

**Tytuł: Badanie struktury elektronowej związków
międzymetalicznych o liniowej dyspersji pasm typu Diraca/Weyla**

Streszczenie rozprawy doktorskiej

Odkrycie kwantowego efektu Halla a następnie grafenu, izolatorów oraz semimetali topologicznych w ostatnich kilku dekadach spowodowało zmianę paradygmatu opisu układów krystalicznych oraz ich struktury elektronowej. Konsekwencją tych pionierskich badań są poszukiwania nowych układów o nietrywialnej topologii struktury pasmowej, stanowiące obecnie wiodący obszar fizyki ciała stałego. Semimetale topologiczne są trójwymiarowymi materiałami, w których strukturze elektronowej obecne są przecinające się pasma energetyczne o liniowej dyspersji, tworzące charakterystyczne stożkowe struktury typu Diraca czy Weyla. Te trójwymiarowe analogi grafenu zostały pierwotnie wykryte wśród układów będących połączeniem atomów *p*- i *d*-elektronowych, takich jak TaAs czy Na₃Bi. Celem niniejszej rozprawy doktorskiej w formie cyklu 6 publikacji było zbadanie teoretyczne z użyciem metod obliczeniowych *ab initio* struktur elektronowych wybranych związków międzymetalicznych pod kątem występowania w nich stanów typu Diraca lub Weyla oraz ich potencjalnego wpływu na właściwości transportowe. W czterech publikacjach z cyklu wyznaczono struktury elektronowe (w tym dyspersje pasm, gęstości stanów i powierzchnie Fermiego) oraz zbadano ich właściwości i wielkości pochodne dla wybranych związków należących do rodziny typu 112 (La;Ce)*M*(As;Sb;Bi)₂, gdzie *M* to atom metalu przejściowego. W strukturze pasmowej nadprzewodników La(Ni;Cu;Pd)Sb₂ wykryto pasma typu Diraca, właściwe dla układów o sieci kwadratowej, złożonej z atomów bloku *p* układu okresowego pierwiastków chemicznych. Związane z nimi kwazi-dwuwymiarowe fermiony Diraca mogą być odpowiedzialne za nadprzewodnictwo tych związków. Dodatkowo zauważono zależność wartości temperatury krytycznej tych nadprzewodników od wymiarowości płatów powierzchni Fermiego w ramach scenariusza rezonansu Feshbacha jej kształtu. Z kolei antyferromagnetyk CeAgAs₂ zbadany został kompleksowo za pomocą różnych metod eksperymentalnych, a wyniki te zostały zinterpretowane w oparciu o wyznaczoną teoretycznie strukturę elektronową z uwzględnieniem polaryzacji spinowej. W tym związku rozpoznano dwie odrębne grupy stanów elektronowych związane z przejściem cis-trans przy braku pasm typu Diraca, prawdopodobnie z powodu dystorsji podsieci arsenowej oraz obniżonej symetrii komórki elementarnej. Ponadto pokazany został bliski związek pomiędzy strukturami elektronowymi i właściwościami nadprzewodnika LaSb₂ i znanego z literatury semimetalu Diraca o sieci kwadratowej, LaAgSb₂. Dla obu związków powiązано występowanie liniowego magnetooporu z obecnością liniowych pasm i w konsekwencji dwuwymiarowych fermionów Diraca przy poziomie Fermiego. Zbadano także teoretycznie

wpływ nieporządku strukturalnego w układzie $\text{LaZn}_{1-x}\text{Bi}_2$ na strukturę elektronową z linią węzłową Diraca, metodą modelowych superkomórek. W następnej publikacji z cyklu zbadany został związek CaIr_2Ge_2 jako przedstawiciel rodziny 122, złożony z atomów p - i d -elektronowych. Zaprezentowano dla niego oryginalne wyniki eksperymentalne (transport elektronowy) i teoretyczne (struktura elektronowa) oraz przeprowadzono ich analizę pod kątem występowania stanów nietrywialnych topologicznie ze względu na wartość niezmiennika topologicznego oraz obecność rozszczepionego anizotropowego stożka Diraca. W kolejnej publikacji z cyklu rozprawy przeprowadzone zostały badania teoretyczne roztworu stałego typu 11, $\text{La}_{1-x}\text{Tl}_x\text{N}$. W publikacji skoncentrowano się na analizie zmian właściwości topologicznych struktury pasmowej układu w zależności od zawartości talu. Wykazano nietrywialny topologicznie charakter semimetalu dla zawartości $x = 0.25$. Otrzymane wyniki zostały skonfrontowane z podobnymi, znanymi w literaturze układami – izolatorami oraz semimetalami topologicznymi o regularnej strukturze krystalicznej.