

EGY HULLÁMCSOMAG KALANDJAI AZ ALAGÚTMIKROSKÓPBAN

Márk Géza István
MTA MFA, Nanotechnológia Főosztály

A modern anyagtudomány [1] napjainkban lép be a nanovilágba. A nanovilág a nanoszerkezetek világa [2], ahol a jellemző méret a nanométer (10^{-9} m). Mostanában kezdjük megtanulni, hogyan hozunk létre nanoszerkezeteket és ezekből álló nanoarchitektúrákat, és hogyan tanulmányozzuk ezeket. E fejlődés motorja elsősorban az elektronikai ipar, az igény az elektronikai eszközök egyre nagyobb mértékű miniatürizálására. Ha szeretnénk részleteiben megérteni a nanoelektronikai eszközök működését, és szeretnénk ilyen eszközöket tervezni, akkor az elektronok mozgásával kell megismerkednünk a nanoszerkezetekben. E mozgás méretskálájára 10^{-10} m (0,1 nm = 1 angström), időskálájára pedig 10^{-15} s (1 femtoszekundum) a jellemző egység – ezek igen távol esnek emberi világunk méret- és időskálájától. A legjelentősebb eltérés azonban a kétféle tartományban érvényes fizikai törvények között van: míg az emberi skálán a klasszikus mechanika törvényei érvényesek, az elektronok nanoszerkezetek-beli mozgását a kvantummechanika törvényei írják le. Emiatt minden mérés, amelyet a nanovilág megismerése érdekében végzünk közvetett és nehezen értelmezhető. Ráadásul a nanoszerkezetek lényegesen bonyolultabb felépítésűek, mint az atomok és molekulák, így pontos elméleti leírásuk is nehézségekbe ütközik. Ezért a nanoszerkezetek tanulmányozásában igen hasznos a számítógépes szimuláció. A számítógépek, korunk mikrotechnológiájának termékei segítenek a jövő nanotechnológiájának létrehozásában.

Az 1991-ben felfedezett szén nanocső [3] az egyik ígéretes jelölt a szilícium felváltására a jövő elektronikájában, ugyanis a szén nanocsövek, atomi szerkezetüktől függően, lehetnek félvezetők vagy vezetők. Laboratóriumi körülmények között sikerült már szén nanocső tranzistorokat, sőt, logikai kapukat is létrehozni. Háromkivezetésű nanoelektronikai elemek megvalósítására kínálnak lehetőséget a szén nanocső Y-elágazások [2]. Az MTA Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézet Nanotechnológia Főosztályán immár 10 éve foglalkozunk szén nanocsövek előállításával és tanulmányozásával. A nanocsöveket elsősorban transzmissziós elektronmikroszkóp (TEM) és pásztázó alagútmikroszkóp segítségével vizsgáljuk.

A pásztázó alagútmikroszkópia (Scanning Tunneling Microscopy, STM) [4] az egyedi nanoszerkezetek tanulmányozásának talán legfontosabb eszköze. Ezt az STM fantasztikus térbeli felbontása teszi lehetővé: STM segítségével rutinszerűen elérhető az atomi felbontás (megfelelő mintákon), és a magassági felbontás jobb, mint 0,01 nm. Amikor az IBM zürichi kutatóközpontjában 1982-ben működni kezdett az első STM [5], sok kutató úgy vélte, hogy elvileg lehetetlen olyan mikroszkópot létrehozni, amellyel látni lehet az atomokat. Valóban, évek teltek el, amíg a tudományos közösségnek sikerült megértenie, mi miatt érhető el mégis ez a hihetetlen felbontás az STM-

ben, és pontosan mit is mér egy alagútmikroszkóp, minek felel meg az alagútmikroszkópos képen látható atomi léptékű mintázat. A részletes vizsgálatok azt mutatják, hogy az STM-kép pontos értelmezéséhez nélkülözhetetlen számítógépes szimulációk alkalmazása.

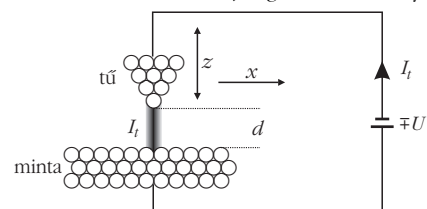
Az elektron mozgásának részletes tanulmányozására jól használható a hullámcsomag-dinamikai módszer (HCS, Wave Packed Dynamics). Cikkünkben arról a kutatásról számolunk be, amelynek során a hullámcsomag-dinamikai módszerrel vizsgáltuk szén nanocsövek alagútmikroszkópos leképezését.

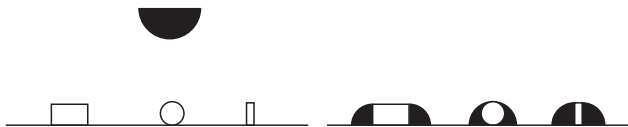
A szén nanocsövek alagútmikroszkópos leképezése

Az egyfalú szén nanocső olyan, csak szénből álló cső, amelynek az átmérője 1 nm körüli – tehát a molekuláris tartományba esik –, de a hosszúsága több mikrométer, akár egy milliméter is lehet – tehát a makroszkopikus tartományba esik. A szén nanocső szerkezetét legegyszerűbben úgy képzelhetjük el, mintha egyetlen grafitsíkot hengerré tekernénk [3]. Habár az ideális szén nanocső kizárólag szénből áll, fizikai tulajdonságai mégis nagymértékben változhatnak, a grafitsík feltekerésének módjától függően – ahogy részletesen olvasható *Biró László* cikkében [2]. A nanocső atomi szerkezete és elektron szerkezete közötti erős kapcsolat miatt igen fontos, hogy meg tudjuk vizsgálni az egyedi szén nanocsövek atomi és elektronszerkezetét. Az alagútmikroszkóp a legalkalmasabb műszer erre a célra.

Az STM működési elve egyszerű (1. ábra). Egy nagyon hegyes tű – legjobban, ha egyetlen atom van a tű csúcán – igen közel hozunk egy elektromosan vezetőképű minta felületéhez és a minta és a tű közé kicsi, 1 V nagyságrendű, feszültséget kapcsolunk. Már azelőtt, hogy a tű hozzáér a mintához – körülbelül, amikor a távolságuk 1 nm alá csökken – a két elektróda közt kicsi, 1 nA nagy-

1. ábra. A pásztázó alagútmikroszkóp működési elve. A kis körök az atomokat szimbolizálják, amelyekből a minta és a tű áll. A minta és a tű közé $U \sim 1$ V feszültséget kapcsolva a $d \sim 0,5$ nm nagyságú alagútátmeneten át $I_t \sim 1$ nA áram folyik. A tű csúcsa és a minta közötti sáv az alagutazási csatornát mutatja, a középvonalban folyik a legnagyobb áramsűrűség (legsötétebb szürkeárnyalat), a középvonaltól távolodva az áramsűrűség erősen csökken. A tű csúcsa és a minta közötti távolság d . A laterális irányú pásztázást jelzi az x felirátú nyíl, a tűnek a mintára merőleges irányú mozgását (amelyet a visszacsatoló hurok úgy szabályoz, hogy állandó értéken tartsa az I_t alagútáramot) a z nyíl mutatja.





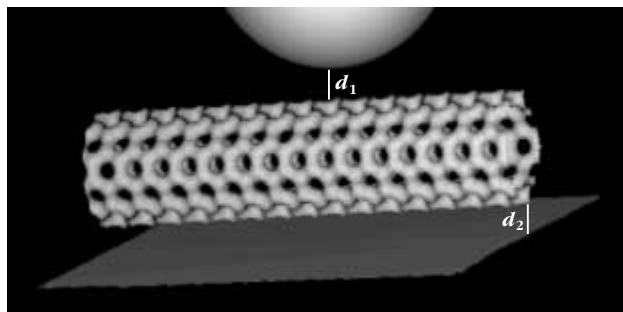
2. ábra. Az STM-tű véges görbületi sugara okozta látszólagos kiszélesedés. A bal oldali ábrán három jellegzetes domborzati alakzatot láthatunk, ezeket képezzük le az ábra tetején fekete félkörrel jelölt tűvel. A jobb oldali ábra azt mutatja, milyen vonal mentén mozog a tű.

ságrendű áram, a kvantummechanikai alagútáram mérhető. Az STM-ben a tűvel finoman pásztázunk a minta felülete fölött és eközben egy visszacsatoló hurok segítségével állandó értéken tartjuk az alagútáramot. Így alakul ki a számítógép képernyőjén az alagútmikroszkópos kép, amely a minta felületének atomi finomságú lenyomata. Mivel az alagútáram a távolsággal exponenciálisan csökken – az STM-ben alkalmazott „ökölszabály” szerint, ha 0,1 nm-rel távolítjuk a tűt, tizedére esik az áram –, egy atomban végződő tű esetén az alagútáram a tű csúcsa körüli nagyjából 0,1 nm szélességű csatornában folyik. Ez magyarázza az STM igen nagy térbeli felbontását.

Az alagútáram pontos értéke attól is függ, hogy milyen a minta elektronszerkezete, ezért az STM egyszerre ad információt a vizsgált minta topográfiájáról és elektronszerkezetéről. Az STM-nek ez a tulajdonsága az egyik legnagyobb előnye. Ugyanakkor ez teszi nehezzé az alagútmikroszkópos képek értelmezését, ugyanis nehéz szétválasztani a topográfia és az elektronszerkezet hatását.

Ha nem sík, egykristályos mintát, hanem egy nanoszerkezetet – például szén nanocsövet – vizsgálunk STM-mel, akkor további hatások is bonyolítják a kép értelmezését. A legfontosabb figyelembe veendő hatás a „tűkonvolúció” jelensége. Amint a 2. ábrán láthatjuk, ha a mintán olyan finom részletek vannak, amelyek görbületi sugara már összemérhető az STM-tű görbületi sugarával – egyfalu nanocsövek esetén mindig ez a helyzet –, ez látszólagos kiszélesedést okoz az STM képen. További, számításba veendő hatás az, hogy, nanoskálán nézve, a nanocső nem része a hordozófelületnek, hanem az úgynevezett Van der Waals-távolságban (kb. 0,34 nm) „lebeg” fölötté (3. ábra). A nanocsövek alagútmikroszkópos leképezésénél tehát nem egy, hanem két alagútátmenetet kell figyelembe vennünk: egyrészt az STM-tű – szén nanocső alagútátmenetet, másrészt a szén nanocső – hordozó alagútátmenetet. (STM vizsgálathoz a nanocsöveket mindig valamilyen elektromosan vezető – vagy legalább félvezető – hordozófelületre kell felvinni. Ez a hordozó mechanikailag tartja a nanocsöveket, és létrehozza a zárt elektromos áramkört. Szén nanocsövek STM-vizsgálatánál a grafit és az arany a legmegfelelőbb hordozók.) A tű

4. ábra. A hullámcsomag-dinamikai módszer elvi vázlata. A bejövő hullámcsomag szóródik a vizsgált rendszeren, a rendszer tulajdonságaira a szórt hullámcsomag tulajdonságaiból következtetünk. A kimenő hullámcsomagot ábrázoló három, különböző vastagságú nyíl azt szimbolizálja, hogy a különböző irányokba különböző erősségű a szórás.



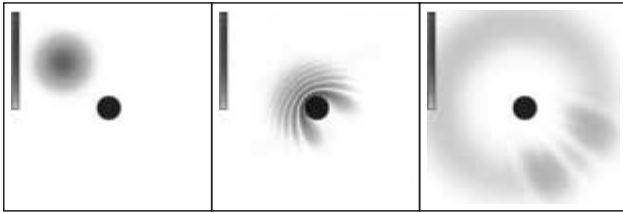
3. ábra. Szén nanocső STM leképezése – a rendszer geometriája. Az STM-tű d_1 távolságra van a nanocső középvonala fölött. A szén nanocső d_2 ($= 0,335$ nm) távolságra „lebeg” a hordozófelület fölött a Van der Waals-potenciálon.

és a cső közötti alagútátmenet nulladimenziós (pontoszerű), a cső és a hordozó közötti alagútátmenet egyszázadimenziós (vonalszerű).

Az MFA Nanoszerkezetek Osztályán, belga kutatókkal is együttműködve (pl. *Philippe Lambin*nel a namuri egyetem szilárdtestfizikai laboratóriumából), körülbelül egy évtizeddel ezelőtt célul tűztük ki a nanocsövek STM-leképezését befolyásoló tényezők részletes vizsgálatát. Kidolgoztunk egy hullámcsomag-dinamikai programcsomagot, amelynek segítségével részleteiben tanulmányoztuk az elektron áthaladását az STM-tűből a nanocsövön keresztül a hordozóba.

A hullámcsomag áthaladása az STM-tű – szén nanocső – hordozó „alagúton”

Erwin Schrödinger 1926-ban azzal a céllal alkotta meg a kvantummechanikai hullámcsomag (HCs) fogalmát, hogy hidat építsen a klasszikus és a kvantummechanika között. A HCs egy térben lokalizált hullámfüggvény, azaz olyan kvantumállapotot ír le, amelyben a részecske nagy valószínűséggel egy adott pont közelében található. A Heisenberg-féle határozatlansági összefüggés miatt a HCs véges impulzusszórással rendelkezik, ezért az idő múlásával a HCs szétfolyik, azaz egyre nagyobb térrészre terjed ki. A szétfolyás sebessége annál nagyobb, minél kisebb térrészre volt a HCs lokalizálva („besorítva”) a kezdoállapotban. Szabad térben, azaz ha semmilyen erő nem hat rá, a HCs mozgása igen egyszerű: tömegközéppontja egyenesvonalú egyenletes mozgást végez és eközben fokozatosan szétfolyik. Ha viszont a HCs valamilyen potenciáltérben mozog, bonyolult és érdekes viselkedést figyelhetünk meg: a HCs több részre oszlik, periodikus, vagy kváziperiodikus mozgás jön létre, sőt, az is előfordulhat, hogy a HCs szétfolyás helyett – a potenciál hatására – összeszűkül. A HCs adott potenciáltérben való mozgásának megfigyelésén alapul a hullámcsomag-dinamikai módszer (HCsD-módszer). A HCsD-módszer nem más, mint egy szórás kísérlet a számítógépen (4. ábra): „nekilövéünk” egy HCs-t a vizsgált (lokalizált) potenciálnak. A HCs időfejlődését az időfüggő Schrödinger-egyenlet segítségével számítjuk ki. A módszer segítségével egyrészt részletesen nyomon tudjuk követni a vizsgált rendszer dinamikáját, másrészt a végállapotból – amikor a kijövő HCs már elhagyja a potenciál tartományát – külön-



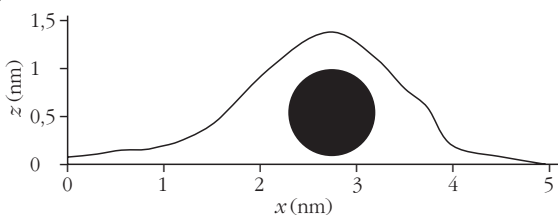
5. ábra. Kétdimenziós Gauss-hullámcsomag szórása körszimmetrikus „merev fal” potenciálon. A bal oldali ábra a kezdőállapot, a középső ábra a kölcsönhatást mutatja, a jobb oldali ábra a végállapot. A középső kör a potenciál helyét mutatja. A hullámcsomag megtalálási valószínűségét szürkescálán ábrázoltuk: a fehér jelenti a nulla valószínűsűrsűrűséget, a sötétszürke a maximális valószínűsűrsűrűséget. A szürkescála nemlineáris (lásd az ábrák bal oldalán), hogy a nagy és a kis valószínűség is jól ábrázolható legyen. A normálás mindhárom ábrán azonos. Ahogy a hullámcsomag szétfolyik (egyre nagyobb térrészre terjed ki), a maximális megtalálási valószínűsűrsűrűség csökken.

féle fizikai mennyiségeket számíthatunk ki, például átmeneti valószínűséget, kvantummechanikai áramsűrűséget, kölcsönhatási időt stb.

Az 5. ábrán egyszerű kétdimenziós példán mutatjuk be a HCsD-módszer működését. A bejövő HCs egy korong alakú potenciálon szóródik. Megfigyelhetjük, hogy – habár a bejövő HCs egy meghatározott irányú impulzussal rendelkezett – a körszimmetrikus potenciál minden irányba szétszórja a HCs-t. Ezt a jelenséget kísérletileg megfigyelhetjük például a Rutherford-féle szórás kísérletben: az atommagokba ütköző részecskék minden irányban (visszafelé is!) szóródnak. A szórt HCs-ben interferenciamintázatot figyelhetünk meg abban az irányban, amelyikben a bejövő HCs haladt. Ezt az interferenciát a bejövő és a szórt HCs interferenciája okozza.

Az STM modellezése esetén a HCs-t a tűből vagy a hordozóból indítjuk (attól függően, hogy a tű potenciálja negatív vagy pozitív a hordozóhoz képest), és azt vizsgáljuk, hogyan „alagutazik” át a HCs a másik elektródába (tehát a hordozóba vagy a tűbe). A vezető tűben (és a hordozóban) az elektronok szabadon mozognak, de a tű és a hordozó között néhány eV magasságú potenciálgát van. Ha egy a tűben szabadon mozgó elektron belülről nekiütközik a tűt határoló felületnek, akkor általában visszapattan a tű belsejébe. Ha azonban a tű elegendően megközelíti a mintát, azon a helyen, ahol a tű csúcsa legközelebb van a mintához, az elektron kicsi, de véges valószínűséggel átalagutazhat. Az STM-ben szokásos paraméterek esetén (1 V nagyságrendű előfeszültség, 0,1–1 nm közé eső távolság a tű és a minta között) a hullámcsomag legnagyobb része visszaverődik és csak körülbe-

6. ábra. Egyfálú szén nanocső látszólagos keresztmetszete a pásztázó alagútmikroszkópban. A vonal az STM-tű pályáját ábrázolja, amint állandó áramú üzemmódban áthalad a nanocső fölött. A vonalmetszet aszimmetriáját a tű csúcsának aszimmetrikus alakja okozza. A fekete korong a nanocső körülbelüli helyzetét és valódi keresztmetszetét ábrázolja. (Biró László Péter mérése.)



lül 0,1%-a jut át a másik elektródába. Ez valószínűségi értelmezésben azt jelenti, hogy a belülről a tű csúcsának ütköző elektronok közül körülbelül minden ezredik átalagutazik: így alakul ki az alagútáram.

Alkalmazási példák

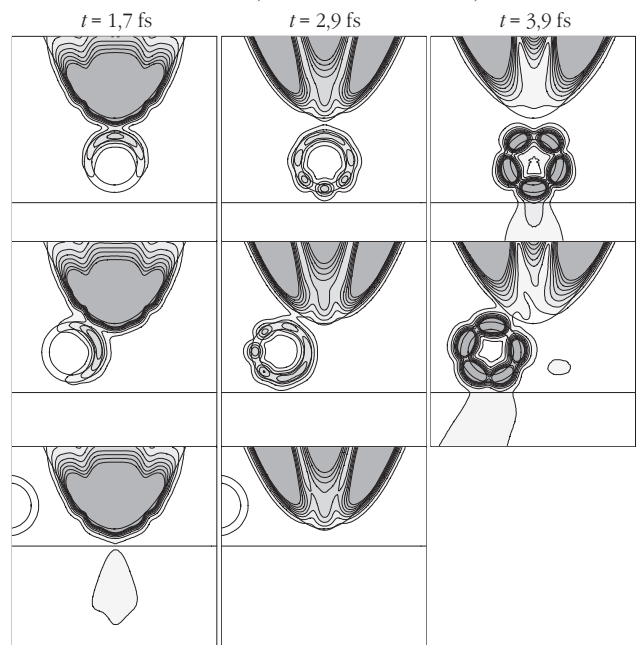
Az elmúlt évtizedben laboratóriumunkban a HCsD-módszert számos alagútmikroszkópos mérésünk értelmezésére felhasználtuk. Az alábbiakban ezek közül mutatunk be kettőt: a nanocső tű okozta látszólagos kiszélesedését és a nanocső zárt vége miatti interferenciák vizsgálatát.

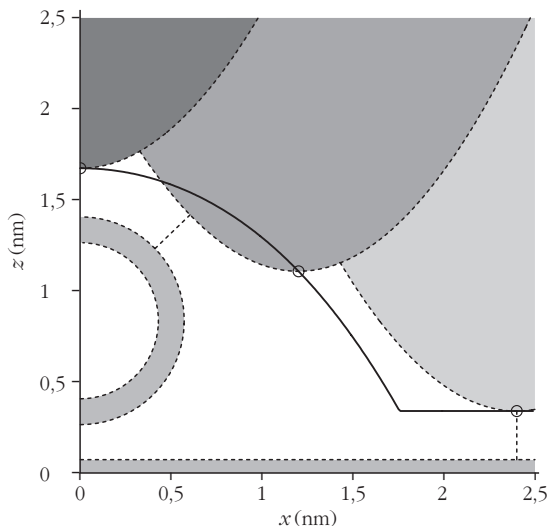
A tűkonvolúció

Mint korábban már utaltunk rá, az STM-mérésekben a nanocsöveket nem körkeresztmetszetűnek látjuk, hanem lapos ellipszisnek – a cső látszólagos szélessége lényegesen nagyobb, mint látszólagos magassága. Az alábbiakban ezt a jelenséget elemezzük a HCsD-módszer segítségével.

Az alagútmikroszkópos felvétel során a tüvel mechanikailag pásztázunk a minta felülete mentén és közben a visszacsatoló hurokkal úgy szabályozzuk a tű minta feletti magasságát, hogy állandó maradjon az alagútáram. A 6. ábra egy ezen a módon mért vonalmetszetet mutat. A számítógépes szimulációban a visszacsatoló hurkot úgy modellezzük, hogy úgy szabályozzuk a tű z pozícióját, hogy a HCs átmeneti valószínűsége állandó maradjon. A 7. ábrán három jellegzetes tüpozíciót mutatunk be. A legfelső ábrason a tű a nanocső középvonala fölött áll,

7. ábra. A hullámcsomag áthaladása az STM-tűből a nanocsövön keresztül a hordozófelületbe három különböző tüpozíció esetére. Az időfejlődést a megtalálási valószínűsűrsűrűség árnyalt szintvonalas képével ábrázoljuk (a csőre merőleges keresztmetszetben). A fehér jelenti a nulla, a sötétszürke a maximális megtalálási valószínűsűrsűrűséget, mindegyik részabrábrán a tényleges maximumra normálva. A szintvonalakat négyzetgyökös skálán ábrázoltuk. A vastag vonalak a tű, a nanocső és a hordozó határfelületeit jelzik. A nanocső átmérője 1 nm.





8. ábra. A tű okozta kiszélesedés geometriai magyarázata. A vastag vonal mutatja azt a pályát, amelyet az STM-tű csúcsa leír. A szaggatott vonallal határolt árnyékolt felső hiperbolák, a középső gyűrű és az alsó félsík a tű, a nanocső és a hordozó keresztmetszeti képei. Három különböző tűhelyzetet mutatunk be különböző szürkeárnyalatokkal jelölve. Mindegyik tűhelyzetben szaggatott vonallal jelöltük meg a nanocső és a tű legközelebbi pontjait összekötő szakaszt.

a középső ábrákon a cső oldala fölött, az alsó ábráson pedig már a tű eltávolodott a nanocsőtől. Mindhárom tűhelyzet esetén elvégeztük ugyanazt a szimulációt: a HCs a tűből indul, és megvizsgáljuk, hogyan halad át a nanocsőn keresztül a hordozófelületbe. Amikor a tű a nanocső középvonala fölött áll, a HCs először átalagutazik a tű csúcsából a nanocsőbe (1,7 fs), azután körülöleli a nanocsövet (2,9 fs), végül átalagutazik a csőből a hordozófelületbe (3,9 fs). A cső két oldalán haladó hullámcsomagrészek interferenciamentázat alakítanak ki a cső kerülete mentén. Ez az interferenciamentázat, mint azt részletesebb elemzéssel kimutattuk, jó közelítéssel megfelel a nanocső kvantummechanikai sajátállapotai szuperpozíciójának.

A középső ábráson megfigyelhetjük, hogy ha a tűt kissé elmozdítjuk a nanocső középvonala fölül (az ábrán 0,8 nm-rel), akkor a visszacsatoló huroknak a tűt kicsit lejjebb kell elmozdítania ahhoz, hogy ne változzon az átmeneti valószínűség. Ebben a helyzetben a HCs már nem a tű csúcspontján fog kilépni, hanem a tű oldalán – itt halad át a nanocsőbe. A jelenség kvalitatívan, de egyszerűen úgy írható le, hogy az alagutazás mindig a két elektróda legközelebbi pontjai között történik.

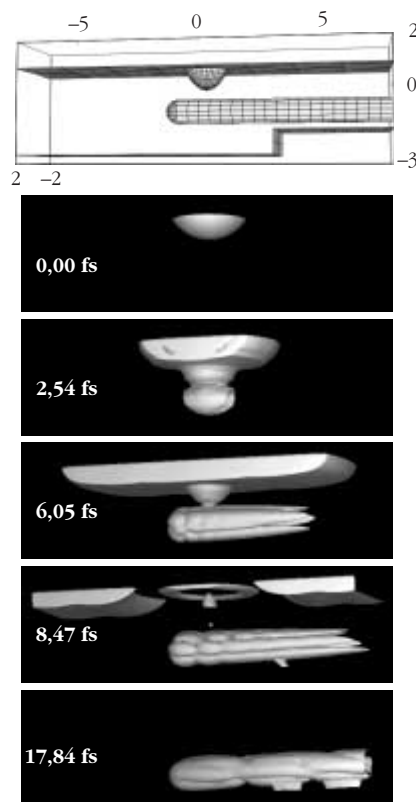
A legelső ábráson a tű vízszintes eltolása 2 nm. Ilyenkor a tű már annyira távol van a nanocsőtől, hogy a visszacsatoló hurok addig mozgatja lefelé a tűt, amíg annak a csúcspontja olyan közel kerül magához a hordozófelülethez, hogy a tű és a hordozó között jön létre alagutazás. Láthatjuk az ábrán, hogy ebben a helyzetben ismét a tű csúcspontján lép ki a HCs és alagutazik át a hordozóba. Mivel a hordozófelületbe való közvetlen alagutazásnál az elektronnak csak egy alagútátmeneten kell áthaladnia, ez a folyamat lényegesen gyorsabban lezajlik, mint a nanocsőn keresztüli alagutazás, ahol a HCs-nek két alagútközön is át kell haladnia. Ezért a nanocsőn kvázistacionárius állapot jön létre.

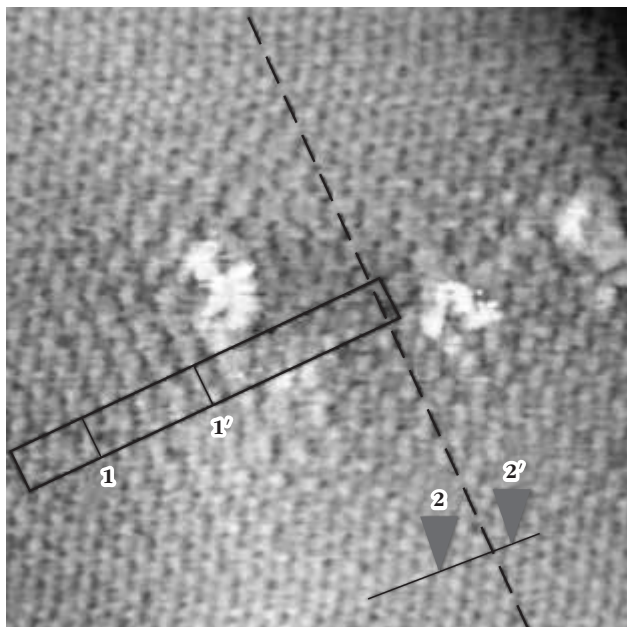
A röviden bemutatott HCsD-eredmények alapján a 8. ábrán szemléltetett egyszerű geometriai módszerrel modellezhetjük az STM-tű mozgását háromdimenziós objektumok leképezése esetén: a tű olyan vonal mentén mozog a minta felülete fölött, hogy a tű és a minta legközelebbi pontjai mindig egyforma távolságban legyenek egymástól. Természetesen ez az egyszerű geometriai modell csak akkor alkalmazható, ha a minta elektronszerkezete mindenhol egyforma, ugyanis az eltérő elektronszerkezetű pontokon más lesz az azonos alagutazási távolsághoz tartozó alagútáram értéke – azaz az elektronszerkezet változása hatására a visszacsatoló hurok változtatja a tű z pozícióját anélkül, hogy ehhez a minta felületén tényleges topográfiai „hegy” vagy „völgy” tartozna. Tehát a mért vonalmetszetnek a geometriai közelítéstől való eltéréséből az elektronszerkezet változásaira következtethetünk.

A félig zárt nanocső

A kísérletekben gyakran látunk egyik vagy mindkét végükön zárt nanocsöveket. Ilyet például úgy lehet létrehozni, hogy az STM-tűre adott pillanatnyi áramimpulzussal elvágjuk a nanocsövet. Egyik STM-mérésünk során találtuk azt a különleges nanocső-elrendezést, amelynek modelljét a 9. ábrán bemutatjuk. Ebben a kísérletben a hordozófelület grafit volt, amely réteges szerkezetű anyag (a rétegek távolsága 0,335 nm) és felületén gyak-

9. ábra. Hullámcsomag időfejlődése, miközben az STM-tűből a grafitlépcső fölé kilógó nanocsőn keresztül a hordozófelületbe alagutazik. A felső kép mutatja a rendszer geometriáját és az ábrázolási dobozt, a méretek nanométerben vannak megadva. A nanocső átmérője 1 nm. Az időfázisképeken egy állandó valószínűségi sűrűségű felület időfejlődését mutatjuk be. A szintfelületnek az ábrázolási dobozon kívül eső részeit nem ábrázoltuk.





10. ábra. Argon-ionokkal besugárzott nanocső topográfiai képe. A hibahely közelében látható szuperstruktúra periodicitását az 1–1' vonal mutatja, a hibahelytől távolabb látható grafitrács periodicitását a 2–2' vonal.

ran előfordulnak „lépcsők”, amelyek viszonylag nagy, atomi sima „teraszokat” választanak el. A nanocsöveket tartalmazó szuszpenziót a grafitfelületre csöppentve az oldószer elpárolgása után a hordozófelületen visszamaradnak a nanocsövek. Ezek közül egy, a végén zárt cső kicsit kilógott egy grafitlépcső fölé: ezt a helyzetet vizsgáltuk meg a HCsD-szimulációval. Ezen a meglehetősen bonyolult rendszeren kiválóan tudjuk illusztrálni azokat a dinamikai jelenségeket, amelyek a HCs nanocsövön keresztüli alagutazása során fellépnek, és jól be tudjuk mutatni a HCsD-módszer teljesítőképességét is a kísérleti eredmények értelmezésében.

A 9. ábrán a túból induló HCs egy állandó valószínűségi sűrűségű szintfelületének időfejlődését láthatjuk. Az STM-tű a szimulációban a csőnek a lépcső fölé kilógó vége fölött áll. A túból induló HCs először átalagutazik a nanocsőbe, körülfolja azt és elkezd szétterjedni a cső tengelye mentén mindkét irányban, miközben a cső kerülete mentén létrejönnek a már a 7. ábrán is bemutatott interferenciamintázatok. Mivel a cső kilóg a lépcső fölé, ez alatt a csődarab alatt olyan messze van a hordozófelület, hogy oda a HCs csak elhanyagolható valószínűséggel

tud átalagutazni, így a teljes HCs marad – egyelőre – a csővön. Azonban a HCs-nek a cső zárt vége felé (az ábrán balra) haladó része hamarosan eléri a zárt véget és onnét visszaverődik. A zárt vég felé haladó és az onnan visszaverődő elektronhullámok interferenciamintázatot hoznak létre a cső tengelye mentén. A HCs csak akkor tud átalagutazni a hordozófelületbe, amikor eléri a lépcső élét. Egybehangzóan más számításokkal és mérésekkel a HCsD-módszer azt mutatja, hogy az egyfalú szén nanocső ballisztikus vezető – akár több mm hosszúságig is.

Az alagútmikroszkópos mérések tanúsága szerint nemcsak a zárt vég, hanem minden más hibahely (olyan hely, ahol megváltozik a nanocső tökéletes szimmetriája) is interferenciamintázat megjelenését okozza az STM-képben, így például az ionbesugárással létrehozott hibahelyek is. A 10. ábrán Ar^+ -ionokkal besugárzott szén nanocső atomi felbontású STM-képét látjuk (Osváth Zoltán munkája). Jól felismerhető a hibahelyen történő elektronhullám-szóródás által létrehozott szuperstruktúra. A hibahelytől távol a szuperstruktúra lecseng és ismét a hibamentes nanocsőre jellemző periodicitás látható.

Összefoglalás

A fenti példákkal azt mutattuk be, hogy a hullámcsomagdinamikai módszer kiváló eszköz az elektronok dinamikájának részletes tanulmányozására nanoszerkezetekben. Ez a módszer – tudományos értéke mellett – jól felhasználható az oktatásban és a szemléltetésben is. A mozgó hullámcsomag segítségével nagyon szemléletesen lehet bemutatni az elektron mozgásának sok esetben meglehetősen bonyolult dinamikáját. A számítástechnika fejlődése napjainkra lehetővé teszi, hogy ilyen szimulációkat egy személyi számítógépen is elvégezzünk. A módszer részletes ismertetése alkalmazási példákkal a www.nanotechnology.hu honlapunkon megtalálható.

Irodalom

1. GYULAI JÓZSEF: *Az anyagtudomány apoteózisa* – Fizikai Szemle 46/8 (1996) 264
2. BIRÓ LÁSZLÓ PÉTER: *Nanovilág: a szén nanocsőtől a kék lepkeszárnyig* – Fizikai Szemle 53/3 (2003) 385
3. KÜRTI JENŐ: *A varázslatos szénatom* – Fizikai Szemle 47/9 (1997) 276
4. BALÁZS ERZSÉBET: *A pásztázó alagútmikroszkóp és társai* – Természet Világa 1993/1
5. <http://nobelprize.org/physics/laureates/1986/>

A TEJÚTRENDSZER MODELLJE – PIZZÁBÓL

A németországi központú Európai Déli Observatórium (European Southern Observatory, ESO) a világ több pontján üzemeltet távcsöveket, például Chilében is. Ott található a szervezet központi csillagvizsgálója és ott van a legnagyobb távcső is. Az Observatórium minden évben nemzetközi csillagászati pályázatot ír ki diákoknak. Az elmúlt időszakban a *Catch a Star* című felhívásukra több sikeres hazai munka is érkezett, 2001-ben pedig a *Life in the Universe* vetélkedőn az Alternatív Közgazdasági Gimnázium csapata érte el az első helyezést. Idén folytatódott a remek magyar sorozat: A Polaris Csillagvizsgáló szakkörösei lettek a legjobbak a nemzetközi mezőnyben és díjnyertesként Chilébe utazhatnak.

A pályázati kiírásban nem határoztak meg konkrét témát, csak annyit, hogy tíz oldal legyen a terjedelme, és lehetőleg angol nyelven

íródjék. Budai Edina, Szabó Andrea és Szulágyi Judit *Star clusters and the structure of the Milky Way* (Csillaghalmazok és a Tejút szerkezete) című munkájukkal pályáztak. Céljuk nem csupán galaxisunk megfigyelése és az ehhez kapcsolódó elméleti háttéranyag összegzése volt, hanem mindezek szemléltetése – ötletes módon egy pizzával. Budai Edina és Szabó Andrea az Óbudai gimnázium, Szulágyi Judit az Eötvös József gimnázium tanulója. Pályázatuk több száz nemzetközi pályázó előtt végzett első helyen. A lányok hosszabb ideje foglalkoznak csillagászáttal. Ismervén az előző évek pályázati anyagait tudták, hogy a sikerhez elengedhetetlen a kreatív ötlet. „A tejútrendszerrel írtunk egy pályázatot és úgy gondoltuk, hogy egy pizzával jól lehetne ezt modellezni” – mondta Budai Edina.