

## FÉNYES ÚJ VILÁG: EGY ÚJTÍPUSÚ FÉNY ÉS ALKALMAZÁSAI

Kroó Norbert

MTA Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézet

A világról szerzett információink jelentős hányadát elektromágneses sugárzás, ezen belül fény, különösen látható fény segítségével szerezzük. A fény szóródik a megfigyelt tárgyon, és amikor ezt a fényt egy lencsével – akár a szemlencsével, akár egy mikroszkóppal – összegyűjtjük, kialakul az a kép, amelyet látunk. A megfigyelő ilyenkor a tárgytól a fényhullám hosszához képest messze van. Ezt nevezzük az optikában *távoli térnek*. Az elektromágneses sugárzásnak azonban olyan komponense is van, amelyik a megvilágított tárgyhoz tapad. Ez a tér a tárgytól távolodva exponenciálisan csökkenő térerősségű. Ezt a térkomponenst, amely a szemünkben vagy a mikroszkópban kialakult képhez nem járul hozzá, az optikában *közeli térnek* nevezzük. Ennek a közeli térnek egy speciális formája hozható létre fémek felületén, amelyet *felületi plazmonoknak* nevezünk. Ebben a cikkben e felületi plazmonok tulajdonságait és lehetséges alkalmazásait szeretném taglalni.

### A felületiplazmon-oszcillációk és közelítér-mikroszkópia

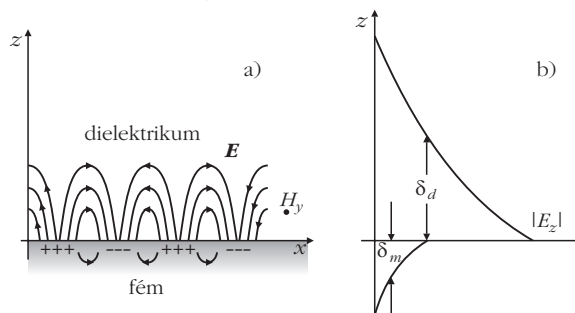
A felületiplazmon-polaritonok (röviden felületi plazmonok) egy fém felületén gerjesztett elektronsűrűség-oszcillációból és a hozzá csatolt, a felületre merőleges elektromos vektorú elektromágneses térből állnak, és a fém–vákuum (dielektrikum) határfelület mentén, ahhoz kötődve terjednek (1.a ábra). Ezt az elektromágneses teret a Maxwell-egyenletek írják le. A jelenség kialakulásához a következő feltételeknek kell teljesülniük.

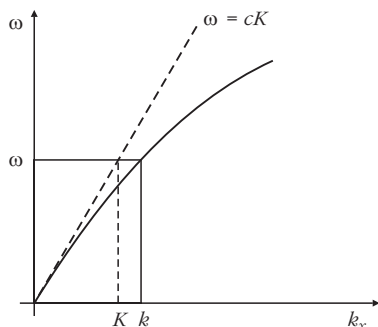
- A dielektrikum dielektromos állandójának valós, pozitív értékűnek kell lennie.
- A fém dielektromos állandója komplex, valós tagjának negatívnak kell lennie és olyan abszolút értékűnek, amely nagyobb, mint a képzetes rész. Ez számos fémre, például az aranyra és az ezüstre, teljesül.

A fém dielektromos állandójának képzetes része határozza meg, hogy milyen gyorsan cseng le a plazmonoszcilláció, miközben energiája hővé alakul. Ezért az a jó, ha az imaginárius komponens kicsiny. Ekkor – például fényvel gerjesztve a plazmonokat – éles rezonanciagörbét kaphatunk, a maximum közelében közel 100%-os gerjedési hatásfokkal. Ebből a szempontból az ezüst a legjobb anyag, de az arany sem rossz.

A gerjesztett hullám a fém felülete mentén terjed (1.a ábra), de a felületre merőlegesen nem. Ilyen módon a távoli térben nem mérhető. Ezért a megszokott módon, azaz képalkotás céljából nem használható. Nagyon fontos megállapítás, hogy az úgynevezett diffrakciós limit a felületi plazmonokra nem érvényes. A diffrakciós limit azt jelenti, hogy a hullámhossznál valamivel kisebb távolságra lévő pontokat optikai úton nem lehet felbontani. A diffrakciós limit hiánya, azaz a felbontóképesség korlátlansága egy sor lehetséges alkalmazást tesz lehetővé.

1. ábra. Fémfelületen gerjesztett felületi plazmonok  $\mathbf{E}$  elektromos térerősségének változása a felület irányában (a ábra) és a felületre merőleges irányban (b ábra). A fémfelülettől távolodva a plazmonok elektromos tere exponenciálisan csökken. A mágneses tér a határfelületen folyamatosan megy át.  $\delta_m$  a szkinmélység,  $\delta_d$  a csökkenő térerősség állandója.





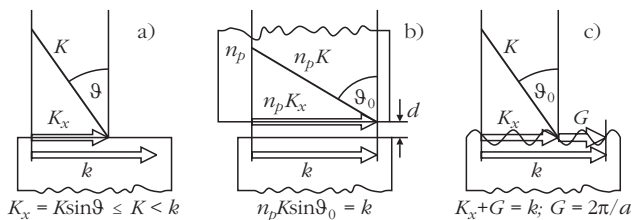
2. ábra. Felületi plazmonok diszperziós görbéje (a frekvencia és a hullámszám függvényében) összehasonlítva a fény (szaggatott egyenes) diszperziós összefüggésével (a fény sebessége vákuumban). A fény hullámszáma ( $K$ ) mindig kisebb az azonos energiájú felületi plazmon hullámszámánál ( $k$ ).

Az elmúlt években rendkívül sok vizsgálat folyt a felületi plazmonok tulajdonságainak tisztázása és gyakorlati alkalmazásának céljából, többek között nálunk is. Meghatároztuk a felületi plazmonok diszperziós összefüggését, amely a hullám impulzusa vagy hullámhossza és energiája közötti összefüggést jelenti, és értékes, érdekes alkalmazásokat ismerhettünk meg az integrált optika területén.

A kutatások során olyan módszerek fejlődtek ki, amelyek lehetővé teszik a hullámhossznál finomabb szerkezetek vizsgálatát, új lehetőségeket teremtve a plazmonok előállításának területén, illetve tulajdonságaik vizsgálatában. De esély van arra is, hogy új fotonikus eszközöket hozzunk létre a hullámhossznál kisebb mérettartományokban. Ezek számos területen, így például a számítástechnikában, egyes orvosi alkalmazásokban, vagy a nanoméretű rendszerek mikroszkópiájában kecsigetnek fontos, új alkalmazási lehetőségekkel.

A felületi plazmonokat p-polarizált fényvel (a felületre merőleges elektromos terű fényvel) lehet gerjeszteni, de mivel diszperziós összefüggésük eltér a fény diszperziós összefüggésétől, speciális technikákat kell alkalmaznunk. Amint ugyanis a 2. ábrán láthatjuk, adott energiánál a fény impulzusa nagyobb, vagyis hullámhossza kisebb, mint a megfelelő felületi plazmon esetén. A hiányzó impulzust valahogyan pótolni kell.

Két általánosan elterjedt módszert ismerünk erre a célra. Az egyik az, hogy a fényt egynél nagyobb törésmutatójú anyagban, például üvegprizmán keresztül bocsátjuk a fém felületére. Ismeretes, hogy ilyen prizmban a fény impulzusa a törésmutató mértékével megnövekszik, ezért így lehetőséget lehet találni arra, hogy a felületi plazmonokkal párhuzamos vetülete – amint a 3.b ábrán látható – megegyezzen a felületi plazmon impulzusával az adott energiánál. Ilyen módon az energia- és az impulzusmegmaradás törvénye a fény és a plazmon között teljesülhet. Ebben az esetben rezonanciaszerű gerjesztést tapasztalhatunk. A másik lehetőség a hiányzó impulzus pótlására, hogy azt egy rács segítségével biztosítjuk. A fény impulzusvektorának a felületi plazmon impulzusával párhuzamos komponenséhez hozzáadva a rács „reciprokrács-

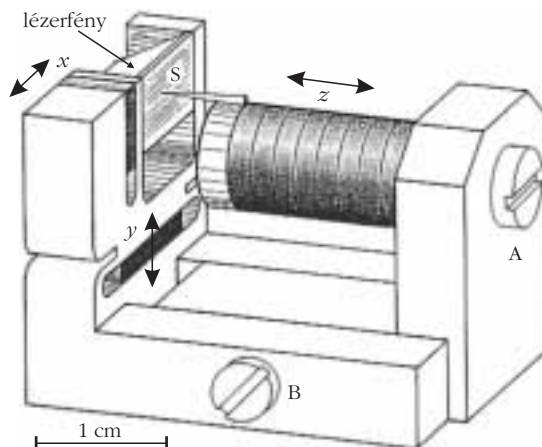


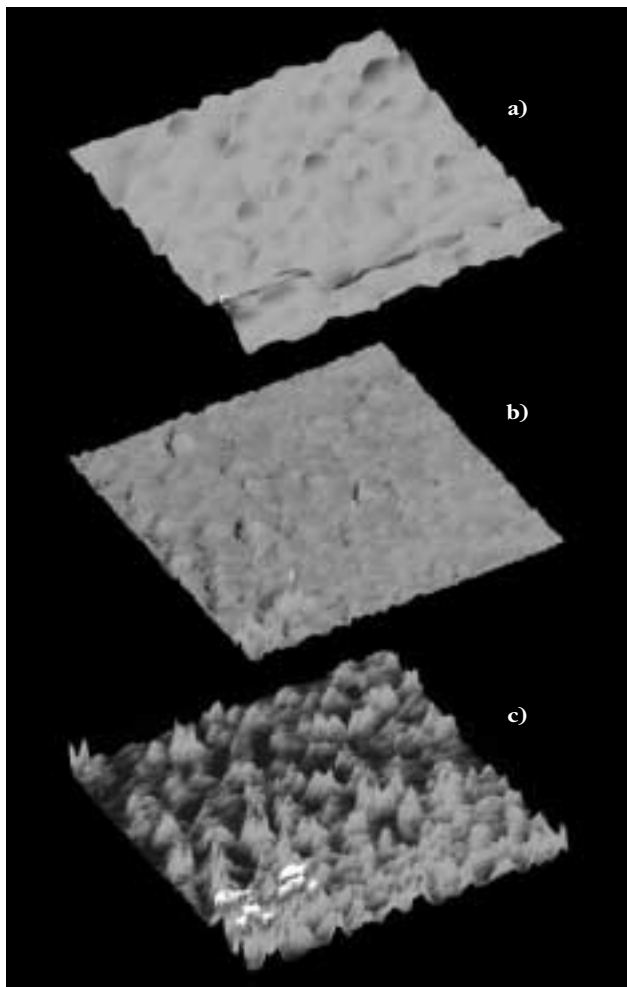
3. ábra. Fény és felületi plazmonok csatolása. Vákuumból jövő fény nem tud plazmonokat gerjeszteni, mert az impulzusmegmaradási törvény nem teljesül ( $K_x < k$ ), (a ábra). Az impulzusmegmaradási törvény teljesülése vagy a fény üvegen keresztül vezetésével ( $n_p$  a törésmutató) (b ábra), vagy egy „hullámszámú” rács segítségével érhető el (c ábra).  $K$  a fény hullámszáma,  $k$  pedig az azonos energiájú felületi plazmoné.

vektorát”, vagyis „kváziimpulzusát”, ismét teljesíthető az impulzusmegmaradás törvénye, és rezonanciaszerű gerjesztést lehet létrehozni (3.c ábra).

Vizsgáljunk meg egy konkrét esetet. A fényt úgynevezett csillapított totálreflexiós geometriában egy prizmán keresztül bocsátjuk a fémfelületre, például mikroszkópobjektívvel fókuszálva, és az egész rendszert – prizma + a felületen lévő vékony fémréteg – egy pásztázó alagútmikroszkópba (STM) helyezjük. Ez azt jelenti, hogy a felületi plazmonokat hátulról, a prizma oldaláról, az STM tűjével szemben gerjesztjük, ahogyan az a 4. ábrán látható. Alkalmazhatunk például egy félvezető lézert, mondjuk 670 nanométeres hullámhosszal, és ennek fényét megszagathatjuk bocsátva tipikusan 2 kHz-es frekvenciával a mintára. Ha a pásztázó mikroszkóp tűjét a felületen meanderes mozgással végigvezetjük, képet alkothatunk. Helyezzünk képzeletben a fém felületére egy koordináta-rendszert. Az  $x$ ,  $y$  tengelyek legyenek a fém felületével azonos síkban, a  $z$  tengely pedig legyen erre merőleges. A mikroszkópban az  $xy$  síkbeli mozgást a tárgy mozgásával érjük el, a felületre merőleges mozgást pedig egy piezokerámiával, amelyre a pásztázó alagútmikroszkóp tűjét erősítjük. Ha ennek a piezokerámiának a feszültsége arányos a kerámia elmozdulásával, akkor a feszültség változtatásával

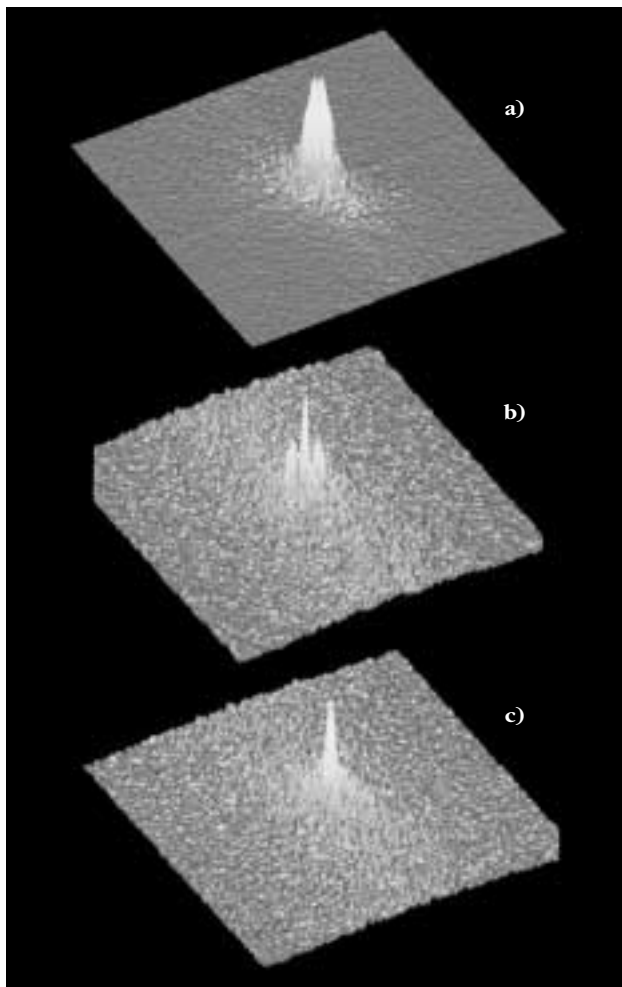
4. ábra. Pásztázó alagútmikroszkóp, melyben közeli teret keltünk felületi plazmonok gerjesztésével, áttetsző fémrétegen, lézerréteg üvegprizmán keresztül becsatolásával.





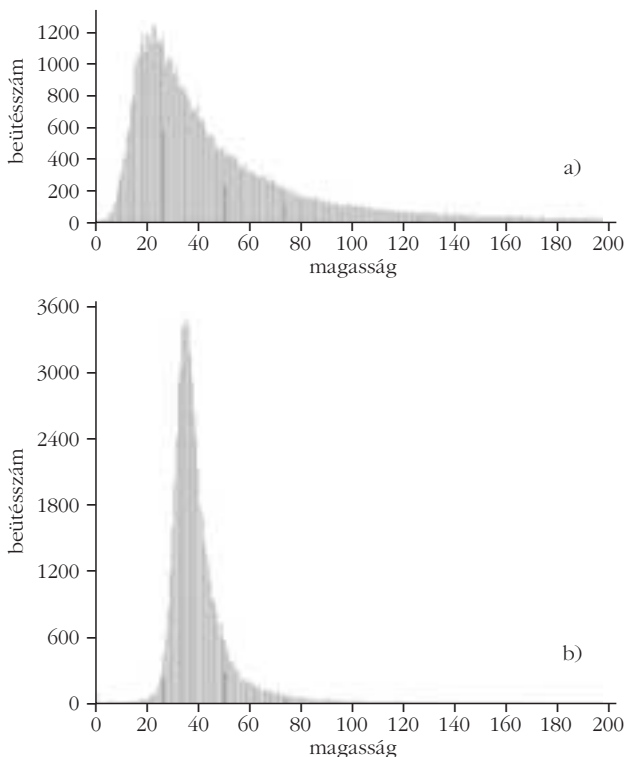
5. ábra. Az alagútmikroszkóppal egyidejűleg felvett  $200 \times 200$  nanométeres topográfia (a), felületi plazmon (b) és termikus (c) kép.

(úgy, hogy a mikroszkóp áramát állandónak tartjuk) feltérképezhetjük a felületet. Ez lesz a vizsgált felület topográfiai képe. Ugyanakkor azonban a lézertér által keltett felületi plazmonok terét is letapogathatjuk. A tér változásával arányosan ugyanis megváltozik a pásztázó elektronmikroszkópon keresztül folyó alagútáram, és ezt a választ is pontról-pontra feltérképezhetjük. Ilyen módon egyidejűleg kialakul a plazmonkép is. A felületi plazmonok viszont elhalnak a felületen, és felmelegítik azt. Ezért a pásztázó elektronmikroszkóp fémtűje és a fém felülete között hőmérsékletkülönbség jön létre, és ha a két fém különböző anyag, akkor termofeszültség is keletkezik. Emellett a felület lokálisan is felmelegszik az elhaló felületi plazmonok miatt, ezért a felület  $z$ -irányban kitágul. Ez a két utóbbi hatás együtt egy úgynevezett termikus képet eredményez, amelyet akkor regisztrálhatunk, amikor a lézert már kikapcsoltuk, vagyis a felületi plazmonok – hiszen ezeknek igen rövid az élettartamuk (100 femtoszekundum nagyságrendű) – már nem léteznek a felületen. Tehát a pásztázó alagútmikroszkóp segítségével egyidejűleg három képet is rögzíthetünk, mégpedig egy topográfiai, egy felületi plazmon- és egy termikus képet (5. ábra). Ez a felületfizikában természetesen egy sor vizsgálatot tesz



6. ábra. Az 5. ábra képeinek Fourier-transzformáltjai.

lehetővé, ugyanakkor módot nyújt annak tisztázására is, hogy milyen módon viselkednek a felületi plazmonok nanoszerkezetekben. Érdeemes megjegyezni, hogy a leírt mikroszkóppal optimális esetben 1 nanométert megközelítő felbontóképességet sikerült elérnünk a plazmonokat látható fény segítségével gerjesztve, ami nyilvánvalóan bizonyítja, hogy ebben a speciális esetben sem érvényes a diffrakciós korlát. Szemmel látható, hogy a három kép lényegesen eltér egymástól, noha – a felület finomszerkeztúrájára jellemző – hasonló tulajdonságaik is vannak. Ha ezeket a képeket Fourier-transzformáljuk, akkor még jobban látszik a lényeges eltérés a három kép között. Különösen érdemes megfigyelni a felületiplazmon-kép Fourier-transzformáltját (6. ábra). A 6.b képen hét kiemelkedő mellékcúscot látunk. Ha megvizsgáljuk a mellékcúscok helyét, kiderül, hogy pontosan azon a helyen vannak, ahol a felületi plazmonok diszperziós görbéje alapján lenniük kell. Ez önmagában a klasszikus fizika törvényei szerint természetes lehetne. De ha az alkalmazott lézerteljesítmény mellett egyidejűleg megnézzük az alkalmazott plazmonsűrűséget, akkor azt látjuk – a plazmonok rövid élettartama miatt –, hogy a mérendő térben csak 0,1 vagy annál kevesebb plazmon tartózkodik. Nyilvánvaló tehát, hogy ezek a plazmoncsúcsok a plazmonoknak önmagukkal

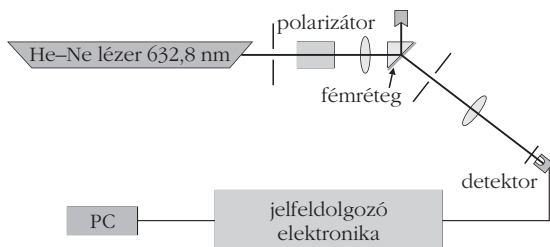


7. ábra. A felületi plazmon és termikus képek statisztikus analízise. A termikus kép (a ábra) Boltzmann-, a felületi plazmon kép (b ábra) pedig Poisson- (sub-Poisson-) eloszlást mutat.

való interferenciájából származnak. Ez máris felveti a gyanút, hogy netán e plazmonok nemklasszikus tulajdonságokkal rendelkeznek. Ezért elvégeztük a megfigyelt képek statisztikai analízisét, vagyis megvizsgáltuk a felületi plazmonok által produkált tér intenzitásának eloszlását, összehasonlítva a termikus kép ugyanilyen eloszlásával.

A 7. ábrán látható, hogy a termikus kép  $z$ -tengely irányú amplitúdóinak eloszlása, vagyis a termikus kép maga Boltzmann-eloszlást mutat, mint ahogyan annak lennie is kell. Ugyanakkor a felületi plazmonkép Gauss-eloszlást (a Poisson-eloszlás határesetét) mutat, és ráadásul lényegesen keskenyebb, mint a Poisson-eloszlás. Ez akkor tapasztalható, hogyha egy nemklasszikus rendszerben úgynevezett squeezing, vagyis „összenyomási” effektus lép fel. Így egyre inkább megerősödik az a következtetés, hogy a felületi plazmonok nemklasszikus tulajdonságokat is mutatnak. Ez a megfigyelés különösen azért meglepő, mert egy-egy plazmonhullámban  $10^{10}$  nagyságrendű elektron vesz részt.

8. ábra. Elrendezés lézersugárral gerjesztett felületi plazmonok bomlásával előállított fény statisztikus analízis vizsgálatára.

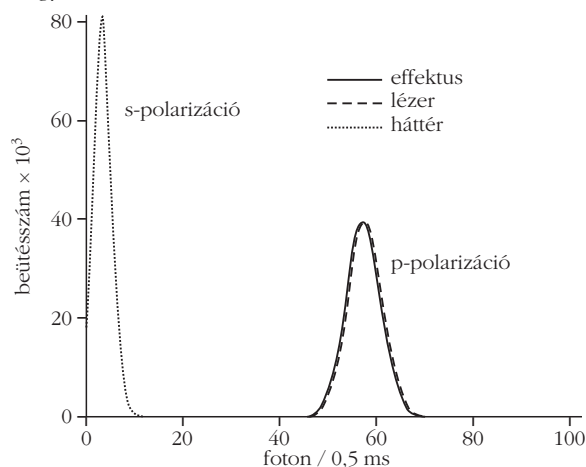


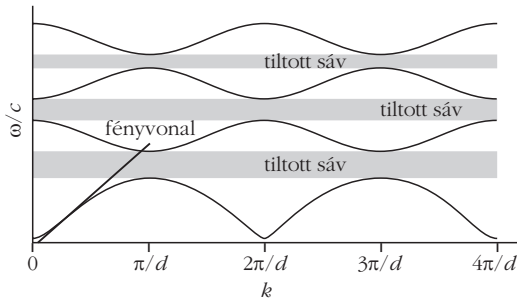
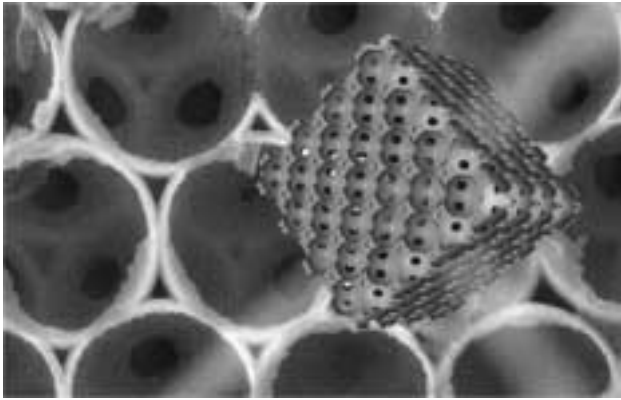
A mérések jellege miatt ezekben az eloszlásokban időben átlagolt statisztikus eloszlást látunk. Felmerül ezért annak igénye, hogy megnézzük a felületi plazmonok jelének időbeli statisztikáját is, térben integrálva. Ilyen mérés viszonylag egyszerűen elvégezhető a 8. ábrán látható geometria szerint. A felületi plazmonokat itt is prizmán keresztül gerjesztjük, akár csak a pásztázó alagútmikroszkóp esetében, azonban most térben integráljuk a megfigyelt jelet, és az időbeli eloszlást mérjük.

A 9. ábrán jól látható, hogy a felületi plazmonok fényvé váló visszaalakítása során ezek statisztikus eloszlása pontosan ugyanolyan, mint a gerjesztő lézertény fotonjaié. Ez koherens állapotnak felel meg, mivel a gerjesztés lézerral történt, és a lézer koherens fényforrás. E megállapításból egy érdekes következtetés vonható le. A gerjesztő fény minden fotonja egy-egy felületi plazmonhullámot gerjeszt. Ezek a hullámok egy-egy fotonná bomlanak el. De az elbomló foton statisztikája ugyanaz, mint a gerjesztő fotonké, vagyis a plazmonhullám ezt a koherens állapotnak megfelelő statisztikus eloszlást megtartotta. Ez újabb bizonyítéka a felületi plazmonok nemklasszikus tulajdonságának. A 9. ábra szerinti mérésben egy 5 milliwattos lézert használtunk, és a gerjesztést ugyanolyan geometriában végeztük el, mint a pásztázó elektronmikroszkóp esetében. A detektor egy lavina-félvezetődióda volt, és egy igen nagy felbontóképességű elektronikus rendszerrel gyűjtöttük össze a detektor impulzusait. A kapott eredmény nem nevezhető triviális megfigyelésnek, hiszen minden lézertény foton egy felületi plazmon gerjeszt a fémfelületen, és ez utóbbi egy mezoszkopikus rendszer. És noha a felületi plazmon energiája ugyanaz, mint a gerjesztő fotoné, a hullámhossza rövidebb.

Érdeemes megemlíteni, hogy *E. Altevischer* vezetésével egy holland kutatócsoport elvégzett egy érdekes kísérletet.  $\hbar\omega$  energiájú fotonokat két  $\frac{1}{2}\hbar\omega$  energiájú fotonná hasítottak egy nemlineáris kristály segítségével. Ismeretes, hogy az így keletkező két foton egymással

9. ábra. Lézertény és az általa gerjesztett plazmonok bomlásával keletkező fény statisztikus tulajdonságainak összehasonlítása. A két fénysugár tulajdonságai megegyeznek, a két statisztikus eloszlás fedi egymást.





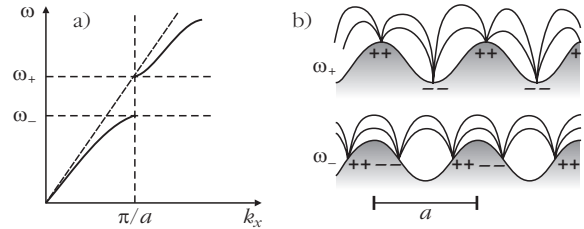
10. ábra. Háromdimenziós fotonikus kristály. A sávszerkezetben tiltott sávok hozhatók létre.

kvantummechanikailag összekapcsolt állapotban van. A két foton mindegyikével felületi plazmonokat keltettek. Ezek újra fénné alakultak vissza, s a keletkezett fotonokat egymással ko incidenciába hozták. Azt találták a kísérlet során, hogy abban az esetben, ha a felületi plazmonokon keresztül átalakított fotonok ko incidenciáját vizsgálják, ugyanazt az eredményt kapják, mint akkor, ha ezt felületi plazmonok nélkül tették volna meg. A kísérlet azt bizonyítja, hogy ez az összekapcsolt állapot a felületi plazmonokon keresztüli fotonkibocsátás esetében is megmarad, vagyis ugyanazt állítja, mint amit a mi kísérleteink is. A felületi plazmonok a nemklasszikus tulajdonságok megőzőiként használhatók. Ezért remény van arra, hogy a kvantuminformatikában, a kvantum-számítástechnikában a felületi plazmonoknak is szerepük lesz.

## Fény egy csipen

A félvezető elektronika alapja, hogy alkalmas félvezető anyagokban, mint például a szilíciumban, egy tiltott energiasáv van a vezetési elektronok számára. Tehát van egy olyan energiasáv, amelyben elektron nem tartózkodhat. Felmerül a kérdés, hogy lehetséges-e olyan anyagot létrehozni, amelyben ugyanilyen tiltott sáv keletkezhet a fotonok számára. A válasz pozitív. Az ilyen tulajdonságú anyagot metaanyagoknak hívjuk, mert a természetben nem nagyon létezik és *fotonikus kristálynak* nevezzük. Ez egy olyan kristályszerű szerkezet, amelyben a rácsparaméter a fény hullámhosszának nagyságrendjébe esik.

Ezt mutatja a 10. ábra. Tiltott energiasáv létrehozható akár két-, akár háromdimenziós struktúrákban.

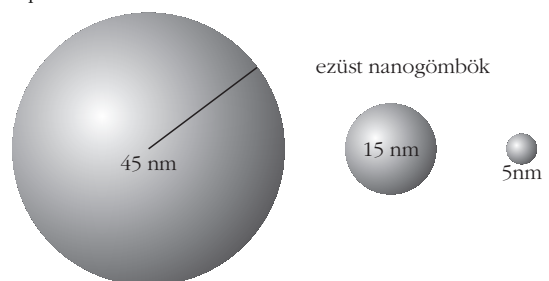


11. ábra. Tiltott sáv rácson gerjesztett felületi plazmonok spektrumában. A diszperziós görbe a félvezetőkhöz hasonlóan felhasad a Brillouin-zóna határán (a ábra), mivel itt aszimmetrikus ( $\omega_+$ ) és szimmetrikus ( $\omega_-$ ) módus lehetséges, és a kettő energiája eltér (b ábra).

Ezeket a fotonikus kristályokat már ma is széleskörűen alkalmazzák. Amiért azonban mégsem vonzó lehetőség ilyen módon például egy fotoncsipet létrehozni, annak oka pontosan a hullámhosszhatár. A diffrakciós limit miatt ugyanis a fény hullámhosszánál lényegesen kisebb struktúrák ilyen tulajdonságokkal nem valósíthatók meg. Felmerül a kérdés, hogy az általunk eddig vizsgált újfajta fény, vagyis a felületi plazmonok esetén nem lehetséges-e ez, vagyis: létrehozható-e olyan integrált „áramkör” ahol az elektronok szerepét a fotonok veszik át? Kiderül, hogy lehetséges. Ha ugyanis a felületi plazmonokat egy optikai rácson hozzuk létre, akkor található olyan geometria, amelyben a felületi plazmonok diszperziós görbéiben ugyanolyan törés lép föl, mint a félvezetők esetében, vagyis tiltott sáv hozható létre (11. ábra). Létrejön egy olyan energiatartomány, amelyben a felületi plazmonok a felületen nem terjedhetnek. Ez a helyzet pontosan akkor valósul meg, amikor az optikai rács állandója ( $a$ ) a felületi plazmonok hullámhosszával egyezik meg. Mindebből az is következik, hogy a felületi plazmonok felhasználásával optikai tranzisztort is létrehozhatunk. Létrehozhatunk továbbá hullámvezetőt is, tehát olyan vezeték, amely a felületi plazmonokat vezeti a fém felületén, mégpedig akár nanométer felbontású struktúrák formájában.

Arra is lehetőségünk van, hogy felületi plazmon lencsével – 12. ábra – ezeket a plazmonokat akár 1 nanométeres méretre összefókuszáljuk. Ha belemennék a részletekbe, kiderülne, hogy minden olyan optikai elem létrehozható felületi plazmonok segítségével, ami ahhoz szükséges, hogy egy teljesen optikai elven működő – tehát csak fotonokat használó – csipet hozzunk létre. Ezek az elemek már léteznek, és meggyőződésem, hogy 10–15 év múlva az ilyen felületi plazmonok felhasználásával készített csipek az elektronikus csipek

12. ábra. Nanoméretű fénygömbök (lyukak) segítségével létrehozható a plazmonokat fókuszáló nanolencse.



versenytársai lehetnek, sőt, le is körözhetik azokat, hiszen a fény lényegesen gyorsabban terjed, mint az áram. Ezért azt is reméljük, hogy nem lesz szükség arra egy információtovábbító rendszerben, hogy egy optikai szálon érkező információt árammá alakítsunk, majd ezt feldolgozva egy elektronikus csip segítségével, az információ továbbviteléhez visszaalakítsuk fényvé, melyet optikai szálon továbbítunk. Ez olcsóbbá is teheti az információtechnológiai rendszereket. Véleményem szerint ez a lehetőség potenciálisan egy olyan jelentős paradigmaváltást eredményezhet, mint amikor az elektroncsövekről tranzisztorokra tértünk át. A felületi plazmonok nem-klasszikus tulajdonságai pedig azt a lehetőséget is magukban hordozzák, hogy a kvantuminformáció feldolgozásban ugyancsak ilyen eszközöket használjunk.

Összefoglalásképpen azt mondhatjuk, hogy a felületi plazmonok új típusú fénynek tekinthetők. Ez az új típusú fény olyan potenciális lehetőségeket rejt magában,

amelyek az alkalmazások igen széles spektrumát tehetik lehetővé, kezdve a közelítér-mikroszkópiától a teljesen optikai elven működő integrált „áramkörökig”, a kvantuminformáció feldolgozásban és még egy sor más területen. Mindez nemcsak azért lehetséges, mert a felületi plazmonokra nem érvényes a diffrakciós limit, hanem azért is, mert ezen túl még óriási elektromos térrel is rendelkeznek, több nagyságrenddel nagyobb, mint a gerjesztő fotonok tere. Ez azért áll elő, mert a gerjesztő fotonok energiája a felülethez kötve „kis térre” koncentrálódik. Ebben az óriási térben egy sor fizikai folyamat, például a Raman-szórás, sok nagyságrenddel (egyes esetekben  $10^{12}$ – $10^{15}$ -szörösen) felerősödik, ami egyetlen molekula Raman-szórásának detektálását is lehetővé teheti. De ez az óriási tér élő szervezetek, például sejtek befolyásolására is alkalmas, ami például az orvosi alkalmazásokban (pl. rákterápia) adhat új eszközöket a kezünkbe. Az új lehetőségek részletezése azonban már túlmutat a jelenlegi írás keretein.

## FÉMEK FELÜLETI STRUKTÚRAINAK KVANTUMMECHANIKÁJA

Kollár János  
MTA SZFKI

Az anyagok felületét olyan ablaknak tekinthetjük, amelyen keresztül megismerhetjük az anyag belsejének fizikai és kémiai tulajdonságait, az anyag és környezete között lezajló reakciók mechanizmusát. Egy megfelelően előkészített, adott kémiai összetételű fémfelület gátolhat vagy elősegíthet különböző kémiai reakciókat. Egy megfelelően kialakított kristályos mikroszerkezet lényegesen javíthatja a fémfelületek tribológiai tulajdonságait. Ugyanakkor az elektronikai ipari technológiák hihetetlenül gyors fejlődése, a méretek rohamos csökkenése is egyre inkább nélkülözhetetlenné teszi az anyagok felületi tulajdonságainak pontos, kvantummechanikai leírását, az ott zajló folyamatok atomi szintű megértését.

A felületfizikában az olyan alapvető fontosságú fizikai mennyiségek, mint a felületi energia, felületi feszültség, vagy a különböző felületi alakzatok, felületi lépcsők képződési energiája csak nagy bizonytalansággal mérhető. A felületi energia kísérleti értékei például többnyire fémolvadékcseppek felületi feszültségének méréséből, majd  $T = 0$  K-re extrapolált értékéből származnak. Az így kapott értékek bizonytalansága meglehetősen nagy, és természetesen csak izotróp kristályokra vonatkoznak. Ezért e mennyiségek pontos értékeinek meghatározásában a kvantummechanikai számítási módszerek szerepe megnő. Az elmúlt években ezek közül kiemelkedő szerepet játszott a *sűrűségfüggő elmélet*, amely a bonyolult, sok atomot tartalmazó rendszerek leírásában szinte egyeduralkodóvá vált.

A sűrűségfüggő elmélet megalapozása *Hohenberg* és *Kohn* nevéhez fűződik [1]. (Az elmélet meg-

alozásáért Walter Kohn 1998-ban Nobel-díjat kapott.) Lényege, hogy egy külső térben mozgó elektronrendszer alapállapot energiáját az elektronsűrűség egyértelműen meghatározza. Így az alapállapot energiája az elektronsűrűség funkcionálja (függvénye), amelyre variációs elv érvényesül: a ténylegesen megvalósuló elektronsűrűség az alapállapot energiáfunkcionál minimalizálja. A funkcionál pontos alakját nem ismerjük, de különböző pontosságú közelítéseit igen. A variációs elv alkalmazása a gyakorlati számításokban egy-elektron Schrödinger-egyenletek megoldására vezet, melyekben az elektronok közötti kicserélődési és korrelációs kölcsönhatást leíró, sűrűségfüggő effektív potenciál lép fel. Ez lehetővé teszi az egyenletek önkonzisztens megoldását, mivel az egyenletek megoldása után, az adott számú elektronállapot feltöltésével kapott elektronsűrűségnek meg kell egyeznie az effektív potenciál számításánál használt elektronsűrűséggel. A módszer segítségével meghatározhatjuk a rendszer teljes energiáját az atomok különböző elrendeződése esetén, így a felületi energiát, vagy a felületi feszültséget is.

### A felületi energia

Felületi energiának ( $\gamma$ ) nevezzük egy adott kristálytani irányban egységnyi felület létrehozásához szükséges többlet-szabadenergiát. Bármely egyensúlyi rendszerre a felületi energia mindig pozitív, hiszen negatív felületi energia spontán felületképződéshez,