



SVEUČILIŠTE U SPLITU  
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET  
Ruđera Boškovića 33, 21000 Split

IBAN: HR 17 23300031100068831  
SWIFT(BIC): SOGE HR22  
MATIČNI BROJ: 3199622  
OIB: 20858497843

# O B A V I J E S T

Javna obrana doktorskog rada studentice poslijediplomskog sveučilišnog studija  
BIOFIZIKA

**MARTINE POŽAR**

pod naslovom

**“On the nature of structural fluctuations in complex liquids”**

održat će se u petak, **16. 11. 2018.** u **16.00 sati** na Prirodoslovno-matematičkom fakultetu u Splitu (amfiteatar A0-1), pred članovima Stručnog povjerenstva:

1. prof. dr. sc. Sanja Tomić (IRB, Zagreb), predsjednica
2. prof. dr. sc. Jean-Francois Dufreche (ICSM, Montpellier, Francuska), član
3. prof. dr. sc. Helene Gerard (LCT, Pariz, Francuska), član
4. prof. dr. sc. Jadran Vrabec (TUB, Berlin, Njemačka), član
5. prof. dr. sc. Leandra Vranješ Markić (PMF, Split), član
6. izv. prof. dr. sc. Dražen Zanchi (ENS, Pariz, Francuska), član
7. prof. dr. sc. Franjo Sokolić (PMF, Split), zamjenski član

**Mentori:** doc. dr. sc. Larisa Zoranić (PMF, Split) i Aurelien Perera (LPTMC, Pariz).

Doktorski rad je dio dvojnog doktorata (*Cotutelle de thesis*) između Prirodoslovno-matematičkog fakulteta u Splitu i Physique en Ile-de-France, Sorbonne Universite u Parizu.

**Title:**

**On the nature of structural fluctuations in complex liquids**

**Naslov:**

**O prirodi strukturnih fluktuacija u kompleksnim tekućinama**

**Abstract:**

The analysis of different types of structuring, present in simple and complex liquids and their mixtures, was done using the method of molecular dynamics. Complex mixtures have at least one associative component, such as water, alcohols (mono-ols and diols) and amines. The supra-molecular structuring in these mixtures is detected, described, quantified and connected with the atom-atom interactions in the molecules. These systems have interesting fluctuation behaviors, as shown through Kirkwood-Buff integrals. Their correlation functions behave in a complex way, depending on the component, concentration and temperature. The pre-peak at small  $k$  values in the site-site structure factor is defined as a signature of molecular domains in these mixtures. A special focus is placed on long-range structuring, which is a novelty considering the majority of the work in the field of the physics of liquids. This thesis contributes to a better understanding of micro-heterogeneous structures in molecular liquids, and gives new links to structural heterogeneities in soft and bio-matter.

**Sažetak:**

Metodom molekulske dinamike provedena je analiza različitih vrsta uređenja prisutnih u jednostavnim i kompleksnim tekućinama i njihovim binarnim mješavinama. Kompleksne mješavine su one koje imaju barem jednu asocijativnu komponentu, kao što su voda, alkoholi (mono-oli i dioli) i amini. Supra-molekularno strukturiranje u tim mješavinama je detektirano, opisano i kvantificirano, te je povezano s atom-atom interakcijama u molekulama. Pokazano je da ovi sustavi imaju zanimljivo ponašanje fluktuacija, opisano kroz Kirkwood-Buff integrale. Imaju kompleksno ponašanje korelacijskih funkcija ovisno o komponenti, koncentraciji i temperaturi. Signal na malim  $k$  vrijednostima atom-atom strukturnih faktora je definiran kao potpis molekularnih domena u tim sistemima. Naročiti naglasak se daje na dugodosežnu organizaciju u mješavinama, što je novost rada u odnosu na većinu literature u polju fizike tekućina. Ova teza doprinosi boljem razumijevanju mikro-heterogene strukture u molekularnim tekućinama, te daje nove poveznice sa strukturnim heterogenostima u mekoj i bio-materiji.