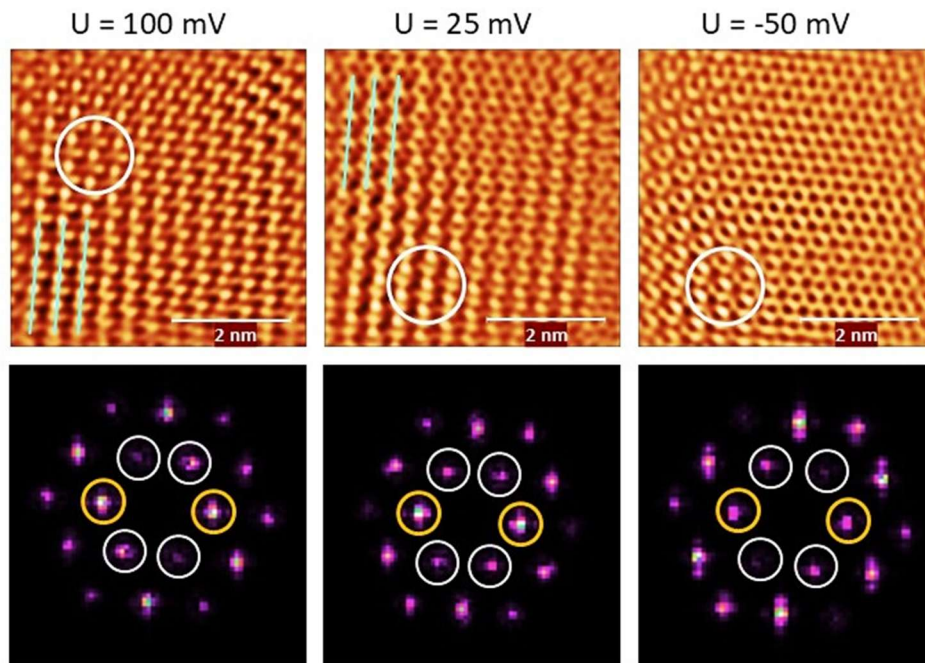


Válaszok Dr. Kormányos Andor bírálataira

Először is köszönöm Dr. Kormányos Andornak az értekezésem alapos áttanulmányozását és konstruktív bírálói véleményét. A feltett kérdésekre az alábbi válaszokat adom:

1. a) 28. ábra felső sorában latható STM felvételek a dolgozat szerint a grafénpötty közepén készültek. A mintázat mind a három képen helyfüggőnek tűnik: pl. a felső sor jobb szélő ábráján a fehér körrel jelzett területen levő mintázat eléggé eltérőnek tűnik ugyanezen ábrának a jobb felső részén látható mintázattól. Ezt mi okozhatja? A grafénpötty szélei hatással vannak annak közepén is az állapotsűrűségre?

Igen, a grafénpötty annyira kis méretű, hogy a közepén mért STM felvételeket befolyásolják a szélek. A völgyközi szórás főleg a „karosszék” irányú élen megy végbe. Kijelenthető, hogy az STM felvételek bal oldalán, a karosszék élhez közelebb eső részekben jobban megfigyelhető a $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ típusú szuperstruktúra (1. ábra). A kérdésben említett felvétel esetén ($U = -50$ mV) a jobb felső részen, azaz távolabb a karosszék éltől, kevésbé alakul ki ez a mintázat. A grafénpötty szélének hatása abban is látszik, hogy az STM felvételeken (főleg $U = 100$ mV és $U = 25$ mV esetén) a karosszék éllel párhuzamos csíkok azonosíthatók a mintázatban, illetve a 2D Fourier-spektrumokon a karosszék irányra merőleges térbeli periodicitás komponensei nagyobb intenzitásúak (narancssárga karikákkal jelölve).



1. ábra. Első sor (ugyanaz, mint a disszertáció 28. ábráján): a grafénpötty közepén különböző előfeszítéssel mért STM-felvételek. Második sor: a mért STM-felvételek kétdimenziós Fourier-spektruma. A bekarikázott komponensek adják a $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ típusú, völgyközi szórásból származó szuperstruktúrákat. A „karosszék” irányú (lásd világos kék segédvonalak az STM felvételeken) élre merőleges periodicitás komponensei nagyobb intenzitásúak (narancssárgával kiemelve).

1. b) A 28. ábra középső sorában a szimulált STM felvételeket mutatja. Mi a kapcsolat a felső sor (mérési eredmények) képein fehér körrel jelzett területek és a középső sor (szimulációs eredmények) fehér körrel jelzett területei között? Itt látható jó egyezés a kettő között? Ezekre a területekre vonatkozik a T1 publikációban szereplő “Taking into account the electron-electron interaction, we can **quantitatively** reproduce the measured STM images” mondat? (a kiemelés tőlem származik).

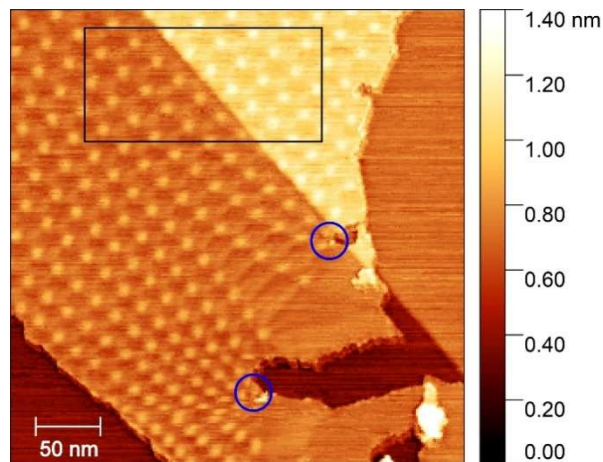
Igen, a mérési és a szimulációs STM-felvételeken fehér körökkel jelöltük meg azokat a részeket, amelyek a legjobban egyeznek. A T1 publikációból idézett mondat ezekre a területekre vonatkozik, de nem csupán. Az STM-felvételek szimulációjánál a lokális állapotsűrűség a rekonstruált grafénpötty elméleti, az elektron-elektron kölcsönhatást is figyelembe vevő vizsgálatból kapott sajátfüggvényeivel lett kiszámolva. A mért STM-felvételek *kvantitatív* reprodukálása alatt azt értjük, hogy a szimuláció eredménye jó egyezést mutat a kísérletekkel, mivel reprodukálni tudta nemcsak magát a $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ típusú szuperstruktúrát, hanem a mintázat helyfüggő jellegét is, az egyes pontok közti intenzitás-különbségeket, a karosszék iránnyal párhuzamos csíkmintázatot, valamint egyéb domináns mintázatokat.

2. A 33. ábrán kis elforgatási szögű grafén/HOPG nanoszerkezeten végzett mérések és az értelmezésükhöz végzett elméleti számolások láthatóak. Az elméleti eredmények szerint a szétnyíló tartomány két oldalán eltérő jellegű deformáció jellemzi a grafén rácsot: A felső (B) részen főleg a grafén rácsvektorok nagyságának a változása, az alsó (C) oldalon pedig az α és ω_0 szögek változásával írható le a moiré mintázat. Mi lehet az oka a két oldalt jellemző deformáció típusok közötti különbségnek? A HOPG szubsztrátum milyen inhomogenitása játszhat szerepet?

A kísérletekhez a legmagasabb minőségű HOPG hordozót (a NanoAndMore-tól származó ZYA minőség, $0,4^\circ \pm 0,1^\circ$ -os mozaikszórási szög) alkalmaztuk, amelyet gyakran kalibrációs célokra használnak. Ezekben a hordozókon a leggyakoribb inhomogenitások a szemcsehatárok és a diszkontinuitások a felső rétegben. A szemcsehatárok jellegzetessége, hogy hirtelen megváltoztathatják az atomi sorok orientációját. Ez azonban a moiré-periódus hirtelen megváltozását is eredményezné, mivel a moiré-mintázat rendkívül érzékeny az orientációra. Mi azonban a moiré-periódus folytonos növekedését (illetve csökkenését) tapasztaljuk, nem pedig ugrásszerű változást, ami egyértelműen kizárja a szemcsehatárok hatását. A szemcsehatárok STM-mel közvetlenül is megfigyelhetők lennének a határok mentén módosult helyi állapotsűrűség (LDOS) miatt, azonban a vizsgált területen nem észleltünk ilyen módosulásokat. Ami az STM felvételeken látható diszkontinuitást (atomi lépcsőt) illeti, elmondható, hogy a megfigyelt moiré-mintázat a HOPG-lépcső mindkét oldalán szabályos és ugyanolyan periódusú (lásd 2. ábra, fekete téglalappal jelölt rész), vagyis ebben a tartományban az atomi rácsparaméterek változatlanok maradnak mind a grafénban, mind az HOPG-ben.

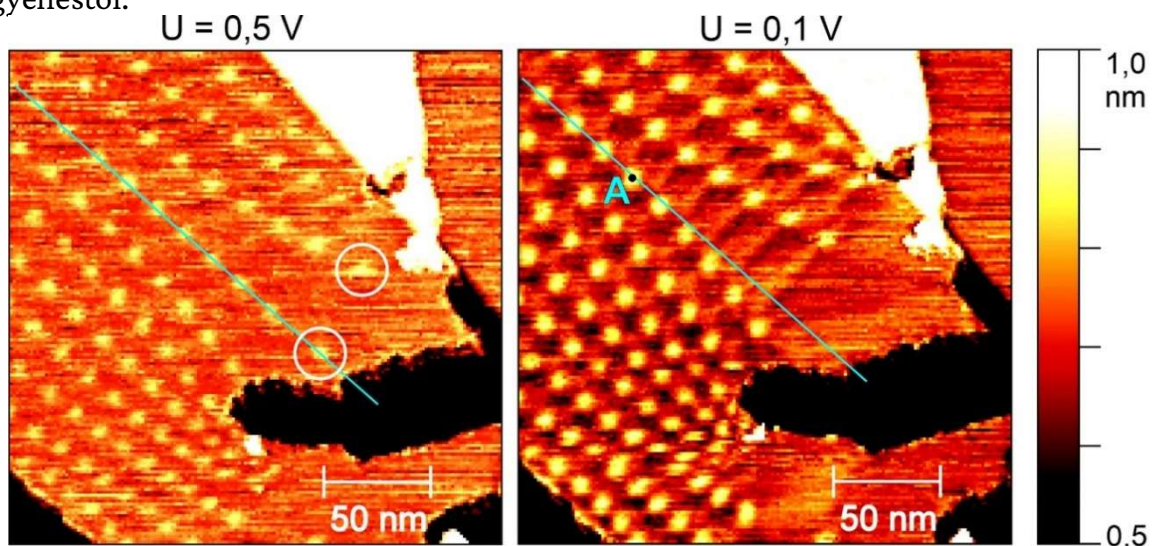
A szétnyíló tartomány két oldalán eltérő jellegű deformáció oka inkább a grafén rétegben keresendő. A grafénszél közelében két olyan hely azonosítható, ahol a moiré-dombok összesűrűsödnek, vagyis a periódus lecsökken 12 nm közelébe (a 2. ábrán kék körökkel jelölve). Ezek a helyek valószínűleg jobban rögzültek a hordozóhoz a hőkezelés során, mechanikai feszültséget hozva létre a grafénban. A két – körrel jelölt – régió között

elhelyezkedő grafén a rácsparamétereit ezen peremfeltételekhez kellett igazítsa, az atomrács ebből adódó kismértékű deformációit pedig a moiré-mintázat nagyítja fel.



2. ábra. STM-felvétel a HOPG hordozón elhelyezkedő grafénról. A moiré-periódus a kék körökkel jelzett grafén-szélek közelében a legkisebb (≈ 12 nm). A felvétel felső részén (fekete téglalap) a moiré-mintázat szabályos, a HOPG-lépcső mindkét oldalán ugyanolyan periódusú.

Újra áttekintve az eredeti STM-méréseket magyarázatot találtam a szétnyíló tartomány két oldalán eltérő jelleget mutató deformációra. Ez pedig nem más, mint a kis feszültséggel (0,1 V) végzett STM-mérés hatása. Ennek demonstrálásához tekintsük a 3-as ábrát, ahol egymás mellett ábrázoltam a vizsgált moiré-mintázat két különböző feszültséggel készült felvételeit. Először 0,5 V-tal történt a leképezés. A 3-as (bal) ábrán látható, hogy a világos kék vonallal kijelölt moiré-dombok egy egyenes mentén helyezkednek el. A későbbi, 0,1 V-tal készült felvételen (3. ábra, jobb) már az látható, hogy ugyanezek a moiré-dombok az „A” ponttól kezdve egyre inkább eltérnek ettől az egyenestől.



3. ábra. A szétnyíló moiré tartomány leképezése előbb $U = 0,5$ V (bal) majd $U = 0,1$ V (jobb) előfeszítéssel. A 0,5 V-os felvételen a világos kék vonallal kijelölt moiré-dombok még egy egyenes mentén helyezkednek el, míg a későbbi, 0,1 V-os leképezésnél ugyanezek a moiré-dombok az „A” ponttól kezdve egyre inkább eltérnek ettől az egyenestől. Továbbá, a 0,5 V-os felvételen fehér karikákkal jelölt két moiré-domb eltűnik a 0,1 V-tal való leképezés során.

Továbbá, a 0,5 V-os felvételen látható két, fehér karikákkal jelölt moiré-domb eltűnik a 0,1 V-tal való leképezés során. Mindez azt mutatja, hogy a szétnyíló tartomány alsó oldala az STM-tűvel való kölcsönhatás során nyerte el végső formáját. A 0,1 V-tal való pásztázás során fellépő tasztító erő olyan hatással volt a grafénnek erre a részére, ami – az elméleti eredmények alapján – kis mértékű lokális elforgatással, az α és az ω_0 szögek változásával írható le.

3. A 4.4 fejezetben a Szerző többek között nanoüregek felett felfüggesztett graféneken végzett nanoindentációs méréseket. Az egyik esetben (42. ábra) a nanoüreg sugara $a_0 \approx 74$ nm volt, és a felfüggesztett grafén $\delta_0 = 10.1$ nm mélyre süppedt az üreg közepén. A másik vizsgált nanoüreg (43. ábra) sugara $a_0 \approx 80$ nm, a bemélyedés pedig $\delta_0 \approx 7$ nm-nek adódott. Tehát a nagyobb sugarú nanoüreg felett felfüggesztett grafén kevésbé süppedt be, mint a kisebb sugarú nanoüreg felett felfüggesztett. Számomra ennek a fordítottja lenne intuitívan könnyen érthető. Mi befolyásolja a δ_0 értékét?

A grafénnal fedett arany vékonyréteg hőkezelése (350 °C) során egyrészt kialakultak a nanoüregek, másrészt a grafén aranyhoz való tapadása is megnőtt. A hőmérséklet növekedésekor az arany kitágul, míg a grafén összehúzódik (negatív hőtágulási együtthatója miatt), lehűléskor pedig fordítva. Az arany és a grafén eltérő hőtágulási tulajdonságainak következtében a grafénban mechanikai feszültség jelenik meg, amely nem homogén a felületen. Így lesznek olyan felfüggesztett grafén részek, amelyek kezdeti feszítettsége nagy, másoké viszont akár elenyésző is lehet. A 43. ábrán mutatott felfüggesztett grafén feszítettsége valószínűleg nagyobb, mint a 42. ábrán mutatott graféné. Így történhet meg az, hogy kissé nagyobb átmérője ellenére a kezdeti bemélyedése kisebb.

Budapest, 2026.04.20



Osváth Zoltán