

**Новый сверхпроводящий материал на основе золота — сильванит AuAgTe₄:
электронные свойства и динамика решётки из первых принципов.**

**Е.В. Комлева, Ю.С. Поносов, С.В. Стрельцов, А.В. Ушаков, Г. Кафл,¹
Е.А. Панкрушина,² Е.А. Маржин¹**

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург

¹ Бингемтонский университет, г. Бингемтон, США

² Институт геологии и геохимии имени академика А.Н. Заварицкого УрО РАН, г. Екатеринбург

Золото, обладая благородным блеском и на протяжении веков являясь символом власти и достатка, с давних времён привлекало к себе внимание человека. В первую очередь, это было обусловлено внешней привлекательностью и отсутствием процессов ржавления, а затем уже и различными особыми физическими свойствами, например, исключительной пластичностью, тепло- и электропроводностью. Интерес же современной науки к соединениям на основе золота связан с сочетанием существенного спин-орбитального взаимодействия и высокой электропроводимости, возможными необычными механизмами сверхпроводимости и исследованиями новых химических соединений Au, которые могут образовываться под давлением.

Согласно результатам проведённых авторами первопринципных расчётов именно под давлением известный ранее при нормальных условиях минерал сильванит, имеющий химическую формулу AuAgTe₄, становится сверхпроводящим при температурах порядка 1 Кельвина. Это незаурядное свойство, предсказанное авторами, было подтверждено в экспериментальных работах.

Изучение сильванита обусловлено не только интересом к входящему в его состав золоту, но и тем, что такое исследование прекрасно вписывается в основные тенденции, наблюдаемые в современной физике конденсированного состояния и материаловедении. Во-первых, данное соединение является представителем вандерваальсовских систем, изучение которых сейчас находится на пике популярности. В кристаллической структуре таких систем можно выделить отдельные, по составу соответствующие химической формуле слои, связанные друг с другом относительно слабыми силами Ван-дер-Ваальса. Во-вторых, поиск и исследование сверхпроводящих материалов является важной задачей как фундаментальной, так и прикладной наук. В-третьих, золотосодержащие соединения сами по себе являются редкими, ввиду того, что химический элемент Au достаточно инертен. То же можно сказать и о серебре.

Благодаря расчётам в рамках теории функционала электронной плотности авторы установили наличие структурного фазового перехода при 5 ГПа из моноклинной фазы, описываемой пространственной группой $P2_1/c$, в фазу высокого давления, характеризующуюся $P2_1/m$ симметрией. При этом происходит следующее качественное изменение кристаллической структуры минерала. В отсутствие внешнего давления и при его относительно невысоких значениях в решетке присутствуют димеры — пары близко расположенных друг к другу ионов Te, а ионы Au и Ag имеют различную координацию, то есть непохожее ближайшее окружение другими атомами. С ростом давления выше критического происходит разрушение этих пар, а ионы золота и серебра оказываются практически в одинаковом окружении. При помощи

моделирования фононных спектров была доказана динамическая стабильность обеих фаз в соответствующих им интервалах давления (ниже и выше фазового перехода при 5 ГПа). Расшифровка спектров комбинационного рассеяния света при давлениях выше 8 ГПа с помощью результатов моделирования динамики решётки AuAgTe_4 говорит о появлении локального структурного беспорядка в областях высокого давления.

Структурные изменения влекут за собой качественную перестройку электронной структуры соединения. Авторы продемонстрировали резкое увеличение плотности электронных состояний на уровне Ферми, формируемой преимущественно p -состояниями Te, с ростом давления. Анализ рассчитанных зависимостей изотропной спектральной функции Элиашберга и константы электрон-фононного взаимодействия от давления показал, что низкоэнергетические фононные моды вносят доминирующий вклад в электрон-фононное взаимодействие. Теоретическая оценка зависимости температуры сверхпроводимости от приложенного давления находится в хорошем согласии с экспериментальными результатами.

Для появления под давлением сверхпроводимости в селваните, по мнению авторов, решающую роль в формировании куперовских пар и, как следствие, появлении сверхпроводимости, может играть тенденция к зарядовому диспропорционированию. Разрушение димеров Te-Te при фазовом переходе, как оказалось, имеет второстепенное значение. Более того, механизм установления сверхпроводимости, предложенный авторами для AuAgTe_4 , может быть реализован и в других соединениях на основе Au и дихалькогенидах переходных металлов и дополняет современное теоретическое понимание механизма сверхпроводимости в этом классе веществ.