

Válasz GESZTI TAMÁSNAK

“ELEKTRONTRANSPORT ATOMI MÉRETSKÁLÁN”

című doktori értekezésem bírálata

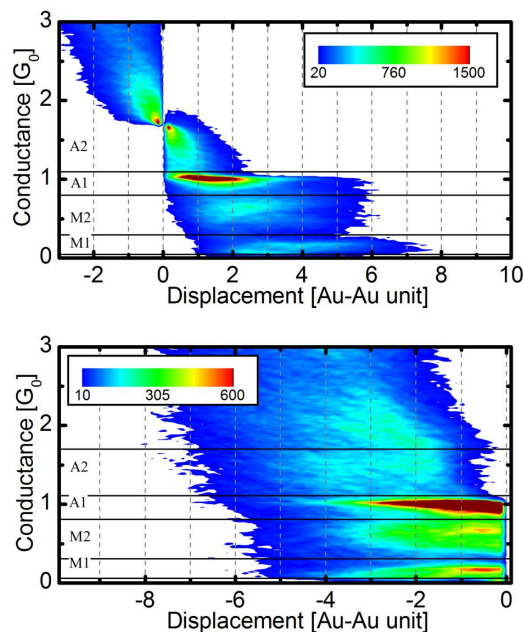
Mindenek előtt köszönöm Geszti Tamásnak értekezésem alapos átolvasását, és a dolgozat különböző fejezeteire vonatkozó gondolatébresztő kérdéseit, melyekre az alábbiakban válaszolok.

1. A bevezető 2. fejezetben említi a vezetési csatornák bezáródását a minta elvékonyodásával. Az átmenet azonban nem éles: alagutazás és rezonancia-szórás színezheti. Jelenik meg ebből valami a mérési eredményekben?

Az atomi méretű kontaktusok elszakadásakor kialakuló rés távolságát nehéz folytonosan változtatni, hiszen szakadás előtt túlfeszítjük a kontaktust, majd hirtelen távolra ugranak a szemközti atomok. A fentiek miatt az alagutazás tartománya kevésbé jól hangolható, mint a félvezető kétdimenzióselektroon-gáz-rendszerekben. Mindemellett tiszta kontaktusokban az exponenciális távolságfüggést mutató alagútáram egyértelműen kimérhető (pl. 3.2./b ábra), nagyobb szerves molekulákkal alkotott molekuláris kontaktusokat pedig az irodalomban gyakran a HOMO vagy LUMO szinten keresztül történő rezonáns alagutazás modelljével írják le. Az $I(V)$ görbék illesztéséből a modell paraméterei (energiaszint, csatolási állandók) meghatározhatók, termofeszültség mérések alapján pedig az is eldönthető, hogy a HOMO vagy a LUMO szinten keresztüli vezetés dominál. Minderről részletes leírás található E. Scheer és J.C. Cuevas *Molecular electronics* című könyvében [38].

2. A 2.18/b ábra generálásához hogyan választják meg a referencia-vezetőképességet, függ-e az eredmény áttekinthetősége ettől a választástól?

A referencia választása nagyban befolyásolja az ábráról leolvasható információ tartalmát. Például nagyobb vezetőképességnél ($>1G_0$) összeillesztett görbék kétdimenziós hisztogramjáról nehéz leolvasni, hogy milyen konfigurációkból szokott elszakadni a kontaktus, hiszen a különböző görbéken különböző távolságoknál történik a szakadás. Ha viszont a szakadás tartományában „toljuk össze” a görbéket, akkor az előbbi kérdésre világos választ kapunk, magasabb vezetőképességeknél viszont elmosódik a kétdimenziós hisztogram. Egy jelenleg referálás alatt álló cikkünkben demonstráljuk a fentieket, a részletek ismertetése nélkül az alábbi ábrán szemléltetem Au-CO kontaktusok kétdimenziós hisztogramját két különböző referencia esetén.



Au-CO kontaktusok kétdimenziós vezetőképességgörbe-hisztogramja $G_{ref}=1.7G_0$ (felül) és $G_{ref}=0.01G_0$ (alul) esetén. Forrás: Alternative types of molecule-decorated atomic chains in Au-CO-Au single-molecule junctions, Z. Balogh, P. Makk and A. Halbritter (referálás alatt)

Általános elvként elmondható, hogy referencia-vezetőképességnek érdemes olyan tartományt választani, ahol a vezetőképesség-hisztogram minimumot mutat, hiszen ekkor lesz a kétdimenziós hisztogram legkevésbé érzékeny G_{ref} pontos értékére.

3. A mechanikailag kontrollált törés folyamatában mennyire megoldható a két atomi ugrás közötti rugalmas megfeszítés átmeneti visszaengedése?

Egy vezetőképesség-platón belül a kontaktus megfeszítettsége oda-vissza hangolható, miközben a vezetőképesség reprodukáló módon változik. Bizonyos esetekben akár vezetőképesség-ugrásokon keresztül is nagyjából reprodukáló módon oda-vissza változtatható a vezetőképesség, ilyenkor persze az ugrás környékén hiszterézis tapasztalható.

4. A 4. fejezetben említi, hogy az interferenciát nem lehet elmozdulás útján kontrollálni, mert az ehhez szükséges elmozdulás már atomi átrendeződést okoz. A tipikus hullámhossz 1 angström, ennek negyedrésze már jól látható nyomot hagy az interferencián. Ekkora elmozdulás, ha jól értelmezem a 4.1.(a) ábrát, még nem igazán okoz átrendeződést. Kérem, kommentálja ezt.

A disszertáció 43. oldalán az alábbi megjegyzés található:

„Az interferenciajárolékok vizsgálatát némileg nehezíti, hogy a trajektóriahosszt kísérletileg csak a hullámhossz tört részével tudjuk változtatni, hiszen egy teljes

hullámhossznyi trajektóiahossz-változtatás már olyan nagy elmozdulásnak felelne meg, ami alatt biztosan atomi átrendeződés is bekövetkezne.”

A fenti kérdés fényében mindezt annyiban pontosítanám, hogy ha az elektródák távolságát a hullámhossz többszörösével tudnánk változtatni atomi átrendeződés nélkül, akkor egyedi görbéken is egyértelműen kvantuminterferencia-jelenségre utaló struktúrákat tapasztalnánk. Azonban tipikusan valóban csak a hullámhossz mintegy negyedrésszel tudjuk hangolni a távolságot átrendeződés nélkül, így egyedi görbéken sokszor csak monoton változás látszik, azonban a görbemeredekség statisztikai vizsgálatával eldönthető, hogy ez elsősorban a transzmisszió távolságfüggéséből, vagy pedig interferenciajelenségből adódik-e.

5. Lehet-e az interferenciát kontrollálni célzottan implantált szennyezőatomokkal?

Atom méretű nanovezetékeknel jól definiált helyre nem tudunk implantálni szennyező atomot, azonban egy érdekes kísérlet lenne az interferenciakorrekciókat statisztikailag vizsgálni a szennyező atomok különböző koncentrációja mellett.

6. A 6. fejezetben bemutatott, Au-H₂ kontaktusokban bemutatott óriás negatív differenciális vezetőképesség értelmezése mennyire tekinthető lezártnak? Vizsgálták-e a kétféle tartomány közötti átmenet dinamikáját, esetleg a karakterisztika váltófeszültségű végigfuttatásával, a frekvencia függvényében? Felmerült-e, hogy a kétféle tartomány között nem atomi átrendeződés, hanem elektron-dinamikai fázisátmenet tesz különbséget?

Az óriás negatív differenciális vezetőképesség értelmezésével kapcsolatban még számos nyitott kérdés maradt, illetve ahogy a disszertációban diszkutáltam, alternatív modellek állnak rendelkezésre. Valóban, a jelenség dinamikájának a vizsgálatából hasznos információt nyerhetnénk. A korábbi mérőrendszerünkben csak korlátozott sáv szélességgel (<30kHz) tudtunk méréseket végezni, de jelenleg már nem okozna gondot szélesebb dinamikai tartományban vizsgálni a jelenséget. A frekvenciafüggő $I(V)$ görbék mérésén túl különösen hasznos lenne az átmeneti tartományban esetlegesen kimutatható telegráffluktuáció vizsgálata, mely egyértelműen utal a dinamika időskálájára. A mi méréseinkben ez utóbbit nem sikerült kimutatni, a [148]-as hivatkozásban azonban réz-hidrogén felületen, STM-elrendezésben egyértelmű telegráffluktuáció látszott. A téma aktualitását mutatja, hogy berlini kutatók kombinált STM-AFM mérőrendszerrel vizsgálták a réz felületen adszorbeált hidrogén sztochasztikus mozgását (*Driving a Macroscopic Oscillator with the Stochastic Motion of a Hydrogen Molecule*, Christian Lotze, Martina Corso, Katharina J. Franke, Felix von Oppen, Jose Ignacio Pascual, **Science** 338 p. 779 (2012))

A disszertációmban bemutatott mérések kapcsán a 6.4./a ábra alapján érzem alátámasztottnak, hogy a hidrogénmolekula deszorpciója áll a jelenség hátterében, hiszen magas feszültségnél a tiszta aranykontaktusokra jellemző viselkedést, alacsony feszültségnél pedig egyértelműen molekuláris kontaktusra utaló görbealakot látunk.

7. A 7.1. ábrán nem látszik szignifikánsnak a 2 vagy 3 csatorna közötti különbség. A mérési adatok tényleg alátámasztják a 3 csatorna beazonosítását?

A görbék kiértékelésekor az illesztés hibáját vizsgáltuk, és azt tapasztaltuk, hogy a csatornaszám növelésével egy ideig szignifikánsan csökken a hiba, majd további nyitott csatornák megengedésével már a hiba nem csökken, és a domináns csatornák transzmissziója sem változik, hanem közel zérus transzmissziójú újabb csatornák jelennek meg. Azt a legkisebb csatornaszámot fogadtuk el a legjobb illesztésként, melynél ezen minimális hibájú illesztést elértük.

8. A 68. oldalon az aranylánchoz oldalról kötődő hidrogénmolekula vezetést csökkentő hatását azzal magyarázza, hogy a hidrogén növeli az aranyatomtávolságot, pedig az ok lehet a hidrogénmolekula elektron-elszívó hatása is, ezt sűrűségfüggő számolással lehetne ellenőrizni.

Egyetértek a felvetéssel. A közelmúltban Au-CO rendszeren végzett vizsgálataink, illetve ezek összehasonlítása korábbi DFT számolásokkal demonstrálta hogy az egyszerű geometriai intuíció tévútra vezethet, hiszen ezen rendszerben az atomláncba ékelődő CO molekula esetén viszonylag nagy a vezetőképesség, a torzítatlan atomláncba oldalról kötődő CO molekula esetén viszont destruktív Fano-interferencia miatt kifejezetten alacsony vezetőképesség adódik. (*Effect of stretching on the ballistic conductance of Au nanocontacts in presence of CO: A density functional study*, G. Sclauzero, A. Dal Corso, A. Smogunov, Phys. Rev. B 85, p165412, 2012)

9. A memrisztor-működéssel elérhető sáv szélességben mennyire lehet szerepe az ionok diffúziós dinamikájának?

Nagyterfogatú memrisztor-kontaktusokban [pl. 179] lassú kapcsolást lehet látni, amiben szerepet játszik a lassú diffúziós dinamika. Az általunk vizsgált rendszernek nagy előnye, hogy közel atomi méretskálájú memrisztort vizsgálunk, így nincs szükség makroszkopikus iondiffúzióra, hanem pár száz vagy akár pár tíz atom lokális átrendeződése a nagy feszültség hatására már komoly vezetőképesség-változást okoz.

10. A 11.2. ábra szerint a mért lokális spinpolarizáció nem mutatja a makroszkopikusan jól látható fázisátalakulást. Ellenőrizték ezt a minta különböző helyeire illesztett szupravezető kontaktussal?

Egymástól független helyeken elvégzett lokális mérések alátámasztják azt, hogy a tömbi fázisátalakulási hőmérséklet felett is jelentős spinpolarizáció tapasztalható. Érdekes lenne vizsgálni a lokális spinpolarizáció térbeli inhomogenitását, erre azonban egyelőre nem áll rendelkezésre megfelelő mennyiségű kísérleti adat.

Budapest, 2015. május 18.



Halbritter András