

Molekulární elektronika je v současné době rychle se vyvíjející vědní obor, který využívá experimentálních i teoretických metod. Jejich kombinace je v mnoha případech nevyhnutelná. Tato práce poskytne čtenáři přehled o experimentálních metodách ke zkoumání nanospojů a teoretickém popisu transportu v nich. Grafen je pro jeho vlastnosti nadějným kandidátem v nahrazení nebo vylepšení křemíkové elektroniky. Z toho důvodu jsou naše zkoumané systémy deriváty grafenu. Programovací balík Kwant dokáže simulovat kvantový transport v nanoskopických systémech. Pro jeho jednoduchost použití a nízké nároky na výpočetní techniku je ideálním prostředím pro simulaci. Kvantový transport v grafenových nanopáskách jsme pomocí zmíněného balíku nasimulovali a získali jejich elektronické vlastnosti.