

## Abstrakt

Tato dizertační práce představuje shrnutí studií konformačního chování amfifilních polymerů, provedených s použitím počítačových simulací. V těchto studiích jsme ukázali, že amfifilní polymery tvoří řadu samoorganizovaných struktur na úrovni jediné molekuly. Jedná se zejména o strukturu perlového náhrdelníku, sférické a cylindrické intramolekulární micely a svazky řetězců. Na základě provedených simulací jsme získali hlubší pochopení chování studovaných polymerů a podmínek, za jakých vznikají jmenované struktury. Některé z výsledků byly srovnávány s experimentálními či teoretickými předpověďmi pro podobné polymery. V některých případech výsledky simulací potvrdily dřívější interpretace, které byly založené na analogii či intuici. V jiných případech ukázaly simulace nové vlastnosti, které předtím vůbec nebyly předpovězeny.