

Abstrakt

Cieľom diplomovej práce je kvantovo-chemicky vyšetriť nekovaletne: vodíkovo viazané komplexy fenyacetylénu s roznyimi molekulami ako napr: voda, amoniak, metanol, metylamín, borántrimetylamín. Hlavne vysvetlit metylom indukovanú zmenu štruktúrneho motívu. V prvej kapitole sú bližšie popísané vlastnosti fenyacetylénu, hlavne jeho rozmanitosť z hľadiska možných vazbových motívov v roznych komplexoch. Druhá kapitola pojednáva o experimentálnom pozadí práce, cituje použité spektrálne metódy. Popisuje interpretáciu experimentálne pozorovaných spektier. V tretej kapitole je vysvetlená metodológia hľadania lokálnych minim na povrchu potenciálnej energie. Predstavený je koncept prechodu od interakčnej energie ku voľnej Gibbsovej energii. Kapitola obsahuje podrobný popis niektorých použitých metód, napr.: DFT-SAPT. Záverečná kapitola prezentuje získané výsledky a interpretuje prepojenie medzi experimentálnymi a teoretickými výsledkami, čo vedie k lepšiemu pochopeniu experimentálne pozorovaných skutočností.