

Od momentu odkrycia w 1911 roku przez około 60 lat wszystkie znane materiały nadprzewodzące mogłyby być opisane za pomocą teorii Bardeen-Coopera-Schrieffera (BCS), zgodnie z którą elektrony przewodnictwa metalu tworzą pary (tzw. pary Coopera) w wyniku przyciągania związanego z oddziaływaniem elektronów przewodnictwa z fononami. Pierwszymi odkrytymi nadprzewodnikami, których właściwości nie można było wytłumaczyć teorią BCS były $CeCu_2Si_2$, UBe_{13} i UPt_3 , czyli kofermionowe niekonwencjonalne nadprzewodniki, charakteryzujące się wysoką wartością parametru Sommerfelda i silnie paramagnetyczną podatnością magnetyczną. Od tego momentu kofermionowe materiały nadprzewodzące są przedmiotem badań naukowców na całym świecie.

Szczególnie ciekawą rodziną materiałów międzymetalicznych zawierających kofermionowe nadprzewodniki jest rodzina $A_nM_mIn_{3n+2m}$ (gdzie M to metal z grupy metali przejściowych: Co, Rh, Ir, Pd lub Pt, a A to Ce, U, Np lub Pu). Jednym z istotnych materiałów należących do tej rodziny jest kofermionowy nadprzewodnik $CePt_2In_7$, którego neptunowy odpowiednik będzie badany w ramach tego projektu. Powodem wzrostu zainteresowania związkami z tej rodziny jest możliwość badania w tych materiałach interakcji pomiędzy magnetyzmem i nadprzewodnictwem. Uważa się, że nadprzewodnictwo w tych materiałach powstaje w wyniku magnetycznego oddziaływania pomiędzy spinami. Tematyką projektu jest zrozumienie podstawowych zasad opisujących związek magnetyczny $NpPt_2In_7$. Celem projektu będzie przeprowadzenie pełnej teoretycznej analizy pod względem struktury elektronicznej i własności magnetycznych nowego międzymetalicznego związku antyferromagnetycznego $NpPt_2In_7$.

Projekt zaplanowany jest na dwa lata. W tym czasie planujemy przeprowadzić pełną analizę teoretyczną badanego systemu. Ze względu na istotną rolę korelacji elektronicznych w materiałach zawierających neptun, standardowe metody badań teoretycznych nie są wystarczające do poprawnego opisu właściwości fizycznych takich materiałów. Z tego powodu obliczenia przeprowadzimy zaawansowanymi metodami typu teorii funkcjonału gęstości (DFT), uwzględniając efekty relatywistyczne. Wyznamy magnetyczny stan podstawowy $NpPt_2In_7$, obliczymy gęstość stanów (DOS) jego struktur pasmowych oraz powierzchnie Fermiego. Analiza materiału antyferromagnetycznego $NpPt_2In_7$ przyczyni się do lepszego zrozumienia zachodzących w nim zjawisk oraz istoty magnetyzmu w tym materiale. Zbadanie materiału, który powstał poprzez zamianę atomu ceru na cięższy neptun bez znaczących zmian w strukturze umożliwi badanie korelacji elektronicznych zachodzących w materiałach z rodziny $A_nM_mIn_{3n+2m}$. Wyniki obliczeń teoretycznych są istotne przy planowaniu kolejnych eksperymentów i mogą naprowadzić naukowców do odkrycia nowych związków o fascynujących właściwościach.