

Válaszok Dr. Penc Karlo kérdéseire

Szeretném megköszönni Dr. Penc Karlónak a bírálattal kapcsolatos munkáját, az dolgozat alapos átnézését és az érdekes kérdéseket. A Bíráló megjegyzéseire és kérdéseire vonatkozó válaszokat az alábbiakban foglaltam össze.

I. KÉRDÉSEK

(1) A 3. fejezet a háromrétegű ABC szerkezetű grafént tárgyalja. A 3.1.1 fejezetben a K pont D_3 kics csoportját 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 $(\Gamma_{E_{1,1}}, \Gamma_{E_{1,2}})$ illetve a $(\Gamma_{E_{2,1}}, \Gamma_{E_{2,2}})$ hullámfüggvények másképp viselkednének annak ellenére, hogy mindkettő a D_3 csoport E kétdimenziós ábrázolásához tartoznak. Mennyiben változna a leírás, ha az időtükrözés szimmetriáját is figyelembe vennék?

Mint az a 1. ábrán látható, mely a dolgozat 3.4 táblázatát mutatja, pl a $\lambda_{1/3}^{E_1} = \langle \Gamma_{E_{1,1}} | \mathcal{H}_{soc} | \Gamma_{A_1} \rangle$ és $-\lambda_{1/3}^{E_2} = \langle \Gamma_{E_{2,1}} | \mathcal{H}_{soc} | \Gamma_{A_1} \rangle$ mátrixelemek különbözni látszanak egy előjelben.

H_{soc}^{ABC}	$\Psi_{\Gamma_{A_1}}$	$\Psi_{\Gamma_{A_2}}$	$\Psi_{\Gamma_{E_{1,1}}}$	$\Psi_{\Gamma_{E_{1,2}}}$	$\Psi_{\Gamma_{E_{2,1}}}$	$\Psi_{\Gamma_{E_{2,2}}}$
$\Psi_{\Gamma_{A_1}}$	0	$\lambda_{1/2} s_z$	$\lambda_{1/3}^{E_1} s_+$	$\lambda_{1/3}^{E_1} s_-$	$-\lambda_{1/3}^{E_2} s_+$	$\lambda_{1/3}^{E_2} s_-$
$\Psi_{\Gamma_{A_2}}$	$\lambda_{1/2} s_z$	0	$-\lambda_{2/3}^{E_1} s_+$	$\lambda_{2/3}^{E_1} s_-$	$\lambda_{2/3}^{E_2} s_+$	$\lambda_{2/3}^{E_2} s_-$
$\Psi_{\Gamma_{E_{1,1}}}$	$\lambda_{1/3}^{E_1} s_-$	$-\lambda_{2/3}^{E_1} s_-$	0	0	$\lambda_{3/3}^z s_z$	$\lambda_{3/3} s_+$
$\Psi_{\Gamma_{E_{1,2}}}$	$\lambda_{1/3}^{E_1} s_+$	$\lambda_{2/3}^{E_1} s_+$	0	0	$\lambda_{3/3} s_-$	$\lambda_{3/3}^z s_z$
$\Psi_{\Gamma_{E_{2,1}}}$	$-\lambda_{1/3}^{E_2} s_-$	$\lambda_{2/3}^{E_2} s_-$	$\lambda_{3/3}^z s_z$	$\lambda_{3/3} s_+$	0	0
$\Psi_{\Gamma_{E_{2,2}}}$	$\lambda_{1/3}^{E_2} s_+$	$\lambda_{2/3}^{E_2} s_+$	$\lambda_{3/3} s_-$	$\lambda_{3/3}^z s_z$	0	0

Table 3.4: Intrinsic spin-orbit Hamiltonian H_{soc}^{ABC} in the symmetry basis at the K point of the BZ.

FIG. 1: A dolgozat 3.4 táblázata. Az ABC rétegsorrendű háromrétegű grafén spin-pálya csatolási mátrixa.

A táblázatban megjelenő előjelek megértéséhez újra elvégeztem a bemutatott eredményekhez vezető számolásokat. Ennek során kiderült, hogy a 3.4 táblázatban látható Γ_{A_1} és Γ_{A_2} állapotokhoz tartozó spin-pálya csatolási mátrixelemek felcserélve szerepeltek, illetve ezen kívül még egy elírást is találtam. Ezek kijavítása után a spin-pálya csatolás mátrixa a I. táblázatban látható. Fontos kihangsúlyozni, hogy a dolgozat 3. fejezetének főbb megállapításait és az első tézispontot ezek a javítások érdemben nem befolyásolják.

Tekintsük pl $\langle \Gamma_{E_{1,1}} | \mathcal{H}_{soc} | \Gamma_{A_1} \rangle$ és $\langle \Gamma_{E_{2,1}} | \mathcal{H}_{soc} | \Gamma_{A_1} \rangle$ mátrixelemeket. A $(\Gamma_{E_{1,1}}, \Gamma_{E_{1,2}})$ illetve $(\Gamma_{E_{2,1}}, \Gamma_{E_{2,2}})$ hullámfüggvény párok a K pontban, $E = \gamma_1$ és $E = -\gamma_1$ energiánál található degenerált állapotoknak felelnek meg (lásd a dolgozat 1.3(c). ábráját). A $|\Gamma_{A_1}\rangle$, $|\Gamma_{E_{1,1}}\rangle$ és $|\Gamma_{E_{2,1}}\rangle$ állapotok hullámfüggvénye a K pontban megtalálható a dolgozat 3.3 táblázatában (a jelölések és a paraméterek a doktori dolgozat 3. fejezetében vannak definiálva):

$$|\Psi_{\Gamma_{A_1}}\rangle = |\overline{\Psi}_{1,0,0}^{1,3}\rangle + \frac{3}{\sqrt{2}} \frac{V_{pd\pi}}{\delta\varepsilon_{pd} - \gamma_2} |\Psi_{2,1,-1}^{3,1}\rangle + \frac{\tilde{V}_{pd\sigma}}{\delta\varepsilon_{pd} - \tilde{\gamma}_2} |\Psi_{2,0,0}^{1,3}\rangle, \quad (1a)$$

$$|\Psi_{\Gamma_{E_{1,1}}}\rangle = |\Psi_{1,0,0}^{2,1}\rangle + \frac{1}{\delta\varepsilon_{pd} + \gamma_1} \left[\frac{V_{pd\sigma}}{\sqrt{2}} |\overline{\Psi}_{2,0,0}^{2,1}\rangle - \frac{3V_{pd\pi}}{2} |\overline{\Psi}_{2,1,-1}^{1,2}\rangle \right], \quad (1b)$$

$$|\Psi_{\Gamma_{E_{2,1}}}\rangle = |\overline{\Psi}_{1,0,0}^{2,1}\rangle + \frac{1}{\delta\varepsilon_{pd} - \gamma_1} \left[\frac{3V_{pd\pi}}{2} |\Psi_{2,1,-1}^{1,2}\rangle - \frac{V_{pd\sigma}}{\sqrt{2}} |\Psi_{2,0,0}^{2,1}\rangle \right]. \quad (1c)$$

H_{soc}^{ABC}	$\Psi_{\Gamma_{A_1}}$	$\Psi_{\Gamma_{A_2}}$	$\Psi_{\Gamma_{E_{1,1}}}$	$\Psi_{\Gamma_{E_{1,2}}}$	$\Psi_{\Gamma_{E_{2,1}}}$	$\Psi_{\Gamma_{E_{2,2}}}$
$\Psi_{\Gamma_{A_1}}$	0	$\tau\lambda_{1/2}s_z$	$-\lambda_{1/3}s_+^{\tau}$	$\lambda_{1/3}s_-^{\tau}$	$\lambda_{1/3}s_+^{E_2}$	$\lambda_{1/3}s_-^{E_2}$
$\Psi_{\Gamma_{A_2}}$	$\tau\lambda_{1/2}s_z$	0	$\lambda_{2/3}s_+^{E_1}$	$\lambda_{2/3}s_-^{E_1}$	$-\lambda_{2/3}s_+^{E_2}$	$\lambda_{2/3}s_-^{E_2}$
$\Psi_{\Gamma_{E_{1,1}}}$	$-\lambda_{1/3}s_-^{E_1}$	$\lambda_{2/3}s_-^{E_1}$	0	$\lambda_{3/3}s_+^z$	$\tau\lambda_{3/3}s_z$	0
$\Psi_{\Gamma_{E_{1,2}}}$	$\lambda_{1/3}s_+^{E_1}$	$\lambda_{2/3}s_+^{E_1}$	$\lambda_{3,3}s_-$	0	0	$\tau\lambda_{3/3}s_z$
$\Psi_{\Gamma_{E_{2,1}}}$	$\lambda_{1/3}s_-^{E_2}$	$-\lambda_{2/3}s_-^{E_2}$	$\tau\lambda_{3/3}s_z$	0	0	$\lambda_{3/3}s_+^z$
$\Psi_{\Gamma_{E_{2,2}}}$	$\lambda_{1/3}s_+^{E_2}$	$\lambda_{2/3}s_+^{E_2}$	0	$\tau\lambda_{3/3}s_z$	$\lambda_{3/3}s_-^z$	0

TABLE I: Az ABC rétegsorrendű grafén H_{soc}^{ABC} spin-pálya csatolás Hamiltonijának mátrixelemei τK ($\tau = \pm 1$) pontban. Itt $s_{x,y,z}$ Pauli matrixokat jelöl és $s_{\pm}^{\tau} = \frac{1}{2}(s_x \pm i\tau s_y)$.

A $|\Psi_{\Gamma_{E_{1,1}}}\rangle$ és $|\Psi_{\Gamma_{E_{2,1}}}\rangle$ explicit alakját tekintve látható, hogy ezek hasonló tagokból állnak, de mégis különböző hullámfüggvények. Ennek megfelelően a $\langle \Gamma_{E_{1,1}} | \mathcal{H}_{soc} | \Gamma_{A_1} \rangle$ és $\langle \Gamma_{E_{2,1}} | \mathcal{H}_{soc} | \Gamma_{A_1} \rangle$ mátrixelemek is különbözhetnek. Ezek számolásakor a $|\Psi_{1,0,0}^{2,1}\rangle$ és $|\Psi_{1,0,0}^{2,1}\rangle$ függvények tagok, melyek p_z atomi pályákat tartalmaznak, nem adnak járulékot, a spin-pálya mátrixelemek a [...] zárójelek között található tagokból erednek. Figyelembe véve a hullámfüggvények fentebb megadott konkrét alakját, a I. táblázatban szereplő $\lambda_{1/3}^{E_1}$ -t és $\lambda_{1/3}^{E_2}$ -t explicit kiszámíthatjuk:

$$\lambda_{1/3}^{E_1} = \frac{3\sqrt{3}}{2} \xi_d \frac{V_{pd\pi}}{(\delta\varepsilon_{pd} + \gamma_1)} \left(\frac{\tilde{V}_{pd\sigma}}{\delta\varepsilon_{pd} - \tilde{\gamma}_2} + \frac{V_{pd\sigma}}{\delta\varepsilon_{pd} - \gamma_2} \right), \quad (2a)$$

$$\lambda_{1/3}^{E_2} = \frac{3\sqrt{3}}{2} \xi_d \frac{V_{pd\pi}}{(\delta\varepsilon_{pd} - \gamma_1)} \left(\frac{\tilde{V}_{pd\sigma}}{\delta\varepsilon_{pd} - \tilde{\gamma}_2} - \frac{V_{pd\sigma}}{\delta\varepsilon_{pd} - \gamma_2} \right). \quad (2b)$$

Látható, hogy $\lambda_{1/3}^{E_1}$ és $\lambda_{1/3}^{E_2}$ értéke általában különbözik. Az mátrixelemek előjel különbségének nem tudok mélyebb fizikai jelentést tulajdonítani.

A disszertáció 3.4 táblázatának eredményei a K völgyben érvényesek. Az időtükrözött állapotok a $-K$ völgyben találhatóak. A völgy szabadsági fokot egy τ indexszel figyelembe véve a spin-pálya csatolási mátrixot a I. táblázat mutatja.

“(2) A 4.2 ábra a átmenetifém-dikalkogenidek sávszerkezetét 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?”

A dolgozat 1.4 ábrája ad áttekintés az egyrétegű átmenetifém-dikalkogenidek sávszerkezetéről a Brillouin zóna néhány magas szimmetriájú irányában, lásd alább az 2. ábrát. A K pont körül felismerhető a doktori dolgozat 4.2 ábráján is látható spin-pálya felhasadása a sávoknak.

Mivel az kristályrács nem rendelkezik inverziós szimmetriával, ezért általában igaz, hogy a sávok felhasadhatnak a spin-pálya csatolás hatására. Mint a 2. ábrán látható, ez alól csak a $\Gamma - M$ irány a kivétel, illetve a Γ pont egy környezetében a spin-pálya felhasadás nagyon kicsi, bármely irányt is tekintjük (magában a Γ pontban zérus). Ezekben az esetekben a lokális szimmetria nem engedi spin-pálya felhasadást. A Brillouin zóna egy általános pontjában a lokális szimmetria C_{1h} pontcsoporttal írható le, lásd az II táblázatot (a pontcsoportokkal kapcsolatos jelölések a Ref. [9]-t követik). Ebben az spin szabadsági fokra ható s_z operátor az A' teljesen szimmetrikus irreducibilis reprezentáció szerint transzformálódik. Ez alapján várható, hogy a sávok általában felhasadnak a spin-pálya csatolás miatt és a

	C_{1h}	E	σ_h
A'	$k_x^2, k_y^2, k_x k_y$	s_z, k_x, k_y	1 1
A''		z, s_x, s_y	1 -1

TABLE II: A C_{1h} csoport karaktertáblája.

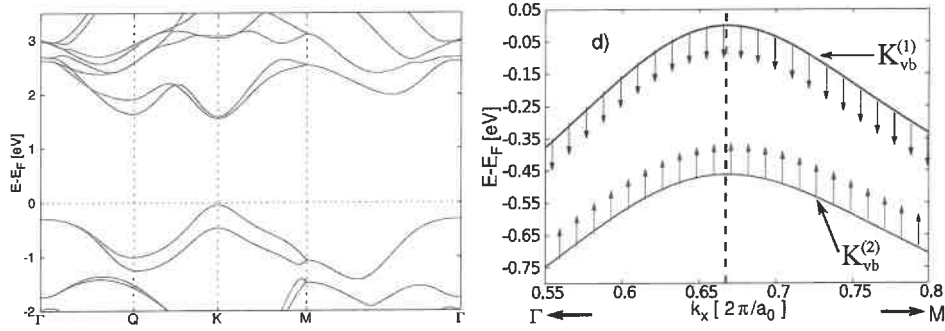


FIG. 2: Bal oldali ábra: egyrétegű WS₂ vegyérték és vezetési sávjának diszperziója a Brillouin zóna $\Gamma - K - M - \Gamma$ pontok mentén történő bejárása esetén. A számolás sűrűségfüggvény elmélet használatával készült, amely figyelembe vette a spin-pálya csatolást is. Jobb oldali ábra: egyrétegű WSe₂ vegyértéksávjának diszperziója a K pont körül. Színes nyilak jelzik a spin polarizáció irányát. Az ábrák a Ref. [8]-ből kerültek adaptálásra.

hullámszámtól függetlenül a spin-polarizáció merőleges lesz a réteg síkjára. A 2. ábra bal oldali részábráján a sávok felhasadása jól látható, de alacsony szimmetriájú pontokban véletlen sávdegenerációk előfordulnak.

“(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?”

A $\Gamma - K$ vonal mentén található Q pontokban a lokális szimmetriát a C_{1h} pontcsoport írja le. Ennek csak egydimenziós irreducibilis ábrázolásai vannak, lásd az II. táblázatot. Ebből következően olyasféle Dirac pont, mint az egyrétegű grafénban, itt biztosan nem lehet, hiszen a grafén esetében a K pontnál fellépő degeneráció szoros kapcsolatban van azzal, hogy az adott sávok a D_{3h} pontcsoport kétdimenziós E' irreducibilis ábrázolásával jellemezhetőek.

Figyelembe véve a C_{1h} szimmetriát és a hullámszámban legfeljebb másodrendű tagokat tekintve, a sávok diszperzióját leíró általános a kifejezés a következő:

$$H_Q^{\tau,s} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_{Q,x}^{\tau,s}} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_{Q,y}^{\tau,s}} + \frac{\hbar^2 k_x k_y}{2m_{Q,xy}^{\tau,s}} + \Delta_Q s_z \tau_z + a_1 k_x s_z + a_2 k_y s_z + b_1 k_x \tau_z + b_2 k_y \tau_z + E_Q. \quad (3)$$

Mint látható, ebben szerepelhetnek a hullámszámban lineáris tagok. Ennek alapján anizotróp Dirac ponthoz hasonló diszperzió felléphet, amennyiben két sáv között, melyeket eltérő, $\sigma_h = 1$ és $\sigma_h = -1$ kvantumszámmal jellemezhetőek, véletlen degeneráció jelenik meg és az effektív tömegek olyan nagyok, hogy a (3) egyenletben megjelenő, hullámszámban másodrendű tagok elhanyagolhatóak.

“(4) Az 5.3 ábrán 9 T és 10 T között megváltozik a kísérletben mért vezetőképesség jellege. Van-e bármilyen magyarázat erre?”

A σ_{xx} longitudinális mágneses vezetőképesség Shubnikov-de Haas oszcillációi mindig egy lassan változó vezetőképesség komponens (háttér) tetején jelennek meg. Ez látható egy nagyobb mágneses tér tartományon a 3(a) ábrán. Ezt a lassan változó komponenst általában el szokták távolítani és csak az oszcilláló tagra fókuszálnak, amelyet σ_{osc} -val jelöltem a 5.3-as ábrán, lásd a 3(b) ábrát. Az 5.3-as ábrán az látható, hogy ennek a háttér vezetőképességnek az értéke 9T és 10T között megugrik, ezért az oszcillációk nem a $\sigma_{osc} = 0$ körül történnek.

A vezetőképességre kapható elméleti eredményt a dolgozat (5.6) egyenlete mutatja:

$$\sigma_{xx}/\sigma_0 = \frac{2}{1 + (\omega_{vb}^{(1)} \tau_{sc}^{(1)})^2} \left[1 - \frac{4(\omega_{vb}^{(1)} \tau_{sc}^{(1)})^2}{1 + (\omega_{vb}^{(1)} \tau_{sc}^{(1)})^2} e^{-\frac{\pi}{(\omega_{vb}^{(1)} \tau_{sc}^{(1)})}} \cos\left(\frac{2\pi E_F}{\hbar \omega_{vb}^{(1)}}\right) \mathcal{A}_1 \mathcal{B} + \frac{g_{eff}^{(i)} \mu_B B_z}{2 E_F} \frac{4(\omega_{vb}^{(1)} \tau_{sc}^{(1)})^2}{1 + (\omega_{vb}^{(1)} \tau_{sc}^{(1)})^2} e^{-\frac{\pi}{(\omega_{vb}^{(1)} \tau_{sc}^{(1)})}} \sin\left(\frac{2\pi E_F}{\hbar \omega_{vb}^{(1)}}\right) \mathcal{A}_2 \mathcal{B} \right]. \quad (4)$$

Itt $\omega_{vb}^{(1)} = \frac{eB_z}{m_{vb}^{(1)}}$ az a ciklotron frekvencia, mely a spin-pálya csatolás miatt felhasadt vegyérték sávok közül a magasabb energiájúhoz tartozik (a kísérletben alkalmazott dőpolási értékek esetén csak ez játszik szerepet). A (4) egyenlet jobb oldalán található kifejezés első tagja írja le a simán változó vezetőképesség komponensét. Ez a B_z mágneses térnek

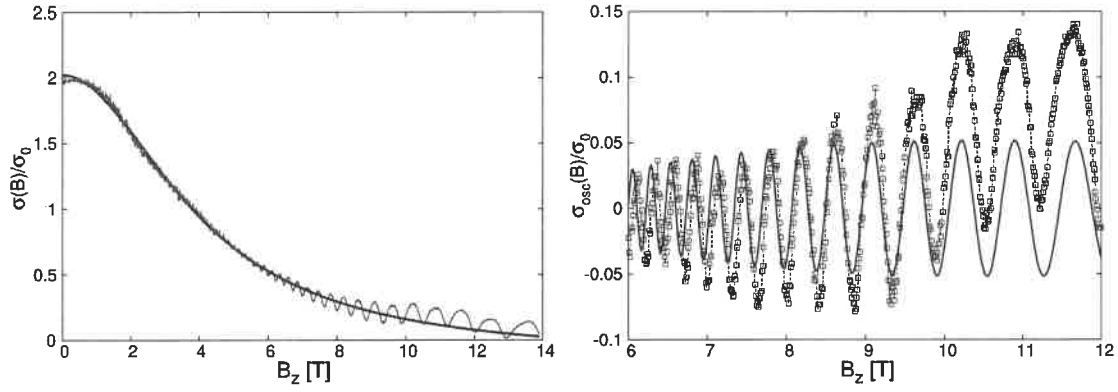


FIG. 3: a) p-dóolt egyrétegű WSe₂-ben mért σ_{xx} longitudinális vezetőképesség (piros) és az elméleti eredmény illesztése a vezetőképesség nem oszcilláló részére (kék). b) A dolgozat 5.3-as ábrája. A mért σ_{xx} Shubnikov - de Haas oszcillációi (piros) és az illesztéssel kapott elméleti eredmény (kék). A kísérleti eredmények a Ref. [3]-ból származnak.

egy $\sim \frac{2}{1+c*B_z^2}$ alakú függvénye, ahol c egy konstans. A 3(a) ábrán kék vonallal annak az eredménye látható, amikor a mérésekre a 0-6 T tartományon egy $h(x) = c_1 + \frac{c_2}{1+c_3*x^2}$ függvényt illesztettem (a kapott illesztési paraméterek: $c_1 = -0.142$, $c_2 = 2.162$, $c_3 = 0.062$). A pirossal jelzett eredmény a 3(b) ábrán lényegében a 3(a) ábra piros és kék eredményeinek a különbségeként adódik. Mint a 3(a) látható, a mért értékek elég jól követik az illesztett $h(x)$ függvényt, bár kisebb eltérések előfordulnak és az eltérés talán legszembetűnőbb a 10-12 T tartományban. Ennek okára nincs magyarázatom.

“(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?”

A kérdést Dr. Legeza Örs hasonló tartalmú kérdésével együtt, egy külön dokumentumban válaszoltam meg.

(6) A 7.1 ábrán a kétrétegű MoS₂ 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 4×4 Hamilton mátrix első 3 sora és oszlopa lényegében megegyezik.)

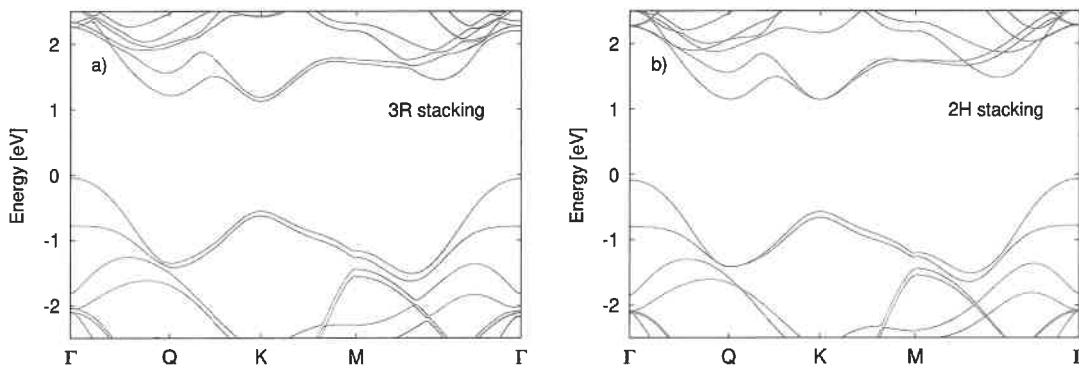


FIG. 4: a) 3R és b) 2H szerkezetű kétrétegű MoS₂ sáv szerkezet DFT számolásokból, a spin-pálya csatolás elhanyagolásával (Ref. [4]).

A 3R és a 2H szerkezetű kétrétegű MoS₂ sáv szerkezet valójában hasonló, különösen, ha első lépésben eltekintünk a spin-pálya csatolástól, lásd a 4. ábrát. A doktori dolgozatban a K pont körüli sáv szerkezetet tárgyaltam részletesebben. A 3R szerkezet esetén (a K pontban a hullámszám kics csoportja a C₃ pontcsoport) a vegyérték

és vezetési sávokat leíró $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ Hamilton operátor:

$$H_K^{3R} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{cb}^b & \gamma_3 q_+ & \gamma_{cc} q_- & 0 \\ \gamma_3 q_- & \varepsilon_{vb}^b & 0 & \gamma_{vv} q_- \\ \gamma_{cc} q_+ & 0 & \varepsilon_{cb}^t & \gamma_3 q_+ \\ 0 & \gamma_{vv} q_+ & \gamma_3 q_- & \varepsilon_{vb}^t \end{pmatrix}, \quad (5)$$

míg a 2H szerkezet esetén (a K pontban a hullámszám kics csoportja a D_3 pontcsoport):

$$H_K^{2H} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{cb} & \gamma_3 q_+ & \gamma_{cc} q_- & 0 \\ \gamma_3 q_- & \varepsilon_{vb} & 0 & t_{\perp} \\ \gamma_{cc} q_+ & 0 & \varepsilon_{cb} & \gamma_3 q_- \\ 0 & t_{\perp} & \gamma_3 q_+ & \varepsilon_{vb} \end{pmatrix}. \quad (6)$$

A (5) és (6) egyenleteket tekintve látható, hogy az első három sor és oszlop valóban nagyon hasonló. A 2H szerkezet inverzió szimmetrikus, aminek egyik következménye, hogy csak egyetlen ε_{cb} és ε_{vb} paraméter jelenik meg a (6) $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ Hamilton operátorban. A két legalacsonyabb energiájú vezetési sáv pedig degenerált lesz, ahogy az a 4(b) ábrán látható. A 3R szerkezet viszont alacsonyabb szimmetriájú és degenerált sávok nem jelenhetnek meg (lásd a 4(a) ábrát). Az első két vezetési sáv energiája a K pontban különböző értéket vesz fel, amelyet a ε_{cb}^b és ε_{cb}^t paraméterek jelölnek, és hasonló igaz a vegyérték sávokra is.

További fontos különbség található a (5) és (6) negyedik sorában (oszlopában). A 3R esetben az egyes rétegekhez tartozó vegyérték sávok szétcsatolódnak a K pontban ($\gamma_{vv} q_{\pm} = 0$), és az energiájuk eltérő lesz (ε_{vb}^t illetve ε_{vb}^b). A 2H szerkezetben viszont a két réteg vegyértéksávja a hullámszámtól függetlenül csatolódik (ezt írja le t_{\perp} paraméter) és a kétrétegű MoS_2 legfelső két vegyértéksáv lényegében az egyes rétegekhez tartozó vegyértéksávok kötő és lazító kötés-kombinációiként tekinthető. A hasonló sáv szerkezet a 4(a) és 4(b) ábrán tehát eltérő okokra vezethető vissza. Ezért a Bíráló által felvetett egyesített leírás véleményem szerint nem lehetséges.

“(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 kérdést Dr. Legeza Örs hasonló tartalmú megjegyzésével együtt, egy külön dokumentumban válaszoltam meg.

II. TOVÁBBI MEGJEGYZÉSEK/KÉRDÉSEK

- 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 $\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \rightarrow -\mathbf{v}_n(-\mathbf{k})$.

Egyetértek a Bírálóval, elírás történt.

- Az 1.15(a) ábra feliratán \mathbf{E} jelölné az elektromos teret, de az ábrán hiányzik, enélkül az ábra nehezen érthető. Ugyanúgy hiányzik az elektromos tér az 1.16(b), valamint az 1.17(c), (d), és (g) ábrákról is.

A kísérletekben sokszor a töltésáram nagysága és iránya az a mennyiség, amelyet változtatnak, ez történt pl. az 1.16(b) ábrával kapcsolatban hivatkozott kísérleti munkában is (Ref. [5]). Valószínűleg ebből ered, hogy pl a spin Hall effektussal kapcsolatban a Ref.[6]-ban található 3-as ábrán is az áramirányt tüntették fel és nem az elektromos tér irányát. Ez az ábra inspirálta a dolgozatban található 1.17 ábrát is. Az anomális sebességről szóló elméleti bevezetőben viszont az \mathbf{E} elektromos tér jelenik meg, erre történik utalás a 1.15(a) ábra aláírásában, az 1.15(a) ábrán viszont az I_c töltésáram iránya van feltüntetve. Egyetértek a Bírálóval, hogy a dolgozat 1.15-1.17 ábráin szerencsésebb lett volna az \mathbf{E} elektromos teret használni.

- 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.

Az idézett mondat fő célja az volt, hogy megmutassa, a Dirac egyenletből kapható $\mathcal{H}_{soc} = \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\nabla V(\mathbf{r}) \times \hat{\mathbf{p}}) \cdot \mathbf{s}$ operátor átírható a $\mathcal{H}_{soc} = \lambda_{so} \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}$ alakba, amennyiben a $V(\mathbf{r})$ potenciál centrális, vagyis csak $|\mathbf{r}|$ -től függ (lásd pl 3.1.34 egyenletet a Ref. [7]-ben). Erre egyébként van is utalás a mondat második, a Bíráló által nem idézett részében. A mondatnak és az öt tartalmazó bekezdésnek nem volt célja a több elektront tartalmazó atomok spektrumának

értelmezését segítő LS vagy jj csatolás tárgyalása. Ilyen értelemben az “atomic physics” kifejezés használata valóban vezethetett félreértéshez.

- 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 p_z illetve a p_x , p_y jelölések különböző alfejezetekben fordulnak elő, ami talán segít abban, hogy ne legyenek könnyen összetéveszthetőek. A Bíráló által észrevételezett jelölés teljesen megszokott és elterjedt a grafén irodalomban.

- A 7.1(b) és (d) ábrából kiindulva a MoS_2 kristályszerkezetét nehéz dekódolni. Mit jelentenek a sárga és kék gömbök? Miért nincs kétszer annyi az egyik gömbből (S), mint a másikkól (Mo), a MoS_2 képletnek megfelelően? A TMDC szerkezetét az 1.4 ábra sem segít megérteni, pedig ezek az anyagok a dolgozat fő szereplői.

Érdeemes talán a dolgozat 1.4 ábrájával kezdeni, melynek releváns része a 5. ábrán látható. Erről szerepel egy rövid leírás a dolgozatban: “Similarly to graphene, they have a hexagonal lattice structure, where the planes of the X atoms are separated by a plane of metal atoms, see Fig. 1.4(a)”. Egyetérték a Bírálóval, hogy az 1.4 ábra aláírásában érdemes lett volna elmondani, hogy a mit jelölnek a sárga, illetve a középen látható sötét színű gömbök, ezt most a 5. ábra alatt pótoltam.

Ha a 5(a) ábrán látható kristályszerkezetre pl. felülről tekintünk rá, akkor a felül elhelyezkedő kalkogén atom eltakarja az alul található, míg a fém atom látható marad. Végeredményben egy olyan hatszöges rácsot láthatnánk, amely emlékeztet a grafén rácsára, csak a rácspontokban kalkogén, illetve átmenetifém atomok vannak. Habár az elemi cellában található atomok nem egy síkban, hanem három, egymás feletti síkban helyezkednek el, a kristályrács szimmetriái számomra könnyebben átláthatóak a 5(b) ábrán. Ezért a dolgozatban az egyrétegű átmenetifém dikalkogénidekre úgy gondoltam, mintha a dolgozat 1.4(b) ábráján (5(b) ábra) látható síkbeli hatszöges (grafén) ráccsal rendelkeznének. Valóban félreértéshez vezethet az, hogy az 1.4(a) és 1.4(b) ábrákon a fém atomok nem ugyanazzal a színnel vannak jelölve, és az 1.4 ábra aláírásában talán egy kicsit részletesebben kellett volna elmagyarázni az 1.4(a) és 1.4(b) ábra kapcsolatát.

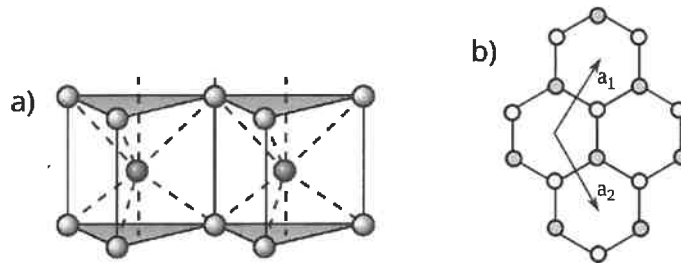


FIG. 5: a) A doktori dolgozat 1.4(a) ábrája, mely az egyrétegű átmenetifém dikalkogénidek kristályrácsát mutatja. Sárga gömbök jelölik a kalkogén (S vagy Se) atomokat, melyek egy-egy síkban az elemi cella tetején és alján helyezkednek el. Középen találhatóak a fém (Mo vagy W) atomok, melyek barna színű gömbökkel vannak jelölve. Az ábra a Ref. [2]-ből került adaptálásra. b) A dolgozat 1.4(b) ábrája. Felülről tekintve az a) ábrán látható kristályszerkezetre, egy hatszögrácsot láthatunk, melynek rácspontjaiban kalkogén (sárga) és átmenetifém (türkiz) atomok vannak. \mathbf{a}_1 és \mathbf{a}_2 jelölik a választott rácsvektorokat.

Az egyrétegű átmenetifém dikalkogénidek egy síkbeli hatszögrácsra való egyszerűsítését használtam a dolgozat 7.1(b) és 7.1(d) ábráján is, ahol a két különböző rétegsorrendű kétrétegű átmenetifém dikalkogénid kristályrácsát ábrázoltam vázlatosan (lásd alább a 6. ábrát). A 7.1 ábra aláírásában valóban nincs egy visszautalás az 1.4 ábrára, ami segíthetne az ábra megértésében (az eredeti publikációban [4] található ilyen utalás). Mint a 6(a) ábrán látható, a 3R rétegsorrend esetén a felső és az alsó rétegben levő átmenetifém atomok környezete eltér, ezért különböző színekkel vannak jelölve. A 2H rétegsorrend esetén viszont a felső és az alsó rétegben levő átmenetifém atomok környezete azonos, ezért ugyanolyan színnel jelöltem őket.

- 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}^{gr} és a (1.4) képlettel megadott \mathcal{H}_{mlg} is talán ugyanazt jelölik.

Valóban, a “graphene/TMDC” a 8.1 ábrán ugyanarra a típusú rendszerre utal, mint a “MLG/TMDC” a 8.3 ábrán. A \mathcal{H}^{gr} és \mathcal{H}_{mlg} is ugyanazt jelölik, erre egyébként van utalás a (8.5) egyenlet alatt, ahol \mathcal{H}^{gr} explicit is definiálva van.

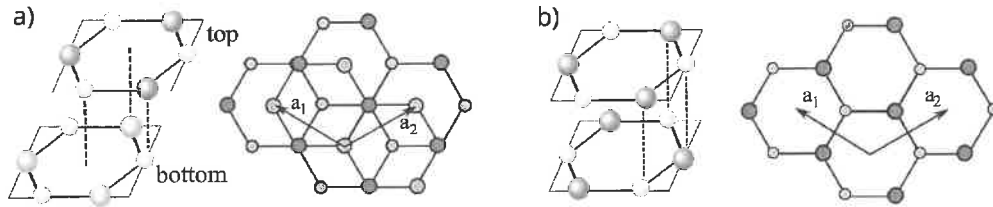


FIG. 6: a) a doktori dolgozat 7.1(b) ábrája. Bal oldali ábra: 3R rétegzettségű kétrétegű átmenetifém dikalkogénid vázlatos kristályszerkezete. Az egyes rétegeket egy-egy hatszögrács jelzi. Sárga gömbök mutatják azokat a rácshelyeket, ahol kalkogén atomok találhatóak, a türkiz és kék gömbök pedig az átmenetifém atomokat jelzik. Jobb oldali ábra: a kristályszerkezet felülnézetből. b) a doktori dolgozat 7.1(d) ábrája. Bal oldali ábra: 2H rétegzettségű kétrétegű átmenetifém dikalkogénid vázlatos kristályszerkezete. Az egyes rétegeket egy-egy hatszögrács jelzi. Sárga gömbök mutatják azokat a rácshelyeket, ahol kalkogén atomok találhatóak, kék gömbök pedig az átmenetifém atomokat jelzik. Jobb oldali ábra: a kristályszerkezet felülnézetből. a_1 és a_2 jelölik a rácsvektorokat. Az ábra a Ref. [4]-ből került adaptálásra.

Egyetértek, szerencsésebb lett volna végig ugyanazt a jelölést használni.

-
- ¹ Andor Kormányos and Guido Burkard, *Intrinsic and substrate induced spin-orbit interaction in chirally stacked trilayer graphene*, Phys. Rev. B **87** 045419 (2013).
- ² Qing Hua Wang, Kourosh Kalantar-Zadeh, Andras Kis, Jonathan N. Coleman, and Michael S. Strano. *Electronics and optoelectronics of two-dimensional transition metal dichalcogenides*. Nature Nanotechnology **7**, 699 (2012).
- ³ Babak Allahzad, Hema C. P. Movva, Kyoungwan Kim, Stefano Larentis, Takashi Taniguchi, Kenji Watanabe, Sanjay K. Banerjee, and Emanuel Tutuc, *Shubnikov-de Haas Oscillations of High-Mobility Holes in Monolayer and Bilayer WSe₂: Landau Level Degeneracy, Effective Mass, and Negative Compressibility*, Phys. Rev. Lett. **116** 086601 (2016).
- ⁴ Andor Kormányos, Viktor Zólyomi, Vladimir I. Fal'ko, and Guido Burkard. *Tunable Berry curvature and valley and spin Hall effect in bilayer MoS₂*. Phys. Rev. B **98** 035408 (2018).
- ⁵ Elyse Barré, Jean Anne C. Incorvia, Suk Hyun Kim, Connor J. McClellan, Eric Pop, H.-S. Philip Wong, and Tony F. Heinz, *Spatial Separation of Carrier Spin by the Valley Hall Effect in Monolayer WSe₂ Transistors*. Nano Letters **19**, 770 (2019).
- ⁶ Jairo Sinova, Sergio O. Valenzuela, J. Wunderlich, C. H. Back, and T. Jungwirth. *Spin Hall effects*. Rev. Mod. Phys. **87** 1213 (2015).
- ⁷ Sólyom Jenő, *A modern szilárdtest-fizika alapjai I*, ELTE Eötvös Kiadó (2009).
- ⁸ A. Kormányos, G. Burkard, M. Gmitra, J. Fabian, V. Zólyomi, N. D. Drummond, and V. I. Fal'ko, *$\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ theory for two-dimensional transition metal dichalcogenide semiconductors*, 2D Materials **2**, 022001 (2015).
- ⁹ Mildred S. Dresselhaus, Gene Dresselhaus, Ado Jorio, *Group Theory (Application to the Physics of Condensed Matter)*, Springer Verlag Berlin Heidelberg, 2010.

Budapest, 2024. január 23.

Kormányos Andor

Válaszok Dr. Legeza Örs és Dr. Penc Karlo hasonló tartalmú kérdéseire

I. TÖBBES SZÁM HASZNÁLATA A TÉZISPONTOKBAN

Dr. Legeza Örs a következő megjegyzést tette a benyújtott pályázati anyaggal kapcsolatban:

"A bevezetésben a szerző ismerteti a kutatás előzményeit, kitér a különböző csoportokkal folytatott kollaborációs munkákra is, de a disszertáció későbbi fejezeteiben minden esetben elválasztja saját publikációik eredményeit a szakirodalomban már publikált eredményektől. Külön említésre került az is, hogy a DFT számításokat nem a szerző végezte el. Ugyanakkor sajnálatos módon, az MTA szabályzata alapján a tézispontokat egyes szám első személyben kell megfogalmazni, így az angolul írt tézispontokban szereplő "We" nem elfogadható. Javasolt ennek mielőbbi javítása."

Kapcsolódik ehhez a Bíráló következő megjegyzése is:

"Az egyes fejezetekben az összefoglalásban a "We" használata nem teszi lehetővé az elért eredmények esetében a szerző saját hozzájárulásának elkülönítését."

Hasonló tartalmú kérdést tett fel Dr. Penc Karlo is:

"(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 doktori dolgozat alapjául szolgáló munkák mind többszerzős közlemények. A fejezetek végén található összefoglalók, illetve a tézispontok megfogalmazásakor a többes szám első személy használata (az angol szövegben "We") érződött természetesnek, mert i) egyes publikációk esetén lényegében témavezetőként vettem részt a munkában és, ii) a doktori dolgozatot a publikációk külföldi társszerzői is olvashatják, akiktől az MTA Fizika osztály szabályzata szerint nem kell lemondó nyilatkozatot kérni.

Azonban az MTA Doktori Szabályzat, III.A fejezet, 23.§ (4) pontja szerint a "...A téziszövegnek az kérelmező önálló, új tudományos eredményeit kell összefoglalnia". Ezt figyelembe véve a többes szám első személy használata a tézispontokban félreértésre adhat okot. Köszönöm a bírálóknak, hogy felhívták erre a figyelmet, hiszen az doktori eljárás szakmai integritásának megőrzése mindannyiunk közös érdeke.

Az MTA doktori szabályzata szerint a tézispontok utólagos, a benyújtás utáni javítására nincs lehetőség.

Szeretném kijelenteni, hogy az eredeti tézispontokban megfogalmazott eredményeket mind saját eredménynek tekintem. Az egyértelműség kedvéért az alábbiakban ismét felsorolom a disszertáció tézispontjait.

Saját tudományos eredmények pontokba szedett felsorolása

1. Meghatároztam a spin-pálya csatolás általános alakját ABC rétegsorrendű háromrétegű grafénra. Csoportelméleti megfontolások és a szoros kötésű közelítés felhasználásával azt találtam, hogy ehhez a d_{xz} , d_{yz} és d_{z^2} atomi pályákat is figyelembe kell venni a szokásosan használt p_z atomi pályák mellett. Megmutattam, hogy az ABC grafénban összesen hét együtthatóval jellemezhető a spin-pálya csatolás. Négy ezek közül az ABC grafén egyes rétegei közötti spin-pálya csatolást írja le, egy pedig magasabb energiákon található, egyébként négy-szeres sávdegeneráció felhasadását okozza. A maradék két spin-pálya csatolási együttható annak köszönhető, hogy az alsó és a felső grafén rétegben található két szénatom különböző módon kapcsolódik a többi rétegben levő szénatomokhoz, és ez kihat a spin-pálya csatolásra is. A hét csatolási együtthatót kifejeztem az atomi pályák energiájának és hullámfüggvény átfedéseinek segítségével. Felhasználva korábbi ismert eredményeket a kétrétegű grafénra, ez lehetővé tette, hogy becslést adjak az ABC grafén spin-pálya csatolási együtthatóinak értékére. A kapott eredmények felhasználásával meghatároztam annak az effektív Hamilton operátornak az alakját, amely a rendszer alacsony energiás tulajdonságait írja le. Megmutattam, hogy az eredeti Hamilton operátorban a rétegek közötti spin-pálya csatolást leíró együtthatók az alacsony energiás Hamilton operátorban a vezető rendű hullámszám függő tagon keresztül jelennek meg.

Az eredmények a [1] publikációban jelentek meg.

2. Meghatároztam a $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ Hamilton operátor általános alakját egyrétegű átmenetifém dikalkogenidekre a Brillouin zóna $\pm K$, Γ , Q és M pontjaiban. Ennek során felhasználtam azt, hogy megállapítottam a tiltott sáv alatti és

feletti néhány sáv szimmetria tulajdonságait. A $\pm K$ pont esetén egy hét sávból álló $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ modellt állítottam fel, amely figyelembe veszi a valencia és a vezetési sáv csatolódását, illetve ezen sávoknak további, energiában távolabb elhelyezkedő sávokhoz való kapcsolódását. Ebben a hét sávot tartalmazó bázisban meghatároztam a spin-pálya csatolás mátrixelemeit. Mivel rendszer nem rendelkezik inverziós szimmetriával, a spin-pálya csatolás következtében az energiasávok felhasadnak és spin-polarizáltak lehetnek a Brillouin zóna általános pontjaiban. A kapott eredmények segítségével egy olyan effektív modellt vezettem le, amely jól leírja a valencia és a vezetési sáv diszperzióját a $\pm K$ völgyekben. Ráműtattam arra, hogy az eredeti, hét sávot tartalmazó modellben meghatározott spin-pálya csatolási mátrix nemdiagonális elemei segítenek megérteni a vezetési sáv spin-pálya felhasadásának részleteit az effektív modellben. A sávok szimmetria tulajdonságaira támaszkodva és feltételezve, hogy a rétegre merőleges külső elektromos tér is jelen van, meghatároztam a Bychkov-Rashba féle spin-pálya csatolás Hamilton operátorának általános alakját. Megmutattam, hogy ez a Hamilton operátor két tag összegeként írható fel, amelyek közül az egyik tag újdonságot jelent a III-V félvezetők esetéhez képest.

Az eredmények a [2–4] publikációkban jelentek meg.

3. Felhasználva az egyrétegű átmenetifém dikalkogenidek esetén a $\pm K$ völgyre kapott $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ Hamiltonit és az ún. Luttinger átírást, meghatároztam a külső mágneses térben létrejövő Landau szintek spektrumát. Azt találtam, hogy a K és $-K$ völgyekben levő elektronállapotokhoz tartozó Landau szintek nem lesznek degeneráltak. A völgy állapotok degenerációjának felhasadása a mágneses térben lineáris és egy effektív völgy g -faktorral jellemezhető. Megmutattam, hogy a völgy g -faktor hogyan számolható ki a $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ Hamiltoniban megjelenő sáv-szerkezet paraméterek segítségével. A Landau szintekre kapott eredményeket felhasználtam arra, hogy a σ_{xx} hosszirányú vezetőképesség Shubnikov-de Haas oszcillációira végezzek számításokat. Megmutattam, hogy a völgy állapotok degenerációjának felhasadása hasonlóan befolyásolja σ_{xx} -t mint a Zeeman-féle spin felhasadás a kétdimenziós elektrongázban. A felállított modellben a teljes σ_{xx} -t az egyes spin-felhasadt sávokból jövő járulékok összegzésével számítottam ki. Kísérleti eredményekkel való összehasonlítás azt mutatta, hogy ezek az eredmények, melyeket egyrészesce képből kaptam, hasznos kiindulópontot jelentenek az egyrétegű MoS₂ mintán végzett Shubnikov-de Haas mérések értelmezésében. Azt találtam, hogy a 1 K-1.7 K hőmérsékleti tartományban az elektron-elektron kölcsönhatás figyelembe vehető oly módon, hogy az egyrészesce képből kapott völgy g -faktor és a spin-pálya csatolás értékekhez képest ezek renormalizált értékét használom. Alacsonyabb hőmérsékleteken ($T < 1K$) azonban a mérések eredményei világosan jelezték, hogy az egyrészesce kép nem elégséges és erős elektron-elektron kölcsönhatási effektusok lépnek fel.

Az eredmények a [5] és [6] publikációkban jelentek meg.

4. Tanulmányoztam az egyrétegű átmenetifém dikalkogenidekben kapuelektrodákkal létrehozható kvantumpöttyök tulajdonságait. Elsőként egy forgási szimmetrikus kvantumpöttyöt tekintettem a nem-kölcsönható határesetben és meghatároztam a kötött állapotok energiáját a mágneses tér függvényében. Ráműtattam, hogy a mágneses tér miatt a völgy állapotok energiája ebben az esetben is nem-degenerált lesz és ezt felhasználva a legalacsonyabb energiájú Kramer-pár felhasználható mint spin-völgy qubit. Kettős kvantumpöttyöket is tanulmányoztam az (1, 1) töltés konfigurációban. A modellben feltételeztem, hogy mind a két kvantumpöttyben elégséges egy-egy energiaszint figyelembe vétele, továbbá, hogy az elektronok közötti Coulomb tasztítás leírható egy Hubbard Hamiltonival. Azt vizsgáltam, hogy a völgy szabadsági fok, az erős spin-pálya csatolás, a Coulomb kölcsönhatás, a kvantumpöttyök energiaszintjei közötti különbség és a kvantumpöttyök közötti alagutazás erőssége hogyan befolyásolja a kettős kvantumpötty alacsony energiás spektrumát. Abban a határesetben, amikor a Coulomb kölcsönhatás domináns a spin-pálya csatoláshoz képest, egy olyan effektív Hamiltonit vezettem le, amely az (1, 1) töltéskonfiguráció által megengedett minden állapotot leír, és meghatároztam az alapállapotot. Az ellenkező határesetben, amikor a spin-pálya csatolás nagyobb mint a Coulomb tasztítás, megmutattam, hogy az alacsony energiás alteret négy állapot feszíti ki. Ebben az alterben kombinált spin-völgy operátorokat definiáltam. Ezek segítségével kifejezve az alterben ható Hamilton operátort azt találtam, hogy ez formálisan olyan formába írható, mint két lokalizált spin kölcsönhatását leíró Heisenberg féle kicserélődési Hamilton operátor.

Az eredmények a [4] és [7] publikációkban jelentek meg.

5. Tanulmányoztam a Berry görbületet és az általa létrejövő völgy és spin Hall vezetőképességet kétrétegű átmenetifém dikalkogenidekben. Konkrét példaként kétrétegű MoS₂-t tekintettem. Első lépésként meghatároztam a $\pm K$ völgyben érvényes $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ Hamiltonit. Ennek segítségével megmutattam, hogy a Berry görbülethez az egyes rétegeken belüli és a két réteg közötti csatolások is adnak járulékot. A rétegek közötti csatolás miatt a Berry görbület hangolható a rétegekre merőleges elektromos tér segítségével. Ez egy ritka példáját jelenti annak, hogy egy anyag bizonyos topológikus tulajdonsága változtatható legyen egy külső paraméter hangolásával. Azt is megmutattam, hogy a két réteg egymáshoz képesti elhelyezkedése fontos a Berry görbület szempontjából, ezért a tanulmányozott 2H és 3R típusú kétrétegű átmenetifém dikalkogenidek

Berry görbülettel kapcsolatos tulajdonságai eltérnek. Vizsgáltam a Berry görbületen alapuló völgy és spin Hall effektust és kiszámoltam az ezekhez tartozó σ_{xy}^{vH} és σ_{xy}^{sH} vezetőképességeket kétrétegű MoS₂ esetén. Azt találtam, hogy ezek a vezetőképességek szintén hangolhatóak merőleges elektromos térrel. Megmutattam, hogy a 2H típusú kétrétegű MoS₂ esetén σ_{xy}^{vH} vezető rendben lineárisan függ a két réteg közötti potenciálkülönbségtől, míg σ_{xy}^{sH} értéke akkor is véges lehet, ha nincs jelen egy, a rétegekre merőleges elektromos tér. Megmutattam, hogy külső elektromos tér jelenlétében a σ_{xy}^{vH} és σ_{xy}^{sH} előjele megváltozik amikor a rétegek közötti potenciálkülönbség nagyobb lesz mint a spin-pálya csatolás értéke a vezetési sávban. Ez emlékeztet az ún. Chern szigetelőkre, amelyek esetén az előjelváltozás a topológikus tulajdonságok megváltozását jelzi. Azonban rámutattam, hogy kétrétegű átmenetifém dikalkogenideknél a σ_{xy}^{vH} és σ_{xy}^{sH} értéke nem kvantált és nem válnak topológikus szigetelőkké az átmenet során.

Az eredmények a [8] publikációban jelentek meg.

6. Elméleti leírását adtam a grafénban keltett spin-pálya csatolás mikroszkópikus mechanizmusának grafén/átmenetifém dikalkogenid heteroszerkezetek esetén. Ehhez a két réteg energiasávjai közötti alagutazást vettem alapul és egy olyan perturbációs közelítést használtam, amelyben az egyes rétegek közötti csatolás egy kis paraméter. Azt találtam, hogy kétfajta spin-pálya kölcsönhatás kelthető a grafén rétegben, melyeket völgy-Zeeman és Bychkov-Rashba típusú spin-pálya csatolásnak neveznek. A grafén réteg saját spin-pálya csatolása viszont nem növelhető meg az átmenetifém dikalkogenid réteg segítségével. Megmutattam, hogy a völgy-Zeeman típusú keltett spin-pálya csatolás az átmenetifém dikalkogenid réteg spin-pálya csatolás mátrixának diagonális elemeitől függ. Eredményeim szerint a keltett Bychkov-Rashba típusú spin-pálya csatolás egy három lépésből álló folyamattal magyarázható. Az első lépés a grafén és az átmenetifém dikalkogenid közötti, spin-független virtuális alagutazás, melyet második lépésben az átmenetifém dikalkogenid réteg bizonyos energiasávjai közötti, a spint átbillentő alagutazás követ. Végül az elektron egy spin-független alagutazás után visszatér a grafén rétegbe. Rámutattam, hogy a grafén és az átmenetifém dikalkogenid energiasávok egymáshoz képesti energiakülönbsége jelentősen befolyásolja a keltett λ_{vZ} és λ_R spin-pálya csatolási együtthatók nagyságát. Az általam használt elméleti keret lehetővé teszi, hogy a két réteg közötti elfordulási szög hatását is vizsgáljuk a keltett spin-pálya csatolás nagyságára. Numerikus számolások eredményei szerint az elfordulási szög változtatásával a keltett spin-pálya csatolás jelentősen megnövelhető. Ezt az átmenetifém dikalkogenid réteg sávszerkezetének jellegzetességeivel magyaráztam.

Az eredmények a [9] és [10] publikációban jelentek meg.

7. Megmutattam, hogy grafén/átmenetifém dikalkogenid heteroszerkezetben a keltett Bychkov-Rashba típusú spin-pálya csatolást általános esetben két paraméter jellemzi: az egyik a λ_R csatolási amplitúdó, a másik pedig egy spin elforgatással kapcsolatos ϑ_R szög. A ϑ_R értéke maga is függ a két réteg közötti θ elfordulási szögtől és a grafén réteg energiasávjainak spin-polarizációját befolyásolja. Ha $\vartheta_R + \theta$ értéke megegyezik a π egész számú többszörösével, akkor a grafén állapotok spin-polarizációja a Fermi felület érintőjének irányába mutat. Ha ez a feltétel nem teljesül a $\vartheta_R + \theta$ értékére, akkor a spin-polarizációnak a Fermi felületre merőleges komponense is van. Rámutattam, hogy az egyes átmenetifém dikalkogenid réteghez tartozó ϑ_R fázisfaktorok interferencia effektusokhoz vezethetnek átmenetifém dikalkogenid/grafén/átmenetifém dikalkogenid három rétegből álló heteroszerkezet esetén. Ez az interferencia mind a keltett Bychkov-Rashba spin-pálya csatolás $\lambda_R^{(tls)}$ erősségét, mind a $\vartheta^{(tls)}$ spin elforgatási szögét befolyásolja. A $\lambda_{vZ}^{(tls)}$ és $\lambda_R^{(tls)}$ spin-pálya csatolási együtthatók rétegek közötti csavarási szögtől való függésének detektálására a háromrétegű heteroszerkezetekben végrehajtott a spin élettartam mérések alkalmasak lehetnek.

Az eredmények a [10] publikációban jelentek meg.

II. KETTŐS KVANTUM PÖTTY ÁTMENETIFÉM DIKALKOGENIDEKBEN

Dr. Legeza Örs a következő kérdést tette fel:

3. *“Ísmert, hogy az elektron korrelációt leíró félig töltött Hubbard-modell erős csatolású határesetében ekvivalens a feles spinű Heisenberg-moddal. Kérdésem, hogy a 6. fejezetben az egy- és két kvantum pöttyök vizsgálatánál a Heisenberg-moddalhoz hogyan lehet eljutni szimmetria megfontolások alapján figyelembe véve a spin-pálya, Coulomb- és völgy szabadsági fokok energiaskáláit is?”*

Hasonló tartalmú kérdést tett fel Dr. Penc Karlo is:

(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?

A két kvantumpöttyöt tartalmazó rendszert a dolgozat 6.2 fejezete tárgyalja, ennek végén jelenik meg egy olyan eredmény, amely formálisan hasonló a Heisenberg modellhez. A feltételezés szerint mindkét kvantumpöttyben egy-egy energiaszint van, amely azonban akár négyszeresen is degenerált lehet ($2(\text{spin}) \times 2(\text{völgy})$ szabadsági fok).

A kérdés tárgyalásához a fermionos rendszerek hullámfüggvényének antiszimmetrikusságát kell felhasználni. Tekintve először az $(1, 1)$ töltés konfigurációt (mind a két kvantumpöttyben 1-1 elektron van), a két elektront leíró teljes hullámfüggvény térbeli része lehet szimmetrikus vagy antiszimmetrikus is (dolgozatban használt jelöléssel a térbeli koordinátának a $j = \{L, R\}$ index felel meg). A teljes hullámfüggvény antiszimmetrikusságához még figyelembe kell venni a spin és völgy szabadsági fokokat leíró hullámfüggvény szimmetriáját is. Az $(1, 1)$ töltés konfiguráció esetén a szimmetrikus (antiszimmetrikus) térbeli hullámfüggvényhez is található antiszimmetrikus (szimmetrikus) hullámfüggvény a spin és völgy szabadsági fokokban. Így összesen 16 állapot lehetséges, melyek a I. táblázatban láthatóak. A $(2, 0)$ illetve $(0, 2)$ töltéskonfiguráció esetén a térbeli hullámfüggvény szimmetriája adott, a teljes hullámfüggvény antiszimmetrikus voltát a spin és völgy szabadsági fokokat leíró hullámfüggvény biztosítja. A $(2, 0)$ $[(0, 2)]$ töltéskonfiguráció esetén 6 antiszimmetrikus hullámfüggvény található, lásd szintén a I. táblázatot. Összesen tehát a $16 + 6 + 6 = 28$ dimenziós a Hilbert tér.

$H_U + H_\varepsilon$	-2Δ	0	$+2\Delta$	
(1, 1)-altér, antiszimmetrikus				
0	$ n_-\rangle$	$ T_+S\rangle$ $ T_-S\rangle$ $ ST_+\rangle$ $ ST_-\rangle$	$ n_+\rangle$	
	(1, 1)-altér, szimmetrikus			
	0	$ \bar{n}_-\rangle$	$ T_+T_0\rangle$ $ T_-T_0\rangle$ $ T_0T_+\rangle$ $ T_0T_-\rangle$	$ \bar{n}_+\rangle$ $ T_+T_+\rangle$ $ T_-T_-\rangle$
		(2, 0)-altér		
$U + \varepsilon$		$ n_-\rangle_{(2,0)}$	$ T_+S\rangle_{(2,0)}$ $ T_-S\rangle_{(2,0)}$ $ ST_+\rangle_{(2,0)}$ $ ST_-\rangle_{(2,0)}$	$ n_+\rangle_{(2,0)}$
		(0, 2)-altér		
	$U - \varepsilon$	$ n_-\rangle_{(0,2)}$	$ T_+S\rangle_{(0,2)}$ $ T_-S\rangle_{(0,2)}$ $ ST_+\rangle_{(0,2)}$ $ ST_-\rangle_{(0,2)}$	$ n_+\rangle_{(0,2)}$

TABLE I: Szimmetrikus és antiszimmetrikus állapotok a spin és a völgy szabadsági fokokban. A következő jelölést használtam: $|s_V s_S\rangle_{(n_L, n_R)}$, ahol (n_L, n_R) a töltéskonfiguráció, és s_V (s_S) jelzi a völgy (spin) szabadsági fok szimmetriáját, amely lehet szingulett (S) vagy pedig triplett (T_-, T_0, T_+). Ezen állapot definíciójáért lásd a II táblázatot. Az $(1, 1)$ töltéskonfigurációban a $|n_\pm\rangle$ és $|\bar{n}_\pm\rangle$ állapotok definíciója: $|n_\pm\rangle = (|ST_0\rangle \pm |T_0S\rangle)/\sqrt{2}$ és $|\bar{n}_\pm\rangle = (|T_0T_0\rangle \pm |SS\rangle)/\sqrt{2}$. A baloldali oszlop a $H_U + H_\varepsilon$ Hamiltoni matricselemeit mutatja, lásd Eq. (1). A három jobboldali oszlop a spin-pálya csatolás járulékát jelzi (-2Δ , 0 és $+2\Delta$), lásd a H_Δ operátort, melyet a Eq. (2) definiál. A táblázat eredetileg a Ref. [7]-ben jelent meg.

	$ S\rangle$	$ T_-\rangle$	$ T_0\rangle$	$ T_+\rangle$
Spin	$\frac{ \uparrow\downarrow\rangle - \downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$	$ \downarrow\downarrow\rangle$	$\frac{ \uparrow\downarrow\rangle + \downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$	$ \uparrow\uparrow\rangle$
Völgy	$\frac{ K\bar{K}\rangle - \bar{K}K\rangle}{\sqrt{2}}$	$ \bar{K}\bar{K}\rangle$	$\frac{ K\bar{K}\rangle + \bar{K}K\rangle}{\sqrt{2}}$	$ KK\rangle$

TABLE II: A szingulett és triplett állapotok definíciója spin és völgy szabadsági fokokra. \bar{K} a $-K$ völgyet jelöli. A táblázat eredetileg a Ref. [7]-ben jelent meg.

Első lépésben hanyagoljuk el a spin-pálya csatolást a rendszerben! Ekkor a két kvantumpöttyből álló rendszer Hamilton operátora

$$H_{\text{tot}} = H_U + H_\varepsilon + H_t \quad (1)$$

alakban adható meg. A következő jelöléseket használjuk. A betöltésszám operátort a $n_j = \sum_{\tau=K,K'} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} c_{j\tau\sigma}^\dagger c_{j\tau\sigma}$ képlet definiálja, ahol $c_{j\tau\sigma}^\dagger$ és $c_{j\tau\sigma}$ fermionos keltő és eltüntető operátorok, $j = \{L, R\}$ jelöli a két kvantumpöttyöt, $\tau = \{K, \bar{K}\}$ a völgy index és $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$ spin index. A H_{tot} -ban megjelenő egyes tagok: $H_U = \frac{U}{2} \sum_{j=L,R} n_j(n_j-1)$ ($U > 0$) a Hubbard Hamiltoni, $H_\varepsilon = \frac{\varepsilon}{2}(n_L - n_R)$ írja le a külső kapufeszültség hatására a két kvantumpötty energiaszintjei között létrehozott esetleges energiakülönbséget (elhangelés), $H_t = \sum_{\tau,\sigma} (t c_{R\sigma\tau}^\dagger c_{L\sigma\tau} + \text{h.c.})$ (t valós szám) pedig a kvantumpöttyök közötti alagutazást adja meg.

Mint látható, H_t esetében feltételezzük, hogy a spin és a völgy kvantumszámok nem változnak az átugrás során. A völgy kvantumszám megmaradása az egyrétegű átmenetifém dikalkogenidek sávszerkezetének figyelembe vételével válik érthetővé. A releváns állapotok a K és $-K$ völgyekben találhatóak, melyek egymástól távol vannak a hullámszám térben. Ezért a kapuelektrodák által létrehozott, atomi távolságokon lassan változó külső potenciál nem okoz átszóródást a völgyek között a két kvantumpötty közötti átmenet során. A kristályrácsban található ponthibák vezethetnek völgyek közötti átszóráshoz, ezeket a folyamatokat elhanyagoljuk. Hasonlóan, ha feltételezzük, hogy a mágneses szennyezők koncentrációja kicsi, ezek nem okoznak spin átfordulást a két kvantumpötty közötti átugráskor. A spin-pálya csatolás alakja az egyrétegű átmenetifém dikalkogenidekben olyan (lásd (2) egyenlet), hogy szintén nem vezet spin átforduláshoz.

Az I. táblázatban látható bázisfüggvények segítségével ezek után kiszámolhatóak a H_{tot} mátrixelemei. Véges mátrixelem csak azonos szimmetriájú térbeli hullámfüggvénnyel rendelkező állapotok között lehet. Ez azt jelenti, hogy a (2,0) és (0,2) töltéskonfigurációjú állapotok az (1,1) állapotok közül csak az antiszimmetrikus spin és völgy hullámfüggvénnyel rendelkezőkkel (lásd I. táblázat) csatolódnak. A csatolás miatt ezen állapotok energiája megváltozik az (1,1) töltéskonfiguráció szimmetrikus spin és völgy hullámfüggvénnyel rendelkező állapotaihoz képest. Az energiaváltozás a J kicserélődési energiával írható le. A továbbiakban végig feltételezzük, hogy a $|t| \ll |U \pm \varepsilon|$. Ekkor a J értéke megkapható a H_{tot} mátrixán végrehajtott Schriffer-Wolf transzformáció segítségével: $J = \frac{4|t|^2 U}{U^2 - \varepsilon^2}$. Ebben a lépésben tehát az találjuk, hogy az (1,1) töltéskonfigurációt leíró 16 állapot közül 6-nak az energiája $-J$ értékkel lecsökken a másik 10-hez képest. Ez látható a 1(a) ábrán.

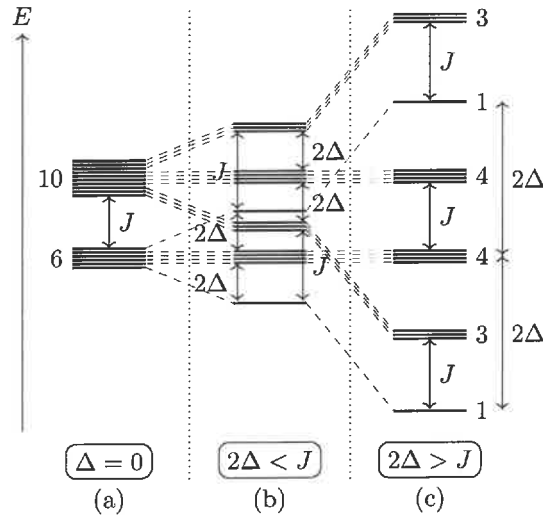


FIG. 1: Az (1,1) töltéskonfiguráció energiaszintjeinek sematikus ábrája a $4|\Delta| < U - |\varepsilon|$ feltétel teljesülése esetén. Vízszintes vonalak jelzik az energiaszinteket, degenerált energiaszintek csoportja mellett látható szám jelzi a degeneráció fokát. A piros vonal az antiszimmetrikus $|n_-\rangle$, a kék szín pedig a szimmetrikus $|\bar{n}_-\rangle$, $|T_+T_-\rangle$, $|T_-T_+\rangle$ állapotokat jelöli. (a) ha a spin-pálya csatolás nulla ($\Delta = 0$), akkor a magasabb (alacsonyabb) energiájú állapotok spin-völgy hullámfüggvénye szimmetrikus (antiszimmetrikus). A két csoport energiája a J kicserélődési energiában különbözik. (b) $\Delta \neq 0$ és $2\Delta < J$ esetén a szimmetrikus és az antiszimmetrikus állapotok is három csoportra hasadnak fel. Az alapállapot a $|n_-\rangle$ lesz, az első 4 gerjesztett állapot antiszimmetrikus. (c) Ha $2\Delta > J$, akkor definiálható egy négydimenziós altér, amelyben az alapállapot a $|n_-\rangle$, a gerjesztett állapotok pedig a $|\bar{n}_-\rangle$, $|T_+T_-\rangle$, $|T_-T_+\rangle$. Az ábra a Ref. 7-ből került adaptálásra.

A következő lépésben figyelembe vesszük a spin-pálya csatolást a kvantumpöttyökben, és az egyszerűség kedvéért feltételezzük, hogy ennek nagysága megegyezik a két kvantumpöttyben. A spin-pálya csatolásra a tömbi anyag

sávszerkezetének $\pm K$ pontjánál érvényes alakot választjuk. Ezt figyelembe véve a vonatkozó Hamilton operátor

$$H_{\Delta} = \Delta \sum_{j,\tau,\sigma} c_{j\tau\sigma}^{\dagger} (\tau_z)_{\tau\tau} (\sigma_z)_{\sigma\sigma} c_{j\tau\sigma} \quad (2)$$

alakba írható. Itt bevezettük a völgy szabadsági fok terében ható τ_z Pauli mátrixot, és a spin szabadsági fok terében értelmezett σ_z Pauli mátrixot. Az I. táblázatban szereplő bázisban H_{Δ} -nak csak diagonális mátrixelemei vannak, melyek értéke szintén megtalálható ebben a táblázatban.

Amennyiben a $4|\Delta| < U - |\varepsilon|$ feltétel teljesül, akkor az $(1, 1)$ töltéskonfiguráció minden állapotának alacsonyabb az energiája, mint a $(2, 0)$ és $(0, 2)$ állapotoké, és ezért az $(1, 1)$ konfiguráció jelenti az alacsony energiás alteret. Megmutatható, hogy mivel feltételeztük a spin és a völgy kvantumszám megmaradását a kvantumpöttyök közötti átugrás során, a J kicserélődési energia kifejezése nem változik az előzőekben tárgyalt, a spin-pálya csatolást elhanyagoló esethez képest. H_{Δ} hatására a szimmetrikus spin-völgy hullámmfüggvényű állapotok eredetileg 10-szeres degenerációja felhasad két 3-szoros és egy 4-szeres degenerációjú csoportra. Az eredetileg 6-szoros degeneráció az antiszimmetrikus spin-völgy hullámmfüggvényű állapotokra szintén felhasad, két nem-degenerált állapotra és egy 4-szeres degenerációjú csoportra. Ez látható a 1(b),(c) ábrákon. Az alapállapot a nem-degenerált $|n_{-}\rangle$ lesz, ennek energiája 2Δ -val csökken a spin-pálya csatolás hatására. A legalacsonyabb gerjesztett állapotok degenerációja és szimmetriája függ attól, hogy a $2\Delta < J$ vagy $2\Delta > J$ feltétel teljesül-e. Amennyiben $2\Delta < J$, akkor az első 4 (degenerált) gerjesztett állapot spin-völgy hullámmfüggvénye antiszimmetrikus (1(b) ábra). Ha $2\Delta > J$, akkor az első 3 (degenerált) gerjesztett állapot spin-völgy hullámmfüggvénye szimmetrikus (kék vonalak a 1(c) ábrán).

Mint az 1(c) ábrán látható, a $2\Delta > J$ esetben definiálható egy 4 dimenziós altér, amelyben az alapállapot és az első három gerjesztett állapot található. Érdemes explicit kiírni ehhez az altérhez tartozó állapotok hullámmfüggvényének völgy és spin szabadsági fokokat tartalmazó tagját:

$$|T_{+}T_{-}\rangle = |K_L \downarrow; K_R \downarrow\rangle, \quad (3a)$$

$$|T_{-}T_{+}\rangle = |\bar{K}_L \uparrow; \bar{K}_R \uparrow\rangle, \quad (3b)$$

$$|\bar{n}_{-}\rangle = (|K_L \downarrow; \bar{K}_R \uparrow\rangle + |\bar{K}_L \uparrow; K_R \downarrow\rangle)/\sqrt{2} \quad (3c)$$

$$|n_{-}\rangle = (|K_L \downarrow; \bar{K}_R \uparrow\rangle - |\bar{K}_L \uparrow; K_R \downarrow\rangle)/\sqrt{2}, \quad (3d)$$

ahol $|\tau_1\sigma_1; \tau_2\sigma_2\rangle = c_{L\tau_1\sigma_1}^{\dagger} c_{R\tau_2\sigma_2}^{\dagger} |0\rangle$. A (3a)-(3d) közül $|n_{-}\rangle$ az alapállapot, $|T_{+}T_{-}\rangle$, $|T_{-}T_{+}\rangle$, $|\bar{n}_{-}\rangle$ pedig a degenerált gerjesztett állapotok. Könnyen látható, hogy bevezetve a

$$|\tilde{\uparrow}\rangle \equiv |\bar{K} \uparrow\rangle, \quad |\tilde{\downarrow}\rangle \equiv |K \downarrow\rangle, \quad (4)$$

“effektív spin- $\frac{1}{2}$ ” állapotokat, a (3) egyenlet átírható a

$$|\tilde{T}_{-}\rangle = |\tilde{\downarrow}; \tilde{\downarrow}\rangle, \quad (5a)$$

$$|\tilde{T}_{+}\rangle = |\tilde{\uparrow}; \tilde{\uparrow}\rangle, \quad (5b)$$

$$|\tilde{T}_0\rangle = (|\tilde{\uparrow}; \tilde{\downarrow}\rangle + |\tilde{\downarrow}; \tilde{\uparrow}\rangle)/\sqrt{2}, \quad (5c)$$

$$|\tilde{S}\rangle = (|\tilde{\downarrow}; \tilde{\uparrow}\rangle - |\tilde{\uparrow}; \tilde{\downarrow}\rangle)/\sqrt{2} \quad (5d)$$

alakba. Ez alapján nem meglepő, hogy megfelelően definiált $\tilde{\mathbf{S}}_L$, $\tilde{\mathbf{S}}_R$ operátorok segítségével ezen a 4 dimenziós alacsony energiás altéren ható effektív Hamilton operátor (konstans tagoktól eltekintve) a

$$H_{\text{eff}} = -J\tilde{\mathbf{S}}_L \cdot \tilde{\mathbf{S}}_R \quad (6)$$

kifejezéssel adható meg, mely formailag úgy néz ki, mint a Heisenberg spin Hamilton operátor. A (2) egyenlet után már bevezettük a völgy (spin) térben ható τ_z (σ_z) Pauli mátrixot. Hasonló módon, vezessük be a τ_x és σ_x , σ_y Pauli mátrixokat is. Közvetlen számolással megmutatható, hogy ezek segítségével az $\tilde{\mathbf{S}}_j$ operátorok a következő módon definiálhatóak:

$$\tilde{S}_{z,j} = \frac{1}{2}\sigma_{z,j}, \quad \tilde{S}_{x,j} = \frac{1}{2}\tau_{x,j}\sigma_{x,j}, \quad \tilde{S}_{y,j} = \frac{1}{2}\tau_{x,j}\sigma_{y,j}. \quad (7)$$

Mint látható, az $\tilde{\mathbf{S}}_j$ operátorok definíciójában megjelenik a völgy szabadsági fok, tehát nem egyszerű spin operátorok.

A (6) levezetése során feltételeztük, hogy $4|\Delta| < U - |\varepsilon|$. Mivel az egyrétegű átmenetifém dikalkogenidekben Δ értéke akár ~ 10 meV, míg az eddigi kísérletekben $U \approx 2$ meV, ezért ez a feltétel általában nem teljesül. Megmutatható

azonban, hogy ha $4|\Delta| > U - |\varepsilon|$ és $2\Delta > J$ (ez utóbbi teljesül, ha a kvantumpöttyök közötti elhangolásra igaz a $\varepsilon \ll U$ feltétel), akkor a rendszer alacsony energiás állapotát továbbra is a (6) Hamilton operátorral írhatjuk le.

-
- ¹ A. Kormányos and G. Burkard, Phys. Rev. B **87**, 045419 (2013), URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.87.045419>.
- ² A. Kormányos, V. Zólyomi, N. D. Drummond, P. Rakyta, G. Burkard, and V. I. Fal'ko, Phys. Rev. B **88**, 045416 (2013), URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.88.045416>.
- ³ A. Kormányos, G. Burkard, M. Gmitra, J. Fabian, V. Zólyomi, N. D. Drummond, and V. Fal'ko, 2D Materials **2**, 022001 (2015), URL <http://stacks.iop.org/2053-1583/2/i=2/a=022001>.
- ⁴ A. Kormányos, V. Zólyomi, N. D. Drummond, and G. Burkard, Phys. Rev. X **4**, 011034 (2014), URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevX.4.011034>.
- ⁵ A. Kormányos, P. Rakyta, and G. Burkard, New Journal of Physics **17**, 103006 (2015), URL <http://stacks.iop.org/1367-2630/17/i=10/a=103006>.
- ⁶ R. Pisoni, A. Kormányos, M. Brooks, Z. Lei, P. Back, M. Eich, H. Overweg, Y. Lee, P. Rickhaus, K. Watanabe, et al., Phys. Rev. Lett. **121**, 247701 (2018), URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.121.247701>.
- ⁷ A. David, G. Burkard, and A. Kormányos, 2D Materials **5**, 035031 (2018), URL <https://doi.org/10.1088/2053-1583/5/2/Faac17f>.
- ⁸ A. Kormányos, V. Zólyomi, V. I. Fal'ko, and G. Burkard, Phys. Rev. B **98**, 035408 (2018), URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.98.035408>.
- ⁹ A. David, P. Rakyta, A. Kormányos, and G. Burkard, Phys. Rev. B **100**, 085412 (2019), URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.100.085412>.
- ¹⁰ C. G. Péterfalvi, A. David, P. Rakyta, G. Burkard, and A. Kormányos, Phys. Rev. Research **4**, L022049 (2022), URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevResearch.4.L022049>.

Budapest, 2024. január 23.



Kormányos Andor

