Predstavitev dela dr. Aljaža Godca, prejemnika Preglove nagrade za izjemno doktorsko delo za leto 2012

Letos je Preglovo nagrado Kemijskega inštituta za izjemno doktorsko delo na področju kemije in sorodnih disciplin prejel dr. Aljaž Godec, za doktorsko delo z naslovom "Večdelčne korelacije pri hidrofobnih interakcijah" pod mentorstvom prof. dr. Janka Jamnika in somentorstvom doc. dr. Francija Merzela. Doktoriral je na Fakulteti za matematiko in fiziko Univerze v Ljubljani.

Četudi komu pojem hidrofobni efekt ni poznan, zagotovo pozna katero od njegovih številnih manifestacij. Vsi vemo, da se olje in voda ne mešata ali pa smo že slišali za t.i. Lotusov efekt – t.j. pojav sedečih vodnih kapljic na Lotusovih listih. Splošno sicer nekoliko manj poznana, a v naravi izjemno pomembna, pa je vloga hidrofobnega efekta pri nastanku in stabilnosti celičnih membran, zvitju proteinov ter pojavu Alzheimerjeve bolezni. Beseda hidrofobno dobesedno pomeni 'vodo boječe' in označuje navidezni medsebojni odboj molekul vode ter nepolarnih molekul.

Na osnovi številnih eksperimentalnih in teoretičnih študij je bilo pokazano, da hidrofobne interakcije v nasprotju z intuicijo niso posledica dejstva, da se molekule vode močneje privlačijo med seboj kot z nepolarnimi molekulami, temveč gre za entropijski efekt. Ustrezna fizikalna razlaga omenjenega dejstva, ki bi pojsanila številna eksperimentalna opažanja, pa do sedaj ni bila poznana.

Entropija je fizikalna količina s številnimi interpretacijami in nam v splošnem pove, kako natančno lahko poznamo mikroskopsko stanje preučevanega sistema. Intrinzična mikroskopska nedoločenost je direktna posledica termičnih fluktuacij in sistem vedno teži k stanju, kjer je le-ta največja. Po obstoječih hipotezah je hidrofobni efekt posledica orientacijskega urejanja vode okoli nepolarnega delca, kar naj bi zmanjšalo entropijo posameznih molekul vode.

Aljaž Godec v doktorski disertaciji na osnovi analize Monte Carlo simualcij modelnih sistemov potrdi večjo ureditev vode okoli nepolarnih delcev, a pojasni, da le-ta ni vzrok za padec entropije. Kot prvi pokaže, da je hidrofobni efekt že v vodilnem redu kolektivni pojav, ki vključuje skupke 3 in 4 molekul vode. Vpelje koncept lokalno ekstenzivnih statistično-termodinamskih količin, kar mu omogoči konsistenten teoretični opis nehomogenih tekočin na poljubni velikostni skali, ki bo v prihodnje omogočil generično teoretično analizo hidratacijskih pojavov. Razultati doktorskega dela predstavljajo pomembem prispevek k splošnemu razumevanju hidrofobnih interakcij in nas vodijo korak bližje k poznavanju fizikalnih zakonitosti zvitja proteinov ter prve faze nastanka Alzheimerjeve bolezni.