

SEMINARIUM Z MAGNETYZMU I NADPRZEWODNICTWA

Uprzejmie zawiadamiamy, że w **środę**

5 marca 2025 r., o godz.10:00

odbędzie się seminarium **online na platformie ZOOM**

- **link podany jest na stronie IF PAN**

na którym

dr inż. Michał J. Winiarski

*(Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej oraz Centrum Materiałów Przyszłości,
Politechnika Gdańska, ul. Narutowicza 11/12, 80-233 Gdańsk)*

wygłosi referat na temat:

“Czy analiza wiązań chemicznych może nam pomóc w poszukiwaniu nowych nadprzewodników?”

Pomimo, że materiały nadprzewodzące mają duże znaczenie w wielu dziedzinach współczesnej techniki, takich jak wytwarzanie i przesyłanie energii, obrazowanie medyczne, precyzyjna metrologia, czy od niedawna informatyka kwantowa, pomimo upływu ponad 110 lat od odkrycia nadprzewodnictwa wciąż brakuje uniwersalnego zestawu zasad, którego można by użyć do racjonalnego projektowania nowych materiałów nadprzewodzących o pożądanых własnościach.

W ostatnich latach w kilku różnych rodzinach materiałów zaobserwowano korelację pomiędzy obecnością stanów antywiązących na poziomie Fermiego i występowaniem nadprzewodnictwa [1-3]. Jakościowo można wytłumaczyć to zjawisko jako pewną formę optymalizacji wiązań chemicznych poprzez „dystorsję” struktury elektronowej, w tym przypadku przyjmującej formę nadprzewodnictwa. Koncepcja taka została wcześniej z powodzeniem zastosowana do przewidywania i projektowania materiałów ferromagnetycznych [4].

Zaprezentuję wyniki badań wiązań chemicznych z użyciem teorii orbitali molekularnych oraz metod opisu wiązań chemicznych opartych o obliczenia wykorzystujące teorię funkcjonału gęstości (np. crystal orbital Hamilton population function – COHP) przeprowadzonych na wybranych fazach Heuslera i związkach z endohedralnymi klasterami Al i Ga [5,6]. Omówię również możliwość wykorzystania tych metod w poszukiwaniu nowych związków nadprzewodzących.

[1] S. Gutowska et al., *J. Phys. Chem. C*. **127** (2023) 14402-14414

[2] X. Gui et al., *Chem. Mater.* **30** (2018) 6005-6013

[3] V.Y. Verchenko, A.A. Tsirlin, A.V. Shevelkov, *Inorg. Chem. Front.* **8** (2021) 1702-1709

[4] G.A. Landrum, R. Dronskowski, *Angew. Chem. Int. Ed.* **39** (2000) 1560-1585

[5] Z. Rzyżyńska et al., *Chem. Mater.* **32** (2020) 3805-3812

[6] Z. Rzyżyńska et al., *J. Phys. Chem. C*. **125** (2021) 11294-11299

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

Serdecznie zapraszamy

Roman Puźniak / Andrzej Szewczyk / Henryk Szymczak