

V této práci jsou studovány strukturní vlastnosti Langmuirovy monovrstvy palmitové kyseliny ($\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{14}\text{COOH}$) na rozhraní voda-vzduch analýzou připravených molekulárně dynamických simulací. Získané veličiny jsou porovnány s dostupnými výsledky z experimentů a souvisejících počítačových simulací publikovaných v literatuře. Byla nalezena shoda s dostupnými údaji v úhlu náklonu alkylových řetězců, hustotních profilech monovrstvy a v tloušťce monovrstvy. Dále bylo zjištěno, že rozdělení délky alkylového řetězce palmitové kyseliny je bimodální; tento jev byl dán do souvislosti s konformací řetězce v oblasti $\text{C}^1\text{-C}^2\text{-C}^3\text{-C}^4$ a pro srovnání byly provedeny simulace hexadekan-1-olu.