

MODELOWANIE UKŁADÓW ZAWIERAJĄCYCH POJEDYNCZE WARSTWY WYKAZUJĄCE SILNE SPRĘŻENIE ANTYFERROMAGNETYCZNE - W POSZUKIWANIU PREKURSORÓW NOWYCH NADPRZEWODNIKÓW

POPULARNONAUKOWE STRESZCZENIE PROJEKTU

MOTYWACJA. Badania zaawansowanych materiałów znajdują się wśród zainteresowań nowoczesnego społeczeństwa, poszukującego wygodnych rozwiązań kolejnych technologicznych przeszkód. Wiele dzisiejszych problemów mogłoby zostać rozwiązanych dzięki redukcji strat w przesyłaniu energii, co skutkowałoby też szybszym i tańszym podróżowaniem, efektywnym magazynowaniem energii i informacji, a także obniżeniem kosztów instrumentalnych analiz medycznych. Materiałem, który może sprostać wszystkim tym wyzwaniom, jest **nadprzewodnik**, czyli substancja mogąca przewodzić prąd bez żadnych strat energii. Chociaż materiały takie są już znane, a nawet stosowane w pewnych dziedzinach nauki i technologii, to jednak wymagają chłodzenia by zapewnić właściwe funkcjonowanie. Najlepsze znane nadprzewodniki działają w temperaturach poniżej $-135\text{ }^{\circ}\text{C}$, a zatem niższych niż w najzimniejszych miejscach na Ziemi. Co zaskakujące, w warunkach standardowego ciśnienia (tj. 1 atm) tylko **jedna rodzina** nadprzewodników jest zdolna do przewodzenia prądu bez strat przy chłodzeniu za pomocą ciekłego azotu (powyżej $-196\text{ }^{\circ}\text{C}$), taniego czynnika chłodzącego. Materiały te, zwane **nadprzewodnikami wysokotemperaturowymi**, w swoim składzie chemicznym zawsze zawierają miedź oraz tlen; zostały one odkryte prawie 35 lat temu, co zostało uhonorowane nagrodą Nobla. Niestety, aż do dzisiaj nie znaleziono żadnego innego rodzaju związków wykazujących podobne właściwości w fazie stałej. W środowisku naukowym nie ma ostatecznej zgody co do tego, co czyni te materiały tak wyjątkowymi. Pomimo to są one dobrym przykładem na to, że współdziałanie oddziaływań magnetycznych i między-elektronowych (wraz z wkładem pochodzącym od drgań sieci krystalicznej) wspólnie „skleja” ze sobą przewodzące prąd elektrony w pary i przyczynia się do sukcesu tych układów. Znalezienie lepszego materiału stanowiłoby niepodważalny przełom w badaniach nadprzewodnictwa.

INSPIRACJE. Ostatnie doniesienia teoretyczne oraz eksperymentalne wskazują na istnienie nowego rodzaju prekursorów, które naśladują zachowanie wspomnianych związków miedzi. Proponowane nowatorskie materiały posiadają **srebro** zamiast miedzi oraz **fluor** zamiast tlenu. Najnowsze obliczenia sugerują, że utworzenie płaskiej warstwy zawierającej srebro i fluor mogłoby znacznie polepszyć ich właściwości. Zabieg polega na tym, by nałożyć ten związek w postaci **pojedynczej warstwy atomowej** na powierzchnię odpowiedniego kryształu. Dokładne wyliczenia wskazują, że takie układy mogłyby zachować stan nadprzewodzący w temperaturach zbliżonych do $-80\text{ }^{\circ}\text{C}$, co byłoby **historycznym rekordem**. Weryfikacja eksperymentalna tych przewidywań trwa. Sposób projektowania, polegający na manipulowaniu cechami materiału na poziomie atomowym, znany jest od dawna, i pozwalający osiągać pożądane właściwości, określany jest mianem nanotechnologii. **Obliczenia teoretyczne** odgrywają tu kluczową rolę, ponieważ pozwalają na stosunkowo tanie przewidywanie właściwości tych materiałów. Otwierają też drogę do wyboru najbardziej obiecujących układów zanim znaczne zasoby finansowe oraz ludzkie zostaną zaangażowane w badania eksperymentalne.

CELE I METODY. Głównym **celem** tego projektu jest znalezienie **nowych układów warstwowych** mogących stanowić prekursory nieznanych dotąd nadprzewodników. Koncepcja badań opiera się na modelowaniu komputerowym układów zawierających kationy metali o nieparzystej liczbie elektronów (Ni^{1+} , Yb^{3+} , Ti^{3+}) o których wiadomo, że wykazują „**silne**” **właściwości magnetyczne** w związkach z pewnymi niemetalami. Ich odpowiedniki „niemagnetyczne” (Pd^{2+}) i te które mogą być zarówno magnetyczne jak i nie (Ni^{2+}) również będą badane jako układy odniesienia. **Warstwy „A”** zawierające wspomniane kationy oraz aniony (O^{2-} , S^{2-} , Cl^{-} , H^{-}) będą umieszczane na powierzchniach różnych **podłoży**, a następnie korzystając z superkomputerów określone zostaną preferowane pozycje atomów i wynikające z tego właściwości fizyczne. Właściwości fizyczne będą silnie zależeć od materiału podłoża, co pozwoli wybrać **układy optymalne**, podobne do wspomnianych powyżej materiałów zawierających tlenki miedzi lub fluorki srebra. W następnym etapie będziemy modelować układy zawierające w pobliżu warstwy „A” dodatkową **warstwę „B”** o atomowej grubości, która będzie wstrzykiwać lub odbierać elektrony z warstwy „A” (proces ten nazywa się **domieszkowaniem**). Ostatecznie, dla wszystkich układów o różnych poziomach domieszki i we współpracy międzynarodowej z ekspertami z Chin i Włoch, oszacujemy temperatury pojawienia się nadprzewodnictwa w tych materiałach. Pozwoli to na wyselekcjonowanie najbardziej obiecujących układów.

WYNIKI. Pozytywne **rezultaty** projektu, tj. zaproponowanie materiałów mogących wykazywać nadprzewodnictwo w temperaturze wyższej niż $-80\text{ }^{\circ}\text{C}$ (jak dla fluorku srebra) lub wręcz w temperaturze pokojowej, może wytyczyć drogę dla przyszłych badań eksperymentalnych. Gdyby właściwości te zostały potwierdzone, mogłoby to zmienić sposób w jaki społeczeństwo, i każdy z nas, korzysta z urządzeń elektrycznych. Powszechne wykorzystanie nadprzewodników w produkcji procesorów pozwoliłoby konstruować jeszcze szybsze komputery. Natomiast oszczędność energii przyczyniłaby się do polepszenia stanu środowiska na naszej planecie, dzięki obniżeniu zużycia paliw kopalnych.