

# Egy hullámcsomag kalandjai az alagútmikroszkópban

**Márk Géza István**

*MTA Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézet*

*Nanotechnológia Főosztály – [www.nanotechnology.hu](http://www.nanotechnology.hu)*

[mark@sunserv.kfki.hu](mailto:mark@sunserv.kfki.hu)

## Bevezetés

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 hozzuk létre nanoszerkezeteket és nanoszerkezetekből álló nanoarchitektúrákat és hogyan tanulmányozzuk ezeket. Ennek a gyors fejlődésnek a motorja elsősorban az elektronikai ipar, az elektronikai eszközök exponenciális ütemben növekvő miniaturizálása. Ha részleteiben meg szeretnénk érteni a nanoelektronikai eszközök működését és ilyen eszközöket szeretnénk tervezni, az elektronok mozgását kell tanulmányoznunk a nanoszerkezetekben. Az elektronok nanoszerkezet béli mozgásának jellemző méretskálája a  $10^{-10}$  m ( $0.1$  nm = 1 ångström), időskálája pedig a  $10^{-15}$  s (1 femtoszekundum) – ezek a skálák igen távol vannak emberi világnk 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 mozgását a nanoszerkezetekben a kvantummechanika törvényei írják le. Ez a jelentős távolság az oka, hogy minden mérés, amelyet a nanovilág tanulmányozása érdekében végzünk, közvetett és nehezen értelmezhető. A nanoszerkezetek ugyanakkor lényegesen bonyolultabb felépítésűek, mint az egyszerű atomok és molekulák, így pontos elméleti leírásuk is nehézségekbe ütközik. Ezért igen hasznos a számítógépes szimuláció a nanoszerkezetek tanulmányozásában. 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 nanoelektronikájában, ugyanis a szén nanocsövek, atomi szerkezetüktől függően, lehetnek félvezetők, vagy vezetők. Laboratóriumi körülmények között sikerült már szén nanocső tranzistorokat, sőt, logikai kapukat is létrehozni. Három kivezetésű 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, elvileg lehetetlen egy ilyen mikroszkóp létrehozni, amivel az atomokat lehet látni. Valóban, évekbe telt, amíg a tudományos közösségnek sikerült megértenie, mi miatt érhető el 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 kimutatták, hogy az STM kép pontos értelmezéséhez igen fontos számítógépes szimulációk alkalmazása.

Az elektron mozgásának részletes tanulmányozására jól használható az ún. hullámcsomag dinamikai módszer (HCSD, 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 un. egyfalú szén nanocső egy 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 grafit síkot hengerré tekernénk [3]. Habár az ideális szén nanocső kizárólag csak szénből áll, fizikai tulajdonságai mégis nagymértékben változhatnak, a grafit sík feltekerésének módjától függően – ahogy részletesebben olvasható Biró László cikkében [2]. Emiatt az erős kapcsolat miatt, amely a nanocső atomi szerkezete és elektronszerkezete között fennáll, 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 (l. 1. ábra). Egy nagyon hegyes tű – legjobb, ha egyetlen atom van a tű csúcsán – igen közel hozunk egy elektromosan vezető minta felületéhez és a minta és a tű közé kicsi (1 Volt nagyságrendű) feszültséget kapcsolunk. Még mielőtt a tű hozzáér a mintához – körülbelül, mikor a távolságuk 1 nm alá csökken – a két elektróda közt kicsi (1 nA nagyságrendű) áram, az un. 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 azonban 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, de 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 – pl. szén nanocsövet – vizsgálunk STM-mel, akkor további hatások is bonyolítják a kép értelmezését. A legfontosabb figyelembe veendő hatás az un. „tű konvolúció” jelensége. Mint a 2. ábrán láthatjuk, ha a mintán olyan finom részletek vannak, amelyek görbületi sugara már összemérhető az STM tű görbületi sugarával – egyfalú 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 hordozó felületnek, hanem a Van der Waals távolságon (kb. 0.34 nm) „lebeg” fölötté (l. 3. ábra). A nanocsövek alagútmikroszkópos leképezésénél tehát nem egy, hanem kettő 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 – hordozó felületre 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 és a cső közötti alagútátmenet nulla dimenziós (pontszerű), a cső és a hordozó közötti alagútátmenet egy dimenziós (vonalszerű). Az MFA Nanoszerkezetek Osztályán, belga kutatókkal együttműködve (Philippe Lambin 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, ennek segítségével részleteiben tanulmányoztuk az elektron áthaladását az STM tűből a nanocsövön keresztül a hordozóba.

## **A hullámcsomag áthaladása az STM tű – szén nanocső – hordozó alagútátmeneten**

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, amikor a részecske nagy valószínűséggel egy adott pont közelében található. A Heisenberg féle határozatlansági összefüggés miatt a HCs véges impulzus szórással rendelkezik, ezért az idő múlásával a HCs szétfolyik, azaz egyre nagyobb térrészre terjed ki. A szétfolyás sebessége annál nagyobb, minél kisebb térrészre volt lokalizálva („beszorítva”) a kezdőállapotban a HCs. Szabad térben, azaz ha semmilyen erő nem hat rá, a HCs mozgása igen egyszerű: a 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 számítógépben (l. 4. ábra): „nekilövének” 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 – különféle fizikai mennyiségeket számíthatunk ki, pl. átmeneti valószínűséget, kvantummechanikai áramsűrűséget, kölcsönhatási időt, stb. Az 5. ábrán egyszerű két dimenziós 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-ot. Ezt a jelenséget kísérletileg megfigyelhetjük például a Rutherford -féle szórás kísérletben – az atommagokba ütköző  $\alpha$  részecskék minden irányban (visszafelé is!) szóródnak. A szórt HCs-ban interferencia mintázatot figyelhetünk meg abban az irányban, amely irányban a bejövő HCs haladt. Ezt az interferenciát a bejövő és a szórt HCs interferenciája okozza.

Az STM modellezése esetén a HCs-ot 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, de ha 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 Volt nagyságrendű előfeszítés, 0.1 nm – 1 nm közé eső távolság a tű és a minta között) a hullámcsomag legnagyobb része visszaverődik és csak kb. 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 Laborunkban a HCsD módszert számos alagútmikroszkópos mérésünk értelmezésére felhasználtuk, alábbiakban ezek közül mutatunk be kettőt, a nanocső tű okozta látszólagos kiszélesedését és a nanocső zárt vége okozta interferenciák vizsgálatát.

### **A tű konvolúció**

Mint korábban már utaltunk rá, az STM mérésekben a nanocsöveket nem kör keresztmetszetűnek

látjuk, hanem lapos ellipszisnek – a cső látszólagos szélessége lényegesen nagyobb, mint a látszólagos magassága. Az alábbiakban ezt a jelenséget elemezzük a HCSD módszer segítségével.

Az alagútmikroszkópos felvétel során a túvel mechanikailag pásztázunk a minta felülete mentén és közben a visszacsatoló hurokkal úgy szabályozzuk a tú 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 tú Z pozícióját, hogy a HCs átmeneti valószínűsége állandó maradjon. A 7. ábrán három, jellegzetes tú pozíciót mutatunk be. A legfelső ábrason a tú a nanocső középvonala fölött áll, a középső ábrán a cső oldala fölött, az alsó ábrason pedig már a tú eltávolodott a nanocsőtől. Mindhárom tú helyzet esetén elvégeztük ugyanazt a szimulációt: a HCs a túból indul és megvizsgáljuk, hogyan halad át a nanocsővön keresztül a hordozó felületbe.

Mikor a tú a nanocső középvonala fölött áll, a HCs először átalagutazik a tú csúcsából a nanocsőbe (1.7 fs), azután körülhúzza a nanocsövet (2.9 fs), végül átalagutazik a csőből a hordozó felületbe (3.9 fs). A cső két oldala mentén haladó hullámcsomag részek interferencia mintázatot alakítanak ki a cső kerülete mentén. Ez az interferencia mintázat, mint azt részletesebb elemzéssel kimutattuk, jó közelítéssel megfelel a nanocső kvantummechanikai sajátállapotai szuperpozíciójának.

A középső ábrason megfigyelhetjük, hogy ha a tút kissé elmozdítjuk a nanocső középvonala fölül (az ábrán 0.8 nm-rel), akkor a visszacsatoló huroknak a tút kicsit lejjebb kell elmozdítania ahhoz, hogy állandó legyen az átmeneti valószínűség. Ebben a helyzetben a HCs már nem a tú csúcspontján fog kilépni, hanem a tú oldalán – itt halad át a nanocsőbe. Kvalitatíven ezt egyszerűen úgy magyarázhatjuk, hogy az alagutazás mindig a két elektróda legközelebbi pontjai között történik.

A legalsó ábrason a tú vízszintes eltolása már 2 nm. Ilyenkor a tú már annyira távol van a nanocsőtől, hogy a visszacsatoló hurok addig mozgatja lefelé a tút, amíg végül a tú csúcspontja olyan közel kerül magához a hordozó felülethez, hogy a tú és a hordozó között jön létre alagutazás. Láthatjuk az ábrán, hogy ebben a helyzetben ismét a tú csúcspontján lép ki a HCs és alagutazik át a hordozóba. Mivel a hordozó felületbe való közvetlen alagutazásnál az elektronnak csak egy alagútátmeneten kell áthaladnia, ez a folyamat lényegesen gyorsabban lezajlik, mint a nanocsővön keresztüli alagutazás, ahol a HCs-nak két alagútközön is át kell haladnia és ezért a nanocsővön kvázistacionárius állapot jön létre.

A most röviden bemutatott HCSD eredmények alapján a 8. ábrán szemléltetett egyszerű geometriai módszerrel tudjuk modellezni az STM tú mozgását három dimenziós objektumok leképezése esetén: a tú olyan vonal mentén mozog a minta felülete fölött, hogy a tú és a minta pillanatnyi 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 tú „z” pozícióját anélkül, hogy ehhez a minta felületén tényleges topográfiai „hegy”, vagy „völgy” tartozna. Tehát a mért vonalmetszetnek a geometriai közelítéstől való eltéréseiből az elektronszerkezet változásaira következtethetünk.

## A félig zárt nanocső

A kísérletekben gyakran látunk egyik, vagy mindkét végükön zárt nanocsöveket, illetve ilyent mesterségesen is létre lehet hozni, ha az STM túre adott pillanatnyi áramimpulzussal elvágjuk a nanocsövet. Egyik STM mérésünk során találtuk azt a különleges nanocső elrendezést, amelynek a modelljét a 9. ábrán bemutatjuk. Ebben a kísérletben a hordozó felület grafit volt, amely réteges szerkezetű anyag (a rétegek távolsága 0.335 nm) és a felületén gyakran előfordulnak lépcsők, amelyek viszonylag nagy, atomi sima teraszokat választanak el. A nanocsöveket tartalmazó szuszpenziót a grafit felületre csöppentettük, az oldószer elpárolgása után a hordozó felületen visszamaradnak a nanocsövek. Ezek közül egy, a végén zárt cső kicsit kilógott egy grafit lépcső fölé

– ezt a helyzetet vizsgáltuk meg a HCSD szimulációval. Jelen cikkünkbe azért választottuk illusztrációnak ezt a meglehetősen bonyolult rendszert, mert ezen kiválóan tudjuk érzékelteni azokat a dinamikai jelenségeket, amelyek a HCs nanocsövön keresztüli alagutazása során fellépnek és egyben jól be tudjuk mutatni a HCSD módszer teljesítőképességét a kísérleti eredmények értelmezésében.

A 9. ábrán a túból induló HCs egy állandó valószínűsűrsűrűségű szintfelületének időfejlődését láthatjuk. Az STM tő a szimulációban a csőnek a lépcső fölé kilógó vége fölött áll. A túból induló HCs először átalagutazik a nanocsőbe, körülhúzza azt és elkezd szétterjedni a cső tengelye mentén mindkét irányban, miközben a cső kerülete mentén létrejönnek a már a 7. ábrán is bemutatott interferencia mintázatok. Mivel a cső kilóg a lépcső fölé, ez alatt a csődarab alatt olyan messze van a hordozó felület, hogy oda a HCs nem tud átalagutazni nem elhanyagolható valószínűséggel, így a teljes HCs marad – egyelőre – a csőben. Azonban a HCs-nak 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 onnét visszaverődő elektronhullámok interferencia mintázatot hoznak létre a cső tengelye mentén. A HCs végül csak akkor tud átalagutazni a hordozó felületbe, mikor eléri a lépcső élét. A HCSD módszer, egybehangzóan más számításokkal és mérésekkel, azt mutatja, hogy az egyfalú szén nanocső ballisztikus vezető – akár több  $\mu\text{m}$  hosszúságig is.

Az alagútmikroszkópos mérések tanúsága szerint nem csak a zárt vég, hanem minden más hibahely (olyan hely, ahol megváltozik a nanocső tökéletes szimmetriája) interferencia mintázat megjelenését okozza az STM képen, így például az ionbesugárással létrehozott hibahelyek is. A 10. ábrán  $\text{Ar}^+$  ionokkal besugárzott szén nanocső atomi felbontású STM képét látjuk (Osváth Zoltán munkája), amelyen jól felismerhető a hibahelyen történő elektronhullám szóródás által létrehozott szuperstruktúra. A hibahelytől távol a szuperstruktúra lecseng és ismét a hibamentes nanocsőre jellemző periodicitás látható.

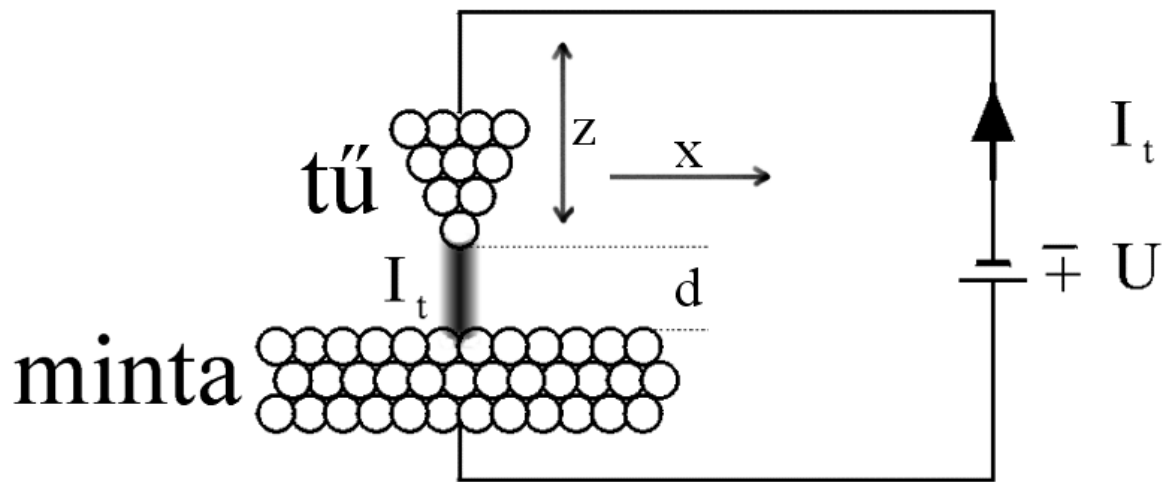
## Összefoglalás

Mint a fenti példákkal bemutattuk, a hullámcsomag dinamikai módszer kiváló eszköz az elektronok nanoszerkezetek béli dinamikájának részletes tanulmányozására. Tudományos értékén kívül jól felhasználható ez a módszer az oktatásban és a szemléltetésben. A mozgó hullámcsomag segítségével nagyon szemléletesen lehet bemutatni az elektron mozgás – sok esetben meglehetősen bonyolult – dinamikáját. A számítástechnika fejlődése napjainkra lehetővé teszi, hogy ilyen szimulációkat egy személyi számítógépen is elvégezzünk. A módszer részletes ismertetése, alkalmazási példák és hivatkozások a [www.nanotechnology.hu](http://www.nanotechnology.hu) honlapunkon találhatóak.

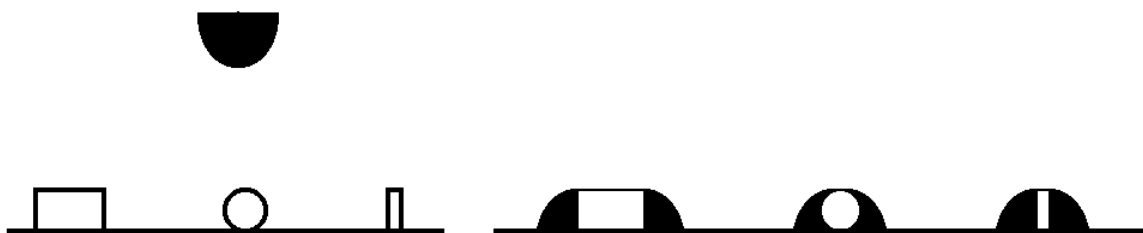
## Irodalomjegyzék

1. Gyulai József: Az anyagtudomány apoteózisa, Fizikai Szemle 1996/8, 264
2. Bíró László Péter: Nanovilág: a szén nanocsőtől a kék lepkeszárnyig, Fizikai Szemle 2003/11, 385
3. Kürti Jenő: A varázslatos szénatom, Fizikai Szemle 1997/9, 276
4. Balázs Erzsébet: A pásztázó alagútmikroszkóp és társai, Természet Világa 1993/1
5. <http://nobelprize.org/physics/laureates/1986/>

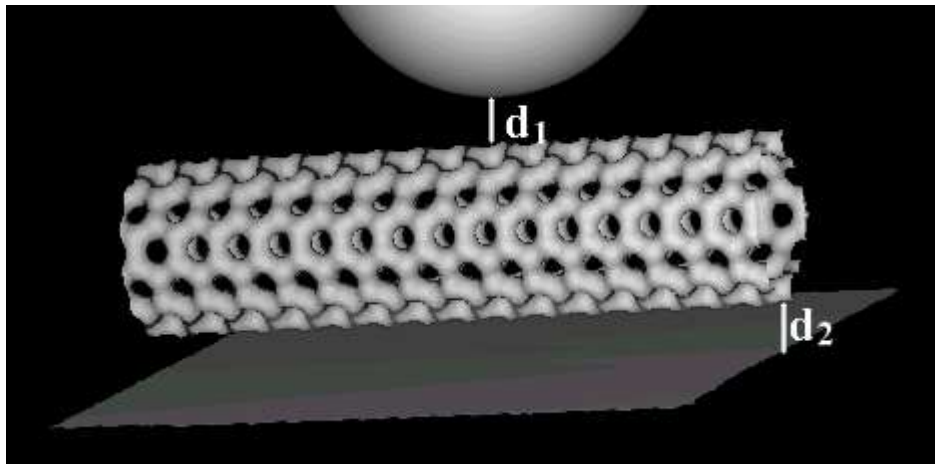




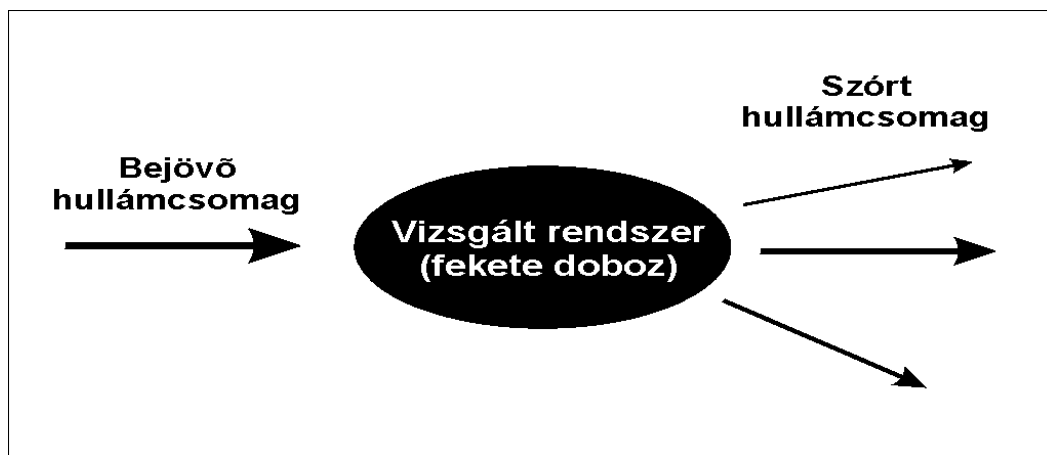
1. ábra. A pásztázó alagútmikroszkóp működési elve. A kis körök az atomokat szimbolizálják, amelyekből a minta és a tű áll. A minta és a tű közé  $U \sim 1$  V feszültséget kapcsolva a  $d \sim 0.5$  nm nagyságú alagútátmeneten át  $I_t \sim 1$  nA áram folyik át. A tű csúcsa és a minta közötti sáv az 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” feliratú 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.



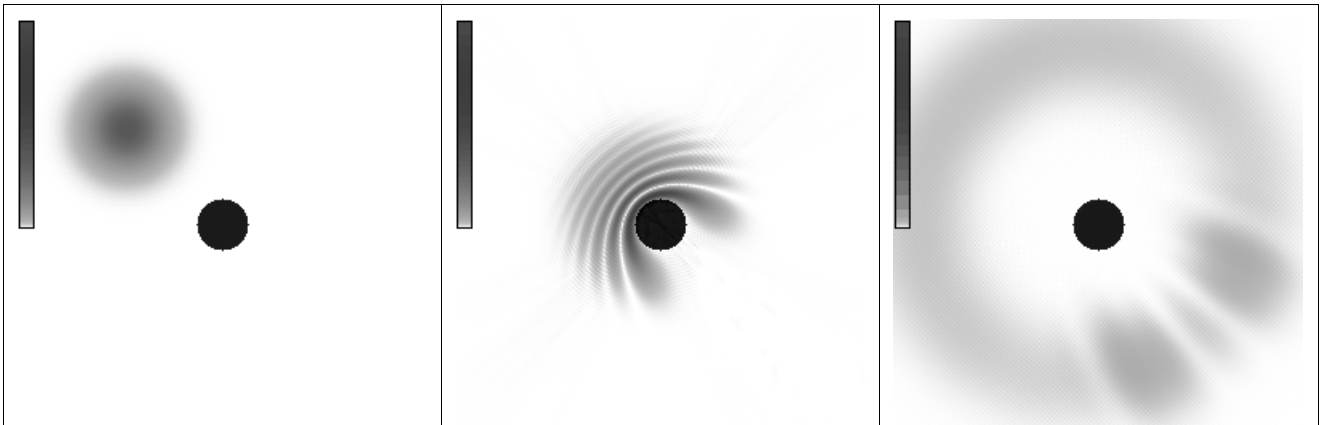
2. ábra. Az STM tű véges görbületi sugara okozta látszólagos kiszélesedés. A bal oldali ábrán három jellegzetes domborzati alakzatot láthatunk, ezeket képezzük le az ábra tetején fekete félkörrel jelölt tűvel. A jobb oldali ábra azt mutatja, milyen vonal mentén mozog a tű.



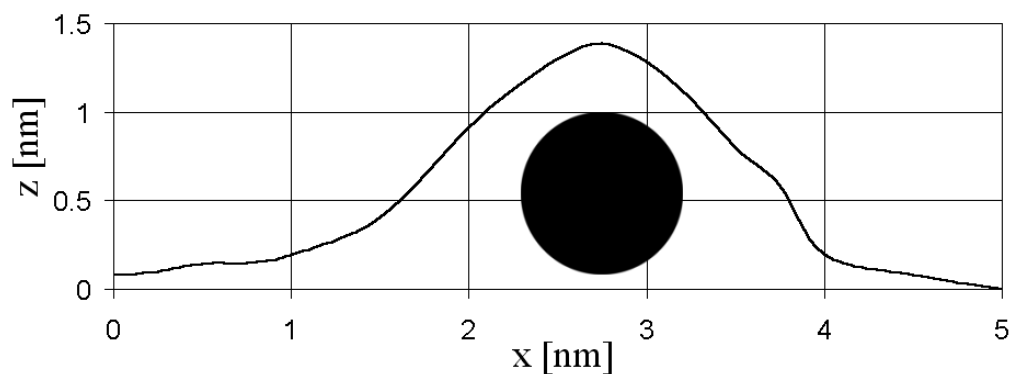
3. ábra. Szén nanocső STM leképezése – a rendszer geometriája. Az STM t<sub>1</sub> távolságra van a nanocső középvonala fölött. A szén nanocső d<sub>2</sub> (=0.335 nm) távolságra „lebeg” a hordozó felület fölött a Van der Waals potenciálon.



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.

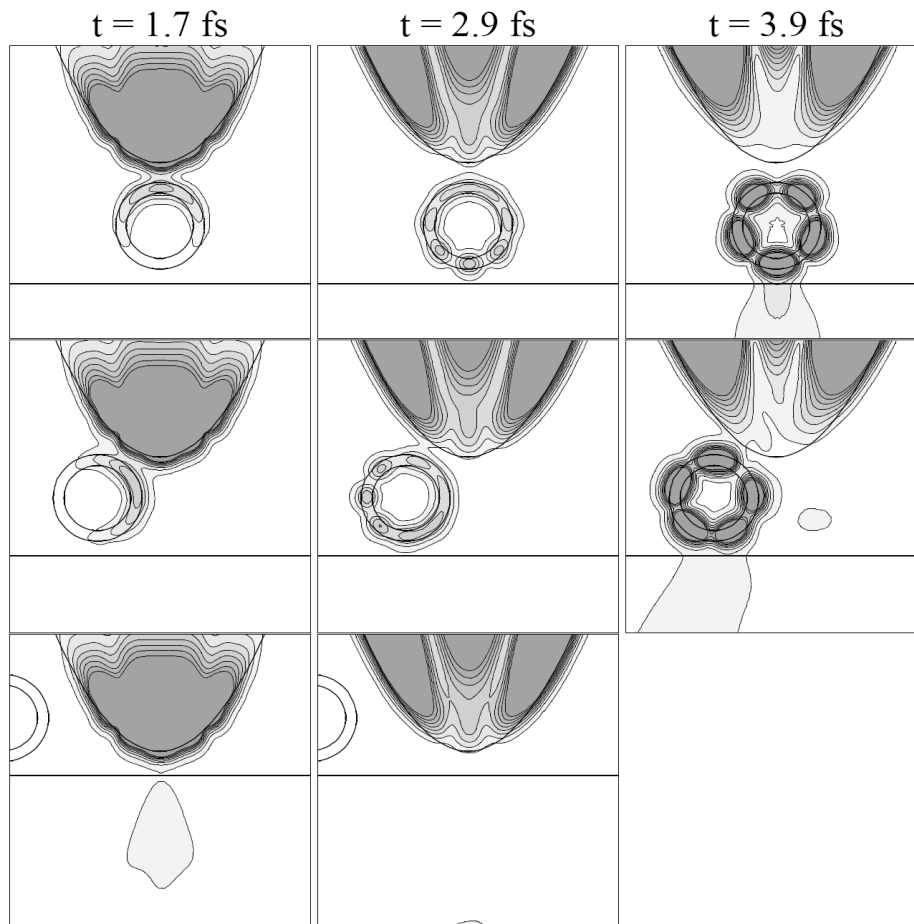


5. ábra. Két dimenziós Gauss hullámcsomag szórása körszimmetrikus „merev fal” potenciálon. A baloldali ábra a kezdőállapot, a középső ábra a kölcsönhatást mutatja, a jobboldali ábra a végállapot. A középső kör a potenciál helyét mutatja. A hullámcsomag megtalálási valószínűségét szürkeskálán ábrázoltuk: a fehér jelenti a nulla valószínűségi sűrűséget, a sötétszürke a maximális valószínűségi sűrűséget. A szürkeskála nemlineáris (l. 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 valószínűségi sűrűség csökken.

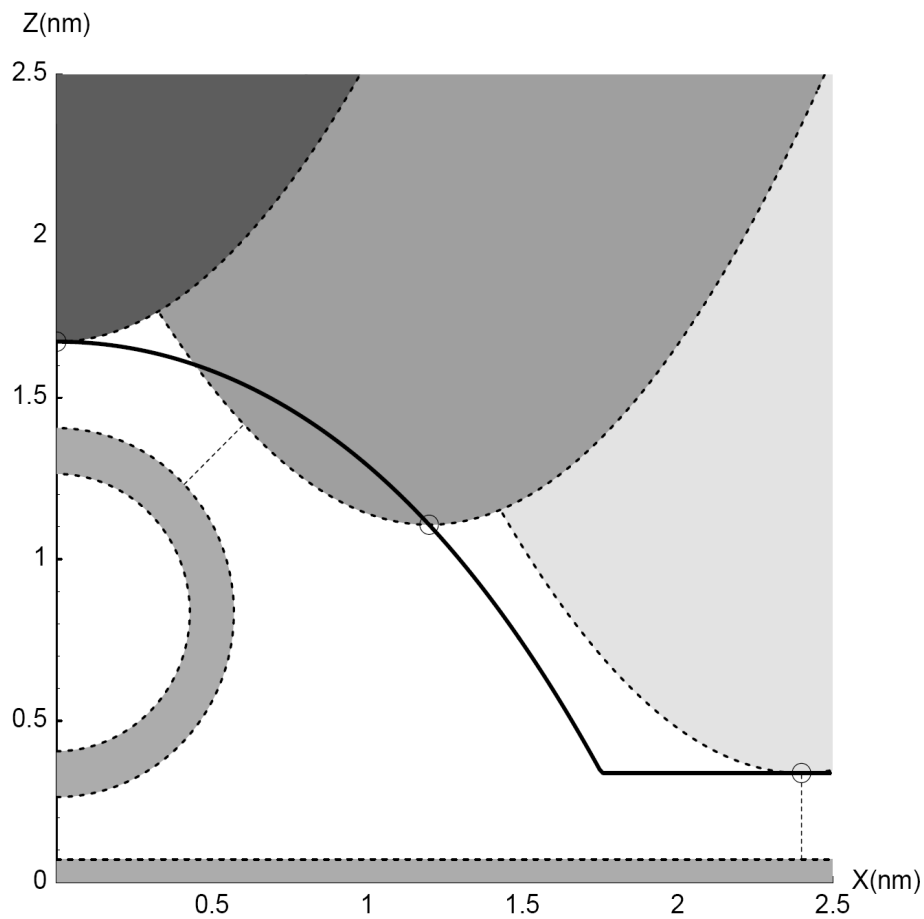


6. ábra. Egyfalú szén nanocső látszólagos keresztmetszete a pásztázó alagútmikroszkópban. A vonal az STM tú pályáját ábrázolja, midőn állandó áramú üzemmódban áthalad a nanocső fölött. A vonalmetszet aszimmetriáját a tú csúcsának aszimmetrikus alakja okozza. A fekete korong a nanocső körülbelüli helyzetét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

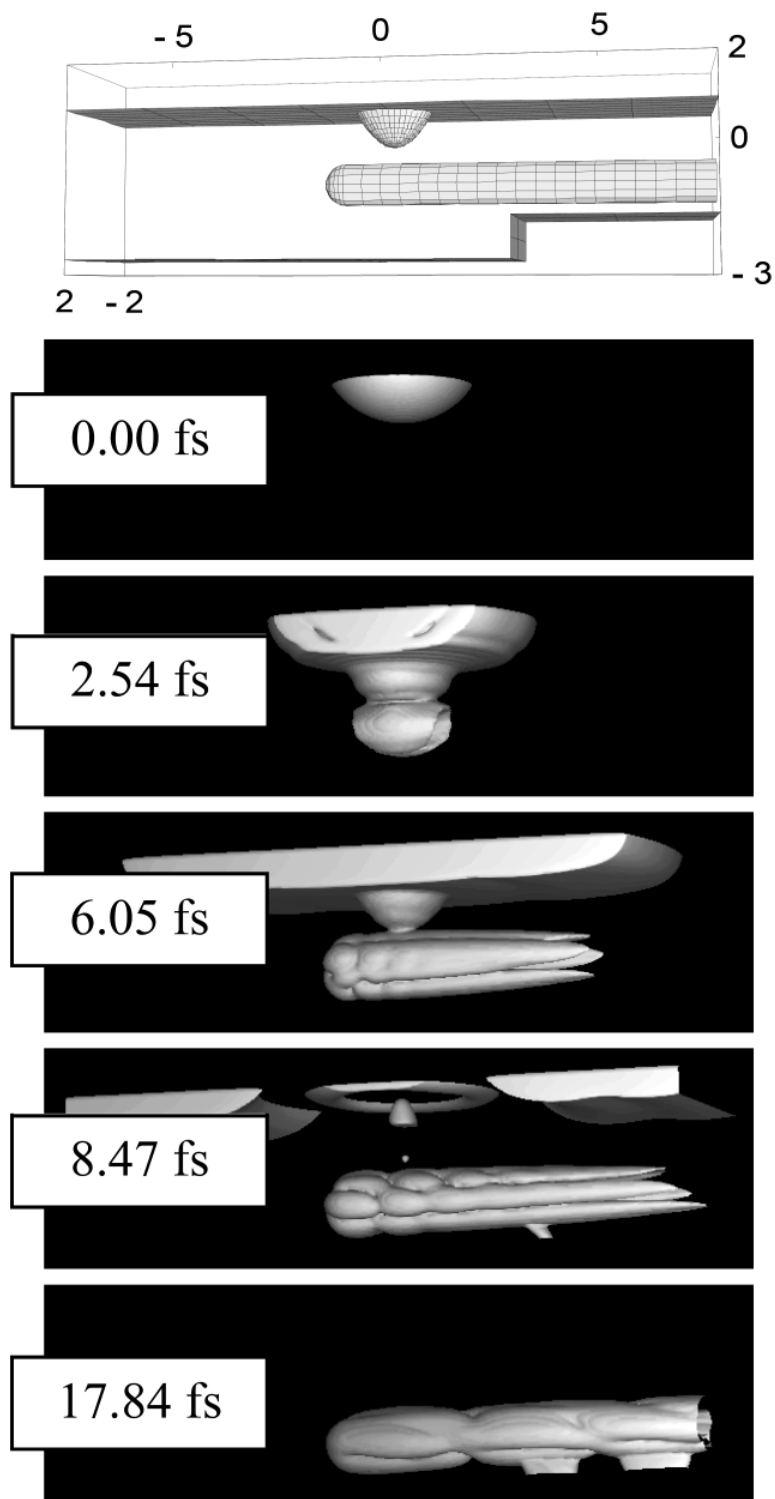




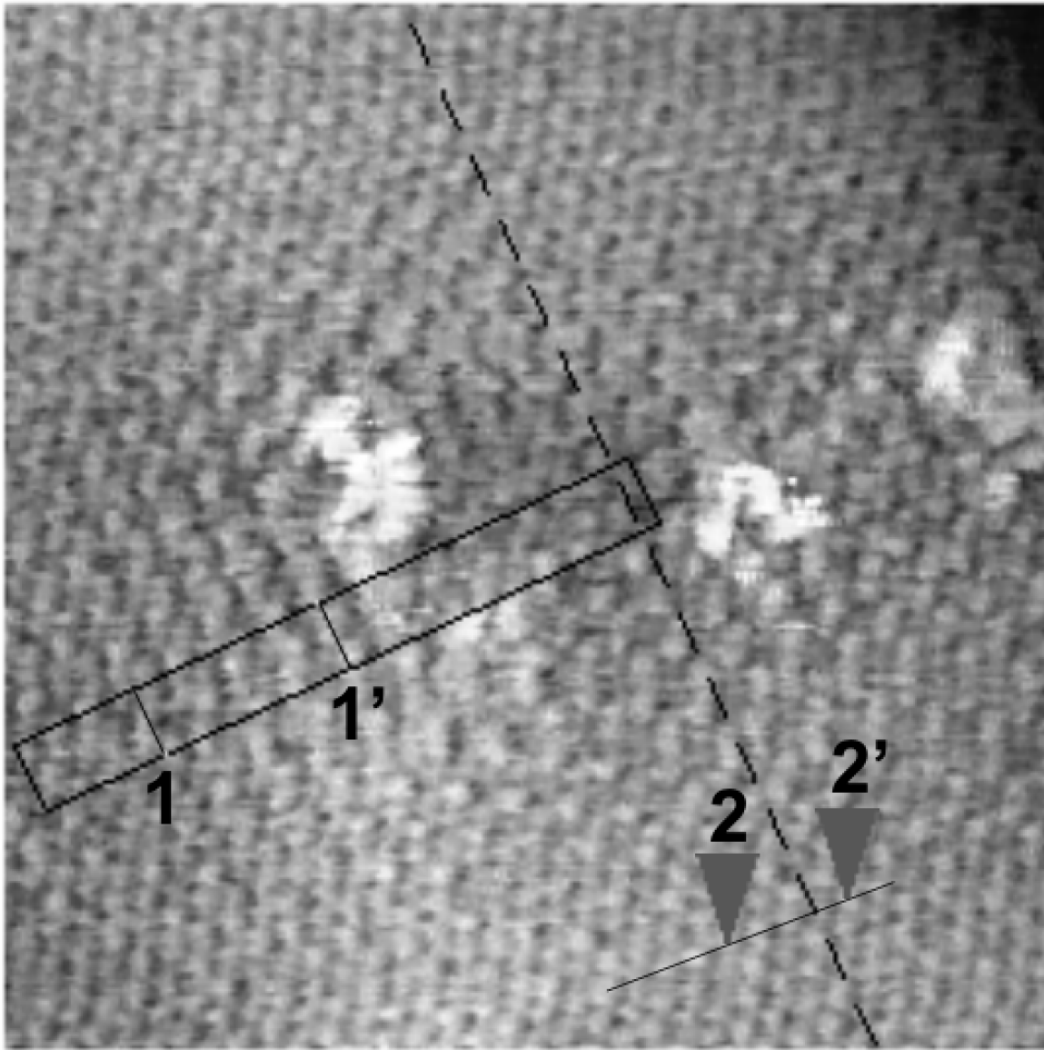
7. ábra. A hullámcsoport áthaladása az STM túból a nanocsövön keresztül a hordozó felületbe három különböző  $t$  pozíció esetére. Az időfejlődést a megtalálási valószínűségi sűrűség árnyalt szintvonalas képével ábrázoljuk (a csőre merőleges keresztmetszetben). A fehér jelenti a nulla, a sötétszürke a maximális megtalálási valószínűségi sűrűséget, mindegyik részábrán a tényleges maximumra normálva. A szintvonalakat négyzetgyökös skálán ábrázoltuk. A vastag vonalak a  $t$ , 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 tű helyzetet mutatunk be, különböző szürkeárnyalatokkal jelölve. Mindegyik tű helyzetben szaggatott vonallal jelöltük meg a nanocső és a tű legközelebbi pontjait összekötő szakaszt.



9. ábra. Hullámcsomag időfejlődése, miközben az STM túból a grafit lépcső fölé kilógó nanocsövön keresztül a hordozó felületbe alagutazik. A felső kép mutatja a rendszer geometriáját és az ábrázolási dobozt, a méretek nanométerben vannak megadva. A nanocső átmérője 1 nm. Az időfázis képeken egy állandó valószínűségegsűrűségű 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 grafit rács periodicitását a 2 – 2' vonal.