

Bírálat
Halbritter András
Elektrontranszport atomi méretskálán
c. MTA doktori értekezéséről

Halbritter András doktori értekezésének fő témája a "molekuláris elektronika", a jelölt definíciója szerint olyan elektronikai eszközök tanulmányozása, "melyekben az áram egyetlen atomon, vagy egyetlen molekulán keresztül folyik". Az atomi méretű jelenségek kutatásában látható fejlődést, a képalkotó módszerek, a mikroszkópia és a spektroszkópia terén ebbe az irányba tett szinte naponta tapasztalható újdonságok megjelenését nem túlzás robbanásszerűnek nevezni. A témaválasztás tehát feltétlenül időszerű. Nem kevésbé dicséretes a kutatás filozófiája, egy olyan kísérleti eszközpark megtervezése és megépítése, ami ezeknek az új jelenségeknek a vizsgálatára alkalmas, majd ezzel világszínvonalú mérések végzése és azok értelmezése korszerű elméleti módszerek segítségével.

A bevezetés a vizsgált problémák, illetve a jelenségek újszerűségét vázolja fel, nagyon élvezetesen, mintegy felkeltve az olvasó étvágyát a továbbiakra. Ezután következik a mérőrendszer fejlesztésének leírása, amit a jelölt már PhD munkája során elkezdett, de világosan elkülöníti az újabb eredményeket, amelyek elviekben és a gyakorlatban is messze meghaladják a kezdeti szakasz tevékenységét (gondolok itt a molekulák nanokontaktusokon való vizsgálatához kifejlesztett berendezésre). A következő hét fejezet egymásután tárgyalja a saját eredményeket: kvantuminterferencia-effektusok meghatározását atomi kontaktusok vezetőképesség-görbéinek elemzéséből (4. fejezet), hidrogénmolekulák beépülését palládium kontaktusokba (5. fejezet), óriás negatív differenciális vezetőképesség jelenségét és magyarázatát arany-hidrogén nanokontaktusokban (6. fejezet), atomi és molekuláris kontaktusok vizsgálatát szupravezető elektródok segítségével subgap-módszerrel (7. fejezet), atomláncok kölcsönhatását molekulákkal (8. fejezet), vezetőképesség-görbék vizsgálatát korrelációanalízissel (9. fejezet). A memrisztorok (10. fejezet), illetve a spintronika (11. fejezet) témája már kiterjeszti a meglévő kísérleti háttér adta lehetőségeket tömbi jelenségek atomi szintű magyarázata irányába, illetve ezen jelenségek alapos megértésén keresztül az alkalmazások felé is, nem tévesztve szem elől, hogy a jelenségeket először megérteni kell és csak azután lehet felhasználni. A tézisek felépítése nem felel meg szigorúan a fejezetek sorrendjének, hanem az alkalmazott vizsgálati módszerek szerinti csoportosítást használ. Ez a logika is tökéletesen követhető. A dolgozat igen élvezetes olvasmány: az eredményeket precíz, de közérthető formában foglalja össze, a részletek tekintetében pedig a közleményekre utal.

A dolgozat kiállítása példászerű, nyelvezete szabatos, magyar helyesírása majdnem tökéletes, bár sajnos nem sikerült elkerülnie minden csapdát, amit az angol szaknyelvnek való folyamatos kitettség okoz. Ezeket az apró elírásokat a dolgozatban megjelöltem, nem olyan súlyúak, hogy érdemes lenne rájuk itt kitérni. Az ábrák informatívak és esztétikusak. Egyetlen nyelvi megjegyzésem lenne, ami már túl is mutat az egyszerű nyelvtanon, és más tudományok felé vezet. Bár a jelölt gondosan kerüli ennek említését, a

molekuláris elektronika előbb-utóbb kapcsolatba kell, hogy kerüljön a kémiával, hiszen már az itt vizsgált egyszerű rendszerek esetében is elkerülhetetlen a kémiai kötés vagy a molekulaszpektroszkópia fogalmainak használata. Célszerű lenne a megfelelő nomenklatúrát egységesen alkalmazni, hogy a más területen már "lefoglalt" szóhasználatból ne kerüljünk konfliktusba. Ilyen a "molekula kötés energiája" (56. old.), amiről egy vegyésznek egyértelműen az az energia jut eszébe, ami egy hidrogénmolekula két hidrogénatomra való bomlásához szükséges, itt azonban az adszorpciós energiát jelenti. A "molekularezgések" kifejezést sem érzem szerencsésnek, hiszen itt a fématomok is részt vesznek a rezgésben. Problémás még a fém-molekula hibridszerkezetre következetesen alkalmazott "molekuláris konfiguráció". Mivel a jövőben, reményeim szerint, egy nagyobb tudományos iskola felnövése várható a jelölt körül, akik átveszik a tudományos nyelvet is, itt felelősen kell eljárni.

A tézispontokhoz közvetlenül 17 publikáció kapcsolódik, ebből 3 Physical Review Letters és Physical Review B, de a terület interdiszciplináris jellegéhez kapcsolódva a nanotudomány és nanotechnológia olyan nagy tekintélyű folyóiratai is szerepelnek, mint az ACS Nano (2), vagy a Nanoscale (3).

A dolgozat, illetve az abban leírt munka legfőbb pozitívumának azt tartom, hogy olyan új irányt honosított meg a hazai kutatásban és tanítványain keresztül az oktatásban is, ami a magyar fizika versenyképességének folytatására alkalmas a nanotudományok területén. Biztos vagyok benne, hogy a befektetett hatalmas munka meg fog térülni.

A dolgozattal kapcsolatban a következő kérdéseim, illetve megjegyzéseim vannak:

1. Az 5.1. ábrán nemcsak a $0.5G_0$ és G_0 , hanem $2G_0$ vezetőképességnél is feltűnik egy maximum. A vonatkozó publikációból az is megtudható, hogy további hidrogénadagolásra ez a maximum eltűnik, és csak a $0.5G_0$ -nél jelentkező csúcs marad meg. Kérem, fejtse ki, hogy mi ennek a viselkedésnek az oka.

2. A hidrogén differenciális vezetőképességéből meghatározott rezgési frekvencia lényegesen kisebb, mint a hidrogénmolekula Raman-spektroszkópiával mért nyújtási frekvenciája (500 meV). A különbség a hidrogénmolekula és az elektród közötti erős kölcsönhatásból adódik, ami felveti a kérdést, hogy valóban beszélhetünk-e itt molekulákról, vagy egy fém-hidrogén komplex keletkezik. Kérdésem, hogy összehasonlíthatók-e az így mért rezgési frekvenciák más, direkt technikákkal kapott eredményekkel (infravörös vagy Raman-spektroszkópia) fémet és hidrogént tartalmazó komplex molekulákon, vagy adszorbeált rendszereken?

3. A 6. fejezetben, ahol az óriás negatív differenciális vezetőképesség magyarázatát adja kétállapotú rendszereket feltételezve, megemlíti egy alternatív modellt is, ami a rezgési módusok szerepét hangsúlyozza. Fontos lett volna ehhez hozzátenni, hogy az alternatív modellben **tranzverz** rezgési módusok szerepelnek, azaz a hidrogénmolekula "kihajlása" az elektródok közül. Kérdésem, hogy egy ilyen rezgés nem vezethet-e a molekula deszorpciójához kellően nagy amplitúdó esetén, és ezzel nem lehetséges-e a két modell

összeegyeztetése?

4. A 7. fejezet egyik következtetése (64. oldal), hogy a nióbbium-hidrogén kontaktusokba nem épülnek be a hidrogénmolekulák. Milyen mechanizmussal magyarázza ebben az esetben az óriás negatív differenciális vezetőképességet (7.4. ábra)?

5. A szimmetrikus hidrogénmolekuláktól eltérően, a CO esetében már kémiai hatások is közrejátszhatnak az adszorpcióban: ismertek a fém-karbonil vegyületek, ahol az esetek többségében a szénatom (és nem az oxigénatom) alkot koordinációs kötést a fémmel. Befolyásolhatja-e ez a hatás a "párhuzamos-merőleges" átmenetet a kontaktusokban? Lehetséges-e, esetleg kétféle elektródával, annak tanulmányozása, hogy a molekula két atomja különbözően viselkedik?

6. Utolsó kérdésem a jövőre vonatkozik, hiszen egy ilyen lendületesen fejlődő területen biztos vagyok benne, hogy a jelölt folytatni kívánja az elkezdett munkát. Kutatói intuíciója, illetve a világban megfigyelhető folyamatok alapján mit gondol, merre érdemes haladni: tömbi rendszerek, esetleg vékonyrétegek vagy alacsony dimenziós szerkezetek finom felbontású vizsgálata irányába, vagy nagyobb molekulák, biológiai rendszerek, fehérjék, sejtek tanulmányozása felé?

Fenti kérdésekre kapott válaszoktól függetlenül meggyőződésem, hogy Halbritter András dolgozata messzemenően kielégíti az MTA Doktora cím odaítélésének feltételeit. A tézisek mindegyikét új tudományos eredménynek fogadom el. Javaslom a doktori mű nyilvános védésre bocsátását.

Budapest, 2015. május 12.

Kamarás Katalin
kutatóprofesszor
MTA Wigner FK SZFI