



ВНИИНМ
РОСАТОМ



МИСИС
УНИВЕРСИТЕТ

Возможности DFT для предсказания свойств MgB_2 с легирующими добавками

К.К. Дихтиевская

Научный руководитель – Карцев А.И.

e-mail: m2208550@edu.misis.ru

Сверхпроводящее соединение MgB_2

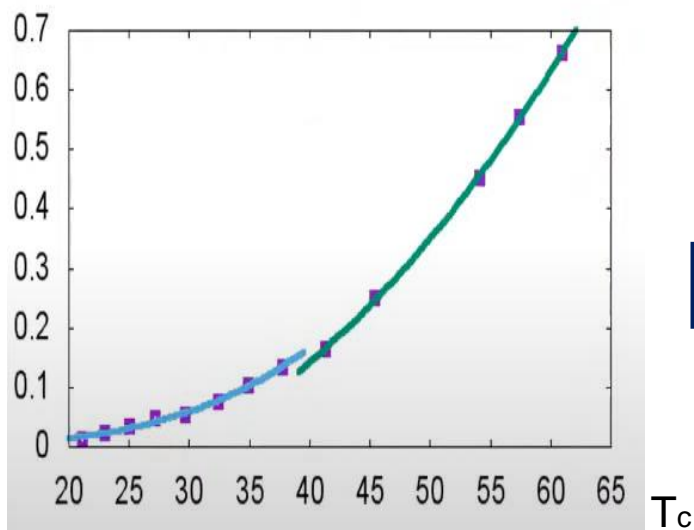
Low Temperature Heat Capacities of Magnesium Diboride (MgB_2) and Magnesium Tetraboride (MgB_4)

BY ROBINSON M. SWIFT AND DAVID WHITE¹

RECEIVED FEBRUARY 14, 1957

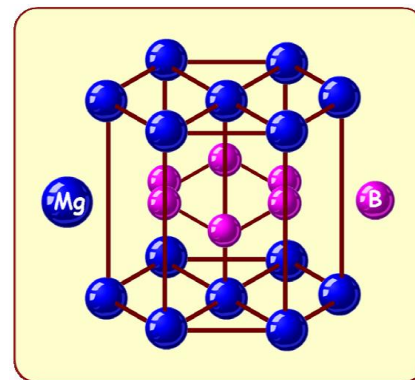
The heat capacities of magnesium diboride (MgB_2) and magnesium tetraboride (MgB_4) were measured in the temperature range 18 to 305°K. The values of heat capacity, entropy, enthalpy and free energy function have been tabulated at integral values of temperature. The entropy at 298.16°K. of MgB_2 is 8.60 ± 0.04 cal. deg.⁻¹ mole⁻¹, that of MgB_4 is 12.41 ± 0.06 cal. deg.⁻¹ mole⁻¹. The heat capacity of these compounds at the lowest temperatures measured do not exhibit a T^3 relationship characteristic of some substances having a layer structure.

cal. deg.⁻¹

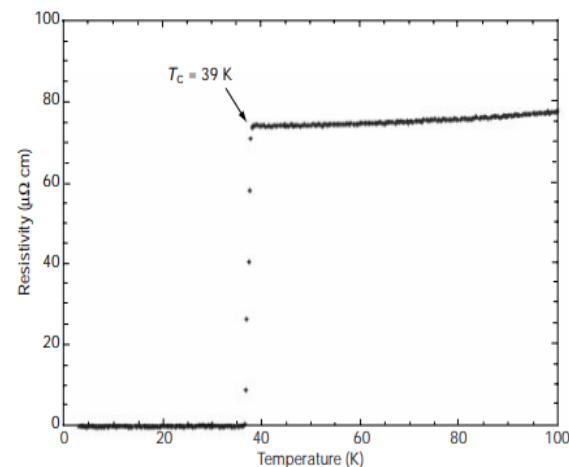


Температурная зависимость теплоёмкости MgB_2

Akimitsu¹



Кристаллическая структура MgB_2



Температурная зависимость удельного сопротивления MgB_2 в условиях нулевого магнитного поля



Области применения сверхпроводников на основе MgB_2



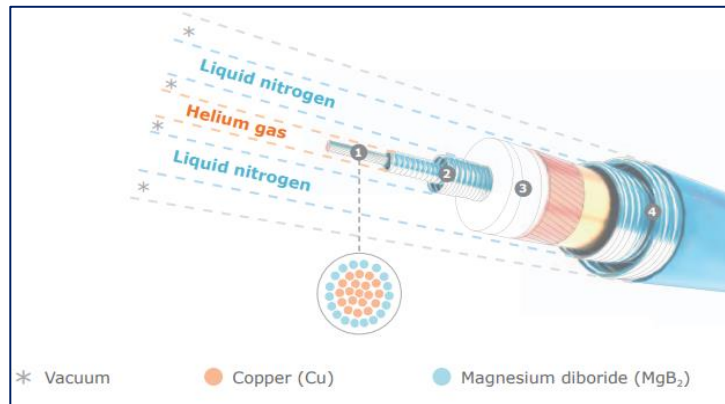
Основные параметры магнита	
Рабочее магнитное поле	0.5 Тл
Номинальный ток	90 А
Общая длина проводника	18 км
Габаритные размеры	2x2x2 м
Масса	25000 кг

Аппарат МРТ открытого типа (MROpen)



Основные параметры линии	
Номинальный ток	110 А
Общая длина проводника	20 м
Поток водорода	220 г/с
Электрическая мощность	50 МВт

Гибридная энергетическая магистраль, состоящая из MgB_2 кабелей и рабочей температурой 20К (ВНИИКП)

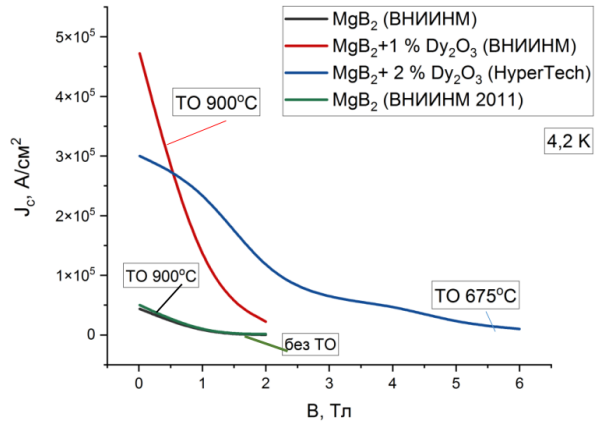


Сверхпроводящий кабель на основе MgB_2 :

1 – MgB_2 провод в гелии; 2 – внутренняя криогенная оболочка; 3- высоковольтная изоляция в жидком азоте; 4 – внешняя криогенная оболочка проект BestPATH

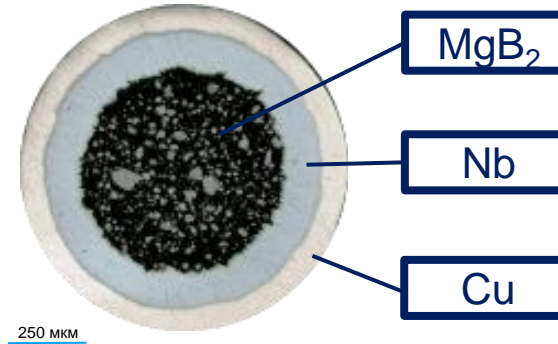
Разработка технических MgB_2 сверхпроводников для применения в энергетике, в том числе для водородных гибридных магистралей

Повышение плотности тока может быть достигнуто путём химического допирования порошковой смеси для PIT

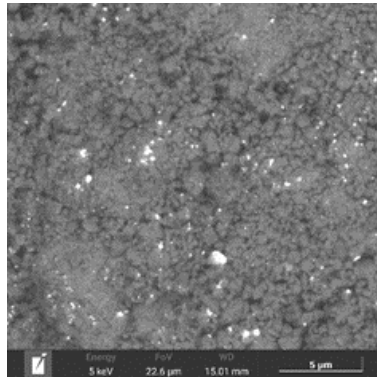


Измерения проводились 4-х контактным методом в гелии.

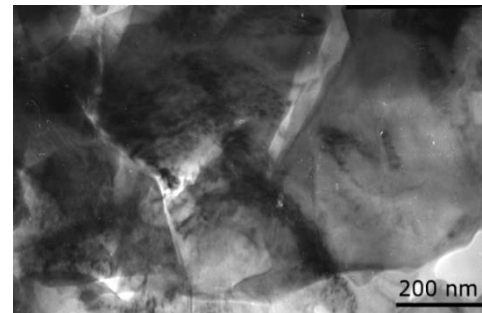
- Наилуший результат показал проводник, легированный оксидом диспрозия, термообработанный при температуре 900 °С.
- Критическая плотность тока в собственном поле составила ~ **4700 А/мм²**.
- T_c составила 34 К.



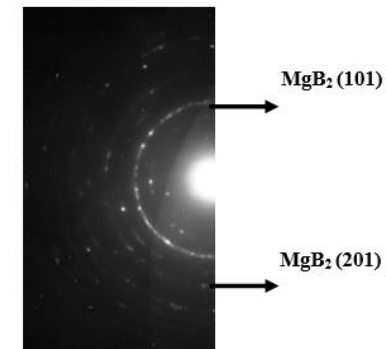
Сечение одноволоконного сверхпроводника на основе легированного MgB_2 , полученного методом PIT



Микроструктура порошковой сердцевины полученных сверхпроводников с добавлением Dy_2O_3



Светлопольное изображение порошковой сердцевины сверхпроводника MgB_2 производства АО «ВНИИНМ»

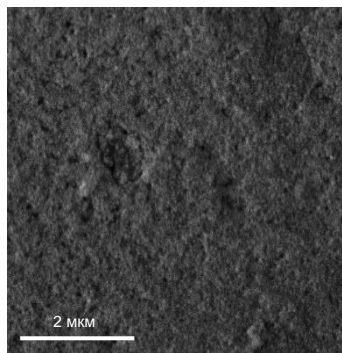


Электроннограмма сверхпроводника MgB_2 производства АО «ВНИИНМ»

Текущий ход дел по разработке технических сверхпроводников на основе MgB_2



Одноволоконный сверхпроводник на основе легированного MgB_2

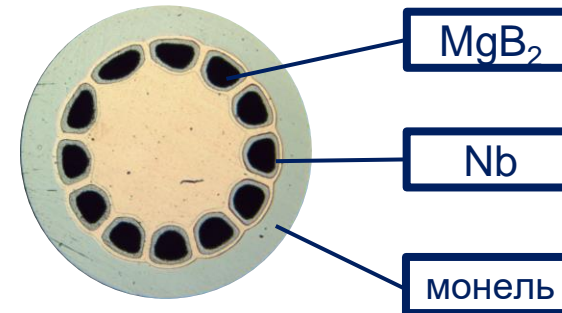


По результатам анализа электронной микроскопии можно сделать выводы:

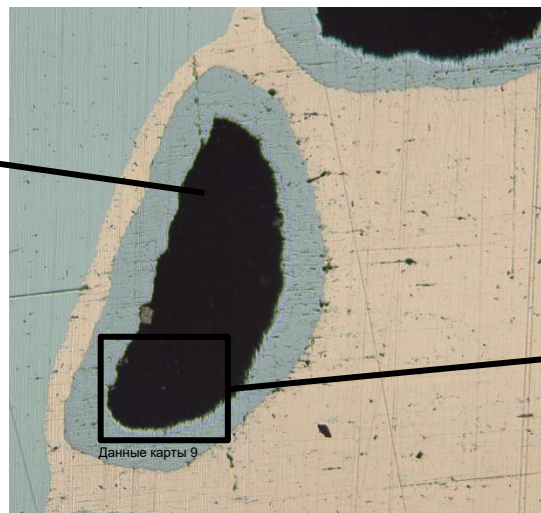
1. Структура сверхпроводящей керамики плотная;
2. Частицы легирующего элемента распределены равномерно.



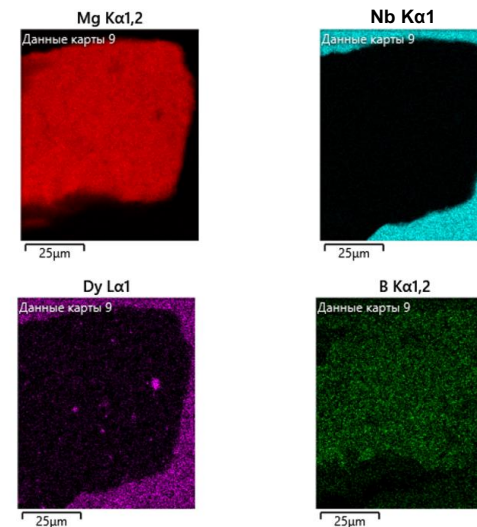
Сборка многоволоконной заготовки



12ти жильный сверхпроводник на основе легированного MgB_2



Сегмент 12-ти жильного сверхпроводника



Карта распределения содержания элементов в субэлементе

Применение расчетного кода Quantum espresso для численных исследований



IN

Model:

unit cell
lattice vectors
basis

Physical approx:

xc-approximation
GGA, LDA, ...

Numerical approx:

energy cut-off
k-points grid
SCF procedure

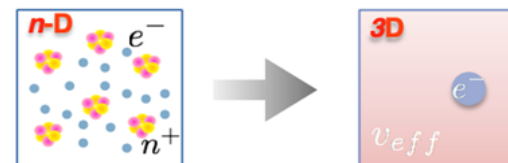
RUN



OUT

Physical quantities:

charge density
total energy
KS wavefunctions
KS energies



Solve Kohn-Sham equations

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + V_{ion}(r) + V_H[n(r)] + V_{XC}[n(r)] \right] \psi_i(r) = \epsilon_i \psi_i(r)$$

External nuclear potential

Hartree potential

Exchange-correlation potential



Входные данные



&CONTROL

```

calculation='scf',
restart_mode='from_scratch',
prefix='si',
pseudo_dir='../pseudo/',
outdir='../temp',
  
```

&SYSTEM

```

ibrav=2,
celldm(1)=10.2625,
nat=2,
ntyp=1,
ecutwfc=60.0,
ecutrho=720.0,
  
```

&ELECTRONS

```

mixing_beta=0.7,
conv_thr=1d-8,
  
```

ATOMIC_SPECIES

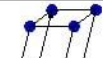
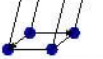
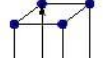
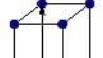
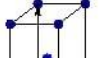
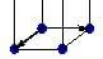
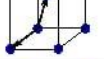
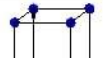
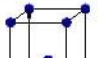
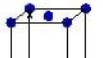

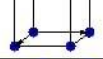
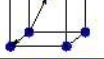
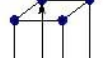
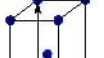
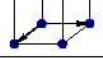
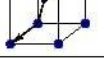
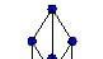

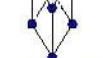
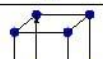

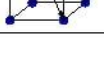






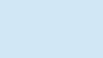
```
Si 28.0855 Si.pbe-n-kjpaw-psl.1.0.0.UPF
```

ATOMIC_POSITIONS {alat}

```
Si 0.00 0.00 0.00
Si 0.25 0.25 0.25
```

K_POINTS {automatic}

```
4 4 4 0 0 0
```

ibrav	Lattice type	Bravais lattice	Parameters	Simple (P)	Volume centered (I)	Base centered (C)	Face centered (F)
1	Simple cubic	Triclinic	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} \neq \alpha_{23} \neq \alpha_{31}$				
2	Face centered cubic						
3,-3	Body centered cubic						
4	Hexagonal	Monoclinic	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$ $\alpha_{12} \neq 90^\circ$				
5	Trigonal with c as 3-fold axis						
-5	Trigonal with <111> as 3-fold axis	Orthorhombic	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$				
6	Simple tetragonal						
7	Centered tetragonal						
8	Simple orthorhombic	Tetragonal	$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$				
9,-9,91	One-face centered orthorhombic						
10	Face centered orthorhombic	Trigonal	$a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} < 120^\circ$				
11	Body centered orthorhombic						
12	Simple monoclinic, c unique						
-12	Simple monoclinic, b unique	Cubic	$a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$				
13	One base centered monoclinic, c unique						
-13	One base centered monoclinic, b unique	Hexagonal	$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} = 120^\circ$ $\alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$				
14	Triclinic						

celldm(1) = cell parameters in [bohr], or A = in angstrom

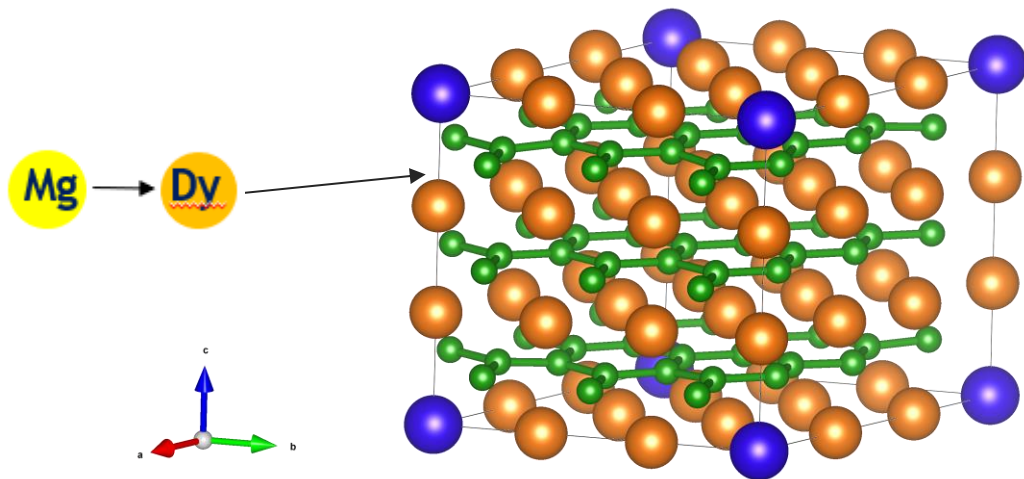
nat = number of atoms

ntyp = sort of atoms

ecutwfc = energy cut off on wave functions

ecutrho = energy cut off on charge density (4-6 * ecutwfc)

Механизм легирования



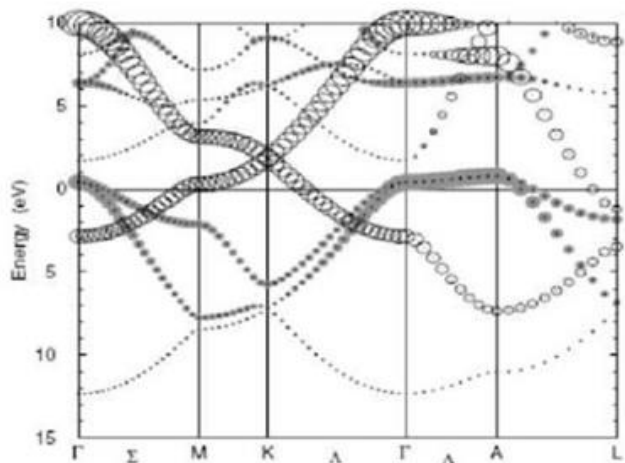
Для определения типа легирования рассчитаны энергии образования для варианта замещения (substitution) и внедрения (layer)

$$E_{f(lay)} = E_{tot}(MgB_2Dy) - NE_{tot} \frac{(Mg)}{n} - NE_{tot} \frac{(B)}{n} - NE_{tot} \frac{(Dy)}{n}$$

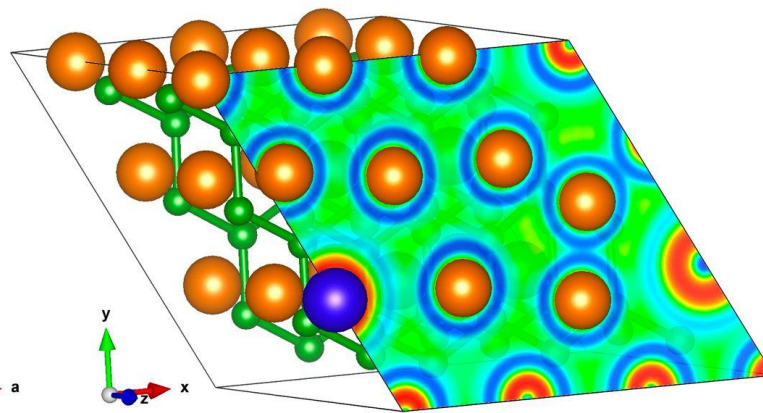
$$E_{f(subst)} = E_{tot}(MgB_2Dy) - NE_{tot} \frac{(Mg)}{n} - NE_{tot} \frac{(B)}{n} - NE_{tot} \frac{(Dy)}{n}$$

lay $E_{formation}$	-0.031 eV/atom
subst $E_{formation}$	0.13 eV/atom

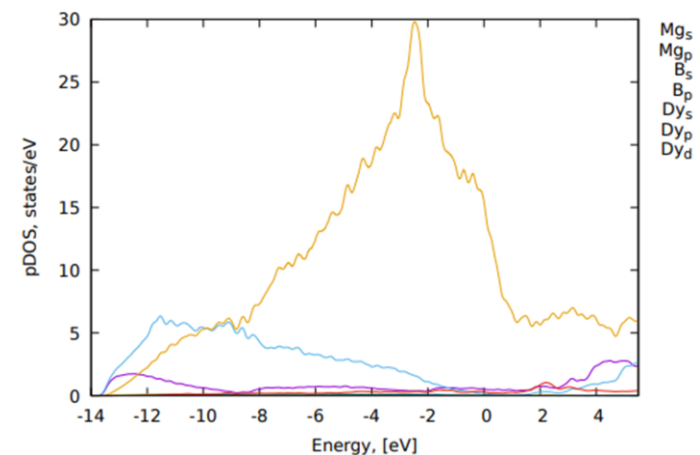
Механизм легирования



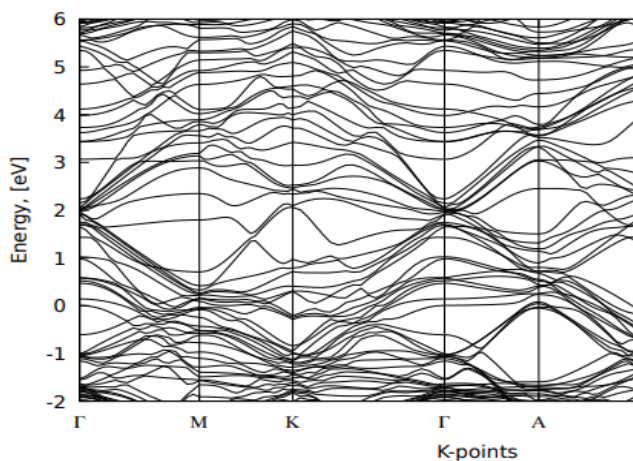
Зонные структуры MgB_2



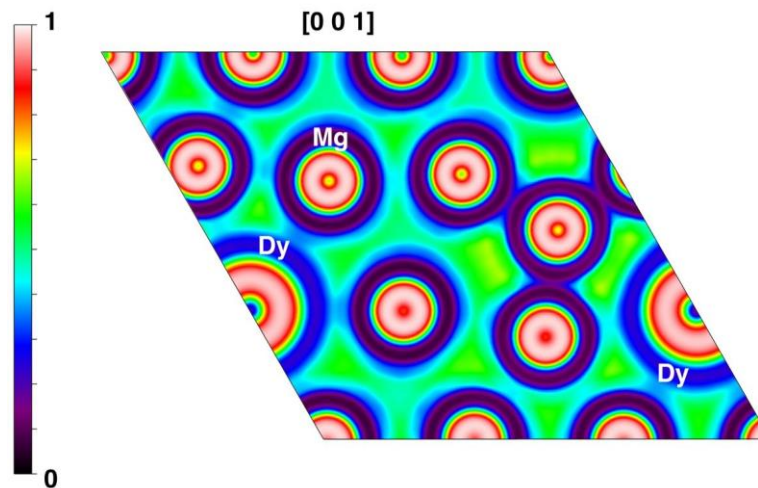
Зарядовая плотность MgB_2+Dy



DOS MgB_2+Dy



Зонные структуры MgB_2
с допантом 1 % Dy



ELF MgB_2+Dy

Применение расчетного кода Quantum espresso для численных исследований



В теории функционала плотности Кона — Шэма полная энергия системы выражается как функционал плотности заряда:

$$E[\rho] = T_s[\rho] + \int d\mathbf{r} v_{\text{ext}}(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}) + E_H[\rho] + E_{\text{xc}}[\rho],$$

где:

T_s — кинетическая энергия Кона — Шэма, которая выражается через орбитали Кона — Шэма как:

$$T_s[\rho] = \sum_{i=1}^N \int d\mathbf{r} \varphi_i^*(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \varphi_i(\mathbf{r}),$$

v_{ext} — внешний потенциал, действующий на взаимодействующую систему (как минимум, для молекулярной системы взаимодействие электрон-ядро),

E_H — энергия Хартри (или кулоновская):

$$E_H[\rho] = \frac{e^2}{2} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|},$$

E_{xc} — обменно-корреляционная энергия.

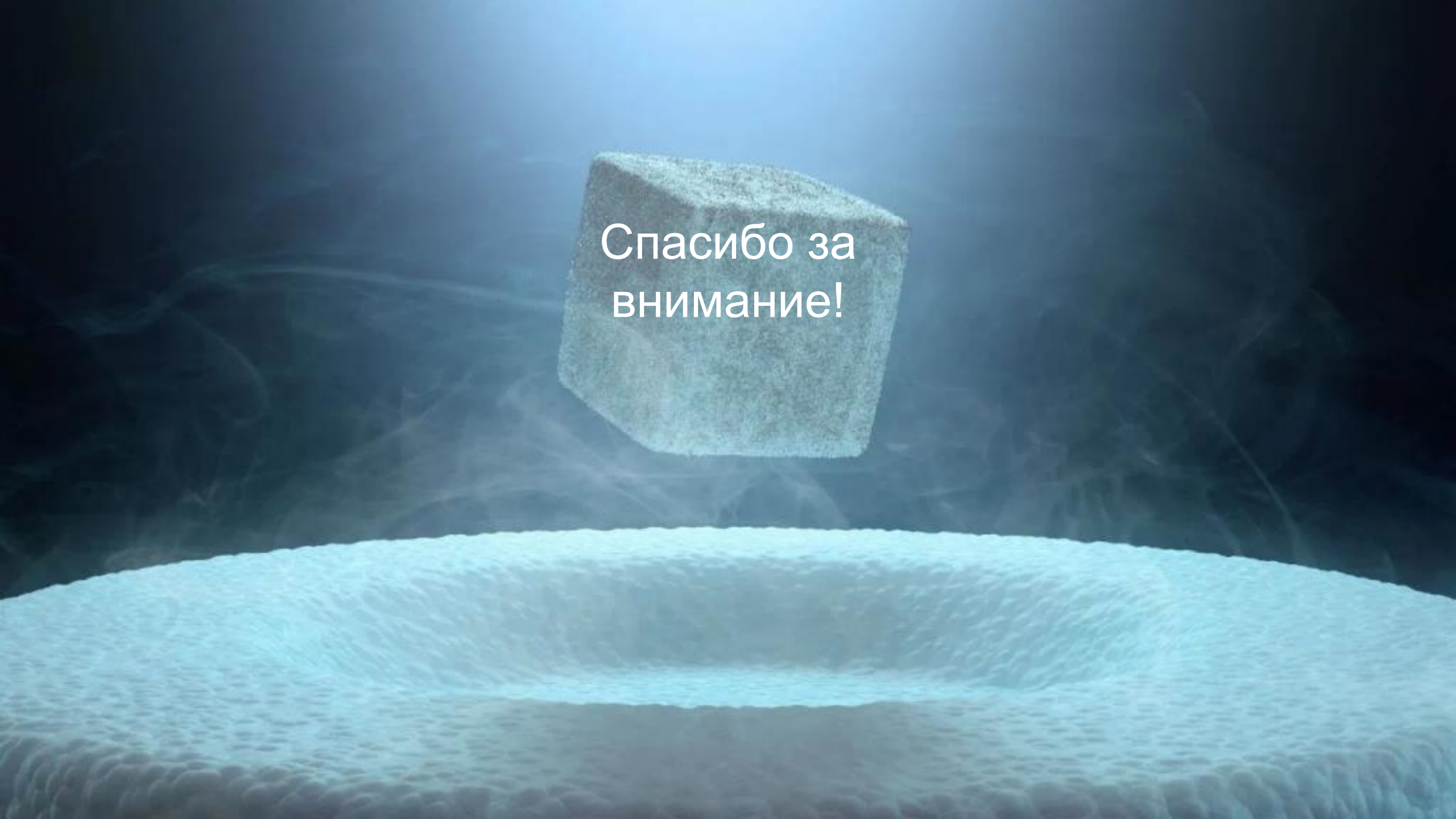
McMillan equation

$$T_c = \frac{\langle \omega \rangle}{1.20} \exp \left\{ -1.04 (1 + \lambda) / (\lambda - \mu^* - 0.62 \lambda \mu^*) \right\}$$

$$\lambda = 2 \int_0^{\infty} \frac{\alpha^2(\omega) F(\omega) d\omega}{\omega}$$

- 1) **Дихтиевская К.К.**, Коновалов П.В., Цаплева А.С. АО «Высокотехнологический научно-исследовательский институт неорганических материалов имени академика А.А. Бочвара» Способ легирования сверхпроводящего соединения на основе диборида магния (MgB_2). Ноу-хау № 05-645-2023 от 2 декабря 2023 г.
- 2) ВОЗМОЖНОСТИ ПРИМЕНЕНИЯ СВЕРХПРОВОДНИКОВ НА ОСНОВЕ MgB_2 ДЛЯ УСКОРИТЕЛЕЙ ЧАСТИЦ **Дихтиевская К.**, Казанцев Ф.П., Цаплева А., Карцев А., Алексеев М., Абдюханов И.М. В книге: Синхротронное излучение и лазеры на свободных электронах (СИ и ЛСЭ - 2024). Книга тезисов. Новосибирск, 2024. С. 84-85.
- 3) ИССЛЕДОВАНИЕ МИКРОСТРУКТУРЫ СОЕДИНЕНИЯ MgB_2 , ЛЕГИРОВАННОГО Dy_2O_3 , И СВОЙСТВ СВЕРХПРОВОДНИКА НА ЕГО ОСНОВЕ **Дихтиевская К.К.** В книге: Гагаринские чтения 2024. Сборник тезисов докладов 50-ой Международной молодежной научной конференции. Москва, 2024. С. 327-328.
- 4) Structural defects of superconducting core of the single fiber $MgB_2/Nb,Cu$ Composite E. Kuznetsova, T. Krinitsina, Yu.Blinova, M. Degtyarev, P.Kononov, **K.Dikhtievskaya**, I.Abdukhanov, and A. Tsapleva ISSN 0031-918, Physics of Metals and Metallography, 2024, Vol. 125, No. 8, pp. 878-886



A 3D rendered scene featuring a glowing blue cube floating in the center. The cube has a textured, slightly grainy surface and is illuminated from above, creating a bright glow. Below the cube is a large, textured blue ground surface that appears to be made of many small, overlapping rectangular blocks, similar to a brick or stone pattern. The background is dark and atmospheric, with some faint, wispy light trails or smoke-like effects. The overall color palette is dominated by various shades of blue, from deep navy to bright cyan.

Спасибо за
внимание!