

Bírálat  
*Kormányos Andor: Spin-pálya csatolás atomi vékonyságú  
anyagokban és heteroszerkezeteikben  
című MTA doktori értekezésről*

A dimenzionalitás szerepének vizsgálata a fizikai rendszerek viselkedésére jelenleg a modern szilárdtestfizika fókuszában áll, így a kísérletileg előállított atomi vékony anyagok elméleti kutatása a grafén felfedezése óta újabb lendületet kapott. Az elektromos tulajdonságok széles spektruma nem csak a természetben előforduló anyagokban figyelhető meg, hanem kísérleti úton mesterségesen előállított szerkezetekben is fellelhető. Kormányos Andor disszertációja e témakör elméleti vizsgálatával foglalkozik a különféle kísérleti eredmények, kölcsönhatások és ún. szabadsági fokok (spin, völgy, réteg) tükrében, illetve az utóbbiak egymásra gyakorolt hatásait elemzi. Az ilyen rendszerek elméleti vizsgálata azonban csak megfelelő közelítések mentén lehetséges, mivel az egyes anyagokban lezajló fizikai folyamatok „teljes” leírásához szükséges paraméterkészlet kezelhetetlenül nagy lenne. A szerző többek között az egy- és többretegű atomi vékony (hetero) szerkezetek, azok térbeni forgatásával hangolható tulajdonságok és külső terek (pl. mágneses) alkalmazásával előálló fizikai rendszerekre vonatkozó sáv szerkezetét vizsgálja, illetve ezek alapján értelmezi az egyes fizikai folyamatokat. Itt említhetők például az egyes sávok degenerációjának felhasadása, a vezetőképesség térbeli oszcillációja, a Berry-görbülettel kapcsolatos transzport jelenségek. A pusztán csoportelméleti megfontoláson alapuló levezetések is gyakran már jó kiindulási alapot nyújtanak a dolgozatban vizsgált rendszerek értelmezéséhez, melyre szintén láthatunk példát a 3. fejezetben. Az alkalmazott közelítéseknek (egyrészecskés kép) azonban fizikai korlátuk van, mivel alacsony hőmérsékleten az elektronok közötti korreláció egyre jobban felerősödik, és a lezajló fizikai effektusokat nem lehet az egyrészecskés képben tárgyalni. A szerző ezért az elemzett rendszerek esetében az egyes kölcsönhatások, mint például spin-pálya kölcsönhatás, rendezetlenség, elektron korreláció vonatkozó energiaskáláinak ismertetésére is kitér.

Kormányos Andor disszertációjában a fent részletezett anyagok és vonatkozó fizikai folyamatok megoldására tett erőfeszítést mutatja be, illetve az általa és számos kollaborációban kifejlesztett különféle módszerek és közelítések alkalmazásával nyert eredményeket részletezi. Az egyes fejezetekben mind a különféle módszerek előnyeit, mind pedig azok hátrányait részletesen elemzi, illetve azok egyfajta hibaelemzését is megemlíti. A fentiek alapján megállapítható, hogy a dolgozat témaválasztása minden szempontból modern és időszerű.

Az angol nyelven íródott disszertáció 119 számozott oldalt tartalmaz, a köszönetnyilvánítással együtt 10 fejezetre tagolódik és egy igen részletes irodalomjegyzék segíti az olvasót az egyes témákban további részletesebb elemzések és eredmények hozzáférésehez. A dolgozat egy rövidítésjegyzékkel indul, ami nagyon hasznos a dolgozatban szereplő rövidítések feloldásához, illetve azok definícióinak gyors eléréséhez. Hasonlóan a jelölésjegyzék is nagyban segíti az olvasót a dolgozatban előforduló jelölések visszakereshetőségét, illetve azok definícióinak gyors megtalálását illetően. 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. A 33 oldalas bevezetés kifejezetten olvasható, jól strukturált módon foglalja össze a disszertáció megértéséhez szükséges elméleti hátteret. A különféle anyagcsaládok szerkezetének megismerését és a vonatkozó fizikai effektusok megértését pedig igényesen kivitelezett ábrák segítik. A szerző a disszertáció későbbi fejezeteiben tárgyalt atomi vékonyságú anyagok, egy és többretegű grafének, átmeneti fémek, illetve kvantum pöttyök tekintetében az alkalmazott elmélet és számítási módszerek részleteit is ismerteti (többek között spin-pálya csatolás, **k.p.** elmélet, csoportelméleti összefüggések, Berry-görbület, spintronika, kvantum Hall-effektust). A 2. fejezet a spin-, völgy- és rétegszabadsági fokokból adódó igen gazdag fizikai effektusokat vázolja, egyben előkészítve a disszertáció további fejezeteiben bemutatott eredmények egységes és koherens formában való tárgyalását. A 3.-8. fejezetek mindegyike egy rövid kivonattal kezdődik, mely összefoglalja az adott fejezetben vizsgáltakat, és útmutatást ad arra vonatkozólag, hogy a bemutatott rendszerek és eljárások milyen tulajdonságokkal rendelkeznek, miben térnek el egymástól, milyen célok motiválják azok vizsgálatát és milyen elért eredményekhez vezetnek. Az analitikus levezetések után a szerző az egyes módszerek és közelítések alkalmazhatóságát is tárgyalja. A bemutatott számítások igen részletesek, az eredmények pedig jól tükrözik az egyes módszerek hatékonyságát, illetve azok alkalmazhatóságainak korlátait. A szerző külön megemlíti azt az esetet is, amikor az egyrészecskés kép határt szab a fizikai effektusok megfelelő értelmezésének az egyre felerősödő elektronkorrelációk tükrében. A 3. fejezetben a szerző a spin-pálya csatolást vizsgálja háromretegű grafénban, és megmutatja további d-pályák

figyelembevételének szükségességét a korábbi közelítésekhez képest, illetve bevezet egy effektív Hamilton, ami kapcsolatot létesít a rétegek közötti SOC paraméterek és az impulzus függő viselkedés között. A 4. fejezetben a **k.p** hamiltoni leírás elméleti levezetését tárgyalja a szerző, illetve megmutatja, hogy milyen pontosabb közelítéseket tesz lehetővé mindez a korábban alkalmazott minimális modellhez képest. A többféle spin-pálya kölcsönhatás a többféle anyagcsaládban jól példázza a kialakuló fizikai folyamatok széles palettáját, melyeket a szerző ismét a kísérleti eredmények kontextusában tárgyal. Az 5. fejezetben a Landau-szintek spektrumának meghatározása szerepel a **k.p** elmélet alkalmazásával egyrétegű TMDS-ekben, ami alapján a völgy szabadsági fokok mágnese térbeni viselkedése egy effektív faktorhoz köthető. Az alacsony hőmérsékletű tartományban azonban a fizikai kép megfelelő leírása már megköveteli az erős elektron korrelációk figyelembevételét. A 6. fejezetben a szerző egy- és két kvantum pöttyöket vizsgál egyrétegű TMDS-ekben. Elsőként a bevezetett modellben a nemkölcsönható esetben vizsgálja a völgy szabadsági fokok felhasadását mágnese térben, később pedig egy effektív modell alapján a Coulomb-kölcsönhatás szerepét, mely erős csatolás esetén a Hesienberg-képben leírható spin fizikához vezet. A 7. fejezetben a spin és völgy szabadsági fokokat elemzi a szerző a kétrétegű MoS<sub>2</sub>-ben, melyek számos, kísérletileg hangolható tulajdonsággal rendelkeznek. Példaként említhető a kialakuló völgy Hall-effektus, amely a sávszerkezet topologikus tulajdonságaihoz köthető Berry-görbülettel magyarázható. A réteg sorrend függő **k.p** Hamilton anyagi paramétereit ismét DFT számítás szolgáltatta, de a további elméleti vizsgálat a szerzők munkássága.

A dolgozat kifejezetten igényes szerzői munkásságról tesz tanúbizonyságot, a mű olvasása közben csak elvétve találtam gépelési és apró szerkesztési hibákat. Ezek egy rövid listászerű felsorolását az alábbiakban foglalom össze:

- 55. oldal: he -> the +-K

- 81. oldal: and the corresponding and the valley

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

A disszertációval kapcsolatban a szerzőnek az alábbi kérdéseket teszem fel:

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?

2. 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 sávszerkezet, a fonon és az elektron-elektron kölcsönhatások szerepét meghatározni.

3. A **k.p** elméletnek milyen alkalmazhatósági korlátai ismertek, milyen elvárások fogalmazhatók meg az alkalmazott bázisfüggvények számára?

4. 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-modellhez hogyan lehet eljutni szimmetria megfontolások alapján figyelembe véve a spin-pálya, Coulomb- és völgy szabadsági fokok energiaskáláit is.

Összességében kijelenthető, hogy mind a disszertáció, mind pedig az ahhoz kapcsolódó 7 tézispont a jelölt saját, nemzetközi szinten is kiemelkedő tudományos eredményeit tartalmazza, melyek nívós szaklapokban kerültek publikálásra. A tézisekben szereplő eredmények mindegyikét a jelölt saját új, tudományos eredményeként fogadom el, amennyiben ezeket a jelölt a többszerzős publikációkban saját eredményként különíti el. A bemutatott eredmények magas színvonala minden szempontból kielégíti az MTA doktora fokozat megszerzésével szemben támasztott kritériumokat. A feltett kérdéseimre adott válaszoktól függetlenül javaslom a disszertáció nyilvános vitára való kitűzését, és sikeres védelem esetén az MTA doktora cím odaítélését.

Budapest, 2023.09.12.



Legeza Örs  
az MTA doktora