

28) Téma: Elektronová struktura nízkodimenziálních systémů

doc. Ing. Pavel Jelínek, Ph.D. (FzÚ AV ČR – Fyzikální ústav AV ČR, v. v. i., odd. povrchů a molekulárních struktur)

Fakultní konzultant: doc. Ing. I. Richter, Dr. (KFE FJFI ČVUT v Praze)

Abstrakt: Současný rozvoj experimentálních metod umožňuje připravit dobře definované nízkodimenziální systémy, která vykazují zajímavé elektronické vlastnosti. Tento pokrok mimo jiné otevírá nové možnosti v oblasti nano-elektroniky. Tudiž je žádoucí hlubší pochopení jejich materiálových vlastností, které jsou definovány jejich atomární a elektronovou strukturou. Cílem práce je osvojení si teoretických nástrojů pro výpočet atomární a elektronové struktury na bázi teorie funkcionálu hustoty a jejich aplikaci na vybrané nízkodimenziální systémy. Teoretické výpočty budou prováděny v úzké spolupráci s experimentálními měřeními. V rámci doktorského studia je předpokládán další vývoj počítačových simulací.

Reference:

- [1] W. Barford, *Electronic and Optical Properties of Conjugated Polymers*, Oxford University Press, 2013.
- [2] Th. Giamarchi, *Quantum Physics in one dimension*, Clarendon Press, 2004
- [3] R. G. Parr and W. Yang, *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules*, Oxford University Press, 1989.
- [4] V. May and O. Kuhn, *Charge and Energy Transfer Dynamics in Molecular Systems*, Wiley-VCH, 2003.
- [5] G. Grosso, G. P. Parravicini, *Solid State Physics Academic Press*, 2000.