

## Válaszok Dr. Legeza Örs kérdéseire

Szeretném megköszönni Dr. Legeza Örsnek a bírálattal kapcsolatos munkáját, az értekezéshez fűzött elismerő megjegyzéseit, és az érdekes kérdéseket. A Bíráló egy fontos megjegyzésére, illetve a feltett kérdésekre vonatkozó válaszokat az alábbiakban foglalaltam össze.

A Bíráló 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 elvlasztja 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.*

A megjegyzést Dr. Penc Karlo hasonló tartalmú megjegyzésével együtt, egy külön dokumentumban válaszolom meg.

A Bíráló négy kérdést tett fel a dolgozatban ismertetett tudományos eredményekkel kapcsolatban.

1: *"Az egyrétegű SO<sub>2</sub> vizsgálatánál mit lehet mondani a rendezetlenség, elektron-elektron és a spin-pálya kölcsönhatások energiaskáláiról, milyen korrekciót jelenthet alacsony hőmérsékleten az utóbbi kettő figyelembevétele?"*

A kérdésben említett energiaskálák a doktori dolgozat 5.3-as fejezetében tárgyalt, elektron dópolt egyrétegű MoS<sub>2</sub>-ben végzett Shubnikov-de Haas (SdH) oscillációk mérési eredményeinek értelmezésében játszanak fontos szerepet (lásd Ref. [4] és alább az 1. ábra). Az, hogy az elektron-elektron kölcsönhatás szerepe jelentős az egyrétegű MoS<sub>2</sub>-ben, várható a következő megfontolás alapján. Egy elektrongáz átlagos kinetikus energiájának és a Coulomb kölcsönhatási energiájának a hányadosát kényelmes a Wigner-Seitz sugár<sup>5</sup> segítségével kifejezni:  $r_s = 1/(\sqrt{\pi n_e} a_B^*)$ , ahol  $n_e$  az elektron sűrűség,  $a_B^* = a_B(\kappa m_e/m^*)$  az effektív Bohr sugár,  $m^*$  effektív tömeg,  $\kappa$  a dielektromos állandó és  $a_B = 5.29 \cdot 10^{-11} \text{m}$  a Bohr sugár. A Ref. [4]-ben az  $r_s$  értéke 9.8 – 7.5 tartományba esett, ami azt jelenti, hogy a elektron-elektron kölcsönhatással kapcsolatos jelenségek fontosak lehetnek. Összehasonlítva pl a GaAs heteroszerkezetekben található kétdimenziós elektrongázzal, az egyrétegű MoS<sub>2</sub> vezetési sávjában az effektív tömeg jóval nagyobb (DFT-vel számolt érték  $m^*/m_e = 0.42$ ), ami jóval kisebb kinetikus energiához és ezáltal  $r_s$  értékhez vezet.

A longitudinális ellenállás SdH oscillációinak sok jellemzője jól értelmezhető az alábbi, (1) kifejezéssel, amely egyrészeszke képben történt számoláson alapul. (Az egyrészeszke kép használatának oka az, hogy számomra nem ismert olyan soktest módszereket használó számolás, amely a SdH oscillációkhoz történő elektron-elektron kölcsönhatási járulékot explicit megadná.)

$$\delta\rho_{xx} \propto -R_0 \exp\left(-\frac{\pi}{\omega_{cb}^{(1)}\tau_q}\right) \cos\left(\frac{2\pi\nu_e}{d}\right) \cos\left(\pi\frac{E_{vz}}{E_c}\right) \frac{2\pi^2 k_B T / \hbar\omega_{cb}^{(1)}}{\sinh\left(2\pi^2 k_B T / \hbar\omega_{cb}^{(1)}\right)}. \quad (1)$$

Itt  $R_0$  egy amplitúdó, amely a nulla mágneses térben mért ellenállással kapcsolatos,  $\tau_q$  a kvantumos szórási idő,  $\nu = \frac{h n_e}{e B_z}$  betöltési szám (betöltött Landau szintek száma),  $n_e$  az elektron sűrűség,  $h$  Planck konstant és  $d$  jelzi a spin és/vagy völgy szabadsági fokkal kapcsolatos degenerációt. Továbbá,  $E_c = \hbar\omega_{cb}$  a ciklotron energia és  $E_{vz} = g_{vl}\mu_B B_z$  völgy Zeeman energia. Ez utóbbi abból ered, hogy a mágneses tér megtöri az időtükrözési szimmetriát és ezért a  $K$  és  $-K$  völgyekben levő állapotok általában nem lesznek degeneráltak. A degeneráció felhasadása lineáris a külső  $B_z$  mágneses térben és egy  $g_{vl}$  völgy  $g$ -faktossal jellemezhető (lásd a disszertáció 5.2-es fejezetét).

A (1) kifejezésnek a kísérletekkel, illetve sűrűségfüggvény elméleten alapuló sáv szerkezet számolásokkal való egybevetése azt jelzi, hogy az elektron-elektron kölcsönhatás a mérési eredményeket több szempontból befolyásolhatta. Ezek közül azokat emelném ki, melyek már viszonylag "magas" hőmérsékleten (1K-3K között) is jól érzékelhetőek voltak. Amint arra a dolgozat 5.3-as fejezetében utalok, alacsony hőmérsékleten (100 mK) végzett mérésekben további bonyolult kölcsönhatási jelenségek figyelhetőek meg.

- **effektív tömeg:** ezt a (1) egyenlet utolsó tagjának segítségével lehet a mérésekből meghatározni, amennyiben az oscillációk amplitúdóját méri a hőmérséklet függvényében. A több mintán végzett mérések eredményei  $m^*/m_e = 0.65 - 0.8$  közé esnek, és hibahatáron belül függetlenek  $n_e$ -től. A DFT sáv szerkezet számolások eredményétől ( $m^*/m_e = 0.42$ ) való eltérésre magyarázatot jelenthet a kölcsönhatási effektus<sup>6</sup>.

- **spin-pálya felhasadás:** a nagyobb töltéssűrűség ( $n_e > 4.1 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ ) mellett kapott kísérleti eredmények értelmezéséhez fel kellett tennünk, hogy a vezetési sáv spin-pálya felhasadás értéke  $2\Delta_{cb} \approx 15 \text{meV}$ . Ez lényegesen eltér a DFT sávszerkezet számolások eredményétől, amelyek szerint  $2\Delta_{cb} \approx 3 \text{meV}$ .
- **völgy g-faktor:** Tegyük fel, hogy alacsony  $n_e$  esetén  $d = 2$ , mint az a sávszerkezet számolásból következik. Változtassuk a mágneses teret állandó  $n_e$  elektronsűrűséget mellett, ezzel a  $\nu$  betöltési számot változtatjuk, az  $\frac{E_{vz}}{E_c}$  hányados az egyrészecke képből állandó marad. A (1) egyenlet alapján ha  $\cos\left(\pi \frac{E_{vz}}{E_c}\right)$  negatív (pozitív), akkor  $\delta\rho_{xx}$ -ban a minimumok páratlan (páros)  $\nu_e$  értékeknél találhatók. A mérések viszont azt mutatják (5.5(b) ábra a dolgozatban, illetve 1. ábra jobb oldala), hogy átmenet történik a minimumok helyében: pl.  $n_e = 3 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$  alatt páratlan  $\nu_e$  értékeknél vannak, míg ezen érték felett páros  $\nu_e$  értékeknél. Hasonló átmenet történik (páros  $\rightarrow$  páratlan)  $n_e = 4.1 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ -nél is. Ez az (1) egyenlet alapján úgy értelmezhető, hogy a  $\frac{E_{vz}}{E_c}$  hányados függ  $n_e$ -től. (Megjegyzendő, hogy a 1. ábra jobb oldali paneljein a piros vonal nem az (1) egyenletnek felel meg, hanem a doktori dolgozat 5.2 fejezetében ismertetett Green függvényeket alkalmazó formalizmust felhasználó numerikus számolások eredményét mutatja.) Mivel az effektív tömeg meghatározására végzett kísérletek arra utalnak, hogy  $m^*$  jó közelítésben független  $n_e$ -től, ezért arra kell következtetnünk, hogy az egyrészecke képpel ellentétben az  $E_{vz}$ , vagyis a  $g_{vl}$  völgy Zeeman faktor nem állandó, hanem  $n_e$  függő.

Mindhárom fenti megfigyelés, különböző módokon, de arra utal, hogy DFT sávszerkezet számolásokra támaszkodó egyrészecke kép nem elégséges, és az elektron-elektron kölcsönhatás fontos szerepet játszik.

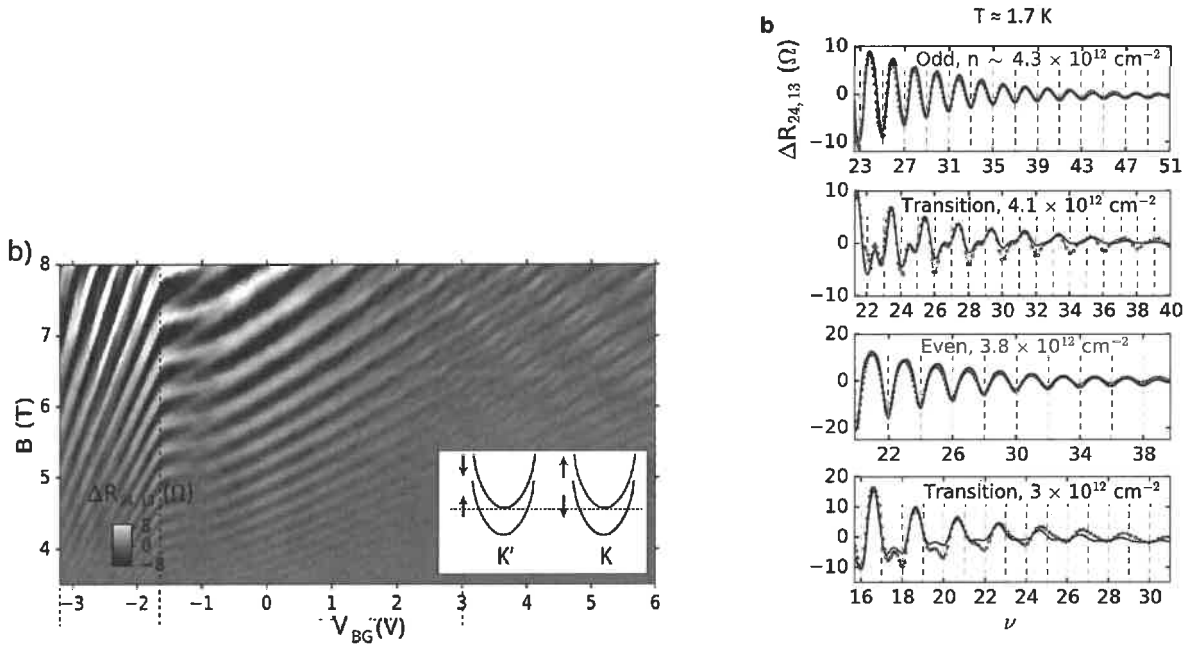


FIG. 1: SdH mérések  $n$ -dóptolt egyrétegű MoS<sub>2</sub>-ben  $T \approx 1.7 \text{K}$  hőmérsékleten [4]. Bal oldali ábra: ellenállás mérés a  $V_{BG}$  kapufeszültség és a mágneses tér függvényében. Jól látható az SdH oszcillációk meredekségében megjelenő változás a szaggatott függőleges fekete vonallal jelzett  $n_e \approx 4.0 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$  sűrűségnél. Jobb alsó sarokban a sávszerkezet vázlatos képe látható a  $K$  és  $-K$  völgyekben. A sávok felhasadnak a spin-pálya csatolás miatt és spin polarizáltak. A vízszintes fekete vonal jelzi azt, hogy a fő ábrán látható fekete vonalnak megfelelő töltéssűrűségnél a felső sávot is elkezdik betölteni az elektronok, ez okozhatja az SdH oszcillációk meredekségében történő változást. Jobb oldali ábra: SdH oszcillációk az  $\nu$  betöltési szám (mágneses tér) függvényében, adott elektronsűrűségek mellett. A fekete vonal a mérési eredményét, a piros vonal pedig numerikus számolások eredményét mutatja.

A rendezetlenség mértékének becslésére a (1) egyenlet második,  $\exp\left(-\frac{\pi}{\omega_{cb}^{(1)}\tau_q}\right)$  tagja használható. Alacsony hőmérsékleten az (1) egyenlet jobb oldalának utolsó tagja  $\approx 1$ . A mágneses tér függvényében mérve az SdH oszcillációkat, ezek akkor válnak láthatóvá, amikor  $\omega_{cb}^{(1)}\tau_q \approx \pi$ . Az effektív tömeg ismeretében ennek segítségével kiszámolható  $\tau_q$  kvantumos szórási idő és az ehhez társítható  $E_d = \hbar/\tau_q$  energiaskála. A  $\tau_q$  függhet az  $n_e$  elektron sűrűségtől is, mert a szórás egy része valószínűleg a töltéscsapidák jelenlétére vezethető vissza, amelyek hatása

nagyobb  $n_e$  esetén jobban leárnycólódik. A Ref[4]-ben tárgyalt 4 minta közül a legtisztább mintában az SdH oszcillációk  $n_e \approx 2.9 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$  esetén  $B = 2\text{T}$ -nál váltak láthatóvá, amely  $\mu_e \approx 5000 \text{cm}^2/\text{Vs}$  mozgékonyaságnak felel meg. Az effektív tömeg a mérések szerint  $m^*/m_e = 0.65$  és így  $\tau_q = 6.16 \times 10^{-12} \text{s}$ , illetve  $E_d \approx 0.1 \text{meV}$ -t adódik (összehasonlításképpen: a ciklotron energia  $\hbar\omega_c = 0.34 \text{meV}$ ). Megjegyzendő, hogy a 1. ábra jobb oldali paneljén mutatott számolásokban valamivel nagyobb,  $\tau_q = 7 - 9 \times 10^{-12} \text{s}$  feltételezésével kaptunk jó egyezést az elméleti eredmények és a mérések között, továbbá kissé eltérő  $\tau_{q,K}$  és  $\tau_{q,-K}$  értékeket használtunk a két völgyre.

2. *“A  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  elméletnek milyen alkalmazhatósági korlátai ismertek, milyen elvárások fogalmazhatók meg az alkalmazott bázisfüggvények számára?”*

A dolgozatban bemutatott modelleknek két fő célja volt: i) jól leírják a vegyérték és a vezetési sáv minimumaiban és/vagy maximumaiban a sávok diszperzióját, és ii) segítsenek megérteni a vizsgált anyagok Berry görbülettel kapcsolatos tulajdonságait. Mindemellett fontos szempont volt, hogy lehetőség szerint minél kevesebb anyag-specifikus paramétert tartalmazzanak, mivel a modellek keletkezésének időpontban a vizsgált anyagok sáv szerkezetéről viszonylag kevés kísérleti eredmény volt ismert. Ezért a dolgozatban ismertett  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  modellek esetén arra törekedtem, hogy kevés bázisfüggvényre legyen szükség és így ezek a modellek a Brillouin zóna egy adott pontjának valamilyen véges környezetében adjanak jó egyezést a sűrűségfüggvény elméleten alapuló sáv szerkezet számolásokkal.

Azonban, mint azt a dolgozat (1.16) egyenlete felett megemlítem, egy adott  $\mathbf{k}_0$  hullámszámra a Bloch hullámfüggvények  $u_{m,\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$  rácsperiódikus része teljes ortonormált bázist alkot. Ezért a  $u_{m,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  rácsperiódikus hullámfüggvényt a  $\mathbf{k}$  hullámszám tetszőleges értékére ki lehet a segítségükkel fejteni. Ily módon a sávok diszperzióját elvileg a teljes Brillouin zónában megkaphatjuk, amennyiben elegendő számú bázisfüggvényt használunk és meg tudjuk adni a modellben megjelenő, adott esetben elég nagyszámú, anyagi paraméterek értékét. Az általam ismert első ilyen munka Manuel Cardona és Fred H. Pollack közleménye<sup>1</sup> a szilikon és a germánium sáv szerkezetéről, amelyre a későbbiekben “full-zone  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  methodology” néven hivatkoztak az irodalomban. Ebben a modellben az  $u_{m,\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$  bázisfüggvények száma 15 volt, ahol  $\mathbf{k}_0 = 0$  ( $\Gamma$  pont) és a kristályszimmetriák figyelembe vétele után összesen 10 meghatározandó anyagi paramétert tartalmazott. Az említett két anyag sáv szerkezetét különböző kísérleti módszerek segítségével korábban jól feltérképezték, ami lehetővé tette a  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  modell paramétereinek meghatározását.

3. *“Ismert, 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 energiáskálát is?”*

A kérdést Dr. Penc Karlo hasonló tartalmú kérdésével együtt, egy külön dokumentumban válaszolom meg.

4. *“Kétrétegű grafénben a rétegek elforgatásával kialakuló szupravezető fázis néhány éve nagy visszhangot váltott ki és a magashőmérsékletű szupravezetés jobb megértését várta a rendszertől a tudományos közösség. Vizsgálta-e ezen effektust a szerző, illetve milyen módon lehetne a disszertációban bemutatott módszerek alapján a sáv szerkezet, a fonon és az elektron-elektron kölcsönhatások szerepét meghatározni.”*

Az említett effektust nem vizsgáltam. A disszertáció 8. fejezetében azt mutattam be, hogy egyrétegű grafént félvezető átmenetifém dikalkogénidre (TMDC) helyezve hogyan lehet leírni a grafénben keltett spin-pálya csatolást (spin-pálya proximitás effektus) és ez hogyan függ a két réteg közötti elfordulás szögétől. A bemutatott módszer perturbációszámításon alapult, amelyben a két réteg közötti csatolás a kis paraméter és a perturbálatlan állapotok a grafén illetve TMDC réteg állapotainak megfelelő Bloch hullámfüggvények. Ezt az eljárást korábbi, sűrűségfüggvény elmélettel végzett sáv szerkezet számolások motiválták [7,8], amelyek a dolgozat 1.9-es ábráján láthatóak (2. ábra felső panelje). Ezek eredménye szerint a grafén/TMDC heteroszerkezetekben a két anyag energiasávjai olyan módon rendeződnek, hogy a grafén réteg spektrumában található Dirac pont a félvezető TMDC tiltott sávjába esik és a grafén alacsony energiás állapotainak karakterisztikus, hullámszámban lineáris diszperziója nem változik. Ez kapcsolatban áll azzal, hogy a grafén és a TMDC réteg rácsállandójának nagysága között kb 30%-os eltérés van. Elméleti megfontolások szerint a grafén/TMDC rendszerben a Dirac pont körüli lineáris grafén spektrum a két réteg közötti bármilyen elfordulási szög esetén fennmarad. Ezt időközben DFT sáv szerkezet számolások is igazolták<sup>10</sup>. A két réteg sávjai csak a Dirac ponttól  $\approx 3.5 \text{eV}$  távolságra tudnak erősen hibridizálódni<sup>9</sup>, lásd a 2. ábra alsó paneljét. Ez az energiatartomány viszont a számunkra fontos grafén (spin) transzport tulajdonságok szempontjából, melyeket a Dirac pont körüli állapotok határoznak meg, már nem releváns.

A csavart kétrétegű grafén több szempontból is jóval bonyolultabb, mint a disszertációban tárgyalt egyrétegű grafén/TMDC rendszer.

- Ebben a rendszerben a két réteg sáv szerkezete kis elfordulási szögek ( $\theta < 3^\circ$ ) esetén a Dirac pontok körül is erősen hibridizálódik. Az ezt leíró egyrészcseke modell szerint (lásd, e.g., Ref. 11) ennek következtében

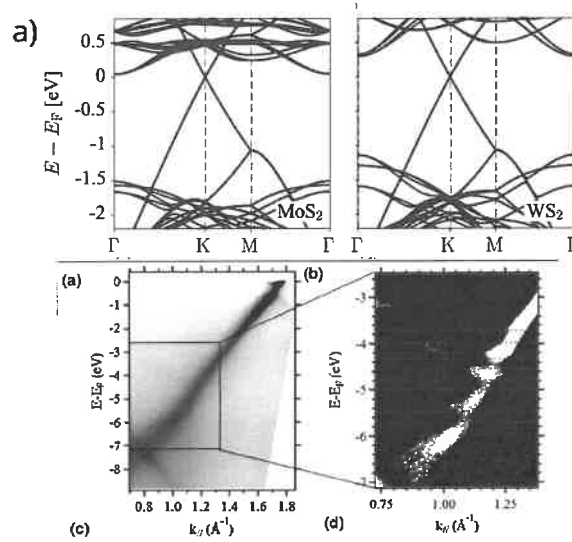


FIG. 2: Felül: a disszertáció 1.9-es ábrája. Egyrétegű grafén/egyrétegű TMDC rendszerek sáv szerkezete sűrűségfüggvény számítások eredménye alapján[8],  $\theta = 0^\circ$  rétegek közötti elfordulási szögre. Alul: grafén/MoS<sub>2</sub> heteroszerkezeten készült ARPES mérés eredménye. Bal oldalt a nyers mérési eredmény látható, amely az MoS<sub>2</sub> sáv szerkezetének egy részét mutatja. Ha a eredményeket numerikusan deriváljuk (jobb oldali ábra), akkor finomabb jelenségek is észrevehetőek lesznek[9]. Az első “minigap” 3.55eV-nál jelenik meg, ennek felhasználásával  $\theta \approx 6^\circ$  a grafén és a TMDC réteg közötti elfordulási szög.

bizonyos elcsavarási szögeknél ( $\theta_m = 1.05^\circ, 0.5^\circ, 0.35^\circ \dots$  “magic angles”) a csavart kétrétegű grafén alacsony energiájú sávjaiban a Fermi sebesség eltűnik és létrejön egy diszperziómentes, lapos sáv. A lapos sávok létrejöttének leírására a disszertációban alkalmazott perturbációs számítás már nem elégséges, hanem ennél bonyolultabb eljárás szükséges.

- A disszertációban tárgyalt grafén/MoS<sub>2</sub> rendszerre felírt modell, és kezdetben a csavart grafént leíró, Ref.[11]-n alapuló modellek egy jelentős része is azzal a feltételezéssel élt, hogy a két rétegnek megfelelő hatszöggrác mereven elfordítható egymás felett és a grafént alkotó szénatomok relaxációja elhanyagolható. A csavart kétrétegű grafén esetén azonban, ha a csavarási szög  $\theta \lesssim 2^\circ$ , fontos jelenség az atomi pozíciók síkon belüli és a síkra merőleges relaxációja<sup>12</sup>, mert ezáltal a teljes energia csökkenthető. A relaxációnak fontos következményei vannak, pl i) a

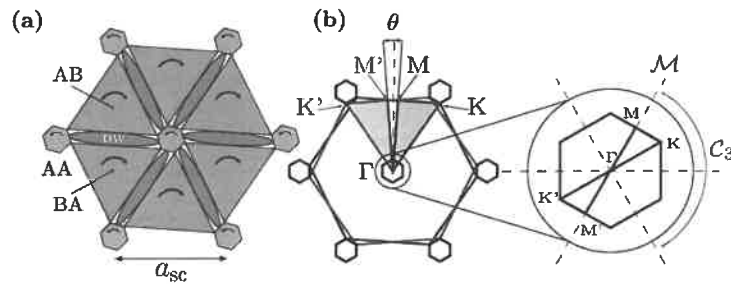


FIG. 3: a) Az atomi relaxáció hatása a csavart kétrétegű grafénben [12]. Véges nagyságú domének alakulnak ki a moiré elemi cellán belül, amelyekben a két rétegben található szénatomok AA, AB/BA koordináció szerint rendeződnek. Az AB és BA koordinációjú területeket doménfalak választják el. b) az egyes grafén rétegek és a csavart kétrétegű grafén Brillouin zónája.

rendszerben különböző domének alakulnak ki, melyeket a szénatomok függőleges irányú koordinációjával lehet jellemezni, lásd 3. ábra, ii) nem több, hanem csak egy olyan elcsavarási szög (pontosabban szög tartomány) van, ahol lapos sávok alakulnak ki.

A relaxációt figyelembe vevő, egyrészecske képben számolt sávrendszer alacsony energiás részét a 4. ábra mutatja. Jól megfigyelhető egy lapos sáv jelenléte a  $[\theta_1, \theta_2]$  elfordulási szögekkel jellemezhető tartományban. A

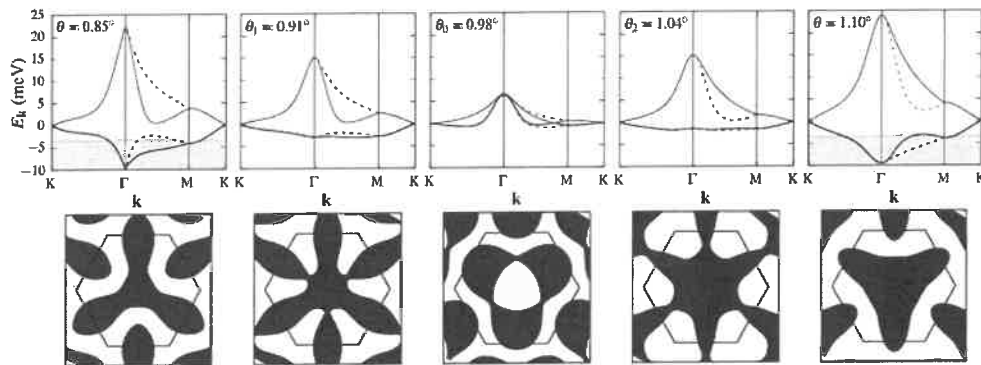


FIG. 4: Felső ábráson: a számolt alacsony energiás sáv szerkezet néhány  $\theta$  csavarási szög esetén [12]. (A sávok spin degeneráltak és a völgy szabadsági fok is vezet még egy kétszeres degenerációhoz). Alsó ábráson: a Fermi felület az alsó sáv félig betöltöttsége esetén.

$v_F$  Fermi sebesség (a sávok meredeksége a mini Brillouin zóna  $K$  pontjában) azonban nem válik nullává. Az is jól látható, hogy a Fermi felület bonyolult formát vehet félig betöltöttség esetén (kísérletileg a Mott szigetelő fázist félig betöltöttségénél, szupravezetést pedig kevéssel félig betöltöttség felett/alatt találnak).

- ahogy az a 4. ábrán látható, kis sáv szélességű (viszonylag lapos) sávok a vizsgált csavarási szögtartományban mindenhol megjelennek, de a sáv szerkezet részletei érzékenyek a csavarási szög pontos értékére. Ez olyan szempontból fontos, hogy a Ref. [13] kísérleti eredményei szerint az elcsavarási szög korántsem ugyanaz a minta minden tartományában.
- a csavart kétrétegű grafénban létrejött lapos sávokban az töltéshordozók kinetikus energiája nagyon lecsökken a Coulomb kölcsönhatási energiához képest. Ezért az egyrétegű grafén/MoS<sub>2</sub> rendszerhez képest itt az elektron-elektron kölcsönhatási effektusok várhatóan sokkal fontosabb szerepet játszanak. Ennek egyik következményeként a 4. ábrán bemutatott sávrendszer tovább módosulhat.

A fenti felsorolás érzékelteti azokat a kihívásokat, amelyek a szupravezetés mikroszkópikus mechanizmusának megértése előtt állnak. A rács relaxációja bizonyosan befolyásolja a fonon spektrumot<sup>16</sup> is, amely fontos lehet az elektron-fonon kölcsönhatás erősségét, és így egy esetleges fononok által közvetített szupravezetési mechanizmust illetően. Az erős elektron-elektron korrelációs effektusokra utaló különböző szigetelő állapotok jelenléte a csavart grafén rendszer normál állapotában kísérletileg jól dokumentált<sup>14,15,18</sup>. Ez azt sugallja, hogy a szupravezetésben is a korrelációs effektusok lehetnek a fontosak. Kísérleti eredmények szerint azonban a fononok szerepét a szupravezetésben nem lehet teljesen kizárni<sup>18</sup>.

Végül érdekes megemlíteni, hogy dolgozatban tárgyalt spin-pálya csatolás proximity effektus is szerepet játszhat a csavart kétrétegű grafén szupravezetéssel kapcsolatos tulajdonságaiban. Kísérletileg szupravezetést a kétrétegű csavart grafénban csak egy szűk,  $\delta\theta \approx 0.1^\circ$  csavarási szög tartományban találtak a 4. ábrán is látható  $\theta = 1.04^\circ$  körül. A Ref. [17] eredményei azt mutatták, hogy ha a kétrétegű csavart grafént WSe<sub>2</sub> rétegre helyezték, akkor ez stabilizálta a szupravezetést olyan értelemben, hogy kisebb csavarási szöggel ( $\theta \gtrsim 0.8^\circ$ ) jellemezhető mintákban is megjelent. A normál állapotban végzett transzport mérések (gyenge antilokalizáció) pedig azt jelezték, hogy a WSe<sub>2</sub> spin-pálya csatolást keltett a grafén rendszerben. Az azonban nem volt egyértelműen eldönthető, hogy a keltett spin-pálya csatolás vagy csak a dielektromos környezet megváltozása volt-e fontosabb a szupravezetés szempontjából.

Hasonló jelenség történik egy másik grafén rendszer szupravezető tulajdonságaiban is. Megmutatható, hogy külső elektromos tér alkalmazásával van Hove szingularitás hozható létre az AB rétegsorrendű kétrétegű (nem csavart) grafén állapotsűrűségében. Egy szűk töltéssűrűség intervallumban, amikor a Fermi energia a szinguláris állapotsűrűség tartományban található, nagyon alacsony hőmérsékleten ( $T_c \lesssim 30$  mK) és mágneses tér jelenlétében ( $B_{\parallel} = 150$  mT) ez a grafén rendszer is szupravezetővé válik<sup>19</sup>. A kísérlet elemzése arra utalt, hogy a mikroszkópikus mechanizmus az elektron-elektron taszításon alapulhat, de a fononok szerepét sem lehetett egyértelműen kizárni. A kísérletet később elvégezték olyan mintákkal is, amelyben a kétrétegű grafént WSe<sub>2</sub>-re helyezték<sup>20</sup>. Azt találták, hogy a grafén most mágneses tér jelenléte nélkül is szupravezetővé vált. A kritikus hőmérséklet maximális értéke  $T_c \approx 300$  mK volt (a  $T_c$  függött a töltéssűrűségtől is). Ez a  $T_c$  érték jelentősen magasabb, mint a Ref. [19] kísérletben volt. A Ref. [20] kísérletei arra is utaltak, hogy a keltett spin-pálya csatolás szerepet játszott a szupravezető fázis Ref. [19]-hoz képest

nagyobb stabilitásában, de a mikroszkópikus mechanizmust itt sem lehetett egyértelműen megállapítani.

- 
- <sup>1</sup> Manuel Cardona and Fred H. Pollack, *Energy-Band Structure of Germanium and Silicon: The  $k \cdot p$  Method*, Phys. Rev **142**, 530 (1966).
- <sup>2</sup> Alessandro David, Guido Burkard, and Andor Kormányos. *Effective theory of monolayer TMDC double quantum dots*. 2D Materials **5** 035031 (2018).
- <sup>3</sup> Andor Kormányos, Guido Burkard, Martin Gmitra, Jaroslav Fabian, Viktor Zólyomi, Neil D. Drummond, and Vladimir I. Fal'ko,  *$k \cdot p$  theory for two-dimensional transition metal dichalcogenide semiconductors*, 2D Materials **2**, 022001 (2015).
- <sup>4</sup> Riccardo Pisoni, Andor Kormányos, Matthew Brooks, Zijin Lei, Patrick Back, Marius Eich, Hiske Overweg, Yongjin Lee, Peter Rickhaus, Kenji Watanabe, Takashi Taniguchi, Atac Imamoglu, Guido Burkard, Thomas Ihn, and Klaus Ensslin, *Interactions and Magnetotransport through Spin-Valley Coupled Landau Levels in Monolayer  $MoS_2$* , Phys. Rev. Lett. **121**, 247701 (2018).
- <sup>5</sup> Sólyom Jenő, *A modern szilárdtest-fizika alapjai III*, ELTE Eötvös Kiadó (2009).
- <sup>6</sup> Ying Zhang and S. Das Sarma, *Density-dependent spin susceptibility and effective mass in interacting quasi-two-dimensional electron systems*, Phys. Rev. B **72**, 075308 (2005).
- <sup>7</sup> Martin Gmitra and Jaroslav Fabian. *Graphene on transition-metal dichalcogenides: A platform for proximity spin-orbit physics and optospintronics*. Phys. Rev. B **92**, 155403 (2015).
- <sup>8</sup> Martin Gmitra, Denis Kochan, Petra Högl, and Jaroslav Fabian. *Trivial and inverted Dirac bands and the emergence of quantum spin Hall states in graphene on transition-metal dichalcogenides*. Phys. Rev. B **93**, 155104 (2016).
- <sup>9</sup> Debora Pierucci, Hugo Henck, Jose Avila, Adrian Balan, Carl H. Naylor, Gilles Patriarche, Yannick J. Dappe, Mathieu G. Silly, Fausto Sirotti, A. T. Charlie Johnson, Maria C. Asensio, and Abdelkarim Ouergh, *Band Alignment and Minigaps in Monolayer  $MoS_2$ -Graphene van der Waals Heterostructures*, Nano Lett. **16**, 4054 (2016).
- <sup>10</sup> Thomas Naimier, Klaus Zollner, Martin Gmitra, and Jaroslav Fabian, *Twist-angle dependent proximity induced spin-orbit coupling in graphene/transition metal dichalcogenide heterostructures*, Phys. Rev. B **104**, 195156 (2021).
- <sup>11</sup> R. Bistritzer and A. H. MacDonald, *Moiré bands in twisted double-layer graphene*, PNAS **108**, 12233 (2011).
- <sup>12</sup> Daniel Bennett, Daniel T. Larson, Louis Sharma, Stephen Carr, and Efthimios Kaxiras, *Twisted bilayer graphene revisited: minimal two-band model for low-energy bands*, arXiv:2310.12308.
- <sup>13</sup> Aviram Uri, Sameer Grover, Yuan Cao, J. A. Crosse, Kousik Bagani, Daniel Rodan-Legrain, Yuri Myasoedov, Kenji Watanabe, Takashi Taniguchi, Pilkyung Moon, Mikito Koshino, Pablo Jarillo-Herrero, Eli Zeldov, *Mapping the twist angle and unconventional Landau levels in magic angle graphene*, Nature **581**, 47 (2020).
- <sup>14</sup> Jiachen Yu, Benjamin A Foutty, Yves H Kwan, Mark E Barber, Kenji Watanabe, Takashi Taniguchi, Zhi-Xun Shen, Siddharth A Parameswaran, Benjamin E Feldman, *Spin skyrmion gaps as signatures of strong-coupling insulators in magic-angle twisted bilayer graphene*, Nature Communications **14** (1), 6679 (2023).
- <sup>15</sup> Youngjoon Choi, Jeannette Kemmer, Yang Peng, Alex Thomson, Harpreet Arora, Robert Polski, Yiran Zhang, Hechen Ren, Jason Alicea, Gil Refael, Felix von Oppen, Kenji Watanabe, Takashi Taniguchi and Stevan Nadj-Perge, *Electronic correlations in twisted bilayer graphene near the magic angle*, Nature Physics **15**, 1174 (2019).
- <sup>16</sup> Xiaoqian Liu, Ran Peng, Zhaoru Sun, and Jianpeng Liu, *Moiré Phonons in Magic-Angle Twisted Bilayer Graphene*, Nano Lett. **22**, 7791 (2022).
- <sup>17</sup> Harpreet Singh Arora, Robert Polski, Yiran Zhang, Alex Thomson, Youngjoon Choi, Hyunjin Kim, Zhong Lin, Ilham Zaky Wilson, Xiaodong Xu, Jiun-Haw Chu, Kenji Watanabe, Takashi Taniguchi, Jason Alicea, and Stevan Nadj-Perge, *Superconductivity in metallic twisted bilayer graphene stabilized by  $WSe_2$* , Nature **583**, 379 (2020).
- <sup>18</sup> Myungchul Oh, Kevin P. Nuckolls, Dillon Wong, Ryan L. Lee, Xiaomeng Liu, Kenji Watanabe, Takashi Taniguchi, and Ali Yazdani, *Evidence for unconventional superconductivity in twisted bilayer graphene*, Nature **600**, 240 (2021).
- <sup>19</sup> Haoxin Zhou, Ludwig Holleis, Yu Saito, Liam Cohen, William Huynh, Caitlin L. Patterson, Fangyuan Yang, Takashi Taniguchi, Kenji Watanabe, Andrea F. Young, *Isospin magnetism and spin-polarized superconductivity in Bernal bilayer graphene*, Science **375**, 775 (2022).
- <sup>20</sup> Yiran Zhang, Robert Polski, Alex Thomson, Étienne Lantagne-Hurtubise, Cyprian Lewandowski, Haoxin Zhou, Kenji Watanabe, Takashi Taniguchi, Jason Alicea and Stevan Nadj-Perge, *Enhanced superconductivity in spin-orbit proximitized bilayer graphene*, Nature **613**, 268 (2023).

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, akikről 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 korábbról 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  $\pm K$ ,  $\Gamma$ ,  $Q$  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. Ráműtöttem 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  $\sigma_{xx}$  hosszirányú vezetőképesség Shubnikov-de Haas oszcillációira végezzek számításokat. Megmutattam, hogy a völgy állapotok degenerációjának felhasadása hasonlóan befolyásolja  $\sigma_{xx}$ -t mint a Zeeman-féle spin felhasadás a kétdimenziós elektrongázban. A felállított modellben a teljes  $\sigma_{xx}$ -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 MoS<sub>2</sub> 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. Ráműtöttem, 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 taszítás 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 taszítás, 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 MoS<sub>2</sub>-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  $\sigma_{xy}^{vH}$  és  $\sigma_{xy}^{sH}$  vezetőképességeket kétrétegű MoS<sub>2</sub> esetén. Azt találtam, hogy ezek a vezetőképességek szintén hangolhatóak merőleges elektromos térrel. Megmutattam, hogy a 2H típusú kétrétegű MoS<sub>2</sub> esetén  $\sigma_{xy}^{vH}$  vezető rendben lineárisan függ a két réteg közötti potenciálkülönbségtől, míg  $\sigma_{xy}^{sH}$  értéke akkor is véges lehet, ha nincs jelen egy, a rétegekre merőleges elektromos tér. Megmutattam, hogy külső elektromos tér jelenlétében a  $\sigma_{xy}^{vH}$  és  $\sigma_{xy}^{sH}$  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 előjelváltás a topológikus tulajdonságok megváltozását jelzi. Azonban rámutattam, hogy kétrétegű átmenetifém dikalkogenideknél a  $\sigma_{xy}^{vH}$  és  $\sigma_{xy}^{sH}$  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  $\lambda_{vZ}$  és  $\lambda_R$  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 sáv szerkezetének 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  $\lambda_R$  csatolási amplitúdó, a másik pedig egy spin elforgatással kapcsolatos  $\vartheta_R$  szög. A  $\vartheta_R$  értéke maga is függ a két réteg közötti  $\theta$  elfordulási szögtől és a grafén réteg energiasávjainak spin-polarizációját befolyásolja. Ha  $\vartheta_R + \theta$  értéke megegyezik a  $\pi$  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  $\vartheta_R$  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. *“Ismert, 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-moddal 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.

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

TABLE I: Szimmetrikus és antiszimmetrikus állapotok a spin és a völgy szabadsági fokokban. A következő jelölést használtam:  $|svs\rangle_{(n_L, n_R)}$ , ahol  $(n_L, n_R)$  a töltéskonfiguráció, és  $sv$  ( $s_S$ ) jelzi a völgy (spin) szabadsági fok szimmetriáját, amely lehet szingulett ( $S$ ) vagy pedig tripllett ( $T_-, T_0, T_+$ ). 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  $H_U + H_\epsilon$  Hamiltoni matrixelemeit mutatja, lásd Eq. (1). A három jobboldali oszlop a spin-pálya csatolás járulékát jelzi ( $-2\Delta$ , 0 és  $+2\Delta$ ), lásd a  $H_\Delta$  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 tripllett 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

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

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  $H_{\text{tot}}$ -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  $H_{\text{tot}}$  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  $H_{\text{tot}}$  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.

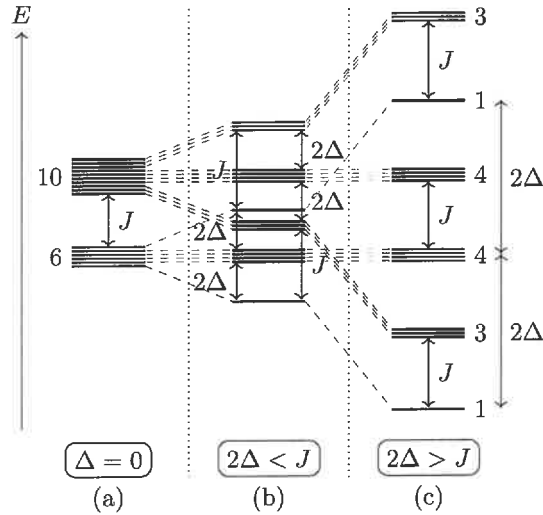


FIG. 1: Az  $(1, 1)$  töltéskonfiguráció energiaszintjeinek sematikusan ábrája a  $4|\Delta| < U - |\varepsilon|$  feltétel teljesülése esetén. Vízszintes vonalak jelzik az energiaszinteket, degenerált energiaszintek csoportja mellett látható szám jelzi a degeneráció fokát. A piros vonal az antiszimmetrikus  $|n_-\rangle$ , 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  $\tau_z$  Pauli mátrixot, és a spin szabadsági fok terében értelmezett  $\sigma_z$  Pauli mátrixot. Az I. táblázatban szereplő bázisban  $H_{\Delta}$ -nak csak diagonális mátrixelemei vannak, melyek értéke szintén megtalálható ebben a táblázatban.

Amennyiben a  $4|\Delta| < U - |\epsilon|$  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.  $H_{\Delta}$  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  $2\Delta$ -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  $\tilde{S}_L$ ,  $\tilde{S}_R$  operátorok segítségével ezen a 4 dimenziós alacsony energiás altéren ható effektív Hamilton operátor (konstans tagoktól eltekintve) a

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

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  $\tau_z$  ( $\sigma_z$ ) Pauli mátrixot. Hasonló módon, vezessük be a  $\tau_x$  és  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  Pauli mátrixokat is. Közvetlen számolással megmutatható, hogy ezek segítségével az  $\tilde{S}_j$  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  $\tilde{S}_j$  operátorok definíciójában megjelenik a völgy szabadsági fok, tehát nem egyszerű spin operátorok.

A (6) levezetése során feltételeztük, hogy  $4|\Delta| < U - |\epsilon|$ . Mivel az egyrétegű átmenetifém dikalkogenidekben  $\Delta$  értéke akár  $\sim 10$  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 alterét továbbra is a (6) Hamilton operátorral írhatjuk le.

- 
- <sup>1</sup> A. Kormányos and G. Burkard, Phys. Rev. B **87**, 045419 (2013), URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.87.045419>.
- <sup>2</sup> 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>.
- <sup>3</sup> 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>.
- <sup>4</sup> 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>.
- <sup>5</sup> 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>.
- <sup>6</sup> 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>.
- <sup>7</sup> A. David, G. Burkard, and A. Kormányos, 2D Materials **5**, 035031 (2018), URL <https://doi.org/10.1088/2053-1583/5/2/Faac17f>.
- <sup>8</sup> 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>.
- <sup>9</sup> 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>.
- <sup>10</sup> 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

