

**Zgłoszenie zagadnienia badawczego realizowanego
w Krakowskiej Interdyscyplinarnej Szkole Doktorskiej
w dyscyplinie fizyka**

w Jednostce: Instytut Fizyki Jądrowej im. H. Niewodniczańskiego Polskiej Akademii Nauk

1	Nazwisko i imię promotora, tytuł/stopień naukowy, jednostka, adres e-mail	Dr hab. Andrzej Ptok, prof. IFJ PAN Zakład Komputerowych Badań Materiałów, Instytut Fizyki Jądrowej PAN andrzej.ptok@ifj.edu.pl
2	Nazwisko i imię promotora pomocniczego (opcjonalnie), jednostka, adres e-mail	
3	Temat zagadnienia badawczego + krótki (do 250 słów) opis tematyki badawczej	Badanie stanów topologicznych indukowanych nietrywialną topologią Odkrycie stanów powierzchniowych w postaci stożków Diraca w topologicznych izolatorach typu Bi₂Se₃ otworzyło okres intensywnych studiów układów topologicznych. Okazuje się, że własności topologiczne mogą być przewidziane przez obliczenia <i>ab initio</i> struktury elektronowej. Obecnie znanych jest ponad 3000 topologicznych izolatorów oraz 4000 topologicznych półprzewodników. Realizacja stanów powierzchniowych wynika głównie z istnienia sprzężenia spin-orbita. Brak symetrii translacyjnej układu, tj. istnienie powierzchni, powoduje realizację topologicznego stanu powierzchniowego. Zazwyczaj stany takie przyjmują postać stożków Diraca, choć również inne realizacje są możliwe, np. podwójne stożki Weyla. Istnienie punktów Diraca (silnie zdegenerowanych punktów w przestrzeni pędów) może prowadzić do realizacji linii nodalnych Diraca. Badanie tego typu stanów możliwe jest w ramach teorii DFT oraz odpowiednio przygotowanych modeli ciasnego wiązania. W ramach doktoratu wybrane związki będą badane tymi metodami. Przykładowe referencje: A. Ptok et al. Phys. Rev. B 102, 245405 (2020); A. Ptok et al., Phys. Rev. B 100, 165130 (2019); A. Ptok et al., Phys. Rev. Materials 2, 024801 (2018); A. Ptok et al., Phys. Rev. B 96, 195430 (2017); A. Ptok et al., Phys. Rev. B 96, 184425 (2017).
4	Wymagania w stosunku do kandydata (wykształcenie, umiejętności/kursy)	Znajomość systemu Linux, znajomość elementów systemu LaTeX, umiejętności programistyczne, znajomość języka angielskiego.

5	Wskazanie możliwych źródeł i zakresu finansowania spoza subwencji, np. stypendium naukowego, kosztów badań, wyjazdów itp.	
---	---	--

1	Supervisor: name/surname, degree, affiliation, e-mail address	Dr hab. Andrzej Ptok, prof. IFJ PAN Department of Computational Materials Research, Institute of Nuclear Physics, Polish Academy of Sciences andrzej.ptok@ifj.edu.pl
2	Auxiliary supervisor (optional) affiliation,e-mail address	
3	Research subject title Short description, up to 250 words	Study of the topological states induced by non-trivial topology Discovery of the surface states in the form of Dirac cones in topological insulators like Bi₂Se₃ opened a period of intensive studies of the topological systems. What is interesting, the topological properties can be predicted within the <i>ab initio</i> calculations. Up to now, we know more than 3000 topological insulators and 4000 topological semimetals. Realization of the surface states is associated with the spin-orbit coupling. Broken of the translational symmetry in the system, i.e. existence of the surface, allow realization of the topological surface states. Typically, this states can be observed in the form of Dirac cones. However, also another realization are possible, like double Weyl cones. Existence of strongly degenerated Dirac points in momentum space can lead to realization of the Dirac nodal lines. Study of this type of states is possible within DFT calculations and adequate tight binding models. During Ph.D. study some compounds will be investigated with these methods. A. Ptok et al. Phys. Rev. B 102, 245405 (2020); A. Ptok et al., Phys. Rev. B 100, 165130 (2019); A. Ptok et al., Phys. Rev. Materials 2, 024801 (2018); A. Ptok et al., Phys. Rev. B 96, 195430 (2017); A. Ptok et al., Phys. Rev. B 96, 184425 (2017).
4	Additional requirements to the candidate (education, skills / courses)	Knowlage about system Linux and LaTeX, programic skills, fluent English in speech and writing.

5	Possible sources of financing, other than subsidy, e.g., scientific scholarship, research and travel costs, etc.	
---	--	--