

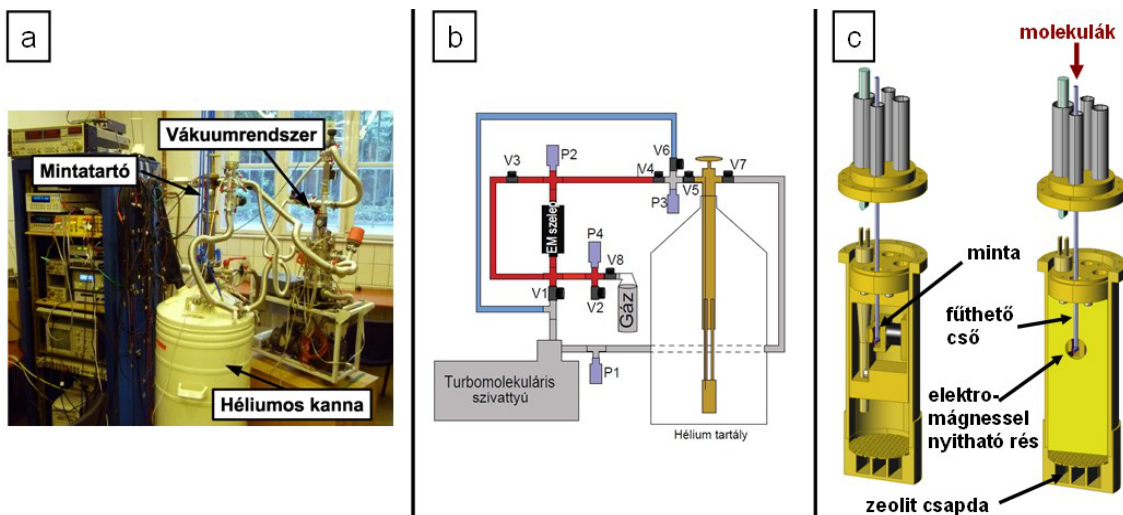
## Elektron transzport molekuláris nanostruktúrákban (szakmai zárójelentés)

Az OTKA K76010 kutatói pályázat keretében folyó kutatások a pályázat célkitűzései szerint haladtak. A kutatás keretében kifejlesztettünk egy molekulák kontrollált adagolására alkalmas mérőrendszert, mely egyedi molekulák kontaktálását teszi lehetővé [7,9,14]. Szupravezető subgap módszerrel vizsgáltunk különböző anyagból készült atomi méretű kontaktusokat [7]. Elméleti csoportokkal együttműködve részt vettünk egy vezetőképesség-hisztogramok szimulálására alkalmas módszer fejlesztésében, melynek megbízhatóságát a subgap módszer segítségével egyedi vezetési csatornák szintjén ellenőriztük [2]. Kifejlesztettünk egy új statisztikai módszert, melynek segítségével atomi és molekuláris kontaktusokban kialakuló konfigurációk közötti korrelációk vizsgálhatók [1,3]. Ezen módszer segítségével számos atomi és molekuláris nanovezeték viselkedését sikerült a szokásos vezetőképesség-hisztogram technikánál részletesebben feltérképezni [1,3,5,6,7,9,11].

### I. Molekulák vizsgálatára alkalmas mérőrendszer fejlesztése

Atom méretű kontaktusokat egy fémszál kontrollált szétszakításával hozhatunk létre [H1]. A szétszakadás előtti utolsó pillanatban csak egyetlen atom köti össze a két oldalt, majd a szakadás után egy nagyon keskeny, atomi méretskálájú rés alakul ki, melynek szélessége finoman változtatható. Az így kialakított *nanorések* kiválóan alkalmasak molekulák kontaktálására, illetve egyetlen molekulából álló kontaktusok vezetési tulajdonságainak vizsgálatára [H2].

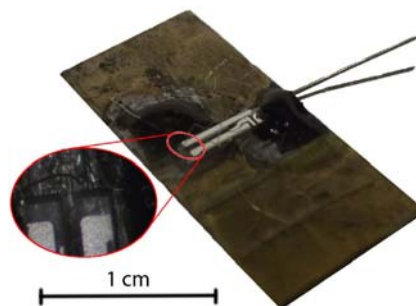
A pályázat egyik fontos célja volt, hogy a korábbiakban fejlesztett alacsony hőmérsékleti törőkontaktus mérőrendszerrel lehetőség nyíljon molekulák kontrollált adagolására, és molekuláris kontaktusok vizsgálatára. Ezen cél érdekében egy új, molekulaadagolásra alkalmas mérőrendszert fejlesztettünk [7,9,14], melyben a molekulák a szobahőmérsékleti tárolóból egy fűthető csövön keresztül jutnak el a folyékony hélium hőmérsékleten elszakított nanovezetékhez. Ezen csövön keresztül 4.2K-nél jelentősen magasabb fagyáspontú gázok is eljuttathatók a nanokontaktushoz. A cső végén egy lyuk található, mely a minta felé irányítja a leérkező molekulákat. A minta és a lyuk között egy elektromágnes segítségével nyitható rést helyeztünk el, mellyel a minta elzárható a kapilláristól akkor, amikor éppen nem engedünk be molekulákat. Zárt rés esetén a molekulák egy nagyterfogatú zeolit csapdába jutnak, mely a 4.2K-en véges göznyomással rendelkező hidrogén molekulákat is effektíven megköti. Ezen fejlesztések, és a szobahőmérsékleti nagy tisztaságú vákuumrendszer kialakítása elengedhetetlenek voltak ahhoz, hogy a nem kívánt molekulákból adódó szennyeződések nagy biztonsággal kiküszöböljünk, és csak a vizsgálni kívánt molekulák jussanak el a kontaktushoz.



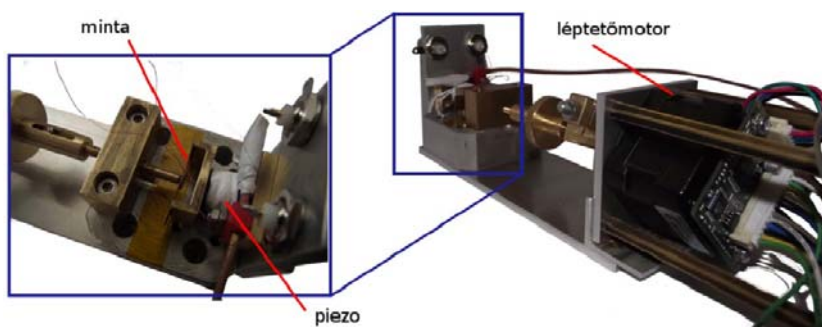
1. ábra: Molekulaadagolásra alkalmas mérőrendszer fényképe (a), a vákuumrendszer összeállítása (b) és a folyékony héliumba helyezett mérőfej kialakítása (fűthető cső, elektromágnessel nyitható rész, zeolit csapda)

A pályázati ciklus utolsó évében mérőrendszerünket egy további funkcióval is bővítettük. A törőkontaktus elrendezésben a fémzárlat egyik végét egy hangvilla alakú kvarcoszcillátorhoz rögzítve lehetőség nyílt a nanokontaktus vezetőképessége mellett a kontaktusban ébredő erők vizsgálatára is, amit a kvarcoszcillátor rezonanciafrekvenciájának eltolódásából detektálhatunk. Sikeresen összeállítottunk egy olyan mérési elrendezést, mellyel a kvarcoszcillátor atom-atom távolságnál lényegesen kisebb,  $0.15\text{\AA}$ -ös rezgési amplitúdója mellett pár százalékos pontossággal sikerült kimérni egy egyatomos kontaktusban ébredő erő távolság szerinti változását [8]. A molekuláris kontaktusok továbbiakban tervezett vizsgálatához az erőmérés fontos kiegészítő technikát biztosít.

2. ábra: A kontaktusban ébredő erő méréséhez kvarcórákban használt hangvilla alakú oszcillátort használunk. Az oszcillátor kiemelkedően nagy jósági tényezőjének köszönhetően atomi méretskálán fellépő erők nagy pontosságú detektálása is lehetséges [8].



Ugyan a kutatási pályázatoknak nem közvetlen célja a tudomány népszerűsítése, érdemes megemlíteni, hogy a pályázati ciklus alatt egy automatizált demonstrációs mérőeszközt is fejlesztettünk, mellyel egyetemi nyílt napon vagy más nyilvános fórumon egy kis asztalon bemutatható az egyatomos kontaktus kialakulását bizonyító kísérlet [10].



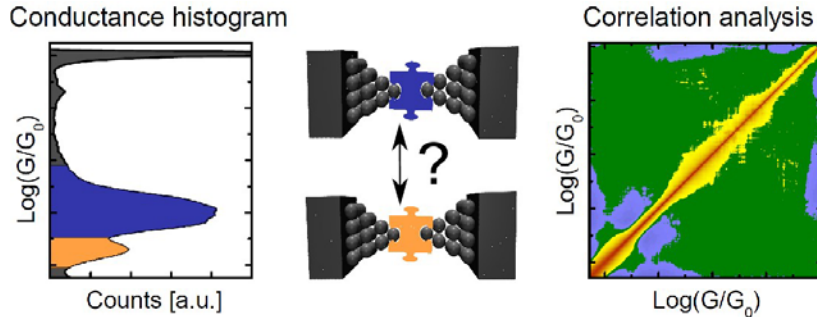
3. ábra: Egy laptop és egy USB csatlakozású mérőkártya segítségével bárhol összeállítható, egyatomos arany kontaktusok kialakulását demonstráló szobahőmérsékleti mérőrendszer [10].

## II. Vezetőképesség-görbék vizsgálata korreláció-analízissel

Atomi méretű kontaktusok legáltalánosabb mérési módszere a vezetőképesség-hisztogram technika [H1]. A nanovezeték szakítása közben ún. vezetőképesség-görbét veszünk fel, melyek a vezetőképesség változását mutatják az elektródák széthúzásának függvényében. A kontaktus ismételt széthúzása és összenyomása során nagymennyiségű (~1000-10000) vezetőképesség-görbe vehető fel, mely lehetővé teszi a statisztikailag releváns, gyakran előforduló atomi konfigurációk azonosítását. Ezen konfigurációkat a vezetőképesség-görbék alapján készített vezetőképesség-hisztogramban megjelenő csúcsok jellemzik. A hisztogram azonban csak korlátozott információt szolgáltat a vizsgált nanovezetékekről. További információ nyerhető nagy energiabontást, kiemelkedő stabilitást és alacsony hőmérsékletet igénylő egyéb módszerek (subgap spektroszkópia, vibrációs spektroszkópia, sörétzaj mérések, vezetőképesség fluktuáció mérések) segítségével. Komplex szerves molekulák vizsgálata azonban alacsony hőmérsékleten nehezen megvalósítható, így az egyedi szerves molekulákból kialakított nanokontaktusokat világszerte szinte kizárólag vezetőképesség-hisztogram módszerrel vizsgálják. A pályázat keretében célul tűztük ki egy olyan vizsgálati módszer kialakítását, mely csupán a vezetőképesség-görbék progresszív statisztikai analízisével a vezetőképesség hisztogramokon jelentősen túlmutató információt szolgáltat.

Az inspirációt a nanofizikában elterjedt zajmérések szolgáltatták [H3], melyek az időbeli korrelációk vizsgálatával a mért mennyiség átlagértékén túlmutató információt adnak. Atomi méretű kontaktusoknál a vezetőképesség-hisztogram tekinthető átlagértéknek, mely az egyes atomi konfigurációk relatív előfordulási gyakoriságát adja meg. Érdekes azonban két konfiguráció (pl. egy molekula két különböző kötési állapota) egymáshoz való viszonyát is vizsgálni. Elképzelhető, hogy egy adott molekuláris konfigurációból további széthúzás közben egy másik jól meghatározott konfiguráció szeret kialakulni, vagy éppen ellenkezőleg, egy adott konfiguráció után egy másik konfiguráció sosem alakul ki. Ezen jelenségek a vezetőképesség-görbék általunk kifejlesztett keresztkorreláció-analízise segítségével vizsgálhatók. A korreláció-analízisre két eljárást is javasoltunk, a feltételes hisztogramok és a kétdimenziós korrelációs hisztogramok módszerét. Feltételes hisztogramok esetén kiválasztjuk azokat a vezetőképesség-görbét, melyek egy adott hisztogramcsúcshoz az átlagosnál nagyobb járulékot adnak. Ezután megvizsgáljuk, hogy az így kiválasztott görbékre felrajzolt (görbék számára normált) hisztogramban más csúcsok amplitúdója hogyan változik a teljes adatsorra készített hisztogramhoz képest. Ha két konfiguráció kialakulása független egymástól, akkor az egyik konfigurációra történő válogatás nem befolyásolja a másik konfiguráció súlyát. Együtt jelentkező konfigurációk esetén az egyikre történő válogatás esetén a

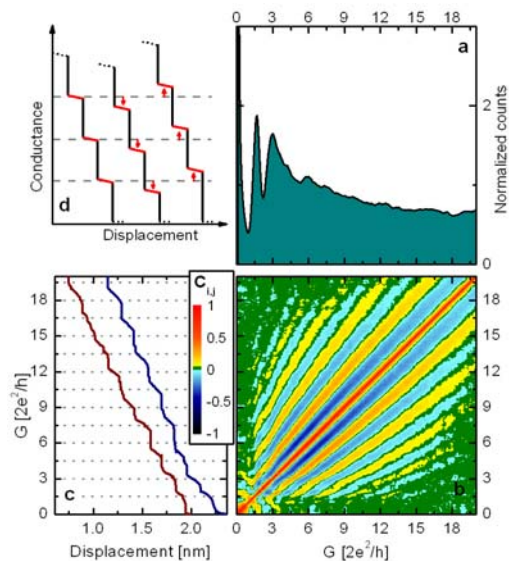
másik súlya is megnő, míg egymást kizáró konfigurációkra az egyikre történő válogatás a másik súlyának elnyomásához vezet. A kétdimenziós keresztkorreláció-analízis esetén hasonló jelenségeket egy kétdimenziós hisztogram segítségével vizsgálunk, melynek  $x$  és  $y$  tengelye a két konfiguráció vezetőképessége, a színskála pedig a megfelelő korrelációs függvénnyel számított korreláció értékét mutatja (4. ábra).



4. ábra: Bal oldal: arany elektródákkal kontaktált 4,4' bipyridin molekulák vezetőképesség-hisztogramja [H4]. A hisztogramban megjelenő két csúcs a molekula két kötési állapotának felel meg. A vezetőképesség-hisztogram azonban nem ad információt a két molekuláris konfiguráció egymáshoz való viszonyáról, ehhez kétdimenziós korrelációs hisztogramokat kell vizsgálni (bal oldal), melyen a kék tartományok negatív, a sárga/piros tartományok pozitív a zöld tartományok pedig zérus korrelációt jeleznek.

A korreláció-analízis segítségével számos anyagban vizsgáltuk atomi és molekuláris konfigurációk egymáshoz való viszonyát [1,3,7]. Ezek közül a továbbiakban Ni nanovezetékek [3,7], Au és Pt atomi láncok [6,11], illetve Pt-CO és 4,4'-bipyridin molekuláris kontaktusok vizsgálatát ismertetjük röviden [1,7,9].

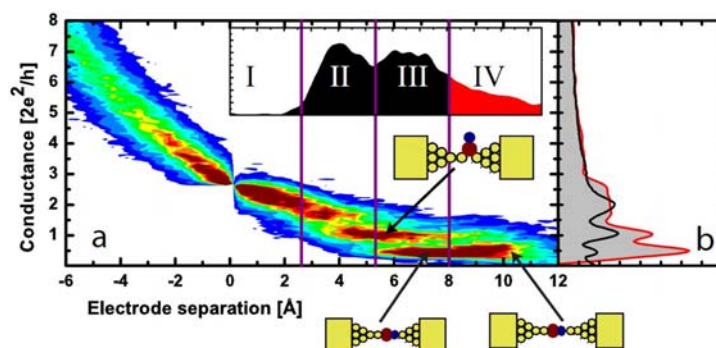
Egy kontaktus vezetőképességét alapvetően meghatározza a legkisebb keresztmetszetben található atomok száma, azonban a legkisebb keresztmetszettel szomszédos tartomány is jelentős mértékben befolyásolhatja a vezetőképességet. Olyan fémekben, ahol a transzport izotrop  $s$ -pályákon keresztül történik a kontaktus legkisebb keresztmetszete jó közelítéssel meghatározza a vezetőképességet, amit a szomszédos elektródák pontos szerkezete csak kisebb mértékben módosít. Ha viszont a transzport irányított  $d$ -pályákon keresztül történik (pl. Ni kontaktusokban), akkor a szomszédos atomok pontos elhelyezkedése sokkal jelentősebb mértékben befolyásolja a vezetőképességet. Így Ni kontaktusokban két hasonló legkisebb keresztmetszetű, de különböző atomi környezetben kialakuló kontaktus vezetőképessége jelentősen eltérhet egymástól, ami a hisztogram elmosódásához vezet. A kísérletek alapján a vezetőképesség-hisztogram valóban csak két széles csúcsot mutat, és  $G=5G_0$  ( $G_0=2e^2/h$ ) vezetőképesség felett már nem tapasztalunk struktúrát. Ezzel szemben a 2D korrelációs ábra egészen magas vezetőképességig gazdag struktúrát mutat. A korrelációs ábráról leolvasható, hogy két egymás utáni konfiguráció közötti vezetőképesség különbség jól definiált, azonban a sztochasztikusan változó atomi környezet miatt egy adott konfiguráció vezetőképessége szakításról szakításra jelentősen fluktuál. Ez a hisztogram teljes elmosódásához vezet, azonban a korrelációs ábrán felbontható a vezetőképesség-platók korrelált eltolódása. A korreláció analízis alapján megállapítható, hogy Ni kontaktusok nagyon rendezett atomonkénti vékonyodást mutatnak, ami a vezetőképesség hisztogramban teljes mértékben rejtve marad [3,7].



5. ábra: Ni nanovezetékek korreláció analízise. (a) Vezetőképesség hisztogram, melyben  $5G_0$  vezetőképesség fölött nem látszik jelentős struktúra. (b) 2D korrelációs hisztogram, melyben az átlóval majdnem párhuzamos pozitívan és negatívan korrelált csíkok váltogatják egymást. Ezen csíkok alapján leolvasható, hogy egy adott vezetőképességű konfigurációt milyen vezetőképességű konfigurációk előznek meg illetve követnek. (c) tipikus vezetőképesség-görbék. (d) A vezetőképesség-görbék korrelált eltolódásának szemléltetése. Szakításról szakításra a platók pozíciója változik, azonban a szomszédos platók egymástól mért távolsága állandó.

Egy másik tanulmányban az atomi láncképződés jelenségét vizsgáltuk korreláció analízissel [6,11]. Az irodalomból ismert, hogy bizonyos anyagokban egy egyatomos kontaktus további széthúzás hatására nem szakad el, hanem egy atom keresztmetszetű, és akár 5-6 atom hosszú atomi láncok húzhatók [H5]. Korreláció analízissel azt vizsgáltuk, hogy a láncképződés kialakulását hogyan befolyásolja az egyatomos kontaktus előtti konfigurációk jellege. Az adatok elemzéséből egyértelmű korrelációt állapítottunk meg: a láncok nagyobb vezetőképességű megelőző konfigurációból alakulnak ki, mint azok az egyatomos kontaktusok, melyekből nem képződik lánc. Ennek egy lehetséges oka, hogy a láncképződés jelensége erősen függ a kontaktus domináns kristálytani orientációjától. Jelenleg ezt a felvetést együttműködő elméleti csoportok vizsgálják, az eredmények publikálását az elméleti számítások elvégzése után tervezzük [6].

Szintén érdekes kérdés atomi láncok és molekulák kölcsönhatásának vizsgálata. Kísérleteinkben a pályázat keretében fejlesztett molekulaadagoló rendszerrel CO molekulákat juttatunk Pt kontaktusokhoz. A vezetőképesség-hisztogram két új molekuláris konfiguráció kialakulását mutatja, azonban a hisztogram önmagában nem ad több információt ezen molekuláris konfigurációk jellegéről. Elméleti számítások alapján a  $G=1G_0$  vezetőképességű molekuláris konfiguráció egy Pt kontaktushoz merőlegesen kötődő CO molekulának, míg a  $G=0.5G_0$  vezetőképességű konfiguráció a kontaktusba párhuzamosan beépült molekulának felel meg [H6]. Ezen molekuláris konfigurációkat a korreláció analízis, a feltételes hisztogram technika és az irodalomból ismert 2D vezetőképesség-elmozdulás hisztogram technika [H4,H7] kombinálásával részletesen sikerült feltérképezni (6. ábra) [5,7,9]. Kísérleteink megmutatták, hogy: (i) CO környezetben tiszta atomi láncok nem képződnek. (ii) Az esetek nagy többségében a szakítás közben beépül egy merőleges állású CO molekula a kontaktusba. Ez a molekuláris konfiguráció elég erős ahhoz, hogy rajta keresztül platina atomi láncot lehessen húzni. (iii) a szakítások egy részében a merőleges állású CO molekula befordul párhuzamos állásba, azonban ez egy véletlen esemény, nem szükségszerű következménye a merőleges konfiguráció kialakulásának. A párhuzamos konfiguráció szintén elég erős kötést alkot ahhoz, hogy atomi Pt láncokat húzzunk rajta keresztül.



6. ábra: 2D vezetőképesség-elmozdulás hisztogram a hosszú láncot húzó görbékre. Ezen feltételes 2D hisztogramok alapján a kontaktus kialakulásának folyamata pontosan végigkövethető.

Napjainkban világszerte széles körben kutatják komplex szerves molekulák vezetési tulajdonságait vezetőképesség-hisztogram módszerrel. A kifejlesztett korrelációs módszerrel a Columbia egyetem kísérleti csoportjának Au-4,4'-bipyridin molekuláris kontaktusokon mért adatait elemeztük (4. ábra). Ezen molekulák két jól elkülönülő kötési konfigurációban épülhetnek be a kontaktusba. A korreláció analízissel megmutattuk, hogy a két kötési állapot egymás után jelentkeznek, azonban a két állapot közötti átugrás egy jól meghatározott vezetőképesség-tartományon belül véletlenszerűen változó esemény [1]. Ezen eredmény jól mutatja, hogy a korreláció-analízis szobahőmérsékleti, szerves molekulákon végzett mérések elemzésére is jól használható.

Összegzésként elmondható, hogy a korreláció-analízis a hagyományos hisztogram technikán jelentősen túlmutató információt szolgáltat atomi és molekuláris kontaktusok tanulmányozásához. A pályázat keretében számos különböző atomi és molekuláris rendszer korreláció analízisét elvégeztük. Reményeink szerint a korreláció analízis alapjait és alkalmazását részletesen bemutató [1] publikáció alapján a 2D korrelációs hisztogramok a vezetőképesség hisztogramhoz hasonlóan elterjedt vizsgálati módszeré válhatnak.

### III. Atomi méretű kontaktusok vizsgálata *subgap* módszerrel

Hagyományos vezetőképesség-hisztogram módszerrel atomi és molekuláris konfigurációk teljes vezetőképessége állapítható meg, mely a Landauer formula szerint  $2e^2/h \sum_i \tau_i$  képlettel írható fel. A  $\tau_i$  együtthatók a kontaktusra jellemző kvantummechanikai vezetési csatornák transzmissziós valószínűségei. A vezetési csatornák vizsgálatához, és az egyes  $\tau_i$  transzmissziós együtthatók meghatározásához speciális mérések szükségesek. Szupravezető elektródák alkalmazása esetén a feszültség-áram karakterisztikákban jelentkező szupravezető *subgap* struktúrák segítségével [H8] pontosan beazonosíthatók a molekuláris kontaktusok vezetési csatornái, és azok transzmissziós együtthatói.

A pályázat keretében részletes minősítő méréseket végeztünk különböző szupravezető anyagok (Nb, V, Sb, Pb, Sn, In) atomi méretű kontaktusainak vizsgálatára [7]. Ezen eredményeket elméleti csoportokkal együttműködve sikeresen alkalmaztuk újszerű szimulációs módszerek fejlesztésére (lásd IV. pont.). A csatornatranszmissziók vizsgálatára egy statisztikai módszert vezettünk be: mintegy 500 különböző vezetőképességű kontaktus csatorna-transzmisszióinak átlagértékét

ábrázoljuk a teljes vezetőképesség függvényében, mely jól szemlélteti a vezetési csatornák adott anyagra jellemző kinyílását.

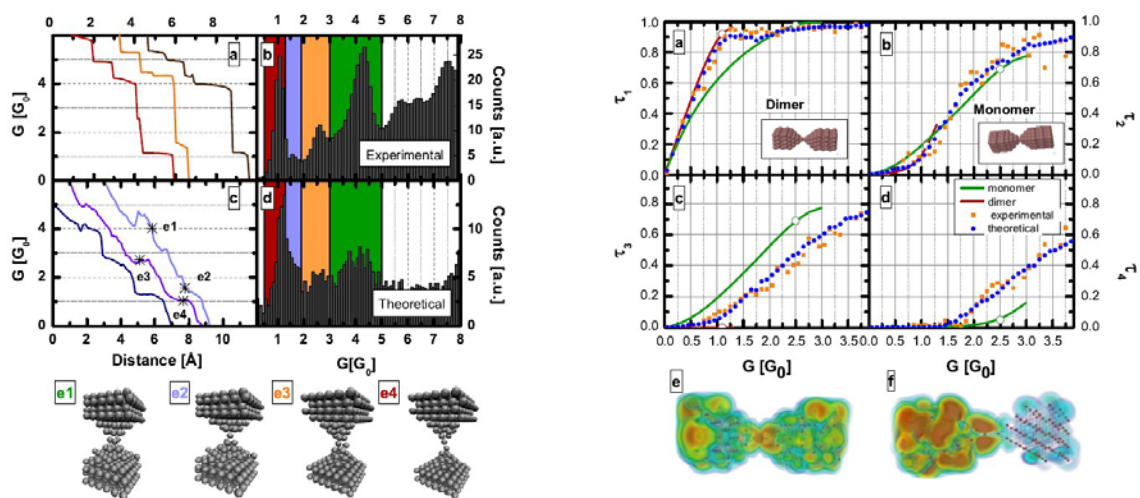
Molekuláris kontaktus esetén is hasznos információt nyújthat a csatornatranszmissziók vizsgálata. Kísérleteink alapján azonban a molekula-adagoláshoz használt kapillárisfűtés (~80K) mellett nehéz elkerülni, hogy a nanokontaktus hőmérséklete is pár fokot emelkedjen, így nehéz biztosítani a szupravezető kritikus hőmérsékletnél lényegesen alacsonyabb hőmérsékletet. A fűtés lekapcsolása után viszont a kontaktus „kitisztul”, és így a molekuláris kontaktusok már nem tanulmányozhatók. Ezen tapasztalatok alapján a molekuláris kontaktusok vizsgálata során a subgap módszer helyett a korábbiakban ismertetett széles körben alkalmazható korreláció analízis fejlesztésére helyeztük a hangsúlyt.

#### **IV. Vezetőképesség-hisztogramok szimulációs technikáinak fejlesztése**

Atomi és molekuláris kontaktusok vizsgálatánál a kísérleti eredmények értelmezéséhez komoly segítséget nyújt a kontaktus elméleti szimulációja. Erre egyre fejlettebb módszerek állnak rendelkezésre, a pontosabb módszerek általában sűrűségfüggvény-elmélet (DFT) segítségével oldják meg a kontaktusra vonatkozó Schrödinger egyenletet, és az így kapott megoldás alapján számolják a kontaktus vezetési tulajdonságait. Ez komoly számítási kapacitást igényel, így ez a módszer leggyakrabban csak pár – kísérleti eredmények alapján feltételezett – konfiguráció szimulálását célozza meg. A kísérletekből azonban világosan látszik, hogy a szakítási folyamatok sztochasztikus jellege miatt komoly következtetéseket csak sok vezetőképesség-görbe statisztikai vizsgálatából vonhatunk le. Ennek megfelelően az elméleti számításoknál is kívánatos lenne nagymennyiségű szakítási görbe szimulációja, és ez alapján vezetőképesség-hisztogram készítése.

Elméleti csoportokkal történő együttműködés keretében egy erre alkalmas szimulációs módszer fejlesztését tűztük ki célul, mely a szakítási folyamatokat klasszikus molekula-dinamika segítségével számolja, majd minden konfigurációnál DFT számítások segítségével határozza meg a vezetési tulajdonságokat [2]. Ezen kívül a molekula-dinamikai szimulációkban használt potenciálok paramétereit is a DFT számítások szolgáltatják. A szimulációk „megmérettetését” a kísérletileg mért hisztogrammal történő összehasonlítás mellett a vezetési csatornák transzmissziós valószínűségeinek összehasonlítása adja, mely a vezetőképesség hisztogramnál sokkal részletesebb összehasonlítást tesz lehetővé. Ehhez alanyként szupravezető indium kontaktusokat választottunk.

A szimulációk mind a vezetőképesség-hisztogram, mind az egyedi csatornatranszmissziók szintjén meggyőző egyezést mutattak a kísérleti eredményekkel. Ezzel szemben az irodalomban gyakran használt ideális kontaktus-geometriák esetén a szimulált csatornatranszmissziók jelentősen eltértek a kísérleti értékektől. Mindez azt mutatja, hogy a klasszikus molekula-dinamikai szimulációk tökéletlensége ellenére a kifejlesztett módszerrel az irodalomban bevett gyakorlatnál lényegesen „élethűbb” képet kapunk a kialakuló atomi konfigurációk jellegéről.



7. ábra: Indium nanokontaktsokon végzett mérések és szimulációk. Bal oldal: vezetőképesség görbék és hisztogramok (kísérlet: a,b; elmélet: c,d). Alul (e1-e4): a különböző vezetőképesség-tartományokra jellemző atomi konfigurációk. Jobb oldal: az első négy csatornatranszmisszió változása a teljes vezetőképesség függvényében. A szimulált csatorna transzmissziók (kék pontok) pontosan követik a kísérleti értékeket (narancssárga pontok) Egy ideális szimulált monomer konfiguráció transzmissziói (zöld vonal) azonban jelentősen eltérnek a kísérleti eredményektől.



## V. Eredmények publikálása; PhD, diploma és TDK tevékenység

### A pályázat során elért eredményeket ismertető publikációk:

#### Megjelent / benyújtott szakcikkek:

- [1] **P. Makk**, D. Tomaszewski, J. Martinek, **Z. Balogh**, **Sz. Csonka**, M. Wawrzyniak, M. Frei, L. Venkataraman, **A. Halbritter**, Correlation Analysis of Atomic and Single-Molecule Junction Conductance, submitted to ACS NANO (2012)
- [2] **Makk P**, Visontai D, Oroszlany L, Manrique DZ, **Csonka S**, Cserti J, Lambert C, **Halbritter A**, Advanced Simulation of Conductance Histograms Validated through Channel-Sensitive Experiments on Indium Nanojunctions, PHYSICAL REVIEW LETTERS 107 276801 (2011)
- [3] **A Halbritter**, **P Makk**, Sz Mackowiak, Sz Csonka, M Wawrzyniak, J Martinek, Regular Atomic Narrowing of Ni, Fe, and V Nanowires Resolved by Two-Dimensional Correlation Analysis, PHYSICAL REVIEW LETTERS 105 266805. (2010)
- [4] Dora B, **Halbritter A**, Temperature-dependent conductance of deformable molecular devices, PHYSICAL REVIEW B 80 155402. (2009)

#### Szerkesztés alatt álló szakcikkek:

- [5] **P. Makk**, **Z. Balogh**, **Sz. Csonka**, **A. Halbriter**, *Pulling platinum chains by carbon-monoxide molecules*
- [6] **P. Makk**, **L. Posa**, **Sz. Csonka**, **A. Halbriter**, *Correlation analysis of atomic chain formation process*

#### Szkdolgozatok:

- [7] Makk Péter: *Investigation of atomic and molecular nanojunctions beyond conductance histograms*, PhD dolgozat (bírálati fázisban)
- [8] Magyarkuti András: *Vezetőképesség és erő egyidejű mérése atomi méretű kontaktusokban*, TDK dolgozat (2011.)
- [9] Balogh Zoltán: *Molekuláris kontaktusok vizsgálatára alkalmas mérőrendszer fejlesztése*, TDK dolgozat (2011.)
- [10] Magyarkuti András: *Atomi méretű kontaktusok „memória jelenségeinek” vizsgálatára alkalmas mérőrendszer fejlesztése*, BSC szakdolgozat (2011)
- [11] Pósa László: *Atomi szintű önszerveződő struktúrák vizsgálata törőkontaktus módszerrel*, TDK dolgozat (2010.)
- [12] Pósa László: *Edzés és hőkezelés hatása atomi méretű kontaktusok viselkedésére*, BSC szakdolgozat (2010.)
- [13] Balogh Zoltán: *Atomi és molekuláris kontaktusok nemlineáris jelenségei*, BSC szakdolgozat (2010.)
- [14] Vigh Máté *Atomi és molekuláris nanokontaktusok új vizsgálati módszerei*, MSC szakdolgozat (2010.)

**A fenti publikácók mellett a pályázat támogatása az alábbi publikációkon is feltüntetésre került. Ezek a publikációk a pályázat keretében fejlesztett kísérleti technikákhoz kötődnek, de a kutatás témáját tekintve nem kapcsolódnak a jelen pályázathoz.**

- [15] A Geresdi, A Halbritter, F Tanczikó, G Mihály, *Direct measurement of the spin diffusion length by Andreev spectroscopy*, APPLIED PHYSICS LETTERS **98** 212507. (2011)
- [16] A Geresdi, A Halbritter, A Gyenis, P Makk, G Mihály, *From stochastic single atomic switch to nanoscale resistive memory device*, NANOSCALE **3** 1504-1507. (2011)
- [17] Geresdi A, Halbritter A, Mihaly G, *Transition from coherent mesoscopic single-particle transport to Josephson proximity current*, PHYSICAL REVIEW B **82** 212501. (2010)

## **A pályázati eredmények ismertetése konferenciákon és szakmai fórumokon:**

### **Szóbeli előadások:**

**Halbritter András:** *Novel statistical methods in the study of atomic-sized and molecular nanojunctions*, 2011. Lancaster University

**Halbritter András:** *Regular atomic narrowing of Ni, Fe and V nanowires resolved by two-dimensional correlation analysis*, 2011, La Thuile, Recontres de Moriond konferencia

**Halbritter András:** *Characterization of single atom and single molecule junctions*, 2011. Budapest EuroNanoForum nemzetközi konferencia

**Halbritter András:** *Electron transport in single-molecule junctions*, 2011. Keszthely, Nano-CTM nemzetközi konferencia (meghívott előadóként)

**Halbritter András:** *Characterization methods of single-atom and single-molecule nanojunctions*, 2011. University of Duisburg-Essen

**Halbritter András:** *Correlation analysis of atomic and molecular nanojunctions*, 2010. Emmetten, International Conference on Molecular Electronics

**Halbritter András:** *Kvantumjelenségek atomi méretű kontaktusokban*, 2010. ELTE, Bolyai kollégium

**Halbritter András:** *Electron transport in atomic and molecular nanojunctions*, 2009 Poznan University

**Makk Péter:** *Identifying stable atomic configurations by correlation analysis*, 2010. Muggendorf Workshop of FunMols training group

**Makk Péter:** *Superconducting spectroscopy and correlation analysis*, 2009. Basel University

**Vigh Máté:** *Correlation analysis of atomic and molecular nanojunctions*, 2009. Ráckeve, European Graduate Collage Workshop

### **Poszter előadások:**

**Halbritter András:** *Identifying stable atomic configurations by the correlation analysis of conductance traces*, 2010. Budapest „Time-dependent dynamics and non-equilibrium quantum systems” nemzetközi konferencia

**Makk Péter:** *Interaction of H<sub>2</sub> with superconducting nanojunctions*, 2009. Ráckeve Workshop of the European Graduate College

**Makk Péter:** *Huge negative differential conductance in Au-H<sub>2</sub> nanojunctions*, 2010. Emmetten International conference on molecular electronics

**Makk Péter:** *Characterization of atomic junctions by superconducting subgap spectroscopy*, 2010. Budapest Time-dependent dynamics and non-equilibrium quantum mechanical systems nemzetközi konferencia

**Makk Péter:** *Identifying stable atomic configurations by the correlation analysis of conductance traces*, 2010. Braga Trends in Nanotechnology nemzetközi konferencia

**Makk Péter:** *Characterization of atomic and molecular junctions by superconducting sub-gap method*, 2010 Malvern Joint FUNMOLS and Nano-CTM nemzetközi konferencia

**Makk Péter:** *Channel sensitive theoretical and experimental analysis of indium nano-Junctions*, 2011 La Thuile Moriond, Quantum Mesoscopic Physics nemzetközi konferencia

**Makk Péter:** *Channel sensitive theoretical and experimental analysis of indium nano-Junctions*, 2011 Keszthely: Nanoelectronics beyond the roadmap nemzetközi konferencia

## VI. A projekthez kapcsolódó díjak, elismerések:

- Halbritter András – Bolyai ösztöndíj (2009-2012.)
- Makk Péter – BME kutatói pályázat 2. díj (2010.)
- Magyarkuti András – Kari TDK konferencia 1. díj, dékáni különdíj (2011.)
- Balogh Zoltán – Kari TDK konferencia 2. díj (2011.)
- Pósa László – Kari TDK konferencia 2. díj (2010.)

## VII. Hivatkozások:

[H1] Agrait, N.; Levy Yeyati, A.; van Ruitenbeek, J. M. Phys. Rep. 2003, 377, 81–279.

[H2] Cuevas, J. C.; Scheer, E., *Molecular Electronics An introduction to Theory and Experiment*; World Scientific: Singapore, 2010

[H3] Oliver, W. D.; Kim, J.; Liu, R. C.; Yamamoto, Y., Science, 1999, 284, 299–301.; Henny, M.; Oberholzer, S.; Strunk, C.; Heinzel, T.; Ensslin, K.; Holland, M.; Schnenberger, C. Science 1999, 284, 296–298.

[H4] Quek, S. Y.; Kamenetska, M.; Steigerwald, M. L.; Choi, H. J.; Louie, S. G.; Hybertsen, M. S.; B., N.; Venkataraman Latha, Nature Nanotechnology 2009, 4, 230–234.

[H5] Yanson, A. I.; Rubio Bollinger, G.; van den Brom, H. E.; Agrait, N.; van Ruitenbeek, J. M. Nature 1998, 395, 783–785.

[H6] Strange, M.; Thygesen, K. S.; Jacobsen, K. W. Phys. Rev. B 2006, 73, 125424.

[H7] Martin, C. A.; Ding, D.; Sørensen, J. K.; Björnholm, T.; van Ruitenbeek, J. M.; van der Zant, H. S. J. Journal of the American Chemical Society 2008, 130, 13198–13199.

[H8] Scheer, E.; Agrait, N.; Cuevas, J. C.; Levy Yeyati, A.; Ludoph, B.; Martín-Rodero, A.; Rubio Bollinger, G.; van Ruitenbeek, J. M.; Urbina, C. Nature 1998, 394, 154–157.