

Táto práca sa zaoberá štyrmi základnými aspektami prenosu nosica náboja: (1) hĺbka potenciálovej jamy vytvorenej okolo nosica náboja, ktorý je lokalizovaný na polymérnom retazci (tzv. polarónová väzbová energia). (2) Rozsah delokalizácie nosica náboja a vplyv stérických efektov. (3) Pohyblivosť nosica náboja na retazci. (4) Vplyv prenosu nosica náboja na stabilitu polymérneho retazca. Ako modelový materiál boli použité polysilánové retazce. Všetky vlastnosti boli študované prostredníctvom teoretických metód kvantovej chémie a molekulárnej dynamiky, ktoré umožnili sledovať mechanizmus prenosu na úrovni redistribúcie spinovej a elektrónovej hustoty, zmeny vibračných módov a dynamiky geometrie retazcov. Porovnanie teoretických a experimentálnych výsledkov ukázalo veľmi dobrú zhodu vo všetkých oblastiach.