

# Новый сверхпроводящий материал на основе золота — сиванит $\text{AuAgTe}_4$ : электронные свойства и динамика решётки из первых принципов.

Г. Кафл,<sup>1</sup> Е.А. Панкрушина,<sup>2</sup> Е.В. Комлева, А.В. Ушаков, С.В. Стрельцов, Е.А. Маржин<sup>1</sup>

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

<sup>1</sup> Бингемтонский университет, г. Бингемтон, США

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

С помощью первопринципных расчётов найден новый сверхпроводящий материал на основе золота — сиванит  $\text{AuAgTe}_4$ . Установлен структурный фазовый переход при 5 ГПа из моноклинной фазы, описываемой пространственной группой  $P2/c$ , в фазу высокого давления  $P2/m$ . Продемонстрировано резкое увеличение плотности электронных состояний на уровне Ферми ( $N(E_F)$ ), формируемой преимущественно  $p$ -состояниями Te, с ростом внешнего давления. Установлено, что в результате фазового перехода с ростом давления димеры Te-Te не сохраняются, что и приводит к качественному изменению электронной структуры. При помощи моделирования дисперсионных кривых доказана динамическая стабильность  $P2/c$  и  $P2/m$  фаз в соответствующих интервалах давления (ниже и выше 5 ГПа). 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. Оценка зависимости температуры сверхпроводимости от приложенного давления находится в хорошем согласии с экспериментальными результатами [1]. Показано, что установленная в соединении тенденция к зарядовому диспропорционированию может играть решающую роль в формировании куперовских пар и, как следствие, появлению сверхпроводимости под давлением, разрушение димеров Te-Te при фазовом переходе имеет второстепенное значение. Расшифровка спектров комбинационного рассеяния света при давлениях выше 8 ГПа с помощью результатов моделирования динамики решётки  $\text{AuAgTe}_4$  говорит о появлении локального структурного беспорядка в областях высокого давления. Таким образом, механизм установления сверхпроводимости, предложенный для  $\text{AuAgTe}_4$ , может быть реализован и в других соединениях на основе Au и дихалькогенидов переходных металлов и дополняет современное теоретическое понимание механизма сверхпроводимости в этом классе веществ.

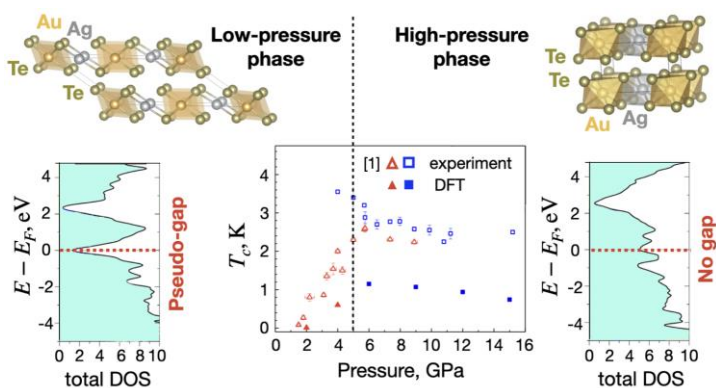


Рисунок - 1. Кристаллические структуры сиванита  $\text{AuAgTe}_4$  ниже ( $P2/c$ ) и выше ( $P2/m$ ) 5 ГПа, а также соответствующие данным структурам полные плотности электронных состояний вблизи уровня Ферми и рассчитанная в DFT температура перехода в сверхпроводящее состояние в зависимости от приложенного внешнего давления (в сравнении с экспериментальными данными из [1]).

## Публикации:

1. [Sylvanite  \$\text{AuAgTe}\_4\$ : a rare case of gold superconducting material](#) / Y. Amiel, G.P. Kafle, E.V. Komleva, E. Greenberg, Y.S. Ponosov, S. Chariton, B. Lavina, D. Zhang, A. Palevski, A.V. Ushakov, H. Mori, D.I. Khomskii, I.I. Mazin, S.V. Streltsov, E.R. Margine, G.Kh. Rozenberg // Journal of Materials Chemistry C.— 2023.—V.11.—P.10016 (9 pages).
2. [Pressure-Induced Reversible Local Structural Disorder in Superconducting  \$\text{AuAgTe}\_4\$](#)  / D.A. Zamyatin, E.A. Pankrushina, S.V. Streltsov, Y.S. Ponosov // Inorganics.—2023.—V.11.—P.99 (12 pages).