

Oznaka poročila: ARRS-RPROJ-ZP-2015/12



ZAKLJUČNO POROČILO RAZISKOVALNEGA PROJEKTA

A. PODATKI O RAZISKOVALNEM PROJEKTU

1. Osnovni podatki o raziskovalnem projektu

Šifra projekta	J1-4148
Naslov projekta	Solvatacija in vpliv narave ionov v bioloških sistemih
Vodja projekta	2563 Vojeslav Vlachy
Tip projekta	J Temeljni projekt
Obseg raziskovalnih ur	8430
Cenovni razred	
Trajanje projekta	07.2011 - 06.2014
Nosilna raziskovalna organizacija	103 Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo
Raziskovalne organizacije - soizvajalke	104 Kemijski inštitut 794 Univerza v Mariboru, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo
Raziskovalno področje po šifrantu ARRS	1 NARAVOSLOVJE 1.04 Kemija 1.04.01 Fizikalna kemija
Družbeno-ekonomski cilj	13.01 Naravoslovne vede - RiR financiran iz drugih virov (ne iz SUF)
Raziskovalno področje po šifrantu FOS	1 Naravoslovne vede 1.04 Kemija

B. REZULTATI IN DOSEŽKI RAZISKOVALNEGA PROJEKTA

2. Povzetek raziskovalnega projekta¹

SLO

Pri teh raziskavah smo bili osredotočeni na lastnosti vodnih raztopin takih polielektrolitov, ki imajo poleg nabitih tudi hidrofobne skupine. Pri študiju smo uporabili eksperimentalne metode s področja fizikalne kemije, kot so UV-Vis spektroskopija, ITC in "flow" kalorimetrija, meritve prevodnosti, osmotskih tlakov in transportnih števil, pa tudi ozkokotnega sipanja z rentgenskimi

žarki (SAXS) in nevtroni (SANS) ter NMR. Kombinacija raziskovalnih metod nam je dala vpogled v naravo medsebojnega delovanja ionov v raztopini in prisotnega polielektrolita. Ugotovili smo (teh podatkov v literaturi ni zaslediti), da so specifični ionski vplivi (Hofmeisterova vrsta) lahko odvisni od prisotnosti hidrofobnih skupin. Pri entalpijah mešanja se zaporedje ionov v Hofmeisterovi vrsti pri bolj hidrofobnih 12,12-ionenih obrne in je drugačno kot pri tistih, ki imajo večjo gostoto naboja. Drugače povedano: nabite skupine, vsajene v hidrofobno okolje, interagirajo z ioni soli drugače, kot če bi bile same v raztopini. To spoznanje je zelo pomembno za razumevanje medsebojnega delovanja soli in biopolimerov, predvsem proteinov. Stabilnost slednjih je odvisna tako od vrste kot množine dodane soli. Enaki zaključki veljajo za razredčilne toplote pa tudi za o vezanju podatke pridobljene z NMR. Pokazali smo tudi, da je vpliv narave soli tesno povezan z entalpijo (pa tudi prosto energijo) hidratacije protiona. Vpliv ko-ionov je manj pomemben, izjema so veliki tetra-alkilamonijevi ioni. Pomembne podatke nam daje strukturne (predvsem SANS) študije: pokazali smo, da v določenih primerih polielektrolitski vrh izgine. Tudi ta rezultat je nov in v ustrezni literaturi dosedaj ni bil opažen! Razliko med vedenjem Br in F protiionov lahko razložimo s tem, kako trdno ti ioni vežejo hidratno vodo - to pa je spet povezano z entalpijo hidratacije. SANS rezultati (odvisnost od hidrofobnosti ali naboja poliiiona) kažejo niz trendov, ki jih teoretične raziskave pa tudi dosedanje eksperimentalne študije niso predvidele oziroma opazile. NMR raziskava potrjuje te podatke in je povsem v skladu tako s termodinamičnimi kot tudi strukturnimi (SAXS, SANS) rezultati. Eksperimentalne rezultate potrjuje tudi naša simulacija dinamike molekul objavljena v PCCP (članek e).

ANG

Focus of our research was on properties of aqueous solutions of polyelectrolytes containing hydrophobic groups. For this purpose we applied different experimental methods such as: UV-Vis spectroscopy, ITC and flow calorimetry, conductivity and transport number measurements, osmotic pressure measurements, small angle X-ray (SAXS) and neutron scattering (SANS) and NMR spectroscopy. Combination of these methods yielded important insights to the interaction between the polyion charges and salt ions in the solution. One important conclusion - we are not aware of any previous data - is that ion-specific effects (Hofmeister series) may depend on presence of hydrophobic groups. In other words, charged groups embedded in hydrophobic environment behave differently in their interaction with salt ions than if alone in solution. This finding is important for understanding the biopolymers, and especially for protein-salt interaction. Stability of protein in aqueous solution depends namely on the type and concentration of added salt. Similar conclusions apply to heats of dilution results and to our NMR data. We showed that the effect of salts' nature depends on the hydration enthalpy (also free energy) of the counterion. The effect of co-ions was also studied but, except for the bulky alkylammonium ions, it is not that important. Very important information comes from structural (especially SANS) studies: we showed that in some situation the, so called, polyelectrolyte peak disappears. This result is new - so far unnoticed in polyelectrolyte studies. The difference in behaviour of Br and F counterions can be explained by how strongly water hydrates the relevant ion. The enthalpy of hydration data are important again. Results of the SANS studies (effects of the backbone hydrophobicity or charge) show the trends not seen before; they have not been foreseen theoretically, nor observed experimentally. NMR spectroscopy supports these data and is consistent with structural (SANS, SAXS) and thermodynamic measurements. The conclusions are supported by our own Molecular Dynamics simulations, published in PCCP (article e).

3. Poročilo o realizaciji predloženega programa dela na raziskovalnem projektu²

Naše teoretične in eksperimentalne raziskave so obsegale predvsem študij raztopin elektrolitov in polielektrolitov. i) Prvo področje je raziskava kationskih polielektrolitov ionenov. Le-te je moč pripraviti (sintetizirati) z različnimi stopnjami hidrofobnosti (različno gostoto naboja na poliiionu), zato so še posebej primerni za ugotavljanje vpliva hidrofobnosti na iono-specifične interakcije. Sintetizirali smo nove ionene (6,12- in 12,12-ionene) s fluoridnimi, kloridnimi, bromidnimi in jodidnimi protiioni. Skupaj z manj nabitimi vrstami (3,3, 6,6, in 6,9-ioneni) smo proučevali njihove lastnosti pri razredčitvi in mešanju z alkalijskimi halogenidi. Rezultate smo objavili v večih člankih:

- a) BONČINA, Matjaž, LUKŠIČ, Miha, SERUČNIK, Mojca, VLACHY, Vojko. Thermodynamic analysis of the interaction of partially hydrophobic cationic polyelectrolytes with sodium halide salts in water. *Molecular Physics*, ISSN 0026-8976, 2014, vol. 112, no. 9/10, str. 1222-1229, doi: [10.1080/00268976.2013.871365](https://doi.org/10.1080/00268976.2013.871365). [COBISS.SI-ID [1707823](https://www.cobiss.si/id/1707823)].
- b) RODIČ, Peter, BRATUŠA, Marsel, LUKŠIČ, Miha, VLACHY, Vojko, HRIBAR, Barbara. Influence of the hydrophobic groups and the nature of counterions on ion-binding in aliphatic ionene solutions. *Colloids and surfaces. A, Physicochemical and Engineering Aspects*, ISSN 0927-7757. [Print ed.], 2013, vol. 424, no. 1, str. 18-25, doi: [10.1016/j.colsurfa.2013.02.021](https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2013.02.021). [COBISS.SI-ID [36602373](https://www.cobiss.si/id/36602373)].
- c) ČEBAŠEK, Sašo, SERUČNIK, Mojca, VLACHY, Vojko. Presence of hydrophobic groups may modify the specific ion effect in aqueous polyelectrolyte solutions. *The journal of physical chemistry. B, Condensed matter, materials, surfaces, interfaces & biophysical*, ISSN 1520-6106, apr. 2013, vol. 117, no. 13, str. 3682-3688, ilustr., doi: [10.1021/jp401313f](https://doi.org/10.1021/jp401313f). [COBISS.SI-ID [36662021](https://www.cobiss.si/id/36662021)].
- d) DRUCHOK, M., LUKŠIČ, Miha, VLACHY, Vojko. Explicit water molecular dynamics study of the mobility of halide ions in presence of ionene oligocations. *The Journal of chemical physics*, ISSN 0021-9606, 2012, vol. 137, no. 1, art. no. 014511 (8 str.), doi: [10.1063/1.4731718](https://doi.org/10.1063/1.4731718). [COBISS.SI-ID [36050437](https://www.cobiss.si/id/36050437)].
- e) LUKŠIČ, Miha, BONČINA, Matjaž, VLACHY, Vojko, DRUCHOK, M. Isothermal titration calorimetry and molecular dynamics study of ion-selectivity in mixtures of hydrophobic polyelectrolytes with sodium halides in water. *PCCP. Physical chemistry chemical physics*, ISSN 1463-9076, 2012, vol. 14, no. 6, str. 2024-2031, doi: [10.1039/C2CP23137A](https://doi.org/10.1039/C2CP23137A). [COBISS.SI-ID [35707397](https://www.cobiss.si/id/35707397)].
- f) SERUČNIK, Mojca, BONČINA, Matjaž, LUKŠIČ, Miha, VLACHY, Vojko. Specific counter-ion and co-ion effects revealed in mixing of aqueous solutions of 3,3 and 6,6-ionenes with solutions of low molecular weight salts. *PCCP. Physical chemistry chemical physics*, ISSN 1463-9076, 2012, vol. 14, no. 19, str. 6805-6811, doi: [10.1039/C2CP40571G](https://doi.org/10.1039/C2CP40571G). [COBISS.SI-ID [35925509](https://www.cobiss.si/id/35925509)].
- g) MALIKOVA, Natalie, ČEBAŠEK, Sašo, GLENISSON, Vincent, BHOWMIK, Debsindhu, CARROT, Geraldine, VLACHY, Vojko. Aqueous solutions of ionenes : interactions and counterion specific effects as seen by neutron scattering. *PCCP. Physical chemistry chemical physics*, ISSN 1463-9076, 2012, vol. 14, no. 37, str. 12898-12904, doi: [10.1039/C2CP41859B](https://doi.org/10.1039/C2CP41859B). [COBISS.SI-ID [36222725](https://www.cobiss.si/id/36222725)].
- h) MALIKOVA, Natalie, ROLLET, Anne-Laure, ČEBAŠEK, Sašo, TOMŠIČ, Matija, VLACHY, Vojko. On the crossroads of current polyelectrolyte theory and counterion-specific effects. *PCCP. Physical chemistry chemical physics*, ISSN 1463-9076, 2015, str. 1-10, ilustr. <http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2015/cp/c4cp05469e#!divAbstract>, doi: [10.1039/C4CP05469E](https://doi.org/10.1039/C4CP05469E). [COBISS.SI-ID [1536162243](https://www.cobiss.si/id/1536162243)].
- i) ČEBAŠEK, Sašo, LUKŠIČ, Miha, POHAR, Ciril, VLACHY, Vojko. Thermodynamics of dilution and the Hofmeister series in aqueous solutions of aliphatic ionenes with halide counterions. *Journal of chemical and engineering data*, ISSN 0021-9568, 2011, vol. 56, no. 4, str. 1282-1292, doi: [10.1021/je101136a](https://doi.org/10.1021/je101136a). [COBISS.SI-ID [34960645](https://www.cobiss.si/id/34960645)].
- Drugo področje so zajemale raziskave konjugiranih polielektrolitov, kot so soli poli (tiofen3-il-ocetne) kisline v vodi.
- a) HOSTNIK, Gregor, VLACHY, Vojko, BONDAREV, Dmitrij, VOHLÍDAL, Jiři, CERAR, Janez. Salt-specific effects observed in calorimetric studies of alkali and tetraalkylammonium salt solutions of poly(thiophen-3-ylacetic acid). *PCCP. Physical chemistry chemical physics*, ISSN 1463-9076, 2015, vol. 17, no. 4, str. 2475-2483, ilustr.

<http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2015/cp/c4cp04710a#!divAbstract>, doi: [10.1039/c4cp04710a](https://doi.org/10.1039/c4cp04710a). [COBISS.SI-ID [1536129219](https://www.cobiss.si/record/1536129219)].

b) HOSTNIK, Gregor, BONDAREV, Dmitrij, VOHLÍDAL, Jiři, ČEBAŠEK, Sašo, ŽAGAR, Ema, VLACHY, Vojko, CERAR, Janez. Transport properties and ion binding in aqueous solutions of alkali metal salts of poly(thiophen-3-ylacetic acid). *Journal of molecular liquids*, ISSN 0167-7322. [Print ed.], 2014, vol. 198, str. 173-180, ilustr. http://ac.els-cdn.com/S0167732214002852/1-s2.0-S0167732214002852-main.pdf?tid=23e64eb0-0845-11e4-b949-00000aacb35f&acdnat=1405005557_b931e811c34c27a10f550875f64f8e0a, doi: [10.1016/j.molliq.2014.04.042](https://doi.org/10.1016/j.molliq.2014.04.042). [COBISS.SI-ID [1739311](https://www.cobiss.si/record/1739311)].

c) HOSTNIK, Gregor, VLACHY, Vojko, BONDAREV, Dmitrij, VOHLÍDAL, Jiři, CERAR, Janez. UV/Vis study of the alkali salts of poly(thiophen-3-ylacetic acid) in water. *Acta chimica slovenica*, ISSN 1318-0207. [Tiskana izd.], 2012, vol. 59, no. 3, str. 571-581. <http://acta.chem-soc.si/59/59-3-571.pdf>. [COBISS.SI-ID [36187141](https://www.cobiss.si/record/36187141)].

d) HOSTNIK, Gregor, VLACHY, Vojko, BONDAREV, Dmitrij, VOHLÍDAL, Jiři, CERAR, Janez. Potentiometric and conductometric study of aqueous solutions of lithium and sodium salts of poly(thiophen-3-ylacetic acid). *Acta chimica slovenica*, ISSN 1318-0207. [Tiskana izd.], 2012, vol. 59, no. 3, str. 582-589. <http://acta.chem-soc.si/59/59-3-582.pdf>. [COBISS.SI-ID [36187397](https://www.cobiss.si/record/36187397)].

Na področju teorije smo razvili model, ki obravnava raztopine makroionov, vode in soli, na način, da so vse prisotne vrste obravnavane enakovredno. Model bo služil za obravnavo faznega ravnotežja v raztopinah proteinov. Obravnavali pa smo tudi hidratacijo hidrofobov in ionov v polju IR sevanja.

a) KALYUZHNYI, Yu. V., VLACHY, Vojko. Model for a mixture of macroions, counterions, and co-ions in a waterlike fluid. *Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics*, ISSN 1539-3755, 2014, vol. E90, no. 12, art. no. 012308 (str. 1-7), ilustr. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.90.012308>, doi: [10.1103/PhysRevE.90.012308](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.90.012308). [COBISS.SI-ID [1748271](https://www.cobiss.si/record/1748271)].

b) MOHORIČ, Tomaž, HRIBAR, Barbara, VLACHY, Vojko. Effects of the translational and rotational degrees of freedom on the hydration of simple solutes. *The Journal of chemical physics*, ISSN 0021-9606, 2014, vol. 140, no. 18, art. no. 184510 (str. 1-7), ilustr. http://scitation.aip.org/docserver/fulltext/aip/journal/jcp/140/18/1.4875280.pdf?expires=1400132190&id=id&accname=quest_checksum=F36ED599283FE83872AB149769FEC65D, doi: [10.1063/1.4875280](https://doi.org/10.1063/1.4875280). [COBISS.SI-ID [1708079](https://www.cobiss.si/record/1708079)].

4. Ocena stopnje realizacije programa dela na raziskovalnem projektu in zastavljenih raziskovalnih ciljev³

Projekt je bil v celoti realiziran in rezultati novi in zanimivi. Nadaljevanje nekaterih raziskav (zlasti teoretičnih) je v teku. Žal financiranje projekta ni bilo podaljšano. Razlog je predvsem nizka kvaliteta predlagatelja (V. Vlacy). Medtem, ko je bil ob predložitvi tega projekta "vreden" najmanj 4,5 točke, jih je sedaj (ob ponovitvi) samo še 3,5.

5. Utemeljitev morebitnih sprememb programa raziskovalnega projekta oziroma sprememb, povečanja ali zmanjšanja sestave projektne skupine⁴

Ni sprememb.

6. Najpomembnejši znanstveni rezultati projektne skupine⁵

Znanstveni dosežek

1.	COBISS ID	36498181	Vir: COBISS.SI
	Naslov	<i>SLO</i> O termodinamiki in gibljivosti ionov v nabitih nanoporoznih sistemih	
		<i>ANG</i> On thermodynamics and mobility of ions enclosed within charged nanoporous system	
	Opis	<i>SLO</i> V tem članku podajamo rezultate simulacij in teorije za delno zamrznjene sisteme, ki jih sestavljajo enovalentni ioni. Proučevali smo tako statične kot dinamične lastnosti tega sistema. V ta namen smo uporabili metodo Brownove dinamike in t.i. replika integralsko enačbo, ki je edina primerna za teoretični opis teh sistemov. Celotni sistem sestavljata dva podsistema: adsorbat in adsorbent. Medtem, ko posamezna podsistema nista elektronevtralna, pa seveda celotni sistem je. Naboji (ioni) so predstavljeni kot Lennard-Jonesove kroglice z naboji v središču. Topilo je obravnavano kot dielektrični kontinuum. Namen študije je poiskati povezave med gibljivostjo ionov (koeficient lastne difuzije) in njihovimi aktivnostnimi koeficienti.	
		<i>ANG</i> Simulations and integral equation results are presented for a model partly quenched system composed of monovalent ions. Static and dynamic properties of the system are explored using the replica Ornstein–Zernike theory in the hypernetted chain approximation and Brownian dynamic simulations. The model system consists of two subsystems: one is a collection of charged obstacles (matrix), and the other is an invading electrolyte. The overall system is electroneutral, while the subsystems are not. Charged species are represented by Lennard–Jones spheres of equal size, with either positive or negative charge in the center. The solvent is treated as a continuous dielectric. The purpose of this study is to correlate the mobility of ions (selfdiffusion coefficients) with their individual activity coefficients.	
	Objavljeno v	EDP Sciences;Springer; The European physical journal, Special topics; 2013; Vol. 216; str. 95-105; Impact Factor: 1.760;Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.852; WoS: UI; Avtorji / Authors: Hribar Barbara, Jardat Marie, Vlachy Vojko	
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	
2.	COBISS ID	36662021	Vir: COBISS.SI
	Naslov	<i>SLO</i> Prisotnost hidrofobnih skupin lahko vpliva na specifične efekte v raztopinah polielektrolitov	
		<i>ANG</i> Presence of hydrophobic groups may modify the specific ion effect in aqueous polyelectrolyte solutions	
	Opis	<i>SLO</i> Določili smo razredčilne entalpije raztopin alifatskih 6,12 in 12,12-ionen bromidov in fluoridov ter entalpije mešanja teh ionenov z nizkomolekularnimi solmi, kot sta NaF in NaBr. Meritve smo primerjali s teoretičnimi rezultati na osnovi Poisson-Boltzmannove enačbe. Po teoriji bi morale biti razredčilne toplote eksotermne, entalpije mešanja pa endotermne. Eksperimenti kažejo, da predznak toplotnega efekta zavisi od narave dodane soli (od protiiona), kot tudi od hidrofobnosti (to je od števila x,y metilenskih skupin) poliona. Pokazali smo, da prisotnost hidrofobnih skupin vpliva na zaporedje toplotnih efektov glede na dodano sol. V prisotnosti močno hidrofobnega 12,12 ionena se vrstni red v Hofmeisterovi vrsti zamenja in je drugačen kot pri 3,3, 6,9, oziroma 6,12-ionenih.	
		Enthalpies of dilution of aqueous solutions of aliphatic 6,12- and 12,12-ionene bromides and fluorides and enthalpies of mixing with low molecular weight salts, such as NaF and NaBr, are determined. The comparison with theoretical results, based on the Poisson–Boltzmann cell model, is presented. The theory predicts for the enthalpy of dilution	

			to be exothermic and the enthalpy of mixing endothermic, while experiments show that signs of the heat effects depend on the nature of the counterion of the added salt, as also on the hydrophobicity (numbers x, y of methylene groups) of the ionene. We show that the salts when ordered by heat effects produced by mixing of NaF and NaBr with 3,3, 6,9, or 6,12-ionene fluorides and bromides follow the opposite ordering than in the case when the same alkali halide salts are mixed with more hydrophobic 12,12-ionene salts.
		ANG	
	Objavljeno v		American Chemical Society; The journal of physical chemistry. B, Condensed matter, materials, surfaces, interfaces & biophysical; 2013; Vol. 117, no. 13; str. 3682-3688; Impact Factor: 3.377; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 3.585; WoS: EI; Avtorji / Authors: Čebašek Sašo, Seručnik Mojca, Vlachy Vojko
	Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek
3.	COBISS ID	36602373	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Vpliv hidrofobnosti poliiona in narave protiiona na vezanje ionov v raztopinah alifatskih ionenov
		ANG	Influence of the hydrophobic groups and the nature of counterions on ion-binding in aliphatic ionene solutions
	Opis	SLO	S pomočjo merjenja prevodnosti in transportnih števil protiionov ter polielektrolitske konstituyente v vodnih raztopinah 3,3, 6,6-in 6,9-ionen fluoridov in bromidov smo študirali transportne lastnosti teh sistemov ter vezavo protiionov na poliion pri temperaturi 298 K. Delež prostih protiionov ter učinkovite gostote naboja poliionov smo izračunali s pomočjo teorije asociacije. Ugotovili smo, da vezava protiionov na poliion močno zavisi od (i) gostote naboja poliiona ter (ii) kemijske narave dotičnega protiiona. Vpliv gostote naboja je največji v raztopinah ionen bromidov. Razlike v obnašanju raztopin ionen fluoridov in bromidov so posledica različne hidratacije protiionov. Ugotovili smo, da je učinkovita gostota naboja poliiona dosti manjša od tiste, ki jo izračunamo iz strukturnih podatkov za poliion.
		ANG	Transport and binding capabilities in aqueous solutions of 3,3, 6,6, and 6,9-ionene fluorides and bromides at 298 K were explored through the experimentally determined values for transport numbers of counterions and polyion constituents, along with the data for electrical conductivity in these solutions. Within the association theory, the fractions of free counterions and the effective linear charge densities of polyions were calculated. It was determined that binding of the counterions to the polyion critically depends (i) on charge density of the polyion and (ii) on the chemical nature of the counterion in question. The effects of the charge density are the strongest in solutions of ionene bromides. Differences in the behavior of solutions of ionene fluorides and bromides are the consequence of different hydration capabilities of these ions. The effective linear charge density was found to be much lower than predicted from structural parameters of ionenes.
	Objavljeno v		Elsevier; Colloids and surfaces. A, Physicochemical and Engineering Aspects; 2013; Vol. 424, no. 1; str. 18-25; Impact Factor: 2.354; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 3.585; WoS: EI; Avtorji / Authors: Rodič Peter, Bratuša Marsel, Lukšič Miha, Vlachy Vojko, Hribar Barbara
	Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek
4.	COBISS ID	35925509	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Vpliv narave dodane soli na toplote mešanja 3,3 in 6,6-ionenov z nekaterimi solmi v vodi.

		ANG	Specific counter-ion and co-ion effects revealed in mixing of aqueous solutions of 3,3 and 6,6-ionenes with solutions of low molecular weight salts
Opis		SLO	Določali smo entalpije mešanja 3,3 in 6,6-ionen fluoridov z različnimi natrijevimi solmi (kot so, acetati, klorati, tiocianati, itd) v vodi. Elektrostatske teorije, ki obravnavajo vodo kot zvezno snov, napovedujejo endotermen efekt v teh primerih, a poskusi kažejo, da so entalpije mešanja lahko tudi eksotermne. Če raztopino ionene fluorida v vodi mešamo z NaF ali NaBr se toplota v resnici porablja, pri mešanju ionenov z ostalimi solmi pa se toplota sprošča. Entalpije mešanja so močno korelirane z entalpijo hidratacije protiiona; zveza je linearna. Za rezultat smo dobili liotropno vrsto, podobno Hofmeisterovi. Proučili smo tudi vpliv narave koiona. V ta namen smo ione bromide titrirali z tetrametil, tetraetil in tetrapropil bromidi. Entalpije so bile eksotermne v vseh primerih, ionospecifični vplivi pa nekoliko nepričakovano izraziti.
		ANG	Enthalpies of mixing of aliphatic 3,3 and 6,6-ionene fluorides with low molecular weight salts (sodium formate, acetate, nitrate, chlorate(V), and thiocyanate), all dissolved in water, were determined. Electrostatic theory, predicted the enthalpy of mixing to be endothermic in all the cases, while experiments showed that this is not always true. When an aqueous solution of 3,3-ionene-fluoride was mixed with a solution of NaF (or formate and acetate) in water, the effect was indeed endothermic. For all other salts heat was released upon mixing. The enthalpy of mixing was strongly correlated with the enthalpy of hydration of the counterion of the low molecular weight salt. A lyotropic series, similar to that of Hofmeister, was obtained. To examine also the effect of coions, ionene bromides were titrated with tetramethyl-,tetraethyl-,or tetrapropylammonium bromides. The enthalpy was exothermic for all mixtures while, somewhat unexpectedly, the coion-specific effect was quite strong.
Objavljeno v	Royal Society of Chemistry; PCCP. Physical chemistry chemical physics; 2012; Vol. 14, no. 19; str. 6805-6811; Impact Factor: 3.829;Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.348; A': 1; WoS: EI, UH; Avtorji / Authors: Seručnik Mojca, Bončina Matjaž, Lukšič Miha, Vlachy Vojko		
Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek		
5.	COBISS ID	36222725	Vir: COBISS.SI
Naslov	SLO	Raztopine ionenov v vodi: SANS raziskave	
	ANG	ANG Aqueous solutions of ionenes: SANS studies	
Opis	SLO	Raztopine alifatskih x,y-ionen bromidov in fluoridov v vodi smo raziskovali z ozkokotnim nevtronskim sipanjem. Gre za prve tovrstne raziskave. Ugotovili smo, da se ioneni, kljub prisotnim metilenskim skupinam, vedejo kot hidrofilni polimeri. Najpomembnejši rezultat je opažanje, da pri raztopinah z bromidnimi protiioni značilni polielektrolitski vrh izgine. Je pa ta vrh prisoten pri ionenih s fluoridnimi protiioni, kar kaže na odvisnost od narave protiiona. Pojav je moč razložiti z različno stopnjo (entalpijo hidratacije) hidratacije fluoridnih in bromidnih anionov.	
	ANG	Aqueous solutions of x,y-ionenes with bromide and fluoride counterions have been investigated using small angle neutron scattering for the first time. We conclude that despite the hydrophobicity of the hydrocarbon chain separating charged centers on ionenes, these chains behave as hydrophilic. The most important observation is that in contrast to Br ionenes, the polyelectrolyte peak remains at all concentrations studied for the single F ionene investigated. This strong counterion effect is rationalized in terms of the different hydrating properties and ion pairing	

		in the case of bromide and fluoride ions.
Objavljeno v		Royal Society of Chemistry; PCCP. Physical chemistry chemical physics; 2012; Vol. 14, no. 37; str. 12898-12904; Impact Factor: 3.829; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.348; A': 1; WoS: EI, UH; Avtorji / Authors: Malikova Natalie, Čebašek Sašo, Glenisson Vincent, Bhowmik Debsindhu, Carrot Geraldine, Vlachy Vojko
Tipologija	1.01	Izvirni znanstveni članek

7. Najpomembnejši družbeno-ekonomski rezultati projektne skupine⁶

	Družbeno-ekonomski dosežek	
1.	COBISS ID	5030938 Vir: COBISS.SI
	Naslov	<i>SLO</i> Car-Parrinellova simulacija vodikovo vezanih sistemov v trdnem stanju <i>ANG</i> Car-Parrinello simulation of hydrogen bonded solids
	Opis	<i>SLO</i> Sodelavec projekta je predstavil najnovejše tehnike za simulacijo in proučevanje strukture biološko aktivnih spojin v trdnem stanju. Vodil je tudi študentko delavnico, ker so slušatelji osvojili osnovne veščine molekularnih simulacij. <i>ANG</i> The project team member introduced state-of-the-art techniques for simulation of biologically active molecules in the solid state. He also prepared and led the workshop for students, focusing on practical work with molecular simulation program tools.
	Šifra	B.04 Vabljeni predavanja
	Objavljeno v	[s. n.]; Second Annual Niels Bohr International Academy Workshop on Neutron Science, Copenhagen, June 25-29, 2012; 2012; Str. [41]; Avtorji / Authors: Stare Jernej
	Tipologija	1.12 Objavljeni povzetek znanstvenega prispevka na konferenci
2.	COBISS ID	Vir: vpis v poročilo
	Naslov	<i>SLO</i> Condensed matter physics <i>ANG</i> Condensed matter physics
	Opis	<i>SLO</i> Vlachy, Vojeslav (član uredniškega odbora 2011). Kiev: Institute for Condensed Matter Physics. ISSN 1607324X. [COBISS.SI ID 33562117] <i>ANG</i> Vlachy, Vojeslav (Editorial board 2011). Kiev: Institute for Condensed Matter Physics. ISSN 1607324X. [COBISS.SI ID 33562117]
	Šifra	C.04 Uredništvo mednarodne revije
	Objavljeno v	Sicris
	Tipologija	4.00 Sekundarno avtorstvo
3.	COBISS ID	1681967 Vir: COBISS.SI
	Naslov	<i>SLO</i> Prisotnost hidrofobnih skupin lahko vpliva na vedenje ionov v raztopinah polielektrolitov <i>ANG</i> Presence of hydrophobic groups may modify the specific ion effect in aqueous polyelectrolyte solutions
	Opis	<i>SLO</i> S pomočjo sistematičnih meritev toplotnih sprememb pri razredčevanju in mešanju različno hidrofobnih x,y-ionenov z navadnimi elektroliti smo ugotovili, da hidrofobnost poliona kvalitativno in kvantitativno vpliva na interakcijo med naboji na polionu in ioni v raztopini. Vrstni red v Hofmeisterovi vrsti se pri tem lahko zamenja.

		ANG	By the systematic measurements of the heat effects upon dilution and mixing of x,y-ionenes of different hydrophobicity with simple electrolytes we discovered that hydrophobicity of the ionene qualitatively and quantitatively influences the ion-polyion interaction. The ordering in the Hofmeister series may change in such situations.
	Šifra	B.05	Gostujoči profesor na inštitutu/univerzi
	Objavljeno v	2013; Avtorji / Authors: Vlachy Vojko	
	Tipologija	3.14 Predavanje na tuji univerzi	
4.	COBISS ID	36864005	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Karakterizacija soli poli(thiofen-3-il-ocetne kisline): staranje raztopine in vpliv na termodinamske in transportne lastnosti
		ANG	Characterization of poly(thiophen-3-ylacetic acid) salts and solutions: ageing and thermodynamic/transport properties of aged solutions
	Opis	SLO	Konjugirani polielektroliti so predmet intenzivnih raziskav zaradi možnosti njihove uporabe v različnih optoelektronskih napravah in senzorjih. Eden od konjugiranih polimerov je tudi poli(thiofen-3-il-ocetna kislina) (PTAA). Kljub mnogim raziskavam uporabe tega polimera, je naše znanje o njegovih temeljnih lastnostih v raztopini še vedno zelo pomanjkljivo. V naši raziskavi smo opazili spremembe v UV in vidnem spektru vodnih raztopin PTAA, ki so bile podobne spreminjanju spektra PTAA pri nevtralizaciji. Izmerili smo tudi osmotske koeficiente, navidezne molske prostornine, razredčilne toplote, molske prevodnosti in transportna števila „postaranih“ vodnih raztopin pri 25 °C. Alkalijske soli (Li, Na in Cs) PTAA se obnašajo podobno kot drugi polielektroliti z razmeroma nizko molsko maso. Pri meritvah razredčilnih toplot smo opazili občuten vpliv protiiona.
		ANG	Conjugated polyelectrolytes are, due to their potential use in different optoelectronic devices and sensors, subject of the intense research. Poly(thiophen3-ylacetic acid) (PTAA) is a promising polymer of this class, however, despite of numerous prospective applications little is known about its fundamental properties in solutions. The changes of UV/vis spectra of aqueous solutions of PTAA alkali salts were monitored. For aqueous alkali salt solutions of PTAA, changes of UV/Vis spectra with time were noticed. Some of these spectra evolutions resemble those attributed to conformational changes observed during PTAA neutralizations. Osmotic coefficients, apparent molar volumes, heats of dilution, molar conductivities, and transference numbers were determined for "aged" aqueous alkali salts solutions at 25 °C. Results indicate that alkali salts (Li, Na, and Cs) of PTAA behave similarly as other relatively low-molecular-weight polyelectrolytes. In addition, some ion specific effects, deserving more detailed studies, were observed.
	Šifra	B.03	Referat na mednarodni znanstveni konferenci
	Objavljeno v	s. n.]; Book of abstracts; 2013; Str. O2-43; Avtorji / Authors: Hostnik Gregor, Vlachy Vojko, Bondarev Dmitrij, Vohlídal Jiři, Cerar Janez	
	Tipologija	1.12 Objavljeni povzetek znanstvenega prispevka na konferenci	
5.	COBISS ID	1613359	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Tetraedrična ureditev vode ob hidrofobnih in nabitih delcih
		ANG	Tetrahedral order of water around hydrophobic and charged solutes
	Opis	SLO	Vodo zaradi zmožnosti tvorbe vodikovih vezi pogosto smatramo za urejeno tekočino. Ko v vodo damo topljenec, interakcije voda-topljenec vplivajo na prvotno strukturo čiste vode. S pomočjo simulacij dinamike molekul smo - v luči metrike tetraedričnega ureditvenega parametra - proučili, kako se model vode vede v bližini topljencev, ki smo jim sistematično spreminjali

		velikost ter naboj.
	ANG	Water is often considered an ordered liquid due to its propensity to form a self hydrogen bonding network. When a solute is added to water, the interactions between water and solute molecules perturb the original structure of water. By means of Molecular Dynamics simulations, we explored - through the metrics of tetrahedral order parameter - how a model water behaves in the neighbourhood of a systematic series of solutes of increasing size and electrostatic interaction magnitude.
Šifra	B.03	Referat na mednarodni znanstveni konferenci
Objavljeno v	2013; Avtorji / Authors: Lukšič Miha, Fennell Christopher J., Dill Ken A.	
Tipologija	3.15	Prispevek na konferenci brez natisa

8. Drugi pomembni rezultati projektne skupine^Z

1. HOSTNIK, Gregor, VLACHY, Vojko, BONDAREV, Dmitrij, VOHLÍDAL, Jiří, CERAR, Janez. Salt-specific effects observed in calorimetric studies of alkali and tetraalkylammonium salt solutions of poly(thiophen-3-ylacetic acid). PCCP. Physical chemistry chemical physics, ISSN 1463-9076, 2015, vol. 17, no. 4, str. 2475-2483, [COBISS.SI-ID 1536129219].

2. HOSTNIK, Gregor, BONDAREV, Dmitrij, VOHLÍDAL, Jiří, ČEBAŠEK, Sašo, ŽAGAR, Ema, VLACHY, Vojko, CERAR, Janez. Transport properties and ion binding in aqueous solutions of alkali metal salts of poly(thiophen-3-ylacetic acid). Journal of molecular liquids, ISSN 0167-7322. [Print ed.], vol. 198, str. 173-180, [COBISS.SI-ID 1739311].

3. BONČINA, Matjaž, LUKŠIČ, Miha, SERUČNIK, Mojca, VLACHY, Vojko. Thermodynamic analysis of the interaction of partially hydrophobic cationic polyelectrolytes with sodium halide salts in water. Molecular Physics, ISSN 0026-8976, 2014, vol. 112, no. 9/10, str. 1222-1229, [COBISS.SI-ID 1707823].

CERAR, Janez. Termodinamične lastnosti raztopin poli(tiofen3-il očetne kisline): vpliv lastnosti protiiona : [predavanje]. Slovenski kemijski dnevi 2013, Maribor, 10.12. september 2013. Maribor: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2013, str. 17, ilustr. [COBISS.SIID 1626671]

CERAR, Janez. [Vodna kemija za barvno industrijo : HELIOS, Tovarna barv, lakov in umetnih smol Količevo, d.o.o., Domžale, 24. 4. 2013]. [2013]. [COBISS.SI-ID 36864517]

CERAR, Janez, BONDAREV, Dmitrij, VOHLÍDAL, Jiří, VLACHY, Vojko. Electric conductivity of aqueous solutions of partially neutralized poly(thiophene3-yl-acetic acid) as predicted by different polyelectrolyte theories comparison with experiment : [lecture]. V: Proceedings of the European Polymer Congress 2011, June 26-July 1, 2011, Granada, Spain. [S. I], str. 526. [COBISS.SIID 35203845]

9. Pomen raziskovalnih rezultatov projektne skupine^B

9.1. Pomen za razvoj znanosti⁹

SLO

Na primeru dveh različnih polielektrolitov, enega kationskega in drugega anionskega, smo pokazali, da ni pomembna le narava skupine na poliiyonu in soli v raztopini ampak tudi okolje kamor je ta skupina umeščena. Če je okolje hidrofobno (na primer 12,12-ioneni), se interakcija z ioni v vodi lahko bistveno spremeni. Posledica je, da se zaporedje ionov v Hofmeisterovi vrsti (le-ta ni v celoti pojasnjena, čeprav prva dela segajo v 19. stoletje), ki opisuje neko lastnost, zamenja. Opazovani pojav ima pomen za razumevanje obarjanja proteinov, ki poteka ob dodatku različnih soli. Naš projekt sodi med osnovne raziskave - na dobro definiranih polielektrolitskih raztopinah smo proučevali medsebojni vpliv ionskih interakcij in hidrofobnega

efekta. Članki so objavljeni v uglednih revijah s tega področja znanosti.

ANG

Focusing on two different polyelectrolytes, one cationic and one anionic, we showed that besides the nature of the group on the polyion its immediate environment may play an important role. If the group is embedded in the hydrophobic environment (an example of 12,12-ionenes) the interaction between this group and the salt ions in water may be substantially modified. One consequence is that the sequence of ions in the Hofmeister series describing certain property (the latter not fully explained though its discovery dates to 19. century), reverses its ordering. This fact is of importance for understanding the protein precipitation under influence of addition of salts. The project which we report on here is of the fundamental nature: on the well defined polyelectrolyte systems we studied an interplay of ionic and hydrophobic effects. The articles were published in important Journals from this field of Science.

9.2. Pomen za razvoj Slovenije¹⁰

SLO

Katedra za fizikalno kemijo, FKKT, Univerze v Ljubljani, je edina v Sloveniji, ki se poglobljeno ukvarja z vodnimi raztopinami elektrolitov, površinsko aktivnih snovi, polielektrolitov in biopolimerov (DNA, proteini), ter podobnimi. Ker so vodne raztopine edine, ki so ekološko sprejemljive, velja za te raziskave tudi določeno zanimanje s strani industrije: (CERAR, Janez. [Vodna kemija za barvno industrijo : HELIOS, Tovarna barv, lakov in umetnih smol Količevo, d.o.o., Domžale, 24. 4. 2013]. [2013]. [COBISS.SI-ID 36864517]. Članki na osnovi naših raziskav so bili objavljeni v najuglednejših revijah s področja fizikalne kemije. Delo pa je bilo predstavljeno tudi v obliki predavanj na večih mednarodnih konferencah in tujih univerzah.

ANG

Physical chemistry group of FCCT, University of Ljubljana, is the only group in Slovenia whose research is mainly devoted to aqueous solutions of electrolytes, polyelectrolytes, biopolymers (DNA, proteins), and similar systems. Because the solutions in water are ecologically acceptable, there was some interest for our work expressed also from the side of industry; Vodna kemija za barvno industrijo : HELIOS, Tovarna barv, lakov in umetnih smol Količevo, d.o.o., Domžale, 24. 4. 2013]. [2013]. [COBISS.SI-ID 36864517]. The reports of our studies were published in important Journals from the field of physical chemistry and the work reported in form of lectures in several international conferences and foreign Universities.

10. Samo za aplikativne projekte in podoktorske projekte iz gospodarstva!

Označite, katerega od navedenih ciljev ste si zastavili pri projektu, katere konkretne rezultate ste dosegli in v kakšni meri so doseženi rezultati uporabljeni

Cilj		
F.01	Pridobitev novih praktičnih znanj, informacij in veščin	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.02	Pridobitev novih znanstvenih spoznanj	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.03	Večja usposobljenost raziskovalno-razvojnega osebja	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>

F.04	Dvig tehnološke ravni	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.05	Sposobnost za začetek novega tehnološkega razvoja	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.06	Razvoj novega izdelka	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.07	Izboljšanje obstoječega izdelka	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.08	Razvoj in izdelava prototipa	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.09	Razvoj novega tehnološkega procesa oz. tehnologije	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.10	Izboljšanje obstoječega tehnološkega procesa oz. tehnologije	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.11	Razvoj nove storitve	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.12	Izboljšanje obstoječe storitve	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.13	Razvoj novih proizvodnih metod in instrumentov oz. proizvodnih procesov	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE

	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.14	Izboljšanje obstoječih proizvodnih metod in instrumentov oz. proizvodnih procesov	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.15	Razvoj novega informacijskega sistema/podatkovnih baz	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.16	Izboljšanje obstoječega informacijskega sistema/podatkovnih baz	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.17	Prenos obstoječih tehnologij, znanj, metod in postopkov v prakso	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.18	Posredovanje novih znanj neposrednim uporabnikom (seminarji, forumi, konference)	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.19	Znanje, ki vodi k ustanovitvi novega podjetja ("spin off")	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.20	Ustanovitev novega podjetja ("spin off")	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.21	Razvoj novih zdravstvenih/diagnostičnih metod/postopkov	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.22	Izboljšanje obstoječih zdravstvenih/diagnostičnih metod/postopkov	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>

	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.23	Razvoj novih sistemskih, normativnih, programskih in metodoloških rešitev	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.24	Izboljšanje obstoječih sistemskih, normativnih, programskih in metodoloških rešitev	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.25	Razvoj novih organizacijskih in upravljavskih rešitev	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.26	Izboljšanje obstoječih organizacijskih in upravljavskih rešitev	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.27	Prispevek k ohranjanju/varovanju naravne in kulturne dediščine	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.28	Priprava/organizacija razstave	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.29	Prispevek k razvoju nacionalne kulturne identitete	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.30	Strokovna ocena stanja	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.31	Razvoj standardov	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>

F.32	Mednarodni patent	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.33	Patent v Sloveniji	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.34	Svetovalna dejavnost	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>
F.35	Drugo	
	Zastavljen cilj	<input type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
	Rezultat	<input type="text"/>
	Uporaba rezultatov	<input type="text"/>

Komentar

--

11.Samo za aplikativne projekte in podoktorske projekte iz gospodarstva!**Označite potencialne vplive oziroma učinke vaših rezultatov na navedena področja**

	Vpliv	Ni vpliva	Majhen vpliv	Srednji vpliv	Velik vpliv	
G.01	Razvoj visokošolskega izobraževanja					
G.01.01.	Razvoj dodiplomskega izobraževanja	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.01.02.	Razvoj podiplomskega izobraževanja	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.01.03.	Drugo: <input type="text"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02	Gospodarski razvoj					
G.02.01	Razširitev ponudbe novih izdelkov/storitev na trgu	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.02.	Širitev obstoječih trgov	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.03.	Znižanje stroškov proizvodnje	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.04.	Zmanjšanje porabe materialov in energije	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.05.	Razširitev področja dejavnosti	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.06.	Večja konkurenčna sposobnost	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.07.	Večji delež izvoza	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.08.	Povečanje dobička	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.09.	Nova delovna mesta	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.10.	Dvig izobrazbene strukture zaposlenih	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	

G.02.11.	Nov investicijski zagon	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.02.12.	Drugo:	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.03	Tehnološki razvoj					
G.03.01.	Tehnološka razširitev/posodobitev dejavnosti	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.03.02.	Tehnološko prestrukturiranje dejavnosti	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.03.03.	Uvajanje novih tehnologij	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.03.04.	Drugo:	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.04	Družbeni razvoj					
G.04.01	Dvig kvalitete življenja	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.04.02.	Izboljšanje vodenja in upravljanja	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.04.03.	Izboljšanje delovanja administracije in javne uprave	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.04.04.	Razvoj socialnih dejavnosti	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.04.05.	Razvoj civilne družbe	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.04.06.	Drugo:	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.05.	Ohranjanje in razvoj nacionalne naravne in kulturne dediščine in identitete					
G.06.	Varovanje okolja in trajnostni razvoj					
G.07	Razvoj družbene infrastrukture					
G.07.01.	Informacijsko-komunikacijska infrastruktura	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.07.02.	Prometna infrastruktura	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.07.03.	Energetska infrastruktura	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.07.04.	Drugo:	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	
G.08.	Varovanje zdravja in razvoj zdravstvenega varstva					
G.09.	Drugo:					

Komentar

--

12.Pomen raziskovanja za sofinancerje¹¹

	Sofinancer		
1.	Naziv		
	Naslov		
	Vrednost sofinanciranja za celotno obdobje trajanja projekta je znašala:		EUR
	Odstotek od utemeljenih stroškov projekta:		%
	Najpomembnejši rezultati raziskovanja za sofinancerja	Šifra	
		1.	

	2.		
	3.		
	4.		
	5.		
	Komentar		
	Ocena		

13. Izjemni dosežek v letu 2014¹²

13.1. Izjemni znanstveni dosežek

MALIKOVA, N., ROLLET, A.-L., ČEBAŠEK, S., TOMŠIČ, M., VLACHY, V. On the crossroads of current polyelectrolyte theory and counterion-specific effects. PCCP. Physical chemistry chemical physics, ISSN 1463-9076, 2015, str. 1-10, [COBISS.SI-ID 1536162243]

Vodne raztopine ionenov smo študirali z metodama SANS in NMR, pri čemer so nas najbolj zanimali vplivi hidrofobnosti ionenov ter ionspecifični efekti. Rezultati sipanja nevtronov jasno kažejo številne trende, ki se razlikujejo od teoretičnih napovedi. Ugotovili smo univerzalnost v vplivih, ki izvirajo zaradi dodane soli. Nad določeno koncentracijo naboja, polielektrolitski vrh izgine iz spektra ionen bromidov. Poleg tega se spektri raztopin ionen bromidov in fluoridov vedejo različno ob spremembi temperature raztopin. Naša interpretacija razlik med Br in F vzorci, osnovana na različnih hidratacijskih lastnosti protiionov, ima podporo tudi v NMR meritvah raztopin ionenov z mešanimi protiioni.

13.2. Izjemni družbeno-ekonomski dosežek

Condensed Matter Physics (Editorial Board of the Scientific Journal)

Vlachy, Vojeslav (član uredniškega odbora 2011). Kiev: Institute for Condensed Matter Physics. ISSN 1607324X. [COBISS.SI ID 33562117]

C. IZJAVE

Podpisani izjavljam/o, da:

- so vsi podatki, ki jih navajamo v poročilu, resnični in točni
- se strinjamo z obdelavo podatkov v skladu z zakonodajo o varstvu osebnih podatkov za potrebe ocenjevanja ter obdelavo teh podatkov za evidence ARRS
- so vsi podatki v obrazcu v elektronski obliki identični podatkom v obrazcu v pisni obliki
- so z vsebino zaključnega poročila seznanjeni in se strinjajo vsi soizvajalci projekta

Podpisi:

*zastopnik oz. pooblaščen oseba
raziskovalne organizacije:*

in

vodja raziskovalnega projekta:

Univerza v Ljubljani, Fakulteta za
kemijo in kemijsko tehnologijo

Vojeslav Vlachy

ŽIG

Liubliana

3.3.2015

Kraj in datum:

Oznaka poročila: ARRS-RPROJ-ZP-2015/12

¹ Napišite povzetek raziskovalnega projekta (največ 3.000 znakov v slovenskem in angleškem jeziku) [Nazaj](#)

² Napišite kratko vsebinsko poročilo, kjer boste predstavili raziskovalno hipotezo in opis raziskovanja. Navedite ključne ugotovitve, znanstvena spoznanja, rezultate in učinke raziskovalnega projekta in njihovo uporabo ter sodelovanje s tujimi partnerji. Največ 12.000 znakov vključno s presledki (približno dve strani, velikost pisave 11). [Nazaj](#)

³ Realizacija raziskovalne hipoteze. Največ 3.000 znakov vključno s presledki (približno pol strani, velikost pisave 11) [Nazaj](#)

⁴ V primeru bistvenih odstopanj in sprememb od predvidenega programa raziskovalnega projekta, kot je bil zapisan v predlogu raziskovalnega projekta oziroma v primeru sprememb, povečanja ali zmanjšanja sestave projektne skupine v zadnjem letu izvajanja projekta, napišite obrazložitev. V primeru, da sprememb ni bilo, to navedite. Največ 6.000 znakov vključno s presledki (približno ena stran, velikost pisave 11). [Nazaj](#)

⁵ Navedite znanstvene dosežke, ki so nastali v okviru tega projekta. Raziskovalni dosežek iz obdobja izvajanja projekta (do oddaje zaključnega poročila) vpišete tako, da izpolnite COBISS kodo dosežka – sistem nato sam izpolni naslov objave, naziv, IF in srednjo vrednost revije, naziv FOS področja ter podatek, ali je dosežek uvrščen v A" ali A'. [Nazaj](#)

⁶ Navedite družbeno-ekonomske dosežke, ki so nastali v okviru tega projekta. Družbeno-ekonomski rezultat iz obdobja izvajanja projekta (do oddaje zaključnega poročila) vpišete tako, da izpolnite COBISS kodo dosežka – sistem nato sam izpolni naslov objave, naziv, IF in srednjo vrednost revije, naziv FOS področja ter podatek, ali je dosežek uvrščen v A" ali A'.

Družbeno-ekonomski dosežek je po svoji strukturi drugačen kot znanstveni dosežek. Povzetek znanstvenega dosežka je praviloma povzetek bibliografske enote (članka, knjige), v kateri je dosežek objavljen.

Povzetek družbeno-ekonomskega dosežka praviloma ni povzetek bibliografske enote, ki ta dosežek dokumentira, ker je dosežek sklop več rezultatov raziskovanja, ki je lahko dokumentiran v različnih bibliografskih enotah. COBISS ID zato ni enoznačen, izjemoma pa ga lahko tudi ni (npr. prehod mlajših sodelavcev v gospodarstvo na pomembnih raziskovalnih nalogah, ali ustanovitev podjetja kot rezultat projekta ... - v obeh primerih ni COBISS ID). [Nazaj](#)

⁷ Navedite rezultate raziskovalnega projekta iz obdobja izvajanja projekta (do oddaje zaključnega poročila) v primeru, da katerega od rezultatov ni mogoče navesti v točkah 6 in 7 (npr. ni voden v sistemu COBISS). Največ 2.000 znakov, vključno s presledki. [Nazaj](#)

⁸ Pomen raziskovalnih rezultatov za razvoj znanosti in za razvoj Slovenije bo objavljen na spletni strani: <http://sicris.izum.si/> za posamezen projekt, ki je predmet poročanja [Nazaj](#)

⁹ Največ 4.000 znakov, vključno s presledki [Nazaj](#)

¹⁰ Največ 4.000 znakov, vključno s presledki [Nazaj](#)

¹¹ Rubrike izpolnite / prepisite skladno z obrazcem "izjava sofinancerja" <http://www.arrs.gov.si/sl/progproj/rproj/gradivo/>, ki ga mora izpolniti sofinancer. Podpisan obrazec "Izjava sofinancerja" pridobi in hrani nosilna raziskovalna organizacija – izvajalka projekta. [Nazaj](#)

¹² Navedite en izjemni znanstveni dosežek in/ali en izjemni družbeno-ekonomski dosežek raziskovalnega projekta v letu 2014 (največ 1000 znakov, vključno s presledki). Za dosežek pripravite diapozitiv, ki vsebuje sliko ali drugo slikovno gradivo v zvezi z izjemnim dosežkom (velikost pisave najmanj 16, približno pol strani) in opis izjemnega dosežka (velikost pisave 12, približno pol strani). Diapozitiv/-a priložite kot priponko/-i k temu poročilu. Vzorec diapozitiva je objavljen na spletni strani ARRS <http://www.arrs.gov.si/sl/gradivo/>, predstavitev dosežkov za pretekla leta pa so objavljena na spletni strani <http://www.arrs.gov.si/sl/analize/dosez/>. [Nazaj](#)

Obrazec: ARRS-RPROJ-ZP/2015 v1.00a

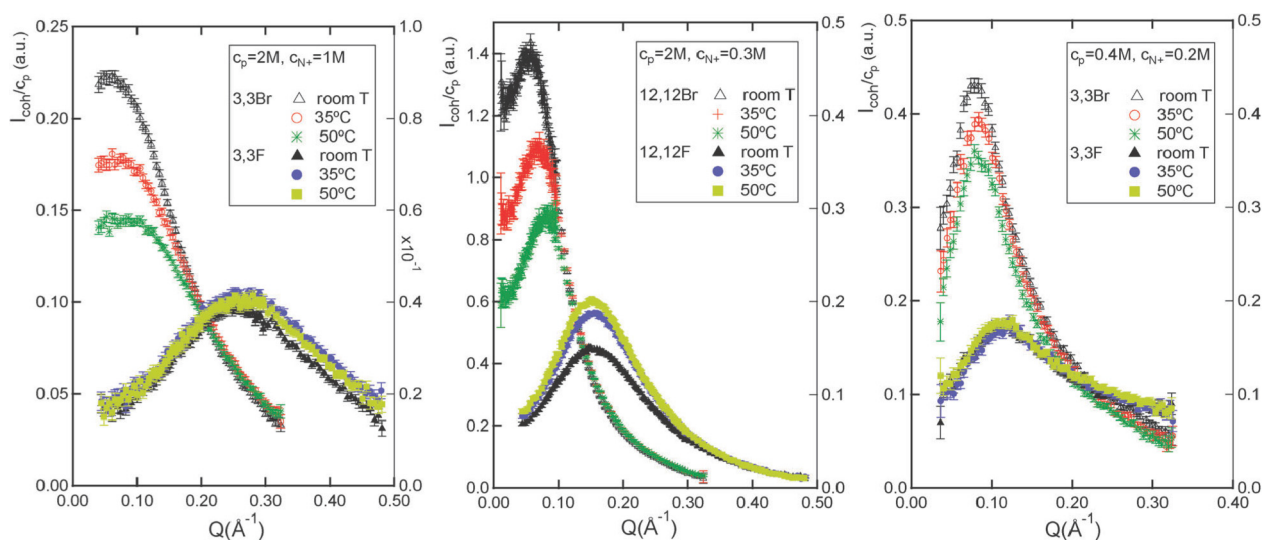
F1-13-99-CA-BC-53-A2-D9-71-60-B2-AC-CC-60-26-B7-6F-35-CA-E5

Priloga 1

VEDA: Kemija

Področje: šifra in naziv področja

Dosežek 1: _____, Vir: COBISS



MALIKOVA, N., ROLLET, A.-L., ČEBAŠEK, S., TOMŠIČ, M., VLACHY, V. On the crossroads of current polyelectrolyte theory and counterion-specific effects. PCCP. Physical chemistry chemical physics, ISSN 1463-9076, 2015, str. 1-10, [COBISS.SI-ID 1536162243]

Vodne raztopine ionenov smo študirali z metodama SANS in NMR, pri čemer so nas najbolj zanimali sočasni vplivi hidrofobnosti ionenov in narave dodane soli. Rezultati sipanja nevtronov jasno kažejo številne trende, ki se razlikujejo od teoretičnih napovedi. Ugotovili smo univerzalnost v vplivih, ki izvirajo zaradi dodane soli. Nad določeno koncentracijo naboja, polielektrolitski vrh izgine iz spektra ionen bromidov. Poleg tega se spektri raztopin ionen bromidov in fluoridov vedejo različno ob spremembi temperature raztopin. Naša interpretacija razlik med Br in F vzorci, osnovana na različnih hidratacijskih lastnosti protiionov, ima podporo tudi v NMR meritvah raztopin ionenov z mešanimi protiioni.