

**Témata rešeršních prací (RP), prací na výzkumném úkolu (VU) a diplomových prací (DP) na které se mohou studenti FJFI ČVUT přihlásit ve školním roce 2002/2003**  
**ve skupině Molekulární elektroniky a spektroskopie KFE FJFI CVUT**

---

---

**Skupina témat II. - rešerše či VU či DP (dle připravenosti studenta/ky) s možností odpovídajícího pokračování:**

**Výpočty spekter a struktur vybraných molekulárních látek**

Práce věnovaná využití vhodných kvantově-mechanických a kvantově-chemických metod pro počítačové simulace optických spekter a výpočty rovnovážných struktur nových supramolekulárních látek pro molekulární elektroniku. Porovnávání dostupných vypočtených a experimentálních hodnot.

**Školitel:** Doc. RNDr. Vlastimil Fidler, CSc

**Konzultant:** Fyzik-teoretik či kvantový chemik  
dle zvoleného konkrétního zameření a úrovně práce studenta.

**Typ práce:**

Lze zahájit na úrovni **rešeršní práce**, práce na **VU** či **DP** s možností pokračovat následujícím stupněm práce – dle připravenosti a zájmu studenta .

**Projekt v rámci něhož bude práce probíhat:**

GA ČR a navazující projekty zahraničních spoluprací

**Student/ka:** vhodné pro teoreticky orientované studenty/ky fyziky či chemie.