

Povzetek

Opisane raziskave lahko tematsko razdelimo v dva sklopa. V prvem delu smo obravnavali hidratacijo nepolarnega topljenca v enostavnem modelu vode. Termodinamične količine, ki spremljajo hidratacijo, smo izračunali s perturbacijsko teorijo, strukturne lastnosti nastalih raztopin pa smo dobili z reševanjem integralnih enačb. Teoretične rezultate smo primerjali z rezultati, ki smo jih pridobili z računalniško simulacijo modelnega sistema. Na ta način smo preverili uporabnost obeh teorij za opis termodinamičnih in strukturnih lastnosti vodnih raztopin nepolarnih topljencev. Zanimalo nas je predvsem območje, kjer opis enostavnega modela približno ustreza pravi vodi. Znotraj danega modela smo dobili zadovoljivo ujemanje med teoretičnimi napovedmi in rezultati simulacij. Nekaterih eksperimentalnih značilnosti vodnih raztopin nepolarnih topljencev nam ni uspelo zajeti niti s teorijo niti z računalniško simulacijo. Razlog je verjetno v obravnavanem modelu vode, za katerega fazni diagram še ni poznan. Zato ni zanesljivo, da območje termodinamičnih pogojev, ki smo ga izbrali za študij, ustreza pravi vodi pri sobnih pogojih.

V drugem delu disertacije smo raziskovali vpliv translacijskega in rotacijskega gibanja molekul vode na njeno strukturo ter na strukturo vodnih raztopin enostavnih topljencev. V ta namen smo prilagodili metodo dinamike molekul, tako da smo lahko predpisali različne vrednosti kinetičnim energijam za translacijsko in rotacijsko gibanje. Formalno smo vzpostavili neravnotežno stacionarno stanje, kjer translacijska in rotacijska temperatura nista enaki. Opazovali smo, kako se spremeni struktura vode ob enostavnih topljencih ter kako ta vpliva na korelacije med modelnimi topljenci. S praktičnega stališča je zlasti zanimivo stanje, kjer je rotacijska temperatura višja od translacijske. To nam namreč služi kot pokazatelj netermičnega učinka mikrovalov na vodne raztopine. Ugotovili smo, da dvig rotacijske temperature močno zmanjša število vodikovih vezi v vodi, poveča red v vodnih raztopinah nepolarnih topljencev ter spodbuja zvitje hidrofobnih verig. Povišana rotacijska temperatura ima nasprotujoča vpliva na hidratacijo kationa in aniona, v vodnih raztopinah soli pa močno poveča asociacijo ionov. Dvig translacijske temperature je v praktično vseh primerih povzročil zmanjšanje korelacij med delci v sistemu.