

9. A tézisekben összefoglalt tudományos eredmények értékelése

(a bírálóbizottság állásfoglalása a jelölt téziseiről, az azokban lefektetett új tudományos eredményekről, a tézisek elfogadása vagy elutasítása, az értekezés tudományos eredményeinek tételes értékelése)

A doktori értekezés a szerző közel egy évtizedes munkásságát öleli föl. Kormányos Andor a kezdetektől fogva bekapcsolódott az átmenetifém-dikalkogenidek, valamint az egy- és többrétegű grafén elméleti tulajdonságainak vizsgálatába. Nevéhez fűződik a kétdimenziós átmenetifém-dikalkogenidek úgynevezett $k \cdot p$ elméletének kidolgozása (a tézispontok [3] publikációja, amelyre több mint 900-an hivatkoztak), a spin-pálya csatolás jelentőségének vizsgálata MoS_2 egyrétegűekben ([2] publikáció, több mint 400 hivatkozással), az egyrétegű átmenetifém-dikalkogenidekből kialakított kvantumpöttyökben a spin-pálya csatolás szerepének vizsgálata ([4] publikáció, ~495 hivatkozással). A viszonylag rövid idő alatt beérkező jelentős számú hivatkozás is rámutat úttörő jellegű munkásságára az átmenetifém-dikalkogenidek (TMDC anyagok) viselkedésének elméleti megértésében.

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

Az eredmények ismertetése tézisszerűen a következőképpen halad: (1) belső spin-pálya kölcsönhatás a háromrétegű ABC grafénban, (2) az egyrétegű TMDC anyagok $k \cdot p$ Hamilton operátora, (3) Shubnikov—de Haas-oszcillációk egyrétegű TMDC anyagokban, (4) kvantumpöttyök egyrétegű TMDC anyagokban, (5) spin és völgy Hall-effektus a kétrétegű MoS_2 -ban, (6) Indukált spin-pálya csatolás eltekert grafén-TMDC heterorétegűekben.

1) Megmutatta, hogy az ABC rétegsorrendű grafénban a spin-pálya csatolás általános alakjának meghatározásához a dxz , dyz és dz^2 atomi pályákat is figyelembe kell venni a szokásosan használt p_z atomi pályák mellett és a spin-pálya csatolás összesen hét együtthatóval jellemezhető. Ennek ismeretében meghatározta a rendszer alacsony energiás tulajdonságait leíró effektív Hamilton-operátort.

2) Az egyrétegű átmenetifém-dikalkogenidek sáv szerkezetére a Brillouin zóna K és -K pontjában egy hét sávból álló $k \cdot p$ modellt állított fel. Meghatározta a belső spin-pálya csatolás mátrixelemeit. Feltételezve, hogy a rétegre merőleges külső elektromos tér is jelen van, felírta a Bychkov-Rashba féle spin-pálya csatolás Hamilton operátorának általános alakját.

3) Az egyrétegű átmenetifém-dikalkogenidek esetén a K és -K völgyekben levő elektronállapotokhoz tartozó Landau-állapotokkal kapcsolatban azt találta, hogy a grafénnal ellentétben ezek nem degeneráltak. A degeneráció felhasadása egy effektív völgy g -faktorral jellemezhető. Ezt felhasználva számításokat végzett a σ_{xx} hosszirányú vezetőképesség Shubnikov-de Haas oszcillációira.

4) Tanulmányozta az egyrétegű átmenetifém-dikalkogenidekben kapuelektrodákkal létrehozható kvantumpöttyök spektrumát. Egy kvantumpöttyre a nem-kölcsönható határesetben meghatározta a kötött állapotok energiáját a mágneses tér függvényében. Megmutatta, hogy a legalacsonyabb energiájú Kramers-pár állapot felhasználható lehet mint spin-völgy qubit. Kettős kvantumpöttyöket is tanulmányozott az (1, 1) töltés konfigurációban. Azt vizsgálta, hogy a völgy szabadsági fok, az erős spin-pálya csatolás, a Coulomb kölcsönhatás és a

kvantumpöttyök közötti alagutazás erőssége hogyan befolyásolja a kettős kvantumpötty alacsony energiás spektrumát.

5) Kétrétegű átmenetifém-dikalkogenidekben meghatározta a K és -K völgyben érvényes $k \cdot p$ Hamilton-operátort. Megmutatta, hogy az elektronállapotok topológiáját jellemző Berry-görbülethez az egyes rétegeken belüli és a két réteg közötti csatolások is adnak járulékot. Ez utóbbi következtében a Berry-görbület hangolható a rétegekre merőleges elektromos tér segítségével. Rámutatott a különböző rétegsorrendű (2H és 3R) kétrétegű átmenetifém dikalkogenidek Berry-görbület tulajdonságaiban található fontos eltérésekre. Vizsgálta ezen anyagokban jelentkező völgy- és spin-Hall effektust.

6) Megmutatta, hogy az átmenetifém-dikalkogenid rétegre helyezett egyrétegű grafénben kétfajta spin-pálya csatolás kelthető: völgy-Zeeman és Bychkov-Rashba típusú. Megmagyarázta ezek kapcsolatát az átmenetifém-dikalkogenid réteg saját spin-pálya csatolásával. A kidolgozott elméleti eljárás lehetővé tette a két réteg közötti elfordulási szög hatásának a vizsgálatát. Numerikus számolások eredményei alapján azt találta, hogy az elfordulási szög változtatásával a keltett spin-pálya csatolás jelentősen növelhető. Megmutatta, hogy a keltett Rashba típusú spin-pálya csatolást általános esetben két paraméter jellemzi: a λR csatolási amplitúdó, és a sávok spin-polarizációját meghatározó θR szög. Megmutatta, hogy átmenetifém-dikalkogenid/grafén/átmenetifém-dikalkogenid három rétegből álló heteroszerkezet esetén a grafénban keltett Rashba spin-pálya csatolást interferencia-effektusok is befolyásolják.