



Kraków, 16 kwietnia 2020 r.

Blisko rozmieszczone atomy wodoru mogą prowadzić do nadprzewodnictwa w temperaturze pokojowej

Międzynarodowy zespół naukowców odkrył, że atomy wodoru w wodorkach metalu są dużo gęściej upakowane niż uważano do tej pory. Właściwość ta może prowadzić do pojawienia się nadprzewodnictwa w temperaturach i ciśnieniach zbliżonych do panujących w warunkach pokojowych. Tego rodzaju materiał nadprzewodzący, służący do przesyłania energii elektrycznej bez strat wywołanych rezystancją, mógłby zrewolucjonizować efektywność energetyczną w szerokim zakresie zastosowań.

W należącym do Departamentu Energii Stanów Zjednoczonych Narodowym Laboratorium Oak Ridge (ORNL) naukowcy przeprowadzili eksperymenty rozpraszania neutronów na wodorku cyrkonowo-wanadowym pod ciśnieniem atmosferycznym w zakresie temperatur sięgających od -268 stopni Celsjusza (5 K) do -23 stopni Celsjusza (250 K) – czyli znacznie powyżej temperatury, w której spodziewane jest wystąpienie nadprzewodnictwa przy takim ciśnieniu. Wyniki pomiarów w żaden sposób nie zgadzały się z istniejącymi modelami. Prof. Zbigniew Łodziana z Instytutu Fizyki Jądrowej Polskiej Akademii Nauk w Krakowie, jeden z członków międzynarodowego zespołu badaczy, zaproponował nowy model tego wodorku. Model ten, poddany obliczeniom na jednym z najpotężniejszych superkomputerów na świecie, pozwolił w prosty sposób wyjaśnić obserwacje eksperymentalne. Okazało się, że odległości pomiędzy atomami wodoru w badanym materiale wynoszą 1,6 angstrema, podczas gdy dotychczas ugruntowane przewidywania dla tych związków wyznaczały tę odległość na poziomie co najmniej 2,1 angstrema.

Odkrycia międzynarodowego zespołu badaczy ze szwajcarskiego Laboratorium Badania Materiałów i Technologii EMPA, Uniwersytetu w Zurychu, Uniwersytetu Illinois w Chicago ORNL oraz Instytutu Fizyki Jądrowej Polskiej Akademii Nauk w Krakowie opublikowane zostały w prestiżowym czasopiśmie „Proceedings of National Academy of Sciences”.

Uzyskana struktura atomowa posiada niezwykle obiecujące właściwości, ponieważ wodór znajdujący się w metalach wpływa na ich właściwości elektronowe. Inne materiały o podobnym upakowaniu atomów wodoru przechodzą w stan nadprzewodnictwa, ale tylko przy bardzo wysokich ciśnieniach.

Na przykład niedawno odkryty dekawodorek lantanu osiąga stan nadprzewodnictwa w temperaturze około -13 stopni Celsjusza, tyle że pod ciśnieniem 150 tysięcy MPa, czyli prawie półtora miliona razy wyższym niż ciśnienie atmosferyczne! Tak wysokie ciśnienie potrzebne jest, by zbliżyć do siebie atomy wodoru na odległość mniejszą niż 2 angstremy. Nam udało się pokazać, że wodór można upakować w taki sposób również pod ciśnieniem atmosferycznym. Co ciekawe – od ponad 40 lat panowało przekonanie, iż nie jest to możliwe, stąd badano materiały pod wysokimi ciśnieniami. Znalezienie substancji, która jest nadprzewodnikiem w temperaturze pokojowej i pod ciśnieniem atmosferycznym, najprawdopodobniej pozwoli inżynierom wykorzystać go do projektowania powszechnie stosowanych systemów i urządzeń elektrycznych, jak na przykład tomografów rezonansu magnetycznego. Mamy nadzieję, że tani i stabilny stop w rodzaju wodorku cyrkonowo-wanadowego można będzie łatwo zmodyfikować w taki sposób, aby uzyskać nadprzewodzący materiał – wyjaśnia prof. Zbigniew Łodziana z IFJ PAN.

Badacze przeanalizowali oddziaływania atomów wodoru w dobrze poznanym wodorku metalu za pomocą wysokiej rozdzielczości wibracyjnej spektroskopii nieelastycznego rozpraszania neutronów wiązki VISION, pochodzącej ze spalacyjnego źródła neutronów laboratorium Oak Ridge w Stanach Zjednoczonych. Uzyskany sygnał widmowy, w tym znaczący wzrost intensywności przy energii około 50 milielektronowoltów, nie zgadzał się z przewidywaniami poczynionymi w ramach istniejących modeli teoretycznych.

Przełom w zrozumieniu obserwacji nastąpił po wykonaniu obliczeń w Oak Ridge. Zaproponowany przez prof. Łodzianę model posłużył opracowaniu strategii analizy danych. Obliczenia wykonano na superkomputerze *Titan*, jednym z najszybszych tego typu urządzeń na świecie. Komputer ten zbudowany jest w oparciu o platformę *Cray XK7* i działa z prędkością dochodzącą do 27 petaflopów (czyli 27 miliardów operacji zmiennoprzecinkowych na sekundę). *Wykonanie takich obliczeń na komputerze domowym trwałoby około dwudziestu lat, a na najszybszym polskim superkomputerze Prometheus w ACK Cyfronet jakieś 3–5 miesięcy. Na maszynie Titan wyniki obliczeń otrzymaliśmy w niespełna tydzień* – mówi prof. Łodziana.

Przeprowadzone symulacje komputerowe, wraz z dodatkowymi eksperymentami wykluczającymi alternatywne wyjaśnienia, wykazały jednoznacznie, że nieoczekiwana sygnatura widmowa występuje tylko wtedy, gdy odległości między atomami wodoru są mniejsze niż 2 angstremy. Takiego zjawiska nigdy wcześniej nie zaobserwowano w wodorkach metalu dla ciśnień i temperatur charakterystycznych dla warunków pokojowych. Odkrycia zespołu stanowią więc pierwszy znany wyjątek od kryterium Switendicka w stopie bimetalicznym – czyli zasady obowiązującej dla stabilnych wodorków w warunkach standardowych, która mówi o tym, że odstęp między atomami wodoru nie może być mniejszy niż 2,1 angstrema.

W kolejnych doświadczeniach naukowcy planują wzbogacić wodorek cyrkonowo-wanadowy większą ilością wodoru pod różnymi ciśnieniami, aby ocenić potencjalne nadprzewodnictwo badanego materiału.

Czy zatem znajdujemy się u progu technologicznej rewolucji polegającej na znalezieniu materiału wykazującego właściwości nadprzewodzące w temperaturze pokojowej? *Tego nie wiem, ale z pewnością udało nam się poczynić istotny krok w tym kierunku* – przekonuje prof. Łodziana.

Badania były częściowo finansowane w ramach projektu NCBiR BIOSTRATEG2/297310/13/NCBR/2016.

Instytut Fizyki Jądrowej im. Henryka Niewodniczańskiego Polskiej Akademii Nauk (IFJ PAN) w Krakowie zajmuje się strukturą materii i własnościami oddziaływań fundamentalnych od skali kosmicznej po wnętrza cząstek elementarnych. Wyniki badań – obejmujących fizykę i astrofizykę cząstek, fizykę jądrową i oddziaływań silnych, fazy skondensowanej materii, fizykę medyczną, inżynierię nanomateriałów, geofizykę, biologię radiacyjną i środowiskową, radiochemię, dozymetrię oraz fizykę i ochronę środowiska – są każdego roku przedstawiane w ponad 600 artykułach publikowanych w recenzowanych wysoko punktowanych czasopismach naukowych. Częścią Instytutu jest nowoczesne Centrum Cyklotronowe Bronowice, unikalny w skali europejskiej ośrodek obok badań naukowych zajmujący się terapią protonową nowotworów. IFJ PAN jest członkiem Krakowskiego Konsorcjum Naukowego „Materia-Energia-Przyszłość” o statusie Krajowego Naukowego Ośrodka Wiodącego (KNOW) na lata 2012-2017. Instytut zatrudnia ponad pół tysiąca pracowników. W 2017 roku Komisja Europejska przyznała IFJ PAN prestiżowe wyróżnienie „HR Excellence in Research” jako instytucji stosującej zasady „Europejskiej Karty Naukowca” i „Kodeksu Postępowania przy rekrutacji pracowników naukowych”. W kategoryzacji MNiSW Instytut został zaliczony do kategorii naukowej A+ w grupie nauk ścisłych i inżynierskich.

KONTAKT:

prof. dr hab. Zbigniew Łodziana
Instytut Fizyki Jądrowej Polskiej Akademii Nauk
tel. +48 12 662 8267
e-mail: zbigniew.lodziana@ifj.edu.pl

PUBLIKACJE NAUKOWE:

1. Andreas Borgschulte, Jasmin Terreni, Emanuel Billeter, Luke Daemen, Yongqiang Cheng, Anup Pandey, Zbigniew Łodziana, Russell J. Hemley i Anibal J. Ramirez-Cuesta
„Inelastic neutron scattering evidence for anomalous H–H distances in metal hydrides”
PNAS **117**, (8) 4021-4026
DOI: 10.1073/pnas.1912900117

POWIĄZANE STRONY WWW:

<http://www.ifj.edu.pl/>

Strona Instytutu Fizyki Jądrowej Polskiej Akademii Nauk

<http://press.ifj.edu.pl/>

Serwis prasowy Instytutu Fizyki Jądrowej PAN

MATERIAŁY GRAFICZNE:

IFJ20200416_foto1s.jpg

HR: http://press.ifj.edu.pl/news/2020/04/16/IFJ20200416_foto1s.jpg

Wizualizacja struktury atomowej wodorku cyrkonowo-wanadowego w warunkach zbliżonych do pokojowych. Została ona wyznaczona za pomocą neutronowej spektroskopii wibracyjnej i superkomputera *Titan* znajdującego się w Oak Ridge National Laboratory w USA. Sieć krystaliczna składa się z atomów wanadu (kolor złoty) i atomów cyrkonu (kolor biały) otaczających atomy wodoru (kolor czerwony). Trzy atomy wodoru połączone sprężyną oddziałują ze sobą na zaskakująco małych odległościach rzędu 1,6 angstrema. Tak bliskie odległości między atomami pozwalają upakować znacznie więcej wodoru w materiale, skutkiem czego można spodziewać się pojawienia nadprzewodnictwa. (Źródło: ORNL / Jill Hemman)