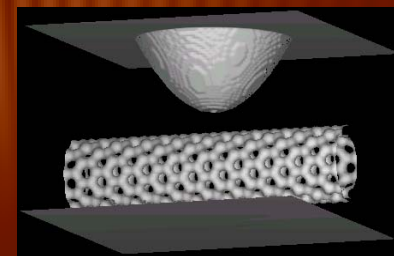




# Utazások alagúteffektussal



***Márk Géza István***



**MTA Műszaki Fizikai és  
Anyagtudományi Kutatóintézet,  
Budapest**

<http://www.nanotechnology.hu>

## Nanostructures Laboratory

### MTA MFA Budapest

[Click here to receive Email notification about new uploads to these pages](#)

[New Results](#)

[Staff](#)

[Publications](#)

[Research Topics](#)

[Research Equipment](#)

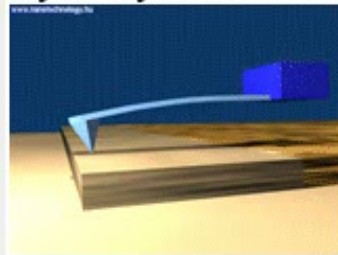
[Cooperations](#)

[Media Coverage](#)

[Links](#)

[Magyar oldalak](#) 

#### Measuring the thickness of graphene layers by TAFM



An Atomic Force Microscope in its "tapping mode" (TAFM) sweeps the sample surface by an oscillating probe attached to

a cantilever. This animation shows how does the oscillation change at a step edge and also when the material of the surface is changed below the probe tip. We determined what TAFM imaging parameters are necessary to measure the thickness of thin (< 1 nm) FLG (Few Layer Graphene) layers correctly.

[AVI movie \(2 M\) >>](#) [Publications >>](#)

#### Web-Schrödinger 2.0

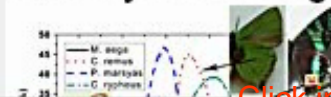


Web-Schrödinger is a program for the interactive solution of the time dependent two dimensional (2D) Schrödinger equation.

The program itself runs on our server and can be used through the Internet with a simple Web browser. Several example configurations are provided with version 2.0. The user can save and load own configurations.

[Details >>](#) [Publications >>](#)

#### Photonic nanoarchitectures in butterfly scales as gas sensors



From 20 examined butterfly species all

[Click into image to start animation](#)

## Nanoszerkezetek Osztály

## MTA MFA Budapest

[Kattints ide, ha E-mail értesítést szeretnél kapni a honlapunkra felkerülő új anyagokról!](#)

### [New Results](#)

### [Staff](#)

### [Publications](#)

### [Research Topics](#)

### [Research Equipment](#)

### [Cooperations](#)

### [Media Coverage](#)

### [Magyar oldalak](#)



### Nanoügyekről – tudósok és civilek



A nanotechnológia orvosi, műszaki, elektronikai, élelmiszeripari felhasználása alapjaiban alakítja át életünket, azonban az

alkalmazásokhoz elengedhetetlen a társadalom, a fogyasztók, felhasználók bizalma – ehhez nélkülözhetetlen a tudósok nyitottsága és laikusok hajlandósága a párbeszédre. Ez a hármas összefüggés fogalmazódott meg a kutatók és civilek közös álláspontjaként a másfél órás beszélgetésben, amelyet a [www.hunscan.hu](http://www.hunscan.hu) honlapon [nézhetünk meg és olvashatunk](#).

[Összefoglaló >>](#)

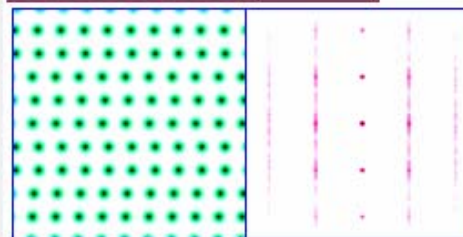
[Film \(MP4, 15 perc, 74 M\) >>](#)

### Bogaraktól tanulnak a fizikusok



Biró László Péter, az MTA MFA kutatójának érdeklődését egy, a rózsabogárfélék családjába tartozó, Tajvanon honos

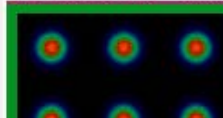
### Rendezett és rendezetlen fotonikus nanoszerkezetek (előadás)



Ez az animáció bemutatja, hogyan változik egy tökéletes kristály Fourier power spektruma, ha véletlenszerűen eltoljuk a rácssíkokat. Az MTA MFA szeminárium sorozatának keretében 2009. december 9-én részletesen bemutattuk, hogyan elemezhetjük a lepkeszárnyakban található rendezett és rendezetlen nanoszerkezeteket és hogyan számíthatjuk ki a pikkelyek optikai spektrumát.

[Az előadás >>](#)

### Schrödinger macskája, kvantum fönix és hasonló "állatok"



Ez az animáció egy 7 nm széles dobozba zárt részecske időfejlődését

# Köszönet



**László P. Biró**



**Philippe Lambin**





# A potenciális energia (1)

Klasszikus mechanikában: ha ismerjük az  $F(x)$  erőteret, ki tudjuk számítani a tömegpont gyorsulását az  $F=ma$  mozgásegyenletből.

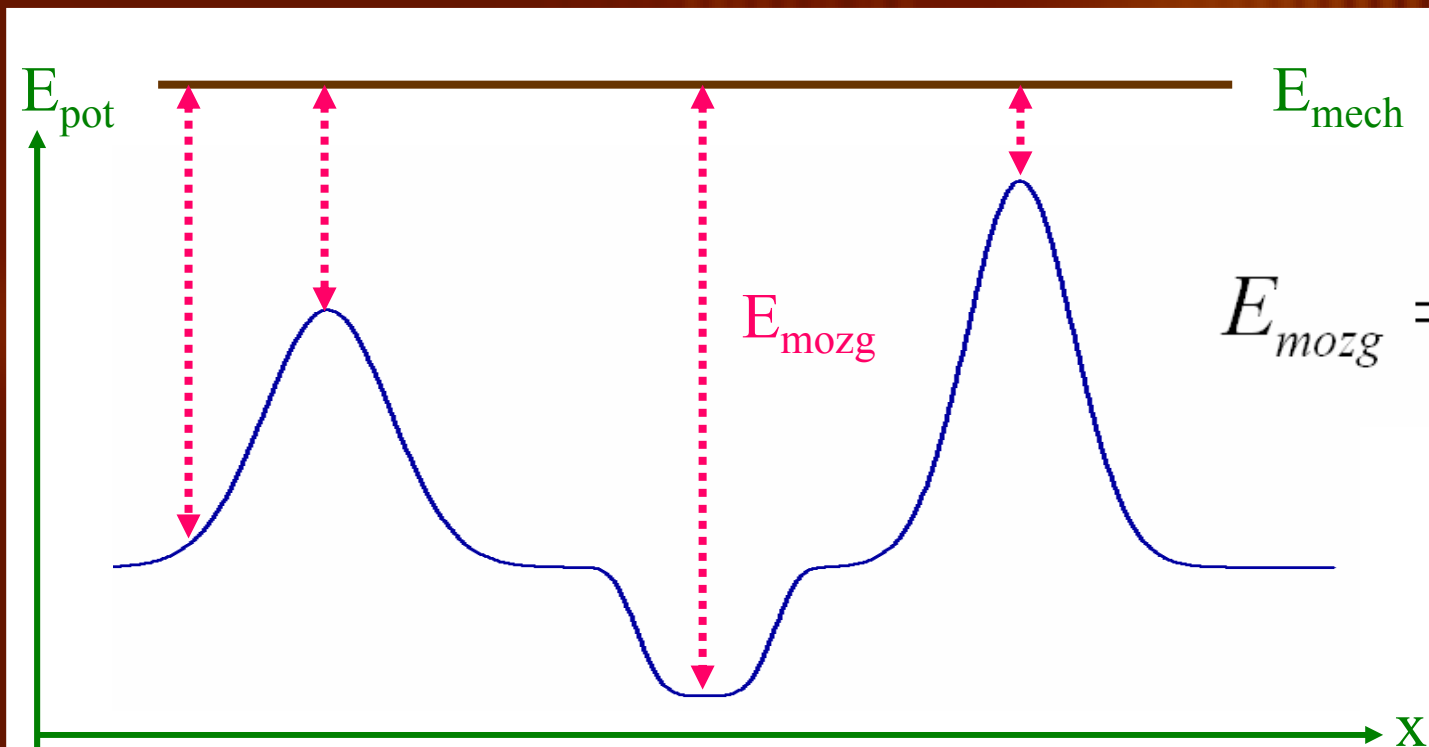
$$v(t) = \int a(t) dt$$

$$x(t) = \int v(t) dt$$

# A potenciális energia (2)

Konzervatív erőter esetén („ha nincs súrlódás”):

$$E_{\text{mech}} = E_{\text{mozg}} + E_{\text{pot}}$$

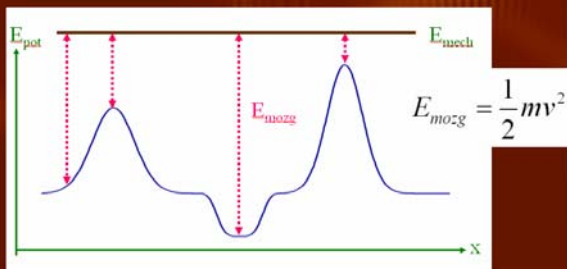


$$E_{\text{mozg}} = \frac{1}{2}mv^2$$

# A potenciális és a kinetikus energia játéka

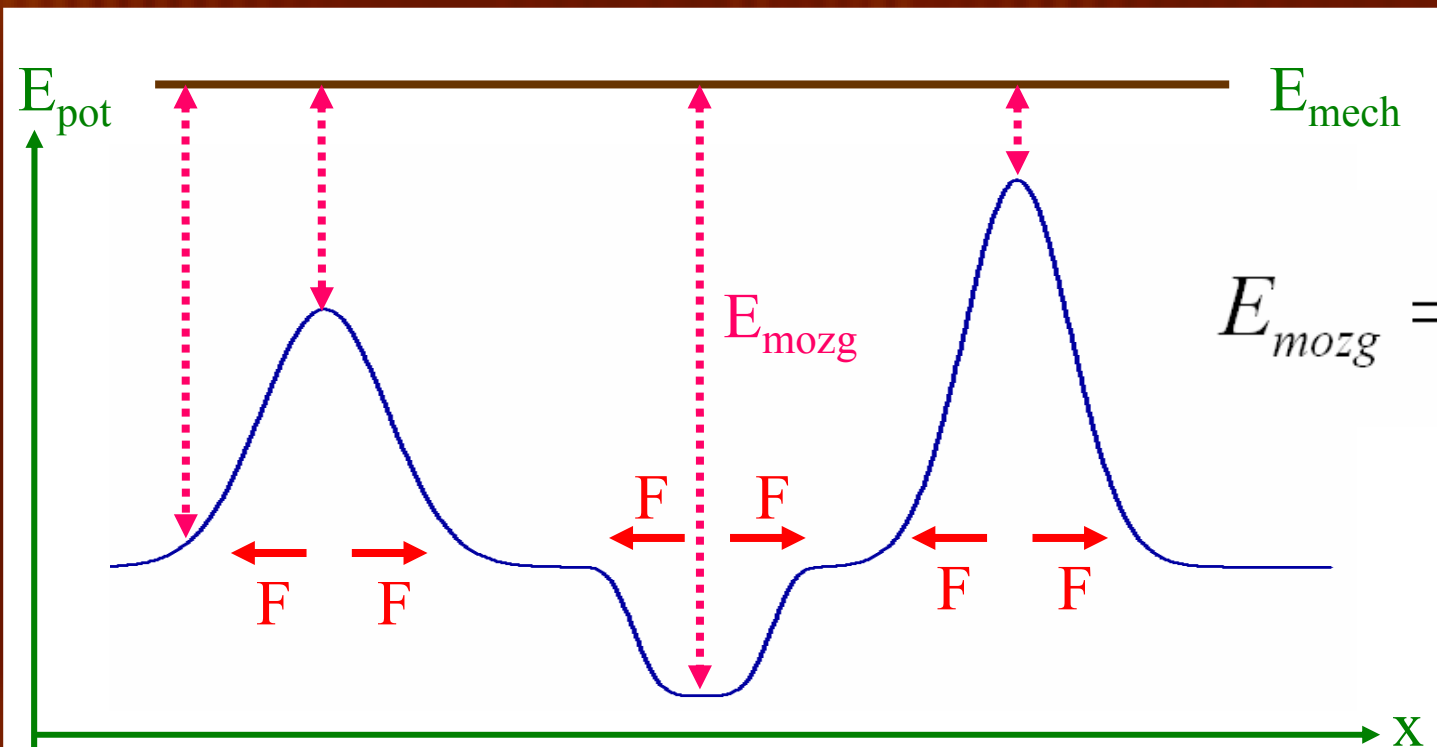


$$E_{\text{mech}} = E_{\text{mozg}} + E_{\text{pot}}$$

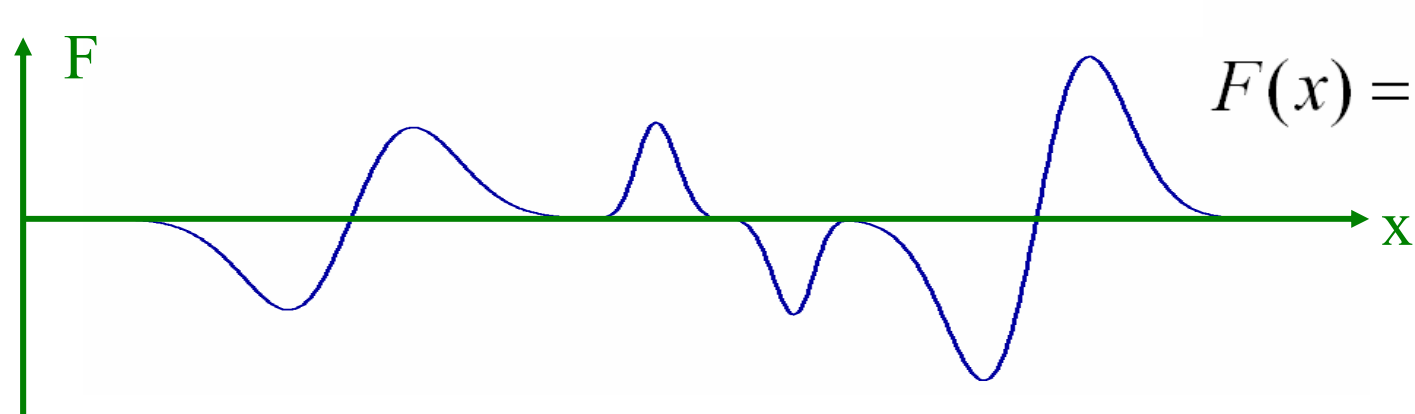


Click into image to start animation

# A potenciális energia (3)



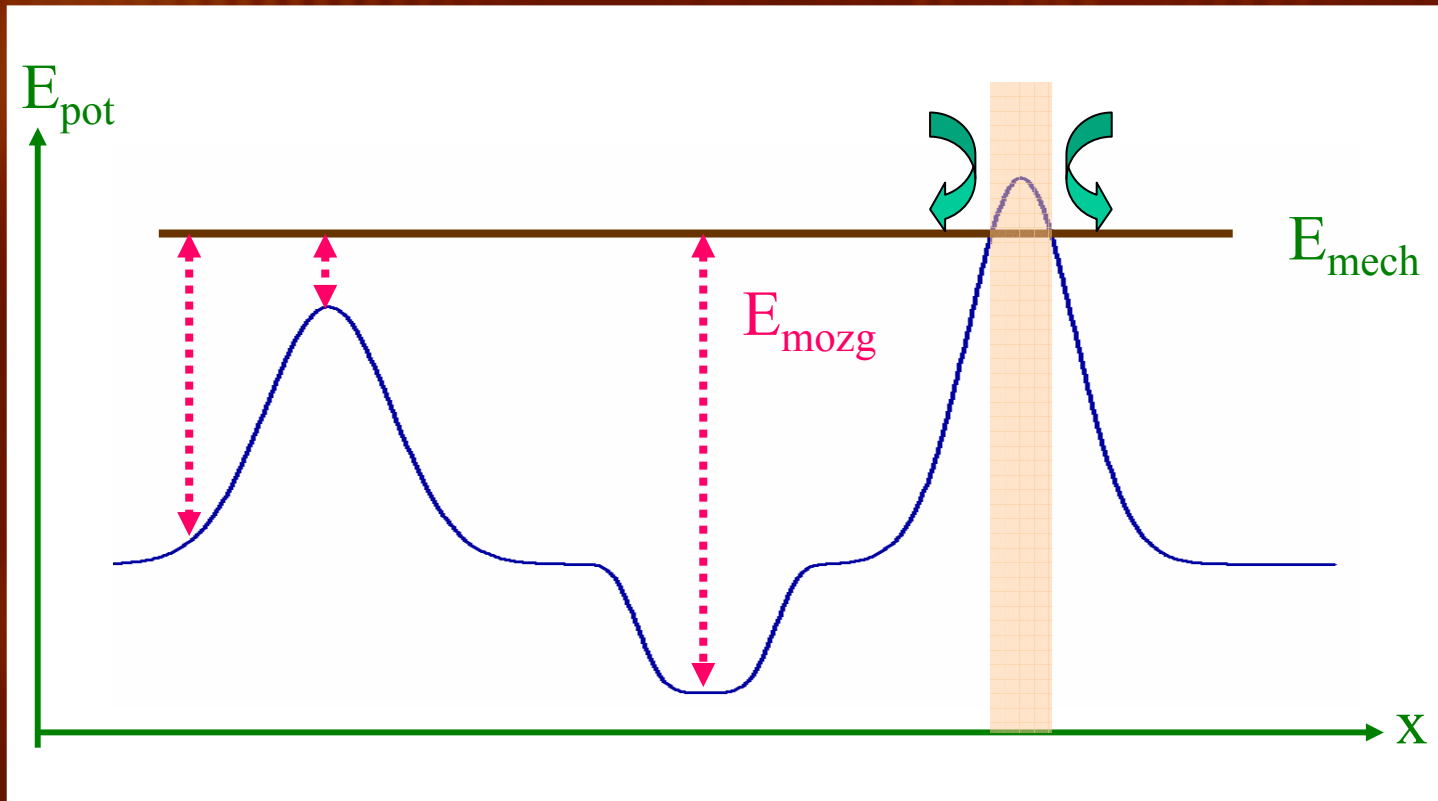
$$E_{\text{mozg}} = \frac{1}{2}mv^2$$



$$F(x) = -\frac{dV(x)}{dx}$$



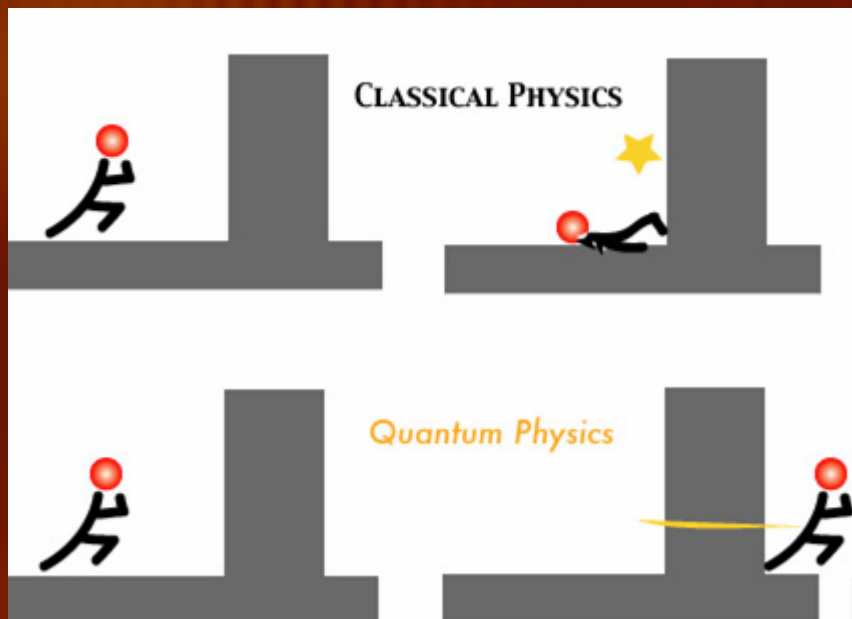
# Klasszikusan tiltott tartomány



$$E_{\text{mozg}} = \frac{1}{2}mv^2$$

Az  $E_{\text{pot}} > E_{\text{mech}}$  tartományba nem tud behatolni a részecske, mert a tartomány szélén  $E_{\text{mozg}} = 0$ ,  $v = 0$ , tehát visszafordul!

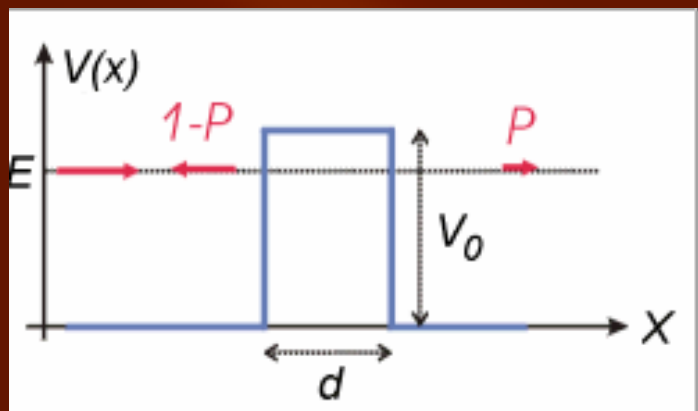
# Az alagútjelenség



**Nem tud átjutni a falon –  
klasszikus mechanika**

**Át tud jutni a falon –  
kvantummechanika**

## Az alagutazás valószínűsége



$$P \propto e^{-d\sqrt{V_0-E}}$$

**Makroszkopikus testekre PICI**

**Nanométerű testekre NAGY**

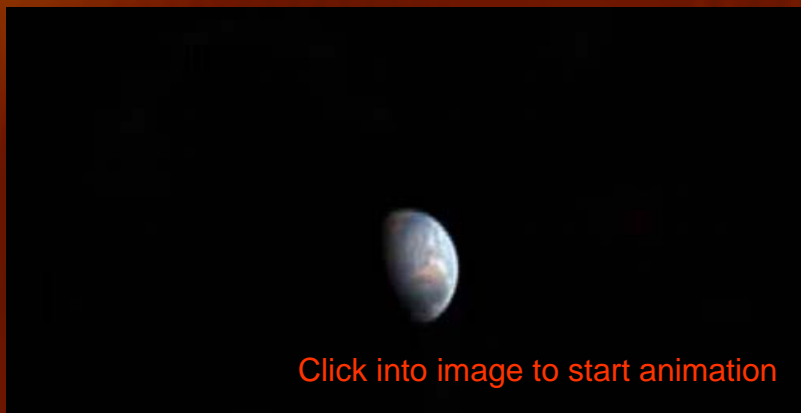
# Alagútjelenség: példa (1)



**Mivel a fémfelületen oxidréteg van (szigetelő), a klasszikus mechanika szerint nem tudna áram folyni!**

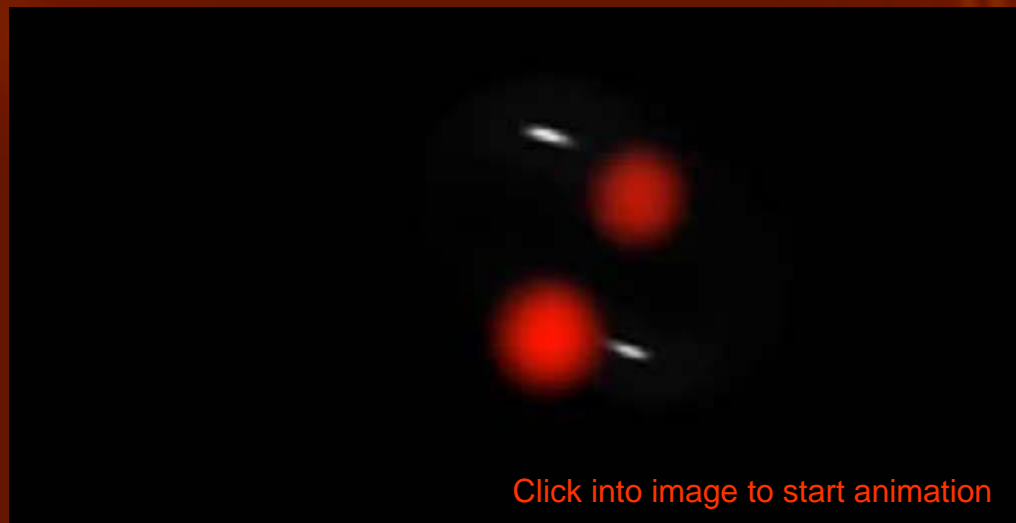
**De a kvantummechanika megmutatja, hogy a vékony oxidrétegen át tudnak alagutazni az elektronok – folyik az áram!**

# Alagútjelenség: példa (2)



**A Napban az energiát hidrogén fúzió termeli, ha két hidrogén atommag egyesül, hélium keletkezik és energia.**

**De az atommagok pozitív töltése taszítja egymás: a magok nem tudnak elég közel jutni egymáshoz – a Napban ehhez nincs elég meleg!**



**Segít az alagúteffektus!**

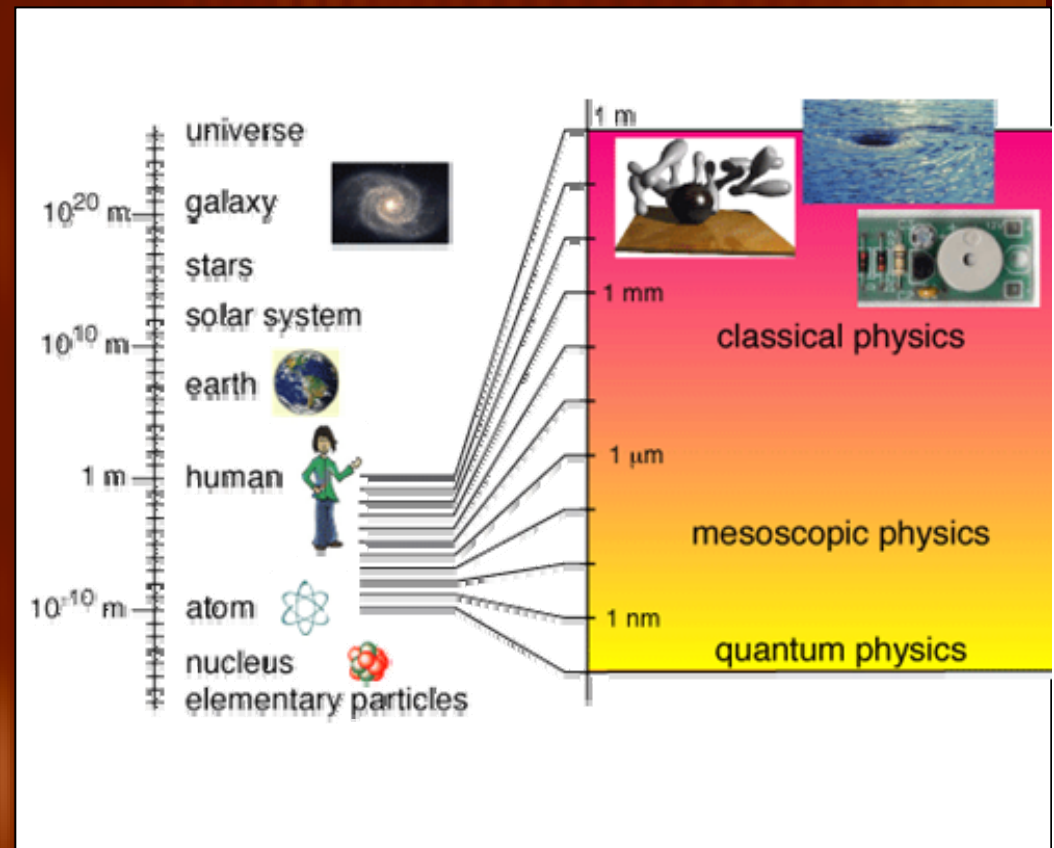
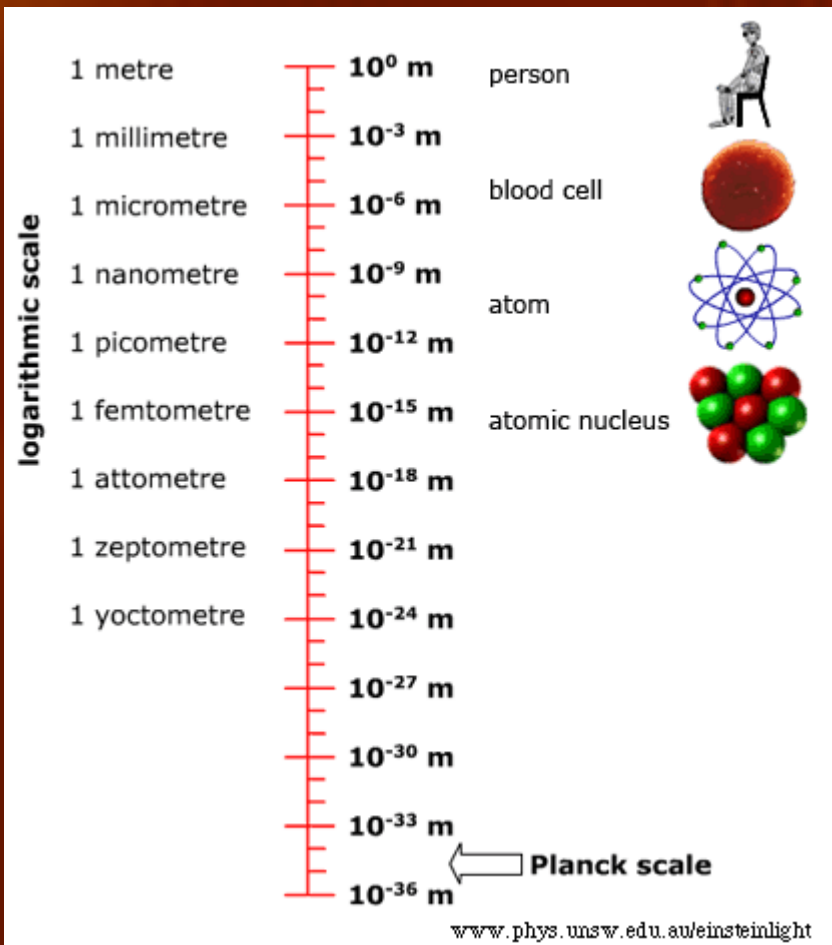
# Alagútjelenség: példa (3)



**A flash memória alagúteffektussal működik**



# Méretskálák



# Méretskálák

## Méretskála

10 km

1 km

100 m

10 m

1 m

10 cm

1 cm

1 mm

100  $\mu\text{m}$

10  $\mu\text{m}$

1  $\mu\text{m}$

100 nm

## Biológia

Legmagasabb fa

Nagy hal

Embergyermek

Nagy rovar

Legkisebb hal

Legkisebb rovar

Növényi sejt

Állati sejt

Baktérium

Vírus

## Technológia

Hosszú híd

Hosszú vonat

Hajó

Autóbusz

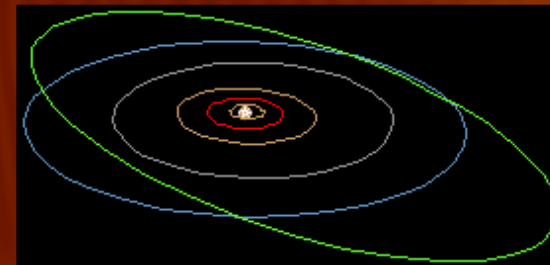
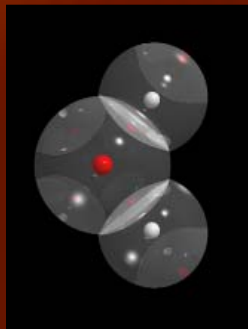
Autómotor

Mobiltelefon

Karóra

Pici gép

# A nanofizika skálái



## TÉR

**1 Angstrom =  $10^{-10}$  m**

**1 m**

**10 millió km =  $10^{10}$  m**

## IDŐ

**1 femto sec =  $10^{-15}$  s**

**1 s**

**31 millió év =  $10^{15}$  s**

## TÖRVÉNYEK

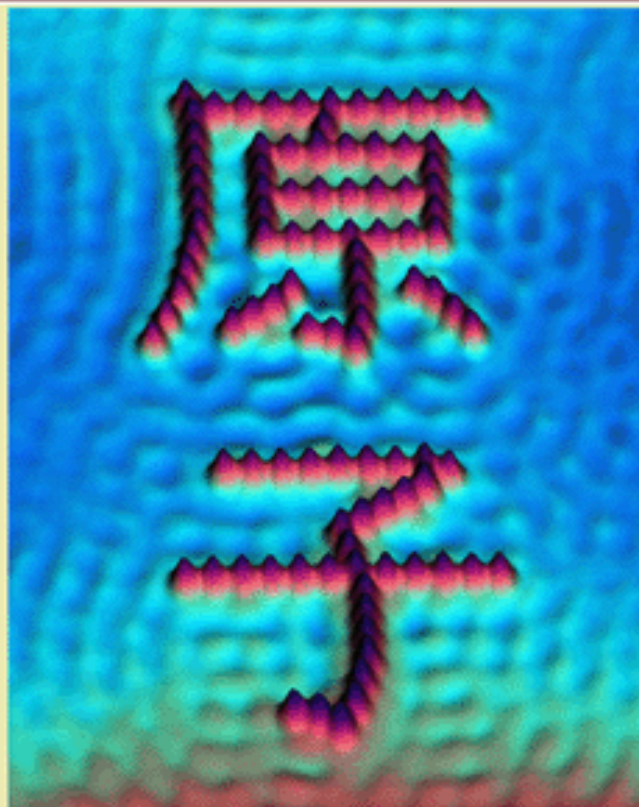
**Kvantum**

**Klasszikus**

# „Legó” atomokkal



Atomok felületen való elrendezése



Forrás: [www.almaden.ibm.com](http://www.almaden.ibm.com)

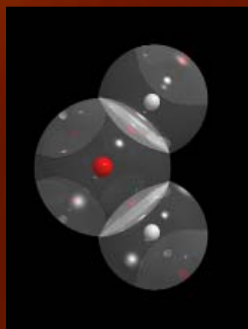
# Miféle csipesszel tudjuk megfogni és odébtenni az atomokat?



**Pásztázó alagút mikroszkóp  
(STM)  
Nobel díj: 1986**



# A nanovilág megközelítése



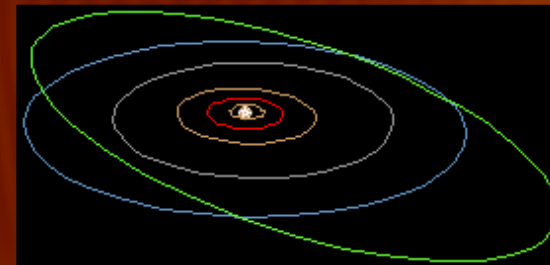
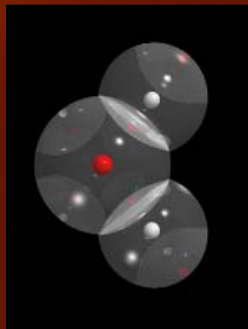
**Nincs közvetlen érzékszervi tapasztalatunk a nanovilágról**

**A nanovilágról tudósító minden mérés közvetett és nehezen értelmezhető**

**Az elméleti fizika számára általában túl bonyolultak a nanorendszerek**

**A nanovilág számítógépes szimulációja segíthet!!!**

# A nanofizika skálái



## TÉR

**1 Angstrom =  $10^{-10}$  m**

**1 m**

**10 millió km =  $10^{10}$  m**

## IDŐ

**1 femto sec =  $10^{-15}$  s**

**1 s**

**31 millió év =  $10^{15}$  s**

## TÖRVÉNYEK

**Kvantum**

**Klasszikus**

# Más méretskálán mások a fizika törvényei is!

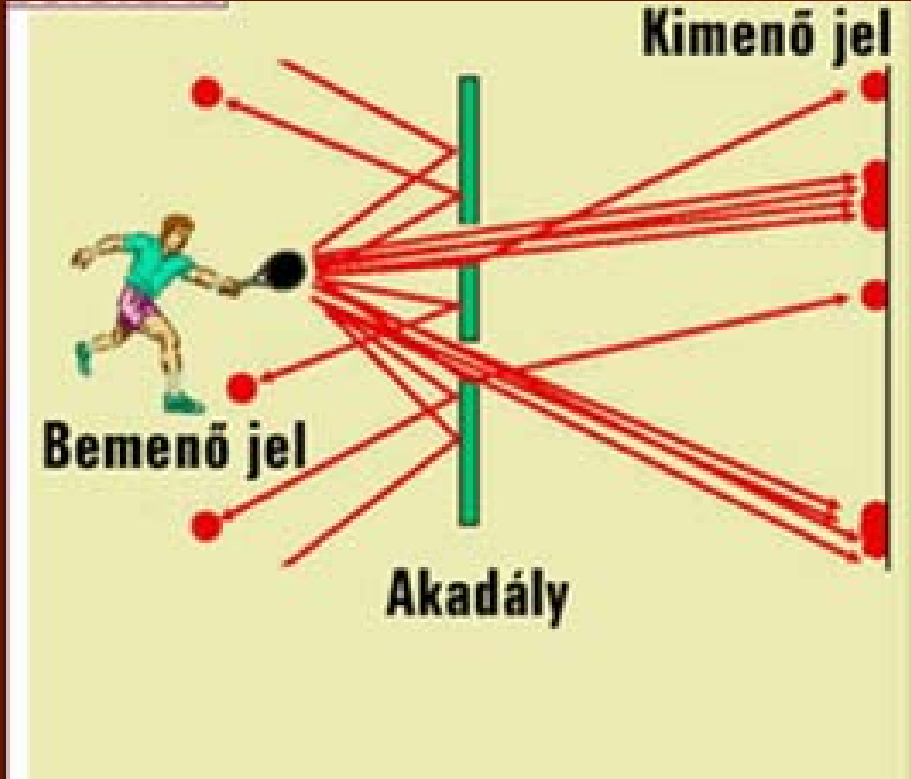
Nagy skála (galaxisok):  
általános relativitáselmélet

Emberi méretskála: klasszikus fizika

Kis skála (elektronok): kvantummechanika

# Kvantummechanika szemléltetése: kétréses kísérlet - klasszikus eset

Focilabda



# Kvantummechanika szemléltetése: kétréses kísérlet - kvantumos eset



**Elektron forrás**



**Akadály két  
nyílással**



**Fluoreszkáló  
ernyő**

Click into image to start animation

**Ezekre a  
helyekre sose  
megy az  
elektron!**

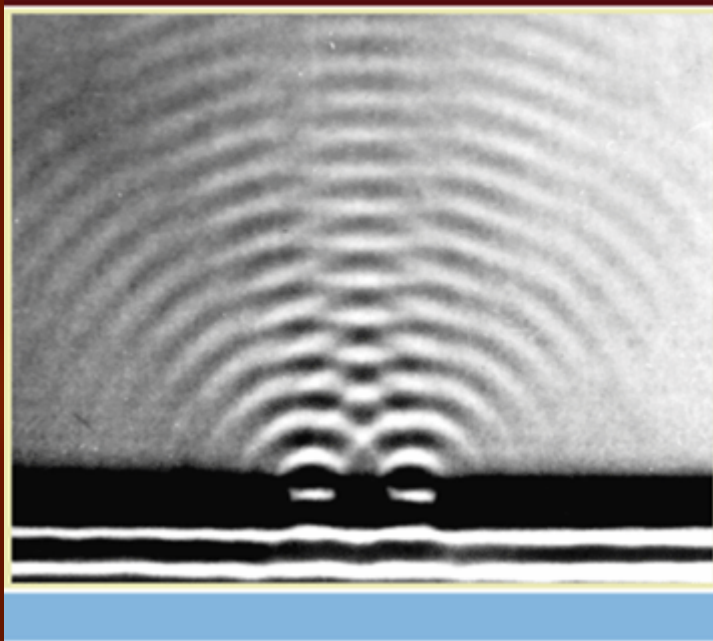
**Középre is jut  
részecske!**

**Ezekre a  
helyekre sose  
megy az  
elektron!**

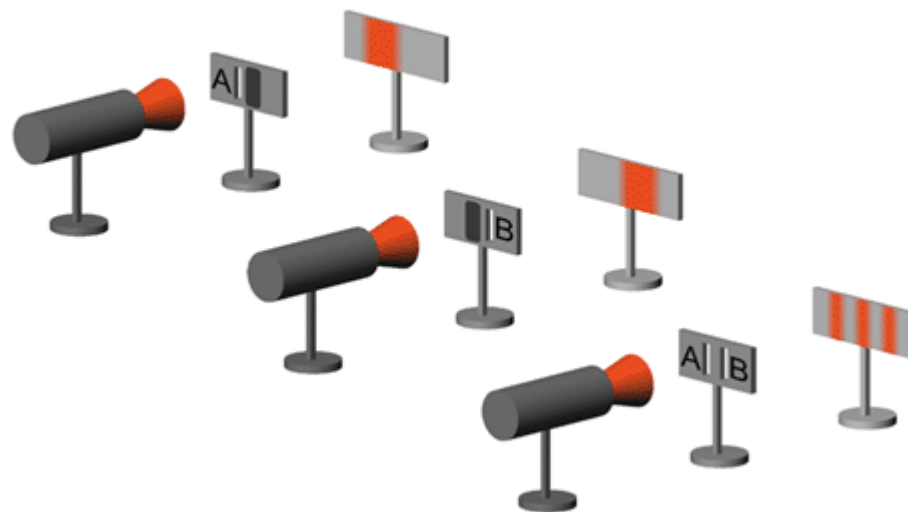


# Az anyag hullámtermészete

Vízhullámok interferenciája



Fényhullámok interferenciája



# A hullámfüggvény

$$\psi(\vec{r}, t)$$

hullámfüggvény  
helyvektor  
idő

A kvantummechanikai **hullámfüggvény** azt határozza meg, adott **helyen** és adott **időpontban** mekkora **valószínűséggel** és milyen **fázissal** található meg a részecske.

# Schrödinger egyenlet: a kvantummechanika mozgásegyenlete

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(\vec{r}, t)$$

Hamilton operátor

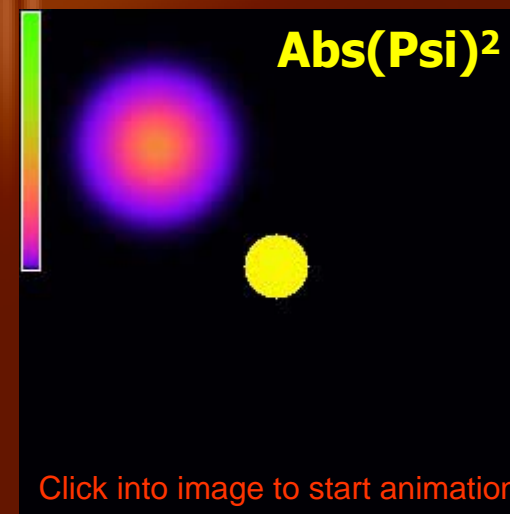
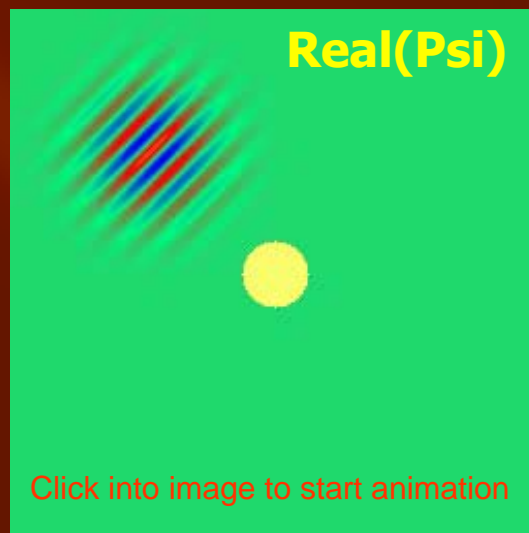
idő

helyvektor

hullámfüggvény

idő deriválás

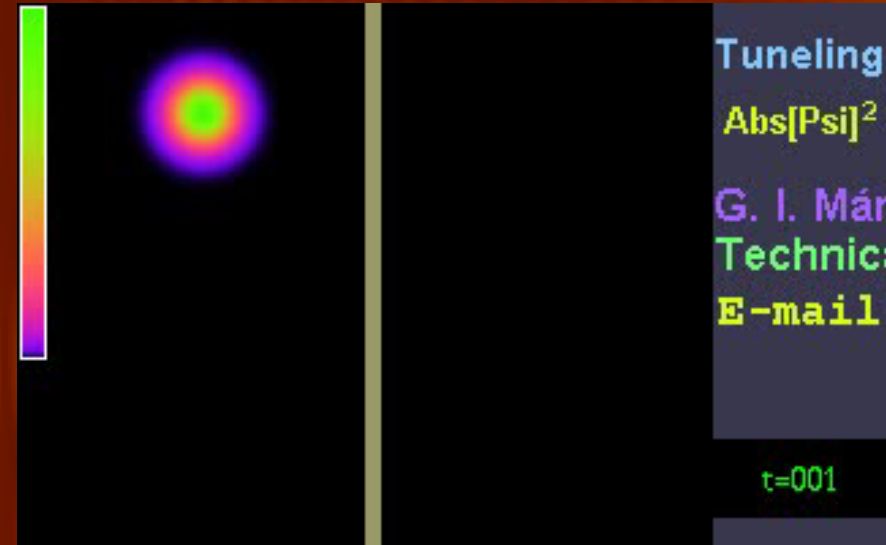
# A hullámcsomag dinamikai módszer



# Az alagútjelenség a hullámcsomag dinamikájában

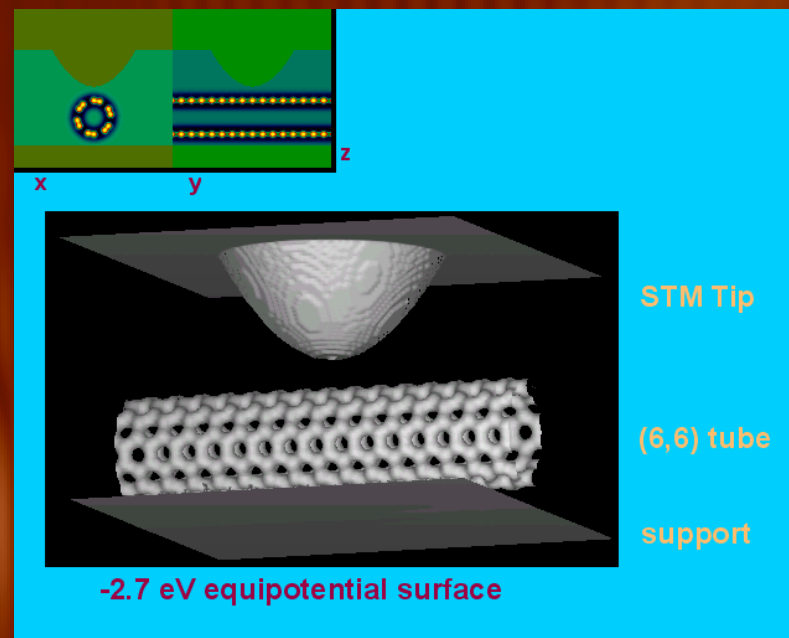
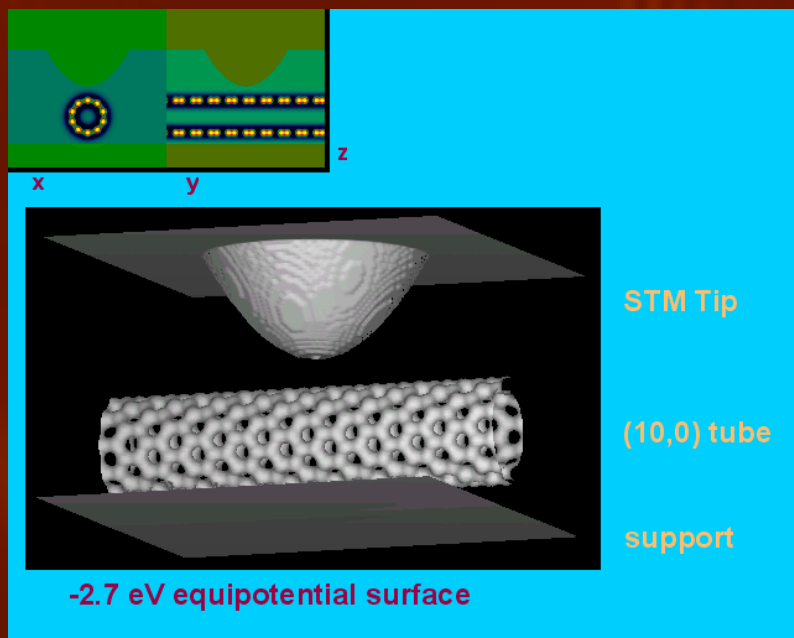


A  $\Psi(x,y;t)$  hullámfüggvény  
valós része



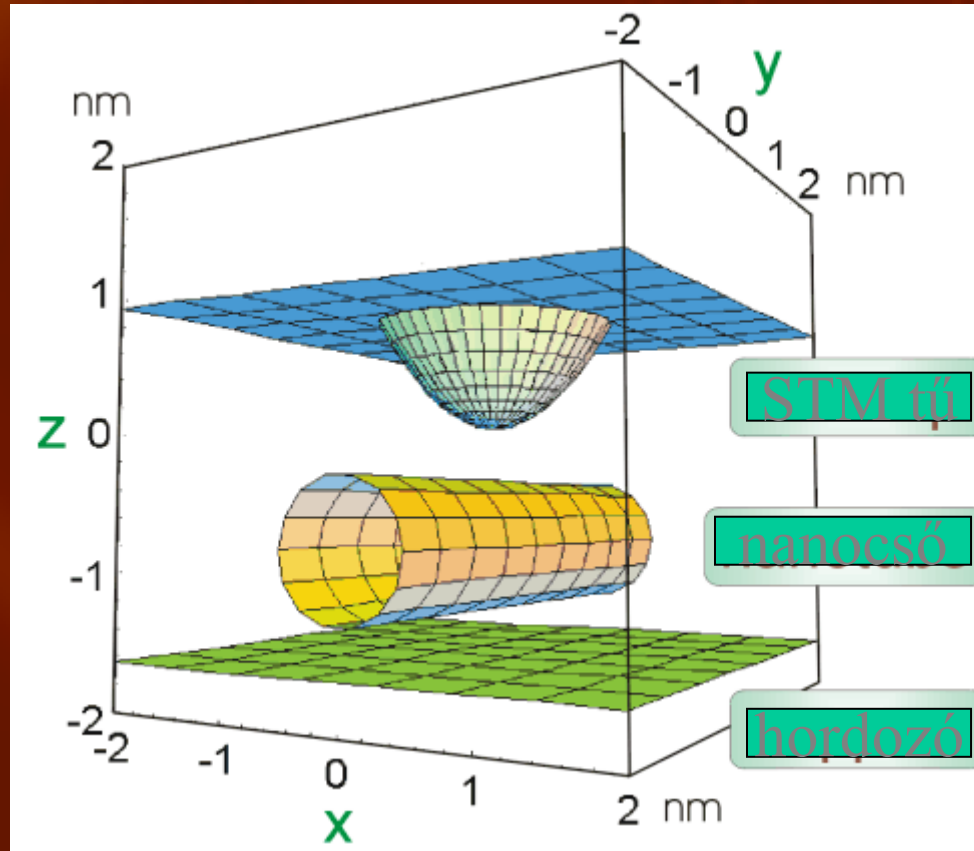
A  $\rho(x,y;t)$   
megtalálási valószínűség

# STM alagutazási geometria





# STM modell



**Akkor mérünk  
alagútáramot, ha  
az elektron a  
tűből a mintába  
alagutazik.**

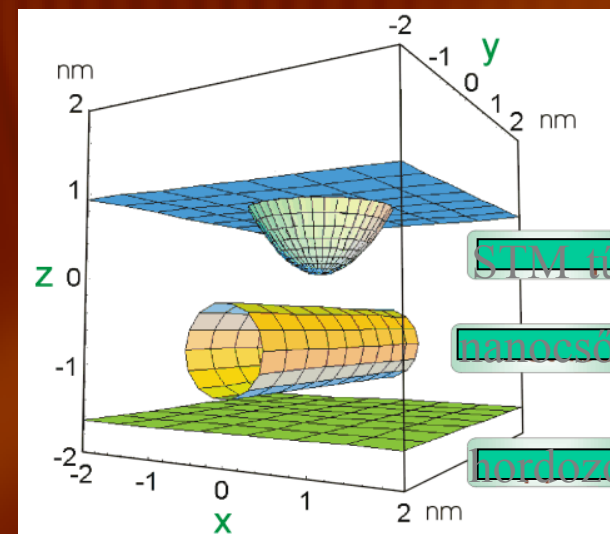
**Az elektronnak  
keresztül kell  
mennie a  
nanocsövön.**

# Egy szintfelület időfejlődése (1)



Click into image to start animation

$t = 0.0 \text{ fs}$

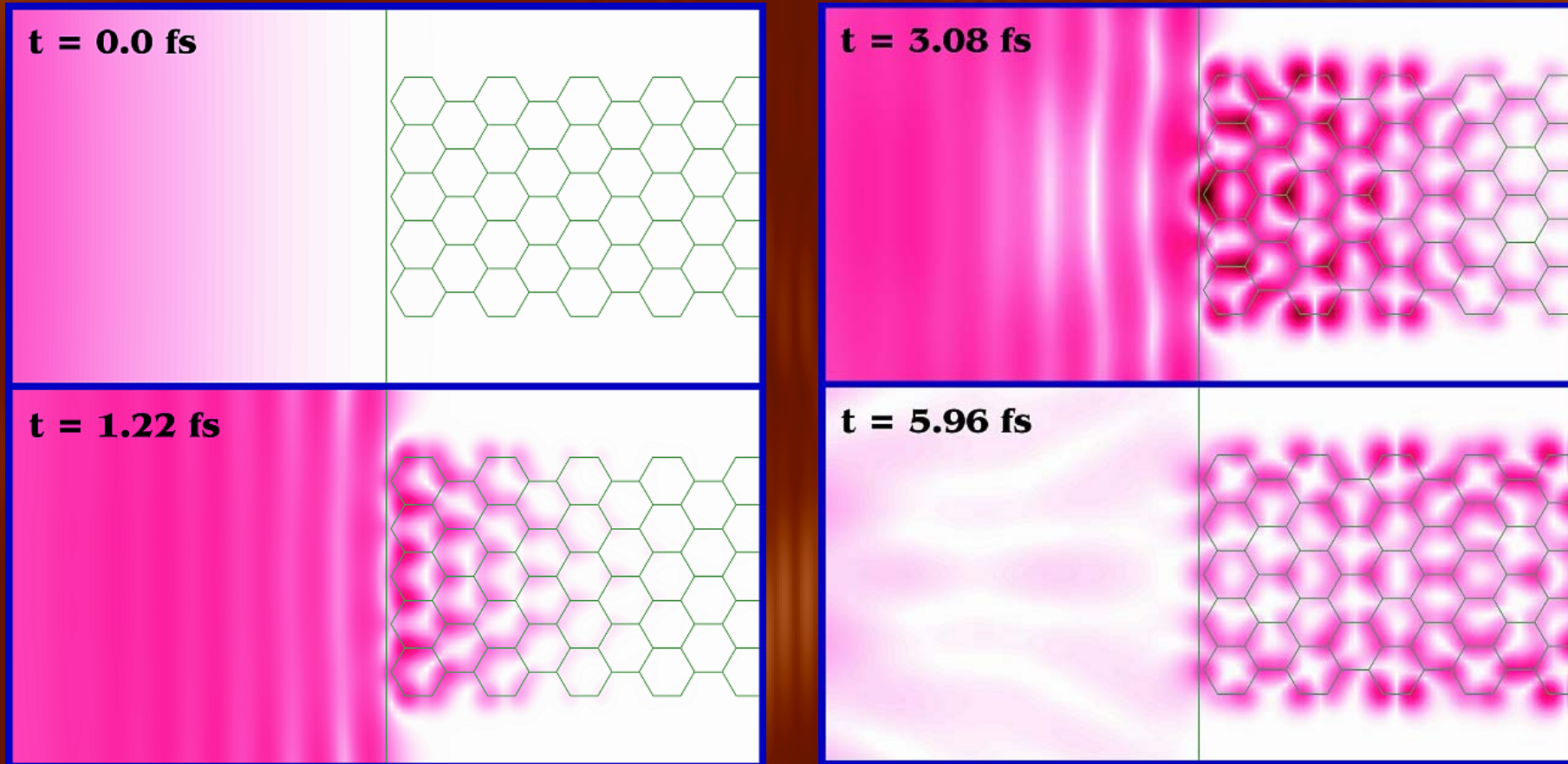


*er* Az elektron a tűből indul

*er* A szintfelület ábrázolási dobozon belüli részét látjuk.

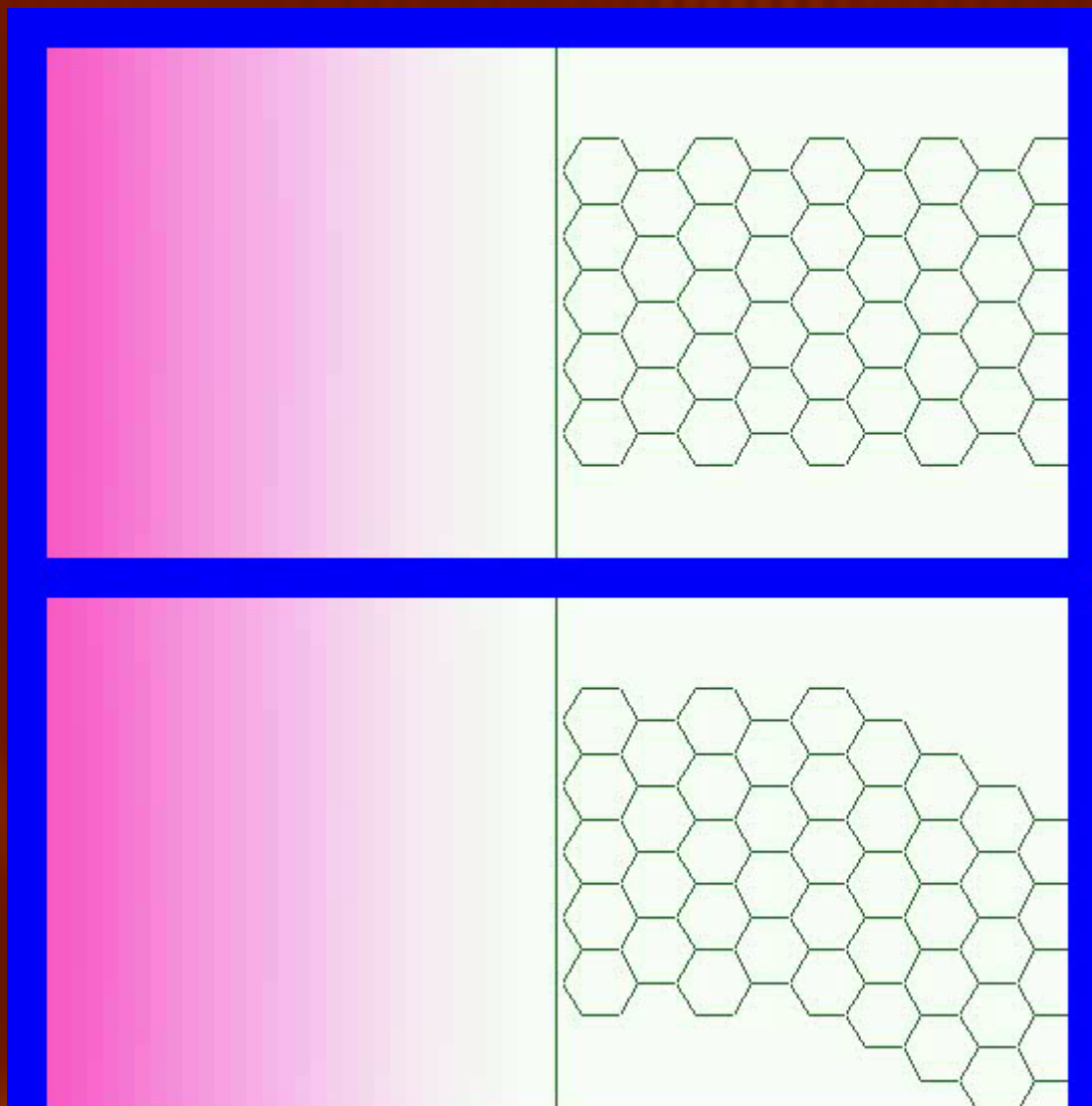
# WPD calculation for a GNR

## II: Time development



G. I. Márk et al, Physica E, EMRS 2007 L-M

# Comparison of WP time development for straight GNR and 30° bent junction

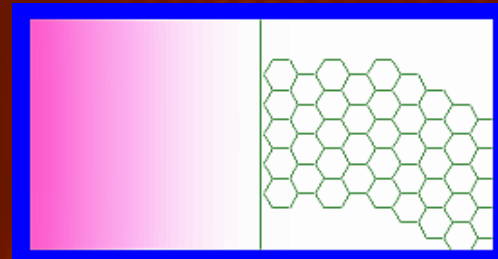
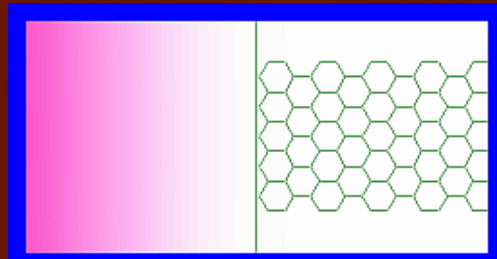


[Click into image to start animation](#)

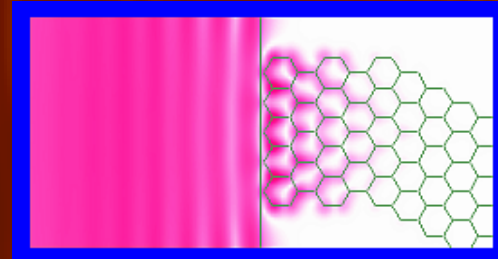
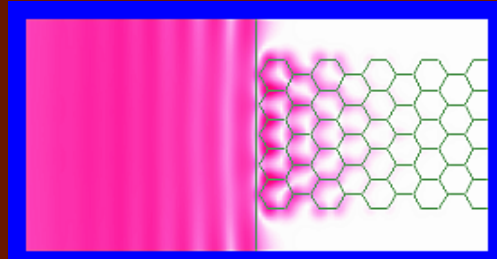
# Comparison of WP time development for straight GNR and 30° bent junction



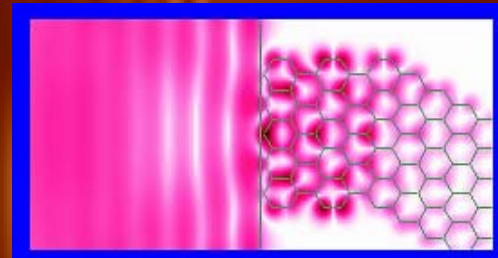
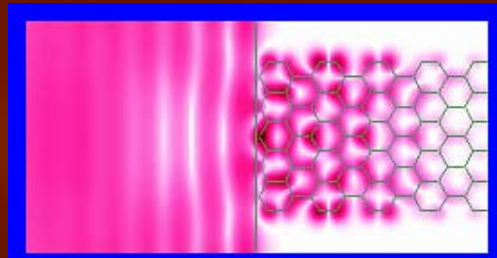
$t = 0.00$  fs



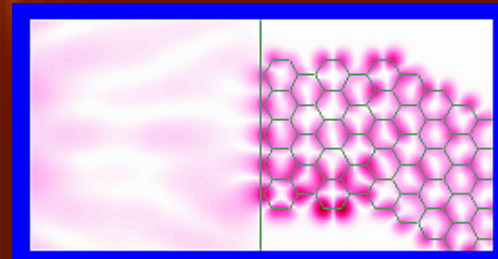
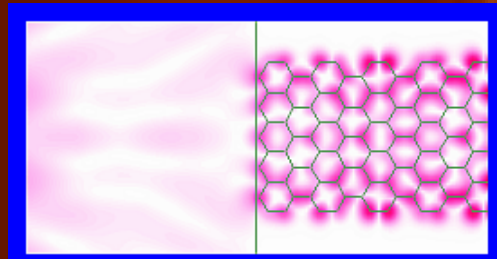
$t = 1.22$  fs



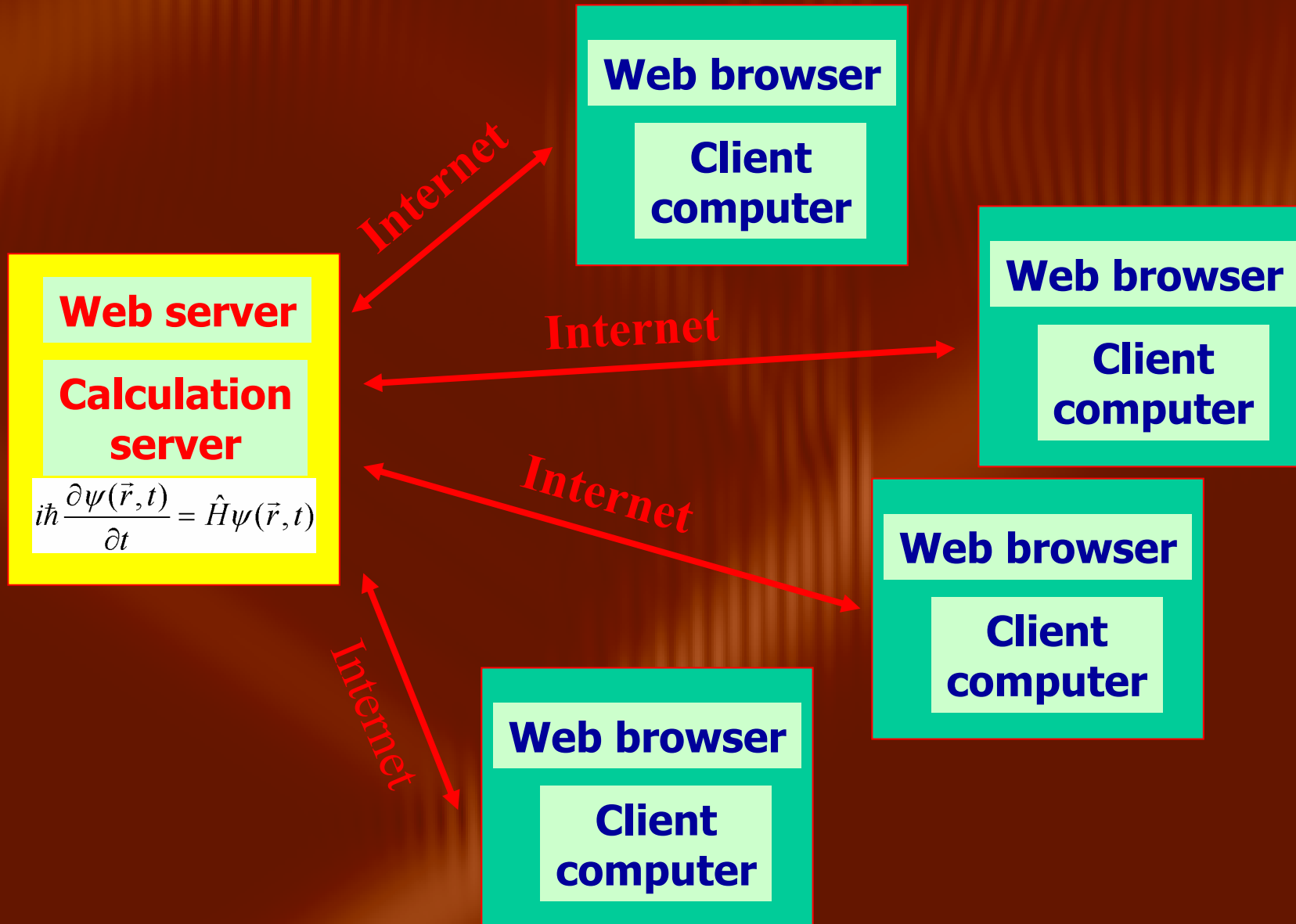
$t = 3.08$  fs



$t = 5.96$  fs



# Web-Schrödinger





# Web-Schrödinger használata

- Potenciál megadása
- Kezdő  $\Psi$  hullámfüggvény megadása
- $\Psi$  időfejlődés kiszámolása (szerver)
- Időfejlődés ábrázolása

# Web-Schrödinger példa



## Web-Schrödinger 2.0

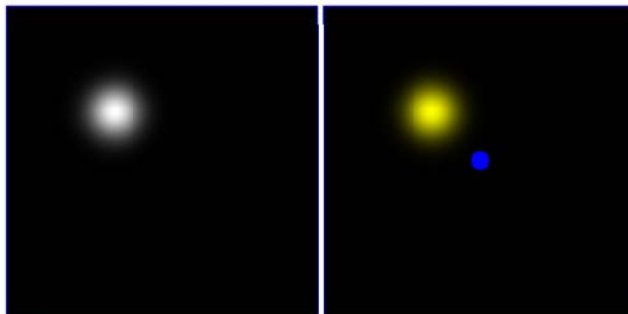
(C)2007-2008 G. I. Márk, Ph. Lambin, L. P. Biró, MTA MFA Budapest, Hungary -- FUNDP Namur, Belgium  
[www.nanotechnology.hu](http://www.nanotechnology.hu)

File	Edit	Time development	Results	Help & more
Mesh	Potential	Initial state	Calculation parameters	

### Mesh parameters

$N_x = 256, N_y = 256, x_0 = -64 \text{ \AA}, y_0 = -64 \text{ \AA}, s_x = 128.0 \text{ \AA}, s_y = 128.0 \text{ \AA}$

### Image of the 2D probability density $\rho(x,y) = |\psi(x,y)|^2$



Grayscale  $\rho$  map

Composite color  $\rho$  and  $V$  map

### Initial state parameters

$x^i$       $y^i$      Center of the Gaussian wave packet [ $\text{\AA}$ ]  
 $a_x$       $a_y$      Width of the wave packet [ $\text{\AA}$ ]  
 $E_{kin}$      angle     Initial kinetic energy [eV] and direction of the  $\mathbf{p}^i$  initial impulse [Deg]  
 $d_{1x}$       $d_{1y}$      Lower left corner of the rectangle with which the Gaussian is convoluted [ $\text{\AA}$ ]  
 $d_{2x}$       $d_{2y}$      Upper right corner of the rectangle with which the Gaussian is convoluted [ $\text{\AA}$ ]  
 $b_x$       $b_y$      Time retardation vector [ $\text{\AA}$ ]

SAVE

# Web-Schrödinger példa



## Web-Schrödinger 2.0

(C)2007-2008 G. I. Márk, Ph. Lambin, L. P. Biró, MTA MFA Budapest, Hungary -- FUNDP Namur, Belgium  
[www.nanotechnology.hu](http://www.nanotechnology.hu)

File

Edit

Time development

Results

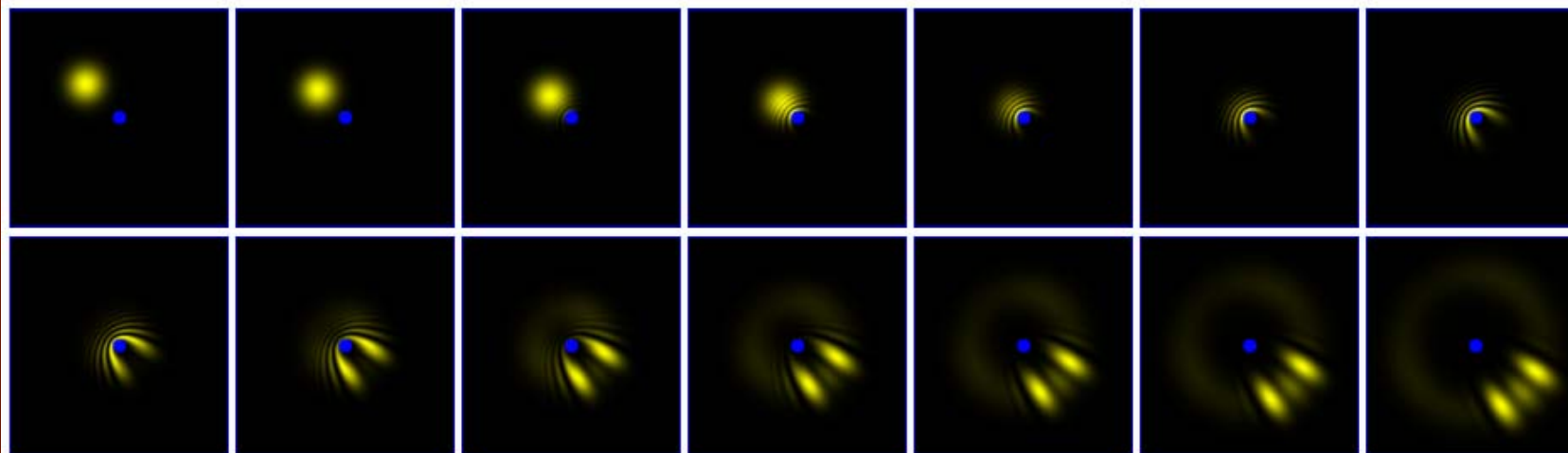
Help & more

Time development calculation READY

See the menu item 'Results'!

The thumbnail images below show the progress of the calculation on the server. Each image is normalised to its individual (time dependent) maximum. New images are added as they are calculated.

Image serial numbers added most recently: 13:14:



## Nanostructures Laboratory

### MTA MFA Budapest

[Click here to receive Email notification about new uploads to these pages](#)

[New Results](#)

[Staff](#)

[Publications](#)

[Research Topics](#)

[Research Equipment](#)

[Cooperations](#)

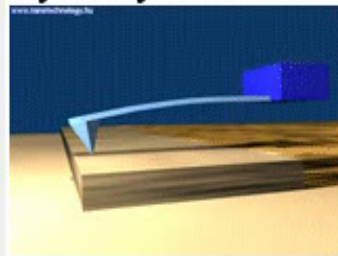
[Media Coverage](#)

[Links](#)

[Magyar oldalak](#)



#### Measuring the thickness of graphene layers by TAFM



An Atomic Force Microscope in its "tapping mode" (TAFM) sweeps the sample surface by an oscillating probe attached to

a cantilever. This animation shows how does the oscillation change at a step edge and also when the material of the surface is changed below the probe tip. We determined what TAFM imaging parameters are necessary to measure the thickness of thin (< 1 nm) FLG (Few Layer Graphene) layers correctly.

[AVI movie \(2 M\) >>](#) [Publications >>](#)

#### Web-Schrödinger 2.0



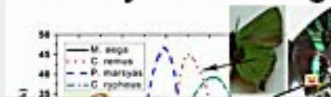
Web-Schrödinger is a program for the interactive solution of the time dependent two dimensional (2D) Schrödinger equation.

The program itself runs on our server and can be used through the Internet with a simple Web browser. Several example configurations are provided with version 2.0. The user can save and load own configurations.

[Details >>](#) [Publications >>](#)

[Click into image to start anima](#)

#### Photonic nanoarchitectures in butterfly scales as gas sensors



From 20 examined butterfly species all

# További tudnivalók az alagutazásról

**Dávid Gyula (DGy) előadása az  
ELTE „Atomoktól a Csillagokig” sorozatában**

**A fóliák és a videofelvétel elérhető itt:**

<http://www.atomcsill.elte.hu/program/kivonat/2009-2010/3>



# További tudnivalók az alagutazásról

Dávid Gyula  
ELTE „Atomcsillag”

A fóliák és a

<http://www.atomcsillag.hu>

KVANTUMKÉMEK  
AZ  
ALAGÚTBAN



Dávid Gyula  
ELTE TTK Atomfizika Tanszék

ATOMCSILLAG

2009.10.22.



**Köszönöm a figyelmet!**