

Dr. Gali Ádám

Bírálat

Dr. Kormányos Andor a „Spin-orbit coupling effects in atomically thin materials and their heterostructures” címmel beadott MTA Doktori értekezés a szerző közel egy évtizedes munkásságát öleli föl. A doktori dolgozat a szilárdtest-fizikában elmúlt két évtizedének egyik legnépszerűbb témáját, a kétdimenziós anyagok viselkedését, járja körül elméleti módszerekkel. A dolgozat elsősorban a kiválasztott kétdimenziós anyagok elektronszerkezetének értelmezésével foglalkozik, beleértve különböző külső perturbációk, mint pl. mechanikai behatás, elektromos és mágneses tér, hatását figyelembe véve a kétdimenziós anyagok vastagságát és a különböző atomi rétegek egymáshoz képesti rétegződését is. Eredményeit 7 tézispontban foglalta össze, amelyeket 10 nemzetközi publikációban közölt. Ezek közül 6 publikációban első szerző, 2 publikációban utolsó szerző és 2 publikációban az általa is vezetett fiatalabb munkatárs volt az első szerző. Eredményeinek többségét posztdoktor kutatóként Guido Burkard professzorral együttműködve érte el a Konstanzi Egyetemen. Utolsó tézishez tartozó publikációját az Eötvös Loránd Tudományegyetem munkatársaként, mint fő szerző jegyzi.

A publikációk hatását és a szerző hozzájárulását a publikációkban feltüntetett eredményekhez az MTA megfelelő bizottsága már kivizsgálta. Bírálati munkám szigorúan a doktori tézis egészére és abban megfogalmazott tudományos állítások helyességére fókuszál, nem vizsgálja az eredmények jelentőségét.

A dolgozat 119 oldalas az irodalomjegyzéket is beleértve, amely nyolc fejezetre, a tézispontok bemutatására és köszönetnyilvánításra oszlik.

A 31 oldalas bevezetés megfelel egy nagyon tömör modern szilárdtest-fizikai jegyzetnek, amely a kétdimenziós anyagokon kimért anomális és kvantum Hall-effektust, a spintronika és ún. „valleytronics” magyarul völgytronika fogalmakon keresztül a völgy Hall-effektus, a spin Hall-effektus, a spin-völgy Hall-effektus és a kvantum Hall-effektus jelenségeket magyarázza, és a hozzátartozó kulcs kísérleteket mutatja be konkrét kétdimenziós eszközökön, amelyek az irodalomban megtalálhatóak. A szerkezeti és elektronszerkezeti elméleti leírást a leginkább vizsgált egyrétegű grafénnel kezdi, amelyet utána kibővíti a két és háromrétegű grafénnel, illetve az átmeneti fém-dikalkogén (angolul TMDC-vel rövidített) anyagokkal. Ez utóbbi anyagokban a spin-pálya kölcsönhatás sokkal erősebb, mint a szén atomokat tartalmazó grafénban. Az

elektronszerkezet megértéséhez a Fermi-szint közelében levő állapotokra csoportelméleti és modern elméleti szilárdtest-fizika (pl. Berry-fázis és Chern számok módszere) módszereket alkalmazva analízist végzett, amelyből az állapotok természetét kapjuk meg, beleértve a spin-pálya csatolás mikroszkopikus leírását. Ebben a részben említésre kerül, hogy a sűrűségfüggvény-elméleti számítások eredménye hasznosítható arra, hogy az analízisben kapott paraméterekre az adott anyagra jellemző értékeket kapjunk, amelyeket utána mint az anyag elektronszerkezetének modell Hamilton-operátoraként tudunk használni bonyolultabb esetek, pl. külső perturbációk, számítására. A szerző itt bevezeti az ún. k^*p -módszert, amelyet az adott anyag Brillouin-zónájának kritikus k -pontjaiban alkalmazott, hogy pl. a magneto-transzportához szükséges anyagi paramétereket megkapja. A k^*p -módszer paraméterezésében az ismert kísérleti eredmények mellett a sűrűségfüggvény-elméleti (röviden: DFT) számítások szintén fontosak, hogy pontos numerikus eredményeket kapjunk. A bevezetésben leírt alapvető szerkezeti és elektronszerkezeti leírásokat és módszereket használja fel kiindulásként a 3-8. fejezetekben található jelenségek megértéséhez.

A 2. fejezet lényegében egy tömör felsorolása a rákövetkező fejezetek egyes témájának, amely az egyszerűbb problémáktól halad a komplexebb problémák irányába.

Az eredmények ismertetése eszerint a következőképpen halad: (1) Intrinszik spin-pálya kölcsönhatás a háromrétegű grafénban, (2) Az egyrétegű TMDC anyagok k^*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 heterorétegekben. Minden egyes eredményeket bemutató fejezet bevezetéssel kezdődik, amely részletezi az adott terület előzményeit. Ez logikusan következik abból a megfontolásból, hogy az egyes fejezetek ugyan egymásra is épülő, de mégis eltérő területet járnak körül, amelyet nem érdemes egyetlen bevezetés fejezetbe tömöríteni. A doktori dolgozat jelentős részét az eredmények ismertetése jelenti ezekben a fejezetekben.

Az eredmények ismertetését a tézispontok felsorolása követi, illetve a tézisek alapjául szolgáló 10 közlemény felsorolása. A doktori tézist az irodalomjegyzék zárja, amelyben közel 300 tudományos cikket sorol fel.

A doktori értekezés szerkezete logikus, beosztásában dominál az eredmények ismertetése. Az egész dolgozatra elmondható, hogy szépen szerkesztett, nagy gondossággal készített, igényes mű. Konkrétan 12 elírást találtam benne, amelyet a szerzőnek csatoltam egy PDF fájlban. Ebből kettő

tűnik értelemzavarónak, amelyet érdemes lenne akár utólag is javítani, ha erre van lehetőség: a 27. oldalon a „+z and -z” szövegben a „-” mögül hiányzik a „z”, illetve a 40. oldalon „Slater-Koster” helyett „Slater-Jouster” szöveget írt. Az ábrák és táblázatok érthetőek és áttekinthetőek; a grafikonokon a feliratozás valamint a mértékegységek helyesek.

Tartalmi megjegyzések:

Lényegében két kritikai megjegyzésem van az egész dolgozatra vonatkozóan. Az egyik egy általános megjegyzés, amely a teljes dolgozatra vonatkozik. A dolgozat több részében előfordul, hogy DFT eredményekre illeszt paramétereket. A leírás alapján a DFT számításokat nem a szerző végezte, hanem együttműködésben kapta vagy az irodalomból vette. Ennek ellenére fontos lett volna, ha pontosan definiálja, hogy melyik DFT funkcionált használta. Az eredményekből gyanítható, hogy vagy lokális sűrűségfunkcionált vagy pedig valamelyik általánosított gradiens sűrűségfunkcionált használtak (féllokális), amelyek valóban alulbecsülik a tiltott sávot. Ez különösen az 5.1 táblázatban szúr szemet, ahol az egyik soktest-perturbációs módszerrel kapott (ú.n. GW-módszer) eredmények lényegesen nagyobb tiltott sávot adnak, amelyekből radikálisan eltérő Hamilton-operátor paraméterek származnak. Ugyanakkor vannak olyan DFT funkcionálok (tipikusan ú.n. hibridfunkcionálok), amelyek a kísérletekkel és GW-módszerekkel egyező tiltott sávot adhatnak. A másik megjegyzés egy konkrét dologra vonatkozik: a 3. fejezet 41. oldalán csoportelméleti módszerekkel levezeti, hogy az egyes sávokat a szimmetria szerint csoportosítva az egyes sávok milyen konkrét atomi pályák lineáris kombinációjából származhatnak, és a lineáris kombináció együttthatója spin-pálya csatolás erősségétől. Ugyanakkor pl. DFT számításokat használva egy konkrét funkcionállal spin-pálya kölcsönhatást is figyelembe véve ezek a lineáris kombinációs paraméterek kiolvashatóak az atomi pályákra való projekcióoperátorral. Érdekes módon az atomi pályák lineáris kombinációs kifejtését a 4. fejezet 46. oldalán tárgyalja nagy részletességgel. Véleményem szerint ezt el lehetett volna végezni a 3. fejezetben tárgyalt háromrétegű grafén esetére, ahol a DFT elektronszerkezetre való illesztés és a DFT számításban kapott projekció eredményeknek konzisztenciát kellene mutatnia. Ez várhatóan az eredményeket nem befolyásolta volna a fizikailag helyes paraméterhalmaz kikényszerítése mellett, csak a sokparaméterű illesztés kezdeti paramétereit tudná jól beállítani.

A szerző jelentős eredményeket ért el a spin-pálya kölcsönhatás értelmezésében a kétrétegű és háromrétegű grafénban, illetve ez egyrétegű TMDC anyagokban. Az utóbbi anyagban a kétdimenziós anyag síkjára merőleges elektromos térre sikerült levezetni a Bichkov-Rashba típusú spin-pálya kölcsönhatást. Az egyrétegű TMDC anyagokban emellett a Brillouin-zónába eső legfontosabb k-pontokra levezette a legegyszerűbb sávmodelleket a $k \cdot p$ módszerben, amelyet

utána sokan tudtak használni ezen anyagok elektronszerkezetének értelmezésében, amelyet valamilyen perturbáció ér. Ezen eredményeket az 1. és 2. tézispontokban fejtette ki, amely tézispontokat elfogadom új tudományos eredményként.

A szerző a 3. tézispontban megvizsgálta és értelmezést adott a Shubnikov—de Haas oszcillációkra az egyrétegű TMDC anyagokra kiindulva, amelyhez először a Landau-szinteket számította ki az előző tézispontban leírt $k \cdot p$ sávméletből. Az elméleti eredmények visszaadják a kísérleti spektrumok nagy részét, míg a nagyon alacsony hőmérsékletű esetre a sávmélet kiterjesztésére lenne szükség. Ezt a tézispontot elfogadom új tudományos eredményként.

A 4. tézispontban a TMDC anyagból készített kvantumpöttyök tulajdonságait határozta meg mágneses és elektromos tér alkalmazása mellett. Itt meghatározta, hogyan lehetne ezeket a kvantumpöttyöket kvantumbitként használni, ahol a sávban levő völgyek, spin-pálya kölcsönhatás, az alkalmazott elektromos és mágneses tér, valamint a kvantumpöttyökbe szorított elektronok közötti Coulomb-kölcsönhatás összjátéka adja a megoldásokat. Ezt a tézispontot elfogadom új tudományos eredményként.

Az 5. tézispontban megvizsgálta a kétrétegű MoS₂-ben a Berry-görbületet és a hozzá tartozó völgy és spin Hall-effektust. Egy nagyon fontos eredmény, hogy az anyag síkjára merőlegesen állított elektromos térrel a Berry-görbület szabályozható ezekben az anyagokban. A különböző rétegződésű kétrétegű MoS₂-ben a különböző topologikus állapotokat meghatározta, és az ehhez tartozó magneto-transzport együtthatókat. Ezt a tézispontot elfogadom új tudományos eredményként.

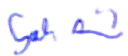
A 6. tézispontban szintén figyelemre méltó eredményt ért el a grafén-TMDC heteroréteg szerkezetek tulajdonságainak értelmezésében, ahol a grafén és TMDC rétegek közötti elfordítási szög függvényében vizsgálta azokat. Konkrétabban kimutatta azt, hogy a TMDC anyagra jellemző erős spin-pálya kölcsönhatás indukálhat spin-pálya kölcsönhatást a grafén rétegben, amelyet egy háromlépcsős folyamatként lehet jellemezni a perturbációs közelítésben. Ezt a tézispontot elfogadom új tudományos eredményként.

A 7. tézispontban a grafén-TMDC heterorétegekben további eredményeket ért el az indukált Bychkov-Rashba spin-pálya kölcsönhatás teljes feltérképezésével, beleértve az ú.n. spin-forgatási szöget. A TMDC/grafén/TMDC háromrétegű anyagban kvantum interferenciát sikerült kimutatni, amelynek kimérésére javasolt egy kísérleti módszert a számítások alapján. Ezt a tézispontot elfogadom új tudományos eredményként.

Összefoglalva: a doktori tézis kivételesen szépen szerkesztett munka, amely fontos, új tudományos elméleti eredményeket tartalmaz, amelyből minden tézispontot elfogadok új, tudományos eredménynek. Három tézispontra már most kijelenthető, hogy nagy jelentőségű eredményeket tartalmaz.

A fentiek alapján Dr. Kormányos Andor MTA Doktori tézisének nyilvános védeése kitűzését feltétel nélkül javasolom.

Budapest, 2023. július 21.



Dr. Gali Ádám