

SEMINARIUM Z MAGNETYZMU I NADPRZEWODNICTWA

Uprzejmie zawiadamiamy, że w **środę**

8 stycznia 2025 r., o godz.10:00

odbędzie się seminarium online na platformie ZOOM

- link podany jest na stronie IF PAN

na którym

dr hab. inż. Bartłomiej Wiendlocha

(Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej,
Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie)

wygłosi referat na temat:

“Badania nadprzewodników klasycznych metodami 'z pierwszych zasad' - przegląd metod na przykładach”

Podczas seminarium wprowadzę w tematykę obliczeń siły oddziaływania elektron-fonon i badania nadprzewodnictwa przy użyciu obliczeń z *pierwszych zasad* (*ab initio*), korzystających z metod teorii funkcjonalu gęstości (DFT - *density functional theory*). Przybliżę kilka możliwych podejść do tego zagadnienia, które z powodzeniem stosujemy w naszym zespole, ilustrując wynikami uzyskanymi dla realnych materiałów nadprzewodzących. W szczególności, poruszę takie zagadnienia jak:

- Metodologię wyznaczania funkcji Eliashberga, będącej kluczową wielkością opisującą oddziaływanie elektron-fonon w nadprzewodnikach;
- Przybliżoną metodę *rigid ion*, stosowaną w przypadkach, w których wyznaczenie funkcji Eliashberga jest zbyt skomplikowane a czasem wręcz niemożliwe (np. stopy wysokoentropowe HEA - *high entropy alloys* - czy inne materiały, w których struktura fononowa jest trudna do określenia, bądź niestabilna);
- Teorię funkcjonalu gęstości dla nadprzewodnictwa (SCDFT - *superconducting density functional theory*), najdokładniejszą z obecnie stosowanych metod obliczeniowych, w której rozwiązuje się anizotropowe równania na przerwę nadprzewodzącą z bezpośrednim uwzględnieniem oddziaływań kulombowskich, co umożliwia m.in. obliczenie temperatury krytycznej bez użycia jakichkolwiek parametrów fenomenologicznych.

Metody te zilustruję wynikami obliczeń przeprowadzonych dla silnie sprzężonego nadprzewodnika typu Heuslera, ScAu_2Al , stopu $\text{Pb}_{0.64}\text{Bi}_{0.36}$, który jest najsilniej sprzężonym nadprzewodnikiem pod ciśnieniem normalnym, i stopów wysokoentropowych $(\text{ScZrNb})_{1-x}(\text{RhPd})_x$ oraz $(\text{TaNb})_{0.67}(\text{HfZrTi})_{0.33}$. Najciekawsze z uzyskanych przez nas rezultatów obejmują wyjaśnienie przyczyn występowania rekordowo silnego sprzężenia elektron-fonon w w/w związkach, pokazują formowanie się wieloprzerwowej, anizotropowej fazy nadprzewodzącej i ilustrują różny jakościowo wpływ nieporządku na nadprzewodnictwo w dwóch badanych rodzinach HEA, zdecydowanie odbiegający od intuicji, gdzie częściowo uporządkowany materiał jest zdecydowanie silniej podatny na nieporządek, w porównaniu do całkowicie nieuporządkowanego stopu.

[1] S. Gutowska, K. Górnicka, P. Wójcik, T. Klimczuk, B. Wiendlocha, "Anisotropic, multiband, and strong-coupling superconductivity of the $\text{Pb}_{0.64}\text{Bi}_{0.36}$ alloy", *Phys. Rev. B* 110, 214510 (2024) [Editors' suggestion]

[2] K. Jasiewicz, S. Gutowska, J. Tobola, B. Wiendlocha, "Electronic Structure and Electron-Phonon Coupling Calculations for bcc HEA Superconductors Ta-Nb-Hf-Zr-Ti", w "High-Entropy Alloy Superconductors. Exotic Properties, Applications and Materials Design" ed. Jiro Kitagawa, Yoshikazu Mizuguchi, Springer 2024.

[3] K. Jasiewicz, J. Tobola, B. Wiendlocha, "Local distortions of the crystal structure and their influence on the electronic structure and superconductivity of the high-entropy alloy $(\text{TaNb})_{0.67}(\text{HfZrTi})_{0.33}$ ", *Phys. Rev. B* 108, 224505 (2023).

[4] G. Kuderowicz, B. Wiendlocha, "Strong-coupling superconductivity of the Heusler-type compound ScAu_2Al : Ab-initio studies", *Phys. Rev. B* 108, 224501 (2023).

[5] S. Gutowska, A. Kawala, B. Wiendlocha, "Superconductivity near the Mott-Ioffe-Regel limit in the high-entropy alloy superconductor $(\text{ScZrNb})_{1-x}(\text{RhPd})_x$ with a CsCl-type lattice", *Phys. Rev. B* 108, 064507 (2023).

Wykład będzie prowadzony w języku polskim, slajdy będą w języku angielskim.

Serdecznie zapraszamy

Roman Puźniak / Andrzej Szewczyk / Henryk Szymczak