

Abstrakt v slovenskom jazyku:

Táto práca sa zaoberá vlastnosťami polyanilínu na kremičitej podložke, konkrétne jeho adhéznou energiou a spektrami polyanilínu s rôznymi nábojmi, vypočítanými metódami kvantovej chémie. Vypočítané spektra boli porovnané s experimentálnymi. Na optimalizáciu komplexného modelu bola použitá metóda DFT ω -B97XD s bázou 3-21G a pre výpočet vibračných spektier bola použitá metóda DFT ω -B97XD s bázou 6-31G(d,p). Pre výpočet energie bola použitá metóda DFT ω -B97XD s bázou 6-31G*. Zistená adhézna energia interpoláciou pre nekonečne dlhý retiazok činila 1,9kcal/mol. Vypočítané Ramanové spektrá boli nafitované na experimentálne data. Takto zistené spektrum sa v hrubých rysoch zhodovalo s experimentálnym, aj keď pri detailnejšom pohľade bolo vidieť rozdiely spôsobené nezahrnutím prostredia a interakcií polyanilínových retiazkov medzi sebou.