

## **27) Téma: Teoretické studium přenosu náboje v nanostrukturách**

**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: Nanotechnologie jsou jedním z klíčových vědních oborů, který zásadně ovlivní vývoj naší společnosti. Jedním z perspektivních směrů nanotechnologií je spojen s možností kontroly náboje a spinu na atomárním měřítku. Možnost aktivně kontrolovat přenos náboje na atomární úrovni v nanostrukturách otvírá nové možnosti v oblasti nanoelektroniky. Hlubší pochopení procesů spojených s přenosem náboje na atomární úrovni vyžaduje nové postupy v oblasti teoretických simulací.

V rámci doktorského studia si student osvojí základní teoretické metody pro počítačové simulace elektronové a atomární struktury nanostruktur na povrchu pevné látky. Osvojí si teoretické základy rastrovací mikroskopie a transportu náboje na atomární úrovni. Zejména si osvojením výpočetní metody spojené s teorií funkcionálu hustoty a její aplikaci na vybrané problémy přenosu náboje v nanostrukturách.

Cílem práce budou studie vybraných problémů popisu tvorby nanostruktur na povrchích pevných látek a jejich fyzikálních a chemických vlastností pomocí numerických simulací. Výpočty budou prováděny v úzké spolupráci s experimentálními měřeními. V rámci doktorského studia je také předpokládán další vývoj počítačových simulací.

### **Reference:**

- [1] R.M. Martin, Electronic structure: Basic Theory and Practical Methods, Cambridge University Press, 2004.
- [2] W. Koch, M.C. Holthausen, A chemist's Guide to Density Functional Theory, Wiley-VCH, 2001.