

Válasz KÜRTI JENŐNEK

“ELEKTRONTRANSPORT ATOMI MÉRETSKÁLÁN”

című doktori értekezésem bírálata

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

3) Mi az oka, hogy az 5.1. ábra (a) és (b) részén látható, a Pd + H rendszerre vonatkozó vezetőképesség-hisztogramok $1 \cdot G_0$ körüli része észrevehetően különbözik egymástól? Ugyanott, milyen atomi konfigurációnak felel meg a kb. $2,2 \cdot G_0$ -nál megjelenő csúcs?

A hisztogramok pontos alakja valamelyest függ a fém nanokontaktus lokális geometriájától (pl. nyílásszög, domináns kristálytani orientáció, stb), és a több ezer görbére történő átlagolás ellenére is elképzelhető, hogy különböző minták, különböző adatsorok hisztogramjainak a részletei eltérnek egymástól.

A $2.2G_0$ -nál megjelenő csúcsra nehéz megalapozott magyarázatot adni, hiszen még az $1G_0$ -os csúcs esetén sem teljesen tisztázott, hogy ez egy egyatomos Pd kontaktus PdH elektródák között, vagy esetleg atomi hidrogén, vagy merőleges irányba álló hidrogén molekula épül be a kontaktusba. Az előbbi esetben az $1G_0$ -os csúcs feltehetően egy dimer Pd atomi kontaktusnak felel meg, így a $2.2G_0$ -as csúcs esetleg lehet egy monomer Pd kontaktus, bár meglepő, hogy az ennek megfelelő csúcsot nem látjuk tiszta Pd esetén. Ha az $1G_0$ -as csúcs valamilyen hidrogénes konfigurációnak felel meg, akkor $2.2G_0$ -as csúcs lehet egy Pd atomi kontaktus, melynek az oldalához hidrogén kötődik (*molekuláris prekurzor konfiguráció*). Ebben az esetben a PdH elektródák csökkentik a vezetőképességet a tiszta Pd-hez képest, viszont kontaktus oldalához kötődő hidrogén növeli, így elképzelhető, hogy összességében a tiszta Pd atomi kontaktusénál nagyobb vezetőképességet kapunk. Fontos azonban hangsúlyozni, hogy mindez csak a lehetőségek mérlegelése, és nem kísérletileg vagy elméletileg alátámasztott állítás.

4) Történtek-e DFT-számolások platina-hidrogén illetve palládium-hidrogén kontaktusokra?

Itt jegyzem meg, hogy kvantumkémikusoktól azt tanultam, hogy a DFT-módszert nem illik ab initio módszernek hívni, hanem inkább elsőelvű (first principles) módszernek.

Számos DFT számolás történt platina-hidrogén és palládium-hidrogén rendszerre.

Pt-H₂ esetében a kísérleti eredményeket bemutató publikációk [52,92] is támaszkodnak elméleti szimulációkra, a [92] publikáció a rezgési módusok DFT szintű szimulációját is tartalmazza. További elméleti publikációk vizsgálták a Pt-H₂ kontaktusok vezetési tulajdonságait:

- (1) J. C. Cuevas, J. Heurich, F. Pauly, W. Wenzel, and G. Schon, Nanotechnology 14, R29 (2003)
- (2) Y. Garcia, J. J. Palacios, E. SanFabian, J. A. Verges, A. J. PerezJimenez, and E. Louis, Phys. Rev. B 69, 041402 (2004)
- (3) K. S. Thygesen and K. W. Jacobsen, Phys. Rev. Lett. 94, 036807 (2005)
- (4) V. M. Garcia-Suarez, A. R. Rocha, S. W. Bailey, C. J. Lambert, S. Sanvito, and J. Ferrer, Phys. Rev. B 72, 045437 (2005)
- (5) K. H. Khoo, J. B. Neaton, Hyoung Joon Choi, and Steven G. Louie, Phys. Rev. B 77, 115326 (2008)

melyek közül (2) alapján felmerül, hogy egy merőleges irányban álló molekula magyarázza a kísérleteket, de a (3) publikációban közölt részletes rezgésimódus-szimulációk, illetve ezek összehasonlítása a kísérleti eredményekkel megerősítik, hogy hosszirányú hidrogénmolekula felel meg a 1G₀-os vezetőképességhisztogram-csúcsnak. A (4)-(5) publikációk Pt-H₂ és Pd-H₂ kontaktusok vezetési tulajdonságait hasonlítják össze. Mindkét publikáció megerősíti a Pt-H₂ kontaktusok 1G₀-os vezetőképességét, Pd-H₂ kontaktusra pedig kisebb vezetőképességet adnak (0.6G₀, illetve 0.35G₀), melyek közel állnak a kísérletünkben megfigyelt csúcspozícióhoz (0.3-0.6G₀), azaz palládium-hidrid elektródák feltételezése nélkül „magyarázatot adnak a kísérleti megfigyelésre”. Fontos azonban megjegyezni, hogy kísérleteinkben a nagyobb kontaktuson felvett pontkontaktus-spektrum alapján bizonyítottan palládium-hidrid elektródák közé épül be a hidrogén.

Az alábbi publikáció kifejezetten palládium-hidrid elektródák közt kialakuló hidrogén kontaktusokat vizsgál:

- (6) X. J. Wu, Q. X. Li, and J. L. Yang, Phys. Rev. B 72, 115438

A párhuzamos H₂ molekuláris kontaktus vezetőképessége palládium hidrid és tiszta palládium elektródák esetén is összeegyeztethető a kísérleti megfigyeléssel. Az 1G₀-nál megjelenő csúcsot vezetőképesség szempontjából jól leírja az a szimulált konfiguráció, melyben a Pd vagy PdH elektródákat egy hidrogén *atom* köti össze, azonban ez a geometria egyetlen nyitott csatornával rendelkezik, ami ellent mond a kísérleti megfigyelésnek. A publikációnkban felvetett további lehetőséget (PdH elektródák közötti egyatomos Pd kontaktus) nem vizsgálják a szerzők.

5) *Hogyan viszonyul az ezüstsulfid memrisztor más típusú (pl. titándioxidos) memrisztorokhoz a kapcsolási idő és a méret szempontjából?*

Fémoxid memrisztorok sebességének tekintetében úgy tudom, hogy a [176] publikáció tartja a rekordot 100ps nagyságrendű kapcsolási idővel mikrométeres skálájú tantáloxid memrisztorban. Tudomásom szerint az általunk bemutatott kísérletek demonstráltak először olyan memrisztort, ami egyszerre nagyon gyors és nagyon „kicsi”, azaz egy nanométeres méretskálájú eszköz ns-os időskálájú kapcsolásra képes.

6) *Léteznek-e memóriával rendelkező más passzív áramköri elemek is (kapacitás, induktivitás)? Ha igen, lehet-e ezeknek a memrisztorokéhoz hasonló jelentősége?*

A memóriával rendelkező kapacitást és induktivitást elméleti szinten – a memrisztorokhoz hasonlóan [163] – Leon Chua vetette fel (*Circuit elements with memory: memristors, memcapacitors, and meminductors*, M. Di Ventra, Y.V. Pershin, L.O. Chua, *Proceedings of the IEEE* **97**, p. 1717, 2009). A memkapacitásban a töltés-feszültség görbék, a meminduktivitásban pedig a fluxus-áram görbék mutatnak hiszteretikus viselkedést, azaz a kapacitás/induktivitás függ az *előzményektől*. Külön érdekessége ezen rendszereknek, hogy – a memrisztorral ellentétben – energia is tárolható bennük. A szakirodalmat tanulmányozva ezen a téren elsősorban elméleti aktivitás tapasztalható, a memrisztorok tanulmányozásához hasonló kísérleti érdeklődés egyelőre nem látszik, talán azért, mert egy memrisztorhoz képest vélhetően bonyolultabb elektronikai elrendezésre van szükség ahhoz, hogy egy memkapacitásban vagy meminduktivitásban tároljunk információt.

A fenti kérdést talán érdemes egy kicsit tágabb kontextusban is megvizsgálni. Elvileg egy hagyományos kondenzátor is alkalmas információ tárolásra, hiszen egy feltöltött, majd magára hagyott kondenzátor megőrzi a töltését. Azonban kiolvasáskor ugyan olyan időskálán töröljük az információt, mint amennyi időre a beíráshoz volt szükség. Emiatt információ tárolásra érdemes egy olyan *nemlineáris* kondenzátort használni, melyre nagy feszültséggel gyorsan felvihetünk töltéseket, kis feszültség alkalmazása esetén viszont csak nagyon lassan sül ki. A széles körben használt flash-memóriák gyakorlatilag ezt valósítják meg, hiszen a feltöltés egy alagútátmeneten keresztül történik, mely nagy feszültséggel letörhető (Fowler-Nordheim tartomány). A töltésállapot beavatkozásmentes kiolvasásához egy háromterminálos tervezérelttranzisztor-elrendezésre van szükség. Mindezek alapján a flash-memóriát is egyfajta memkapacitásnak tekinthetjük.

A fenti gondolatmenet saját mérésekhez is kapcsolódik, hiszen egy memrisztor is akkor működik jól, ha nagy feszültség mellett gyorsan változtatható az állapota, kis feszültség mellett viszont csak lassan relaxál. Ag₂S memrisztorokban a közelmúltban megjelent cikkünkben demonstráltuk a nemexponenciális relaxáció jelenségét (*Non-exponential*

resistive switching in Ag₂S memristors: a key to nanometer-scale non-volatile memory devices, A. Gubicza, M. Csontos, A. Halbritter, G. Mihály, *Nanoscale* **7**, p4394, 2015)

7) Jelenleg milyen fázisban van a kombinált alacsony hőmérsékleti STM–AFM mérőrendszer fejlesztése?

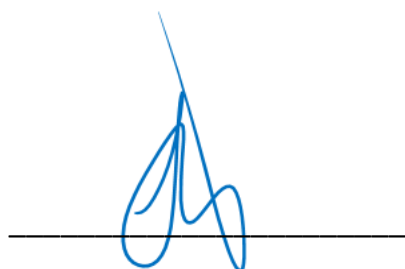
Az STM üzemmód a szobahőmérsékleti mérőrendszerünkben rutinszinten működik, és alacsony hőmérsékleten is megtörténtek az első sikeres tesztmérések. Az AFM üzemmód fejlesztése tekintetében a 3.7./d ábrán ismertetett első sikeres tesztmérés óta – idő hiányában – még nem történt érdemi előrelépés.

A szakmai kérdések mellett külön köszönöm a formai és helyesírási hibákra vonatkozó megjegyzéseket, melyek közül egyre szeretnék reflektálni. A differenciális vezetőképesség-görbe helyesírását illetően a helyesiras.mta.hu portálra támaszkodtam, mely szerint:

A "differenciális vezetőképesség" főnévi szerkezetet és a "görbe" főnevet kötőjellel írjuk, és az első szerkezetet egybeírjuk (összerántjuk) az alábbi szabály alapján:

Ha egy különírt szókapcsolat ("differenciális vezetőképesség") olyan utótagot kap, amely az egészhez járul, az egyébként különírandó előrészt az új alakulatban egybeírjuk, és ehhez az utótagot (a szótagszámtól függetlenül) kötőjellel kapcsoljuk.

Budapest, 2015. május 18.



Halbritter András