

Název práce: Model těsné vazby a jeho aplikace na molekulární elektroniku a transport v mezoskopických systémech

Autor: Jan Prachař

Katedra (ústav): Ústav teoretické fyziky

Vedoucí bakalářské práce: RNDr. Martin Čížek, Ph.D.

E-mail vedoucího: [Martin.Cizek@mff.cuni.cz](mailto:Martin.Cizek@mff.cuni.cz)

### Abstrakt

V předložené práci aplikujeme model těsné vazby na molekulární elektroniku. Předmětem teoretického popisu je molekulární můstek, což je systém jedné či několika molekul, které překlenují nepatrnou mezeru mezi dvěma kovovými vodiči. Informace o vodičích potřebná k určení pravděpodobnosti průchodu skrz můstek je dána self-energií vodičů. Hlavním cílem práce je analyticky vypočítat self-energie vybraných modelů v rámci modelu těsné vazby. Pro každý model také určujeme pravděpodobnost průchodu skrz molekulární můstek. V práci rovněž studujeme uhlíkové nanotrubičky, materiál pozoruhodných vlastností, s potenciální možností využití v molekulární elektronice. Podařilo se získat analytický výraz pro self-energií cik-cak nanotrubiček.

Klíčová slova: model těsné vazby, molekulární můstek, self-energie, uhlíkové nanotrubičky

Title: Tight-binding model and its application for molecular electronics and transport in mesoscopic systems

Author: Jan Prachař

Department: Department of Theoretical Physics

Supervisor: RNDr. Martin Čížek, Ph.D.

Supervisor's e-mail address: [Martin.Cizek@mff.cuni.cz](mailto:Martin.Cizek@mff.cuni.cz)

### Abstract

In the presented thesis we study application of tight-binding model for molecular electronics. In particular we analyze molecular junction, which is a single molecule or system of molecules between two macroscopic metal leads. All the information about the leads needed to determine the transmission probability across the junction enters through the selfenergy function. Our main goal is to obtain analytic expressions for the leads' self-energy of selected models using the tight-binding approximation. Within each model we also calculate the transmission function of molecular junction. In the work we also study carbon nanotubes, material of remarkable properties, from the point of molecular electronics. We have succeeded in obtaining analytic solutions for the self-energy of zigzag nanotubes.

Keywords: tight-binding model, molecular junction, self-energy, carbon nanotubes