

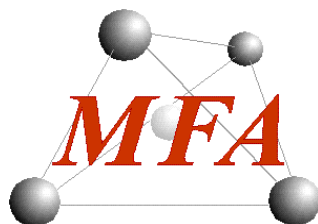


# Lehet-e tökéletes nanotechnológiai eszközöket készíteni tökéletlen grafénból?

Márk Géza, Vancsó Péter, Nemes-Incze Péter, Tapasztó Levente, Dobrik Gergely,  
Osváth Zoltán, Philippe Lamin, Chanyong Hwang, Biró László Péter

**MTA TTK Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézet**  
**Korea-Hungary Joint Laboratory for Nanosciences**

Magyar Fizikus Vándorgyűlés, 2013. augusztus 21-24, Debrecen



[www.nanotechnology.hu](http://www.nanotechnology.hu)



# Vázlat

- **Az MTA TTK MFA  
(Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézet)  
Nanoszerkezetek Osztálya**
- **Grafén kutatás – irány a grafén nanoelektronika!**
  - Hogyan befolyásolják a pont- és vonalhibák a grafén elektronszerkezetét és transzport tulajdonságait?
  - A grafén nanoskálájú megmunkálása



# MFA

## Nanoszerkezetek Osztály

### Kutatók (PhD)

- Horváth Enikő
- Horváth Zsolt Endre
- Kertész Krisztián
- Koós Antal Adolf
- Márk Géza István
- Nemes-Incze Péter
- Osváth Zoltán
- Tapasztó Levente
- Vértesy Zofia



Osztályvezető:  
Prof. Biró László Péter, DSc

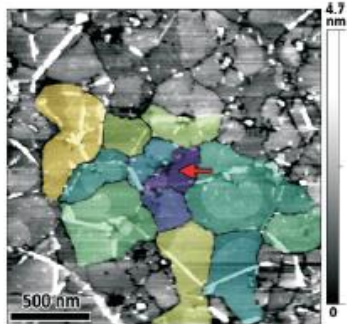
### Ph.D. hallhatók / diplomamunkások

- Dobrik Gergely
- Neumann Péter Lajos
- Pataki Bernadeth
- Tamáska István
- Vancsó Péter
- Magda Gábor
- Obreczán Vince (diplomamunkás)
- Piszter Gábor (diplomamunkás)

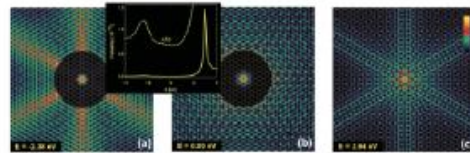
**Összesen 18 (ebből 4 távol)**



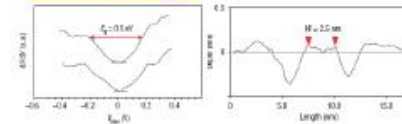
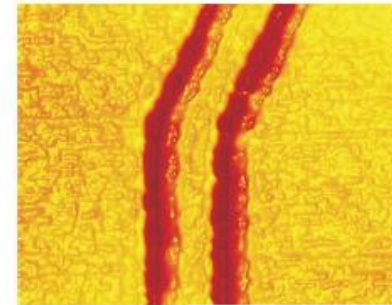
# Nanoszerkezetek Osztály – kutatási témák



**Revealing the grain structure of polycrystalline graphene**  
P. Nemes-Incze et al., *Appl. Phys. Lett.* (2011) 99, 023104



**Anisotropic charge spreading in graphene**  
G. Márk, et al. *Phys. Rev. B* (2012) 85, 125443

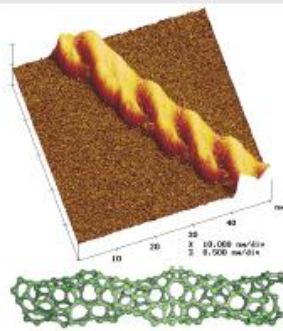


**Tailor made graphene nanoribbons**  
L. Tapasztó, et al. *Nature Nanotechnology* (2008) 3, 397

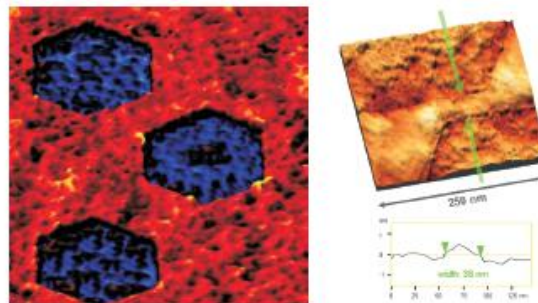


**Nanostructures Laboratory**

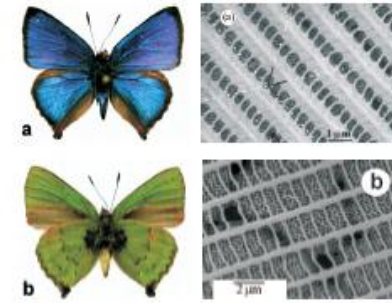
www.nanotechnology.hu



**Special carbon nanostructures**  
L.P. Biró, et al., *Phys. Rev. B* (2002) 66, 165405



**Crystallographically selective patterning of graphene**  
P. Nemes-Incze, et al. *Nano Res.* (2010) 3, 110-116



**Photonic single- and polycrystal structures on butterfly wings**  
K. Kertész, et al., *Phys. Rev. E* (2006) 74, 021922-1

The publications can be downloaded from our homepage at: [www.nanotechnology.hu](http://www.nanotechnology.hu)



# Honlap

## Nanostructures Departement MTA TTK MFA Budapest



Click here to receive EMail notification about new uploads to these pages

[New Results](#)

[Staff](#)

[Publications](#)

[Research Topics](#)

[Research Equipment](#)

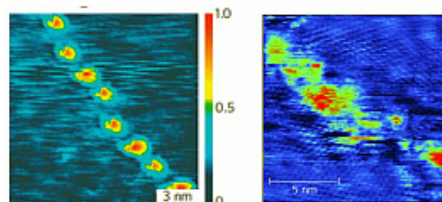
[Cooperations](#)

[Media Coverage](#)

[Links](#)

[Magyar oldalak](#)

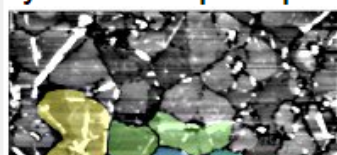
### Electronic states of disordered grain boundaries in graphene



This pair of Scanning Tunneling Microscope (STM) images shows an ordered and a disordered grain boundary (GB) in graphene. (Ordered: J. Cervenka et al, disordered: our measurement). Such disordered GBs are often seen in graphene samples prepared by CVD, hence we studied their properties by experimental and theoretical methods. This is important for nanoelectronic applications of graphene.

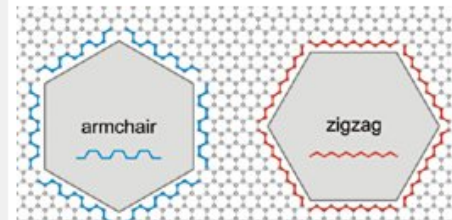
[Publications >>](#)

### Grain boundaries in graphene grown by chemical vapor deposition



In this article written by L. P. Biró

### Selective etching of armchair edges in graphite



Due to its high electron mobility and long coherence length, graphene is a promising material for next generation electronic devices. Patterning graphene with well controlled crystallographic orientation and atomically precise edges is very important for such applications. [Formerly](#), we developed a method for producing graphene edges with zigzag orientation, and our new procedure makes it now possible to etch edges with armchair orientation.

[Publications >>](#)

### Web-Schrödinger 3.0



Web-Schrödinger is a program for the interactive solution of the time dependent and stationary



# 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](#)

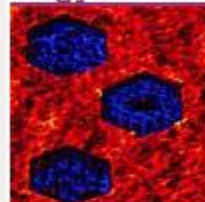
### [Cooperations](#)

### [Media Coverage](#)

### [Magyar oldalak](#)



### Magyar áttörések a grafénkutatásban



Az [MTA honlapján](#) rövid [hírben](#) írunk Osztályunknak a grafén kutatás terén elért új eredményeiről.

Nemes-Incze Péter munkájának köszönhetően

SiO<sub>2</sub> felületre helyezett egyetlen atom vastag grafén réteget tudunk kristálytani irányok szerint nanométeres pontossággal megmunkálni.

[Részletek>>](#)

### 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.buncean.hu](#) honlapon nézhetünk meg

### Kutatók a neten

*Kutatók a Neten*



2010. szeptember 24-én, a [Kutatók Éjszakája](#) keretében kerül sor az [1. Kutatói Blog és Weboldal találkozó](#)ra, amelyen a [www.nanotechnology.hu](#)

honlapunk is bemutatkozik. Minden érdeklődőt [szeretettel látunk!](#)

### A magyar nanotechnológiai kutatás jelene (film)



A [DunaTV Csodafa](#) c. műsorának 2010. március 3-i adása a magyar nanotechnológiai kutatás néhány élvonalbeli területét mutatta be.

Láthatjuk a műsorban, hogyan viszik tovább a "nagy öregek" munkáját a fiatalok. Kattints [ide](#) a [DivX](#) formátumú film letöltéséhez!

(607M, 41:23 perc) *Ez a videó csak oktatási célra használható fel, a forrás (Duna TV és MFA) megjelölésével!*

### A magyar nanotechnológiai kutatás kezdetei (film)



[Click into image to start animation](#)

# Főbb kísérleti eszközök

## Pásztázószondás mikroszkópok

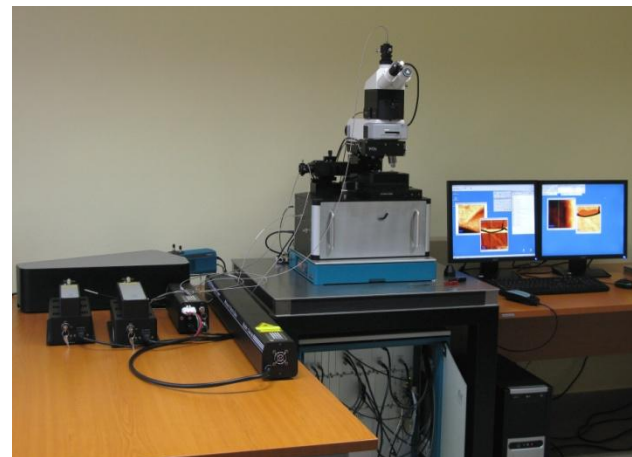
Bruker – Multimod 8 Nanoscope (STM/AFM)

Veeco – Multimod 3A Nanoscope (STM/AFM)



WiTec – Confocal Raman Microscope (Alpha300 RSA+)

LEO 1540 XB FESEM / FIB Nanomachining and Observation System



Bruker AXS D8 Discover X-Ray Diffractometer



# Modellezési technikák

## Elektonszerkezet és transzport számolások

Tight-Binding módszer

Sűrűségfunkcionál módszer (DFT) – VASP  
(szuperszámítógép Koreában)



Hullámcsomag dinamika (WPD)



**Web-Schrödinger 3.0**

(C)2007-2011 G. I. Márk, Ph. Lambin, L. P. Biró, MTA MFA Budapest, Hungary -- FUNDP Namur, Belgium  
[www.nanotechnology.hu](http://www.nanotechnology.hu)



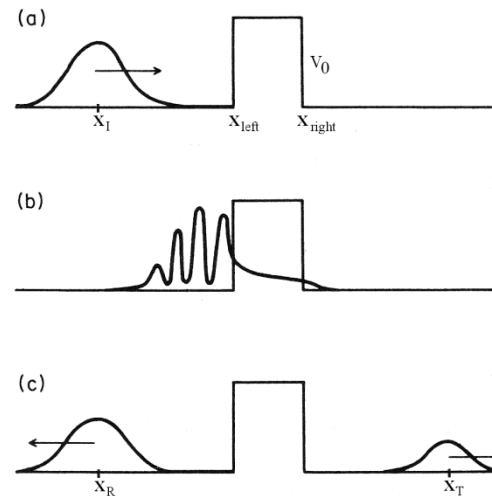
# Hullámcsomag dinamika (WPD)

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

$$\psi(\vec{r}, t) = \hat{U}(t, t_0) \psi_0(\vec{r}, t_0)$$

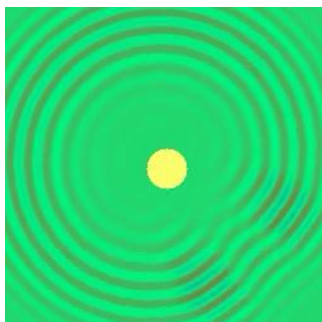
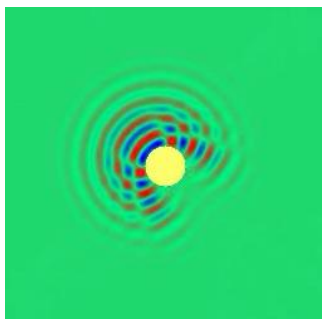
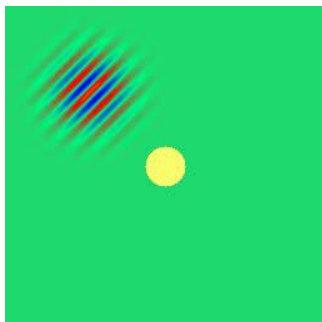
$$e^{\hat{A} + \hat{B}} \cong e^{\hat{A}/2} e^{\hat{B}} e^{\hat{A}/2}$$

1D

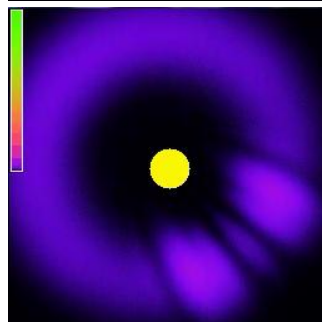
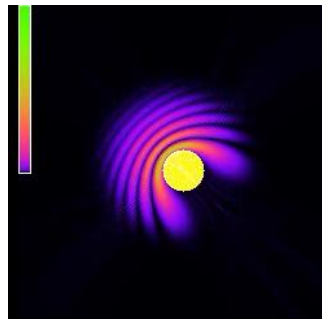
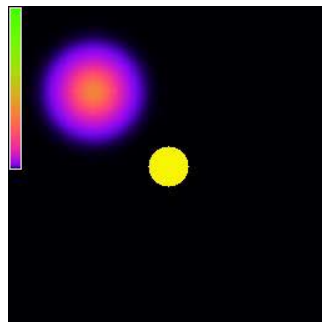


# Hullámcsomag dinamika (WPD) – két dimenzió

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



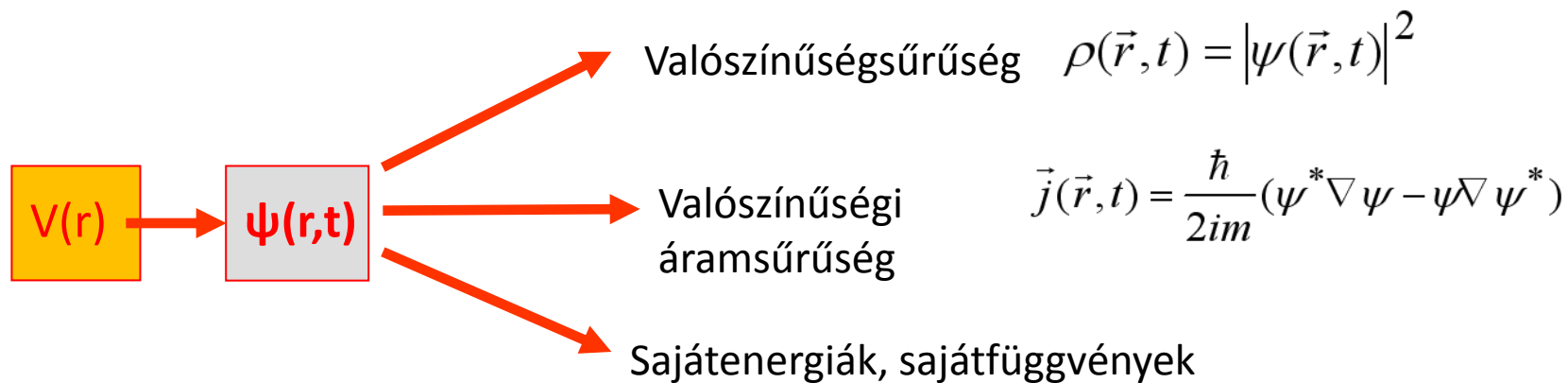
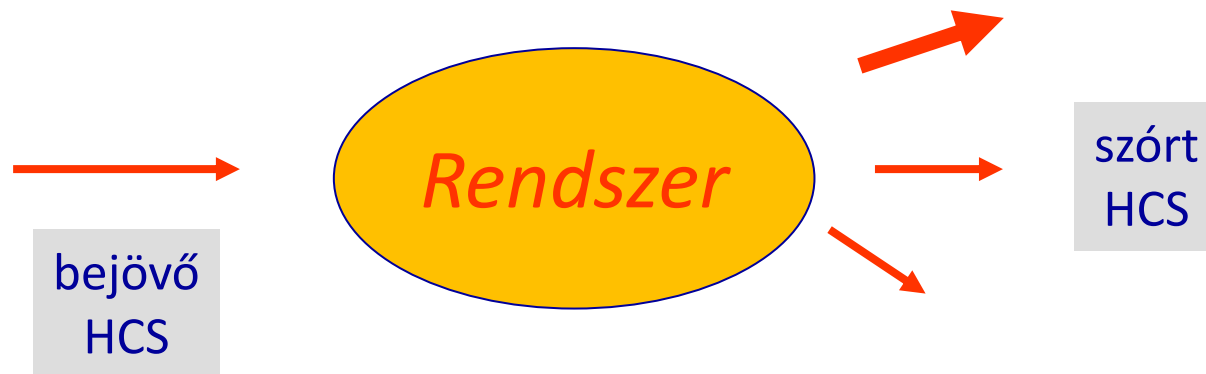
$$\rho(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2$$



idő

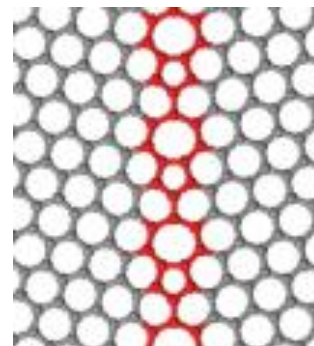
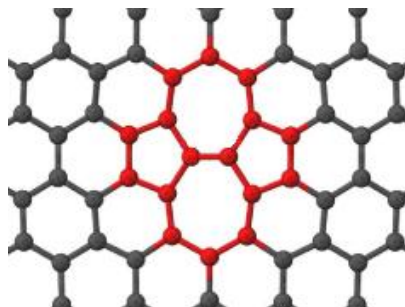


# Hullámcsomag dinamika (WPD)

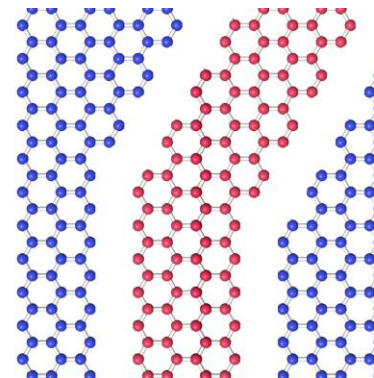
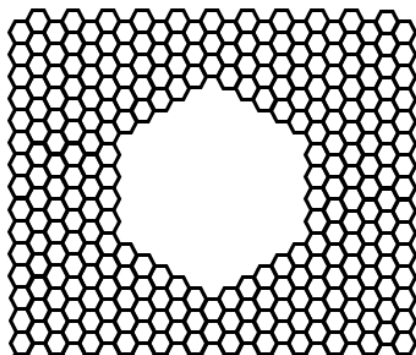


# Grafén

- Hogyan módosítják a pont- és vonalhibák a grafén elektronszerkezetét?



- A grafén megmunkálása nanoskálán

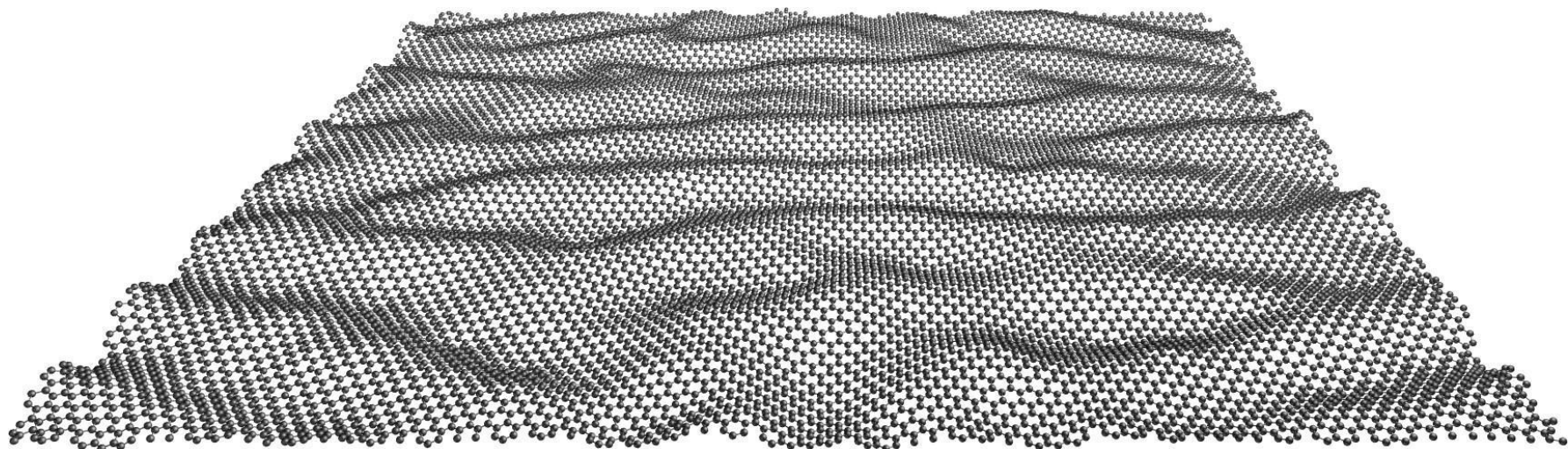


# A grafén

A grafén: szénatomok hatszöges rácsából álló, 2 dimenziós kristály.  
A világ legvékonyabb anyaga, egyetlen atom vastag.

Tulajdonságai:

jó elektromos vezető, jó hővezető, nagy az elektronok koherencia hossza,  
nulla tiltott sávú félvezető, különleges az elektronszerkezete, kimagasló  
mechanikai tulajdonságok, stb.



# Grafén-történelem

**K. S. Novoselov, A. K. Geim, et al.**  
**Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films**  
*Science* **22,306,666 –669(2004)**



Nobel-díj 2010



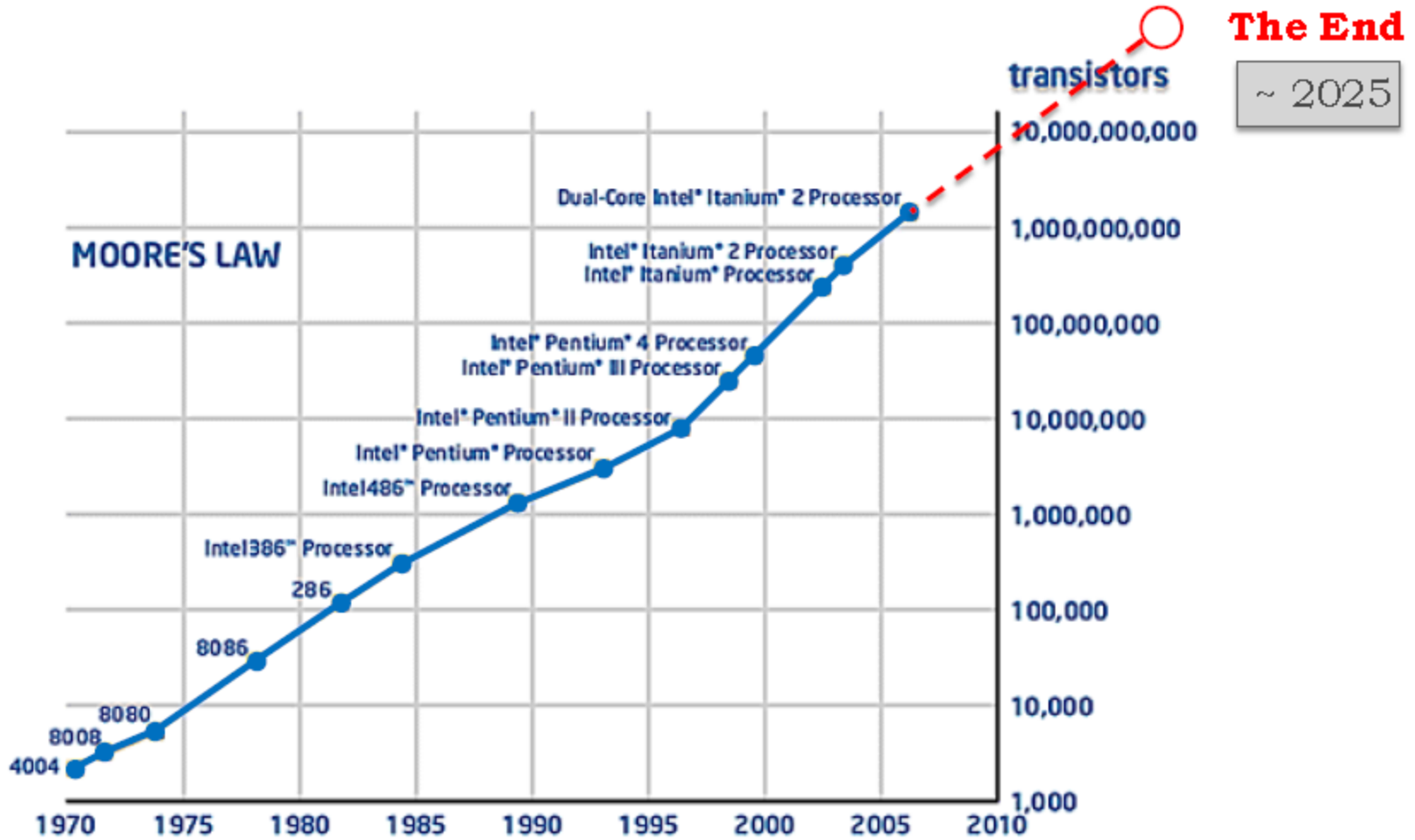
*"for groundbreaking experiments  
regarding the two-dimensional  
material graphene"*



# Alkalmazások



# Moore törvény



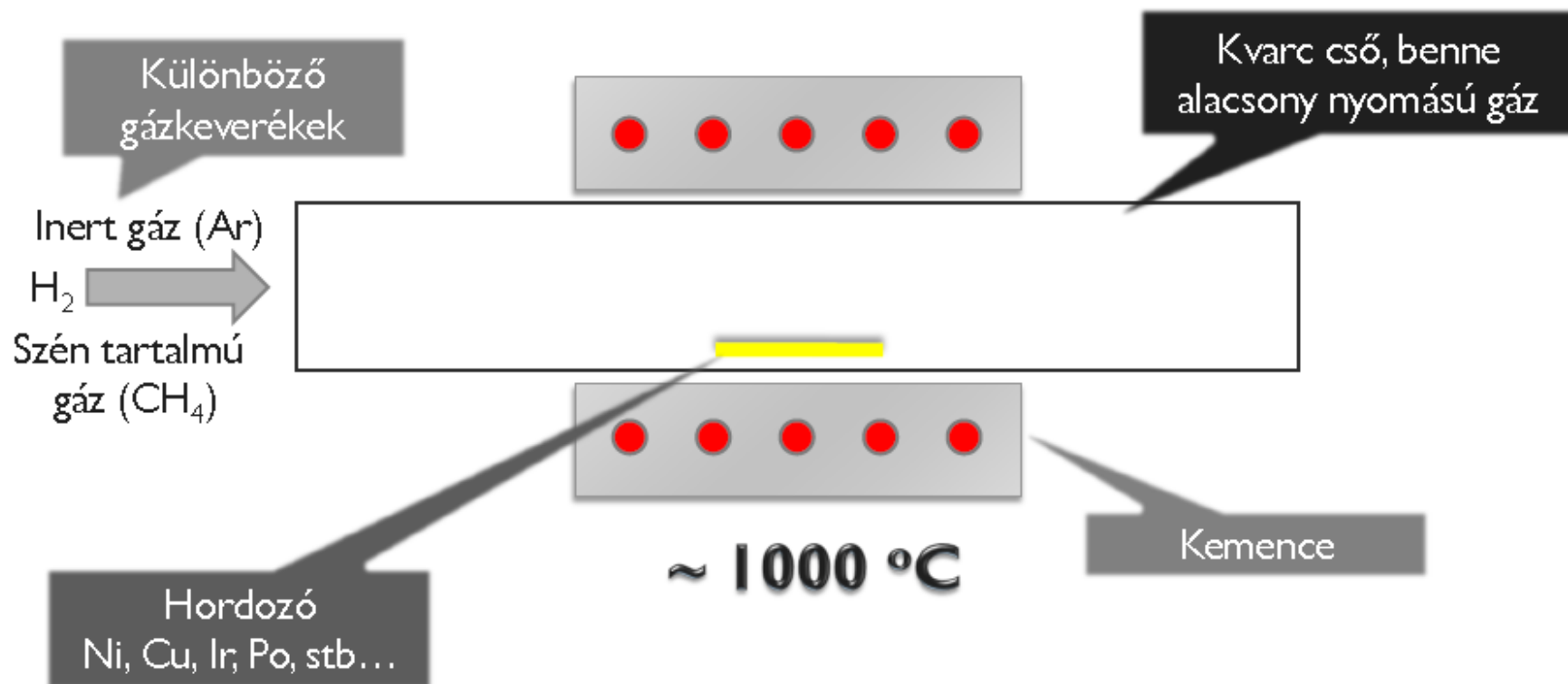




# Grafén – Si összehasonlítás

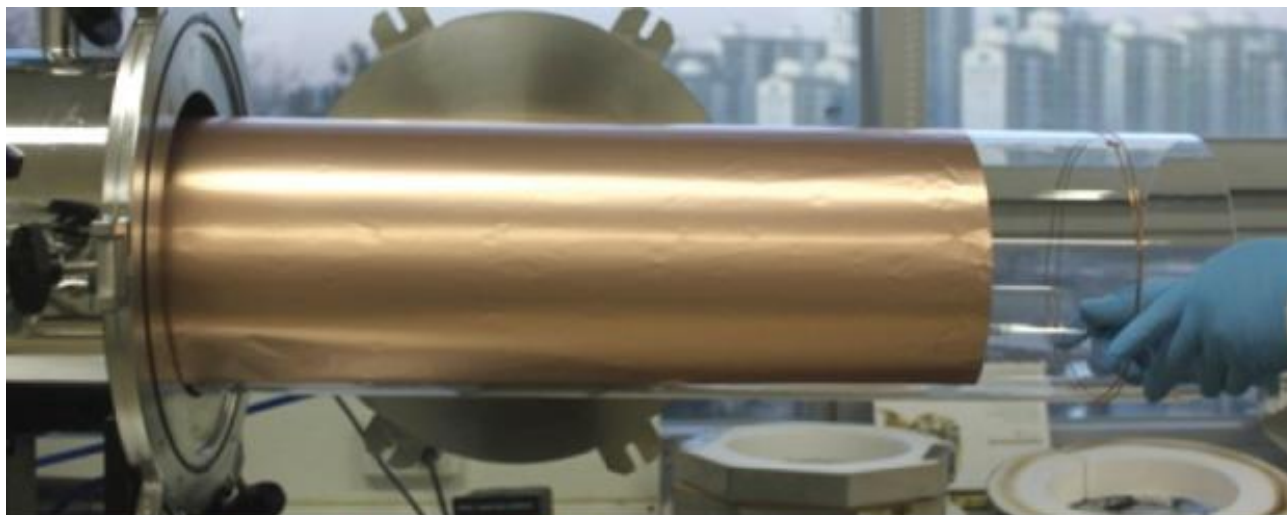
- Töltéshordozók mozgékonyasága
  - 200.000 cm<sup>2</sup>/Vs (Si: 1400 cm<sup>2</sup>/Vs)
- Töltéshordozó sűrűség
  - 3 x 10<sup>12</sup> cm<sup>-2</sup> (Si: 1.3 x 10<sup>10</sup> cm<sup>-3</sup> sajátvezetés)
- Áramsűrűség
  - 2.3 × 10<sup>9</sup> A/cm<sup>2</sup> (Si: 3x 10<sup>5</sup> A/cm<sup>2</sup> tranzisztoron)
- Hővezetés
  - 5000 Wm<sup>-1</sup>K<sup>-1</sup> (Si: 163 Wm<sup>-1</sup>K<sup>-1</sup> szobahőmérséklet)
  - (disszipáció nano-méreteken!!)

# Grafén CVD növesztés



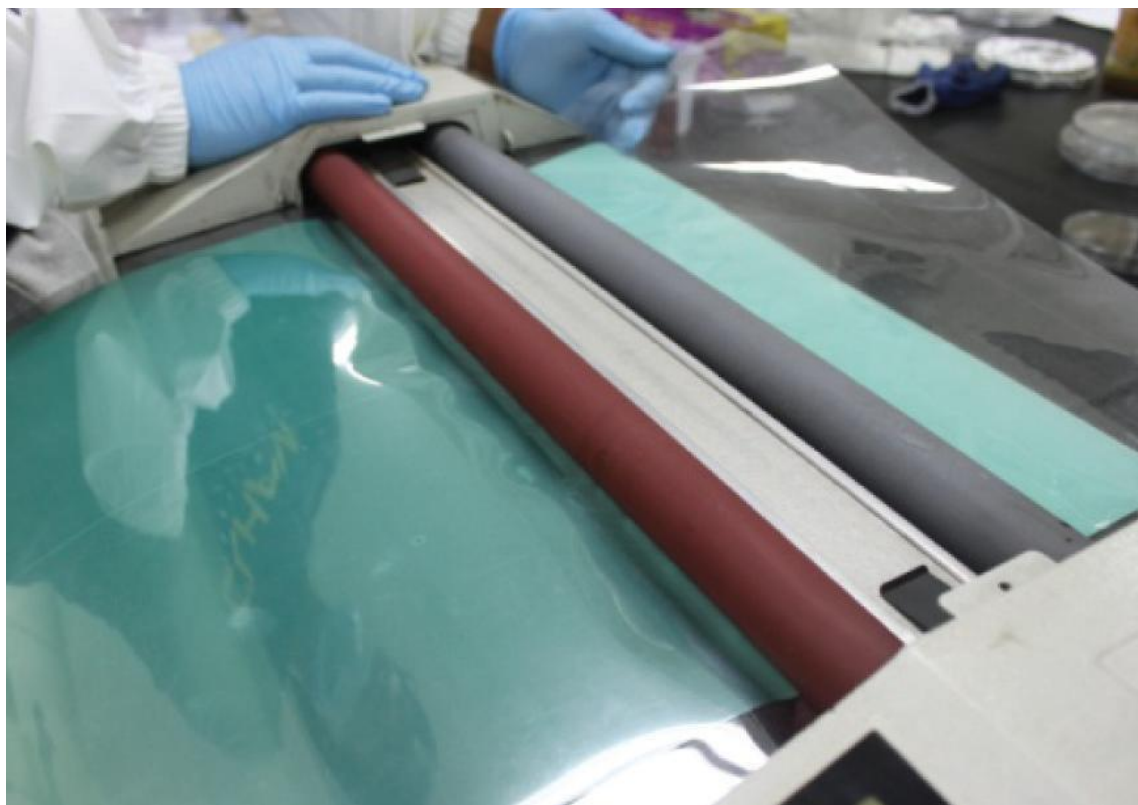


# Grafén CVD növesztés



# Grafén CVD növesztés

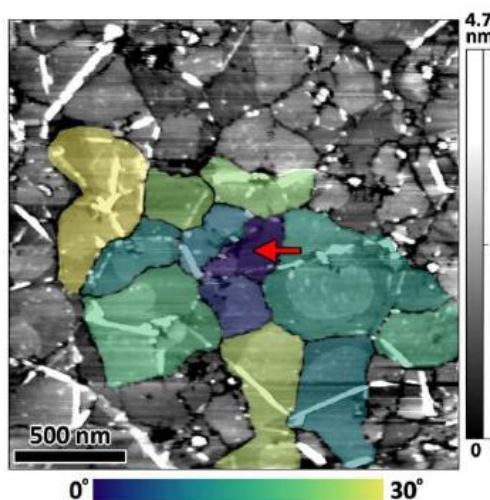
Akár 30 inch átmérőjű vagy még nagyobb minták készítése !



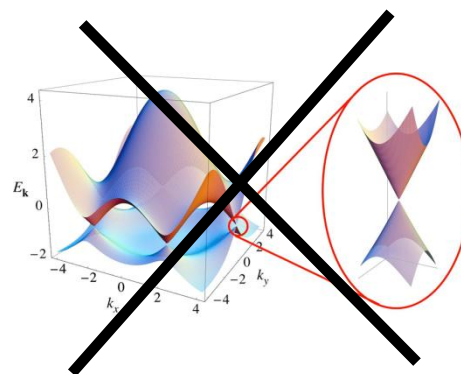
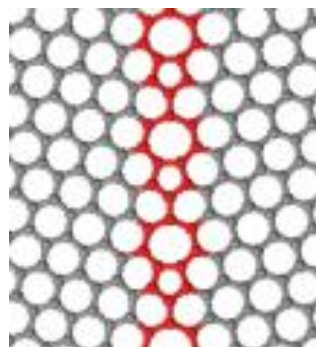
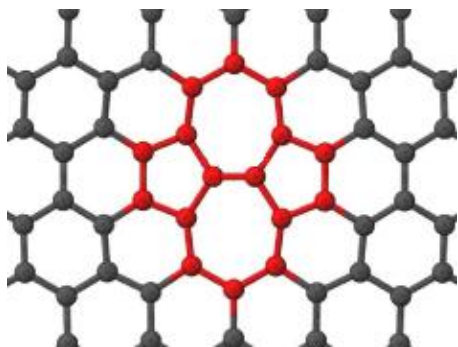
**Hátrány:**

A mobilitás nagyságrendekkel kisebb mint az exfoliált grafén esetében!

# Grafén előállítás – CVD (Chemical Vapor Deposition)



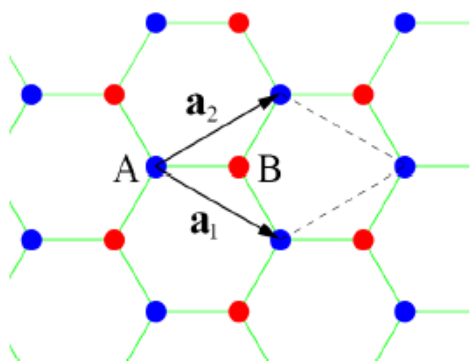
P. Nemes-Incze et al., Appl. Phys. Lett. **99**, 023104 (2011)



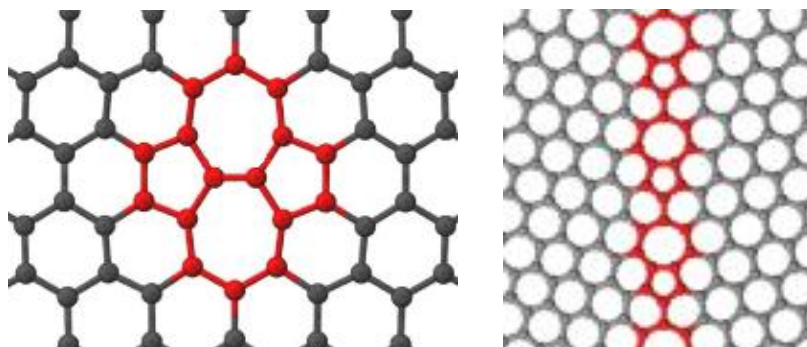
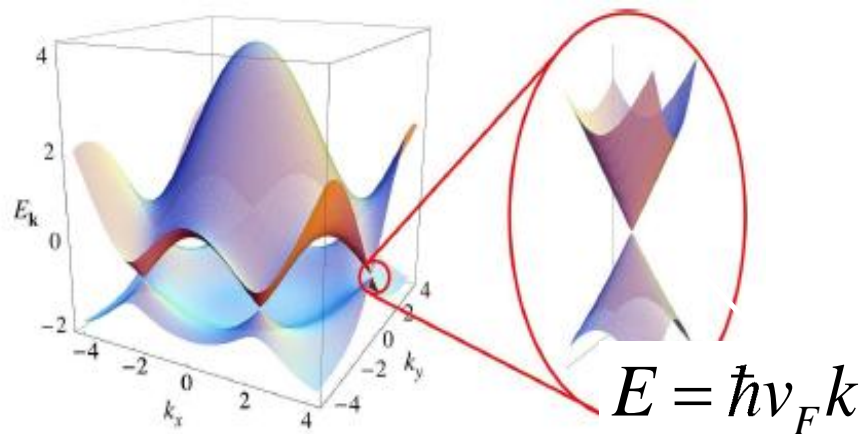
Kristályhibák grafénban



# Hogyan módosítják a pont és vonalhibák a grafén elektronszerkezetét?



A grafén réteg



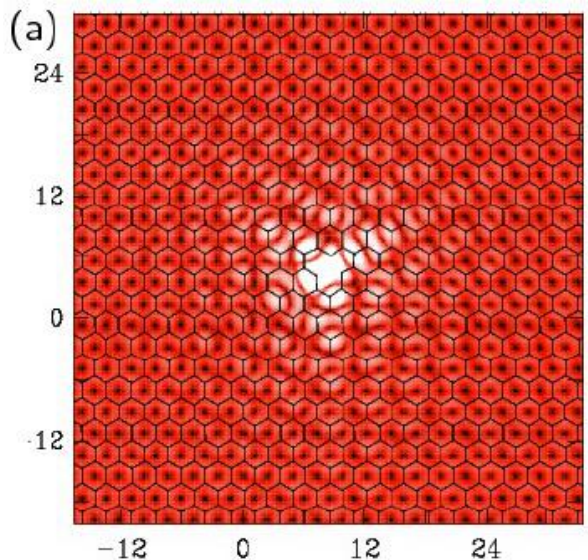
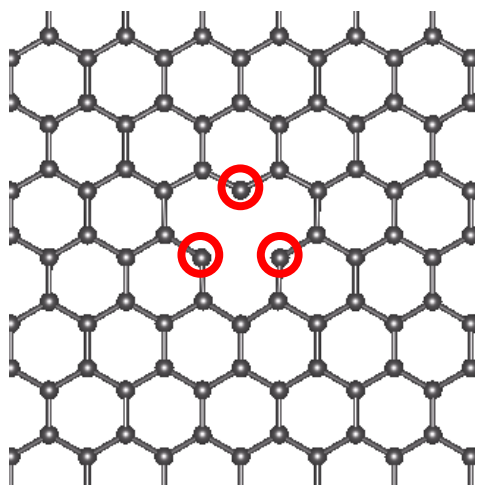
Pont- és vonalhiba grafénben

?

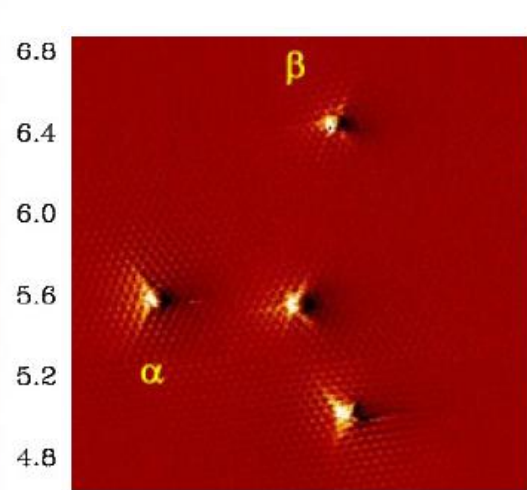
# 1. Ponthiba: vakancia

Ugeda et al., PRL **104**, 096804 (2010)

Elmélet



Számolt STM kép

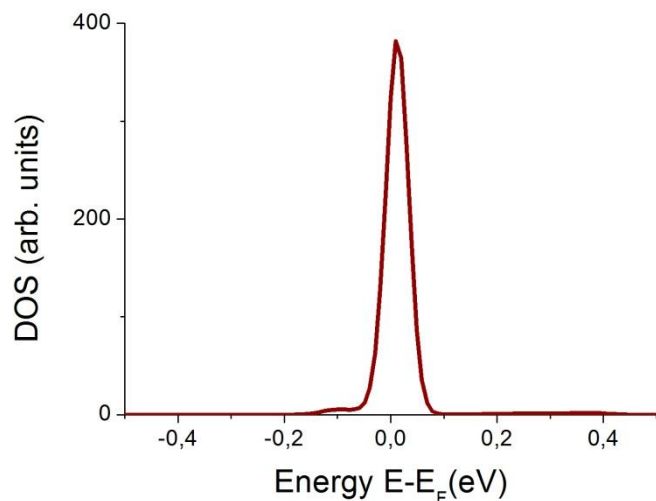


Mért STM kép



Erős szórócentrumok

DFT-(VASP)

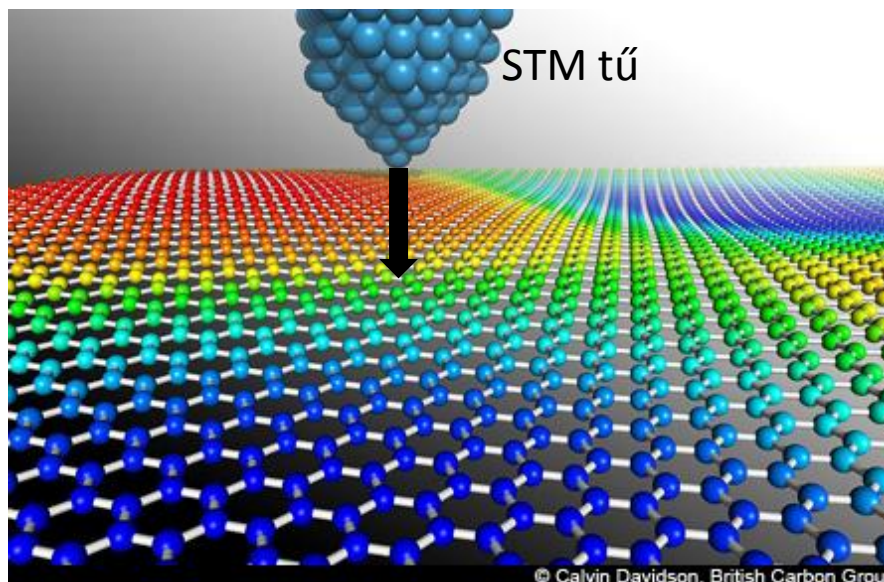


# STM tű, mint ponthiba

Az STM tű megtöri a grafén rács transláció szimmetriáját



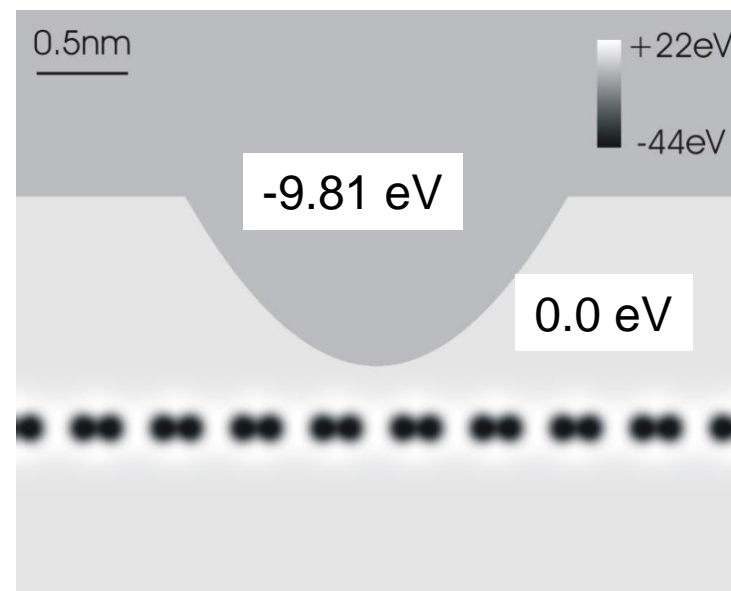
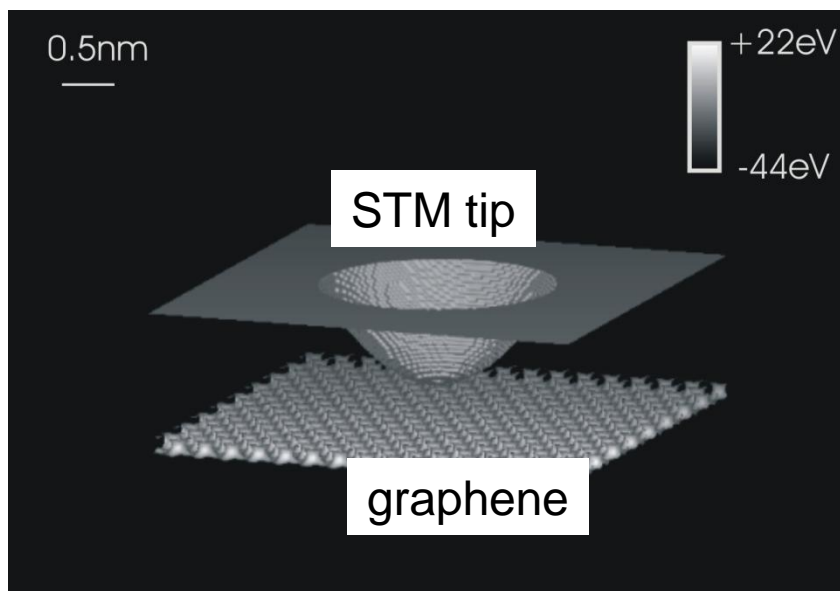
Hogyan alagutazik át egy elektron az STM tűből a grafénra?





# A rendszer potenciál modellje

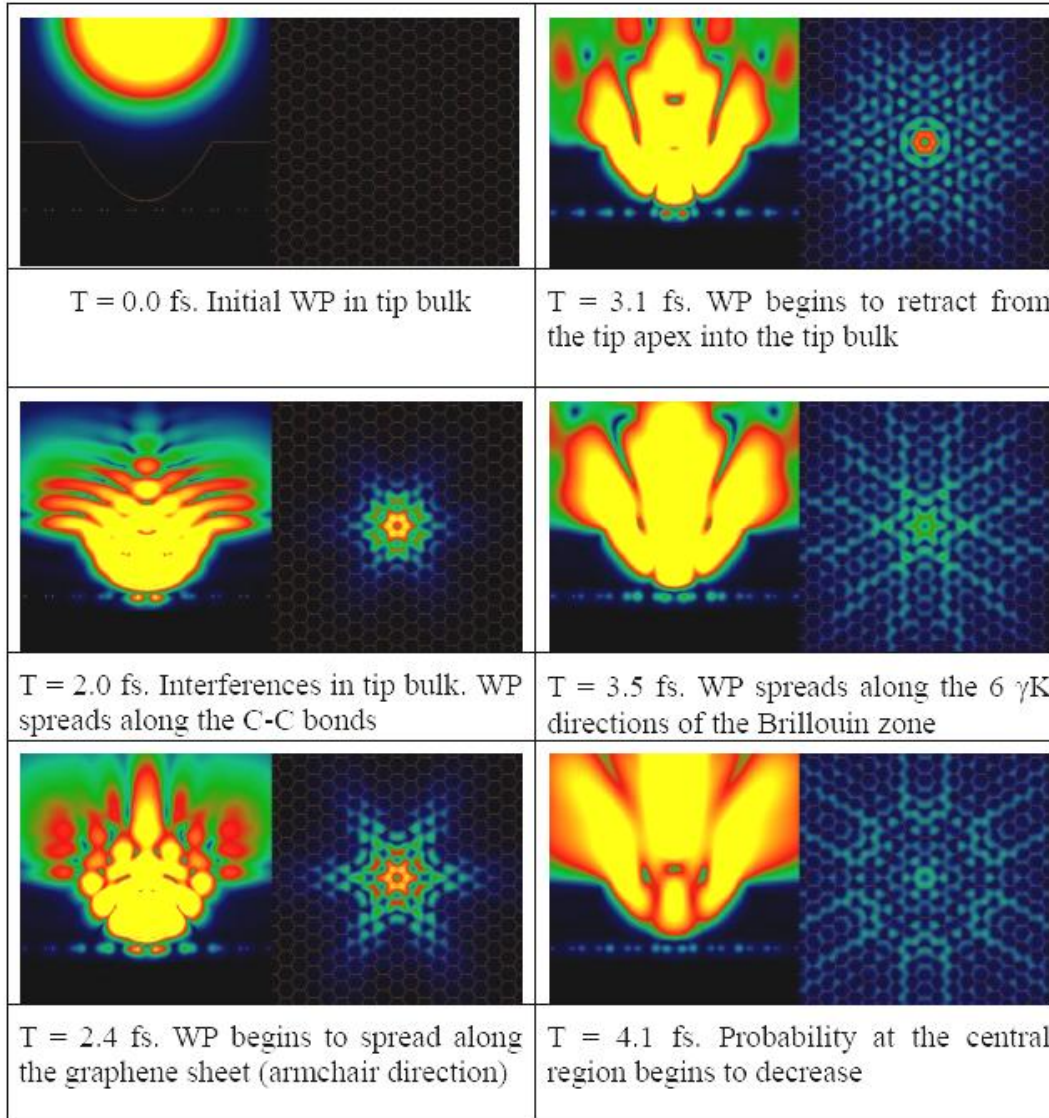
Fémes STM tű + grafén



$$V_{\text{graphene}}(\vec{r}) = \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^3 A_i e^{-a_i |\vec{r} - \vec{r}_j|^2}$$



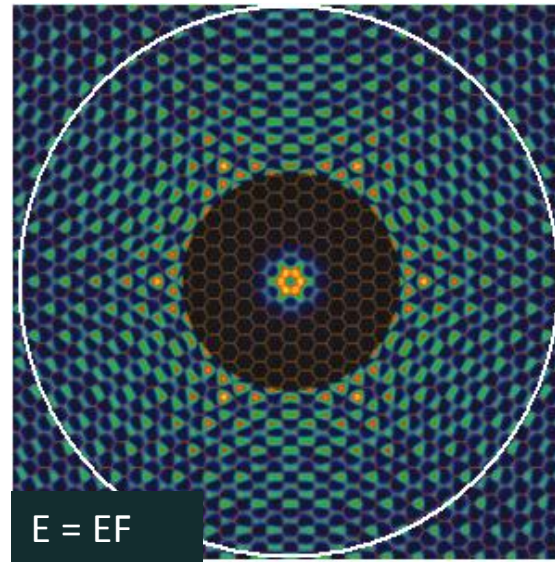
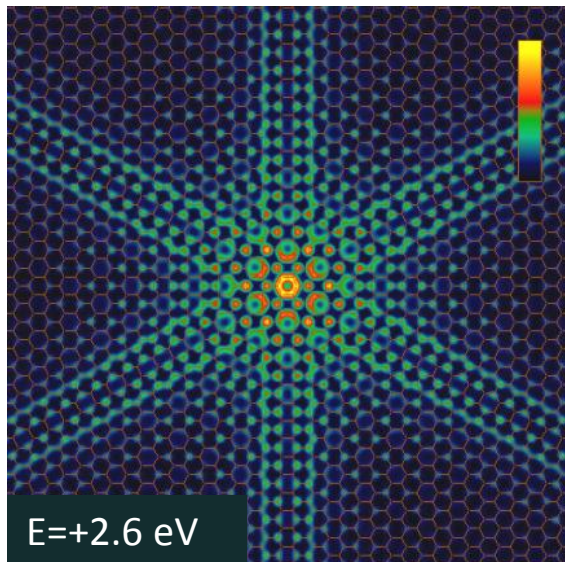
# A hullámcsomag időfejlődése



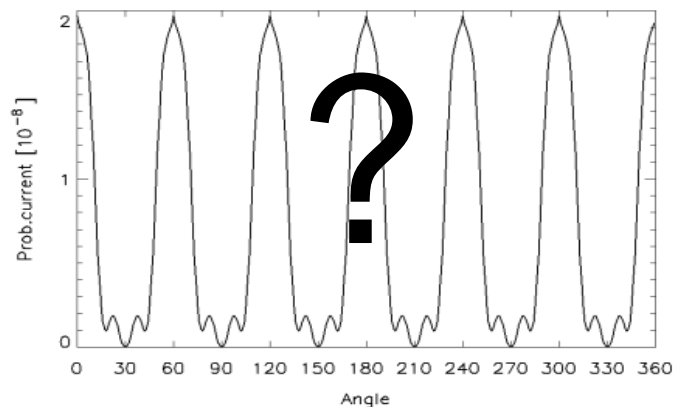
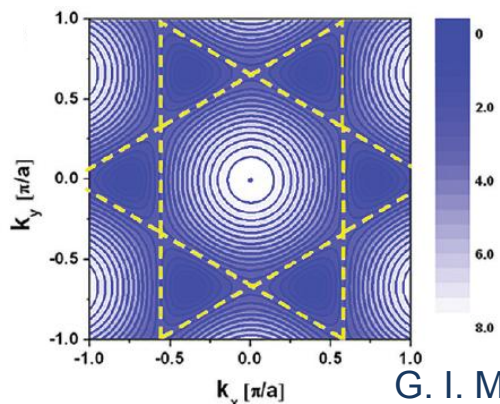


# Anizotróp szétfolyás

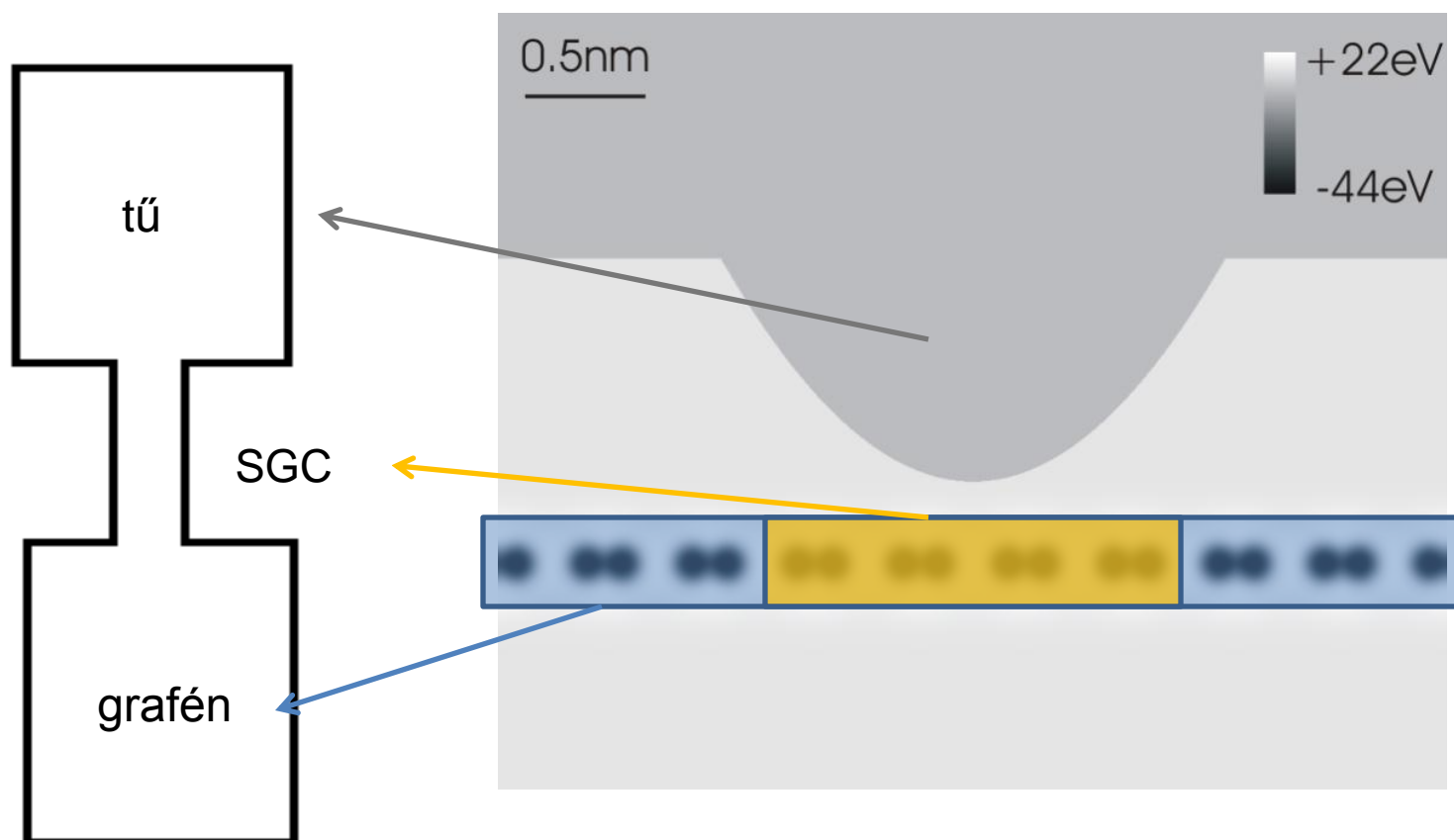
$$\rho(\vec{r}, E) = |\psi(\vec{r}, E)|^2$$



Trigonal warping

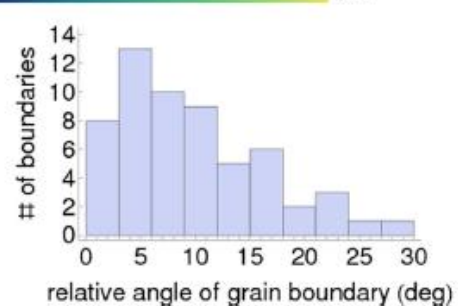
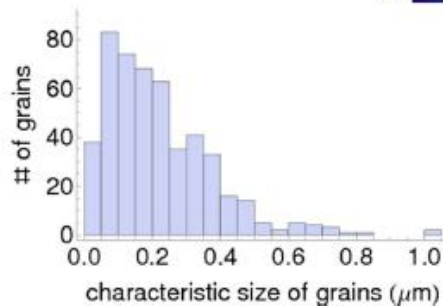
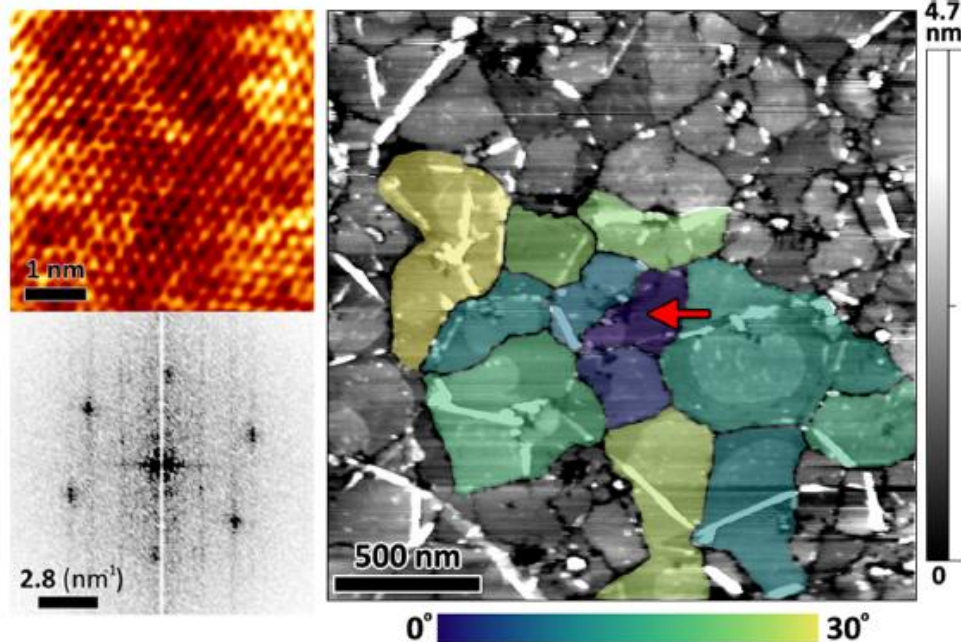
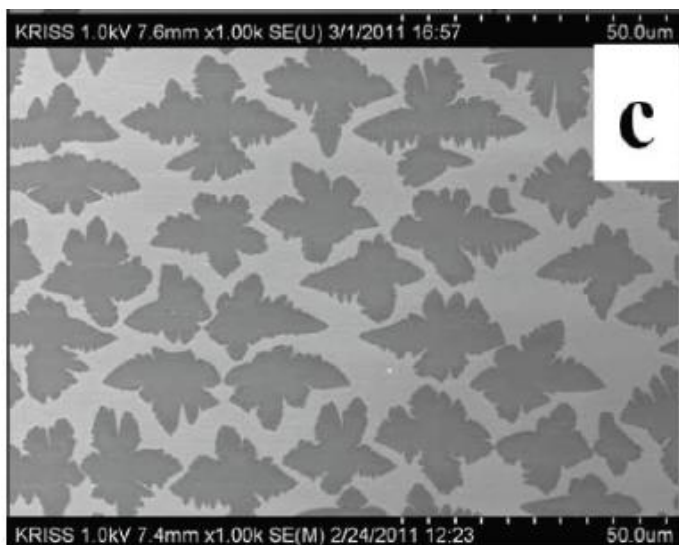


# Landauer kép





## 2. Vonalhibák: szemcsehatárok



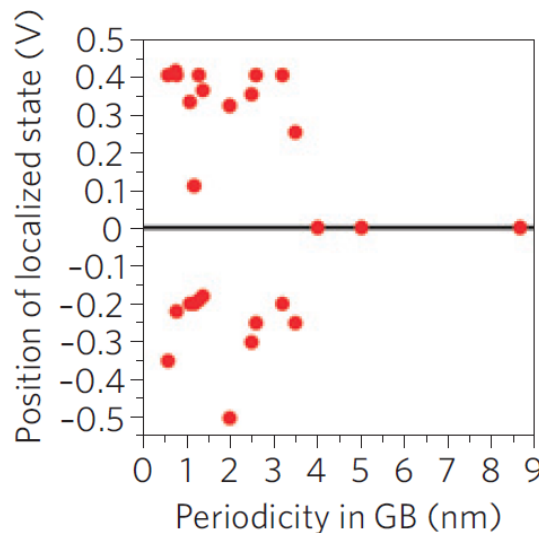
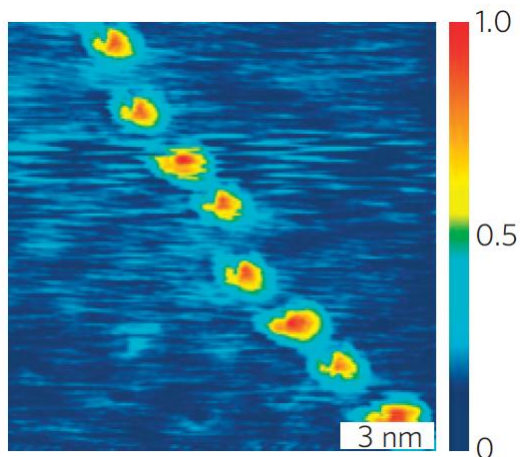
C. Hwang et al., J. Phys. Chem C **115**, 22369 (2011)

P. Nemes-Incze et al., Appl. Phys. Lett. **99**, 023104 (2011)



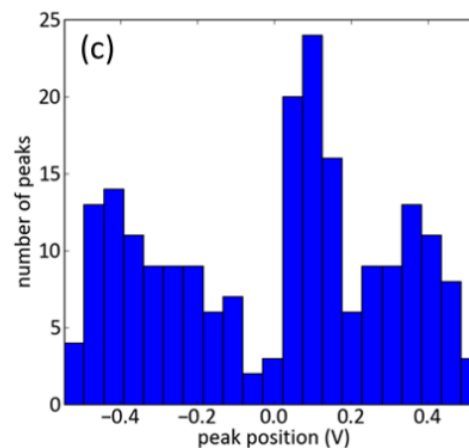
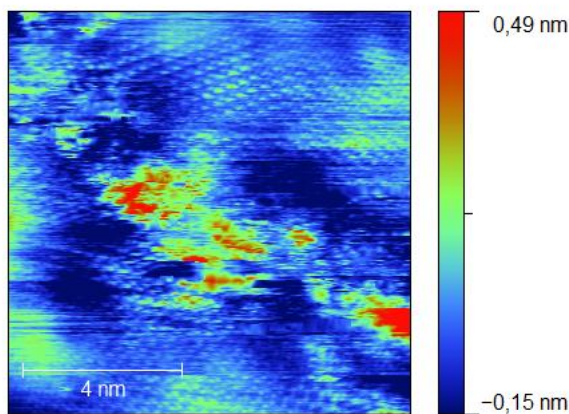
# Periodikus és amorf szemcsehatár

STM kép grafiton



J. Červenka et al.,  
Nat. Phys. 5, 840 (2009)

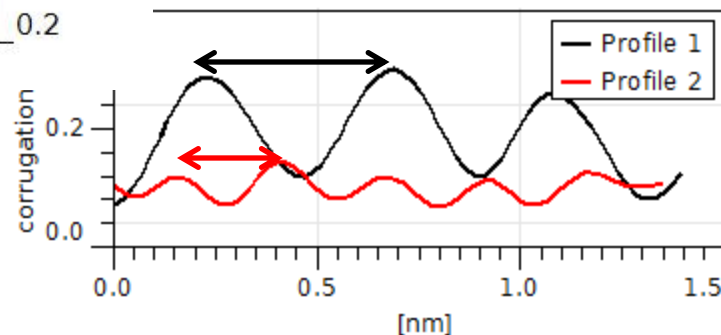
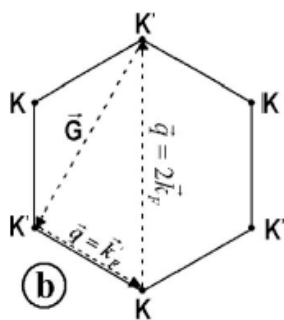
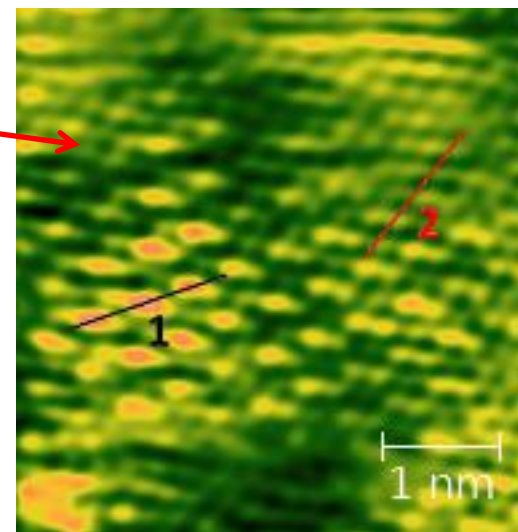
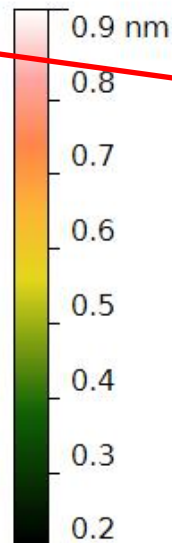
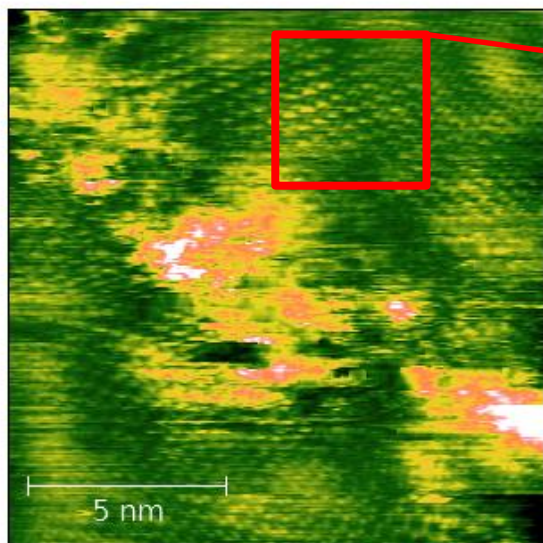
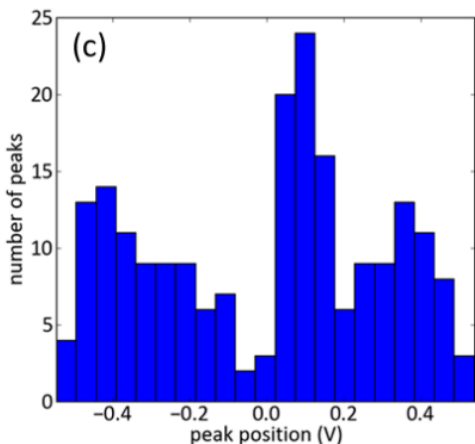
STM CVD grafénen



Lokalizált állapotok  
statisztika

# Amorf szemcsehatár – vonalhibák a CVD grafénben

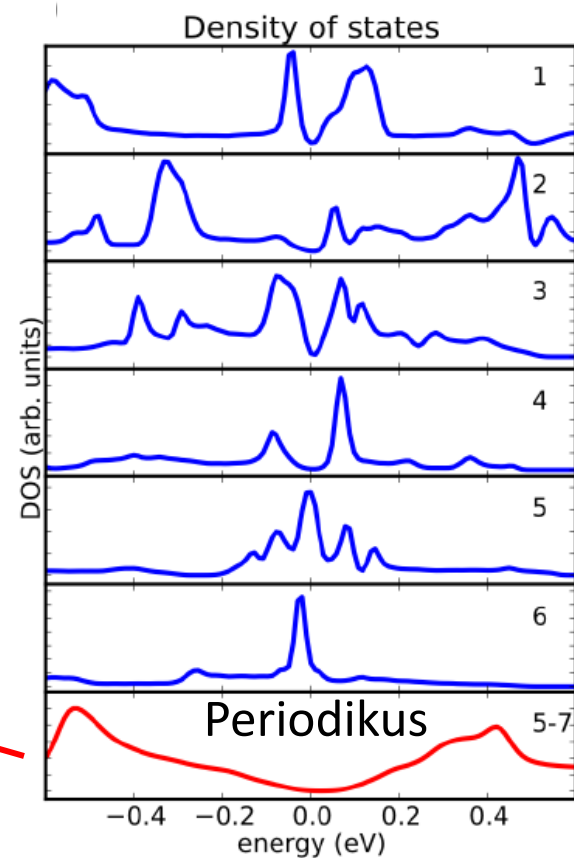
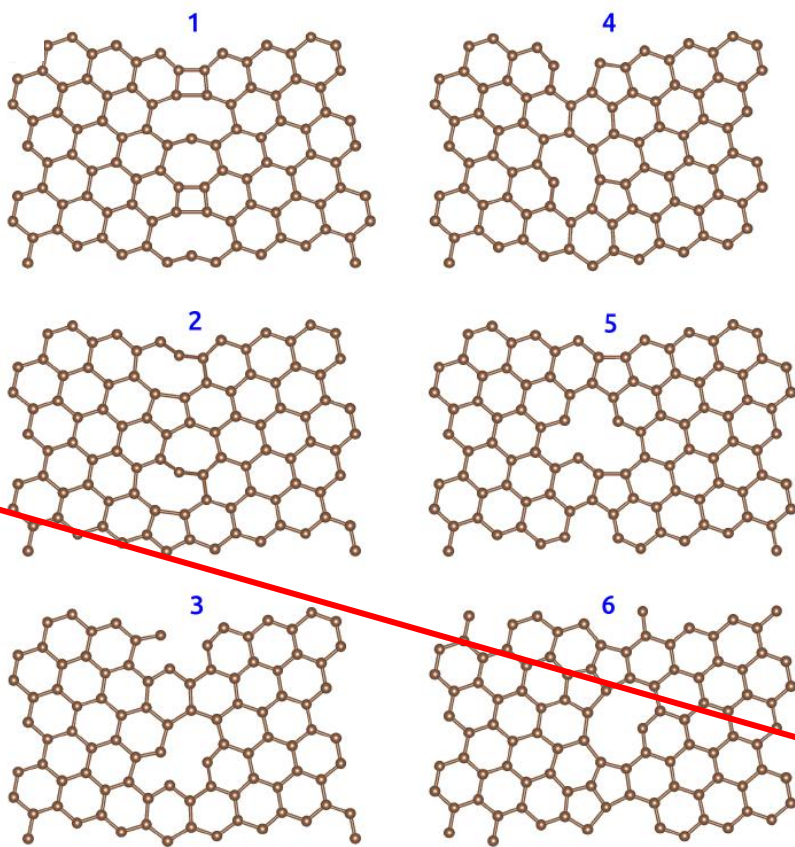
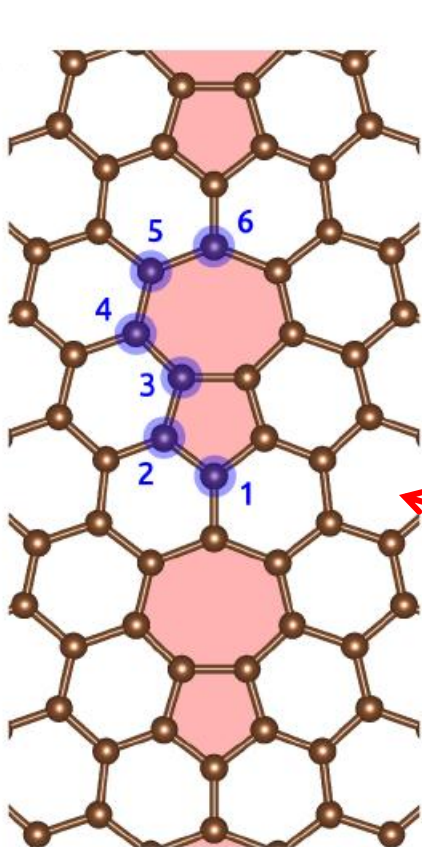
T = 4K



szuperstruktúra: 0.43 nm  
atomi távolság: 0.25 nm

K-K' szóródás „Intervalley scattering”

# Rendezetlen grafén szemcsehatárok elektronszerkezete DFT szimuláció



Kiinduló (periodikus) geometria

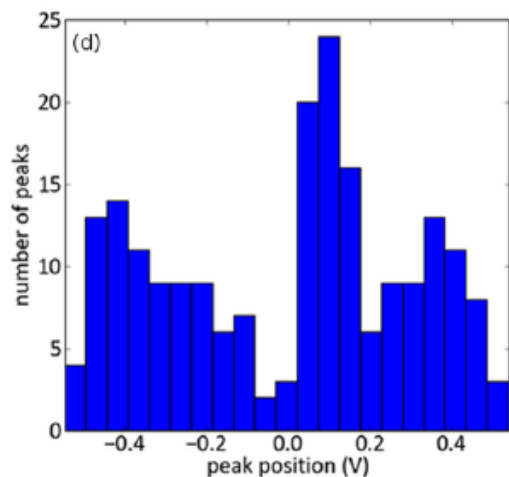
Relaxált „hibás” geometriák

DOS a szemcsehatárokon

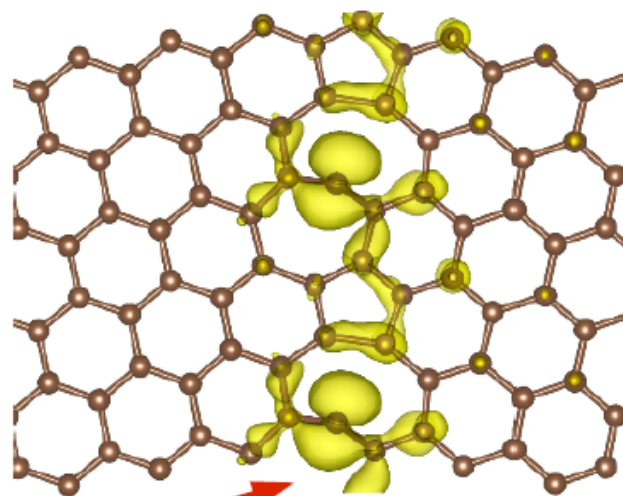
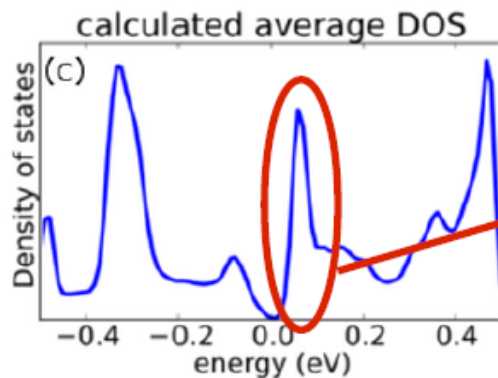


# STM – DFT összehasonlítás

## Mérés



## Szimuláció



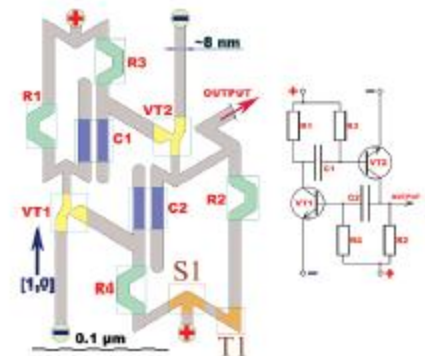
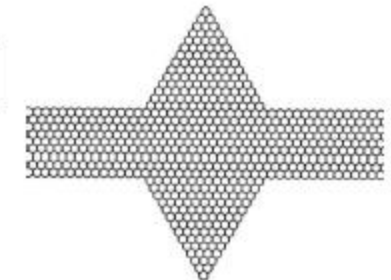
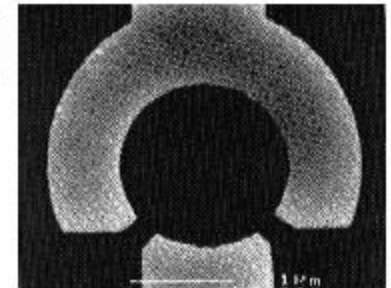
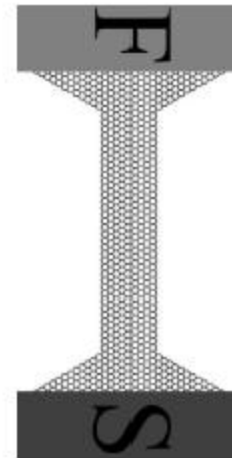
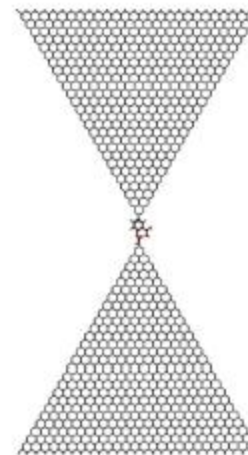
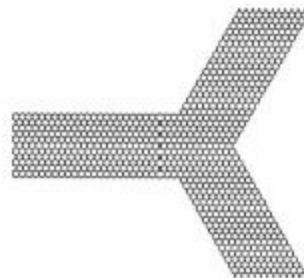
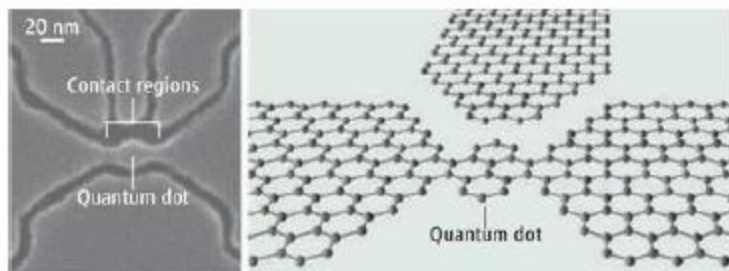
Kettős koordinációjú szénatomok jelentősen befolyásolják az elektron szerkezetet és a szórási folyamatokat.

# Grafén nanoszerkezetek

A grafén önmagában is figyelemreméltó anyag. De, ha képesek vagyunk úgy alakítani, ahogy mi szeretnénk, akkor új tulajdonságokkal, új funkciókkal ruházhatjuk fel.

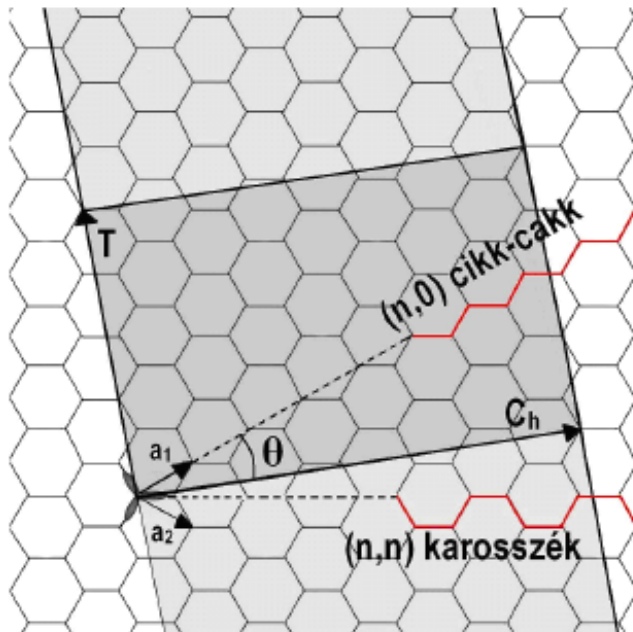
- quantum dotok
- nanorés
- **nanoelektronika**
- quantum billiárd
- Y-elágazás Cooper- pár feltörőhöz
- stb.

Mint ahogy egy fafaragó egy darab fából különféle eszközöket alkot.



# Grafén nanoszerkezetek – a két paraméter

Mitől függenek a grafén nanoszerkezetek tulajdonságai? Milyen paraméterek a meghatározók?

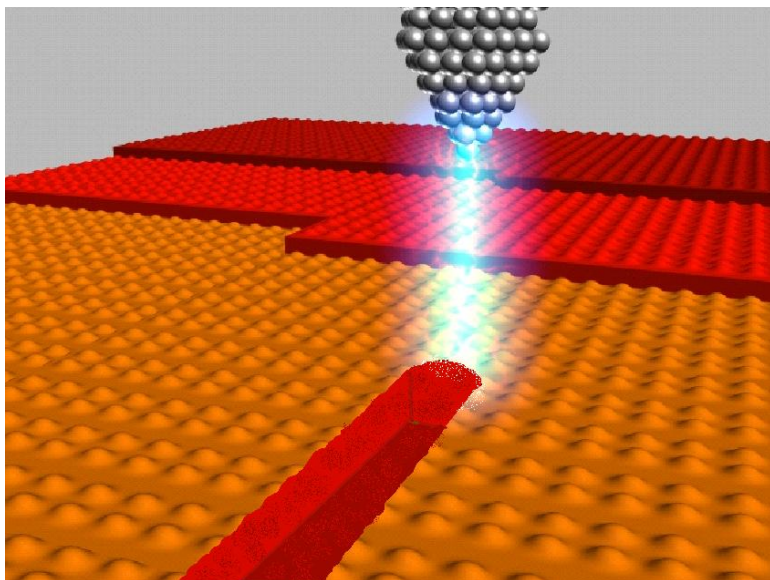


Mivel a grafén rácsa hatszögös, ezért ez a szimmetria megjelenik a fizikai tulajdonságaiban is. Tehát nem mindegy hogy milyen irányban hozzuk létre a nanoszerkezetünket.

Ahogy természetesen az sem mindegy mekkora az a struktúra amit készíteni szeretnénk. Ugyanis másképpen viselkedik egy szerkezet makro-, mikro- és nano skálán.

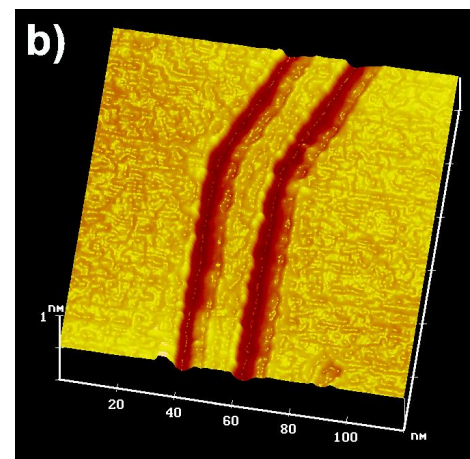
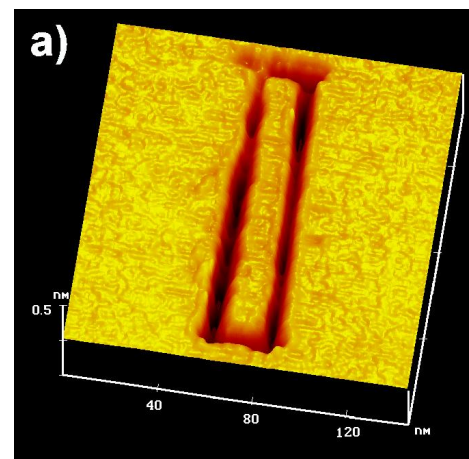
Tehát ha grafén nanoszerkezeteket akarunk létrehozni, akkor kézben kell tartanunk a nanoszerkezetek orientációját és vonalszélességét!

# STM litográfia



L. Tapasztó et al. Nature Nanotechnology, 4, 937 (2008)

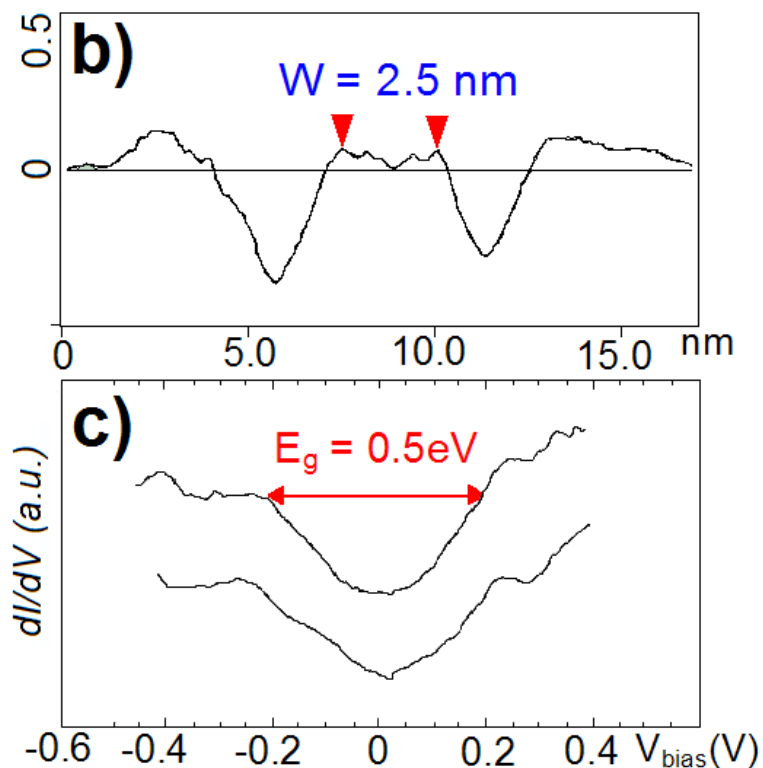
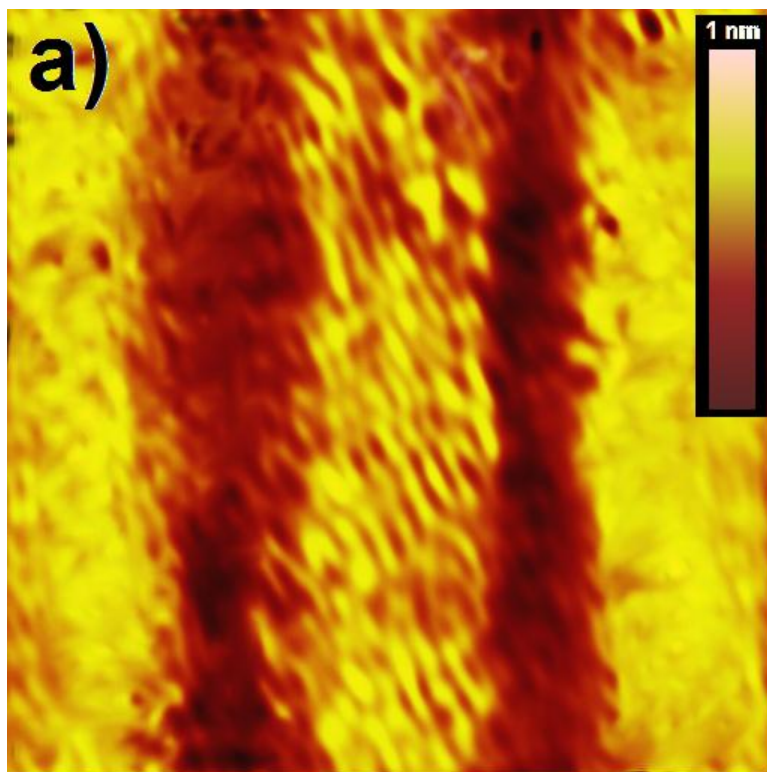
## Grafén nanoszalagok



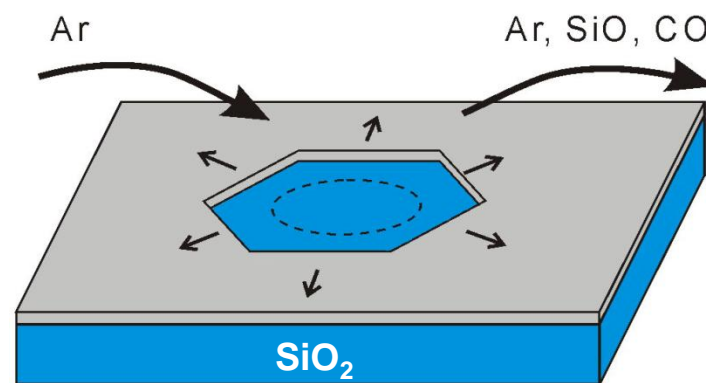
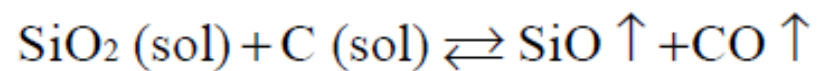
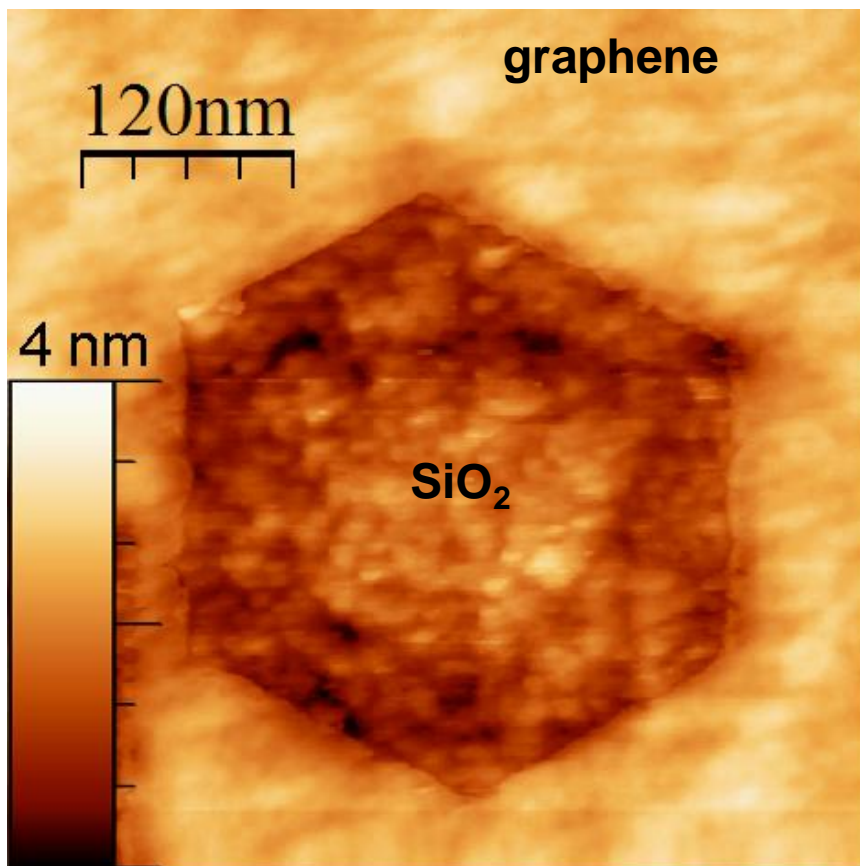
8 nm széles karosszék – cikcakk nanoszalag

# STM litográfia

Világrekord: legvékonyabb nanoszalag

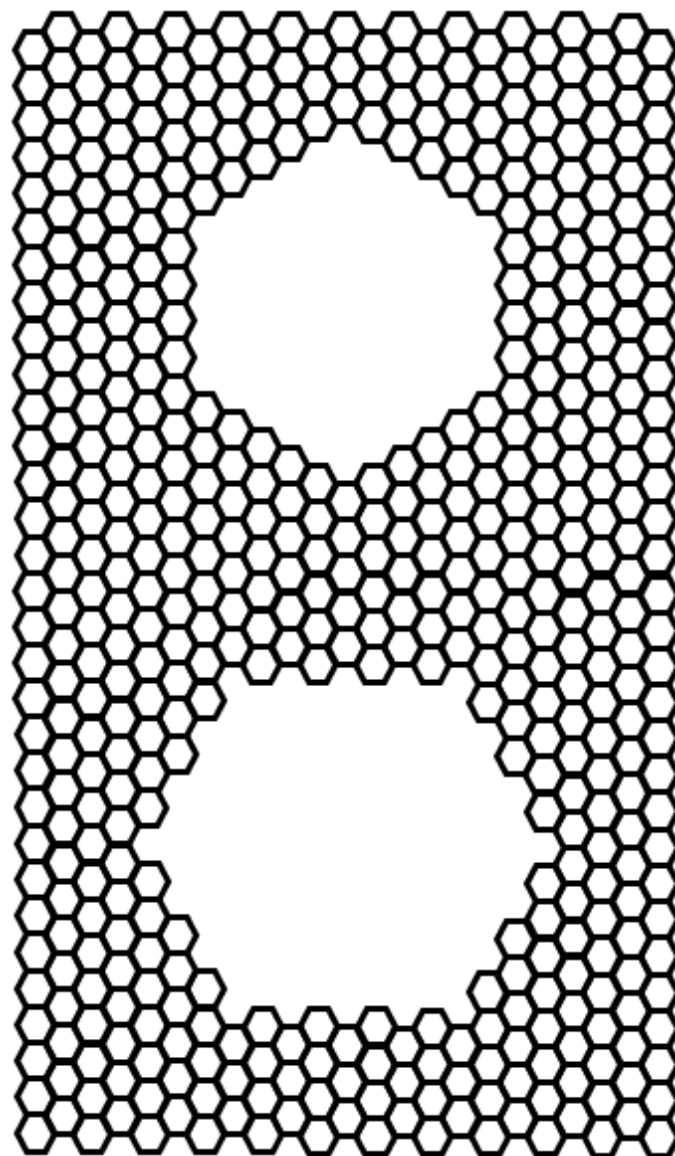
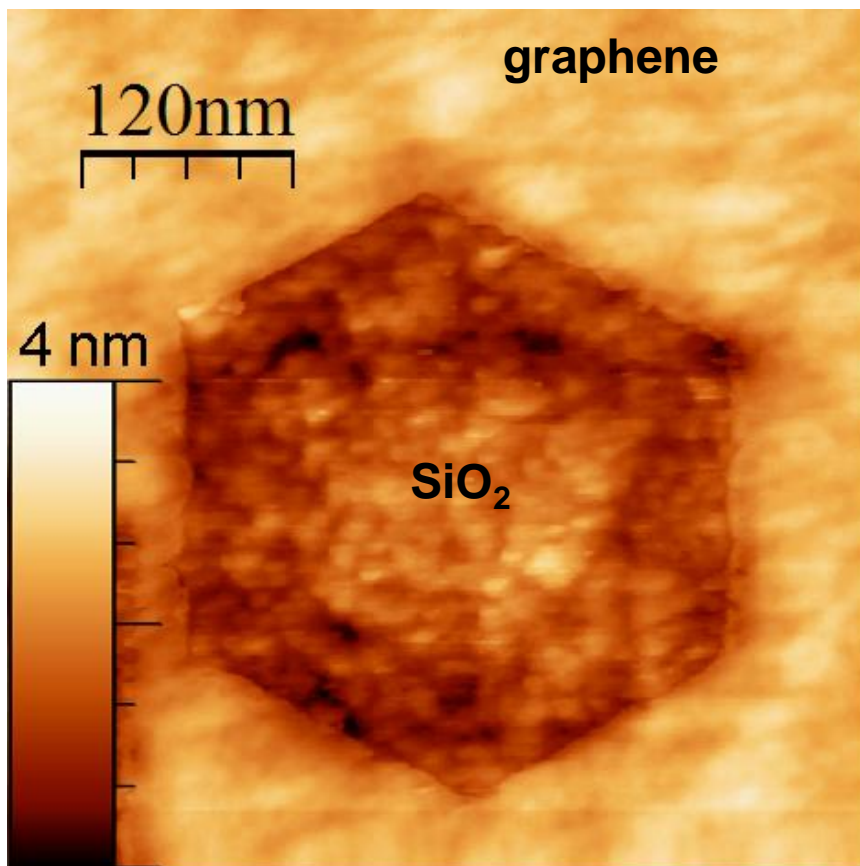


# Anizotróp kémiai marás



700°C, Argon

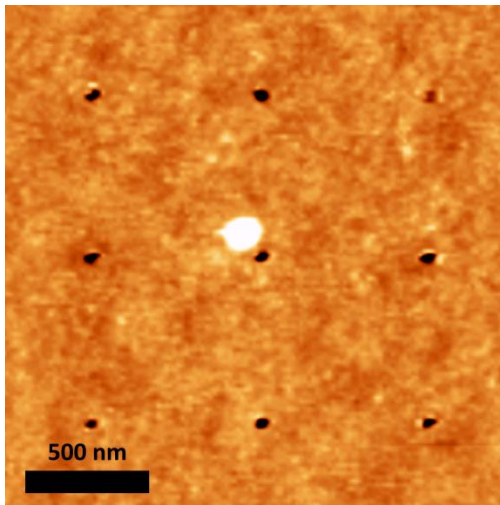
# Anizotróp kémiai marás



P. Nemes-Incze, et al. Nano Research 3 (2010) 110



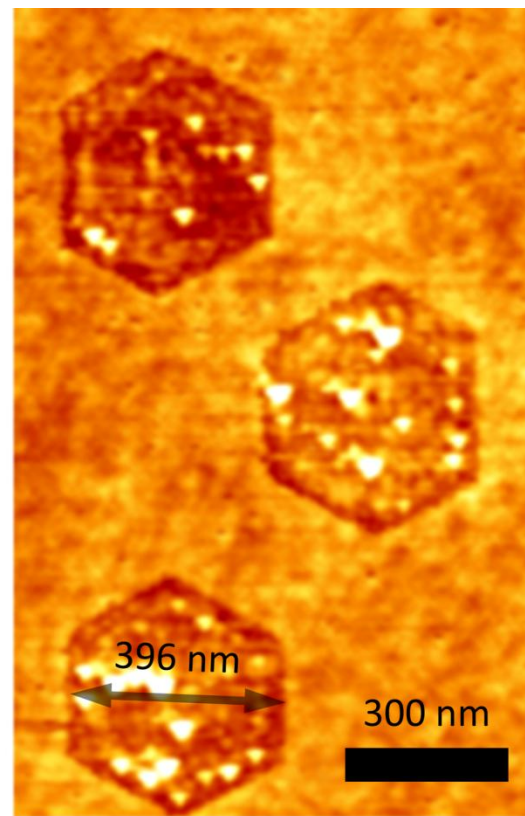
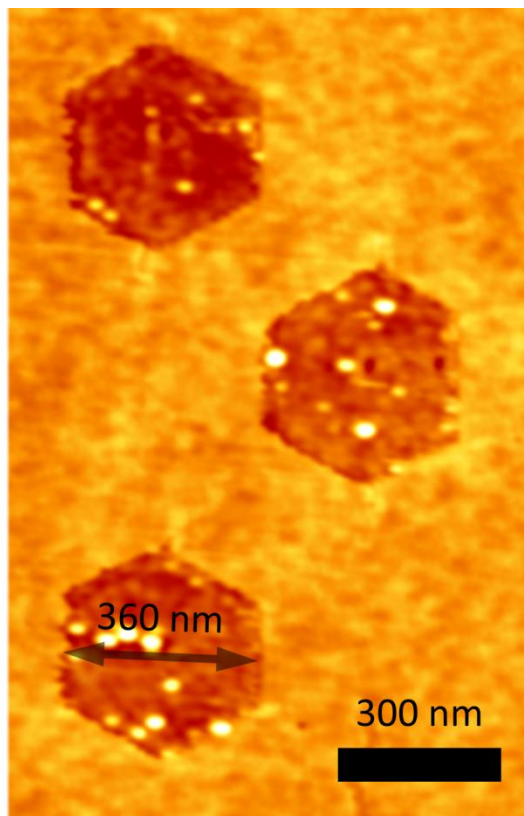
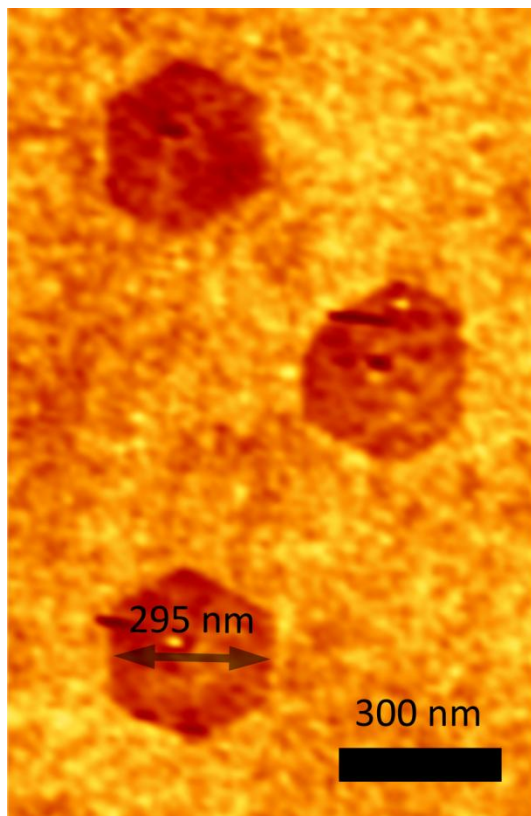
# Anizotróp kémiai marás – („cikkakk” szélű nanoszalagok)



AFM tűvel szúrt lyukak

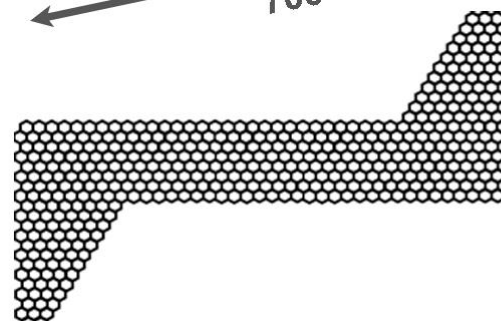
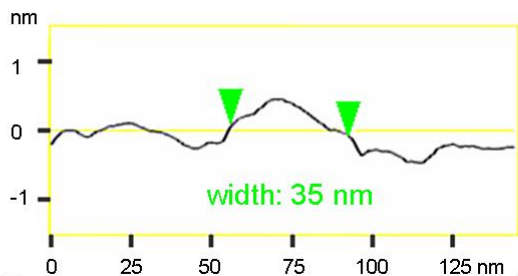
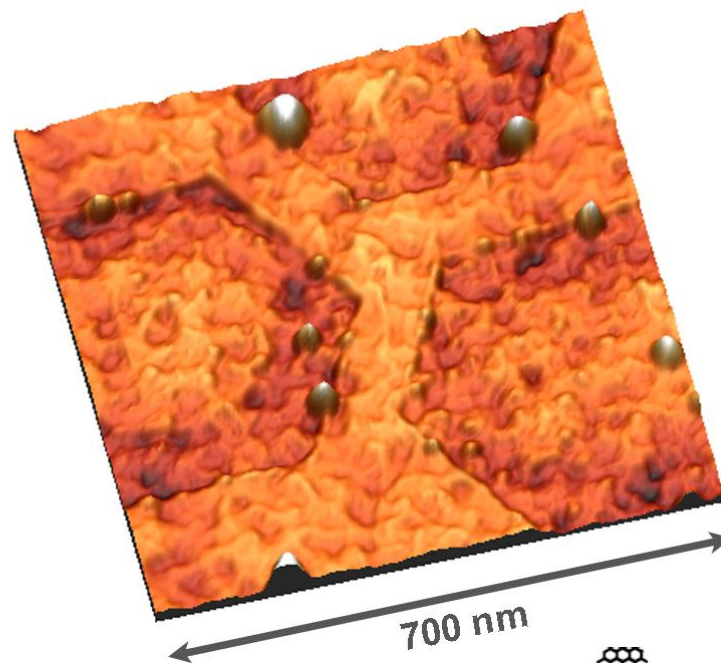
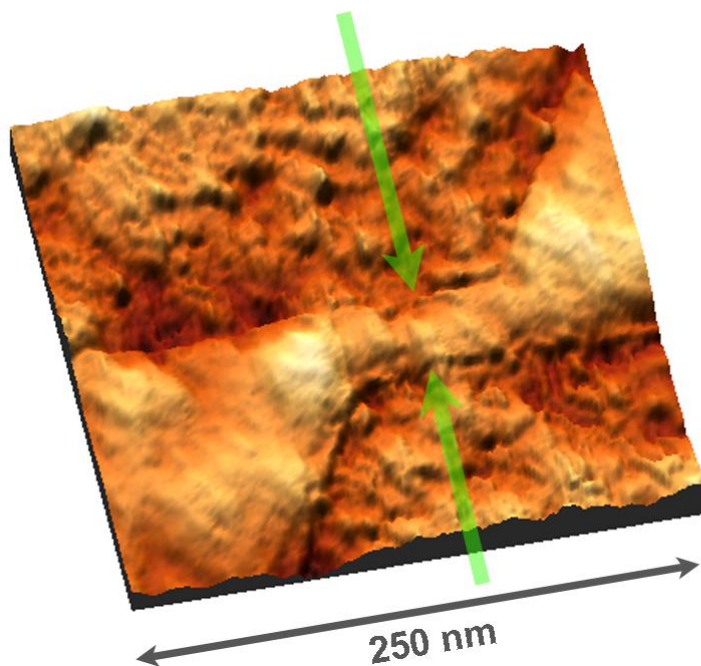


# Anizotróp kémiai marás – („cikkakk” szélű nanoszalagok)

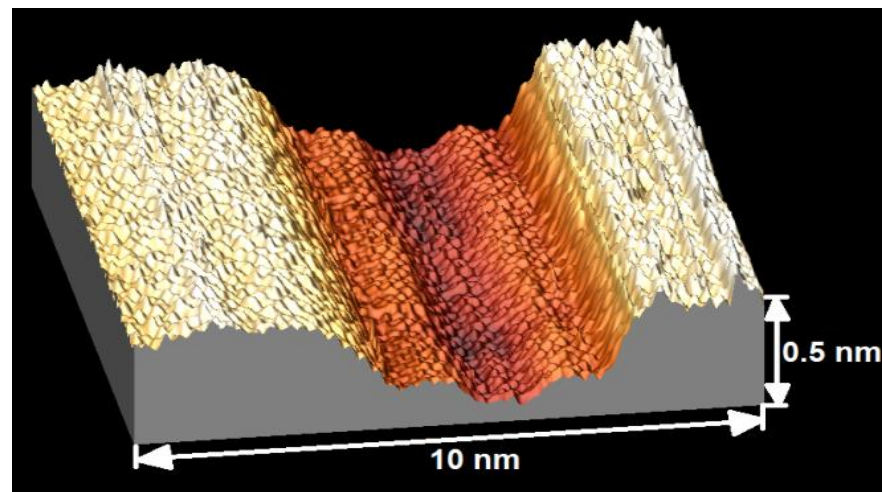
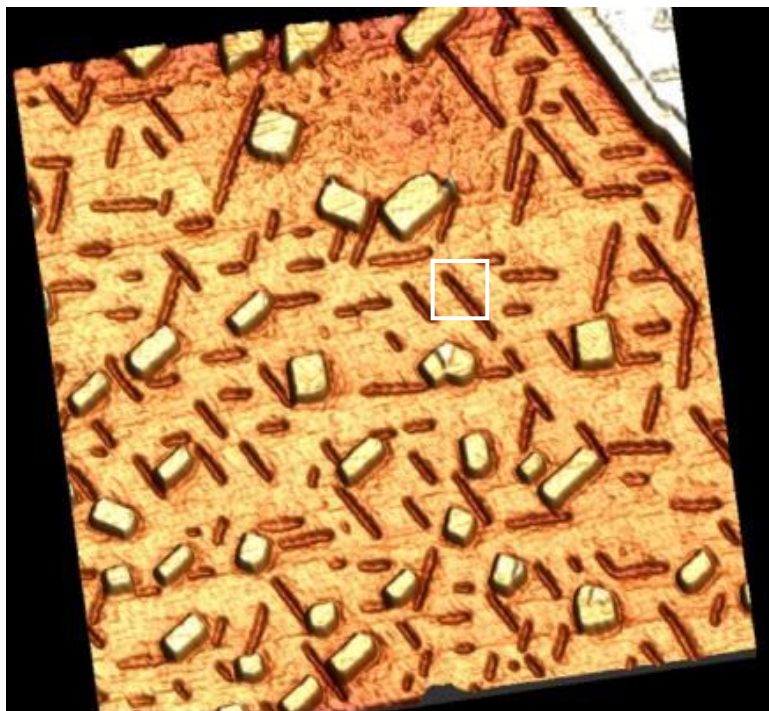




# Anizotróp kémiai marás – („cikkakk” szélű nanoszalagok)

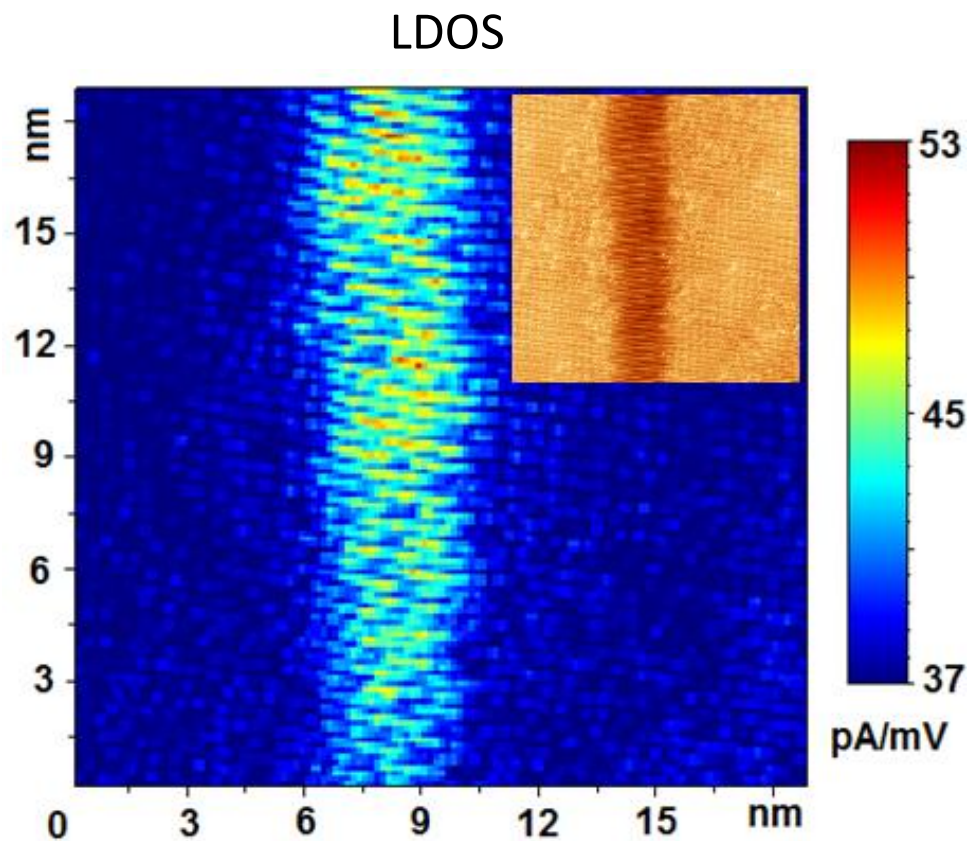
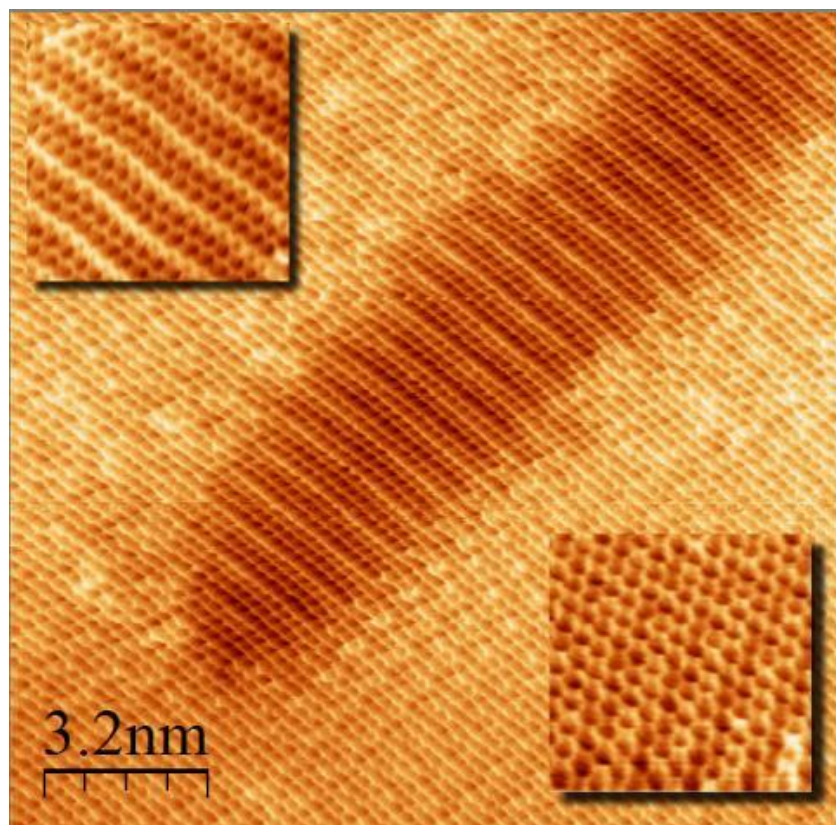


## Nanoskálájú periodikus hullámszámítás a graféneken (feszültség mérnökség)



Cu (111) réz egykristály „árkokkal”

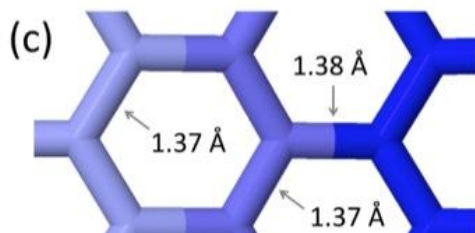
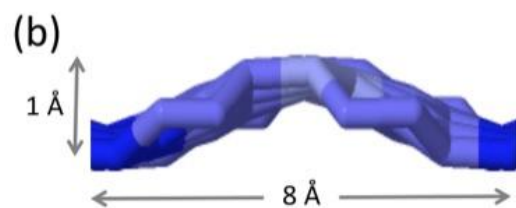
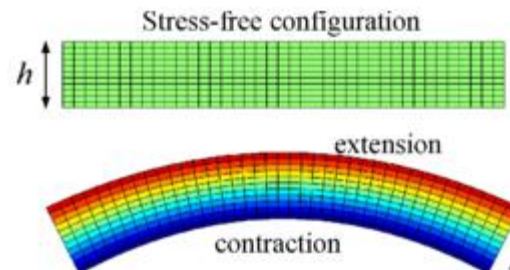
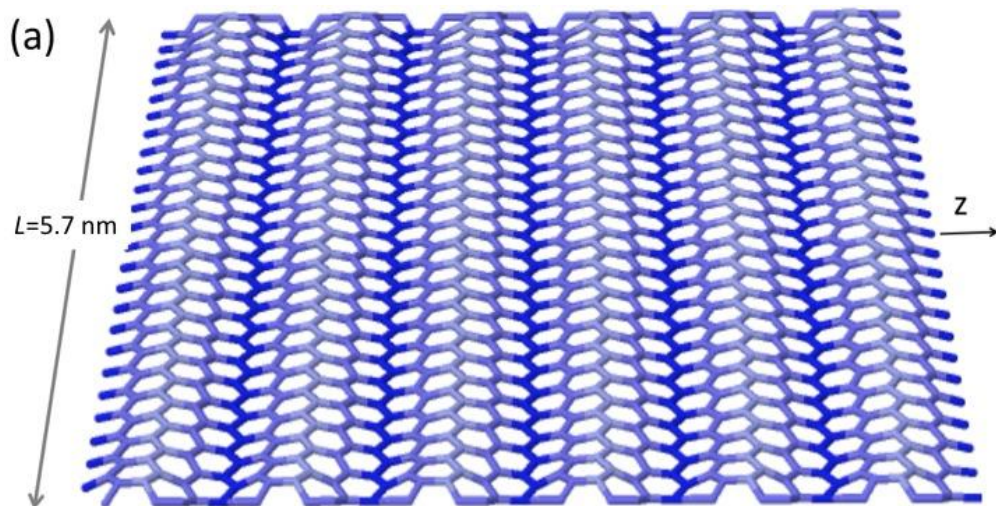
# Nanoskálájú periodikus hullámszámítás a grafénen (feszültség mérnökség)



$$\lambda_{\text{exp}} = 0.7 \text{ nm}, A_{\text{exp}} = 0.5 \text{ \AA}$$



# Nanoskálájú periodikus hullámok a grafénen



Klasszikus kontinuum mechanikai modell nagyságrendileg hibás eredményt ad – atomi szintű szimuláció jól leírja az eredményt

$$\lambda_{\text{theor}} = 0.8 \text{ nm}, A_{\text{theor}} = 0.5 \text{ \AA}$$

$$\lambda_{\text{exp}} = 0.7 \text{ nm}, A_{\text{exp}} = 0.5 \text{ \AA}$$



# Összefoglalás

- A kémiai gőzfázisú leválasztással (CVD) növesztett grafén sok amorf szemcsehatárt tartalmaz. Ezek erősen befolyásolják az elektronszerkezetet és a transzportot. A szemcsehatár két fontos jellemzője: a szemcsék szöge és a szemcsehatár atomi szerkezete (rendezett, rendezetlen).
- Módszereket dolgoztunk ki a grafén atomi skálájú megmunkálására: STM litográfia és kémiai marásos módszerek. Ezzel jól meghatározott élszerkezetű és vastagságú nanoszalagokat tudtunk létrehozni.
- Nanoskálájú periodikus hullámokat hoztunk létre graféneken (réz hordozón). Ez tiltott sávot okoz – nanoelektronikai alkalmazás!



# Lehet-e tökéletes nanotechnológiai eszközöket készíteni tökéletlen grafénból?

Van rá lehetőség, de ehhez az élek és a szemcsehatárok szerkezetét kézben kell tartani!



# Honlap

## Nanostructures Departement MTA TTK MFA Budapest



Click here to receive EMail notification about new uploads to these pages

[New Results](#)

[Staff](#)

[Publications](#)

[Research Topics](#)

[Research Equipment](#)

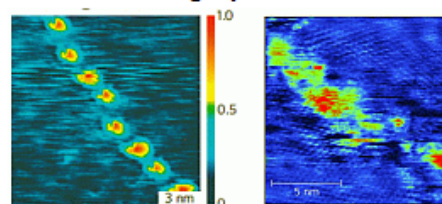
[Cooperations](#)

[Media Coverage](#)

[Links](#)

[Magyar oldalak](#)

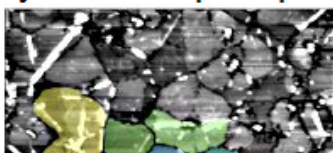
### Electronic states of disordered grain boundaries in graphene



This pair of Scanning Tunneling Microscope (STM) images shows an ordered and a disordered grain boundary (GB) in graphene. (Ordered: J. Cervenka et al, disordered: our measurement). Such disordered GBs are often seen in graphene samples prepared by CVD, hence we studied their properties by experimental and theoretical methods. This is important for nanoelectronic applications of graphene.

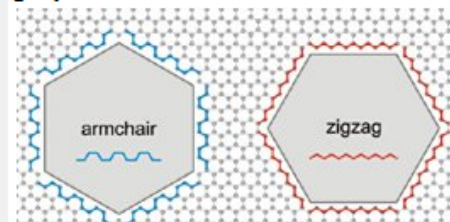
[Publications >>](#)

### Grain boundaries in graphene grown by chemical vapor deposition



In this article written by L. P. Biró

### Selective etching of armchair edges in graphite



Due to its high electron mobility and long coherence length, graphene is a promising material for next generation electronic devices. Patterning graphene with well controlled crystallographic orientation and atomically precise edges is very important for such applications. [Formerly](#), we developed a method for producing graphene edges with zigzag orientation, and our new procedure makes it now possible to etch edges with armchair orientation.

[Publications >>](#)

### Web-Schrödinger 3.0



Web-Schrödinger is a program for the interactive solution of the time dependent and stationary





# Köszönöm a figyelmet!

**The work was supported by:**

**Korea – Hungary Joint Laboratory for Nanosciences**

**OTKA-NKTH K 67793**

**EU FAEMCAR project**