



BUDAPESTI MŰSZAKI ÉS GAZDASÁGTUDOMÁNYI EGYETEM
TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR

Atomi és molekuláris nanokontaktusok vezetőképesség fluktuációinak vizsgálata

Tézisfüzet

Mezei Gréta

Témavezető: Balogh Zoltán

Fizika Intézet,

Fizika Tanszék

Budapest

2025

A kutatások előzménye

1960-as előadásában Richard P. Feynman előrevetítette egy olyan új kutatási területnek a kialakulását, amely az anyagot az atomi/molekuláris szinten manipulálva olyan funkcionális eszközök megvalósítására törekszik, amelyek csupán néhány atomból/molekulából állnak [1]. Az utóbbi évtizedekben az elektronikai eszközök figyelemreméltó fejlődésen és miniaturizáción mentek keresztül, és ez napjainkban is folytatódik. A folyamatot empirikusan a Moore-törvény írja le, amely azt jósolta, hogy a tranzisztorok száma a nyomtatott áramkörökben két évente megduplázódik [2]. A legújabb tranzisztorok aktív tartománya néhány tíz nanométer nagyságú, ami már közelíti a molekuláris méretskálát. Moore törvényének molekuláris szintre való kiterjesztése inspirálta a molekuláris elektronika területének gyors fejlődését. Az elektronikai eszközök méretcsökkentésének egyik lehetséges iránya egyedi molekulák vagy azok kis csoportjának elektronikai áramkörökbe integrálása [3, 4]. A molekulák előnye továbbá a kis méretükön túl az is, hogy kémiai szintézis és funkcionális csoportok beépítése révén rendkívül jól testreszabhatók és jól használhatók szenzorikai alkalmazásokban [5].

A molekuláris elektronika egy multidiszciplináris terület, ahol vegyészek, fizikusok, biológusok, anyagtudósok, villamosmérnökök és adattudósok közösen dolgoznak olyan elektronikai eszközök fejlesztésén, melyeknek az aktív tartománya csupán egyetlen vagy néhány molekulából áll.

A kutatási terület célja nemcsak az olyan alapvető kérdések vizsgálata, mint hogy egy molekula képes-e az elektródák közti nanorés áthidalására vagy hogy milyen konfigurációk alakulhatnak ki, hanem hogy vizsgáljuk, hogyan tudjuk ezeket a konfigurációkat kontrollálni és milyen zajkarakterisztikát mutatnak [6]. Habár a zajra gyakran zavaró tényezőként tekintünk [7], mégis értékes információk forrása is lehet a nanokontaktusok transport folyamatainak tanulmányozásához. A zajspektroszkópia egy jól megalapozott karakterizációs technika a különböző rendszerek és eszközök transzport tulajdonságainak vizsgálatára, ilyenek pl. a nanovezetékek, memrisztorok, tranzisztorok, stb. [8–11]. Az elektromos zaj tanulmányozása kiterjed a molekuláris elektronika területére is [12–14].

Kutatómunkámat a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem **Neuromorfikus Elektronika Csoportjában**¹ végeztem, amely évek óta foglalkozik atomi és egyedi molekulás kontaktusok transzportfolyamatainak vizs-

¹https://nanoelectronics.physics.bme.hu/neuromorphic_electronics

gálatával [15–20]. Ez idő alatt ígéretes mérőrendszereket fejlesztettek mind szoba-, mind alacsony hőmérsékletű mérések kivitelezésére [21–24], valamint statisztikai módszerek kidolgozásával is hozzájárultak a molekuláris kontaktusok karakterizációjához [17, 19, 23–27], demonstrálták azt is, hogy a mérések különböző, akár gépi tanulási módszerekkel történő válogatása segíthet a lezajló folyamatok megértésében [27–29]. Egy új területként kidolgozásra került az úgynevezett zajdiagnosztika módszertana, mely segítségével értékes információkat kaphatunk különböző nanostruktúrákról, mint például a memrisztív rendszerek [30–32] vagy akár az atomi és molekuláris kontaktusok [13].

Vizsgálati módszerek

Mielőtt funkcionális eszközökben alkalmazhatnánk az egyedi molekulákat, meg kell értenünk a transzportfolyamataikat és viselkedésüket. Ez azonban bizonyos nehézségeket is felvet, mint hogy hogyan alakítsunk ki olyan nanoréseket, amik elegendően kicsik ahhoz, hogy a molekula beépülhessen, vagy hogy hogyan mérjük az ilyen kontaktusokon keresztül folyó áramot [33, 34]. Ilyen nanorések kialakítása történhet különböző nanofabrikációs eljárásokkal, ezek azonban nem alkalmasak nagyobb statisztikai analízisek elvégzésére. A nanorések kialakítására egy hatékony módszer a *mechanikailag kontrollálható törőkontaktus technika* (angolul *mechanically controllable break junction method*, röviden MCBJ). A módszer lényege, hogy egy vékony fémvezeték *kontrollált* szakításával alakítunk ki egy nanorést, ami lehetővé teszi a különféle *molekulaadagolási* technikákkal bejuttatott célmolekulák elektromos kikötését. Méréseimhez a csoportunkban fejlesztett MCBJ-alapú mérőrendszereket [21–23] alkalmaztam szoba- és alacsony hőmérsékleten is. Az alacsony hőmérsékletű mérésekhez a mintatartót levákuumoztam, majd folyékony héliumos kannában hűtöttem le. A célmolekulákat *in situ párologtatási technikával* juttattam a minta felületére [23]. A nanorés kezdeti kialakítása után a fém kontaktust újra kialakíthatjuk, a keletkező elektródák közelítésével majd összenyomásával. A nanorés széthúzási és összenyomási ciklusait ismételve a folyamatot több ezerszer megismételhetjük, a folyamat közben a vezetőképességet mérve így több ezer egymástól független *vezetőképesség-elmozdulás* görbét rögzíthetünk.

A mért görbék statisztikai analízise olyan alapvető módszereket foglal magába, mint az *1D vezetőképesség hisztogramok* [35], *2D vezetőképesség-elmoz-*

dulás hisztogramok [36, 37], illetve fejlettebb módszereket is, mint például a *korreláció analízis* [17, O1]. A több ezer mért görbe nagyon különböző tulajdonságokat mutathat, ezért gyakran hasznos, ha a statisztikai analízis előtt a teljes adathalmazból kiválogatjuk azokat a görbéket, amelyek egy adott tulajdonsággal rendelkeznek. A válogatási módszerek is sokfélék lehetnek: egyszerű feltételek definiálásától [18], a legújabb gépi tanulási módszereken [38, O2] át, a kontaktus korrelációit felhasználva is végezhetünk válogatást. A főkomponens analízis (principal component analysis, PCA) a belső korrelációkat használja arra, hogy a görbéket valamilyen karakterisztikus jelleg alapján rangsorolja, majd kiválogassa azokat, amelyekre az adott jelleg a leginkább jellemző [29, 39]. Azokban az esetekben, amikor nem a görbék teljes osztályozása a cél, csupán azokat a görbéket szeretnénk vizsgálni, amelyekben legerősebben megjelenik az adott tulajdonság, az *extrém főkomponens vetítés* módszerét (*extremal principal component projection*, EPCP) hatékonyan tudjuk alkalmazni.

A nanokontaktusok transzportfolyamatainak alaposabb megértéséhez a vezetőképesség görbék egyszerű statisztikai elemzését kiegészíthetjük *I(V) karakterisztikával* vagy *zajmérésekkel*. Ezen mérések kivitelezéséhez azonban speciális körülményeket kell biztosítanunk: a vizsgált kontaktusnak a mérés idejére stabilnak kell maradnia. Ezt a stabilitást elérhetjük *lassú törőkontaktus mérésekkel*, melyekben a széthúzás sebességét lecsökkentjük, a kontaktus így rövid szakaszokon stabilnak tekinthető [40]. Egy másik módszer szerint a széthúzást néhány száz milliszekundumra teljesen megállítjuk egy adott elmozdulás megtétele után véletlenszerűen [12, 13]. Egy *valós idejű mérésvezérlő rendszerrel* még tovább javítható a széthúzási folyamat megállítása, így nem kell arra hagyatkoznunk, hogy a fix elmozdulás után kialakul a vizsgálni kívánt kontaktus, hanem kontrolláltan abban a pillanatban állítjuk meg a folyamatot, amikor ez a kontaktus kialakult. Magyarkuti András fejlesztett egy ilyen FPGA-alapú (Field-Programmable Gate Array, a felhasználás helyén programozható logikai kapumátrix) mérésvezérlő rendszert, ami olyan méréseket tesz lehetővé, amelyeknél elengedhetetlen a gyors reakcióidő és a jó stabilitás. A méréseimben ezt az FPGA-alapú valós idejű mérésvezérlő rendszert használtam arany-4,4'-bipiridil-arany kontaktusok feszültségfüggő karakterisztikájának és zajspektrumának, illetve arany nanorések zajspektrumának vizsgálatára. Lassú törőkontaktus méréseket is végeztem, hogy tanulmányozzam az arany-4,4'-bipiridil-arany kontaktusok időbeli evolúcióját.

Célkitűzések

2017-ben csatlakoztam a Neuromorfikus Elektronika Csoporthoz, ahol molekuláris mérésekkel kezdtem el foglalkozni, hogy eredményeimmel hozzájáruljak a molekuláris elektronika gyorsan fejlődő kutatásaihoz [P1–P4]. Céлом, hogy olyan korszerű mérési módszereket fejlesszek ki és alkalmazzak, amelyek túlmutatnak a vezetőképesség görbék alapvető statisztikai analíziséen. Ezért kutatásaimban elsődlegesen olyan rendszerekre fókuszáltam, amelyeket az irodalomban széles körben kutattak: arany nanoréseket és arany–4,4'-bipiridil–arany molekuláris kontaktusokat vizsgáltam.

Szobahőmérsékleten végzett mérésekben megmutatták, hogy az arany–4,4'-bipiridil–arany kontaktusnak két stabil konfigurációja van: egy magas és egy alacsony vezetőképességű, az elektródák mechanikai perturbációjával ezek között reverzibilisen kapcsolni lehet [41]. Ezek a mérések bizonyítékai a mechanikai kapcsolásnak, azonban a kapcsolási mechanizmus vizsgálatához nem elég stabilak illetve jól kontrollálhatóak. Céлом az volt, hogy kriogenikus hőmérsékleten ($T = 4,2$ K) végzett mérésekkel demonstráljam a két állapot közötti mechanika kapcsolást jobb stabilitással és hosszabb időskálán. Méréseimet $I(V)$ karakterisztika mérésekkel is kiegészítettem, hogy vizsgáljam, a feszültség növelésével is lehet-e kapcsolást előidézni. A valós idejű mérésvezérlő rendszerrel is végeztem méréseket, amelyekben a széthúzási folyamatot a molekuláris kontaktus kialakulásakor megállítva vizsgáltam a kapcsolási mechanizmus feszültségfüggését.

Lassú törökontaktus mérések alkalmasak a molekuláris kontaktusok zajkarakterisztikájának időbeli felbontására [40]. Céлом volt, hogy arany–4,4'-bipiridil–arany kontaktusok időbeli változását vizsgáljam. Az extrém főkomponens alapú vetítés 4,4'-bipiridilmolekulás görbék konfiguráció szerinti válogatásában elért kezdeti sikerek motiválták a kontaktus időbeli változásának konfiguráció-specifikus vizsgálatát.

Sok mérési módszer alapfeltétele a nagyfokú stabilitás és a kontaktusok hatékony kontrollálása, ami továbbra is kihívás, különösen szobahőmérsékleten. Az FPGA-alapú valós idejű mérésvezérlő rendszert használtam, és céloom az volt, hogy olyan mérési módszereket dolgozzak ki, amelyek kihasználják a rendszerrel elérhető magasfokú kontrollt és stabilitást. Arany nanoréseket vizsgáltam, hogy tanulmányozzam a megállási folyamat stabilitását és megmutassam, mennyire teljesít jól a mérésvezérlő rendszer egy ilyen távolságra rendkívül érzékeny nanorés esetében szobahőmérsékleten. Hogy a mérésve-

zérő rendszerben rejlő lehetőségeket demonstráljam, komplex, $I(V)$ karakterisztika és zajméréseket kombináló méréseket végeztem és értékeltem ki.

Általános céloom az volt, hogy ezt a komplex mérésvezérlő rendszert egy hasonlóan összetett kiértékelési szoftverrel egészítsem ki, amelynek a felhasználása később kiterjeszthető más, kevésbé ismert molekuláris rendszerek vizsgálatára is.

Új tudományos eredmények, tézispontok

1. Kétállapotú vezetőképesség-kapcsolás arany–4,4'-bipiridil–arany egymolekulás nanovezetékekben

Alacsony hőmérsékleten ($T = 4,2$ K) vizsgáltam arany–4,4'-bipiridil-arany molekuláris kontaktusok mechanikai- és feszültségvezérelt kapcsolási jelenségeit, és kísérleti eredményeimet összevetettem az irodalomban gyakran alkalmazott egyszerű elméleti modellekkel [P1].

Megmutattam, hogy a szobahőmérsékleti méréseknél már bemutatott mechanikai módon történő kapcsolat a 4,4'-bipiridil két konfigurációja között alacsony hőmérsékleten is elvégezhető, a kriogenikus körülményeknek köszönhetően akár több nagyságrenddel hosszabb időskálán.

Továbbá vizsgáltam a vezetőképesség-elektrodatávolság grafikonon a molekuláris konfigurációknak megfelelő tartományban megjelenő hiszterézist, ahol az $I(V)$ karakterisztikában véletlenszerű elektromos kapcsolási jelenséget figyeltem meg. Megmutattam, hogy a kapcsolat a két molekuláris konfigurációval azonosítható vezetőképességek között történik, valamint hogy az egyes állapotokban töltött idők aránya annak függvényében változik, hogy a hiszterézis mely pontjában található a rendszer.

Vizsgáltam a kapcsolási effektus feszültségfüggését, mely alapján sikerült megállapítanom, hogy az egyes állapotokhoz tartozó karakterisztikus idők a feszültség növelésével exponenciálisan csökkennek, azaz a kapcsolat mindkét állapotban szimultán felgyorsul.

2. Arany–4,4'-bipiridil–arany molekuláris kontaktusok konfiguráció-specifikus zajkarakterisztikáinak vizsgálata

Szobahőmérsékleti törőkontaktus mérésekben vizsgáltam arany–4,4'-bipiridil–arany molekuláris kontaktusok $1/f$ -jellegű zajkarakterisztikáit a molekuláris konfigurációk és a vezetőképesség függvényében. Megmutattam, hogy a főkomponens-vetítésen alapuló görbeválogatás és zajmérések kombinálásával több információ kapható a molekuláris konfigurációk jellegéről [P2].

Lassú törőkontaktus méréseket végeztem egy alacsony zajú, anti-aliasing szűrőt tartalmazó mérőrendszerrel, majd a kapott görbéket szakítás közbeni zajspektrum kiértékelés módszerével elemeztem és statisztikai módon vizsgáltam a zajkarakterisztika vezetőképesség-függését. A molekuláris vezetőképesség-tartomány széleinél a molekuláris konfigurációkkal összhangban lévő, irodalom alapján várt zajkarakterisztikákat figyeltem meg, azonban a konfigurációk közötti átmeneti tartományban ettől eltérő viselkedést tapasztaltam.

A megfigyeléseim mélyebb megértése érdekében az ún. extrém főkomponens vetítésen (angolul extreme principal component projection, azaz EPCP) alapuló görbeválogatás alkalmazásával létrehoztam két olyan vezetőképesség-görbe-csoportot, melyekben a magas- és alacsony vezetőképességű molekuláris konfiguráció teljesen szétválik. Ezáltal konfiguráció-specifikusan elemeztem a relatív zaj vezetőképesség-függését és megmutattam, hogy mindkét molekuláris konfiguráció hasonló tendenciát mutat: a molekuláris vezetőképesség-csúcs felső tartományában konstans jelleg, míg az alsó tartományban $\sim G^{-0.5}$ hatványfüggvényhez közeli vezetőképesség-függés figyelhető meg, melyek rendre az ún. téren keresztüli (angolul through-space) és kötésen keresztüli (through-bond) csatolás megjelenésére utalnak mindkét konfigurációban. A konfigurációk szerint felbontott zajkarakterisztika megértése a teljes adatsor zajkarakterisztikájának megértésében is segített és feltárta, hogy a megfigyelt, várakozásoktól eltérő tendencia a téren keresztüli (through-space) és kötésen keresztüli (through-bond) csatolások szakítási folyamat alatt váltakozó kialakulásának következménye lehet.

3. Arany nanorések stabilitásának és zajjelenségeinek vizsgálata FPGA-alapú valós idejű mérésvezérlő rendszerrel

Csoportunk által kidolgozott FPGA-alapú valós idejű mérésvezérlő rendszer segítségével vizsgáltam szobahőmérsékleti törőkontaktus technikával létrehozott arany nanorések stabilitását és zajjelenségeit [P3, P4].

A mérőrendszer gyors reakcióidejének köszönhetően megfigyeltem a szakítási folyamat alatt megjelenő relaxáció jelenségét, és megmutattam, hogy a néhány száz ms-ig tartó relaxáció lezajlása után a kontaktus akár több másodpercig is stabil lehet, így a kialakult konfigurációban alkalmas komplex mérések elvégzésére. Az összenyomási folyamatban hasonlóan magas stabilitást figyeltem meg, azonban a relaxáció jelenségét nem tapasztaltam, ezzel megmutattam, hogy az összenyomási folyamat ideális az előre beállított vezetőképességértékeken történő mérésekhez.

Demonstráltam, hogy a gyors reakcióidőnek és a nagyfokú stabilitásnak köszönhetően komplex jelalakot igénylő mérések is kivitelezhetők, ehhez kombinált $I(V)$ karakterisztika és zajméréseket végeztem az arany nanoréseken. Ennek keretében meghatároztam az arany alagútkontaktus relatív vezetőképesség-zaját a kontaktus vezetőképességének függvényében, melyben enyhe vezetőképesség-függést figyeltem meg. Ez a vezetőképesség-függés nem értelmezhető egyszerű alagutazási modellben feltételezett résméret-fluktuációkkal.

Az $I(V)$ görbék numerikusan kiértékelt Simmons-moddal való illesztéséből kinyerhető információ lehetőséget ad komplexebb zajmodellezésre, melyben kísérletileg meghatározott résméreteket és potenciálgát-magasságokat veszünk figyelembe, és ezen két paraméter együttes fluktuációját is megengedjük. A szimulációs eredményeket felhasználva meghatároztam a különböző résméret és potenciálgát magasság fluktuáció esetén várt zajkarakteristikákat, melyeket összevettem a kísérleti eredményeimmel. Megállapítottam, hogy ezen zajmodellek alapján a kísérletileg megfigyelt vezetőképességfüggő zajkarakteristikák pikométeres nagyságrendű résméret-fluktuációk és 10 meV nagyságrendű potenciálgátmagasság-fluktuációk feltételezésével illeszthetők legjobban.

Kapcsolódó publikációk

- [P1] **G. Mezei**, Z. Balogh, A. Magyarkuti és A. Halbritter, „Voltage-Controlled Binary Conductance Switching in Gold-4,4'-Bipyridine-Gold Single-Molecule Nanowires”, *Journal of Physical Chemistry Letters* **11**, 8053–8059 (2020).
- [P2] Z. Balogh, **G. Mezei**, N. Tenk, A. Magyarkuti és A. Halbritter, „Configuration-Specific Insight into Single-Molecule Conductance and Noise Data Revealed by the Principal Component Projection Method”, *Journal of Physical Chemistry Letters* **14**, 5109–5118 (2023).
- [P3] Z. Balogh, **G. Mezei**, L. Pósa, B. Sánta, A. Magyarkuti és A. Halbritter, „1/f noise spectroscopy and noise tailoring of nanoelectronic devices”, *Nano Futures* **5**, 10.1088/2399-1984/ac14c8 (2021).
- [P4] **G. Mezei**, A. Magyarkuti, L. Pósa, A. Halbritter és Z. Balogh, „Correlating noise and nonlinear conductance data in real-time controlled break junction measurements”, To be submitted (2025).

Egyéb publikációk

- [O1] A. Magyarkuti, Z. Balogh, **G. Mezei** és A. Halbritter, „Structural Memory Effects in Gold-4,4'-Bipyridine-Gold Single-Molecule Nanowires”, *The Journal of Physical Chemistry Letters* **12**, 1759–1764 (2021).
- [O2] W. Bro-Jørgensen, J. M. Hamill, **G. Mezei**, B. Lawson, U. Rashid, A. Halbritter, M. Kamenetska, V. Kaliginedi és G. C. Solomon, „Making the Most of Nothing: One-Class Classification for Single-Molecule Transport Studies”, *ACS Nanoscience Au* **4**, 250–262 (2024).

Irodalmi hivatkozások

- [1] R. P. Feynman, „There's Plenty of Room at the Bottom”, *Engineering and Science* **23** (1960).
- [2] G. E. Moore, „Cramming more components onto integrated circuits”, *Electronics* **38** (1965).
- [3] A. Aviram és M. A. Ratner, „Molecular rectifiers”, *Chemical Physics Letters* **29**, 277–283 (1974).

- [4] C. Joachim, J. K. Gimzewski és A. Aviram, „Electronics using hybrid-molecular and mono-molecular devices”, *Nature* **408**, 541–548 (2000).
- [5] G. Qu, T. Xia, W. Zhou, X. Zhang, H. Zhang, L. Hu, J. Shi, X.-F. Yu és G. Jiang, „Property–Activity Relationship of Black Phosphorus at the Nano–Bio Interface: From Molecules to Organisms”, *Chemical Reviews* **120**, 2288–2346 (2020).
- [6] S. V. Aradhya és L. Venkataraman, „Single-molecule junctions beyond electronic transport”, *Nature Nanotech* **8**, 399–410 (2013).
- [7] Y. Komoto, J. Ryu és M. Taniguchi, „Total variation denoising-based method of identifying the states of single molecules in break junction data”, *Discover Nano* **19**, 10.1186/s11671-024-03963-4 (2024).
- [8] S. Kogan, *Electronic Noise and Fluctuations in Solids* (Cambridge University Press, 1996).
- [9] A. Balandin, S. Morozov, S. Cai, R. Li, K. Wang, G. Wijeratne és C. Viswanathan, „Low Flicker-Noise GaN/AlGaN Heterostructure Field-Effect Transistors for Microwave Communications”, *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques* **47**, 1413–1417 (1999).
- [10] A. Balandin, *Noise and Fluctuations Control in Electronic Devices* (American Scientific Publishers, Stevenson Ranch, Calif, 2002).
- [11] A. A. Balandin, „Low-Frequency 1/f Noise in Graphene Devices”, *Nature Nanotechnology* **8**, 549–555 (2013).
- [12] O. Adak, E. Rosenthal, J. Meisner, E. F. Andrade, A. N. Pasupathy, C. Nuckolls, M. S. Hybertsen és L. Venkataraman, „Flicker Noise as a Probe of Electronic Interaction at Metal–Single Molecule Interfaces”, *Nano Letters* **15**, 4143–4149 (2015).
- [13] A. Magyarkuti, O. Adak, A. Halbritter és L. Venkataraman, „Electronic and Mechanical Characteristics of Stacked Dimer Molecular Junctions”, *Nanoscale* **10**, 3362–3368 (2018).
- [14] S. Yuan, T. Gao, W. Cao, Z. Pan, J. Liu, J. Shi és W. Hong, „The Characterization of Electronic Noise in the Charge Transport through Single-Molecule Junctions”, *Small Methods* **5**, 2001064 (2021).
- [15] A. Halbritter, P. Makk, S. Csonka és G. Mihály, „Huge negative differential conductance in Au-H₂ molecular nanojunctions”, *Phys. Rev. B* **77**, 075402 (2008).

- [16] A. Halbritter, P. Makk, S. Mackowiak, S. Csonka, M. Wawrzyniak és J. Martinek, „Regular Atomic Narrowing of Ni, Fe, and V Nanowires Resolved by Two-Dimensional Correlation Analysis”, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 266805 (2010).
- [17] P. Makk, D. Tomaszewski, J. Martinek, Z. Balogh, S. Csonka, M. Wawrzyniak, M. Frei, L. Venkataraman és A. Halbritter, „Correlation Analysis of Atomic and Single-Molecule Junction Conductance”, *ACS Nano* **6**, 3411–3423 (2012).
- [18] P. Makk, Z. Balogh, S. Csonka és A. Halbritter, „Pulling platinum atomic chains by carbon monoxide molecules”, *Nanoscale* **4**, 4739–4745 (2012).
- [19] P. Makk, „Investigation of atomic and molecular nanojunctions beyond conductance histograms”, dissz. (Budapest University of Technology és Economics, 2012).
- [20] G. Mezei, „Egyedi szerves molekulákból kialakított nanovezetékek kísérleti vizsgálata” (Budapest University of Technology és Economics, 2018).
- [21] A. Halbritter, „Investigation of atomic-sized conductors with the mechanically controllable break junction technique”, dissz. (Budapest University of Technology és Economics, 2003).
- [22] A. Halbritter, *Elektrontranszport atomi méretskálán*, 2014.
- [23] Z. Balogh, „Atomi kontaktusok kölcsönhatása szén-monoxid molekulákkal”, dissz. (Budapest University of Technology és Economics, 2017).
- [24] A. Magyarkuti, „Analysis of Break Junction Measurements with Single Organic Molecules using Advanced Statistical Methods”, dissz. (Budapest University of Technology és Economics, 2020).
- [25] Z. Balogh, D. Visontai, P. Makk, K. Gillemot, L. Oroszlány, L. Pósa, C. Lambert és A. Halbritter, „Precursor configurations and post-rupture evolution of Ag–CO–Ag single-molecule junctions”, *Nanoscale* **6**, 14784–14791 (2014).
- [26] A. Magyarkuti, K. P. Lauritzen, Z. Balogh, A. Nyáry, G. Mészáros, P. Makk, G. C. Solomon és A. Halbritter, „Temporal correlations and structural memory effects in break junction measurements”, *The Journal of Chemical Physics* **146**, 092319 (2017).

- [27] N. Balogh, „Molekuláris elektronikai mérések elemzése modern gépi tanulási és adatbányászati módszerekkel” (Budapest University of Technology és Economics, 2020).
- [28] K. P. Lauritzen, A. Magyarkuti, Z. Balogh, A. Halbritter és G. C. Solomon, „Classification of conductance traces with recurrent neural networks”, *The Journal of Chemical Physics* **148**, 084111 (2018).
- [29] A. Magyarkuti, N. Balogh, Z. Balogh, L. Venkataraman és A. Halbritter, „Unsupervised feature recognition in single-molecule break junction data”, *Nanoscale* **12**, 8355–8363 (2020).
- [30] B. Sánta, Z. Balogh, L. Pósa, D. Krisztián, T. N. Török, D. Molnár, C. Sinkó, R. Hauert, M. Csontos és A. Halbritter, „Noise Tailoring in Memristive Filaments”, *ACS Applied Materials & Interfaces* **13**, PMID: 33533590, 7453–7460 (2021).
- [31] B. Sánta, „Rezisztív kapcsoló memóriák dinamikai vizsgálata”, dissz. (Budapest University of Technology és Economics, 2021).
- [32] A. Nyáry, Z. Balogh, B. Sánta, G. Lázár, N. Jimenez Olalla, J. Leuthold, M. Csontos és A. Halbritter, „Benchmarking Stochasticity behind Reproducibility: Denoising Strategies in Ta2O5 Memristors”, *ACS Applied Materials & Interfaces* **17**, 25654–25662 (2025).
- [33] T. Li, W. Hu és D. Zhu, „Nanogap Electrodes”, *Advanced Materials* **22**, 286–300 (2010).
- [34] V. R. Manfrinato, L. Zhang, D. Su, H. Duan, R. G. Hobbs, E. A. Stach és K. K. Berggren, „Resolution Limits of Electron-Beam Lithography toward the Atomic Scale”, *Nano Letters* **13**, 1555–1558 (2013).
- [35] N. Agraït, A. L. Yeyati és J. M. van Ruitenbeek, „Quantum properties of atomic-sized conductors”, *Physics Reports* **377**, 81–279 (2003).
- [36] C. A. Martin, D. Ding, J. K. Sørensen, T. Bjørnholm, J. M. van Ruitenbeek és H. S. J. van der Zant, „Fullerene-Based Anchoring Groups for Molecular Electronics”, *Journal of the American Chemical Society* **130**, 13198–13199 (2008).
- [37] M. Kamenetska, M. Koentopp, A. C. Whalley, Y. S. Park, M. L. Steigerwald, C. Nuckolls, M. S. Hybertsen és L. Venkataraman, „Formation and Evolution of Single-Molecule Junctions”, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 126803 (2009).

- [38] W. Bro-Jørgensen, J. M. Hamill, R. Bro és G. C. Solomon, „Trusting our Machines: Validating Machine Learning Models for Single-Molecule Transport Experiments”, *Chem. Soc. Rev.* **51**, 6875–6892 (2022).
- [39] J. M. Hamill, X. T. Zhao, G. Mészáros, M. R. Bryce és M. Arenz, „Fast Data Sorting with Modified Principal Component Analysis to Distinguish Unique Single Molecular Break Junction Trajectories”, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 016601 (2018).
- [40] Z. Pan, L. Chen, C. Tang, Y. Hu, S. Yuan, T. Gao, J. Shi, J. Shi, Y. Yang és W. Hong, „The Evolution of the Charge Transport Mechanism in Single-Molecule Break Junctions Revealed by Flicker Noise Analysis”, *Small* **18**, 2107220 (2022).
- [41] S. Y. Quek, M. Kamenetska, M. L. Steigerwald, H. J. Choi, S. G. Louie, M. S. Hybertsen, J. B. Neaton és L. Venkataraman, „Mechanically controlled binary conductance switching of a single-molecule junction”, *Nature Nanotechnology* **4**, 10.1038/nnano.2009.10 (2009).