

Výpočet presných adsorpčných energií molekúl na povrchoch je neľahká úloha, pretože metódy s dostatočnou presnosťou sú príliš výpočtovo náročné na to, aby sa mohli aplikovať na tieto systémy. Teórie vnorenia predstavujú prirodzené riešenie tohto problému: zameranie výpočtov na malú oblasť a zahrnutie efektov prostredia. V tejto diplomovej práci sa skúma metóda vnorenia a odozva mnohoelektrónových systémov na adsorbovanú nečistotu. Na tento účel sa používajú dva prístupy: tesná väzba a *ab initio*. V tesnej väzbe študujeme formalizmus Greenových funkcií a získavame explicitné výrazy pre Greenove funkcie rôznych jedno- a dvojrozmerných modelov. Pomocou tohto formalizmu študujeme kvalitatívne lokálnu hustotu stavov a adsorpčné energie. V druhej časti tejto práce sú použité moderné metódy *ab initio* na štúdium konvergenzie schémy subtraktívneho vnorenia pre adsorpčné energie malých systémov s uzavretou valenčnou vrstvou na dvojrozmernom graféne a hexagonálnom nitríde boritom. Účinnosť a použiteľnosť schémy je posudzovaná pre neón a fluorovodík ako adsorbáty. Zistili sme, že skúmaná metóda vnorenia funguje lepšie pre neón v porovnaní s fluorovodíkom, čo možno vysvetliť použitou párovou disperznou korekciou.