

Nadprzewodnictwo jest jednym z najbardziej fascynujących zjawisk fizycznych, w którym przez materiał, schłodzony poniżej odpowiedniej (zazwyczaj bardzo niskiej) temperatury, prąd elektryczny płynie nie napotykać oporu. Dzięki temu nadprzewodnik może przewodzić prąd elektryczny bez strat. Drugą niezwykle ważną cechą nadprzewodnika jest jego diamagnetyzm, czyli zdolność do całkowitego wypychania pola magnetycznego z wnętrza materiału. Dzieje się tak, ponieważ w nadprzewodniku, umieszczonym w polu magnetycznym, indukują się prądy, które powodują powstanie pola magnetycznego, ekranującego wnętrze materiału od pola zewnętrznego. W konsekwencji, magnes umieszczony nad nadprzewodnikiem, może się unosić – lewitować. Pomimo ponad stuletniej historii, nadprzewodnictwo ciągle nas zaskakuje. Odkrywane są nadprzewodniki niekonwencjonalne, o własnościach innych niż te znane wcześniej, nadprzewodnictwo pojawia się w materiałach, w których zupełnie tego byśmy się nie spodziewali, bądź z coraz to wyższymi temperaturami krytycznymi. W materiałach, którymi będziemy się zajmować, nadprzewodnictwo prawdopodobnie powstaje dzięki specyficznemu oddziaływaniu pomiędzy elektronami a drganiami sieci krystalicznej – fononami, w efekcie prowadząc do przyciągającego oddziaływania elektron-elektron. Dzięki fascynującej fizyce tego zagadnienia, oraz szerokim zastosowaniu praktycznym (przede wszystkim do budowy niezwykle silnych elektromagnesów), nadprzewodnictwo jest rozwijającą się dziedziną badań podstawowych.

W projekcie pt: „**Rola stanów rezonansowych, sprzężenia spin-orbita i nieporządku w nadprzewodnictwie wybranych materiałów**” zamierzamy podjąć teoretyczne badania nadprzewodnictwa w aspektach dotąd niebadanych, bądź poruszanych niezwykle rzadko. Naszym celem będzie teoretyczne opisanie i zrozumienie własności oddziaływania elektronowo-fononowego i nadprzewodnictwa w bardzo ciekawych i nietypowych związkach, które pokrótce scharakteryzujemy poniżej:

1. Nadprzewodzące domieszkowane półprzewodniki, w których na atomie domieszki powstaje tzw. stan rezonansowy. Celem naszych prac będzie chęć wyjaśnienia mechanizmu nadprzewodnictwa w tych materiałach, które są znacząco różne od typowych nadprzewodzących metali. Istniejące teorie opisujące to zjawisko muszą zostać poddane weryfikacji, ponieważ opierają się na szeregu założeń, które mogą być nie spełnione w tych związkach.
2. Nadprzewodniki zawierające ciężkie pierwiastki i nadprzewodniki niecentrosymetryczne. W układach tych planujemy dokładnie zbadać rolę relatywistycznego oddziaływania spin-orbita na własności materiału, anizotropowego oddziaływania elektron-fonon i własności fazy nadprzewodzącej, wychodząc poza model BCS, w kierunku rozważań ilościowych, opartych na dokładnych obliczeniach numerycznych.
3. Nieuporządkowane stopy o wysokiej entropii – ta nowa klasa materiałów posiada niezwykle złożoną budowę chemiczną (od 5 to kilkunastu pierwiastków chemicznych), a jednocześnie formuje niezwykle proste struktury krystaliczne, takie jak kryształy metali, np. żelaza czy miedzi. Odkryte niedawno nadprzewodnictwo tych stopów zdaje się również wykraczać poza standardowe ramy, a niezwykle budowa tych układów otwiera szerokie możliwości optymalizacji własności związku, poprzez modyfikację składu i podstawienia innych pierwiastków.

Nasze badania opierać się będą na numerycznych obliczeniach własności realnych związków o zadanej strukturze krystalicznej i składzie. Wyznaczone z *pierwszych zasad* własności elektronowe i fononowe posłużą do dalszej, ilościowej analizy własności nadprzewodzących, w oparciu o obecnie najdokładniejsze teorie mikroskopowe nadprzewodnictwa indukowanego oddziaływaniem elektron-fonon. Pozwoli to na zrozumienie własności badanych materiałów, prognozowanie wystąpienia nadprzewodnictwa w nowych materiałach, oraz stworzenie uniwersalnych narzędzi teoretycznych mogących służyć nowemu zespołowi do zaawansowanych badań teoretycznych przez szereg kolejnych lat.