

Les fluctuations quantiques de l'hydrogène, un sésame vers la supraconductivité à haute température ?

Des calculs effectués dans le cadre d'une collaboration internationale (Espagne, Italie, France, Allemagne et Japon) dont l'Institut des NanoSciences de Paris (CNRS/Sorbonne Université) fait partie, démontrent que la structure cristalline du supraconducteur LaH_{10} ($T_c=250$ K) est due à la nature quantique des atomes d'hydrogène. Ce résultat marque une étape importante puisqu'il suggère que la supraconductivité à température ambiante peut être obtenue dans un futur très proche dans les composés à base d'hydrogène. Ceci à des pressions fortement inférieures à celles prédites par des calculs qui négligeaient la nature quantique des atomes d'hydrogène. Les résultats sont publiés dans la revue Nature.

Un des « Saint Graal » de la physique moderne est la supraconductivité à température ambiante. La découverte d'un matériau avec une telle propriété provoquerait une véritable révolution technologique et industrielle car cela rendrait possible le transport électrique sans dissipation thermique, le développement de moteurs et générateurs ultra performants et la génération de champs magnétiques de grande intensité sans refroidissement. Les découvertes de la supraconductivité à 200 K (-73 °C) dans le sulfure d'hydrogène et à 250 K (-23 °C, la température des réfrigérateurs de cuisine) dans LaH_{10} ont propulsé l'étude des matériaux à base d'hydrogène. Ces hydrures sont néanmoins supraconducteurs à des pressions supérieures à 100 GPa, un million de fois la pression atmosphérique.

LaH_{10} fait partie de la classe de superhydrures (très haute concentration d'hydrogène) et il est le supraconducteur le plus « chaud » jamais observé. Des calculs théoriques effectués en 2017 et basés sur l'hypothèse que les atomes d'hydrogène se comportent comme des particules classiques, avaient prédit la stabilisation d'une structure hautement symétrique de LaH_{10} formée par des cages d'hydrogène qui entourent les atomes de lanthane (voir Fig. 1). A des pressions inférieures à 230 GPa, les calculs prévoyaient une réduction de la température critique à cause de la déformation de la cage. Les expériences effectuées en 2019 ont montré un scénario totalement différent : la structure hautement symétrique, responsable de l'état supraconducteur à 250 K, étant stable à des pressions fortement inférieures (entre 130 et 220 GPa) et la structure distordue absente dans ce palier de pressions. La structure cristalline et l'origine de l'état supraconducteur étaient donc inexplicables.

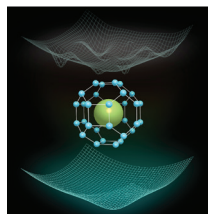


Figure 1

Structure cristalline hautement symétrique (groupe spatial $Fm\bar{3}m$) du superhydrure LaH_{10} . Une cage hautement symétrique d'atomes d'hydrogène entoure l'atome de Lanthane. Dans la partie haute de la figure, un cartoon du profil d'énergie obtenu en négligeant les effets quantiques et présentant plusieurs minima, chaque minimum correspondant à une structure différente. Dans la partie inférieure, le profil d'énergie remodelé par les effets quantiques avec un seul minimum correspondant à la structure expérimentale et supraconductrice.

Grâce au développement d'une théorie capable de décrire la nature quantique des atomes d'hydrogène, l'équipe internationale a démontré que les fluctuations quantiques de ces atomes sont la « colle » qui préserve la structure hautement symétrique de LaH_{10} aux pressions expérimentales. En particulier, le profil d'énergie des simulations classiques à une certaine pression est très complexe et présente plusieurs minima, chaque minimum correspondant à une structure potentiellement stable. Lorsque les fonctions d'onde des atomes d'hydrogène sont prises en compte dans les simulations, un seul minimum reste, celui correspondant à la structure hautement symétrique, comme montré dans la Fig. 1. Si on assimile le profil d'énergie classique à un matelas déformé (Fig. 1, en haut) et surpeuplé à cause du poids des différentes structures cristallines stables, on voit que les effets quantiques éliminent tous les occupants pour n'en garder qu'un seul (Fig. 1 en bas). Le matelas classique est surpeuplé, le matelas quantique ne supporte qu'un hôte.

Autrement dit, les effets quantiques rendent stables des structures cristallines qui ne le seraient pas et instables les autres qui seraient stables classiquement et ils permettent la supraconductivité à haute température à des pressions beaucoup plus faibles que prévu. Un nouvel espoir pour la supraconductivité à haute température critique à des pressions plus facilement abordables.

Référence

“Quantum crystal structure in the 250-kelvin superconducting lanthanum hydride”

Ion Errea, Francesco Belli, Lorenzo Monacelli, Antonio Sanna, Takashi Koretsune, Terumasa Tadano, Raffaello Bianco, **Matteo Calandra**, Ryotaro Arita, Francesco Mauri, and José A. Flores-Livas.

Nature 578, 66–69 (2020)

<https://www.nature.com/articles/s41586-020-1955-z>

Contact : Matteo Calandra - m.calandrabuonaura@unitn.it