measurements, temperature-dependent crystal structure determination, and electronic band structure calculations // Inorganic chemistry. – 2004. – T. 43. – № 16. – C. 4974-4987.
11. Katsura Y. et al. On the possibility of MgB2-like superconductivity in potassium hexaboride // Physica C: Superconductivity and its applications. – 2010. – T. 470. – C. S633-S634.
12. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous electron gas // Physical review. – 1964. – T. 136. – № 3B. – C. B864.
13. Kohn W., Sham L.J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects // Physical review. – 1965. – T. 140. – № 4A. – C. A1133.
14. Gonze X.X. Gonze, B. Amadon, P. Anglade, J.-M. Beuken, F. Bottin, P. Boulanger, F. Bruneval, D. Caliste, R. Caracas, M. Côté, T. Deutsch, L. Genovese, P. Ghosez, M. Giantomassi, S. Goedecker, D. Hamann, P. Hermet, F. Jollet, G. Jomard, S. Leroux, M. Mancini, S. Mazevet, M. Oliveira, G. Onida, Y. Pouillon, T. Rangel, G.-M. Rignanese, D. Sangalli, R. Shaltaf, M. Torrent, M. Verstraete, G. Zerah, and J. Zwanziger, Comput. Phys. Commun. 180, 2582 (2009) // Comput. Phys. Commun. – 2009. – T. 180. – C. 2582.
15. Troullier N., Martins J.L. Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations // Physical review B. – 1991. – T. 43. – № 3. – C. 1993.
16. Monkhorst H.J., Pack J.D. Special points for Brillouin-zone integrations // Physical review B. – 1976. – T. 13. – № 12. – C. 5188.
17. Schlegel H.B. Optimization of equilibrium geometries and transition structures // Ab Initio Methods in Quantum Chemistry. – 1987. – № Part I. – C. 249-286.
18. Baroni S. et al. Phonons and related crystal properties from density-functional perturbation theory // Reviews of Modern Physics. – 2001. – T. 73. – № 2. – C. 515.
19. Gonze X. First-principles responses of solids to atomic displacements and homogeneous electric fields: Implementation of a conjugate-gradient algorithm // Physical Review B. – 1997. – T. 55. – № 16. – C. 10337.
20. Gonze X., Lee C. Dynamical matrices, Born effective charges, dielectric permittivity tensors, and interatomic force constants from density-functional perturbation theory // Physical Review B. – 1997. – T. 55. – № 16. – C. 10355.