

POPULARNONAUKOWE STRESZCZENIE PROJEKTU

Po opracowaniu teorii BCS (Bardeena-Coopera-Schrieffera) w 1957 roku i jej eksperymentalnej weryfikacji wydawało się że zjawisko nadprzewodnictwa (po raz pierwszy zaobserwowane w 1911 roku) zostało już całkowicie wyjaśnione. Ważnym elementem pierwszego mikroskopowego modelu nadprzewodnictwa była koncepcja efektywnie przyciągającego oddziaływania pomiędzy elektronami, które prowadzić może do powstania tzw. par Coopera (par elektronów). Ze względu na to że pary Coopera nie są poddawane rozproszeniom na jonach sieci krystalicznej, w stanie nadprzewodzącym opór elektryczny nie występuje. To wraz z innymi unikatowymi własnościami nadprzewodników (jak np. efekt Meissnera) czyni że są one bardzo atrakcyjne z punktu widzenia zastosowania w technice. Przykładowo mogą być one wykorzystane do budowy silnych magnesów, nowoczesnej aparatury elektronicznej, pociągów lewitujące, czy procesorów nadprzewodzących. Niestety destrukcyjny charakter szumu termicznego na tworzenie się par Coopera powoduje, że ze wzrostem temperatury następuje gwałtowne przejście do fazy normalnej. Temperatury krytyczne, w których takie przejście następuje dla pierwszych odkrytych nadprzewodników wynoszą zaledwie kilka Kelvinów (0 Kelvinów to -273 stopnie Celcjusza). Odkrycia końca lat 70 i 80 pokazały jednak, że wiele materiałów może znajdować się w stanie nadprzewodzącym, w znacząco wyższych temperaturach. Nietypowe własności tak zwanych nadprzewodników wysokotemperaturowych nie dają się niestety opisać przy pomocy znanej teorii BCS. Znaczną grupą takich materiałów stanowią związki na bazie miedzi odkryte w 1986 r., których dotyczy obecny projekt. To co czyni je jeszcze bardziej interesującymi jest fakt, że oprócz zjawiska nadprzewodnictwa obserwują się w nich całą gamę innych intrygujących efektów takich jak przejście Motta, uporządkowanie ładunkowe i magnetyczne, czy zagadkowa faza pseudoprzerwy. Pomimo 30 lat wzmożonych prac zarówno teoretycznych jak i eksperymentalnych wciąż nie udało się stworzyć kompletnej teorii, która opisywała by miedziowce i wyjaśniała możliwość wiązania się w nich par Coopera w podwyższonych temperaturach.

Zgodnie z jedną z rozważanych przez środowisko naukowe koncepcji w układach składających się z wielu elektronów, które silnie odpychają się Kulombowsko, na skutek efektów kolektywnych może dojść do silnego wiązania się par Coopera co pozwala na stabilność fazy nadprzewodzącej w znacząco wyższych temperaturach niż to miało miejsce w nadprzewodnikach konwencjonalnych. Tego typu teoria, w ramach której w układach silnie skorelowanych nadprzewodnictwo może powstać bez efektywnego oddziaływanie przyciągającego stanowi obecnie zasadnicze wyzwanie w dziedzinie fizyki ciała stałego. Duży stopień złożoności takiego opisu powoduje, że analiza teoretyczna nadprzewodników wysokotemperaturowych wymaga bardzo zaawansowanych technik obliczeniowych. W ramach tego projektu aby uwzględnić efekty korelacyjne z odpowiednią dokładnością planuje się zastosować innowacyjną metodę *diagrammatic expansion Gutzwiller wave function* (DE-GWF) opracowaną w ostatnich latach. Metoda ta jest efektywna z punktu widzenia numerycznego oraz jest bardziej dokładna niż wiele innych metod stosowanych do tego typu zagadnień przy jednoczesnym braku ograniczeń dotyczących rozmiarów układu.

Zasadniczą kwestią związaną z badaniami teoretycznymi nad nadprzewodnikami na bazie miedzi jest dobranie odpowiedniego modelu matematycznego w ramach którego można opisywać wybrane zjawiska. W przypadku nadprzewodników wysokotemperaturowych kwestia ta nie jest jeszcze całkowicie rozwiązana i wciąż rozważa się różne możliwości. Jak pokazały ostatnie badania zarówno eksperymentalne jak i teoretyczne uwzględnienie tlenowych stopni swobody w modelowaniu związków miedziowych jest niezwykle ważne w celu pełnego zrozumienia fizyki tych materiałów. Ponadto, pomimo pewnych sukcesów związanych z opisem teoretycznym w oparciu o szeroko stosowane modele jednopasmowe (gdzie tlenowe stopnie swobody są wyeliminowane) nie udało się jeszcze odtworzyć kompletu najważniejszych wyników eksperymentalnych. Dlatego bardzo ważna jest rozległa analiza realistycznego modelu trzypasmowego, który obejmuje opis wspomnianych wcześniej tlenowych stopni swobody. Taka analiza przy jednoczesnym uwzględnieniu korelacji elektronowych z odpowiednią dokładnością przeprowadzona zostanie w ramach niniejszego projektu a wyniki obliczeń porównane zostaną z dostępnymi danymi eksperymentalnymi co pozwoli na weryfikację stosowanego podejścia teoretycznego. Odtworzenie podstawowych wyników doświadczalnych wskazywałaby na poprawność kwazicząstkowego obrazu jaki wynika ze stosowanego modelu i stanowiłoby znaczący krok w kierunku stworzenia kompletnej teorii nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego w miedzianach.