

## Nota de prensa

---

07/04/2016

# Los efectos cuánticos influyen en el superconductor más fétido del mundo

**Una investigación de la UPV/EHU y el DIPC ha concluido que los efectos cuánticos explican por qué el sulfuro de hidrógeno es superconductor a temperaturas récord**

Según los resultados de una investigación colaborativa internacional liderada por la UPV/EHU y el DIPC, la Universidad de la Sorbona de París y la Universidad de La Sapienza de Roma, y publicados hoy en la prestigiosa revista *Nature*, el comportamiento cuántico del hidrógeno afecta a las propiedades estructurales del sulfuro de hidrógeno —un compuesto, que expuesto a presiones extremas, tiene propiedades superconductoras a la más alta temperatura detectada hasta el momento—. Se trata de un gran avance en la búsqueda de superconductores de temperatura ambiente; muy ansiados pero aún no descubiertos.

Los resultados teóricos de una investigación internacional publicada por *Nature*, cuyo primer autor es el investigador de la UPV/EHU y del Donostia International Physics Center (DIPC) Ion Errea, sugieren que la naturaleza cuántica del hidrógeno (es decir, la posibilidad de las partículas de comportarse como partícula o como onda) influye considerablemente en las propiedades estructurales de compuestos ricos en hidrógeno (potenciales sustancias superconductoras de temperatura ambiente). Ese es, precisamente, el caso del superconductor sulfuro de hidrógeno: un compuesto hediondo —huele a huevo podrido—, que cuando se expone a presiones un millón de veces superiores a la presión atmosférica, se comporta como superconductor a la mayor temperatura jamás identificada. Ese nuevo avance en la comprensión de la física de la superconductividad de alta temperatura podría ayudar a avanzar en la búsqueda de superconductores de temperatura ambiente, que se podrían utilizar, por ejemplo, en trenes de levitación o en superordenadores de nueva generación.

Los superconductores son materiales que conducen corriente eléctrica sin resistencia eléctrica alguna. Los convencionales o de baja temperatura se comportan como tal cuando la sustancia es enfriada hasta temperaturas cercanas al cero absoluto (-273 C o 0 Kelvin). Sin embargo, el pasado año, investigadores alemanes identificaron las propiedades superconductoras de alta temperatura del sulfuro de hidrógeno, que llega a ser superconductor a la más alta temperatura jamás descubierta: -70 C o 203 K.

## **Cambia la estructura de los enlaces entre átomos**

En la física clásica, o newtoniana, es posible medir la posición y el momento de un objeto en movimiento, para determinar adónde va y cuánto tiempo necesitará para llegar a su destino. Estas dos propiedades son inherentes. Sin embargo, en el extraño mundo de la física cuántica, según el principio de incertidumbre de Heisenberg, es imposible que determinados pares de magnitudes físicas observables y complementarias de una partícula sean conocidas al mismo tiempo con precisión.

El hidrógeno es el elemento más ligero de la tabla periódica, por lo que se trata de un átomo muy ligado al comportamiento cuántico. Su naturaleza cuántica influye en las propiedades tanto estructurales como físicas de diversos compuestos de hidrógeno. Sirva citar, como ejemplo, el hielo a alta presión, donde las fluctuaciones cuánticas del protón provocan un cambio en la manera en la que las moléculas se unen unas a otras, incluso simetrizando los enlaces químicos entre los átomos. Los investigadores de este estudio creen que en el superconductor sulfuro de hidrógeno ocurre una simetrización cuántica de los enlaces de hidrógeno similar a la citada.

Los investigadores han formulado los cálculos considerando a los átomos de hidrógeno como partículas cuánticas con comportamiento de onda, y han concluido que estos forman enlaces simétricos a una presión similar a la utilizada experimentalmente por los investigadores alemanes. De esta manera, han conseguido explicar el fenómeno con mayor precisión, ya que en estudios previos los cálculos fueron realizados tratando a los átomos de hidrógeno como partículas clásicas, no pudiendo así entender el comportamiento observado experimentalmente. Todo ello pone de manifiesto que detrás de la superconductividad de alta temperatura en el sulfuro de hidrógeno es clave el comportamiento cuántico

Los investigadores se congratulan de que los buenos resultados obtenidos en esta investigación demuestran que las predicciones cuantitativas y la computación pueden ser utilizados con plena confianza, para acelerar el descubrimiento de superconductores de alta temperatura. Según los cálculos realizados, la simetrización cuántica de los enlaces de hidrógeno tiene un gran impacto en las propiedades vibracionales y superconductoras del sulfuro de hidrógeno. "Para poder reproducir teóricamente la dependencia que tiene la temperatura a la que ocurre la superconductividad, es fundamental tener en cuenta la simetrización cuántica", explica Ion Errea, investigador principal del estudio.

Este estudio teórico muestra que en los compuestos ricos en hidrógeno, el movimiento cuántico del hidrógeno puede influir mucho en las propiedades estructurales (e incluso modificar el enlace químico), así como en la interacción electrón-fonón que conlleva a la transición superconductoras.

En opinión de los investigadores, la teoría y la computación han tenido un papel fundamental en la búsqueda de superconductores hidruros expuestos a compresión extrema. Y remarcan, además, que en

el futuro se intentará incrementar la temperatura hasta obtener superconducción a temperatura ambiente, pero reduciendo radicalmente las presiones requeridas.

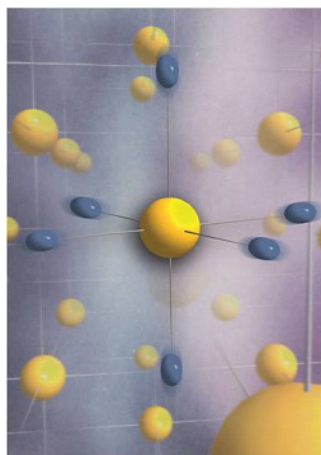
### Información complementaria

La investigación internacional se ha llevado a cabo con la colaboración de investigadores de la UPV/EHU y el Donostia International Physics Center (DIPC), de UPMC Université Paris 06 (Sorbona), de la Universidad de Cambridge (Cavendish Laboratory), de Jiangsu Normal University, de Carnegie Institution de Washington, de la Universidad de Jilin, y de la Universidad de Roma 'La Sapienza'.

El investigador principal del estudio, Ion Errea (Donostia, 1984), es doctor en Física, y actualmente es investigador del DIPC y profesor del Departamento de Física Aplicada de la UPV/EHU.

### Referencia bibliográfica

I. Errea, M. Calandra, C. J. Pickard, J. R. Nelson, R. J. Needs, Y. Li, H. Liu, Y. Zhang, Y. Ma, y F. Mauri. "Quantum hydrogen-bond symmetrization in the superconducting hydrogen sulfide system". *Nature* (2016). DOI: [10.1038/nature17175](https://doi.org/10.1038/nature17175).



**Pie de imagen:** Estructura con enlaces de hidrógeno simétricos inducidos por el comportamiento cuántico de los protones, representados mediante esferoides azules fluctuantes.