

1. Raziskovalna organizacija:

Univerza v Ljubljani, *Fakulteta za naravoslovje in tehnologijo*

2. Ime in priimek mentorja:

Vojeslav Vlachy

3. Področje znanosti iz šifranta ARRS:

1.04.01 Fizikalna kemija

4. Kontaktni e-naslov mentorja:

vojko.vlachy@fkk.uni-lj.si

5. Kratek opis programa usposabljanja:

Raziskujemo raztopine elektrolitov, polielektrolitov in proteinov v vodi. Pri tem uporabljamo teoretične (integralske enačbe in perturbacijske teorije), eksperimentalne in računalniške metode, to je simulacijo dinamike molekul ali metodo Monte Carlo. V preteklih letih smo razvili nove modele vode, raztopin elektrolitov in polielektrolitov [1-3], ter raziskovali vedenje hidrofobnih delcev v vodi. Hkrati smo v našem laboratoriju pridobili tudi mnoge pomembne eksperimentalne podatke [4–10] o teh sistemih. Za boljše razumevanje dogajanja na mikroskopskem nivoju, smo uporabili tudi računalniške simulacije [9,11]. Raziskave so nam omogočile razumevanje lastnosti topljencev (polielektroliti, proteini), kjer sočasno nastopajo tako ionske kot hidrofobne skupine. Med najpomembnejše rezultate v zadnjem letu lahko štejemo dognanja, da so i) toplotne spremembe pri mešanju in hidrataciji linearno odvisne od entalpije hidratacije protiiona in, i) da prisotnost hidrofobnih skupin na molekuli lahko spremeni vrstni ionov v Hofmeisterovi vrsti. K tem rezultatom so pomembno prispevali tudi dosednji mladi raziskovalci. Medtem, ko smo se do sedaj v glavnem ukvarjali s "čistimi" raztopinami, pa želimo naše raziskave razširiti na razmere, ko je v sistemu prisotna velika množina nevtralne komponente ali koloidni delci. Zanimata nas vpliv površine in pomanjkanja prostora v raztopini ali suspenziji. Takšne razmere so značilne zlasti za biološke pa tudi nekatere industrijske sisteme. Delo bo večji del eksperimentalno, uporabili bomo širok spekter metod, od meritev transportnih (prevodnost) in termodinamičnih lastnosti (osmozni koeficienti, kalorimetrične meritve), do viskoznosti in sipanja nevtronov. V sodelovanju s skupino dr. N. Malikove (UPMC, Pariz), bomo raziskovali flokulacije kationskih polielektrolitov (ionenov) z negativno nabitimi glinami (alumosilikati). Poleg fizikalne kemije je zaželeno predznanje biologije ali fizike in računalniškega programiranja.

1. A. Bizjak, T. Urbič, V. Vlachy, K. A. Dill, *J. Chem. Phys.*, **131**, 194504 (2009).
2. Yu.V. Kalyuzhnyi, V. Vlachy, K. A. Dill, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **12**, 6260–6266 (2010).
3. Yu.V. Kalyuzhnyi, V. Vlachy, P.T. Cummings, *Chem. Phys. Letters* **438**, 238–243 (2007).
4. M. Lukšič, B. Hribar-Lee, V. Vlachy, R. Büchner, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **11**, 10053–10058 (2009).
5. M. Bončina, J. Reščič, V. Vlachy, *Biophys. J.*, **95**, 1285–1294 (2008).
6. M. Bončina, J. Reščič, J. Lah, V. Vlachy, *J. Phys. Chem. B*, **114**, 4313–4319 (2010).
7. S. Čebašek, M. Lukšič, C. Pohar, V. Vlachy, *J. Chem. Eng. Data*, **56**, 1282–1292 (2011).
8. N. Malikova, S. Čebašek, V. Glenisson, G. Carrot, V. Vlachy, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **14**, 12898–12904 (2012).
9. M. Lukšič, M. Bončina, M. Druchok, V. Vlachy, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **14**, 2024–2031 (2012).
- 10) S. Čebašek, M. Seručnik, V. Vlachy, *J. Phys. Chem. B*, **117**, 3682–3688 (2013).
- 11) M. Druchok, M. Lukšič, V. Vlachy, *J. Chem. Phys.*, **137**, 014511 (2012).