

Povzetek

V pričujočem delu so predstavljeni rezultati računalniških simulacij vodnih raztopin enostavnih soli in surfaktantov. S pomočjo enostavnega dvodimenzionalnega modela vode smo izračunali asociacijske konstante nekaterih alkalijskih halogenidov. Monte Carlo simulacije z uporabo Mercedes-Benz + dipol modela vode so dale trend asociacijskih konstant, ki se večinoma kvalitativno ujema z rezultati študij, kjer so uporabili bolj realistične modele, in tudi z meritvami. Izvedli smo tudi atomistične simulacije molekulske dinamike vodnih raztopin vseh treh geometrijskih izomerov natrijevega hidroksibenzoata, da bi na molekulskem nivoju razložili razlike v njihovih transportnih lastnostih. Izomeri hidroksibenzoata se razlikujejo glede na relativni položaj hidroksilne in karboksilne skupine na benzenovem obroču. Izkazalo se je, da lahko simulacije molekulske dinamike, pri katerih smo uporabili GROMOS96 53a5 polje sile in SPC ali SPC/E model vode, pravilno razvrstijo izomere hidroksibenzoata glede na njihov difuzijski koeficient. Pri nižjih koncentracijah soli je mobilnost izomera določena s tvorbo vodikovih vezi z molekulami vode. *Orto* izomer z vodo tvori najmanj vodikovih vezi in je tako najbolj mobil, medtem ko je *para* izomer najbolj hidratiran in ima zato najnižji difuzijski koeficient. Pri višjih koncentracijah pa smo opazili tvorbo agregatov, v katerih so molekule hidroksibenzoata povezane preko vodikovih vezi. Analiza nastalih gruč je pokazala, da *orto* izomer najpogosteje tvori stabilne dimere, medtem ko lahko druga dva izomera tvorita tudi višje agregate, ki so lahko verige ali obroči. S simulacijami molekulske dinamike z GROMOS96 53a5 poljem sile smo preučevali tudi vpliv različnih izomerov hidroksibenzoata na micelizacijo kationskega surfaktanta dodeciltrimetilamonijevega klorida (DTAC). Preučevali smo obnašanje dolgih cilindričnih DTAC micel ter spontano micelizacijo DTAC v prisotnosti NaHB v SPC in SPC/E vodi. Opazili smo, da *orto* izomer prodre globlje v micelo in s pozitivno nabitimi glavami surfaktantov interagira močneje kot druga dva izomera. Poleg tega ima *orto* izomer najbolj izrazito preferenčno orientacijo glede na molekule surfaktanta in vzpostavi najbolj urejeno strukturo glav DTAC unimerov. Iste trende, ki jih lahko pripišemo dejstvu, da je *orto* izomer najbolj amfifilen, smo opazili ne glede na koncentracijo HB soli, uporabljeni model vode ali začetno razporeditev molekul surfaktanta. Pri spontani micelizaciji smo opazili tudi zlivanje micel, pri katerem sodelujejo na sodelujoči miceli adsorbirani hidroksibenzoatni anioni, ki med seboj tvorijo vodikove vezi.

Ključne besede: molekulske simulacije vodnih raztopin, asociacija enostavnih soli, agregacija majhnih molekul, micelizacija kationskih surfaktantov, ionospecifični efekt