

# ABSTRACT

Sahakyan Mane

Institute of Low Temperature and Structure Research, Polish Academy of Sciences, P. O. Box 1410,  
50-422 Wrocław, Poland

E-mail: *m.sahakyan@int.pan.wroc.pl*

## **Electronic structure studies of non-centrosymmetric Th-based superconductors**

Noncentrosymmetric superconductors are currently intensively studied due to the fact that the lack of inversion center could lead to a mixed state of the spin-singlet and spin-triplet configurations of the superconducting pairs.

In this thesis, the investigation of electronic structure will be presented for noncentrosymmetric superconductors based on Th with the stoichiometry  $\text{Th}_7\text{T}_3$  ( $\text{T}=\text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Rh}, \text{Os}, \text{Ir}$ ), exhibiting weak electron correlations. The studied  $\text{Th}_7\text{T}_3$  compounds crystallizing in the hexagonal  $\text{Th}_7\text{Fe}_3$ -type structure (space group  $P6_3mc$ ) undergo transition into a superconducting state at  $T_c \approx 2$  K.

In order to prove consistent results, first principle calculations have been performed using two methods: full potential linear muffin-tin orbital (FP-LMTO) and full potential linear augmented plane wave (FP-LAPW), and applying the scalar and fully relativistic treatments. The main results are as follows:

1) There are large differences in both electronic band structures and Fermi surface topologies calculated without spin-orbit coupling (SOC) and taking into account the SOC effect:

- asymmetric spin splitting in both energy bands and Fermi surface (FS) topologies
- anisotropic structures of the FS.

We assign this behaviour to strong effect of asymmetric spin-orbit coupling (ASOC) which removes the Cramers degeneracy and induces the anisotropic splitting in the  $|\mathbf{k}|$ -space.

2) The results of the density of states (DOS) calculations are shown that Th-6*d* and T-*d* valence electrons contribute mainly to  $N(E_F)$  and thus are responsible for the superconducting properties.

3) The resulting values of the electron-phonon coupling constant point to a weak- and intermediate-coupling superconductivity in  $\text{Th}_7\text{T}_3$  superconductors.

4) The results of the calculations of electron localization function (ELF) indicate the co-existence of covalent and metallic bonds.



**Badania struktury elektronowej torowych nadprzewodników niecentrosymetrycznych**

Nadprzewodniki niecentrosymetryczne są obecnie intensywnie badane z uwagi na fakt, że brak centrum inwersji umożliwia powstanie mieszanych konfiguracji spinowych par nadprzewodzących typu spin-singlet i spin-tryplet.

W rozprawie przedstawione zostaną wyniki obliczeń struktury elektronowej torowych nadprzewodników niecentrosymetrycznych o wzorze chemicznym  $\text{Th}_7\text{T}_3$  ( $\text{T}=\text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Rh}, \text{Os}, \text{Ir}$ ), które wykazują słabą korelację elektronową. Związki te krystalizują w strukturze heksagonalnej typu  $\text{Th}_7\text{Fe}_3$  (grupa symetrii  $P6_3mc$ ). W temperaturze  $T_c \approx 2$  K materiały przechodzą w stan nadprzewodzący.

Obliczenia z zasad pierwszych zostały wykonane przy użyciu metody FP-LMTO oraz FP-LAPW w przybliżeniach zarówno skalarnie relatywistycznym (SR), jak i w pełni relatywistycznym (FR). Główne wyniki rozprawy są następujące.

1) Obserwuje się duże różnice w strukturach pasmowych oraz w powierzchniach Fermiego obliczonych bez sprzężenia spin-orbita i z uwzględnieniem sprzężenia spin-orbita, m.in:

- W rozszczepieniach spinowych w strukturze pasmowej oraz w powierzchniach Fermiego
- W anizotropowych kształtach powierzchni Fermiego

Zaobserwowane różnice są przypisane silnemu efektowi asymetrycznemu sprzężenia spin-orbita ( $\sim 40\text{-}100$  meV), które usuwa degenerację Cramera i indukuje anizotropowy podział w powierzchniach Fermiego w przestrzeni lkl.

2) Wyniki obliczeń gęstości stanów pokazały, że elektrony Th-6*d* oraz T-*d* dają znaczący wkład do  $N(E_F)$ , zatem są odpowiedzialne za nadprzewodnictwo w  $\text{Th}_7\text{T}_3$ .

3) Współczynnik sprzężenia elektron-fonon wskazuje na słabo sprzężone nadprzewodnictwo w  $\text{Th}_7\text{T}_3$ , co jest zgodne z wynikami eksperymentalnymi.

4) Wyniki obliczeń funkcji lokalizacji elektronów wskazują na współistnienie wiązań kowalencyjnych i metalicznych.