

Pásztázó alagútmikroszkóp szimulációja első elvekből

Mándi 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 legkülönfélébb felületek vizsgálatára.

Kutatásaim során olyan gyors és hatékony elektron alagút modelleket fejlesztettem és implementáltam, amelyek alkalmasak nagy felbontású STM és SP-STM képek szimulációjára. Ezek a modellek első elvekből származó elektronszerkezet-számításokon alapulnak és képesek tetszőleges tű orientáció modellezésére. Kutatásaim hozzájárulnak a kísérleti STM képek értelmezésének meglehetősen komplex feladatához.