

ЭЛЕКТРОННЫЕ, ФОНОННЫЕ И СВЕРХПРОВОДЯЩИЕ СВОЙСТВА ГИДРИДОВ ИТТРИЯ И СЕРЫ ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ

К. С. Гришаков ^{a*}, Н. Н. Дегтяренко ^{a**}, Е. А. Мазур ^{a,b***}

^a Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ
115409, Москва, Россия

^b Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»
123098, Москва, Россия

Поступила в редакцию 5 июня 2018 г.
после переработки 5 июня 2018 г.
Принята к публикации 13 июня 2018 г.

Выполнен анализ электронных, фононных и сверхпроводящих свойств двойных гидридов YH_6 , H_3S , YH_{10} , UH_{10} , CaH_{10} в сравнении со свойствами тройного гидрида YS_4H_4 в рамках единого физического и расчетного подхода для определения диапазона устойчивости и критической сверхпроводящей температуры. Рассчитаны нормальные и сверхпроводящие характеристики тройного гидрида YS_4H_4 при высоком давлении. Проведено сравнение результатов для тройного гидрида YS_4H_4 со свойствами соединений YH_6 , H_3S , YH_{10} , UH_{10} и CaH_{10} .

DOI: 10.1134/S0044451019010103

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время актуальной задачей является поиск новых высокотемпературных сверхпроводящих материалов (ВТСП) с высоким содержанием водорода, у которых переход в сверхпроводящее состояние происходит в условиях, близких к нормальным (нормальное давление и комнатная температура). В обзорной работе [1] подробно рассматриваются данные по расчетам 33 гидридов основных групп элементов при высоком давлении, имеющих различную структуру и различающихся содержанием атомов водорода. По результатам проведенного в обзоре анализа определены оптимальные значения давлений для получения максимальной критической температуры T_c . Для ряда бинарных гидридов на основе компьютерного моделирования была предсказана сверхпроводимость со значением T_c более 100 К (CaH_6 [2], AlH_5 [3], SiH_3 [4], SiH_4 [5], PbH_8 [6], SbH_4 [7], SH_3 [8], SeH_3 [9]).

Значения T_c выше 200 К были предсказаны в ковалентном гидриде SH_3 [8] и нескольких полигидридах, имеющих структуру типа YH_6 [10].

Наряду с теоретическими оценками сверхпроводящих свойств различных гидридов были получены и экспериментальные результаты [11, 12], которые подтвердили высокие значения $T_c \sim 200$ К в гидридах серы SH_3 [13] под высоким давлением. Также экспериментально [14] было найдено значение $T_c \sim 100$ К для гидрида фосфора PH_3 при высоком давлении.

Таким образом, на основе гидридов достигнуты высокие температуры сверхпроводящего перехода, и одной из главных задач является поиск соединений, устойчивых при меньших давлениях. Возможными направлениями поиска новых сверхпроводящих гидридов являются: 1) двойные соединения с нестандартной стехиометрией; 2) тройные соединения. С целью поиска соединений, устойчивых при малых давлениях, мы начали рассмотрение тройных соединений YXH .

Мы предполагаем, что для получения устойчивых тройных соединений YXH при меньших давлениях по сравнению с бинарными гидридами необходимо: существование устойчивого соединения из элементов X и Y , а также существование устойчи-

* E-mail: gks88@mail.ru

** E-mail: NNDegtyarenko@mephi.ru

*** E-mail: eugen_mazur@mail.ru

вых двойных гидридов для элементов X и Y, которые демонстрировали бы при высоких давлениях большие значения критической температуры сверхпроводящего перехода.

Используя программу USPEX [15], мы нашли несколько структур для тройных гидридов на основе иттрия и серы. Действительно, при нормальных условиях существует сульфид иттрия (YS , Y_2S_3) [16], а для двойных гидридов YH_6 и SH_3 при высоком давлении расчетные значения T_c достаточно велики [8, 10]. Кроме того, для гидрида серы сверхпроводимость и высокие значения критической температуры получены экспериментально [12].

Характерной особенностью тройных соединений является сочетание нескольких факторов, увеличивающих требования к вычислительным мощностям: большие размер и число электронов в расчетной элементарной ячейке; более низкий возможный тип реализуемой симметрии элементарной ячейки, что обусловлено несоответствием задаваемой исходной стехиометрии. На данном этапе мы представляем результаты для стехиометрического состава YS_4H_4 .

2. МЕТОДИКА РАСЧЕТА

Расчет свойств соединений гидридов $Y_nX_mH_k$ проводился в рамках теории функционала плотности (density functional theory, DFT) в базе плоских волн, с использованием сохраняющего норму псевдопотенциала в следующей последовательности для каждого значения давления:

- 1) структурные параметры, энтальпия равновесной структуры;
- 2) электронные блоховские спектры равновесной структуры;
- 3) фоновые спектры для равновесной структуры;
- 4) переход в базис функций Ванье;
- 5) нахождение электронных спектров, получение спектральной функции Элиашберга и константы электрон-фононного взаимодействия;
- 6) оценка T_c сверхпроводящего перехода, исходя из аппроксимации решений уравнений Элиашберга с использованием ряда приближений. В первом приближении использовалась оценка T_c по формуле Аллена – Дайнса, которая аппроксимирует решения уравнений Элиашберга [17];
- 7) решение уравнений Элиашберга для нормального состояния системы, учет влияния электрон-фононного взаимодействия на электронный спектр;
- 8) решение уравнений Элиашберга для сверхпроводящего состояния системы с учетом электрон-фо-

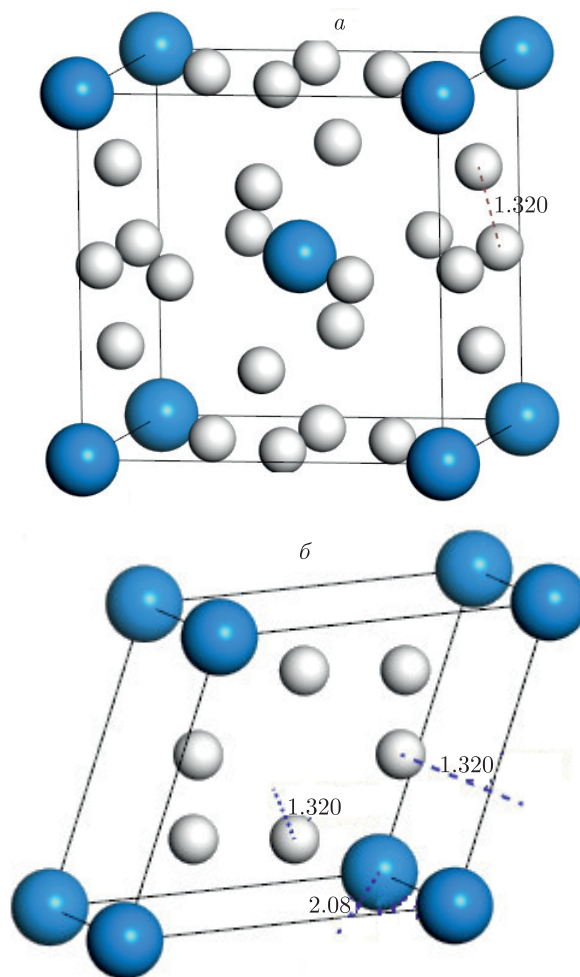


Рис. 1. (В цвете онлайн) Кубическая ячейка $Me-H_6$ с симметрией $Im-3m$ (ОН-9) и примитивная ячейка той же структуры (цифры — расстояния Н–Н)

нонного взаимодействия, расчет T_c и ширины щели сверхпроводящего перехода.

В данной работе представлены результаты расчетов в рамках пунктов 1–6. В расчетах использовались пакет программ QUANTUM ESPRESSO версии 6.2.1 [18], собственные программные комплексы, основанные на работе [19], а также визуализаторы расчетов.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Характерной особенностью структуры двойных гидридов YH_6 и H_3S является высокая симметрия, а также наличие подрешетки водорода, однородной по расстояниям Н–Н в первой и второй координационных сферах. Эти структуры хорошо изучены и для них получены как расчетные [8, 10, 11], так и экспериментальные данные [12]. Базовые элемен-

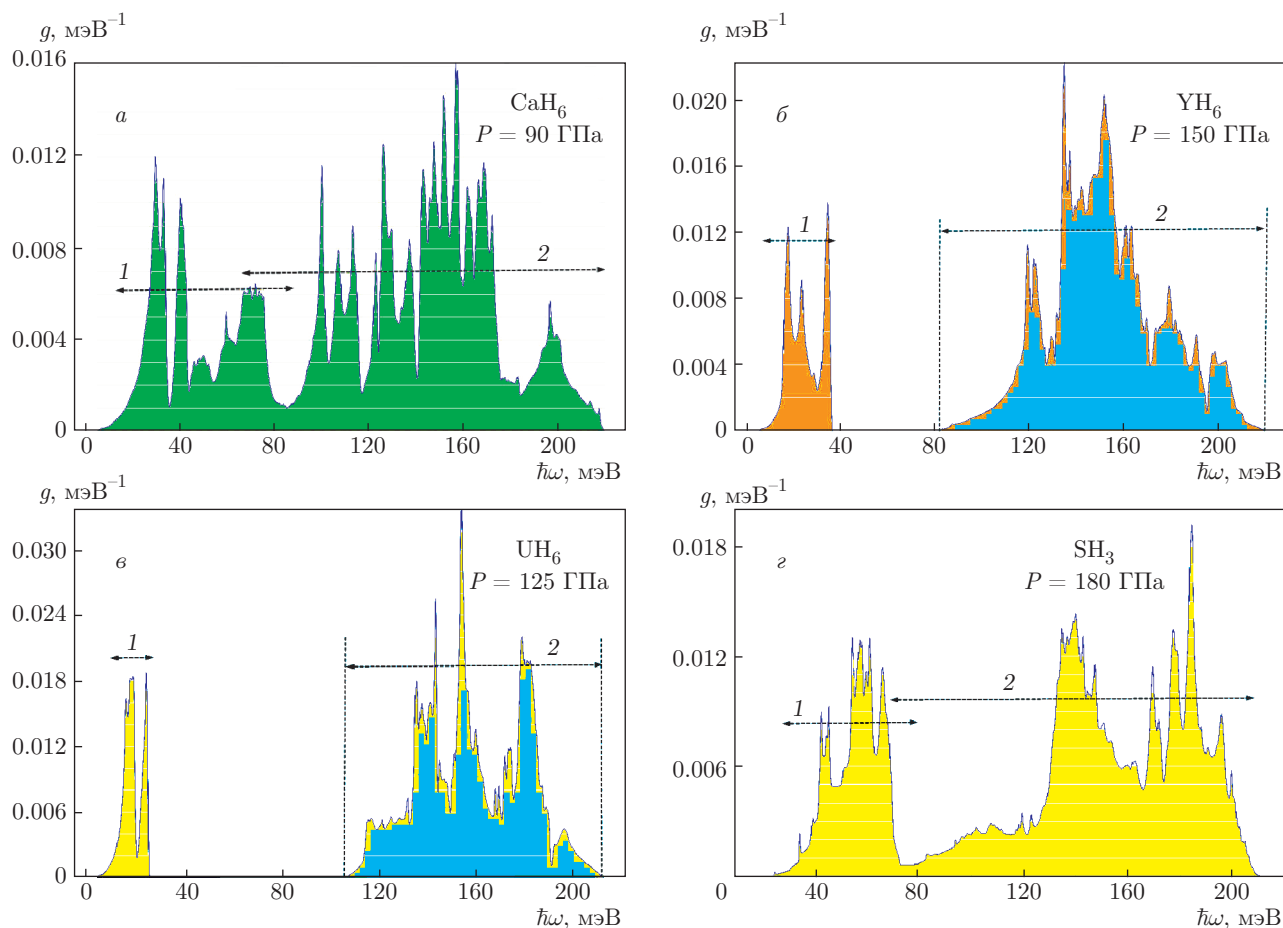


Рис. 2. (В цвете онлайн) Парциальные плотности фоновых колебаний $g(\hbar\omega) = \text{PDOS}$ соединений CaH_6 (а), YH_6 (б), UH_6 (в) и H_3S (г) при характерных для структур давлениях $P = 90, 150, 125, 180$ ГПа; интервал 1 — частоты колебаний тяжелых атомов, интервал 2 — частоты колебаний атомов водорода

ты этих гидридов различны, что приводит к различным диапазонам устойчивости по давлению [3], т. е. к различному вкладу в величину «химического» давления. Ниже представлены результаты расчетов для этих двойных гидридов. Результаты частично совпадают с результатами предыдущих работ [8, 10, 11], однако нами выявлены и принципиальные различия.

3.1. Результаты для соединений XH_m ($m = 6$)

1. Особенностью структур двойных гидридов XH_6 ($X = \text{U}, \text{Y}, \text{Ca}$) является наличие подрешетки водорода, однородной по расстояниям Н–Н в первой координационной сфере (рис. 1). Базовые элементы этих гидридов различны, что приводит к различному вкладу в величину «химического» давления.

2. Для $\text{CaH}_6, \text{YH}_6, \text{UH}_6$ фоновые спектры не содержат мнимых частот, начиная соответственно с давлений $P \approx 90, 150, 30$ ГПа, т. е. гидрид UH_6 является наиболее устойчивым при понижении давления. Для H_3S нижняя граница устойчивости составляет примерно 175 ГПа. Характерные фоновые спектры для соединений $\text{CaH}_6, \text{YH}_6, \text{UH}_6$ и H_3S представлены на рис. 2. Максимальные частоты фоновых колебаний примерно одинаковы (около 200 мЭВ). Для соединений YH_6 и H_3S мнимые частоты отсутствуют в спектре, начиная соответственно с давлений $P \approx 150$ ГПа и $P = 175$ ГПа.

Фоновые колебания в интервале 100–200 мЭВ, помеченные цифрой 2, связаны с колебаниями подрешетки водорода этих гидридов. Практически весь интервал частот колебаний заполнен только для CaH_6 и H_3S . Имеется небольшая область перекрытия интервалов 1 и 2, что указывает на совместные

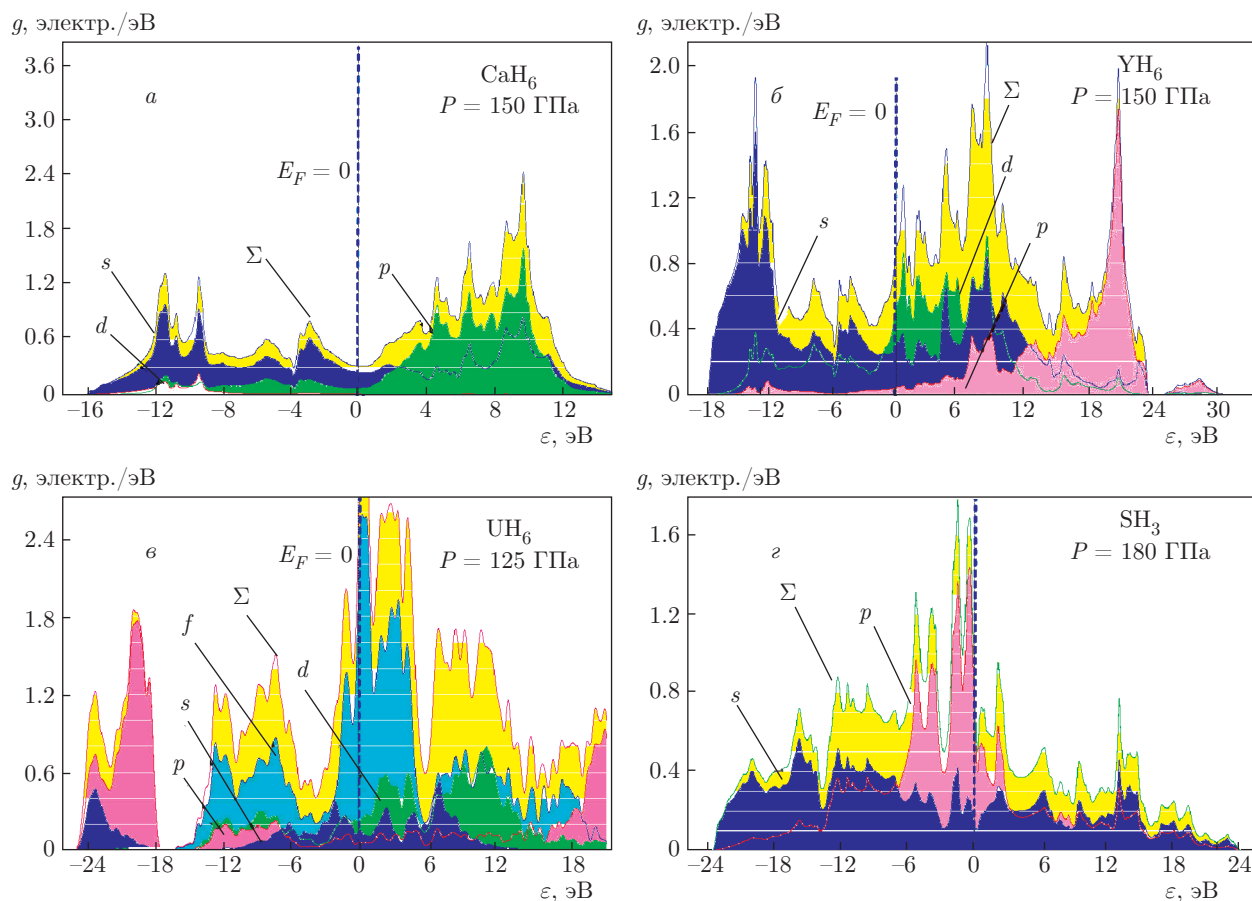


Рис. 3. (В цвете онлайн) Парциальные плотности числа электронных состояний $g(\varepsilon) = \text{PDOS}$ соединений CaH_6 (а), YH_6 (б), UH_6 (в) и H_3S (г) при характерных для структур давлениях $P = 150, 150, 125, 180$ ГПа

колебания подрешеток этих гидридов. В то же время диапазон колебаний подрешетки водорода определяется явно. Для YH_6 и UH_6 в плотности фоновых состояний присутствуют явно выраженные пустые интервалы частот. С ростом давления спектр частот становится «жестче», и пустые интервалы частотного спектра могут возникать и для соединений CaH_6 и H_3S .

3. Для указанных веществ плотность электронных состояний на уровне Ферми (рис. 3) создается электронами разных типов (s , p , d , f — условное разделение для твердого тела). Для UH_6 электроны s -типа локализованы только на подрешетке водорода и их относительное число незначительно. На подрешетке урана «глубокие» s -электроны не представлены (для использованного псевдопотенциала).

Важную роль в установлении величины температуры сверхпроводящего перехода играет поведение плотности числа электронных состояний (density of states, DOS) вблизи уровня Ферми E_F ,

т. е. $\text{DOS}(E_F)$. Для CaH_6 уровень Ферми приходится на область плотности числа электронных состояний вблизи уровня Ферми, где такая плотность примерно постоянна. Для YH_6 уровень Ферми приходится на область «ската» широкого (несколько электрон-вольт) пика плотности электронных состояний. Для UH_6 уровень Ферми находится вблизи более узкого пика плотности электронных f -состояний. Для SH_3 уровень Ферми приходится на узкие пики плотности электронных s - и p -состояний. Последнее обусловлено высокой симметрией этого соединения и наличием линейных цепочек атомов водорода (особенности Ван-Хова).

С изменением давления P парциальная плотность числа электронных состояний (partial DOS, PDOS) меняется по-разному в зависимости от положения уровня Ферми и факта наличия или отсутствия пика DOS. Например, для YH_6 (рис. 4а) парциальная плотность числа электронных состояний PDOS относительно слабо меняется для s - и

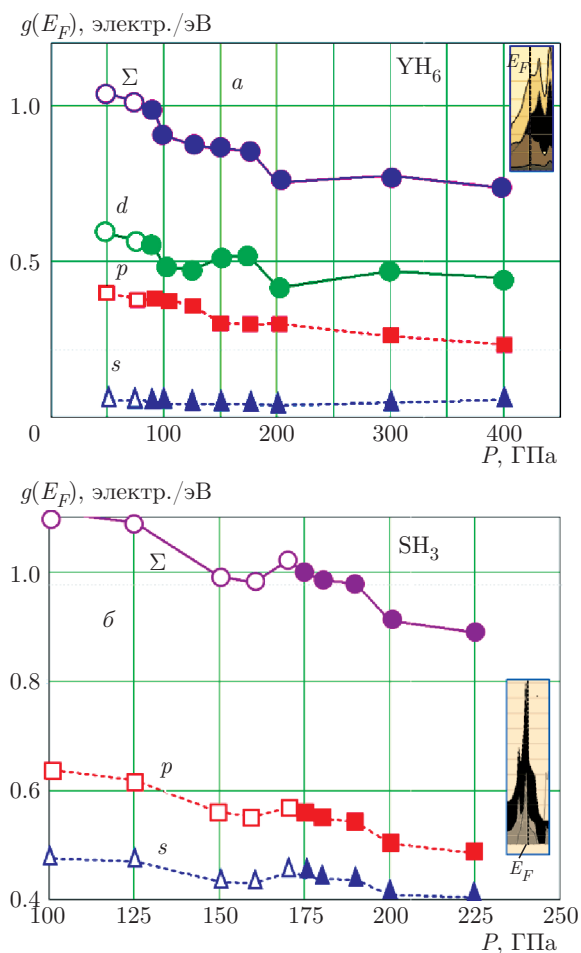


Рис. 4. (В цвете онлайн) Зависимость парциальной плотности числа электронных состояний $g(E_F) = \text{PDOS}$ на уровне Ферми для s -, p -, d -состояний и суммарного значения Σ плотности электронных состояний от давления P для YH_6 (а) и SH_3 (б). На вставках — вид $g(\epsilon)$ вблизи E_F

p -состояний. Несколько большие изменения имеют место для числа d -состояний на уровне Ферми. Как следует из рис. 4а, устойчивость структуры YH_6 имеет место при смещении уровня E_F относительно d -пика PDOS с ростом давления P . Наличие узкого пика парциальной плотности числа электронных состояний PDOS для SH_3 в s - и p -состояниях приводит к некоторому росту суммарной парциальной плотности электронных состояний $\text{DOS}(E_F)$ при давлении $P = 170$ ГПа. При этом устойчивость структуры SH_3 (отсутствие мнимых частот) возникает при $P > 175$ ГПа. Это значение давления коррелирует с данными работы [8].

4. Спектральные функции электрон-фононного взаимодействия сохраняют представленные особенности парциальных плотностей фононных состоя-

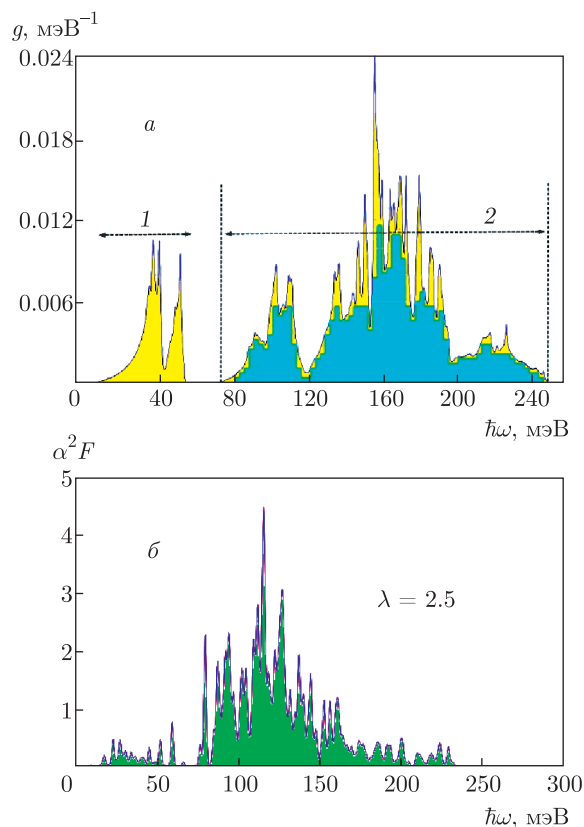


Рис. 5. (В цвете онлайн) Парциальная плотность фононных состояний $g(\hbar\omega) = \text{PDOS}$ (а) и спектральная функция электрон-фононного взаимодействия (б) соединений CaH_6 при давлении $P = 150$ ГПа. Диапазон частот колебаний атомов водорода обозначается цифрой 2, энергетические диапазоны мод колебаний атомов Ca — цифрой 1

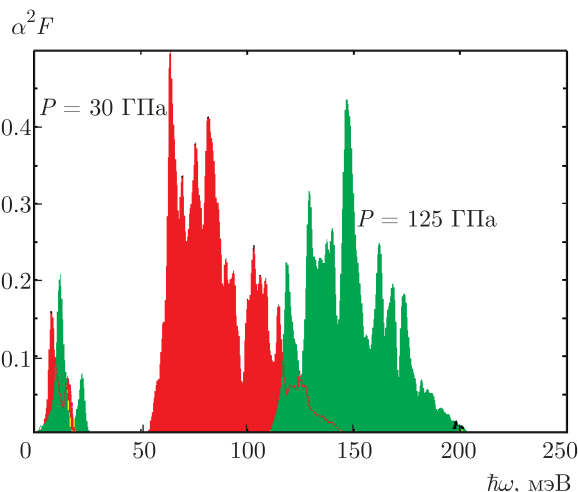


Рис. 6. (В цвете онлайн) Спектральные функции электрон-фононного взаимодействия соединений YH_6 для двух значений давления, $P = 30$ ГПа и $P = 125$ ГПа

Таблица

Соединение	P , ГПа	λ	T_c , К
SH ₃	180	2.3	200
CaH ₆	150	2.5	180
YH ₆	125	3.0	165
UH ₆	125	0.38	1.32
UH ₆	30	0.56	7.8

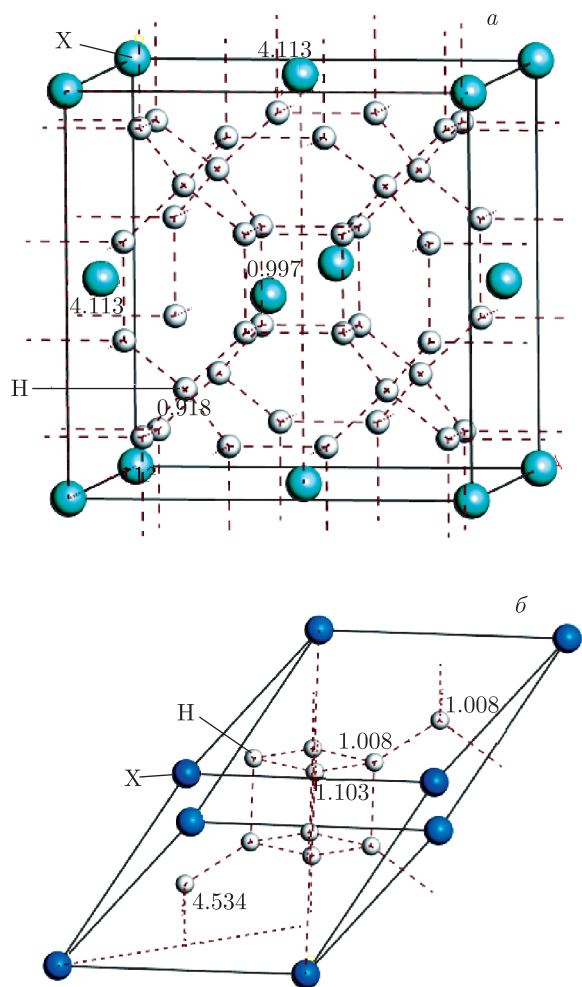


Рис. 7. (В цвете онлайн) Кубическая ячейка XH₁₀ с симметрией $Fm\bar{3}m$ (ОН-5) и примитивная ячейка той же структуры. В окружении одного атома X находятся 32 атома H (цифры — расстояния H–H)

ний PDOS (рис. 5). Как следует из рис. 5, основные максимумы обеих зависимостей соответствуют колебаниям атомов водорода (интервал 2).

На рис. 6 показано изменение спектральной функции Элиашберга с изменением давления P для соединения UH₆. В соответствии с выражением для

константы электрон-фононного взаимодействия

$$\lambda = 2 \int_0^{\omega_{max}} d\omega \frac{\alpha^2(\omega)F(\omega)}{\omega}$$

пустой интервал в области низких частот для UH₆ не может давать вклада в значение константы электрон-фононного взаимодействия. Сдвиг максимума в поведении спектральной функции электрон-фононного взаимодействия с понижением давления в область меньших частот должен приводить к большему значению константы λ . Расчеты констант электрон-фононного взаимодействия λ и значений критической температуры T_c сверхпроводящего перехода представлены в таблице. Результаты обусловлены приведенными выше особенностями фоновых и электронных спектров этих гидридов.

3.2. Результаты для соединения XH_m ($m = 10$)

Расчеты фоновых, электронных спектров и последующий учет электрон-фононного взаимодействия для соединений с $m = 10$ был проведен по схеме, аналогичной расчетам при $m = 6$. Кубическая ячейка XH₁₀ с симметрией $Fm\bar{3}m$ (ОН-5) приведена на рис. 7.

Расчеты фоновых спектров дали следующие результаты (рис. 8):

- в CaH₁₀ присутствуют мнимые частоты в акустической ветви для давлений $P \leq 400$ ГПа (т. е. это соединение неустойчиво);
- в YH₁₀ мнимых частот в фоновом спектре нет для интервала давлений $P = 200\text{--}400$ ГПа;
- в UH₁₀ мнимых частот в фоновом спектре нет для интервала давлений $P = 100\text{--}400$ ГПа.

Таким образом, для соединений XH₁₀ интервал устойчивости (отсутствие мнимых частот) увеличивается для тяжелых элементов. Расчет константы электрон-фононного взаимодействия λ был проведен для соединения YH₁₀ для давления $P = 400$ ГПа. Значение этой константы оказалось равным $\lambda \approx 1.74$, что дало высокое значение критической температуры сверхпроводящего перехода $T_c \approx 200$ К.

3.3. Свойства тройного гидрида YS₄H₄

Мы рассмотрели несколько вариантов тройных гидридов. Поиск структур с наименьшей энергией проводился с помощью программы [18]. Найти структуры типа Ca_nS_mH_k с высокой симметрией

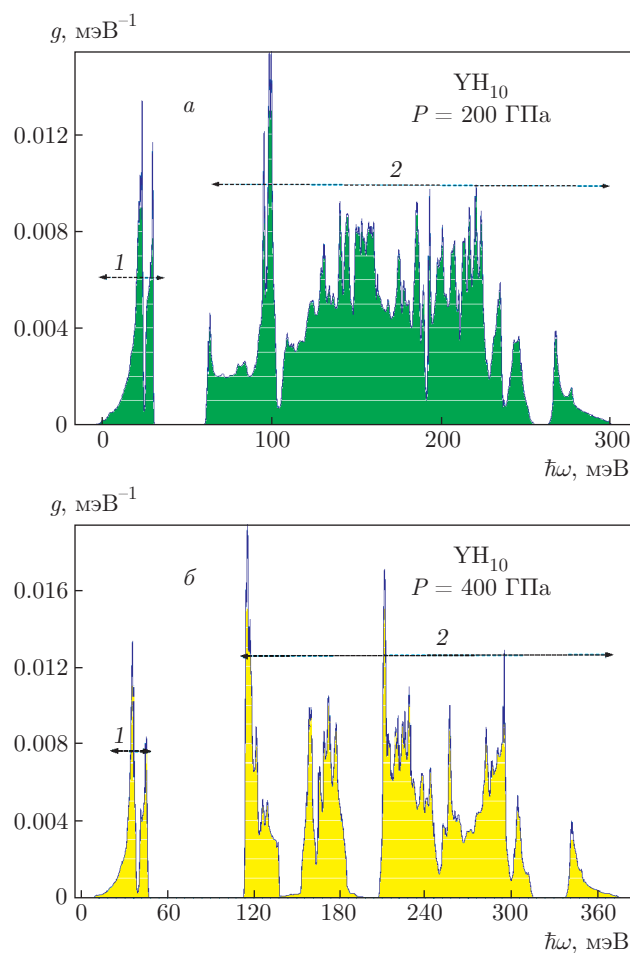


Рис. 8. (В цвете онлайн) Парциальные плотности числа фононных колебаний $g(\hbar\omega) = \text{PDOS}$ соединения YH_{10} при давлениях $P = 200$ (а) и $P = 400$ ГПа (б). Диапазон частот колебаний атомов водорода обозначается цифрой 2, энергетические диапазоны мод колебаний атомов Y — цифрой 1

нам не удалось. Для систем $\text{Y}_n\text{S}_m\text{H}_k$ были исследованы структуры $\text{Y}_1\text{S}_1\text{H}_k$ ($k = 8, 10, 16$) с высокой симметрией, но во всех случаях фононный спектр содержал мнимые частоты. Было установлено несколько структур с соотношением элементов в элементарной ячейке, большим единицы, и устойчивых до давлений 50–75 ГПа.

Установленная нами структура тройного гидрида со стехиометрией YS_4H_4 представлена на рис. 9. Прimitивная ячейка этой структуры содержит многоэлектронные атомы Y и S, взаимодействие которых удерживает симметрию структуры при давлениях, более низких по сравнению с давлениями, стабилизирующими соединения YH_6 и H_3S [20]. Подрешетка водорода имеет вид «гармошки» с преимущественным квазицепочечным пространственным рас-

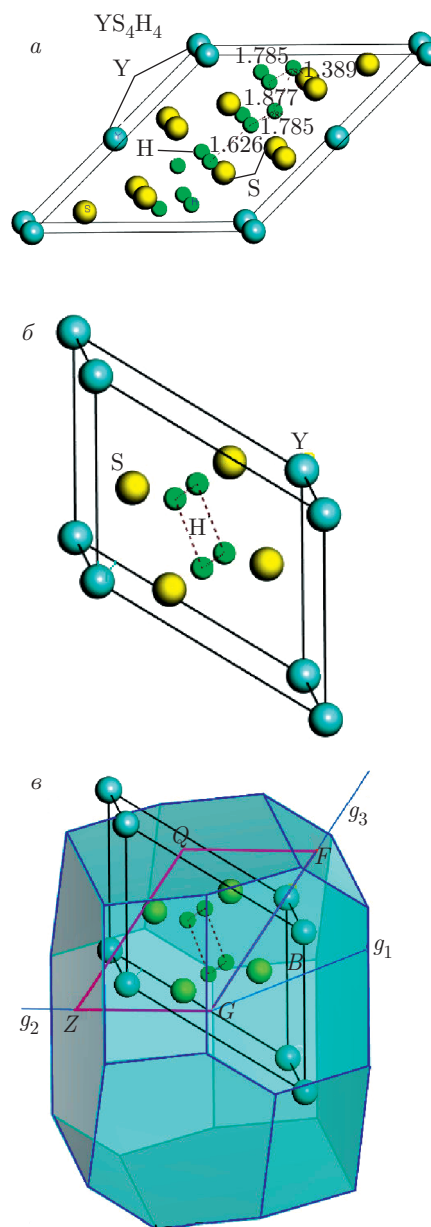


Рис. 9. (В цвете онлайн) Соединение YS_4H_4 при давлении $P = 200$ ГПа: ячейка с симметрией C_2/M (а); примитивная ячейка той же структуры (б) и обратная к примитивной ячейка, на которой изображен k -путь $G-Z-Q-F-G$ (в)

положением атомов. Атомы тяжелых элементов образуют свои отдельные цепочки.

Дисперсионные зависимости фононных мод и фононные плотности числа состояний для соединения YS_4H_4 представлены на рис. 10, 11. Максимальные частоты фононных колебаний для YS_4H_4 составляют величину, равную примерно 280 мэВ.

Колебания в интервале 100–200 мэВ связаны с колебаниями подрешетки водорода этого соединения (рис. 11). Для YS_4H_4 присутствует несколько

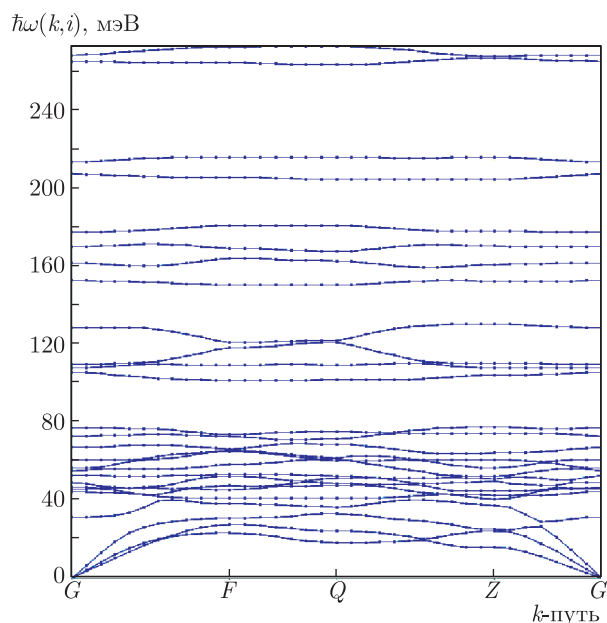


Рис. 10. Дисперсионная зависимость фоновых колебаний для соединения YS_4H_4 (C_2/M) при давлении $P = 200$ ГПа

явно выраженных пустых интервалов частот, что обусловлено различными окружениями разных атомов водорода и наличием в структуре набора межатомных расстояний Н-Н. Плотность числа фоновых мод в области низких частот (100 мэВ для атомов Н) имеет существенно большее значение, чем для YN_6 . Колебания атомов тяжелых элементов (Y и S) имеют частоты до 80 мэВ, и их спектры перекрываются (диапазон 1 на рис. 11).

Диаграмма электронных зон соединения YS_4H_4 имеет сложную структуру. На рис. 12 показана структура электронных зон при давлении $P = 200$ ГПа. Вдоль k -пути $G-Z-Q-F-G$ желтым цветом выделены области, где имеет место электронный тип носителей, зеленым — дырочный.

Плотность числа электронных состояний на уровне Ферми, которая создается электронами разных типов (s , p , d), для давления $P = 200$ ГПа показана на рис. 13. Уровень Ферми приходится на скат широкого пика плотности числа состояний. При изменении давления в широком диапазоне вплоть до 400 ГПа плотность числа состояний электронов на уровне Ферми меняется (рис. 14), и уровень Ферми попадает в минимум плотности электронных состояний DOS.

Для тройных гидридов изменение стехиометрии (состава) позволяет, в принципе, изменить соотношение условных (s , p , d) электронов на уровне Ферми, т. е. позволит изменить матричные элементы

электрон-фононного взаимодействия.

Спектральные функции Элиашберга сохраняют основные особенности фоновых парциальных плотностей числа состояний PDOS. Расчеты константы электрон-фононного взаимодействия λ и значения критической температуры сверхпроводящего перехода дали следующие результаты, обусловленные приведенными особенностями фоновых и электронных спектров этого тройного гидрида:

$$YS_4H_4 \quad P = 200 \text{ ГПа}, \quad \lambda \approx 1, \quad T_c \approx 20 \text{ К.}$$

Тяжелые элементы в указанных соединениях сообщают атомам водорода определенную часть электронной плотности. Это видно из графиков зависимости милликеновских зарядов Z_M атомов в зависимости от давления (рис. 15).

Как видно на рис. 15а, зависимости $Z_M(P)$ для SH_3 и YN_6 слабые. Каждый из атомов водорода приобретает заряд $Z_M(H) \approx 0.1$ или $Z_M(H) = 0.2$ соответственно для SH_3 и YN_6 , который сохраняется приблизительно с изменением давления. Для соединения YS_4H_4 (рис. 15б) изменения более существенны. Для структуры YS_4H_4 характерно наличие двух групп атомов водорода. Для Н(1) величина милликеновского заряда $Z_M(H) \approx 0$, для Н(2) величина $Z_M(H)$ растет с ростом давления вплоть до -0.3 . Для атомов иттрия величина милликеновского заряда $Z_M(Y)$ уменьшается с ростом давления от 0.7 до 0.3. У атомов серы происходит изменение знака милликеновского заряда $Z_M(S)$ при давлении $P \approx 125$ ГПа, диапазон изменения $Z_M(S) \approx -0.2 \dots 0.4$.

На рис. 16 представлены зависимости от давления удельного объема, приходящегося в среднем на один атом элементарной ячейки двойных соединений CaH_6 , YN_6 , UH_6 и H_3S и тройного гидрида YS_4H_4 . Для всех двойных соединений характерны кривые примерно одного типа. Для YS_4H_4 эта величина примерно вдвое больше из-за взаимодействия атомов Y и S.

Диапазон устойчивости гидрида YS_4H_4 , определяющийся отсутствием мнимых частот в спектре фононов, несколько больший, чем для YN_6 и H_3S . Это следует из рис. 17, где представлена зависимость энергии на атом от давления

$$E = \frac{1}{N_{cell}} [E_{cell} - (mE_Y + nE_S + kE_H)].$$

Здесь E_{cell} и N_{cell} — полная энергия и число атомов в расчетных ячейках систем; E_Y , E_S , E_H — расчет-

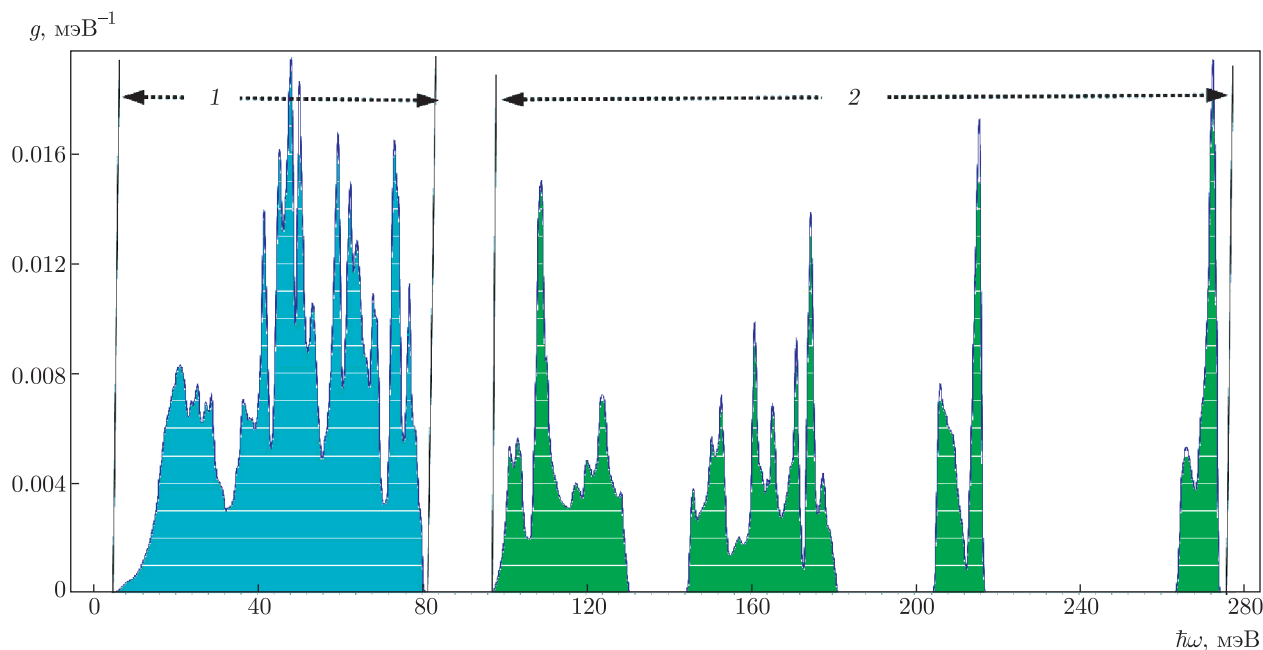


Рис. 11. (В цвете онлайн) Парциальные плотности числа фоновых колебаний $g(\hbar\omega) = \text{PDOS}$ для соединения YS_4H_4 при характерных для структуры давлениях $P = 200$ ГПа. Диапазон частот колебаний атомов водорода для YS_4H_4 обозначается цифрой 2, энергетические диапазоны мод колебаний тяжелых атомов Y и S — цифрой 1

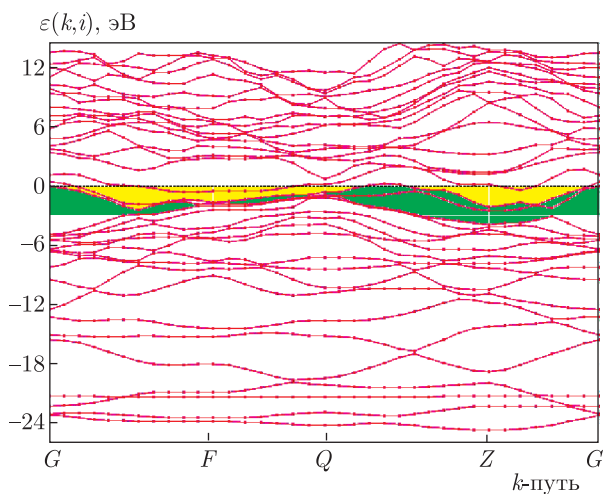


Рис. 12. (В цвете онлайн) Зонная структура соединения YS_4H_4 при давлении $P = 200$ ГПа: вдоль k -пути $G-F-Q-Z-G$. Желтым цветом выделены области, где имеет место электронный тип носителей, зеленым — дырочный. При давлении $P = 100, 400$ ГПа качественный вид структуры зон сохраняется

ные энергии уединенных атомов соответствующего элемента.

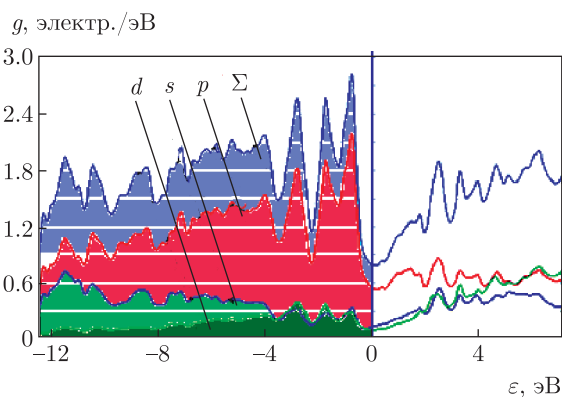


Рис. 13. (В цвете онлайн) Парциальные плотности числа электронных состояний $g(\varepsilon) = \text{PDOS}$ соединения YS_4H_4 при $P = 200$ ГПа

4. ВЫВОДЫ

Тройной гидрид YS_4H_4 является системой, устойчивой вплоть до давления около 50 ГПа, что указывает на положительную тенденцию в плане расширения интервала устойчивости тройных соединений. При этом структура первого предсказанного нами устойчивого тройного гидрида YS_4H_4 содержит относительно малое количество

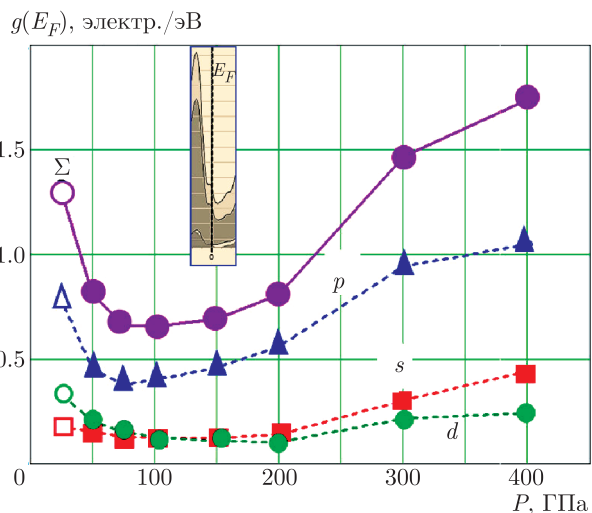


Рис. 14. (В цвете онлайн) Зависимость парциальной плотности числа электронных состояний $g(E_F) = \text{PDOS}$ на уровне Ферми для s -, p -, d -состояний и суммарного значения Σ плотности электронных состояний от давления P для соединения YS_4H_4 . На вставке — вид $g(\epsilon)$ вблизи E_F

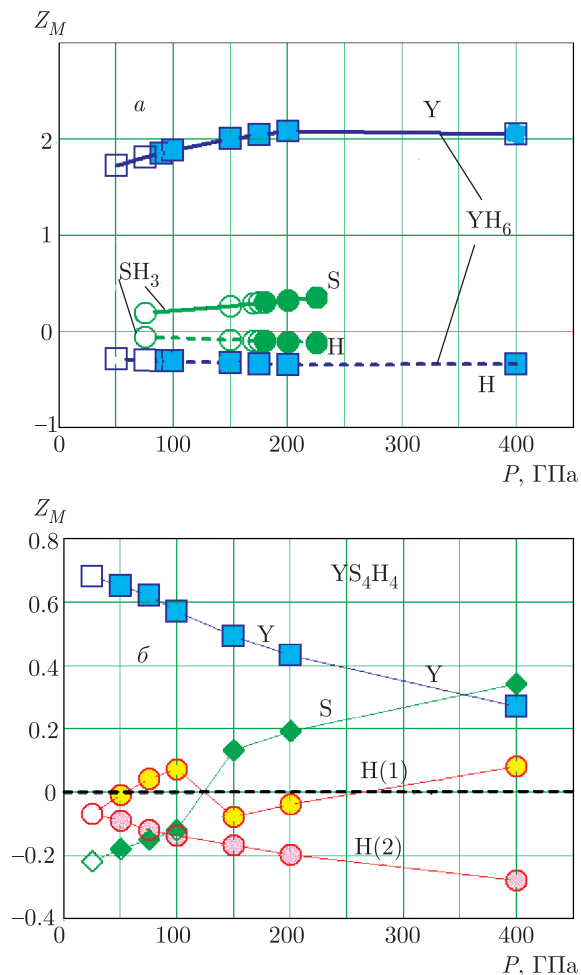


Рис. 15. (В цвете онлайн) Зависимости милликеновских зарядов Z_M атомов для систем YH_6 , SH_3 (а) и YS_4H_4 (б)

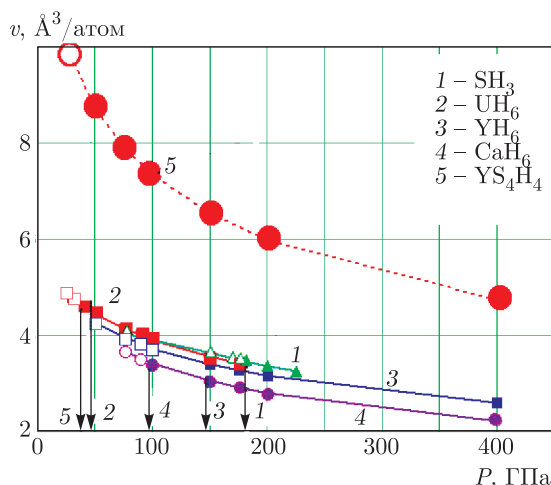


Рис. 16. (В цвете онлайн) Зависимости от давления удельного объема, приходящегося в среднем на один атом элементарной ячейки, для двойных гидридов и для YS_4H_4 . Стрелками показаны минимальные давления, при которых системы устойчивы. При давлениях, представленных на графиках, указанные темными символами данные системы не содержат мнимых частот в спектре фоновых колебаний

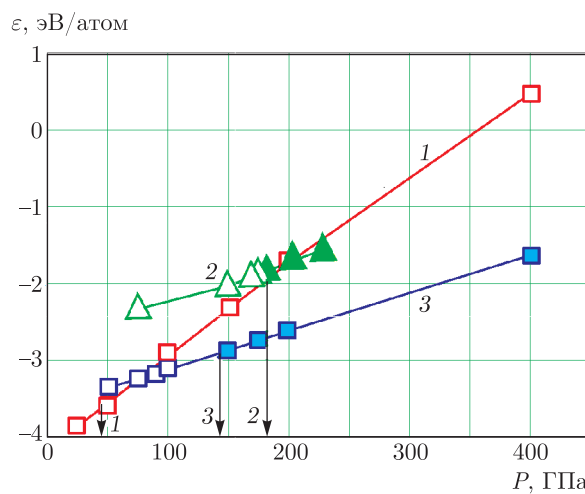


Рис. 17. (В цвете онлайн) Зависимости приведенной удельной энергии на атом для систем YH_6 (3), SH_3 (2), YS_4H_4 (1). Стрелками показаны минимальные давления, при которых системы устойчивы. При давлениях, представленных на графиках, указанные темными символами данные системы не содержат мнимых частот в спектре фоновых колебаний

атомов водорода в элементарной ячейке. Поэтому для YS_4H_4 при $P = 200$ ГПа оценка критической температуры сверхпроводящего перехода приводит к небольшому значению $T_c \approx 20$ К.

Полученные результаты указывают на сложный характер взаимосвязей структуры, электронных и фоновых спектров, типов внутренних связей и зарядового состояния атомов исследованных соединений, особенно с учетом изменений указанных свойств с изменением давления. В соединениях, представляющих собой тройные гидриды, возможна устойчивость при пониженных давлениях за счет «химического» давления материнских атомов матрицы. Представленные особенности фонового и электронных спектров свидетельствуют о сильном влиянии характера связи H–Me и величины содержания водорода на значение критической температуры сверхпроводящего перехода.

Из приведенного сравнительного анализа могут быть получены качественные ориентиры для разработки сверхпроводников с высокими значениями T_c , превышающими 200 К. Соединения CaH_6 , UH_6 , UH_6U и H_3S , представляющие собой новые гидриды с высоким содержанием водорода, являются полигидридами с нестандартными стехиометриями, которые недоступны при атмосферном давлении, и представляют чрезвычайно ценный предмет исследования. Полигидриды могут быть синтезированы при меньших давлениях путем использования «химического» давления материнских атомов матрицы. Представленные особенности фонового и электронных спектров UH_6 свидетельствуют о сильном влиянии характера связи H–Me на значение критической температуры сверхпроводящего перехода.

Работа поддержана Министерством образования и науки РФ в рамках Программы повышения конкурентоспособности НИЯУ МИФИ (2018). Работа выполнена с использованием оборудования центра коллективного пользования «Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса» НИЦ «Курчатовский институт» (субсидия Министерства образования и науки, идентификатор работ RFMEFI62117X0016), <http://ckp.nrcki.ru/>.

ЛИТЕРАТУРА

1. D. Duan, Y. Liu, Y. Ma et al., *National Sci. Rev.* **4**, 121 (2017).
2. H. Wang, S. T. John, K. Tanaka et al., *Proc. National Acad. Sci. USA* **109**, 6463 (2012).
3. P. G. Hou, X. S. Zhao, F. B. Tian et al., *RSC. Adv.* **5**, 5096 (2015).
4. X. L. Jin, X. Meng, Z. He et al., *Proc. Natl. Acad. Sci USA* **107**, 9969 (2010).
5. J. Feng, W. Grochala, T. Jaron et al., *Phys. Rev. Lett.* **96**, 017006 (2006).
6. Y. Cheng, C. Zhang, T. T. Wang et al., *Sci. Rep.* **5**, 16475 (2015).
7. Y. B. Ma, D. F. Duan, D. Li et al., arXiv:1506.03889.
8. D. F. Duan, Y. X. Liu, F. B. Tian et al., *Sci. Rep.* **4**, 6968 (2014).
9. S. T. Zhang, Y. C. Wang, J. R. Zhang et al., *Sci. Rep.* **5**, 15433 (2015).
10. Y. Li, J. Hao, H. Liu et al., *Sci. Rep.* **5**, 09948 (2015).
11. A. P. Drozdov, M. I. Erements, and I. A. Troyan, arXiv:1412.0460.
12. A. P. Drozdov, M. I. Erements, I. A. Troyan et al., *Nature* **525**, 73 (2015).
13. M. Einaga, M. Sakata, T. Ishikawa et al., *Nature Phys.* **12**, 835 (2016).
14. A. P. Drozdov, M. I. Erements, and I. A. Troyan, arXiv:1508.06224.
15. A. R. Oganov and C. W. Glass, *J. Chem. Phys.* **124**, 244704 (2006).
16. Ф. Х. Спеддинг, А. Х. Даан, *Редкоземельные металлы*, Металлургия, Москва (1965).
17. Г. М. Элиашберг, *ЖЭТФ* **39**, 1437 (1960).
18. P. Giannozzi et al., *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 395502 (2009); **29**, 465901 (2017).
19. В. Н. Гребенев, Е. А. Мазур, *ФНТ* **13**, 479 (1987).
20. Н. Н. Дегтяренко, Е. А. Мазур, *ЖЭТФ* **148**, 289 (2015).