|  |  |
| --- | --- |
| DEMES SÁNDORElektronikus rendszerekMSc, 9. félévUngvári Nemzeti EgyetemMérnöki-műszaki |  |

Témavezető:

|  |
| --- |
| Ivanickij Valentinprofesszor, Ungvári Nemzeti Egyetem |

AsnSn kristályok energetikai tulajdonságainak és paramétereinek meghatározása a sűrűség-funkcionál módszer segítségével

  A modern anyagtudomány és a nanotechnológia korszakának egyik kiemelkedően fontos tudományos irányzata a modellező anyagvizsgálati módszerek magas szintű alkalmazása korszerű algoritmusok és numerikus számítási módszerek kidolgozásával, tökéletesítésével illetve felhasználásával. A számítógépes modellezés, az egyre tökéletesebb módszerek olyan lehetőségeket nyújtanak számunkra, amelyeket semmilyen más, kísérleti módszerrel nem érhetünk el. A modern approximációs elméletek egyre pontosabban tudják illusztrálni a legkülönbözőbb rendszerekben végbemenő kvantum-szintű fizikai folyamatokat.

  Munkám során az AsnSm kristályok, klaszterek, komplex rendszerek elemzésére használom a számítógépes numerikus módszerek nyújtotta anyagvizsgálati lehetőségeket, azon belül is főképp a sűrűség-funkcionál módszerre támaszkodom. Ezek a módszerek mindamellett, hogy alátámasztják a kísérleti eredmények pontosságát, olyan távlatokba és olyan mélységekbe is bepillantást engedhetnek, ahová kísérleti síkon nem juthatunk el a jelenlegi technológiával.
  A tanulmány 3 fő részből áll.

  Az 1. fejezetben a számítógépes anyagvizsgálati módszerek elméleti hátterét elemzem, különösen nagy figyelmet fordítva a sűrűség-funkcionál módszer részletes bemutatására.

  A 2. fejezetben az eddig elért eredményeimet mutatom be a megvizsgált AsnSm kristályokra vonatkozólag. Általános jellemzést fogalmaztam meg az említett anyagokról. A vizsgált rendszereket főleg energetikai szempontból tanulmányoztam a DFT módszer segítségével. Ennek eredményeképp megkaptam több kristály teljes energiáját, sávszerkezetét és az abból származtatható paramétereit valamint vetített állapotsűrűségeit és a kötési energia hiperfelületeit. Az eredményeket a fejezetben ábrákkal, grafikonokkal és táblázatokkal illusztráltam.

  A 3. fejezetben a jövőbeli kutatási perspektíváimra tértem ki valamint beszámoltam a kutatásom jelenlegi állásáról is. Beszámoltam arról, hogy a jelenlegi munkám az úgynevezett molekuláris dinamika módszerre való átmenetre összpontosul.

  A tanulmány végén az általam tapasztalt eredmények elemzéseként levontam a megfelelő következtetéseket az AsnSm kristályok energetikai tulajdonságaiból és paramétereiből.