



Komisija za nagrade, priznanja
in promocijo UL FKKT

V Ljubljani, 20. 5. 2014 / 894

Vsem študentom UL FKKT

Razpis tem za Prešernove nagrade študentom UL FKKT v študijskem letu 2014/15

V skladu s "Pravilnikom o podeljevanju Prešernovih nagrad študentom Univerze v Ljubljani" in "Pravilnika o podeljevanju pohval in nagrad študentom UL FKKT in nagrad ter priznanja Maksa Samca" Komisija za nagrade, priznanja in promocijo UL FKKT razpisuje raziskovalne teme za Prešernove nagrade študentom UL FKKT in Prešernove nagrade študentom Univerze v Ljubljani za študijsko leto 2014/15.

Prešernova nagrada se podeli študentom za samostojna dela, ki so izdelana v času študija do zaključene 2. bolonjske stopnje izobrazbe in predložena v predpisani obliki. V skladu s pravilniki so lahko za Prešernovo nagrado predlagana raziskovalna ali diplomska dela, ki izrazito presegajo redne študijske zahteve in so napisana v strokovno neoporečni slovenščini.

Zainteresirani študentje, ki bi želeli opravljati raziskovalno nalogo in jo prijaviti za Prešernovo nagrado, prosim stopite v stik neposredno z mentorjem, ki je raziskovalno temo razpisal. Raziskovalno nalogo bo potrebno v pisni obliki predložiti Komisiji za nagrade, priznanja in promocijo UL FKKT do 1. septembra 2015.

izr. prof. dr. Helena Prosen
Predsednica Komisije za nagrade,
priznanja in promocijo UL FKKT



prof. dr. Matjaž Krajnc
Dekan UL FKKT

PREDLOGI TEM RAZISKOVALNIH NALOG ZA PREŠERNOVO NAGRADO

A.

Naslov: Vpliv koncentracije topljenca na anomalne lastnosti pri vodi

Mentor: izr. prof. dr. Tomaž Urbič, Katedra za fizikalno kemijo UL FKKT

Kratka vsebina:

Večini tekočin se volumen zmanjša, ko se le te ohladijo, prav tako postanejo bolj viskozne, ko jim povečamo pritisk. Vse to pa ne velja za vodo, ki je najpomembnejša tekočina na Zemlji. Voda je tekočina z veliko nenavadnimi lastnosti. Najznačilnejša in največkrat omenjena lastnost je njena gostota, ki ima največjo vrednost pri 4 °C. Večini tekočin se volumen zmanjša, ko zmrznejo, pri vodi pa se poveča. Zaradi tega led plava na tekoči vodi. Pomembne značilnosti so še: minimum izotermne stisljivosti v tekoči fazi, visoka in skoraj konstantna toplotna kapaciteta tekoče vode glede na temperaturo ter negativni temperaturni razteznostni koeficient pri nizkih temperaturah. Nenavadne so tudi transportne lastnosti vode kot sta viskoznost in difuzijski koeficient. Vse te lastnosti so posledice molekulske strukture vode, saj imajo molekule možnost tvoriti tetraedrično koordinirane vodikove vezi. Lastnosti pa so odvisne od koncentracije topljenca.

V tej raziskavi bomo s pomočjo računalniških simulacij Monte Carlo določili, kako koncentracija nepolarnega topljenca vpliva na obliko faznega diagrama in kje se pojavijo anomalne lastnosti.

B.

Naslov: **Vpliv elektronegativnosti atomov na jakost vodikove vezi**

Mentor: **izr. prof. dr. Tomaž Urbič, Katedra za fizikalno kemijo UL FKKT**

Kratka vsebina:

Vodikove veze nastanejo, ko ena molekula donira vodikov atom elektronegativnemu atomu druge molekule. Moč vezi je odvisna tudi od elektronegativnosti obeh udeležениh atomov.

V tej raziskavi bomo s pomočjo kvantnokemijskih izračunov preverili, kako je moč vodikove vezi odvisna od elektronegativnosti udeležениh atomov.

C.

Naslov: Opis transportnih pojavov v mikroreaktorju na osnovi Lattice Boltzmanove metode

Mentor: izr. prof. dr. Tomaž Urbič, Katedra za fizikalno kemijo

Somentor: prof. dr. Igor Plazl, Katedra za kemijsko, biokemijsko in ekološko inženirstvo

Kratka vsebina:

Opis konvektivno-difuzijske dinamike v mikropretočnih sistemih je osnova za razumevanje in načrtovanje različnih (bio)kemijskih procesov na mikro skali. Teoretični opis transportnih pojavov in reakcijske kinetike v mikroreaktorju na makroskopskem nivoju, ki sloni na predpostavki kontinuuma, se je pokazal kot primeren za mikrosisteme, katerih hidravlični premer je večji ali enak okoli 100 mikrometrov. Z zmanjševanjem karakteristične dimenzije mikroreaktorja, pa narašča vpliv mikro efektov in predpostavka kontinuuma ni več sprejemljiva. Modeliranje procesov na makroskopskem nivoju ni več primerno in moramo uporabiti mezo ali mikroskopski opis.

V delu bomo izračunali hitrostne in koncentracijske profile v mikroreaktorju s pomočjo Lattice Boltzmannove metode (LBM) in jih primerjali z napovedmi, ki jih bomo izračunali z makroskopskimi enačbami. Ugotovili bomo, pri katerih karakterističnih dimenzijah mikrosistemov makroskopske enačbe niso več primerne.

D.

Naslov: Merjenje elektroforetske mobilnosti sferičnih poliiionov v prisotnosti nevtralne soli z metodo kapilarne elektroforeze

Mentor: doc. dr. Janez Cerar, Katedra za fizikalno kemijo

Somentor: izr. prof. dr. Matevž Pompe, Katedra za analizo kemijo

Kratka vsebina:

Študije elektroforetske mobilnosti ionov omogočajo pridobitev novih spoznanj s področja elektrokemije. Med pomembnejšimi parametri, ki vplivajo na elektroforetsko mobilnost, so električni naboj iona, njegova velikost in konformacija. Ker so te količine pogosto v večini realnih vzorcev slabo definirane, je obstoječe teorije, ki napovedujejo elektroforetsko mobilnost makroionov v raztopinah nevtralnih soli, težko preveriti z eksperimentom.

Nekateri vodotopni fulerenheksamalonatni makroioni imajo zaradi rigidne fulerenske sredice in nanjo togo vpetih polarnih funkcionalnih skupin zelo dobro definirano tako strukturo kot tudi električni naboj in so zato nadvse pripravi za preizkušanje določenih elektrostatskih teorij s področja elektrolitov in polielektrolitov.

Z metodo kapilarne elektroforeze (CE) bomo izmerili elektroforetsko mobilnost fulereneheksamalonatnega iona v raztopinah nosilnega elektrolita različnih koncentracij in sestave. Eksperimentalne vrednosti bomo primerjali s teoretičnimi napovedmi.

Delo bo imelo predvsem eksperimentalni značaj in bo obsegalo pripravo raztopin nosilnih elektrolitov za CE, delo na sistemu za kapilarno elektroforezo Applied Biosystems 270A-HT na Katedri za analizo kemijo (sodelovanje s prof. dr. Matevžem Pompe) in obdelavo pridobljenih podatkov. Glede na željo študenta je praktično delo moč nadgraditi tudi s teoretičnimi študijami in računanjem.

E.

Naslov: Določitev fiziološko aktivnih sestavin nekaterih rastlin

Mentor: izr. prof. dr. Helena Prosen, Katedra za analizo kemijo

Kratka vsebina:

Slovenija je zaradi križanja klimatskih vplivov botanično zelo bogata dežela. Med rastline, ki jim je farmacevtsko-kemijska znanost potrdila zdravilno učinkovanje in določila učinkovine, spadajo tako nestrupene kot strupene rastline. Obstaja pa precejšnje število rasilinskih vrst, za katere iz primerov uporabe v ljudskem zdravilstvu ali iz anekdotičnih poročil o zastrupitvah lahko sklepamo, da vsebujejo neke fiziološko aktivne učinkovine, vendar le-te niso identificirane. Za njihovo kvalitativno določitev jih je najprej potrebno izolirati, kar zahteva optimizacijo pogojev ekstrakcije. Analizna tehnika izbire je masna spektrometrija v povezavi s separacijskimi tehnikami (plinska, tekočinska kromatografija), ki ob uporabi razmeroma majhnih količin vzorca nudi dobre možnosti identifikacije posameznih spojin.