Document Type: Full length research Paper
Pages: 1-19

Criticality in Two Corrugated Graphene Sheets Including SeH_2 Molecules

Mohammad Amin Rastkhadiv*

Estahban Higher Education Center-Shiraz University, Estahban, Iran

Received: 10.10.2024 Final revised: 27.10.2025 Accepted: 30.11.2025 Published On-Line: 31.12.2025

Doi: 10.22055/jrmbs.2025.20479

Abstract

In this paper, our system under study consists of two corrugated graphene layers with SeH_2 molecules placed between them. Using the lowest-order constrained variational method, the thermodynamic and structural behaviors of this system, including entropy, free energy, specific heat capacity, and the critical point, have been calculated. The results reveal a superconducting transition within a specific range of temperature and density. Therefore, the magnetic susceptibility, superconducting energy gap, and critical current density have also been evaluated. Our calculations indicate a superconducting transition temperature of about 148 K without applying external pressure and a critical current density of 10^7 A/cm². These results suggest that the proposed structure can be considered a promising candidate for superconducting applications at intermediate temperatures.

Keywords: Superconductivity, Graphene, Phase transition, SeH_2

* Corresponding Author: rastkhadiv@shirazu.ac.ir

This work is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License

بحرانیت در دو صفحهٔ گرافین شیاردار شامل مولکول‌های SeH_2

محمّد امین راست خدیو*

مرکز آموزش عالی استهبان–دانشگاه شیراز، استهبان، ایران

دریافت: ۱٤۰۳/۰۷/۱۹ ویرایش نهائی: ۱٤۰٤/۰۸/۰۵ پذیرش: ۱٤۰٤/۰۹/۰۹ انتشار بر خط: ۱٤۰٤/۱۰/۱۰
Doi: 10.22055/jrmbs.2025.20479

چکیده

در این مقاله، سامانهٔ مورد بررسی ما دو لایهٔ گرافین شیاردار است که مولکول‌های SeH_2 در بین این دو لایه قرار گرفته‌اند. به‌کمک روش پایین‌ترین مرتبهٔ مقیّد وردشی، رفتار ترمودینامیکی و ساختاری این سامانه از قبیل آنتروپی، انرژی آزاد، ظرفیت گرمایی ویژه و نقطهٔ بحرانی محاسبه شده‌اند. نتایج، یک گذار ابررسانایی در محدودهٔ خاصی از دما و چگالی را نشان می‌دهند. از این‌رو، پذیرفتاری مغناطیسی، گاف انرژی ابررسانایی و چگالی جریان بحرانی نیز محاسبه شده‌اند. محاسبات ما دمای گذار ابررسانایی حدود ۱٤۸K بدون اعمال فشار خارجی و چگالی جریان بحرانی $۱۰^{۷}A/cm^{۲}$ را نشان می‌دهند. این نتایج نشان می‌دهند که ساختار پیشنهادی می‌تواند به‌عنوان گزینه‌ای مناسب برای کاربردهای ابررسانایی در دمای متوسط مطرح شود.

کلیدواژگان: ابررسانایی، گرافین، گذار فاز، SeH_2

مقدمه

بعد از کشف اولین ابررسانا، دانشمندان جهت دستیابی به‌موادی با دمای گذار ابررساناییِ بالاتر بسیار تلاش کرده‌اند. کشف اخیر که منجر به یافتن ابررسانایی با دمای بحرانی (T_c) ۲۵۰K تحت فشاری از مرتبهٔ ۱۰۰GPa شد [۱]، حاصل این پژوهش‌های مستمر بوده است. به‌دلیل اینکه این نوع ابررساناها به فشار بسیار بالا نیاز دارند نمی‌توان از آن‌ها در صنعت و زندگی روزمره استفاده کرد. در نتیجه هنوز ابررساناهای کاپرت[1] [۲،۳] با T_c=۱۳۳٫۵K مناسب‌ترین انتخاب در بسیاری از صنایع هستند زیرا در فشار جو، بالاترین T_c را دارند. مطالعات اخیر بر روی ابررساناهایی با T_c بالاتر از ۱۳۳٫۵K بیانگر دو مطلب است، یکی نیاز همگی موارد بررسی شده به فشار بسیار بالاتر از فشار جو [۸-٤] و دیگری وجود اتم‌های هیدروژن زیاد [۹،۱۰] در این ساختارها می‌باشد. ترکیباتی که دارای هیدروژن فراوان در ساختار خود هستند، در فشارهای بسیار بالا، ممکن است کوپل شدگی قوی الکترون–فونون مورد نیاز جهت تولید زوج کوپر در آن‌ها ایجاد شود [۹،۱۰]. هرچند برای ایجاد ساختارهایی با هیدروژن فراوان از فلزاتِ واسطه استفاده می‌شود، امّا باید توجه داشت که این هیدروژن‌ها هستند که نقش اصلی را در تولید ابررساناهای دمای بالا بازی می‌کنند

* نویسنده مسئول: rastkhadiv@shirazu.ac.ir

[1] Cuprates

باز نشر این مقاله با ذکر منبع آزاد است.
این مقاله تحت مجوز کریتیو کامنز تخصیص ٤.۰ بین‌المللی می‌باشد

[۱]. روش‌های نظری مثل نظریهٔ تابع چگالی[1] (DFT) بر مبنای نظریهٔ میگدال–الیشبرگ [۱۱]، نقش به‌سزایی در پیش‌بینی T_c ابررساناهای دمای بالا در ساختارهای کلترت[2] داشته‌اند. در این ساختارها، یک اتم میزبان (Y، Ca و La) در مرکز قفس‌های H_n قرار می‌گیرد (n تعداد هیدروژن‌های قفس است) و تعدادی از الکترون‌هایش را برای ایجاد تعادل در این قفس با هیدروژن‌ها به اشتراک می‌گذارد [۱۶–۱۲]. این قفس‌ها شامل تعداد زیادی هیدروژن هستند، قفس H_{24} مربوط به ساختارهای CaH_6 و YH_6 و قفس H_{32} مربوط به YH_{10} و هیدریدهای کمیاب خاکی مانند LaH_{10} می‌باشد. T_cهای پیش‌بینی شده برای LaH_{10}، YH_{10} و CaH_6 تحت فشارهایی از مرتبهٔ ۰٫۱ TPa در بازهٔ $۲۳۵ < T_c < ۳۲۰\text{K}$ قرار می‌گیرند [۱۸–۱۲]. علیرغم پیش‌بینی‌های زیادی که توسط کارهای نظری ارائه شده است، امّا تعداد کمی از آن‌ها با نتایج آزمایشگاهی همخوانی داشته‌اند. یکی از علت‌های اصلی این نارسایی، عدم توانایی روش DFT در محاسبهٔ دقیق ناتوازنی (anharmonicity) پتانسیل هیدروژن در ساختارهای کلترت می‌باشد [۱۹]. علاوه بر ساختارهای کلترت، محققین توانسته‌اند ابررسانایی دمای بالا را در هیدریدهای فلزی نیز پیش‌بینی کنند [۲۲–۲۰]. در این مطالعات، محاسبات اصول اوّلیه[3] به‌همراه ملاحظهٔ انرژی نقطه–صفر، جهت یافتن ساختاری که از منظر ترمودینامیکی و دینامیکی پایدار باشد به‌کار می‌رود [۲۵–۲۳]. ابررسانایی که در این فلزات کشف شده است غالباً از نوع ابررساناهای متعارف[4] می‌باشند [۲۶].

ما اخیراً ساختار الکترونی یک سامانه شامل دو لایه گرافینِ اعوجاج‌دار که در آن مولکول‌های مشخصی به‌عنوان ناخالصی در بین صفحات گرافینی قرار گرفته‌اند را به‌کمک روشِ پایین‌ترین مرتبهٔ مقیّد وردشی (LOCV)[5] بررسی کرده‌ایم [۲۷]. در آن سامانه، مولکول‌های H_2S، H_3S و CeH_9 به‌طور جداگانه به‌عنوان ناخالصی در مکان‌های مشخصی در بین صفحات گرافینی قرار می‌گیرند. به‌ازای هر نوع ناخالصی، انرژی آزاد الکترون‌های ظرفیت سامانه محاسبه می‌شود. محاسباتِ انرژی آزاد، یک گذار فاز مرتبهٔ دوم برای ناخالصی CeH_9 در دمای $T > ۱۳۳٫۵\ \text{K}$ را نشان می‌دهد درحالی‌که برای دو ناخالصی دیگر هیچ‌گونه رفتار بحرانی در این بازهٔ دمایی دیده نمی‌شود. دمای بحرانی برای ناخالصی CeH_9 برابر ۱۸۶٫۳ K و فشار بحرانی آن ۳۲٫۴۵ MPa می‌باشد. در آن کار، به‌این سؤال که آیا گذار فاز مرتبه دوّم دیده شده مبیّن یک گذار ابررسانایی است یا نه به‌طور دقیق پاسخ داده نشد [۲۷]. ما در ادامهٔ کار قبلی خود [۲۷] توانستیم در کار دیگری که اخیراً انجام داده‌ایم [۲۸]، جهت بیشینه کردن دمای گذار، چینش بهینهٔ مولکول‌های CeH_9 را از میان ۹۹۰۰ نوع چینش مختلف بیابیم. دستاورد بزرگ ما در آن کار، محاسبهٔ گاف انرژی ابررسانایی و چگالی جریان بحرانی می‌باشد که مؤید قطعی گذار ابررسانایی است.

در کار پیش‌رو، سامانهٔ مورد بررسی ما از دو لایه گرافین به‌همراه چینش‌های متفاوتی از مولکول‌های SeH_2 که در بین دو لایه گرافین قرار گرفته‌اند، تشکیل شده است.

[1] Density Functional Theory
[2] Clathrate
[3] First-principles calculations
[4] Conventional superconductors
[5] Lowest order constrained variational

ما در ابتدا انرژی آزاد و تابع موج کل الکترون‌های ظرفیت این سامانه را محاسبه می‌کنیم سپس خواص ترمودینامیکی الکترون‌های ظرفیت را به‌دست می‌آوریم. خواهیم دید که این خواص نشان دهندهٔ یک گذار فاز تعادل ساختاری[1] در الکترون‌های ظرفیت سامانه می‌باشد. جهت تعیین نوع این گذار، نمودارهای پذیرفتاری مغناطیسی و گاف انرژی سامانه محاسبه می‌شوند که خواهیم دید این نمودارها مبیّن یک گذار ابررسانایی هستند. در این مقاله به‌ترتیب در بخش روش، نظریهٔ بس‌ذرّه‌ای LOCV و نحوهٔ چینش مولکول‌ها را توضیح خواهیم داد، در بخش نتایج، داده‌های به‌دست آمده از محاسبات بس‌ذره‌ای را ارائه خواهیم کرد. نهایتاً بخش آخر به نتیجه‌گیری اختصاص پیدا خواهد کرد.

روش

ما از روش LOCV برای محاسبهٔ خواص گرمایی، الکتریکی و مغناطیسی الکترون‌های ظرفیت سامانه استفاده می‌کنیم. این روش برای سامانه‌های بحرانی نیز مناسب است زیرا هیچ پارامتر آزادی به‌جملات انرژی سامانه $(E = E_1 + E_2 + \cdots)$ وارد نمی‌کند [۲۹]. در ادامه با این جملات انرژی آشنا خواهیم شد. هرچقدر برد برهم‌کنش بین ذرّات بلندتر باشد، جملات بیشتری از بسط انرژی سامانه را باید محاسبه کرد. با افزایش مرتبهٔ جمله‌ها، محاسبهٔ آن‌ها به‌طور قابل ملاحظه‌ای دشوارتر می‌شود. محاسبهٔ خوشه‌ها تا مرتبه‌ای باید انجام شود که سهم آن مرتبه در انرژی کل سامانه (E) ناچیز باشد. باید به‌این نکته توجه کرد که روش LOCV مانند بسط تیلور در ریاضیات کاملاً دقیق است که از جملات ناچیزِ آن صرفه نظر می‌شود.

از آنجا که ما قصد داریم برهم‌کنش اسپین–اسپین را نیز جهت محاسبهٔ رفتار مغناطیسی سامانه در نظر بگیریم، تعداد الکترون‌های ظرفیت سامانه (N) را به دو گروه $N^{(+)}$ و $N^{(-)}$، که به‌ترتیب نشان دهنده تعداد الکترون‌های با اسپین بالا و پایین می‌باشند، تقسیم می‌کنیم. برای یک الکترون با اسپین $i = +, -$، تابع توزیع فرمی–دیراک $(\rho^{(i)})$ به‌صورت:

$$\rho^{(i)}(k) = \left[e^{\beta(\varepsilon(k)-\mu^{(i)})} + 1\right]^{-1}, \qquad ۱$$

می‌باشد که در آن $\varepsilon(k)$ حالت‌های انرژی تک ذره‌ای، k بردار موج الکترون ظرفیت، μ پتانسیل شیمیایی، $\beta = \frac{1}{k_B T}$ و k_B ثابت بولتزمن است. پتانسیل شیمیایی در هر دما (T) و هر چگالی عددی $(\mathfrak{n})$ با قید تعداد ذرات:

$$N = \sum_{k,i} \left[e^{\beta(\varepsilon(k)-\mu^{(i)})} + 1\right]^{-1}, \qquad ۲$$

محاسبه می‌شود. برای اهداف مغناطیسی که در این کار پیش‌بینی شده است، پارامتر نظم اسپینی (ξ) به‌صورت:

$$\xi = \frac{N^{(+)} - N^{(-)}}{N}, \qquad ۳$$

تعریف می‌شود. در روش LOCV تابع موج N ذره‌ای سامانه به دو بخش به‌صورت:

$$\psi(1, 2, \cdots, N) = F(1, 2, \cdots, N)\Phi(1, 2, \cdots, N), \qquad ٤$$

تقسیم می‌شود که F تابع همبستگیِ N ذره‌ای و Φ تابع موج بدون برهم‌کنشِ N ذره‌ای سامانه می‌باشد [۲۹].

[1] Structural stability phase transition

Φ بر اساس نوع ذرات سامانه که فرمیون یا بوزون باشند تعیین می‌شود. در حالتی که ذرات سامانه فرمیون باشند، Φ دترمینان اسلیتر خواهد بود.

در روش LOCV انرژی کل سامانه برحسب خوشه‌های انرژی تعریف می‌شود [۲۹]:

$$E = \frac{\langle\Psi|\mathcal{H}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} = E_1 + E_2 + \cdots, \qquad ۵$$

که در آن $\mathcal{H}$ هامیلتونی سامانه، E_1 انرژی تک–جسمی، E_2 انرژی دو–جسمی و غیره می‌باشند. E_1 از رابطهٔ:

$$E_1 = \sum_i E_1^{(i)} = \sum_{k,i} \rho^{(i)}(k)\varepsilon(k), \qquad ۶$$

و E_2 از رابطهٔ:

$$E_2 = \frac{1}{2}\sum_{i,j_1,j_2} \rho^{(i)}(k_{j_1})\rho^{(i)}(k_{j_2})\langle j_1 j_2|\omega(12)|j_1 j_2\rangle_a, \qquad ۷$$

به‌دست می‌آید. j_1 و j_2 نشان دهندهٔ حالت‌های دو–ذره‌ای هستند. چون ذرات سامانه فرمیون هستند، a بیانگر پادمتقارن بودن تابع موج است. $\omega(12)$ پتانسیل مؤثر خوشه دو–جسمی است که به‌صورت:

$$\omega(12) = \frac{\hbar^2}{m^*}\left[\vec{\nabla}F(\mathrm{r})\right]^2 + F^2(\mathrm{r})V(\mathrm{r}), \qquad ۸$$

می‌باشد [۲۹]. در این رابطه $\hbar = \mathrm{h}/(2\pi)$، h ثابت پلانک، $\vec{\nabla}$ عملگر گرادیان، $V(\mathrm{r})$ پتانسیل برهم‌کنش کننده بین دو ذره با فاصله r، m^* جرم مؤثر هر الکترون ظرفیت و $F(\mathrm{r})$ تابع همبستگی دو–ذره‌ای می‌باشد. با در نظر گرفتن برهم‌کنش اسپین–اسپین، تابع همبستگی دو–ذرّه‌ای به‌صورت:

$$F(\mathrm{r}) = \sum_{s=0,1} f_s(\mathrm{r})P_s, \qquad ۹$$

در می‌آید که در آن داریم:

$$P_0 = \frac{1}{4}(1 - \vec{\sigma}_1.\vec{\sigma}_2), \qquad ۱۰$$

و

$$P_1 = \frac{1}{4}(3 + \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2), \qquad ۱۱$$

σ اسپین الکترون، و f_0 و f_1 به‌ترتیب تابع همبستگی مربوط به اسپین–یگانه و اسپین–سه‌گانه هستند. با اعمال قید بهنجارش، انرژی خوشه دوجسمی نسبت به وردش تابع همبستگی دو–جسمی کمینه می‌شود. این کمینه‌سازی با استفاده از معادلهٔ اویلر–لاگرانژ:

$$f_s''(\mathrm{r}) + \left(\frac{2}{\mathrm{r}} + \frac{a_s'}{a_s}\right)f_s'(\mathrm{r}) - \frac{m^*}{\hbar^2}(V(\mathrm{r}) - 2\Lambda)f_s(\mathrm{r}) = 0 \qquad ۱۲$$

انجام می‌شود که ضرایب لاگرانژ Λ قید بهنجارش را اعمال می‌کنند. علامت پرایم نشان‌دهندهٔ مشتق‌گیری نسبت به r می‌باشد. تابع همبستگی دو–جسمیِ وابسته به اسپین با استفاده از رابطهٔ۱۲ به‌دست می‌آید که با محاسبهٔ آن می‌توان سایر خوشه‌های انرژی را نیز محاسبه کرد. جهت یافتن اطلاعات بیشتر در مورد سایر خوشه‌های انرژی به‌مرجع [۲۹] مراجعه کنید.

برای محاسبهٔ آنتروپی سامانه از رابطهٔ:

$$S(m^*,T) = -k_B\sum_{k,i}\left[(1-\rho^{(i)}(k))\ln(1-\rho^{(i)}(k)) + \rho^{(i)}(k)\ln(\rho^{(i)}(k))\right], \qquad ۱۳$$

استفاده می‌کنیم. در این رابطه m^* جرم مؤثر ذرّات سامانه است که انرژی آزاد سامانه نسبت به آن کمینه می‌شود.

پذیرفتاری مغناطیسی (χ) یک تابع واکنشی مهم در تعیین ویژگی مغناطیسی مواد می‌باشد. جهت محاسبهٔ پذیرفتاری مغناطیسی سامانه مورد نظر، یک میدان مغناطیسی خارجی در راستای z به‌صورت H_z در نظر می‌گیریم که این منجر به اضافه شدن جملهٔ

$-\sum_i \vec{\mu}_i \cdot \vec{H}$ به‌همیلتونی سامانه می‌شود. ممان مغناطیسی الکترون $\vec{\mu}_i$ برابر با $\vec{\mu}_i = -\frac{\mathbf{e}}{m^*}\vec{\sigma}_i$ است که $\mathbf{e}$ بار الکترون می‌باشد. پذیرفتاری مغناطیسی از روابط زیر:

$$M_z = \left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial H_z}\right)_{T,\mathfrak{n}}, \qquad ۱٤$$

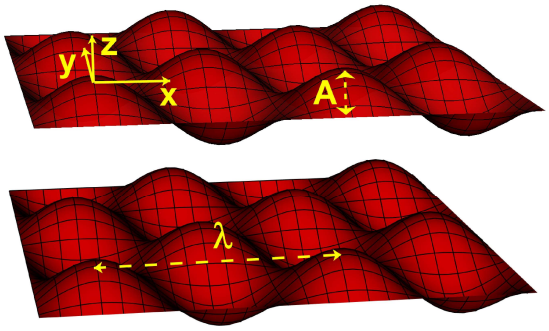
$$\chi = \left(\frac{\partial M_z}{\partial H_z}\right)_{T,\mathfrak{n}}, \qquad ۱۵$$

به‌دست می‌آید، که در آن M_z مغناطش در جهت محور z و $\mathcal{F}$ انرژی آزاد الکترون‌های ظرفیت است.

پیکربندی سامانه

زمانی که لایه‌های گرافین در کارهای نظری اعمال می‌شوند، اولین مشکل در نظر گرفتن چین‌خوردگی‌های خودبه‌خودیِ سطح گرافین در محاسبات است. در دماهای بالا، بسیاری از دانشمندان نظری این چین‌خوردگی‌های کوچک حرارتی را برای سادگی محاسبات نادیده می‌گیرند، در حالی‌که در نظر گرفتن آنها ممکن است نتایج را به‌طور قابل توجهی تغییر دهد [۲۷]. چین خوردگی در سطح گرافین، با ایجاد شیار در سطح گرافین متفاوت است. چین‌خوردگی‌های سطح گرافین یک پدیدهٔ تصادفی است، در حالی‌که شیارها را با دستگاه‌های مخصوص در آزمایشگاه‌ها به‌صورت توابع دوره‌ای ریاضیاتی بر روی گرافین ایجاد می‌کنند؛ بنابراین، شیارها را می‌توان در معادلاتی مانند معادلهٔ شرودینگر در نظر گرفت و آن‌ها را حل کرد. از لحاظ فنی، هنگامی‌که یک لایه گرافین در حال ساخت است، سازنده می‌تواند شیارهایی منظم روی سطح آن ایجاد کند تا از بروز چین‌خوردگی‌های ذاتی جلوگیری کند [۳٤].

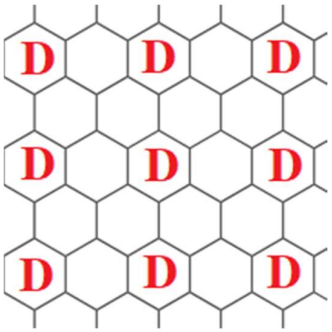
در کار حاضر، سامانهٔ مورد بررسی ما، دو ورقهٔ گرافین با فاصله دو اتم کربن (C-C) برابر با ۱٫٤۲ آنگستروم که الگوهای شش ضلعی آنها دقیقاً روی هم قرار گرفته‌اند و با فاصله‌ای به‌اندازهٔ L از هم جدا شده‌اند، می‌باشد؛ L را فاصلهٔ تعادلی می‌نامیم که دلیل آن در ادامه روشن خواهد شد. شیارهایی که برای دو ورقه گرافین در نظر گرفته‌ایم به‌صورت توابع سینوسی با دورهٔ تناوبλ و دامنهٔA می‌باشند که در محاسبات ریاضی، تابع سینوسی، خوش رفتار می‌باشد (شکل۱).



شکل۱. دو لایهٔ گرافین شیاردار به‌صورت توابع سینوسی با دوره تناوب λ و دامنهٔ A. شکل بدون مقیاس رسم شده است.

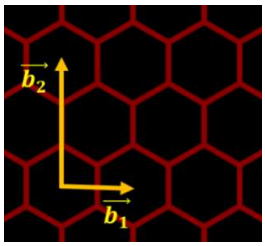
این شیارها تناوب الگوی شش ضلعی را تغییر نمی‌دهند. همان‌طور که قبلاً ذکر شد، تحقیق ما بر روی بررسی خواص الکتریکی و ترمودینامیکی یک سامانه شامل دو لایهٔ گرافین شیاردار با مولکول‌های آلایش شدهٔ SeH_2 است. برای محاسبهٔ این خواصِ سامانه، دانستن مختصات موقعیت‌های تعادلی مولکول‌های SeH_2 و اتم‌های کربنِ لایه‌های گرافین ضروری است. باید تأکید کرد که منظور از موقعیت‌های تعادلی اتم‌ها، موقعیت‌های میانگین اتمی بر اساس چگالی‌های احتمالی کوآنتومی آنها می‌باشد. محاسبهٔ مختصات تعادلی مولکول‌های سامانه، یک چالش مهم در انجام تحقیق نظری ما محسوب می‌شود. برای حل این مشکل، ابتدا موقعیت‌های آزمایشی برای مولکول‌های SeH_2 و اتم‌های کربن در نظر می‌گیریم، سپس به‌کمک فرآیند بهینه‌سازی، این موقعیت‌های آزمایشی را اصلاح

می‌کنیم تا مختصات تعادلی دقیق اجزای سامانه به‌دست بیاید. اتم‌های سلنیم مولکول‌های آلایش شدهٔ SeH_2 در ابتدا به‌صورت دوره‌ای و دقیقاً در وسط دو لایهٔ گرافین در موقعیت‌های خاصی توزیع می‌شوند. این مکان‌ها را مکان‌های آزمایشی سلنیم می‌نامیم. به‌عنوان مثال، شکل۲ نمای دو بعدی از نحوهٔ توزیع مولکول‌های آلایش شده برای یک چینش خاص از مولکول‌های SeH_2 را نشان می‌دهد [۲۷]. در این شکل، اتم‌های سلنیم مولکول‌های SeH_2 ابتدا به‌طور دقیق در نقطهٔ وسط خطوطِ اتصالِ مراکزِ دو ساختارِ شش ضلعیِ گرافین، که یکی از شش ضلعی‌ها در بالا و دیگری در پایین اتم‌های سلنیم هستند، قرار گرفته‌اند. این نحوهٔ قرارگیری اتم‌های سلنیم در وسطِ دو لایهٔ گرافین، برای تمامیِ انواعِ توزیع‌های مولکول‌های SeH_2 اعمال می‌شوند. بعداً در رابطه با انواع چینش‌های SeH_2 توضیح خواهیم داد.



شکل۲. نمایشِ دو بعدی از چینشِ خاصی از مولکول‌های SeH_2 در بین دو صفحه گرافین. نماد D نشان دهندهٔ مولکول‌های آلایش شدهٔ SeH_2 است.

در کار حاضر برای به‌حداکثر رساندن دمای بحرانی الکترون‌های ظرفیت، انواع مختلفی از توزیع‌های مولکول‌های SeH_2 را در بین دو لایهٔ گرافین شیاردار در نظر می‌گیریم. برای این منظور، دو بردار شبکهٔ b_1 و b_2 را برای یک گرافین تخت تعریف می‌کنیم که در شکل۳ نشان داده شده است. فاصلهٔ بین دو مولکول آلایش شده متوالی در جهت‌های افقی و عمودی به‌ترتیب با n_1b_1 و n_2b_2 تعریف می‌شود که در آن $n_1 = ۲،۳،...$ و $n_2 = ۱،۲،...$ می‌باشد. برای مثال، توزیع $n_1 = ۲$، $n_2 = ۱$ مربوط به‌شکل۲ می‌باشد. به‌دلیل اندازهٔ نسبتاً بزرگ مولکول‌های SeH_2، مقدار $n_1 = ۱$ مجاز نیست. موقعیت‌های اتم‌های کربن در لایه‌های سینوسی شکل گرافین شکل۱ به‌عنوان موقعیت‌های آزمایشی برای اتم‌های کربن در نظر گرفته می‌شوند.



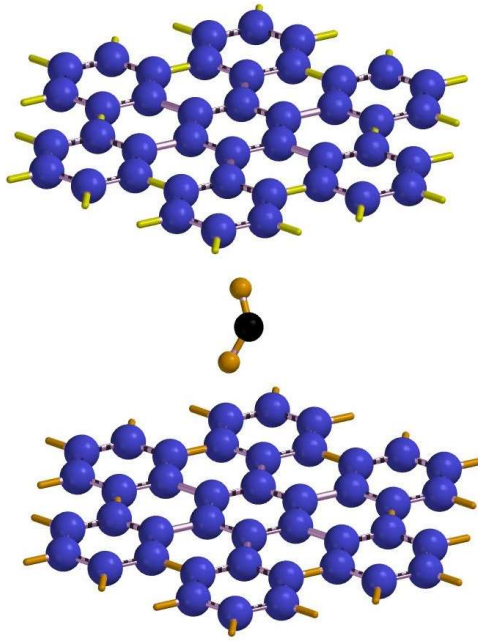
شکل۳. جهت آدرس دادن مولکول‌های آلایش شده، بردارهایِ شبکهٔ b_1 و b_2 بدین صورت در صفحهٔ گرافین تعریف می‌شوند.

برای محاسبهٔ مختصات آزمایشیِ دو اتم هیدروژن در اطراف اتم‌های سلنیم، ابتدا فرض می‌کنیم فقط یک مولکول SeH_2 بین دو لایهٔ تخت گرافین قرار دارد. با حل معادلهٔ شرودینگر برای این حالت خاص و کمینه کردن انرژی آزاد سامانه نسبت به مختصات اتم‌ها، مختصات تعادلیِ آزمایشیِ دو هیدروژن اطراف یک اتم سلنیم بین دو صفحهٔ گرافین به‌دست می‌آید. مختصات دو هیدروژن به‌دست آمده از این رهیافت، به‌عنوان مختصات آزمایشی تمامِ جفت هیدروژن‌های اطراف اتم‌های سلنیم سامانهٔ مورد بررسی ما در نظر گرفته می‌شوند. در ادامه، اصول این محاسبات را توضیح می‌دهیم. در این راستا، یک اتم سلنیم دقیقاً در نقطهٔ میانیِ خطی که مراکز دو شش ضلعی گرافین که یکی در بالای اتم سلنیم و دیگری در زیر آن هست، قرار داده می‌شود. سپس یک فضای کروی فرضی با شعاع حدوداً ۵ آنگستروم به مرکزیت اتم‌های سلنیم در نظر

می‌گیریم. این کره نشان دهندهٔ فضایی است که در آن اتم‌های هیدروژن به‌طور مؤثر با Se، C و اتم H دیگر برهم‌کنش می‌کنند. همان‌طور که در بالا بیان شد، این شعاع مؤثر از حل معادلهٔ شرودینگر برای یک مولکول SeH_2 بین دو لایهٔ تخت گرافین به‌دست می‌آید. در این روش، فضای کروی مذکور، به‌زیر فضاهای مکعبی با حجم $۱۰^{-۳}$ آنگستروم مکعب تقسیم می‌شود. انرژی آزاد یک مولکول SeH_2 بین دو لایهٔ تخت گرافین به‌روش LOCV برای تمامی توزیع‌هایِ مؤثرِ ممکنِ دو اتم هیدروژن بین مکعب‌ها محاسبه می‌شود، به‌طوری که هر اتم هیدروژن در مرکز یک مکعب قرار می‌گیرد. موقعیت‌های تعادلی دو اتم هیدروژن در اطراف اتم سلنیم، با پیکربندی که کمترین انرژی آزاد را دارد، تعیین می‌شود. پتانسیل کولنی برای برهم‌کنش‌های H-H، H-Se و H-C به‌همراه برهم‌کنش اسپین–اسپین در نظر گرفته می‌شود (معادلهٔ۹). فرآیند محاسبهٔ انرژی آزاد یک مولکول SeH_2 بین دو لایهٔ تخت گرافین به‌روش LOCV مشابه محاسبه انرژی آزاد الکترون‌های ظرفیت است که در معادلات۱٦، ۱۷ و ۱۹ توضیح داده شده است.

تمام مختصات‌های آزمایشی برای شروع محاسبات مفید هستند. مختصات تعادلی واقعی همه اتم‌ها با روش وردشی که در ادامه توضیح داده خواهد شد تعیین می‌شوند. موقعیت‌های آزمایشی اتم‌های C، Se و H به‌ترتیب با بردارهای $\mathbf{R_C'}$، $\mathbf{R_{Se}'}$ و $\mathbf{R_H'}$ مشخص می‌شوند. در این مقاله بردارها به‌صورت پر رنگ نوشته می‌شوند. اکنون می‌خواهیم به‌اتم‌ها اجازه دهیم تا در پایدارترین موقعیت‌های مکانی خودشان قرار گیرند. این‌ها در واقع مکان‌هایی هستند که اتم‌ها در ساخت آزمایشگاهی سامانه در آن مکان‌ها قرار می‌گیرند. با این روش، ما می‌توانیم محاسبات نظری خود را با واقعیت‌های تجربی سازگار کنیم. برای این کار، جملات $\boldsymbol{\delta R'}$ را به موقعیت‌های آزمایشی اتم‌ها اضافه می‌کنیم؛ $\mathbf{R_C = R_C' + \delta R_C'}$، $\mathbf{R_{Se} = R_{Se}' + \delta R_{Se}'}$ و $\mathbf{R_H = R_H' + \delta R_H'}$. با کمینه کردن انرژی آزاد ساختار شبکه نسبت به تغییرات $\boldsymbol{\delta R_C'}$، $\boldsymbol{\delta R_{Se}'}$ و $\boldsymbol{\delta R_H'}$ موقعیت‌های میانگین همه اتم‌ها محاسبه می‌شوند؛ بنابراین، بردارهای $\mathbf{R_C}$، $\mathbf{R_{Se}}$ و $\mathbf{R_H}$ نمایانگر مکان‌های تعادلیِ واقعی (موقعیت‌های میانگین) اتم‌ها در ساختار شبکه هستند. نحوهٔ قرار گرفتن یک اتم SeH_2 در بین دو لایهٔ گرافین مربوط به توزیع۱ (انواع توزیع‌های اتم SeH_2 در بین دو لایه گرافین در ادامه توضیح داده خواهد شد) در شکل٤ رسم شده است. مختصات اتم‌ها در این شکل مربوط به نقطهٔ بحرانی می‌باشند.

الکترون‌های موجود در اتم‌های کربن و مولکول‌های آلایش‌شده را می‌توان به الکترون‌های ظرفیت و غیر ظرفیت دسته‌بندی کرد. الکترون‌های ظرفیت دقیقاً همان سامانهٔ ترمودینامیکی هستند که قصد داریم رفتار بحرانی آن را بررسی کنیم. در روش‌شناسی ما، این الکترون‌ها به هیچ اتم خاصی نسبت داده نمی‌شوند. آن‌ها در شبکه بلوری مانند یک سیّال جریان می‌یابند تا رسانایی یا ابررسانایی ایجاد کنند؛ بنابراین، ما آن‌ها را الکترون‌های سیّال می‌نامیم. از طرفی دیگر، الکترون‌های غیر ظرفیت به هسته‌ها متصل هستند و اثر پوششی ایجاد می‌کنند. این اتصالات مانع از مشارکت آن‌ها در تشکیل زوج کوپر می‌شود. در محاسبات ما، همه اتم‌های کربن، سلنیم و هیدروژن به‌عنوان یون‌هایی با بار مؤثر q در نظر گرفته می‌شوند که الکترون‌های سیّالِ سامانه بین آن‌ها حرکت می‌کنند. این یون‌ها عبارتند از: Se^{2+}، C^{4+} و H^{+}. بار مؤثر q هر یون توسط هستهٔ مثبت آن و اثر پوششی ناشی از الکترون‌های غیر ظرفیت آن تعیین می‌شود.



شکل ٤. نحوهٔ قرار گرفتن یک اتم SeH_2 در بین دو لایه گرافین مربوط به توزیع۱ در نقطهٔ بحرانی. برای دید بهتر، فاصلهٔ بین دو گرافین افزایش یافته است.

در روش LOCV، داشتن مقادیر انرژی تک‌ذره‌ای ε(k)، تابع موج تک‌ذره‌ای Φ(k) و پتانسیل‌های برهم‌کنش کننده، ورودی‌های اصلی این روش محسوب می‌شوند. با محاسبهٔ این سه مورد، تمام توابع ترمودینامیکی سامانه به‌دست می‌آیند. برای محاسبه ε(k) و Φ(k)، معادلهٔ شرودینگر زیر برای یک الکترون سیّال که در نقطهٔ $\boldsymbol{r} = x\hat{\boldsymbol{\imath}} + y\hat{\boldsymbol{\jmath}} + z\hat{\boldsymbol{k}}$ قرار دارد و با پتانسیل الکتریکی ایجاد شده توسط یون‌های کربن و آلایش‌شده برهم‌کنش می‌کند، حل می‌شود:

$$-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m^*}\Phi + U\Phi = \varepsilon\Phi, \qquad ۱۶$$

$$U = \sum_{i=1}^{N_1} V_{e-C}\left(\vec{R}_{C_i},\vec{r}\right) + \sum_{j=1}^{N_2} V_{e-D}\left(\vec{R}_{D_j},\vec{r}\right), \qquad ۱۷$$

که در آن، ∇^2 عملگر لاپلاسی است و $N_1 = ۱۸$ و N_2 به‌ترتیب تعداد یون‌های کربن و مولکول‌های آلایش شده‌ای هستند که برهم‌کنش‌های مؤثری با یک الکترون سیّال دارند. این اعداد با ارزیابی فواصلی محاسبه می‌شوند که در آن‌ها، پتانسیل‌های برهم‌کنش کنندهٔ e-C و e-D به‌اندازهٔ دو مرتبهٔ بزرگی از مقادیر مطلقِ جذبیِ حداکثریِ خود کاهش می‌یابند.

یک الکترون سیّال سه پتانسیل مجزا را احساس می‌کند: ۱) الکترون با یون‌های کربن شبکه گرافین(e-C)، ۲) الکترون با یون‌های آلایش‌شده(e-D)، و ۳) الکترون با سایر الکترون‌های سیّال (e-e). برهم‌کنش‌های e-C و e-D در معادلهٔ۱۷ در نظر گرفته می‌شوند، در حالی‌که e-e در معادلهٔ۸ و خوشه‌های انرژی بالاتر در نظر گرفته می‌شود. جواب کلی معادلهٔ۱۶ به‌صورت زیر است:

۱۸

$$\Phi\left(x,y,z,\vec{k}\right) = \mathcal{A}\cdot u_1\left(x,y,k_x,k_y\right)u_2\left(z,k_z\right)\cdot e^{(ik_x x + ik_y y)},$$

که در آن $\mathcal{A}$ ثابت بهنجارش است. در نظر گرفتن این نوع تابع موج از دوره تناوب شیارهای گرافین و توزیع مولکول‌های SeH_2 ناشی می‌شود. به‌دلیل این تناوب‌ها، تابع موج به‌شکل بلاخ[1] نوشته شده است که در آن $u_1\left(x,y,k_x,k_y\right)$ شرط مرزی دوره‌ای بورن–فون کارمان[2] را در صفحه x-y ارضا می‌کند. وابستگی تابع موج به z و k_z با عبارت $u_2\left(z,k_z\right)$ لحاظ شده است. با در نظر گرفتن شرایط مرزی در رابطهٔ۱۶، معادلهٔ شرودینگر با روش شوتینگ[3] حل می‌شود و بدین ترتیب ε(k) و Φ(k) به‌دست می‌آیند، سپس انرژی کلِ الکترون‌های سیّال، با وارد کردن ε(k) و Φ(k) در جملات خوشه‌های انرژی و جمع کردن انرژی خوشه‌ها با یکدیگر، محاسبه می‌شود. کار کردن با انرژی

[1] Bloch
[2] Born-Von Karman
[3] Shooting method

آزاد F=E−TS به‌جای استفاده از انرژی کل راحت‌تر است که در آن S آنتروپی سامانه می‌باشد:

$$S(m^*,T)=-k_B\sum_{k,i}[(1-\rho^{(i)}(k))\ln(1-\rho^{(i)}(k))+\rho^{(i)}(k)\ln(\rho^{(i)}(k))] \quad (۱۹)$$

در این رابطه، جرم مؤثر به‌عنوان یک پارامتر وردشی در نظر گرفته می‌شود. در واقع انرژی آزاد الکترون‌های سیّال با توجه به تغییرات جرم مؤثرشان کمینه می‌شود. به‌این ترتیب، برهم‌کنش‌های الکترون–فونون در محاسبات انرژی آزاد سامانه در نظر گرفته می‌شود. این برهم‌کنش‌ها می‌توانند نقش مهمی در تعیین رفتار بحرانی سامانه‌ها ایفا کنند. در بخش بعدی نشان داده خواهد شد که با نادیده گرفتن این برهم‌کنش‌ها، رفتار بحرانی الکترون‌های سیّال ناپدید می‌شود.

نتایج

در بخش روش‌شناسی، فرآیند تعیین موقعیت‌های تعادلیِ دو اتم هیدروژنِ مولکول SeH_2 که بین دو لایه گرافین صاف قرار دارد، مورد بحث قرار گرفت. این موقعیت‌ها در مختصات کروی در جدول شماره۱ ارائه شده‌اند، که در آن θ و φ به‌ترتیب نمایانگر زوایای قطبی و سمتی هستند. این نتایج بر اساس مبدأ دستگاه مختصات که در مرکز اتم Se قرار دارد تعیین شده اند.

جدول۱. موقعیت‌های تعادلیِ دو اتم هیدروژنِ مولکول SeH_2 که بین دو لایه گرافین صاف قرار گرفته است. θ و φ رتیب نمایانگر زوایای قطبی و سمتی می‌باشند.

اتم	شعاع(A°)	φ (degree)	θ (degree)
Se	0	-	-
H	۲٫۰۲	٦۳٫۳٦	٥۱٫۳۸
H	۲٫۰٤	۲۹۷٫۱٤	۱۲٥٫۳۲

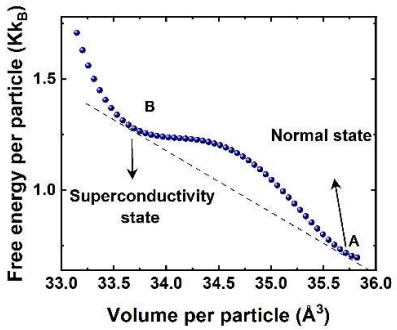
نتایج ما نشان می‌دهند که انرژی آزاد به‌طور قابل توجهی برای فواصل H-Se بیشتر از حدود ۳ آنگستروم افزایش می‌یابد. در نتیجه، ما فرآیند کمینه‌سازی انرژی آزاد را به فواصل کمتر از ۳ آنگستروم محدود می‌کنیم. دماهای بحرانی الکترون‌های سیّال به‌ازای ۹۹۰۰ حالت متفاوت $n_1 = ۲،۳،...$ و $n_2 = ۱،۲،...$ محاسبه شده‌اند. برای هر توزیع از مولکول‌های SeH_2، خوشه‌های انرژی تا عبارت E_3 محاسبه می‌شوند زیرا خوشه‌های مراتب بالاتر سهمشان ناچیز است. در این مطالعه، تمام مقادیر خوشه‌های انرژی به‌صورت انرژی بر ذره ارائه شده‌اند. آنتروپی الکترون‌های سیّال با استفاده از معادلهٔ۱۹ محاسبه شده و انرژی آزاد نسبت به L ، λ، A و m^* ، در تمام دماها و چگالی‌ها، کمینه می‌شود. در ادبیات فیزیک ماده چگال، این روند به‌عنوان پایداری ساختاری[1] شناخته می‌شود.

الف. گذار فاز مرتبه دومِ الکترون‌های سیّال

در سامانه‌های دارای گذار فاز، نمودار انرژی آزاد، ابزار مفیدی برای شناسایی نوع گذار و محاسبهٔ ویژگی‌های نقطه بحرانی است. برای نمایش این فرآیند، در شکل۵، انرژی آزاد الکترون‌های سیّال بر واحد الکترون نسبت به معکوس چگالی در دمای T= ۱٤٦K رسم شده است. وجود یک منطقه ناپایدار در این نمودار نشان دهنده یک گذار فاز مرتبهٔ اول برای الکترون‌های سیّال می‌باشد و همچنین وجود دو فرو رفتگی در این نمودار نشان دهندهٔ یک گذار فاز مرتبه اول است. پس از محاسبهٔ مغناطش مغناطیسی، خواهیم دید که سمت راست نقطهٔ A مبیّن حالت عادّی رسانایی، سمت چپ نقطهٔ B نشان دهندهٔ حالت ابررسانایی و منطقهٔ میانی یک حالت مخلوط را نشان می‌دهد. این مبیّن یکی از جنبه‌های بنیادین ابررسانایی به‌نام شکست

[1] Structural stability

خودبه‌خودی تقارن است. یعنی انتقال از حالت معمولی به‌حالت پایداری ساختاری است. بعداً توجیه خواهیم کرد که این گذار نشان‌دهندهٔ گذار فاز ابررسانایی می‌باشد. برای تعیین مرزهای این گذار، ما از روش دوبل-تانژانت اصلاح ماکسول[1] که با خطِ نقطه چین‌دار در شکل۵ نمایش داده شده است، استفاده می‌کنیم.



شکل۵. نمودار انرژی آزاد الکترون‌های سیّال بر واحد الکترون نسبت به معکوس چگالی در دمای T=۱٤٦ K .

جزئیات بیشتر درباره این روش را می‌توان در مرجع [۳۵] یافت. فرآیند انتقال از نقطه A آغاز می‌شود، جایی که تمام الکترون‌های سیّال در حالت معمولی هستند. با افزایش چگالی، آن‌ها به‌تدریج به‌سمت حالت پایداری ساختاری منتقل می‌شوند. در نهایت، درنقطه B ، تمام الکترون‌های سیّال وارد فاز جدید شده و فرآیند گذار پایان می‌یابد. برای یافتن نقطهٔ بحرانی، لازم است دما را افزایش دهیم. با افزایش دما، طول خطِ نقطه چین‌دار کاهش می‌یابد و نقاط A و B به‌هم نزدیک‌تر می‌شوند. در نهایت، در دمای خاص T_c= ۱٤۷٫۸۳ K این دو نقطه به یک نقطهٔ واحد همگرا می‌شوند. این نقطه واحد نمایانگر نقطهٔ بحرانی است که یک گذار فاز مرتبهٔ دوم برای الکترون‌های سیّال را نشان می‌دهد. در حالی که اکثر فیزیکدانان نظری برای محاسبه دمای گذار ابررسانایی از معادلهٔ آلن-داینز[2] استفاده می‌کنند، ما از روش ماکسول به‌عنوان رویکردی جایگزین بهره می‌بریم. معادلهٔ آلن-داینز از نظریهٔ الیشبرگ با تقریب نادیده گرفتن وابستگی ممان تابع الیشبرگ استخراج شده است، در حالی که روش ماکسول قادر است در تمام دماها بدون محدودیت اعمال شود. یک رویکرد برجسته که در این مقاله به‌کار رفته، در نظر گرفتن یک تابع موج واحد در قبل و بعد از نقطهٔ بحرانی است؛ بنابراین، گذار فاز و شکست خودبه‌خودی تقارنِ مشاهده شده در نمودار انرژی آزاد به‌طور ذاتی توسط رفتار جمعی الکترون‌های سیّال و پتانسیل‌های پیرامون آن‌ها رخ داده است. این درحالی است که در برخی از مقالات، در قبل و بعد از نقطهٔ بحرانی، دو تابع موج متفاوت در نظر می‌گیرند تا گذار فاز راحت‌تر مشاهده شود. با در نظر گرفتن یک تابع موج در نقطهٔ بحرانی، روش‌شناسی ما درک جامع‌تری از چگونگی گذار فاز الکترون‌های سیّال را فراهم می‌آورد.

انرژی‌های آزاد و نقاط بحرانی مربوط به الکترون‌های سیّال برای تمام ۹۹۰۰ توزیع مختلف مولکول‌های SeH_2 به‌طور جداگانه محاسبه شده‌اند. نتایج سه توزیع اول با بالاترین دماهای بحرانی در جدول۲ نشان داده شده‌اند. در این جدول، توزیع‌های ۱، ۲ و ۳ به‌ترتیب به‌مقادیر n_1=۹،۸،۷ و n_2=۵،٤،٤ مربوط می‌شوند. در میان ۹۹۰۰ مورد بررسی شده، مورد n_2=۵،n_1=۹ نشان‌دهندهٔ بالاترین دمای گذار T_c= ۱٤۷٫۸۳K است که تقریباً ۱٤K بیشتر از بالاترین دمای ابررسانایی (مواد کاپرت) در فشار اتمسفر می‌باشد. نتایج نقاط بحرانی برای سه توزیع n_1=۹،۸،۷ و n_2=۵،٤،٤ که به‌ترتیب به‌صورت توزیع ۱، توزیع ۲ و توزیع ۳ نوشته می‌شوند، در جدول شماره۲ ارائه شده است.

[1] Double-tangent Maxwell construction

[2] Allen-Dynes

جدول۲. دما، فشار و چگالی بحرانی برای توزیع ۱، توزیع ۲ و توزیع ۳.

پارامتر بحرانی	توزیع ۱	توزیع ۲	توزیع ۳
T_c (K)	۱٤۷٫۸۳	۱٤۷٫۰۲	۱٤۳٫۸٦
n_c (nm^{-3})	۷٫۲۵	۷٫۱۰	۷٫۰۳
P_c (MPa)	۱٤٫۰۹	۱٤٫۰٦	۱٤٫۰٤

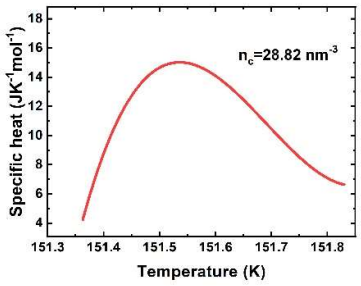
باید تأکید شود که نتایج فشارهای مگاپاسکالی که در جدول شمارهٔ۲ ذکر شده‌اند، فشارهای خارجی اعمال شده بر سطوح خارجی دو لایه گرافین نیستند بلکه این فشارها نمایانگر فشارهای داخلی بین الکترون‌های سیّال هستند که از ماهیت فرمیون بودن الکترون‌ها و برهم‌کنش‌های آن‌ها با محیط ناشی می‌شود. این در حالی است که، ابررساناهای ساخته شده دیگر با دمای بحرانی بالاتر از ۱۳۳٫۵ K نیاز به فشارهای خارجی بسیار بالاتر با مرتبهٔ بزرگی GPa دارند [۱]. عدم نیاز گذار فاز به‌دست آمده به فشار خارجی، یکی از بزرگترین دستاوردهای این تحقیق می‌باشد. این یافته‌ها به‌وضوح نشان می‌دهد که لایه‌های گرافین نقش مهمی در حذف نیاز به فشارهای شدید خارجی و افزایش دمای بحرانی ایفا می‌کنند.

بر اساس محاسبات ما، جرم مؤثر الکترون‌های سیّال در محدودهٔ ۰٫۳٦ ≤ $\frac{m^*}{m}$ ≤ ۰٫۱٦ می‌باشد، که در آن mجرم الکترون آزاد را نشان می‌دهد. این نتایج مربوط به توزیع n_1=۹، n_2=۵ در نزدیکی نقطهٔ بحرانی در محدودهٔ ۱٤۷٫۱ ≤T≤ ۱٤۸٫۷K است. کمتربودن جرم مؤثر الکترون‌های سیّال به نسبت جرم الکترون آزاد، نشان‌دهندهٔ برهم‌کنش جاذب بین الکترون‌های سیّال است. این برهم‌کنش یکی از عوامل مهم در تشکیل جفت‌های کوپر می‌باشد و اهمیت جفت‌شدگی‌های الکترون–فونون در وقوع گذار فاز مرتبه دوم را نشان می‌دهد. زیرا با به‌کارگیری جرم الکترون آزاد به‌جای جرم مؤثر، گذار فاز محو می‌شود. استفاده از جرم مؤثر، این امکان را به‌ما می‌دهد که برهم‌کنش‌های الکترون–فونون را در محاسبات انرژی آزاد وارد کنیم. سه عامل اصلی که به‌مشاهدهٔ رفتار بحرانی در الکترون‌های سیّال سامانه مورد بررسیِ ما کمک می‌کند، ساختار نواری گرافین شیاردار، تعداد زیاد اتم‌های هیدروژن در هیدرید SeH_2 و در نظر گرفتن وردشی m^* در محاسبات انرژی آزاد می‌باشند. مقادیر بهینه‌شدهٔ A ،L و λ برای توزیع ۱ با کمینه‌سازی انرژی آزاد عبارتند از: L=۸٫٦٤A°، A= ٦٫۱۸A° و λ=۲۷٫٦A°. تمام محاسباتِ توزیع۱ با در نظر گرفتن این مقادیر انجام شده است. دمای بحرانی وابستگی زیادی به‌این پارامترها دارد، به‌طوری که مشاهدهٔ گذار فاز برای توزیع۱ به‌بازه‌های ۷٫۳٦≤L ≤ ۸٫۹۳ $A°$، ۷٫۰۵ ≤ A ≤ ٤٫۹۱ $A°$ و ۲٦٫۰۱ ≤ λ ≤ ۲۹٫۱۸ $A°$ محدود می‌شود.

یکی از دلایل مشاهدهٔ این فاز جدیدِ ثباتِ ساختاری که برای الکترون‌های سیّال یافته‌ایم، وجود مواد غنی از هیدروژن و کربن در ساختار ما است که می‌توانند طیف‌های فونونی ضروری برای تشکیل جفت‌های کوپر را فراهم کنند [۳٦،۳۷]. شامل کردن پارامتر وردشی $\boldsymbol{\delta R'}$ در محاسبات ما دلیل مهم دیگری در مشاهده گذار فاز است. نادیده گرفتن این پارامتر در محاسبات انرژی آزاد منجر به ناپدید شدن گذار فاز مرتبهٔ دوم می‌شود. دامنه تغییرات این پارامترها برای توزیع ۱ عبارتند از ۱٫۷۹ pm ≤ $\boldsymbol{\delta R'_C}$ ≤ ۱٫٦۳، ۰٫۱۷ ≤ $\boldsymbol{\delta R'_{Se}}$ ≤ ۰٫۲۵ $A°$ و

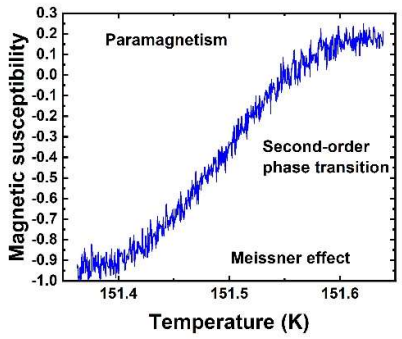
A° ۰٫۲۸ ≤ $\delta R'_H$ ≤۰٫۹۶ بر اساس این نتایج، همان‌طور که انتظار می‌رفت، مکان میانگین یون‌های کربن از پایداری بسیار زیادی برخوردار هستند، زیرا گرافین دارای یکی از پایدارترین ساختارها می‌باشد. در حالی‌که یون‌های H به‌دلیل جرم‌های سبک‌تر و واکنش پذیری شیمیایی بالا، تحرک زیادی از خود نشان می‌دهند. این نتایج نشان می‌دهند که وقتی مولکول‌های SeH_2 در مکان‌های خاصی بین لایه‌های گرافین قرار می‌گیرند، موقعیت‌های اولیه یون‌های C، Se، و H به‌طور قابل توجهی تغییر نمی‌کند. یکی از دستاوردهای این پژوهش، توانایی محاسبهٔ این حرکات با استفاده از کمینه‌سازی انرژی آزاد ساختار یونی می‌باشد. تحرک‌های محدود C ، Se و H نشان‌دهنده این است که این تحقیق نظری می‌تواند از طریق آزمایشگاهی نیز مورد بررسی قرار بگیرد. اگر حرکات یونها بیشتر بود، شرایط مرزی برای حل معادلات شرودینگر تغییر زیادی می‌کرد و محاسبات به‌طور قابل توجهی پیچیده‌تر می‌شد.

رفتار واگرایی توابع پاسخی، یک ویژگی بارزِ گذار فازهای مرتبهٔ دوم می‌باشد. برای نشان دادن این رفتار بحرانی، نمودار گرمای ویژه در حجم ثابت (C_v) برای الکترون‌های سیّال در شکل٦ برای توزیع۱ به‌ازای چگالی بحرانی برحسب دما نشان داده شده است. نزدیک به نقطه بحرانی، افت و خیزهای انرژی آزاد قابل چشم‌پوشی نیستند زیرا دامنهٔ این نوسانات، با نزدیک شدنِ سامانه به نقطه بحرانی، افزایش می‌یابند. بنابراین، برهم‌کنش‌های کوتاه‌بردِ فونون–فونون و e-e منجر به همبستگی‌های بلندبرد میان الکترون‌های سیّال می‌شوند. به‌همین دلیل C_v در نزدیکی نقطهٔ بحرانی، رفتاری شبیه بی‌مقیاس از خود نشان می‌دهد.



شکل٦. نمودار ظرفیت گرمایی ویژه در حجم ثابت برای الکترون‌های ظرفیت در چگالی بحرانی و در نزدیکی دمای بحرانی.

نمودار پذیرفتاری مغناطیسی (χ) الکترون‌های سیّال در شکل۷ به‌عنوان یک تابع پاسخی دیگر برای توزیع۱، در نزدیکی نقطهٔ بحرانی رسم شده است. این نتایج با در نظر گرفتن یک میدان مغناطیسی خارجی در جهت z و محاسبهٔ پاسخ مغناطیسی سامانه به‌دست می‌آید. پذیرفتاری مغناطیسی در T>Tc رفتاری معمولی (بسیار کوچک و مثبت) دارد، در حالی که در زیر دمای بحرانی، به‌طور ناگهانی به 1- ≃ کاهش می‌یابد؛ به‌عنوان مثال در T= ۱٤۷٫۸۵ K، χ= ۰٫۹۵۳ به‌دست می‌آید. این تغییر ناگهانی، یک گذار فاز از حالت طبیعی (پارامغناطیس) به‌حالت ثبات ساختاری (دیامغناطیس تقریباً کامل) را نشان می‌دهد. اگرچه اثر مایسنر با χ=−۱ شناخته می‌شود، اما نمودار شکل۷ نیز بیانگر اثر مایسنر می‌باشد. زیرا دقت تخمین‌هایی که در محاسبهٔ تابع موج کل سامانه استفاده می‌شود، بر مقادیر χ تأثیر دارد، خصوصاً در بخش بعدی نشان خواهیم داد که این گذار فاز نشان‌دهندهٔ یک گذار ابررسانایی است. مطلب دیگری که در نمودار شکل۷ دیده می‌شود، نوسانات مقادیر χ می‌باشد.

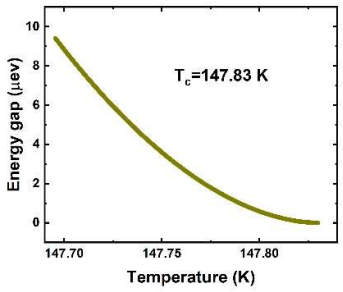


شکل۷. نمودار پذیرفتاری مغناطیسی الکترون‌های ظرفیت در مجاورت دمای بحرانی. گذار فاز مرتبه دوم و اثر مایسنر بخوبی دیده می‌شوند.

همان‌طور که قبلاً بیان کردیم، علّت این نوسانات، افت و خیزهای انرژی آزاد سامانه در محدودهٔ نقطهٔ بحرانی است. با فاصله گرفتن از نقطهٔ بحرانی، به‌سرعت دامنهٔ نوسانات به صفر میل می‌کند.

تعیین نوع ابررسانایی سامانه و ویژگی‌های آن

با توجه به $\chi\approx-1$، آنچه اکنون اهمیت دارد، شناسایی نوع فاز جدید مشاهده شده در الکترون‌های سیّال است. وجود گذار فاز مرتبه دوّم و دیامغناطیس تقریباً کامل برای الکترون‌های سیّال، احتمالاً نشان دهندهٔ فاز ابررسانایی در سامانه مورد بررسی ما می‌باشد. گذار فاز مرتبه دوّم، شرط لازم برای ابررسانایی است در حالی که دیامغناطیس کامل شرط کافی آن است. اگر χ دقیقاً ۱- بود، می‌توانستیم با اطمینان نتیجه بگیری که فاز جدید نشان‌دهندهٔ حالت ابررسانایی می‌باشد؛ بنابراین، برای اطمینان از وجود فاز ابررسانایی می‌بایست به‌دنبال گاف انرژی الکترون‌های سیّال در دماهای کمتر از دمای بحرانی بگردیم. در صورت یافتن گاف انرژی، گذار فازِ یافت شده حتما یک گذار ابررسانایی می‌باشد. گاف انرژیِ (Δ) ابررسانایی الکترون‌های سیّال با استفاده از انرژی کل سامانه (رابطهٔ۵) محاسبه شده و در شکل۸ به‌ازای$T\leq Tc$ برای توزیع۱ رسم شده است.



شکل۸. گاف انرژی ابررسانایی سامانه برحسب دما.

وابستگی دماییΔ کاملاً با رابطهٔ گاف انرژی ابررسانایی زیر سازگار است[۳٤]،

$$\Delta\sim\left(1-\frac{T}{T_c}\right)^{j}\left(1+b\frac{T}{T_c}\right). \qquad ۲۰$$

که در آن j یک نمای بحرانی و b یک ضریب است که هر دو با برازش نمودار به‌دست می‌آیند. این دو مقدار برای الکترون‌های سیّال در توزیع۱ به‌ترتیب ۱٫۱۲ و ۱٫٦٤ می‌باشند.

محاسبهٔ گاف انرژی نه تنها مؤیّد ابررسانایی بودن فاز جدیدِ مشاهده شده است، بلکه امکان تعیین نوع آن را نیز فراهم می‌آورد. تعیین نوع ابررسانا، متعارف[1] یا غیرمتعارف، جنبه‌ای اساسی در زمینه فیزیک مادّه چگال است. تشخیص تفاوت‌های میان این دو دسته از مواد بسیار مهم است زیرا امکان بررسی دقیق خواص منحصر به فرد آن‌ها و ارائه بینش‌هایی دربارهٔ مکانیزم‌های فیزیکی حاکم بر ابررسانایی را فراهم می‌آورد. محاسبهٔ نسبت گاف کاهش‌یافته، $\alpha=\frac{2\Delta_0}{K_BT_c}$، رویکرد مؤثری برای تعیین نوع ابررساناها است، که در آن Δ_0 گاف انرژی ابررسانا در دمای مطلق صفر

[1] Conventional

می‌باشد. برای ابررساناهای متعارف $\alpha\simeq$۳٫۵ است، در حالی که برای ابررساناهای غیرمتعارف معمولاً بیشتر از ۳٫۵ می‌باشد [۳۸]. برای الکترون‌های سیّال توزیع ۱، این نسبت برابر ٦٫٦٨ می‌باشد که تقریباً دو برابر مقداری است که توسط نظریه BCS در رژیم پیوند ضعیف[1] پیش‌بینی شده است. هنگامی که نسبت گاف کاهش‌یافته از آستانهٔ BCS بیشتر شود، به‌این معنی است که ابررسانا به‌عنوان یک سامانهٔ با پیوندهای قوی طبقه‌بندی می‌شود. بنابراین، استفاده از فرمالیزم الیشبرگ برای تحلیل رفتار این سامانه‌ها در رژیم پیوند-قوی بسیار مناسب است. در این راستا، مطالعاتی در زمینهٔ بررسی اثرات محیط بر همدوسی حالت‌های کوآنتومی انجام شده است [۳۹].

تا به امروز، تلاش‌های زیادی برای بهبود ساخت سیم‌ها و نوارهای ابررسانا اختصاص یافته است. در این راستا، تمرکز اصلی بر افزایش چگالی جریان بحرانی بوده است، چرا که J_c نقش مهمی در تعیین کارایی ابررساناها در فناوری ایفا می‌کند. اهمیت این کارایی به‌حدی است که تمایل به‌استفاده از ابررساناهای با T_c پایین‌تر برای دستیابی به‌مقادیر بالاتر J_c وجود دارد. J_c سیم‌های ابررسانای مسی، $Bi_2Sr_2CaCu_2O_8$ و $Bi_2Sr_2Ca_2Cu_3O_{10}$، با فناوری پودر در لوله، از مرتبهٔ $10^6 A/cm^2$ است، و برای اکسید مس باریم کمیاب با فناوری پوشش‌دار از مرتبهٔ $10^7 A/cm^2$ است [٤٠]. این مواد به‌طور گسترده به‌عنوان ابررساناهای دمای بالا شناخته می‌شوند که به‌خاطر چگالی جریان بحرانی بالایشان مشهورند. در سامانهٔ ما، چگالی جریان بحرانی الکترون‌های سیّال بر اساس Δ_0 محاسبه شده است که برای مورد $n_1=9$، $n_2=5$، J_c از مرتبهٔ 10^7 A/cm^2 می‌باشد. این چگالی جریان بحرانی بالا با $T_c=$ ۱٤۷٫۸۳ K، سامانه دو لایه گرافین حاوی مولکول‌های SeH_2 را به‌ترکیبی بسیار مناسب برای ساخت سیم‌های ابررسانا تبدیل می‌کند. در زمینهٔ ابررسانایی در ساختارهای گرافینی، اخیراً مطالعاتی انجام شده است که برای جزئیات بیشتر می‌توان به [٤١] مراجعه کرد.

خلاصه و نتیجه‌گیری

در این مطالعه، ما یک گذار فاز ابررسانایی در الکترون‌های ظرفیتِ سامانهٔ متشکل از دو لایهٔ گرافین که با مولکول‌های SeH_2 آلایش یافته‌اند را بررسی کرده‌ایم. بدین منظور، ۹۹۰۰ توزیع مختلف از مولکول‌های SeH_2 را جداگانه بررسی کرده و دمای بحرانی مربوط به آن‌ها را محاسبه کرده‌ایم. از میان توزیع‌های مورد نظر، بالاترین دمای بحرانی مربوط به‌توزیع ۱ برابر با $T_c=$۱٤۷٫۸۳ K است که حدود ۱٤K بیشتر از دمای بحرانی ابررسانای مسی $HgBa_2Ca_2Cu_3O_{8+\delta}$ می‌باشد. باید تأکید کرد که هیچ فشار خارجی بر روی سطح‌های بیرونی لایه‌های گرافین اعمال نشده است، در حالی‌که فشار بحرانی گزارش شده در این کار، به برهم‌کنش‌های الکترون‌های ظرفیت با محیط اطرافشان و تابع موج کلی فِرمیونی مربوط می‌شود. نتایج ما نشان می‌دهد، چنانچه وردش مکانی یا جرم مؤثر، در محاسبات ما نادیده گرفته شوند، گذار فاز ابررسانایی رؤیت نخواهد شد. این خود نشان دهندهٔ تأثیر برهم‌کنش‌های فونون-فونون و فونون-الکترون در تشکیل زوج کوپر می‌باشد.

ما همچنین گرمای ویژه و پذیرفتاری مغناطیسی الکترون‌های ظرفیت در نزدیکی نقطهٔ بحرانی را محاسبه کرده‌ایم. رفتار توانی گرمای ویژه نشان‌دهندهٔ گذار فاز مرتبهٔ دوم است. علاوه بر این، به‌محض کاهش دما به دماهای کمتر از دمای بحرانی، پذیرفتاری مغناطیسی، کاهش ناگهانی به‌سمت ۱-≃ را تجربه می‌کند. با توجه

[1] Weak-coupling regime

به رؤیت این دیامغناطیس تقریباً کامل و گذار فاز مرتبه دوم، انتظار می‌رود که این ثبات ساختاری الکترون‌های ظرفیت نشان‌دهندهٔ گذار ابررسانایی باشد. برای روشن شدن اینکه آیا این گذار، به ابررسانایی مربوط است یا خیر، ما گاف انرژی الکترون‌های ظرفیت را محاسبه کرده‌ایم. محاسبات گاف انرژیِ وابسته به دما برای الکترون‌های ظرفیت مشخّص می‌کند که فاز جدیدِ دیده شده، مبیّن یک گذار ابررسانایی می‌باشد و همچنین سامانه مورد بررسی ما یک ابررسانای نامتعارف است. دلایل اصلی مشاهدهٔ این گذار فاز، یکی وفور اتم‌های هیدروژن در مولکول‌های آلوده‌شدهٔ SeH_2 و دیگری وجود لایه‌های کربنی است که پیوندهای قوی الکترون–فونون را ایجاد می‌کنند و برای تشکیل جفت‌های کوپر ضروری هستند. وجود پیوندهای قویِ الکترون–فونون در سامانهٔ مورد بررسی ما منجر به چگالی جریان بحرانی بالا از مرتبهٔ $۱۰^۷$ A/cm² می‌شود که این موضوع، ترکیب مورد بررسی ما را برای ساخت سیم‌های ابررسانا با دمای بالا مناسب می‌سازد.

مرجع‌ها

[1] A.P. Drozdov, P.P. Kong, V.S. Minkov, S.P. Besedin, M.A. Kuzovnikov, S. Mozaffari, L. Balicas, F.F. Balakirev, D.E. Graf, V.B. Prakapenka, E. Greenberg, D.A. Knyazev, M. Tkacz, M.I. Eremets, Superconductivity at 250 K in lanthanum hydride under high pressures, Nature 569 (2019) 528–531. https://doi.org/10.1038/s41586-019-1201-8

[2] J.G. Bednorz, K.A. Müller, Possible high-T_c superconductivity in the Ba–La–Cu–O system, Z. Phys. B Condens. Matter 64 (1986) 189–193. https://doi.org/10.1007/BF01303701

[3] A. Schilling, M. Cantoni, J.D. Guo, H.R. Ott, Superconductivity above 130 K in the Hg–Ba–Ca–Cu–O system, Nature 363 (1993) 56–58. https://doi.org/10.1038/363056a0

[4] Y. Sun, J. Lv, Y. Xie, H. Liu, Y. Ma, Route to a superconducting phase above room temperature in electron-doped hydride compounds under high pressure, Phys. Rev. Lett. 123 (2019) 097001. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.123.097001

[5] T. Bi, N. Zarifi, E. Zurek, The search for superconductivity in high-pressure hydrides, Ref. Module Chem. Mol. Sci. Chem. Eng. (2019) 1–12. https://doi.org/10.1016/B978-0-12-409547-2.11435-0

[6] C.J. Pickard, I. Errea, M.I. Eremets, Superconducting hydrides under pressure, Annu. Rev. Condens. Matter Phys. 11 (2020) 57–76. https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-031218-013413

[7] R.P. Dias, C. Yoo, V.V. Struzhkin, M. Kim, T. Muramatsu, T. Matsuoka, Y. Ohishi, S. Sinogeikin, Superconductivity in highly disordered dense carbon disulfide, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 110 (2013) 11720–11725. https://doi.org/10.1073/pnas.1305129110

[8] V. Struzhkin, R.J. Hemley, H.K. Mao, Y.A. Timofeev, Superconductivity at 10–17 K in compressed sulfur, Nature 390 (1997) 382–384. https://doi.org/10.1038/37074

[9] D.Y. Kim, R.H. Scheicher, H.K. Mao, T.W. Kang, R. Ahuja, General trend for pressurized superconducting hydrogen-dense materials, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 107 (2010) 2793–2796. https://doi.org/10.1073/pnas.0914462107

[10] K. Tanaka, J.S. Tse, H. Liu, Electron-phonon coupling mechanisms for hydrogen-rich metals at high pressure, Phys. Rev. B 96 (2017) 100502. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.96.100502

[11] G.M. Eliashberg, Interactions between electrons and lattice vibrations in a superconductor, Sov. Phys. JETP 11 (1960) 696–702.

[12] F. Peng, Y. Sun, C.J. Pickard, R.J. Needs, Q. Wu, Y. Ma, Hydrogen clathrate structures in rare-earth hydrides at high pressures: possible route to room-temperature superconductivity, Phys. Rev. Lett. 119 (2017) 107001. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.119.107001

[13] Y. Li, J. Hao, H. Liu, J.S. Tse, Y. Wang, Y. Ma, Pressure-stabilized superconductive yttrium hydrides, Sci. Rep. 5 (2015) 9948. https://doi.org/10.1038/srep09948

[14] H. Wang, J.S. Tse, K. Tanaka, T. Iitaka, Y. Ma, Superconductive sodalite-like clathrate calcium hydride at high pressures, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 109 (2012) 6463–6466. https://doi.org/10.1073/pnas.1118168109

[15] H. Liu, I.I. Naumov, Z.M. Geballe, M. Somayazulu, J.S. Tse, R.J. Hemley, Dynamics and superconductivity in compressed lanthanum superhydride, Phys. Rev. B 98 (2018) 100102. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.98.100102

[16] L. Liu, C. Wang, S. Yi, K.W. Kim, J. Kim, J. Cho, Microscopic mechanism of room-temperature superconductivity in compressed LaH10, Phys. Rev. B 99 (2019) 140501. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.140501

[17] I.A. Kruglov, D.V. Semenok, H. Song, R. Szczęśniak, I.A. Wrona, R. Akashi, M.M. Davari Esfahani, D. Duan, T. Cui, A.G. Kvashnin, A.R. Oganov, Superconductivity of LaH_{10} and LaH_{16} polyhydrides, Phys. Rev. B 101 (2020) 024508. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.101.024508

[18] H. Liu, I.I. Naumov, R. Hoffmann, N.W. Ashcroft, R.J. Hemley, Potential high-Tc superconducting lanthanum and yttrium hydrides at high pressure, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 114 (2017) 6990–6995. https://doi.org/10.1073/pnas.1704505114

[19] I. Errea, M. Calandra, C.J. Pickard, J. Nelson, R.J. Needs, Y. Li, H. Liu, Y. Zhang, Y. Ma, F. Mauri, High-pressure hydrogen sulfide from first principles: a strongly anharmonic phonon-mediated superconductor, Phys. Rev. Lett. 114 (2015) 157004. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.114.157004

https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.10.232

[25] P. Tsuppayakorn-aek, A. Majumdar, R. Ahuja, T. Bovornratanaraks, W. Luo, Superconducting state of the van der Waals layered PdH_2 structure at high pressure, Int. J. Hydrogen Energy 48 (2023) 16769–16781. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.12.312

[26] P. Tsuppayakorn-aek, N. Phaisangittisakul, R. Ahuja, T. Bovornratanaraks, High-temperature superconductor of sodalite-like clathrate hafnium hexahydride, Sci. Rep. 11 (2021) 16403. https://doi.org/10.1038/s41598-021-95112-5

[27] M.A. Rastkhadiv, High-temperature structural stability of intercalated cerium superhydride into graphene sheets at low pressure, J. Supercond. Nov. Magn. 35 (2022) 2777–2787. https://doi.org/10.1007/s10948-022-06332-3

[28] M.A. Rastkhadiv, M. Pazoki, Superconductivity in two corrugated graphene sheets with intercalated CeH_9 molecules, J. Phys.: Condens. Matter 37 (2025) 175003. https://doi.org/10.1088/1361-648X/adc061

[29] J.W. Clark, Variational theory of nuclear matter, Prog. Part. Nucl. Phys. 2 (1979) 89–102. https://doi.org/10.1016/0146-6410(79)90004-8

[30] G.H. Bordbar, M.A. Rastkhadiv, Confined fluid ^{3}He: thermodynamic

[20] W. Sukmas, P. Tsuppayakorn-aek, U. Pinsook, T. Bovornratanaraks, Near-room-temperature superconductivity of Mg/Ca-substituted metal hexahydrides under pressure, J. Alloys Compd. 849 (2020) 156434. https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2020.156434

[21] P. Tsuppayakorn-aek, U. Pinsook, W. Luo, R. Ahuja, T. Bovornratanaraks, Superconductivity of superhydride CeH_{10} under high pressure, Mater. Res. Express 7 (2020) 086001. https://doi.org/10.1088/2053-1591/ababc2

[22] P. Tsuppayakorn-aek, P. Phansuke, P. Kaewtubtim, R. Ahuja, T. Bovornratanaraks, Enthalpy stabilization of superconductivity in an alloying S–P–H system: first-principles cluster expansion study under high pressure, Comput. Mater. Sci. 190 (2021) 110282. https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2021.110282

[23] P. Tsuppayakorn-aek, R. Ahuja, T. Bovornratanaraks, W. Luo, Superconducting gap of pressure-stabilized $(A_{10.5}Zr_{0.5})H_3$ from ab initio anisotropic Migdal–Eliashberg theory, ACS Omega 7 (2022) 28190–28206. https://doi.org/10.1021/acsomega.2c02447

[24] W. Sukmas, P. Tsuppayakorn-aek, P. Pluengphon, S.J. Clark, R. Ahuja, T. Bovornratanaraks, W. Luo, First-principles calculations on superconductivity and hydrogen-diffusion kinetics in Mg–B–H phases under pressure, Int. J. Hydrogen Energy 48 (2023) 4006–4017.

properties and critical behavior in quasi-one dimension, Rom. J. Phys. 64 (2019) 601–617.

[31] M.A. Rastkhadiv, Criticality in electronic structure of two graphene layers containing praseodymium superhydride-doped molecules, Eur. Phys. J. B 96 (2023) 79. https://doi.org/10.1140/epjb/s10051-023-00545-8

[32] G.H. Bordbar, M.A. Rastkhadiv, Critical behavior of two-dimensional fluid He on a sinusoidal graphene, J. Phys. Soc. Jpn. 92 (2023) 074604. https://doi.org/10.7566/JPSJ.92.074604

[33] G.H. Bordbar, M.A. Rastkhadiv, Liquid phase of ^{3}He on a corrugated graphene, Rom. J. Phys. 64 (2019) 605–616.

[34] A. Fasolino, J.H. Los, M.I. Katsnelson, Intrinsic ripples in graphene, Nat. Mater. 6 (2007) 858–861. https://doi.org/10.1038/nmat2011

[35] D. Chandler, Introduction to Modern Statistical Mechanics, Oxford University Press, New York, 1987.

[36] N.W. Ashcroft, Hydrogen dominant metallic alloys: high-temperature superconductors?, Phys. Rev. Lett. 92 (2004) 187002. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.92.187002

[37] M.L. Cohen, Superconductivity in modified semiconductors and the path to higher transition temperatures, Supercond. Sci. Technol. 28 (2015) 043001. https://doi.org/10.1088/0953-2048/28/4/043001

[38] K. Fossheim, A. Sudbø, Superconductivity: Physics and Applications, Wiley, Chichester, 2004.

[39] M. Asoudeh, N. Biari, Effect of environmental noise on the coherence of quantum states, J. Res. Many-Body Syst. 12 (2022) 1–9. https://doi.org/10.22055/jrmbs.2022.17460

[40] C. Yao, Y. Ma, Superconducting materials: challenges and opportunities for large-scale applications, iScience 24 (2021) 102541. https://doi.org/10.1016/j.isci.2021.102541

[41] R. Gholami, Superconducting copper pairs in AA bilayer graphene, J. Res. Many-Body Syst. 14 (2025) 29–38. https://doi.org/10.22055/jrmbs.2025.20196