

Wizualizacja i analiza oddziaływań azotu z powierzchnią SiC(0001) na podstawie obliczonych metodą DFT własności elektronowych układu.

Celem proponowanej pracy magisterskiej jest napisanie programu do wizualizacji struktury atomowej i elektronowej otrzymanej przy pomocy programów vasp i siesta działającego w systemie linux.

Program ten powinien wyświetlać strukturą elektronową i atomową trójwymiarowo, a także umożliwiać wykonanie dowolnych przekrojów. Dodatkowo powinien umożliwiać symulacje obrazów STM-owych badanych układów. Program ten zostanie zastosowany do zbadania zachowania się azotu na powierzchni węgla krzemu.

Promotor: prof. dr hab. Adam Kiejna

Opiekun naukowy: dr Elwira Wachowicz