



Predstavitev področij diplomskih del

Katedra za fizikalno kemijo

Pedagoško osebje katedre:

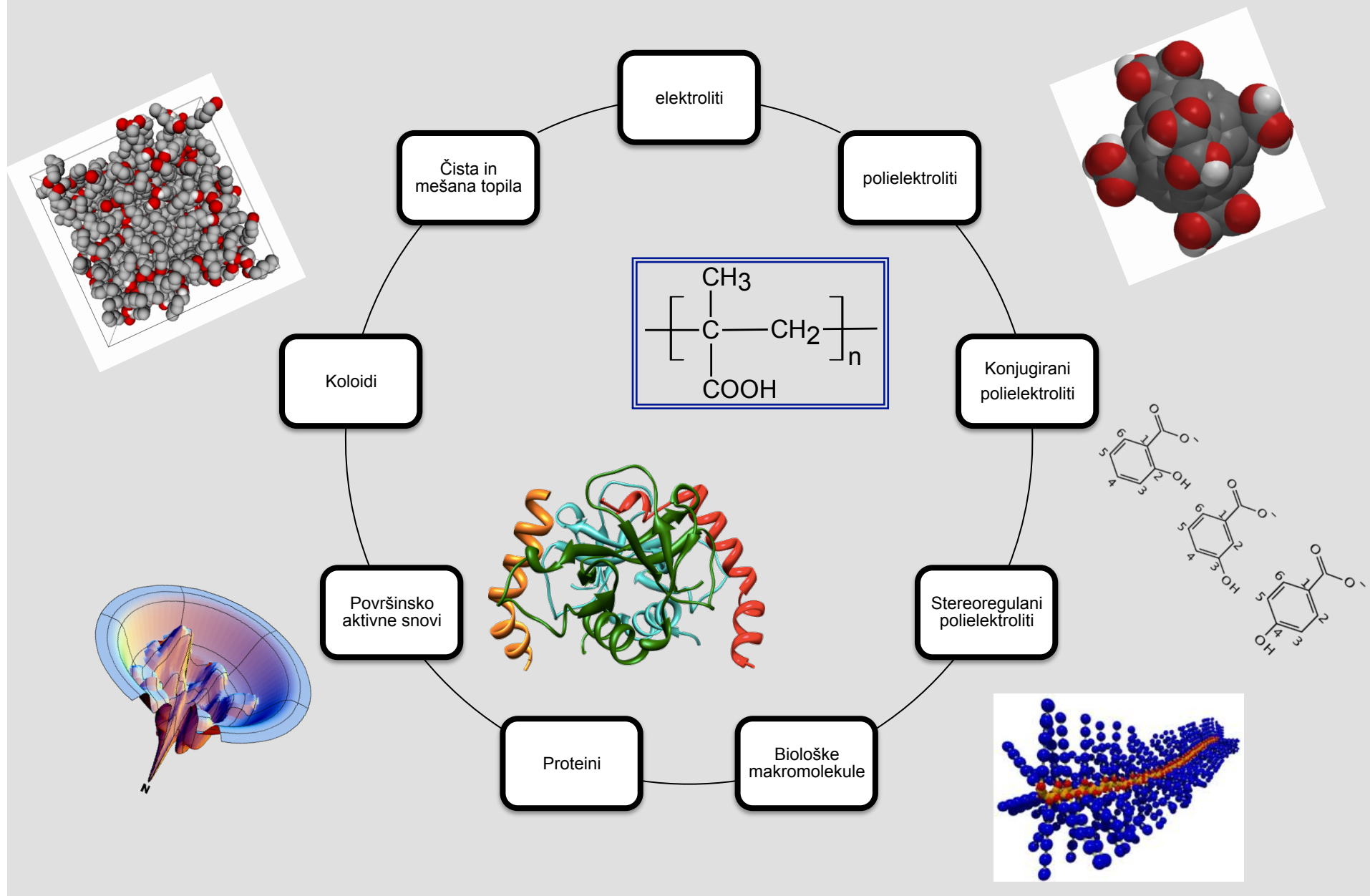
Dr. Bešter-Rogač Marija*
Dr. Bončina Matjaž*
Dr. Cerar Janez*
Dr. Godec Andrej
Dr. Hribar Lee Barbara*
Dr. Jamnik Andrej*
Dr. Kogej Ksenija*
Dr. Lah Jurij*
Dr. Lukšič Miha*

Dr. Podlipnik Črtomir*
Dr. Prislan Iztok*
Dr. Reščič Jurij*
Dr. Šarac Bojan
Dr. Tomšič Matija*
Dr. Urbič Tomaž*
Dr. Vlachy Vojko*

*možni uradni mentorji

Tehnični sodelavci:

Arrigler Vesna
Kelbl Anton
Mirzet Čuskić

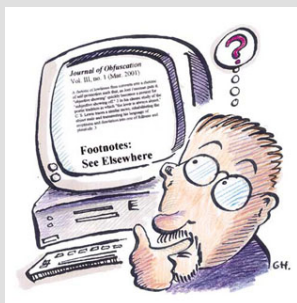




TEORIJA

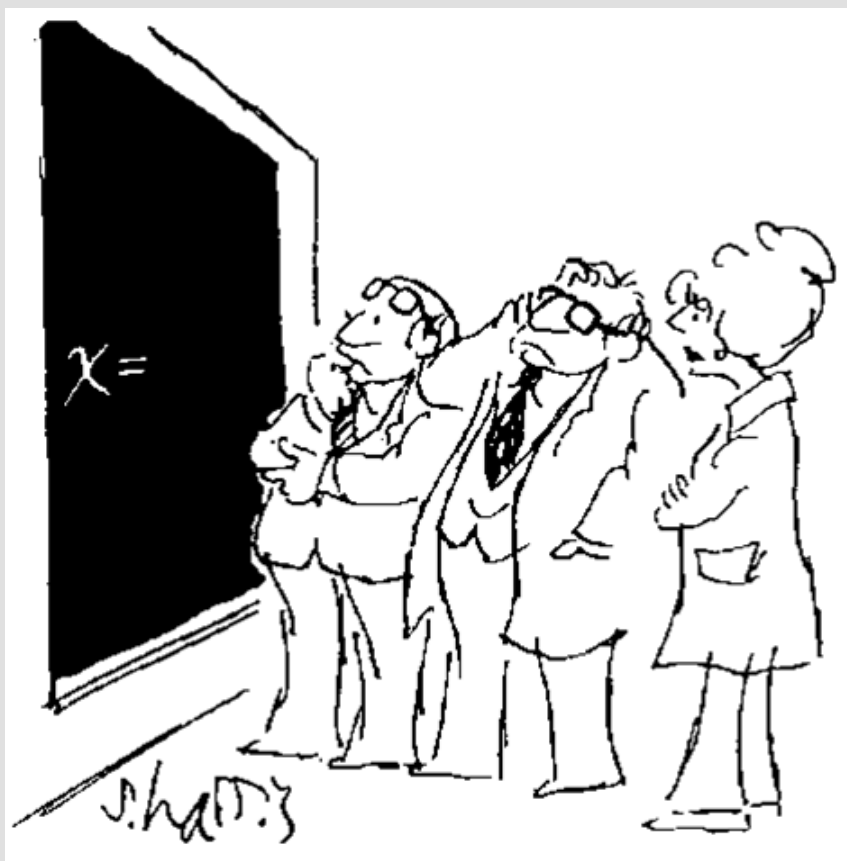
EKSPERIMENT

**TEORIJA
+
EKSPERIMENT**



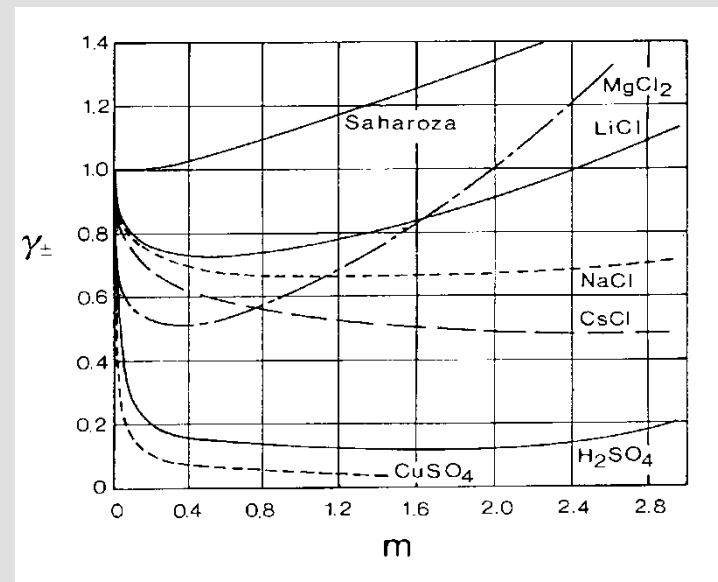
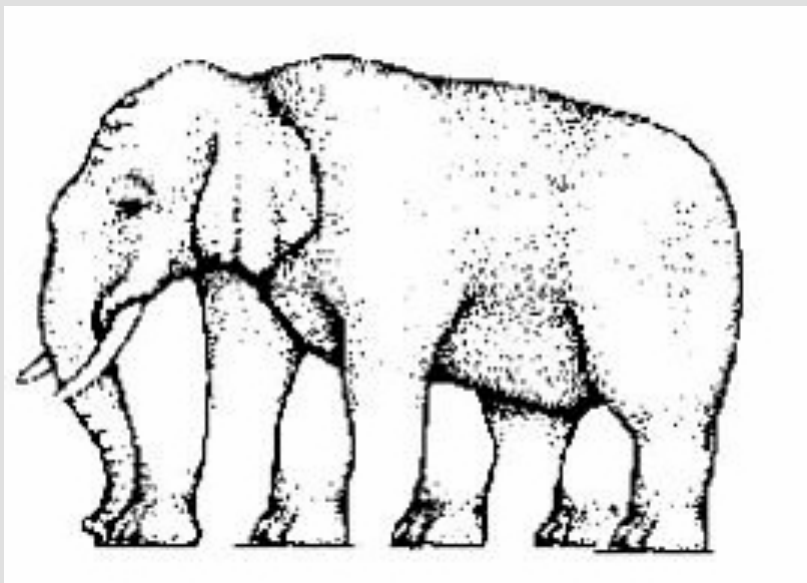
Teoretična kemija tekočin in raztopin

Vojko Vlachy
Barbara Hribar Lee
Andrej Jamnik
Miha Lukšič
Jurij Reščič
Tomaž Urbič



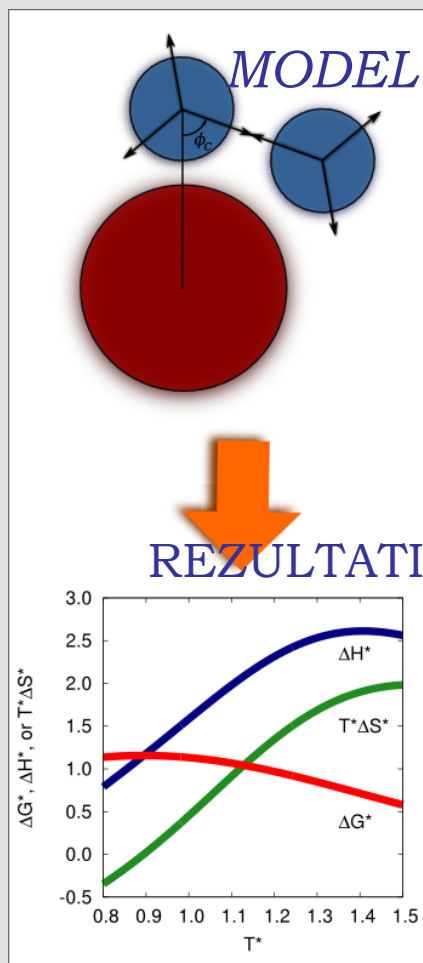


Zakaj sploh potrebujemo "teorijo"?

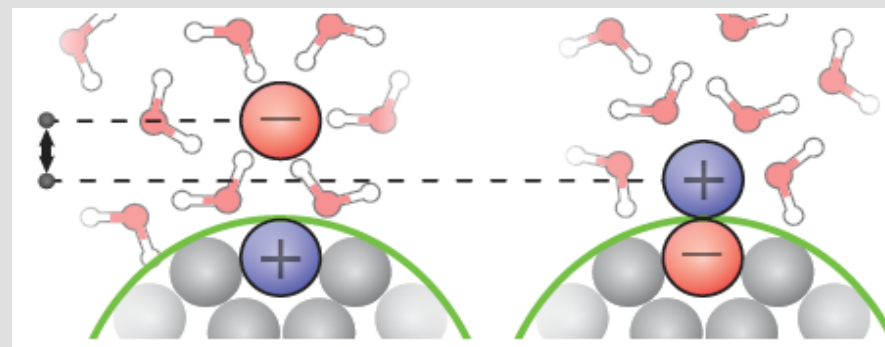
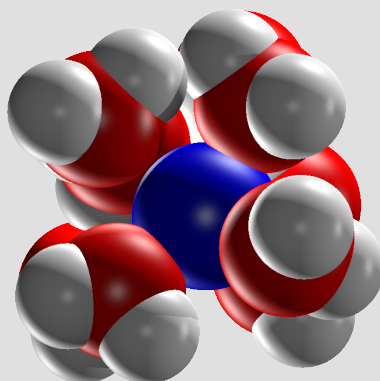


opazovati ... opaziti ... razložiti!

*Narava v ljubosumju svojem
lepote skriva nam neznane,
ne bomo jih dosegli s strojem,
dokler razum jih ne ugane.*



- **Snovi:** elektroliti, polielektroliti, koloidi
- **Teorijski pristopi:** metoda Monte Carlo, Metoda dinamike molekul, integralske enačbe; modeli vode in hidratacija preprostih topljencev, adsorpcija elektrolita v porozni snovi, modeliranje koloidnih sistemov

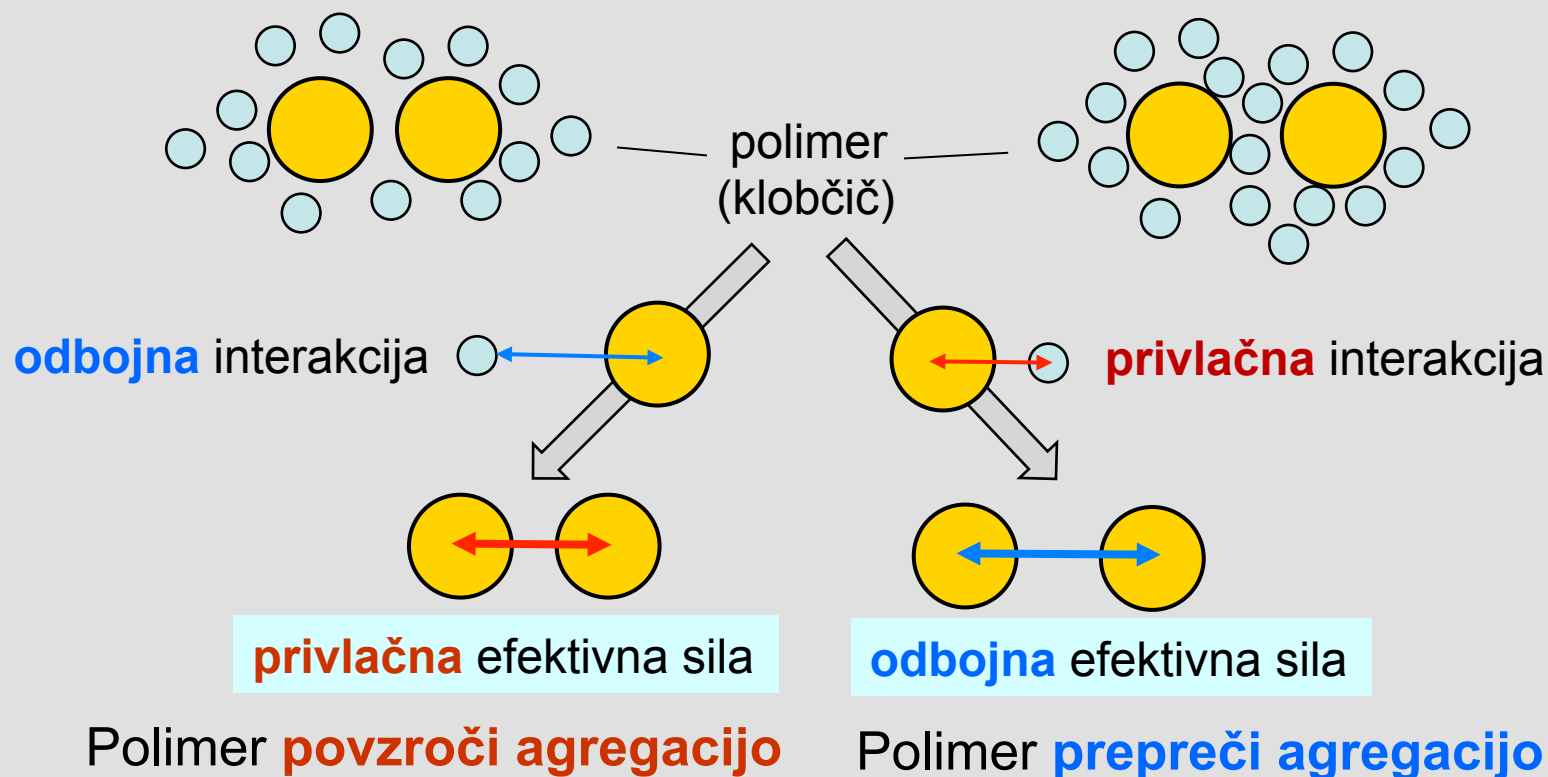


Teorijska obravnava tekočin in koloidnih sistemov

Andrej Jamnik

Primer: Efektivna interakcija med koloidnimi delci

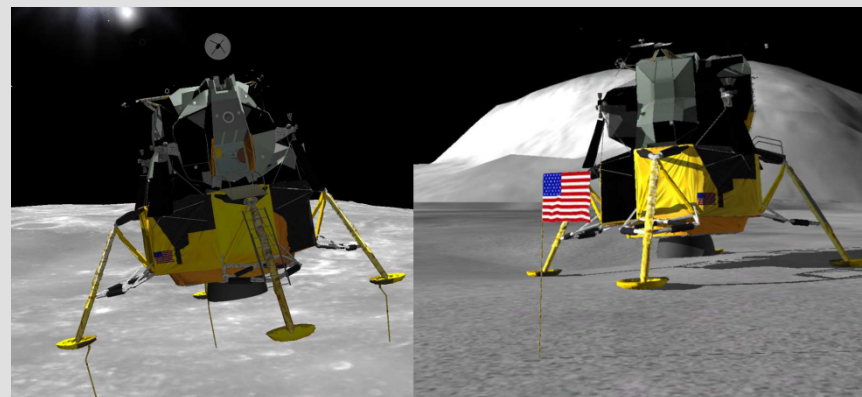
Integralske enačbe & simulacija Monte Carlo





Molekulsko modeliranje bioloških sistemov: Črtomir Podlipnik

Prikaz vezave toksina kolere na celično membrano. Za vezavo je pomemben koncept komplementarnosti med proteinom in oligosaharidom oGM_1 .

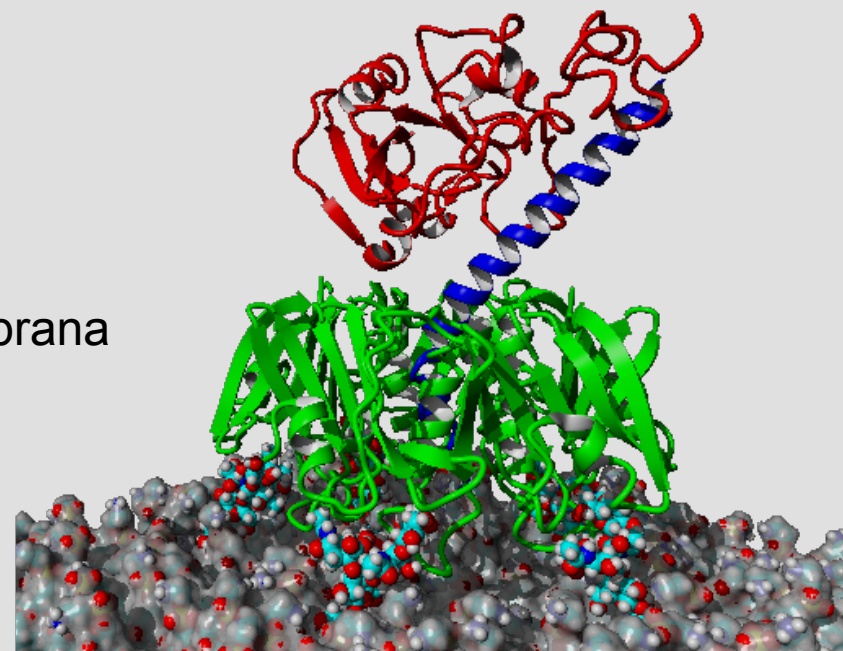
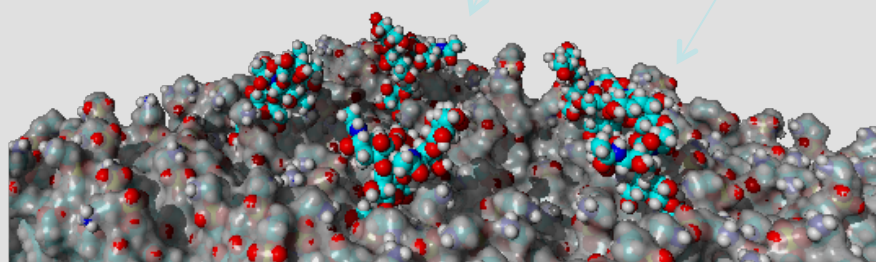


CTA (toksična enota)

CTB₅ (netoksična enota)

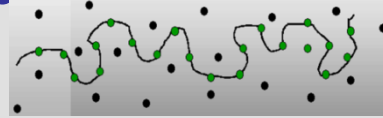
ganglozid GM_1

celična membrana



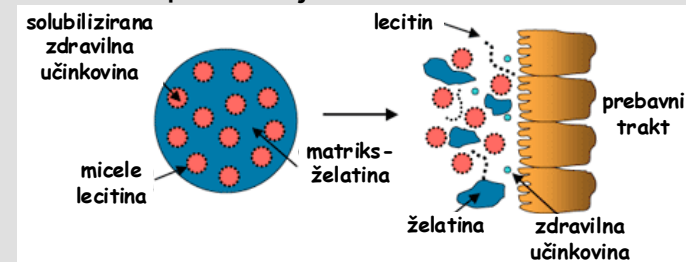
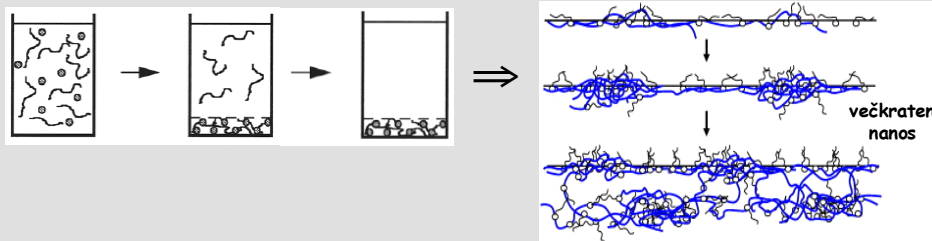


Mešanice polielektrolitov in surfaktantov: Ksenija Kogej



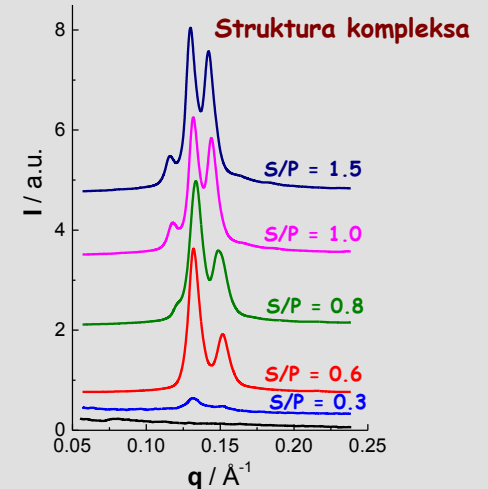
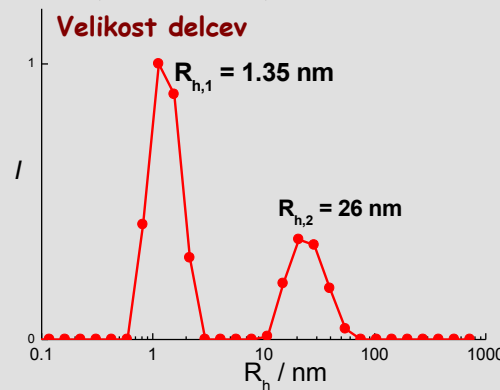
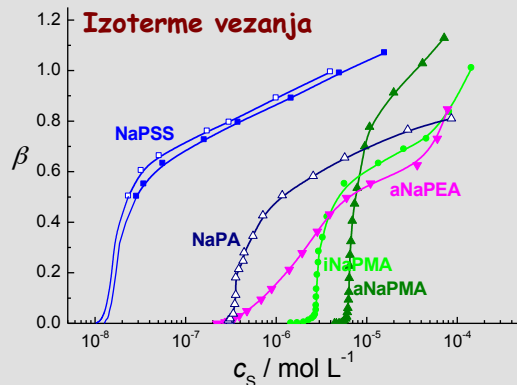
Zakaj nas zanimajo? \Rightarrow mnoge praktične uporabe

- Povečanje viskoznosti medija (lastnost polielektrolitov, PE)
- Solubilizacija hidrofobnih molekul (lastnost surfaktantov, S)
- Ločitev faz, nanos netopnega kompleksa PE-S: zaščita površin, kontrolirano sproščanje zdravilnih učinkovin



Razumevanje pojavov \Rightarrow možnosti vplivanja

- kakšne so interakcije: izoterme vezanja
- kako lahko nanje vplivamo: topilo, ionska moč raztopine, temperatura
- kakšne so lastnosti kompleksa: velikosti delcev, struktura, afiniteta do medija

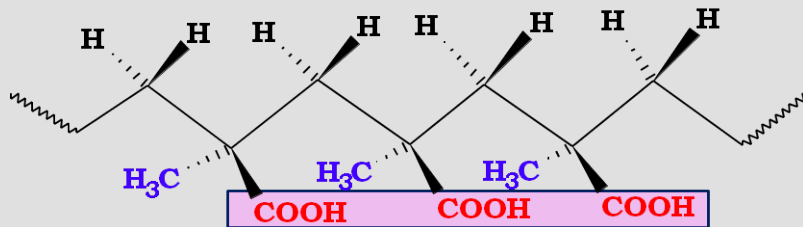
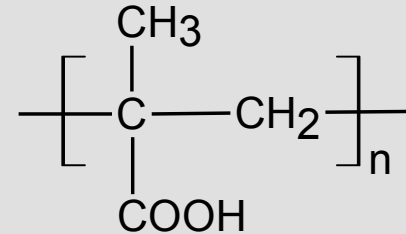




Raztopine stereoregularnih polielektrolitov: Ksenija Kogej

Polimetakrilna kislina: PMA, osnovna enota

Stereoizomere PMA: ➤ ataktična
➤ **izotaktična**
➤ sindiotaktična



urejenost na molekularnem
nivoju ⇒ vpliv na
konformacijo in lastnosti



Zakaj nas zanimajo? ⇒ uporaba na osnovi

- odvisnosti ionizacije COOH skupin od pH medija
- medmolekulske asociacije (geliranja) v primernem okolju
(topilo, ioni, ...)

Študiramo predvsem

- vpliv stereoregularnosti na asociacijo
- vpliv medija (pH, ionska jakost, topilo) in temperature
- interakcije z drugimi snovmi



nanodelci s polimetakrilno kislino

mikro-mediji za
vgrajevanje in kontrolirano
sproščanje zdravilnih
učinkovin (npr. za oralno
doziranje insulina)



Lastnosti čistih in mešanih topil

Električna prevodnost raztopin elektrolitov

Marija Bešter Rogač, Bojan Šarac

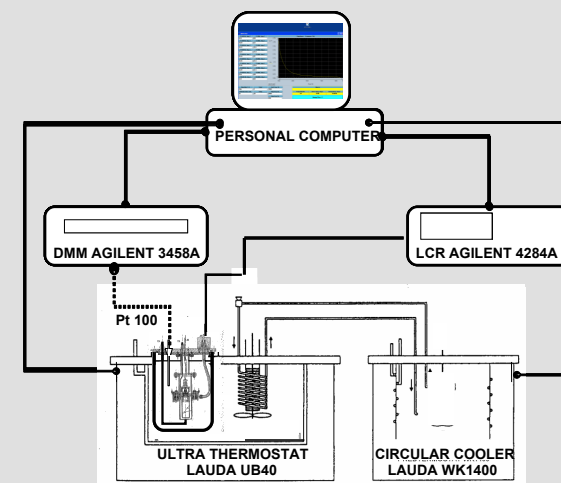
Gostota
Viskoznost
Volumske lastnosti
Prevodnost
Dielektrična konstanta



gostotomer DM 5000



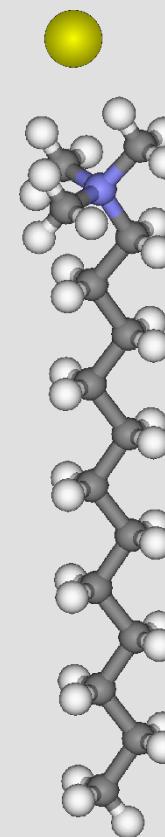
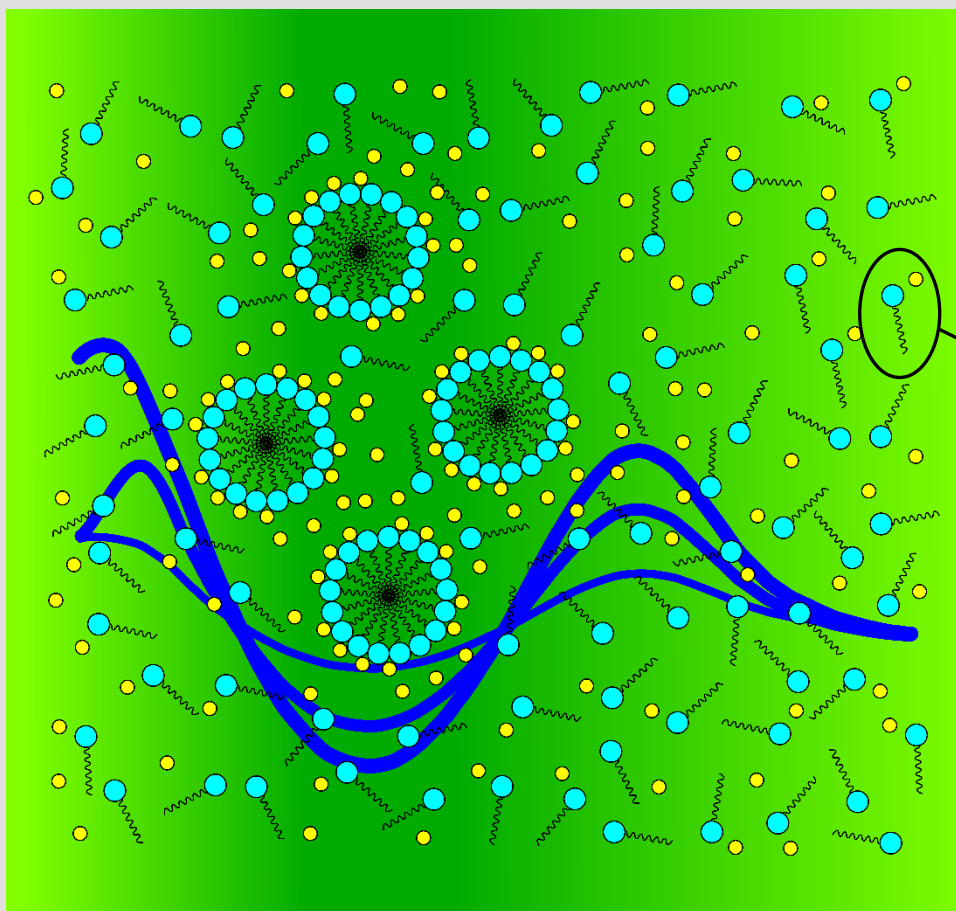
ViscoSystem AVS370



Sistem za merjenje električne prevodnosti raztopin in dielektrične konstante topil



Asociacija površinsko aktivnih molekul: Marija Bešter Rogač Bojan Šarac

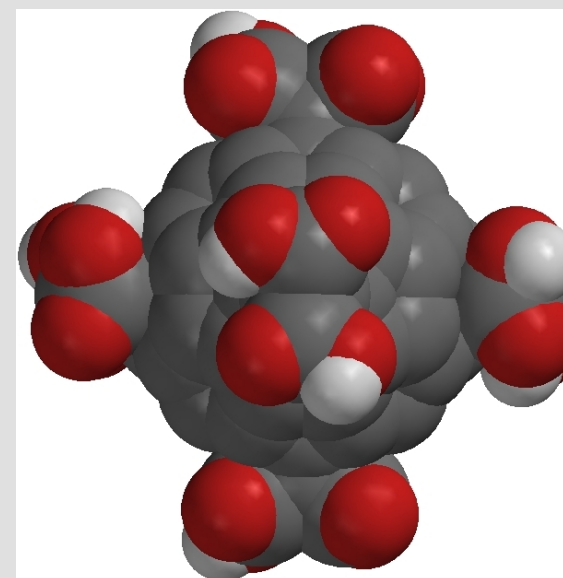
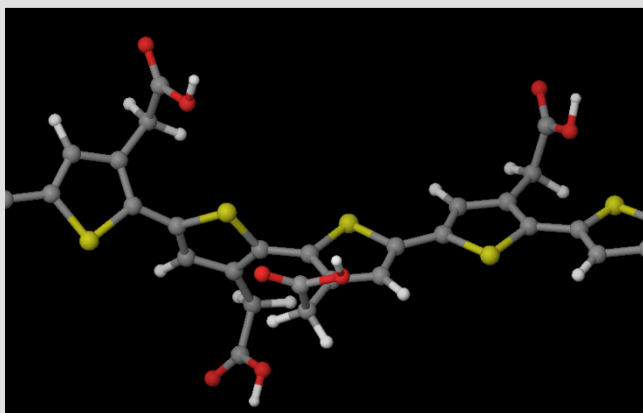




Raziskave raztopin polielektrolitov: Janez Cerar

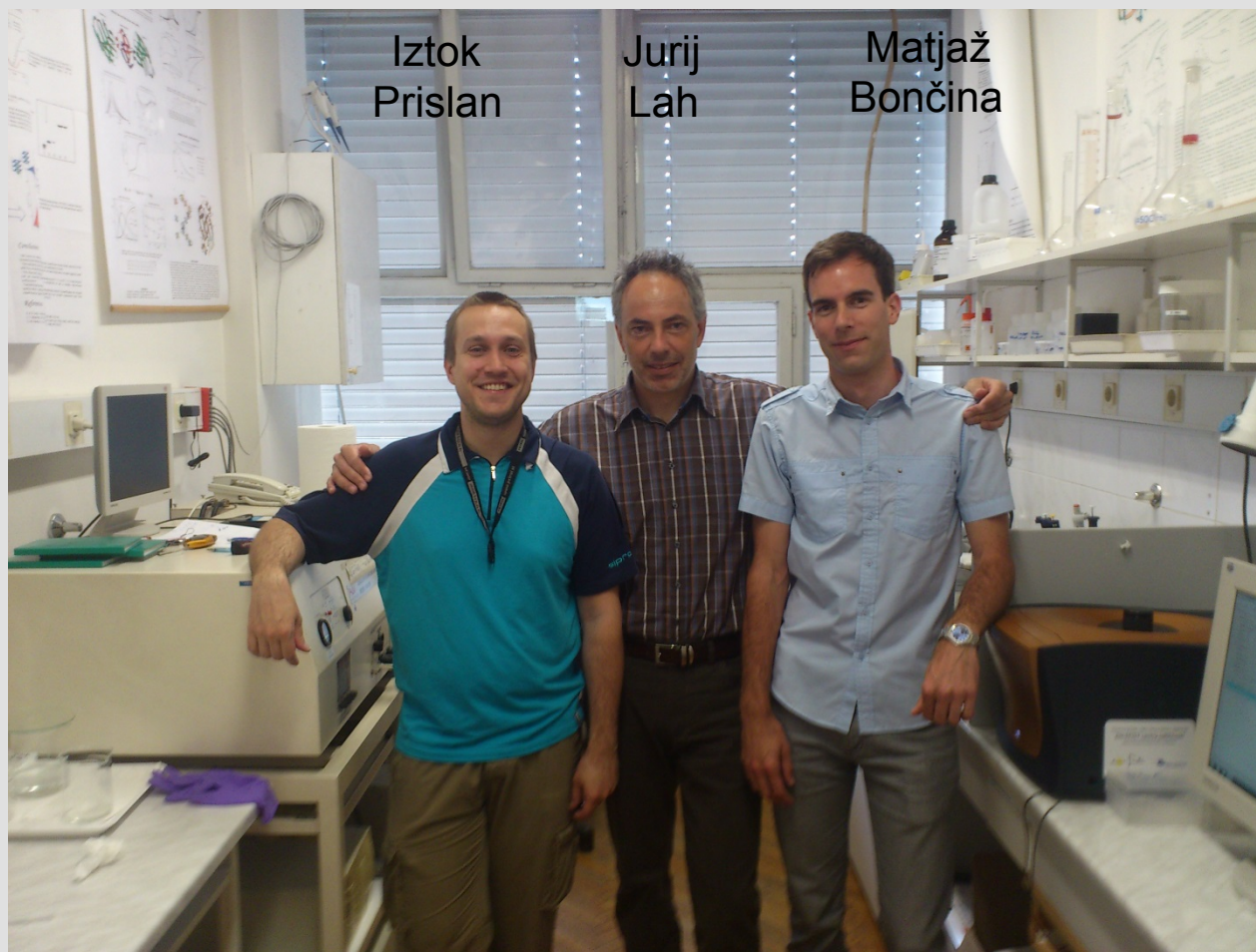
Snovi: fulereni, konjugirani polielektroliti

Zanimajo nas: termodinamske lastnosti (osmozni koeficienti, razredčilne toplote, ...) in transportne (električna prevodnost, transportna števila, viskoznost)



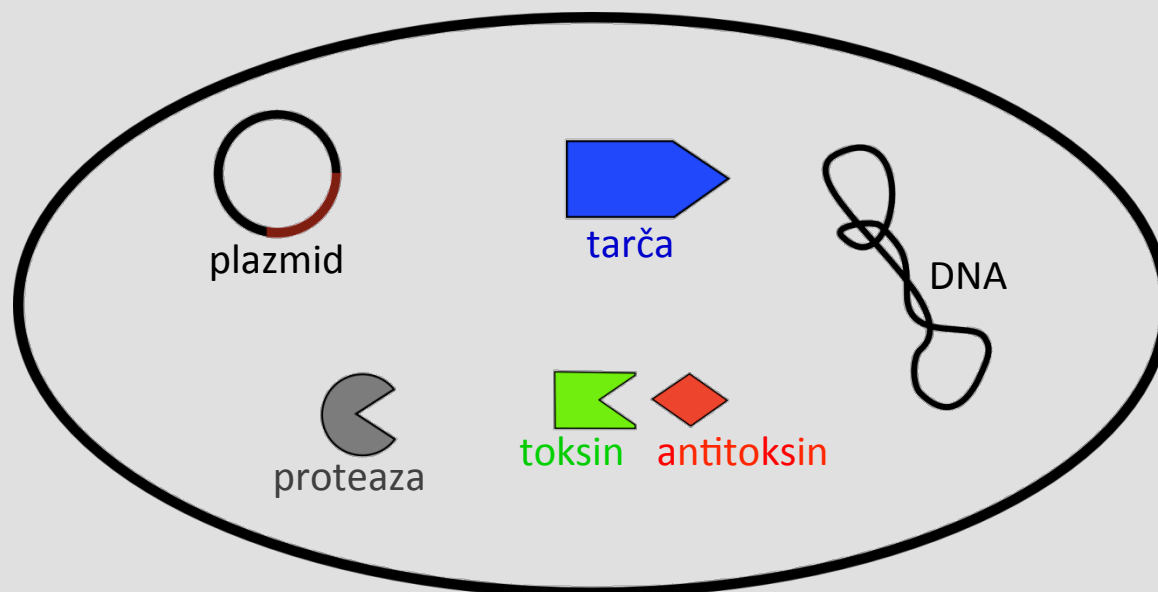


Biofizikalna kemija





Razumevanje delovanja bioloških sistemov

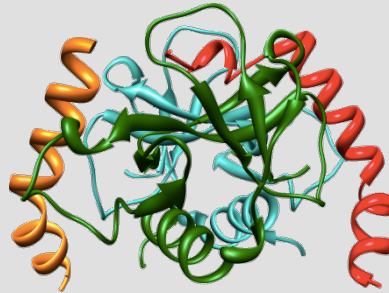


Področja:

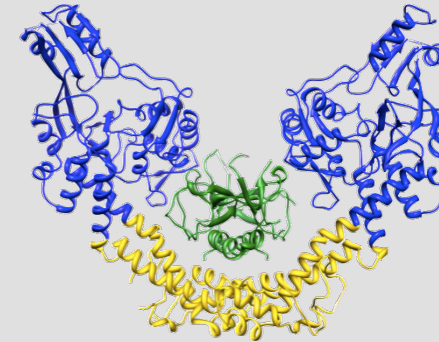
- Zvitje in molekularno prepoznavanje proteinov in nukleinskih kislin
- Moduli toksin-antitoksin kot regulatorji stresa pri bakterijah
- Nativno nestrukturirani proteini (intrinsically disordered proteins)
- Diagnostika bolezni na osnovi termodinamskega zapisa proteinov v krvni plazmi



antitoksin:DNA



antitoksin:toksin



tarča:toksin

Gonilne sile molekulskega prepoznavanja ?
Napoved obnašanja biomolekularnih sistemov?

**Prostorske strukture ne zadoščajo –
potrebujemo termodinamsko informacijo!!!**



Eksperimentalne metode

- **Kalorimetrija:**
izotermna titracijska kalorimetrija (ITC) - vezanje molekul
diferenčna dinamična kalorimetrija (DSC) - strukturni prehodi molekul
- **Spektroskopija:**
spektropolarimetrija (CD) – prostorska asimetrija molekul
spektrofluorimetrija (FL) – okolje fluoroforjev
spektrofotometrija (UV-Vis)
- **Gelska elektroforeza** - velikost in oblika molekul



ITC



DSC



CD



FL



Karakterizacija nanosistemov z metodami sipanja svetlobe

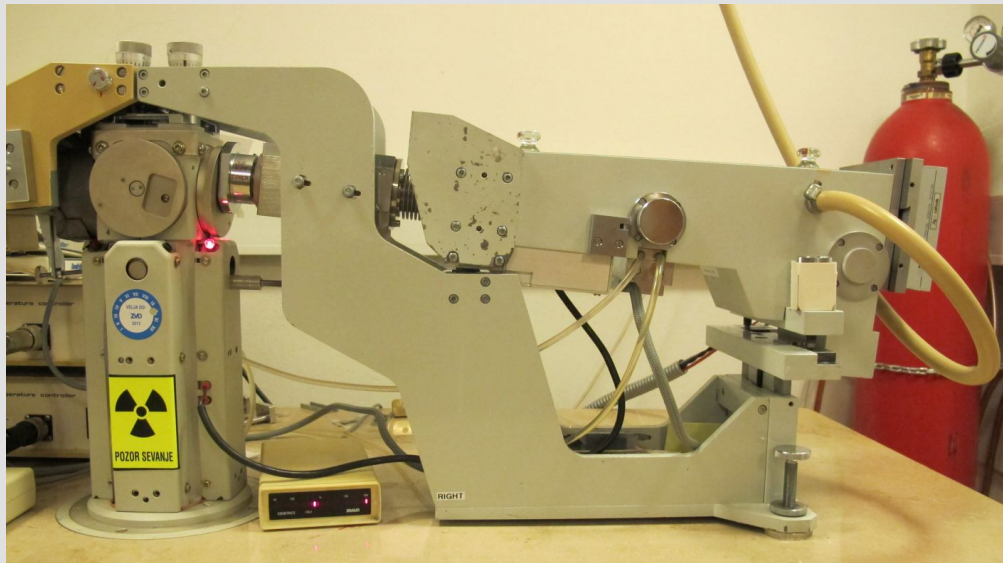
Andrej Jamnik
Matija Tomšič

Snovi (sistemi):

- **Površinsko aktivne snovi, koloidi** – „self-assembly“ sistemi neionskih in ionskih surfaktantov, blok-kopolimerov, ... (agregati, miceli, vezikli, mikroemulzije, tekoče-kristalinične faze, geli, ...)
- **Biološke makromolekule, proteini** – geometrijske značilnosti proteinov, lipidov, polisaharidov, itd. v raztopinah

Eksperimentalne metode za njihov študij:

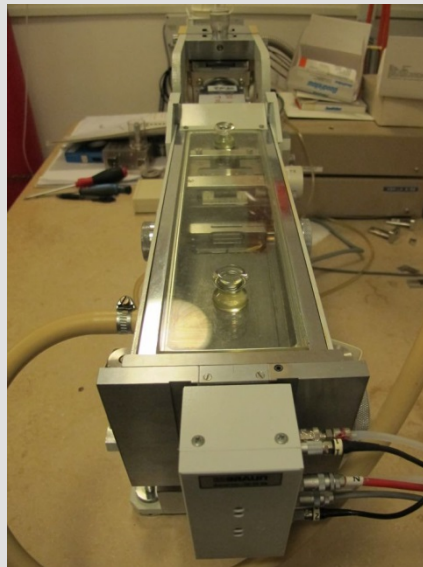
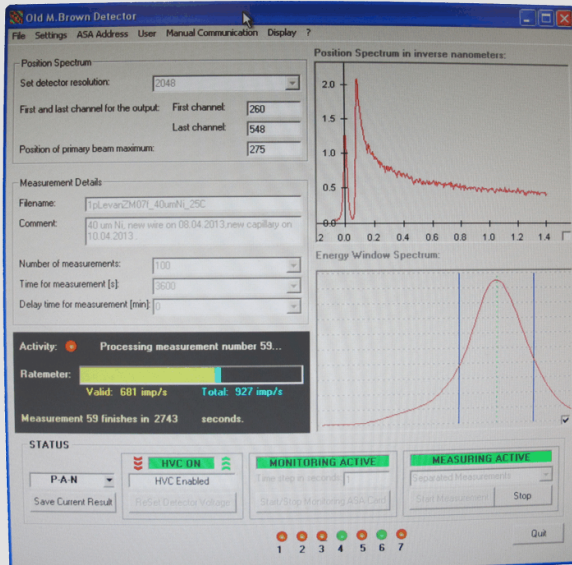
- Ozkokotno rentgensko sipanje (SAXS)
- Statično sipanje laserske svetlobe (SLS)
- Dinamično sipanje laserske svetlobe (DLS)



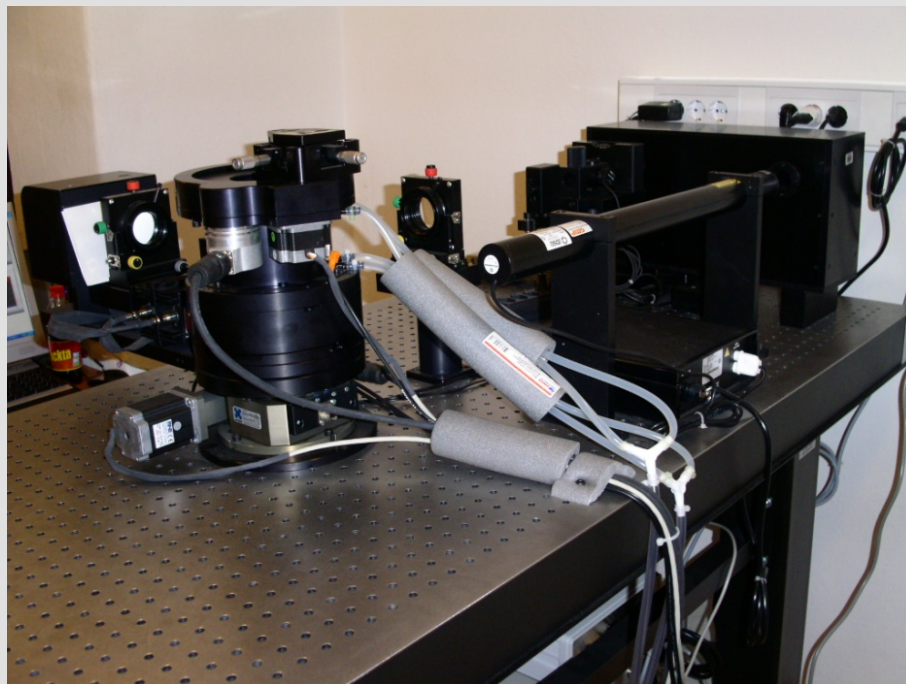
Metoda SAXS

- Raziskave **strukturnih lastnosti** koloidnih raztopin z delci dimenzij od **nekaj nm do nekaj deset nm**.

velikost, oblika in notranja struktura sipalnih delcev, meddelčne interakcije



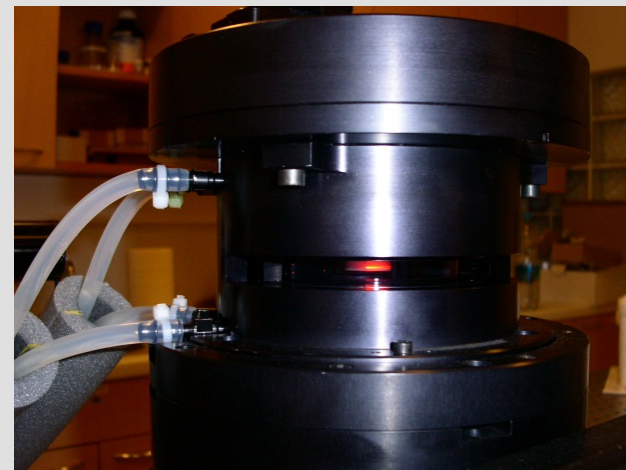
- Nanosistemi in nanotehnologija** sta moderna pojma, ki sta relevantna na različnih področjih: okoljska obnova, farmacevtska, kozmetična, prehrabna agro-kemična in kemična industrija, ...



Raziskava mikroemulzij
Strukture primarnih alkoholov

Metodi DLS in SLS

- Raziskave dinamike in strukturnih lastnosti koloidnih raztopin.
- Za DLS so primerni vzorci s sipalnimi delci dimenzij **do reda velikosti mikrometra**.
- S pomočjo SLS lahko izvedemo osnovno karakterizacijo raztopin polimerov (velikost delcev, masno povprečje molske mase, ...)



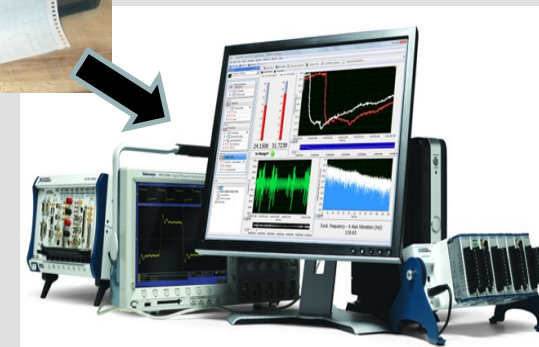
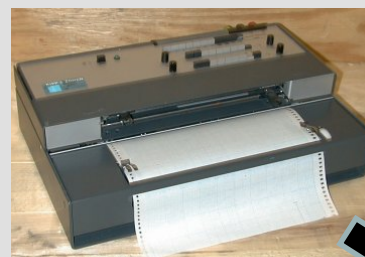


Inštrumentalne metode – Sodobne merilne in regulacijske metode v kemiji

Matija Tomšič
Jurij Reščič
Janez Cerar

Poznavanje fizikalnih osnov, inštrumenta in njegovih sestavnih delov – osnova za dobre meritve – nujen pogoj za kvalitetno eksperimentalno raziskovalno delo in pravilno interpretacijo raziskovanih fenomenov!

- SENZORIKA
- REGULACIJSKI SISTEM
- ZAJEMANJE PODATKOV
- PROCESIRANJE PODATKOV
(analogno, digitalno)
- PRIKAZ IN ANALIZA REZULTATOV





Primer: Avtomatizacija potenciometrične titracije

Avtomatiziran titrator za eno- ali večstopenjske potenciometrične titracije z modificirano bireto Gilmont.

