

Bírálati vélemény Kormányos Andor

“Spin-orbit coupling effects in atomically thin materials and their heterostructures”,

magyarul

“Spin-pálya csatolás atomi vékonyságú anyagokban és heteroszerkezeteikben”

című MTA doktori értekezéséről

Két évtizeddel ezelőtt A.K. Geim és K.S. Novoselov közönséges ragasztóval vékony, mindössze egy atom vastagságú szénlemezeket választott el grafitból. Ezeket grafénnek nevezték el. A grafénnel a fizikusok a kétdimenziós anyagok új osztályát tanulmányozhatják, amelyek egyedülálló tulajdonságokkal rendelkeznek. A grafén olyan kísérleteket tett lehetővé, amelyek új megvilágításba helyezték a kvantumfizika jelenségeit. A gyakorlati alkalmazások széles köre is lehetségesnek tűnik, beleértve új anyagok létrehozását és innovatív elektronika gyártását. Geim és Novoselov 2010-ben Nobel-díjat kapott felfedezésükért. A grafént más kétdimenziós anyagok, például az átmenetifém-dikalkogenidek ( $\text{MoS}_2$  és társai) követték.

Kormányos Andor a kezdetektől fogva bekapcsolódott az átmenetifém-dikalkogenidek, valamint az egy- és többrétegű grafén tulajdonságainak vizsgálatába. Kutatásai fontos és aktuális kérdésekkel foglalkoztak, így megelőzte versenytársait, és jelentősen hozzájárult ehhez a gyorsan fejlődő területhez. Nevéhez fűződik a kétdimenziós átmenetifém-dikalkogenidek úgynevezett  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  elméletének kidolgozása (a tézispontok [3] publikációja, amelyre több mint 500-an hivatkoztak), a spin-pálya csatolás jelentőségének vizsgálata  $\text{MoS}_2$  egyrétegekben ([2] publikáció, több mint 300 hivatkozással), az egyrétegű átmenetifém-dikalkogenidekből kialakított kvantumpöttyökben a spin-pálya csatolás szerepének vizsgálata ([4] publikáció, kb. 200 hivatkozással). Mindez rámutat úttörő jellegű munkásságára az átmenetifém-dikalkogenidek viselkedésének elméleti megértésében. Értekezésében minderről részletesen beszámol, kiegészítve a témával kapcsolatos legújabb munkákkal.

Doktori disszertációját kifogástalan angol nyelven írta. A hivatkozásokkal együtt 119 oldalas értekezés 41 ábrát tartalmaz, amelyek többsége igényes. Az ábrák felirataiban azonban gyakran szűkszavúak, és a szövegben kell keresni a magyarázatot. A dolgozat első fejezete bevezeti az olvasót a témába, a második fejezet röviden ismerteti a dolgozat további részét és a megválaszolandó tudományos kérdéseket, majd a 3-8. fejezetekben saját eredményeit tárgyalja, kezdve a grafénnel, folytatva az átmenetifém-dikalkogenid (TMDC) rétegekkel, végül a heteroszerkezeteken kapcsolatos számításait mutatja be. Ezek az elmúlt 10 év munkáját ölelik fel. A 9. fejezetben ismerteti a tézispontokat, és köszönetnyilvánítással (10. fejezet) zár. Téziseit 7 pontban foglalja össze 10 publikált cikk eredményeiből. Ezek a publikációk kevés szerzővel készültek, amelyekben általában meghatározó (első vagy utolsó) szerző.

Sajnos több tényező is megnehezítette a bíráló feladatát. Az értekezés apró betűkkel íródott, és soronként 90-100 karaktert tartalmaz (így hosszabb, mint amennyit az oldalszám sugallna). Emellett túlzottan sok a rövidítés (több mint 32 rövidítés és van olyan mondat, amelyben 8 rövidítés is szerepel). Mindez nemcsak a megértést, hanem magát az olvasást is jelentősen akadályozta. Emellett hiányoztak a fizikai magyarázatok és érvek. Ettől eltekintve a dolgozat tudományosan megalapozott, bősséggel el van látva hivatkozásokkal, és összefoglaló műként hasznos.

Kutatásainak célja olyan effektív Hamilton-operátorok felírása ab initio és csoportelméleti módszereket felhasználva, amelyekkel tanulmányozható a spin-pálya csatolás, valamint a külső elektromos és mágneses terek összjátékának hatása kétdimenziós, egy- és többrétegű átmenetifém-dikalkogenidek és grafén anyagokban. Különösen a transzporttulajdonságok érdeklik, amelyek a Berry-görbület következményei, és a Hall-effektushoz hasonló válaszokhoz vezetnek. Továbbá vizsgált Shubnikov-de Haas oszcillációkat átmenetifém-dikalkogenidekben, összehasonlítva elméleti számolásait kísérleti eredményekkel. Az utóbbi időben figyelme középpontjába kerültek az olyan átmeneti átmenetifém-dikalkogenid/grafén heteroszerkezetek leírása, amelyekben a két réteg egymáshoz képest elforgatható. Az elforgatás függvényében vizsgálta az indukált spin-pálya csatolást és az általa előidézett elektronállapotokat.

A dolgozatban bemutatott tudományos eredményeket illetően a következő kérdéseket teszem fel:

- (1) A 3. fejezet a háromrétegű ABC szerkezetű grafént tárgyalja. A 3.1.1 fejezetben a K pont  $D_3$  kicsoportját ismerteti, amely két egydimenziós és egy kétdimenziós irreducibilis ábrázolással rendelkezik. Ez alapján osztályozza az állapotokat és írja fel az effektív Hamilton-operátort a 3.4 táblázatban. A táblázatból úgy tűnik, mintha az  $(\Gamma_{E_{1,1}}, \Gamma_{E_{1,2}})$  ill a  $(\Gamma_{E_{2,1}}, \Gamma_{E_{2,2}})$  hullámfüggvények másképp viselkednének annak ellenére, hogy mindketten a  $D_3$  csoport  $E$  kétdimenziós ábrázolásához tartoznak. Mennyiben változna a leírás, ha az időtükrözés szimmetriáját is figyelembe vennék?
- (2) A 4.2 ábra a átmenetifém-dikalkogenidek sáv szerkezetét mutatja be spin-pálya csatolás jelenlétében a K pontok közelében. Az ábrán a különböző sávokban a spinek iránya meghatározott és független a  $\mathbf{k}$  hullámszámtól. Mennyiben igaz ez, ha a teljes Brillouin-zónát tekintjük?
- (3) A 4.2 fejezet a Q-pontbeli  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  Hamilton-operátort tárgyalja. El tudunk képzelni olyan paramétereket, amikor a Q pontbeli diszperziók Dirac-pontokká válnak?
- (4) Az 5.3 ábrán 9 és 10 T között megváltozik a kísérletben mért vezetőképesség jellege. Van-e bármilyen magyarázat erre?
- (5) A (6.4) képletben a két kvantumpötty között alagutazó elektron megőrzi a völgy- kvantumszámot. Ez miből következik? A 6.3 ábrán bemutatott energiaszintek degenerációja mennyire stabil, milyen szimmetriák védik?
- (6) A 7.1 ábrán a kétrétegű  $\text{MoS}_2$  sáv szerkezetét ábrázolja két különböző módon egymásra helyezett szerkezetben (3R és 2H). A sáv szerkezetet tekintve úgy tűnik, hogy a Brillouin -zónabeli K pont közelében a két szerkezet azonos effektív Hamilton-operátorral írható le, amelyben az alacsonyabb szimmetriájú 3R szerkezet bizonyos paramétereinek az eltűnésével kapnánk meg a magasabb szimmetriájú 2H szerkezet elfajult sávjait. Elképzelhető-e ilyen egyesített leírás? (pl. a 7.3 képletben és a 7.5 képletben szereplő  $4 \times 4$  Hamilton mátrix első 3 sora és oszlopa lényegében megegyezik.)
- (7) Kormányos Andor az általában elfogadott egyes szám első személy helyett többes szám első személyben fogalmazta meg tézispontjait. Kérem ismertesse egyértelműen, hogy mit tekint saját eredményének a tézispontokból.

A dolgozatban több zavaró elírás, pontatlanság, át nem gondolt jelölés található, amelyek megnehezítik az olvasást. Néhány példa:

- Az (1.32) ill. (1.33) képlet fölött a dolgozatban az időtükrözés és a térbeli inverzió a sebességet  $\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \rightarrow -\mathbf{v}_n(\mathbf{k})$  szerint transzformálja, pedig valójában  $\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \rightarrow -\mathbf{v}_n(-\mathbf{k})$ .
- Az 1.15(a) ábra feliratán  $\mathbf{E}$  jelölné az elektromos teret, de az ábrán hiányzik, enélkül az ábra nehezen érthető. Ugyanígy hiányzik az elektromos tér az 1.16(b), valamint az 1.17(c), (d), és (g) ábrákról is.
- Az 1.4.3 fejezet utolsó bekezdésében szerepel a spin-pálya csatolás  $\mathcal{H}_{soc} = \lambda_{soc} \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}$  képlete után, hogy “This form of  $\mathcal{H}_{soc}$  is exact in atomic physics.”. Valójában ez nem egzakt, hanem egy közelítés, ami LS (vagy Russell-Saunders) csatolásként szokott szerepelni az irodalomban és könnyű atomok esetén használható. Nehéz atomoknál a  $jj$  csatolást szokták használni.
- A 3.2 fejezet elején a momentum  $p_x$  és  $p_y$  jelölése könnyen összetéveszthető a pályák jelölésével (a (3.1) képlet alatt szerepel a  $p_z$  pálya).
- A 7.1(b) és (d) ábrából kiindulva a  $\text{MoS}_2$  kristályszerkezetét nehéz dekódolni. Mit jelentenek a sárga és kék gömbök? Miért nincs kétszer annyi az egyik gömbből (S), mint a másiktól (Mo), a  $\text{MoS}_2$  képletnek megfelelően? A TMDC szerkezetét az 1.4 ábra sem segít megérteni, pedig ezek az anyagok a dolgozat fő szereplői.
- Inkonzisztens elnevezés ill. jelölés a 8. fejezetben: A “graphene/TMDC” feltételezem, hogy ugyanaz, mint a “MLG/TMDC” (pl. a 8.1 ábra és a 8.3 ábra feliratai). Hasonlóképpen, a (8.5) képletben szereplő  $\mathcal{H}^{sr}$  és a (1.4) képlettel megadott  $\mathcal{H}_{mlg}$  is talán ugyanazt jelölik.

Véleményem szerint a fentiek valamilyen módon történő figyelembevétele növelné a doktori értekezés használati értékét.

Összeségében a dolgozatban bemutatott tudományos munkát kimagaslónak, és a tézispontokban leírt valamennyi eredményt új tudományos eredménynek ismerem el, amelyek bőven teljesítik az MTA doktora cím megszerzésének követelményeit. Eredményei jelentősen hozzájárultak a kétdimenziós anyagok fizikájának megértéséhez és fejlődéséhez. A kérdéseimre adott válaszoktól függetlenül javaslom a dolgozat nyilvános vitára való kitűzését és Kormányos Andor részére az MTA doktora cím megítélését.



Penc Karlo  
MTA doktora