

V této práci jsem stručně popsal základy metody funkcionálu hustoty (DFT) pro výpočet elektronové struktury molekul, pevných látek a povrchů. Dále, jsem zde shrnul základní stavební kameny výpočetního programu Fireball, který využívá metody DFT a se kterým jsem následně prováděl výpočty atomární a elektronové struktury vybraných modelů. Také jsem se zabýval teorií skenovací tunelovací mikroskopie (STM) a přístupy jak simulovat STM mapy na základě DFT výpočtů. Studovanými modely byly rekonstrukce povrchu Si (111), konkrétně šlo o rekonstrukce 7×7 , 2×1 *Pandey chain*. a dále pak rekonstrukce s periodicitou $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$, kde bylo úkolem nalezení vhodné atomární struktury, odpovídající novým experimentálním poznatkům. Následně jsem provedl porovnání energetické výhodnosti jednotlivých rekonstrukcí. Posledním studovaným modelem byla adsorpce molekuly benzenu na nejstabilnější rekonstrukci 7×7 . U všech modelů jsem provedl analýzu atomární a elektronové struktury a pomocí kódu STM jsem simuloval jejich STM mapy. Ty jsem následně porovnal s experimentálními STM měřeními v literatuře a s výsledky experimentů, které prováděli RNDr. Pavel Kocán, Ph.D. (rekonstrukce $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$) a Prof. Alastair McLean (benzen na 7×7). Byl nalezen pravděpodobný model pozorované metastabilní rekonstrukce $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$. Také byla prokázána chemisorpce benzenu v takzvané di- σ -můstkové konfiguraci.