

Mezoszkopikus rendszerek fizikája

Hétfő 13:30 Marx-terem

- 1. Bernád József Zsolt (ELTE TTK)**
- 2. Kálmán Orsolya (SZTE TTK)**
- 3. Nemes-Incze Péter (BBTE)**
- 4. Pekker Áron (BME TTK)**
- 5. Rusznyák Ádám (ELTE TTK)**
- 6. Szekrényes Zsolt (BBTE)**

Kettős kvantumdoton alapuló detektor elmélete

BERNÁD JÓZSEF ZSOLT, fizikushallgató (2003 ősz)

Eötvös Loránd Tudományegyetem, Budapest

Témavezető: GESZTI TAMÁS, egyetemi tanár,
ELTE Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék

A dolgozat célja, hogy a kettős kvantumdot elektron-detektorként való új alkalmazására adjon elméleti számolásokat. Ezért egy olyan kettős kvantumdot-rendszert vizsgálunk, amelynek egyik dotja Coulomb-kölcsönhatásban van egy elektron csapdával. Már eddig is vizsgáltak ilyen típusú berendezés, de csak egy dot volt kölcsönhatásban a csapdával. Mivel a két dot esetén a paraméterek tere bővül, ezért egy sokkal érzékenyebb detektor megtalálása lenne a céloom ebben a dolgozatban.

A kapott rendszert leírva a master-egyenlettel megkapjuk a sűrűségmátrix időbeli fejlődését. A választott elméleti eljárás eltér az irodalomban megjelent módszertől, ami a perturbáció számításán alapszik. A két módszer ekvivalenciája megmutatkozik a dolgozatban kiszámolt képletek azonosságában.

A sűrűségmátrix ismeretében kiszámoltam a rendszeren átfolyó stacionárius áramot. Itt is új oldalról közelítettem meg a számolásokat, felhasználva a Ramo-Shockley tételt. A teljes csatolt differenciálegyenletrendszert iterációs módszeren alapuló numerikus eljárással is megoldottam. Az áram változásában voltak olyan időintervallumok, amik egyértelműen jelezték, ha volt elektron a csapdában. Kérdés maradt a zaj kiszámolása, illetve a nem-stacionárius áram analitikus leírása. Ezeket a részeket már a TDK-dolgozat megírása után sikerült megoldani, az már a diplomamunkám kereteibe tartozik.

Egyszerű kvantumos kapuk és a teleportáció gömbi Wigner-függvényes leírása

KÁLMÁN ORSOLYA, fizikus szakos hallgató (2004 tavasz)
Szegedi Tudományegyetem, Szeged

Témavezető: BENEDICT MIHÁLY, egyetemi docens,
SZTE Elméleti Fizikai Tanszék

A kvantummechanika megszületése forradalmat jelentett a fizikában. Ez a rendkívül sikeres elmélet ugyanakkor számos paradox, a klasszikus szemlélet számára szokatlan jelenséget is felfedezett, melyek mögött rendszerint a kvantummechanika két különös fogalma áll: az *összefonódottság* és a *kvantummechanikai mérés*.

Az összefonódott kvantumállapotokról kiderült, hogy sokoldalúan felhasználhatók, így megszületett a kvantuminformáció elmélete, amely az információelmélet és a számítástechnika egy új területének tekinthető. Itt az információ alapegysége egy kétállapotú kvantumrendszer, a kvantumbit (*qubit*) valamely állapota. A klasszikus logikai biteknek kvantumbitek felelnek meg és a kvantummechanika szabályai érvényesek rájuk. Fejlődésnek indult a kvantumkommunikáció és kvantum-számítástechnika.

Tudományos diákköri dolgozatomban a kvantuminformáció manipulálásának egyik alapvető eljárását, a *kvantumteleportációt* elemeztem. A teleportáció nem más, mint a fizikai rendszer állapotának megsemmisítése és későbbi előállítása más helyen összefonódott állapotok és klasszikus kommunikáció segítségével. Jelen munka célja az volt, hogy a teleportációt az eddig erre a célra nem használt úgynevezett gömbi Wigner-függvényekkel írjam le. Mindehhez szükség volt a teleportáció során alkalmazott egyszerű kvantumos kapuk leírására is ugyanilyen típusú Wigner-függvényekkel.

Számításaim alapján megállapítottam egy általános két qubites állapot gömbi Wigner függvényét, továbbá megmutattam, hogy a Wigner függvény alkalmas az egyszerű kvantumos kapuk (2×2 -es unitér transzformációk) és a teleportáció leírására. Az eljárás igen szemléletes képet nyújt: a kapuk a Wigner függvények elforgatásainak felelnek meg, melyek segítségével a teleportáció is végigkövethető.

Szén nanocsövek előállítása benzolszármazékok pirolízisével katalizátorok jelenlétében

NEMES-INCZE PÉTER, fizika szakos hallgató
Babes-Bolyai Tudományegyetem, Kolozsvár

Témavezető: DARABONT SÁNDOR, egyetemi tanár
BBTE Anyagtudományi és Fejlett Technológiák Tanszék

Az utóbbi években a szén nanocsövekkel foglalkozó publikációk száma rohamosan megnőtt. Ez annak tulajdonítható, hogy egyre erőteljesebb tudományos kutatás folyik ezen a téren. Ezen kutatási munka részben a szén nanocsövek kiváló fizikai tulajdonságainak a kihasználása felé irányulnak. Már napjainkban számos gyakorlati alkalmazást kaptak, a Li alapú akkumulátorok elektródáitól, lapos képernyős kijelzőkig. Modern műszaki felhasználásuk érdekében szükséges a szén nanocsövek előállítási folyamatának minél jobb megismerése, hogy különböző alkalmazásoknak megfelelő szén nanocsöveket legyünk képesek nyerni.

Dolgozatomban, a szén nanocsövek előállítását tárgyalom a CVD (Chemical Vapour Deposition) eljárás porlasztásos pirolízis változatával. Kísérleteink során különböző benzolszármazékokat használtunk a nanocsövek növesztésére. Tanulmányoztuk hatásukat a nyert nanocsövek mennyiségére és minőségére. A kapott szén nanocső mintákat tisztítottuk, és HRTEM vizsgálatnak vetettük alá.

Optikai vizsgálatok funkcionalizált szén nanocsöveken

PEKKER ÁRON, mérnök-fizikus szakos hallgató (2004 ősz)
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Budapest

Témavezetők: KAMARÁS KATALIN, tudományos tanácsadó
MTA Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézet

Dolgozatomban a szén nanocsövekhez kötött oldalsoportoknak a cső optikai tulajdonságaira gyakorolt hatását vizsgálom.

A vizsgálatokat egyfalú (SWNT) és többfalú (MWNT) nanocsöveken végeztem, az abszorpciós spektrum közép infravörös (MIR), távoli infravörös (NIR) és látható (VIS) tartományában. Célom a funkcionalizálás kimutatása és az oldalsoportok azonosítása.

Az általam vizsgált tartomány a hordozott információ szempontjából két részre osztható. A NIR/VIS tartományban az abszorpciós csúcsok az állapotsűrűségben megjelenő van Hove szingularitásokhoz köthetők, amik a nanocső elektronszerkezetének egydimenziós jellegéből adódnak. Ezeknek változása a funkcionalizálás során a csőre kapcsolódó oldalsoportok számával hozható összefüggésbe. Ezek a csúcsok a többfalú csöveknél nem megfigyelhetők a széles átmérőeloszlás és az árnyékolás miatt. A MIR/NIR tartományban látszanak a molekuláris rezgéseknek megfelelő csúcsok, amik az oldalsoportokra vonatkozó információt hordozzák. Sajnos itt jelennek meg a nanocsőgyártás és a mintakészítés során a csövek közé keveredett szennyezőkre jellemző csúcsok is, ezért fontos a jó méréshez a tiszta és körültekintően előkészített minta.

Dolgozatomban összefoglalom a szén nanocsövek alapvető tulajdonságait, az optikai mérések elvét. Vázolom a funkcionalizálás hatását, bemutatom a mintakészítési eljárást és kiértékelem az eredményeket.

Irodalom:

- [1.] S. Reich, C. Thomsen, J. Maultzsch: Carbon Nanotubes: Basic Concepts and Physical Properties, Wiley-VCH (2004)
- [2.] K. Kamarás, M. E. Itkis, H. Hu, B. Zhao, R.C. Haddon: Covalent Bond Formation to a Carbon Nanotube Metal, Science 301, 1501 (2003)
- [3.] F. Borondics, E. Jakab, M. Bokor, P. Matus, K. Tompa, S. Pekker: Reductive Functionalization of Carbon Nanotubes, Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures, (elfogadva)

Lineáris szénlánc szén nanocsövekben

RUSZNYÁK ÁDÁM, fizikus (2004 ősz)
Eötvös Loránd Tudományegyetem, Budapest

Témavezetők: KÜRTI JENŐ, egyetemi tanár,
ZÓLYOMI VIKTOR, doktorandusz,
ELTE Biológiai Fizika Tanszék

A szén nanocsövek felfedezését követően nagy erővel indult a kutatás tulajdonságaik felderítésére. Jelen elméleti munka új keletű kísérleti eredményeken alapul, nemrég ugyanis többfalu szén nanocsőről sikerült olyan felvételt készíteni, amin jól láthatóan a legbelső csőben egy szénatomokból álló lánc is helyet foglal. Számolásaink során az izolált lánc fizikai tulajdonságait, valamint ennek a szén nanocsőre való hatását kívántuk felderíteni. Meghatároztuk az egyensúlyi geometriát, aminek ismeretében többek között a sáv szerkezetek felderítésére nyílik lehetőség. A számolások a sűrűségfüggvény elméletre épülő, periodikus határfeltételekkel dolgozó VASP program segítségével történtek. Az izolált láncban a szomszédos kötéstávolságok nem lehetnek azonosak, mert ebben az esetben a lánc fémessé válna, és az egydimenziós vezető rendszerekre ismert Peierls-instabilitás a lánc torzulásához vezet. A valóságban megvalósuló lánc-cső rendszerek jellemzően inkommensurábilisak, a lánc és a cső rácsállandója nem összeegyeztethető. A Peierls-instabilitás okozta torzulás leírása a lánc-csőrendszerben periodikus határfeltétel mellett nehézkes, mert a periodicitás inkommensurabilitást kényszerít ki, így a torzulás mértéke függ attól, mekkora szupercellával dolgozunk. A részletes vizsgálat azt mutatja, hogy a lánc geometriájának kialakulásában fontos szerepet játszik a töltésátvitel a két alrendszer között, ami az együttes rendszervezetési tulajdonságaira drasztikus hatással lehet. Olyan sarkalatos eset is előfordulhat, hogy egy szabadon szigetelő lánc és cső együttes rendszere már vezető tulajdonságokat mutat.

Periodikus szén nanocső rendszerek növesztése

SZEKRÉNYES ZSOLT, fizika szakos hallgató
Babes-Bolyai Tudományegyetem, Kolozsvár

Témavezető: DARABONT SÁNDOR, egyetemi tanár
BBTE Anyagtudományi és Fejlett Technológiák Tanszék

SIMION AȘTILEAN, egyetemi tanár
BBTE Optika és Spektroszkópiai Tanszék

A szén nanocsövek periodikus rendszerek alakjában való növesztését egy viszonylag frissen bejegyzett eljárás által lehet megvalósítani. Ennek alapja egy elektronsugár litográfiával készült nikkell pontocskákból álló mintázat. (Ren, Z. F.; Huang, Z. P.; Wang, D. Z.; Wen, J. G.; Xu, J. W.; Wang, J. H.; Calvet, L. E.; Chen, J.; Klemic, J. F.; Reed, M. A. *Appl. Phys. Lett.* 75, 1086, 1999.) A nikkell pontocskáknak egyfelől katalizátor szerepük van, másfelől pedig méretük és elhelyezkedésük által ellenőrizni tudjuk a nanocsövek átmérőjét és a köztük levő távolságot. Ebben a dolgozatban kipróbáltunk egy alternatív megoldást ezen periodikus nikkell pont rendszerek készítésére. Először is egyrétegű önrendező polisztírol nanogömböcskéket létesítettünk egy kvarc (SiO₂) alapon. Következett egy 30 nm vastagságú nikkell filmréteg rápárolgatása a nanogömbök közti térre és ezután a nanogömbök eltávolítása ultrahangos kezeléssel. Az így kapott periodikus nikkell rendszerre kémiai gőzlerakódás (CVD) útján növesztettünk szén nanocsöveket. Végül pásztázó elektron mikroszkópot és a Raman spektroszkópiát használtuk a kapott nanocső rendszerünk jellemezésére.