

# Pásztázó alagútmikroszkóp szimulációja első elvekből

Máncdi Gábor

Témavezető: Dr. Palotás Krisztián

## Összefoglaló

Feltalálása óta a pásztázó alagútmikroszkóp (STM) nagyban hozzájárult a nanotechnológia és nanotudomány gyors fejlődéséhez és a mai napig aktívan használt eszköz az anyagtudomány számos ágában a legkülönbözőbb felületek vizsgálatára.

Az STM nem egyszerűen a felület geometria struktúráját térképezi fel, a felületről készített topográfiát a minta és a tű elektron-állapotsűrűségének konvolúciója is befolyásolja. Ez megnehezíti a kísérleti STM képek értelmezését, ezért rendkívül fontos az STM elméleti modellezése is, amely a PhD kutatásaim fő témája volt.

Alapvetően hozzájárultam a pályafüggő 3D-WKB elektron alagút modell kifejlesztéséhez és implementálásához, amely rendkívül hatékonyan képes nagy felbontású STM és SP-STM képek szimulációjára. Megvizsgáltam tű-minta távolság és az alagútfeszültség függvényében megfigyelhető korrugáció inverzió jelenségét a nem mágneses W(110) és a mágneses Fe(110) felületen és a jelenséget az alagutazásban részt vevő elektronállapotok térbeli irányultságával, valamint az minta és a tű elektron állapotainak komplex összjátékával magyaráztam.

Kiterjesztettem a modellt tetszőleges tű orientáció szimulációjára és tanulmányoztam a W(110) felületet számos tű orientáció mellett, feltártam és megmagyaráztam a korrugáció inverzió komplex tű-minta távolság, alagút feszültség és tű orientáció függését. Szintén megvizsgáltam a tű forgatások hatását grafit (HOPG) felületen és megmutattam, hogy az  $m \neq 0$  tű állapotok képesek az STM képen a háromszöggrácsból hatszöggrács kontraszt átmenetet létrehozni.

Bemutattam egy újszerű korrelációs analízis módszert, mellyel kvantitatíven összehasonlíthatóvá váltak elméleti modellekkel számolt és kísérleti STM képek, valamint egy statisztikai módszert, mellyel információ nyerhető a kísérletben használt tű geometriájáról és a tű-minta relatív orientációról.

Kiterjesztettem Chen derivált szabályát, hogy kombinálható legyen első elvekből számított elektronszerkezet adatokkal. A modellt két olyan felületen validáltam, ahol a kvantum interferencia effektusok jelentősek az alagutazás során (nitrogénnal szennyezett grafén felület és a mágneses Mn<sub>2</sub>H komplex Ag(111) felületen) és megmutattam, hogy az  $s$  és  $p_z$  tű állapotok között fellépő interferencia felelős a kontraszt változásokért mindkét vizsgált rendszerben.

Mindkét alagútmodell gyors és megbízható eszköznek bizonyult STM képek szimulációjára, amelyek figyelembe veszik a tű elektronszerkeze és lokális geometriája mellett annak tetszőleges orientációját is.