

S kombinacijo eksperimentalnih in teoretičnih raziskovalnih pristopov v povezavi z metodo sipanja rentgenske svetlobe in računalniškimi simulacijami smo preučevali strukturo in dinamiko različnih sistemov, v katerih je povezovanje molekul z vodikovimi vezmi pomemben dejavnik pri njihovem strukturiranju. Raziskave so zaobsegale tako strukturo v smislu molekulskih konformacij, preferenčnega orientiranja in prostorske organizacije molekul kot tudi njihovega povezovanja v skupke na supramolekularnem nivoju. Iz rezultatov simulacij smo po teoretični *metodi dopolnjenega sistema* izračunali rentgensko sipanje modelnih sistemov in ga primerjali z eksperimentalnimi rezultati. Simulacije so nam na ta način priskrbele neposreden vpogled v strukturo in dinamiko modelnih sistemov, laboratorijski eksperimenti so nam pa služili kot kriterij za oceno pravilnosti uporabljenega modela. Dinamiko sistemov smo raziskali preko trendov spreminjanja lastnih difuzijskih koeficientov molekul in življenjskega časa različnih tipov vodikove vezi, reološke lastnosti smo pa določili s pomočjo rezultatov neravnotežnih simulacij molekulske dinamike in literaturnih eksperimentalnih podatkov. Raziskave smo pričeli z relativno preprostim čistim tekočim *n*-butanolom, nadaljevali z zahtevnejšim 1,4-butandiolom in nato še s homologno vrsto terminalnih diolov od etilen glikola do 1,5-pentandiola. Sledila je raziskava precej kompleksnejše binarne vodne mešanice hidrotropnega *tert*-butanola v celotnem koncentracijskem območju z zelo raznolikim strukturnim in dinamičnim obnašanjem ter strukturnimi segmenti reda velikosti nekaj nanometrov in na koncu še raziskava makromolekulskih raztopin neionskega surfaktanta Brij 35 v organskih in organsko-vodnih medijih. Rezultati dokazujejo, da uporabljena metodologija omogoča celostno interpretacijo razmerij in povezav med strukturo, dinamiko in reološkimi lastnostmi tekočin na intra-, inter- in supramolekularnem nivoju podrobno tudi za kompleksnejše sisteme z velikimi strukturnimi segmenti in makromolekulami, in izpostavljajo prednosti te metodologije pred klasičnimi izključno eksperimentalnimi ali izključno teoretičnimi pristopi.