

DOKTORSKI ŠTUDIJSKI PROGRAM KEMIJSKE ZNANOSTI, UNIVERZA V LJUBLJANI, FAKULTETA ZA KEMIJO IN KEMIJSKO TEHNOLOGIJO

Predstavitev študijskega programa:

1. Podatki o študijskem programu:

- Tretjestopenjski univerzitetni študijski program **KEMIJSKE ZNANOSTI** traja 3 leta (6 semestrov) in obsega skupaj 180 kreditnih točk.
- Študij ima tri smeri: *kemija*, *biokemija* in *kemijsko inženirstvo*.
- Strokovni naslov, ki ga pridobi doktorand je *doktor/doktorica znanosti*.

2. Temeljni cilji programa in splošne kompetence

Temeljni cilj doktorskega študijskega programa Kemijske znanosti je usposobiti strokovnjake, ki bodo imeli kompetence, primerne za zaposlitev na raziskovalno usmerjenih, tudi vodilnih, delovnih mestih v kemijski in sorodnih industrijah in javnih službah ali za nadaljevanje raziskovalne kariere v akademskem okolju.

Študenti, ki bodo uspešno končali izobraževanje po predlaganem programu bodo pridobili predvsem naslednje **splošne kompetence** in veščine:

- sposobnost kritične analize, vrednotenja in sinteze novih in kompleksnih idej;
- sposobnost komuniciranja o svojem ekspertnem področju s kolegi, z večjimi strokovnimi skupinami, kot tudi širšo javnostjo;
- sposobnost promocije znanstvenega in tehnološkega napredka na akademski in aplikativni ravni v na znanju temelječi družbi.

3. Pogoji za vpis in merila za izbiro ob omejitvi vpisa

Pogoji za vpis:

1. Na doktorski študij Kemijskih znanosti se lahko vpiše, kdor je končal:

- a) študijski program druge stopnje;
- b) enovit magistrski program, če je ovrednoten s 300 kreditnimi točkami;
- c) dosednji univerzitetni dodiplomski program;
- d) dosednji študijski program za pridobitev magisterija znanosti (Kandidatom se priznajo študijske obveznosti v obsegu do 60 KT, o priznavanju odloča senat FKKT oziroma organ, ki ta ga imenuje.);
- e) dosednji študijski program za pridobitev specializacije, če je pred tem končal visokošolski strokovni program, pri čemer se mu lahko določi individualni premostitveni program v obsegu od 10 do 60 kreditnih točk po ECTS, o čemer odloča senat FKKT oziroma organ, ki ta ga imenuje;
- f) študijski program na drugih domačih ali tujih univerzah v skladu s predpisanimi pogoji kot veljajo za študente RS. Enakovrednost predhodno pridobljene izobrazbe v tujini se ugotavlja v postopku priznavanja tujega izobraževanja za nadaljevanje izobraževanja skladno s 121. členom Statuta UL.

V programu je predvidenih skupno 40 vpisnih mest za redni in izredni študij. Pogoj za vpis je soglasje mentorja.

Izbor kandidatov ob omejitvi vpisa bo temeljil na:

1. povprečni oceni izpitov in vaj (brez diplome) na dosedanem študijskem programu za pridobitev univerzitetne izobrazbe ali študijskem programu 2. stopnje (75%),
2. oceni diplomske naloge ali magistrske naloge 2. stopnje (25%).

V primeru omejitve vpisa bodo izbrani kandidati z večjim skupnim številom zbranih točk.

4. Merila za priznavanje znanj in spretnosti, pridobljenih pred vpisom v program

Znanja in spretnosti, pridobljene s formalnim, neformalnim ali izkustvenim učenjem pred vpisom v program, se bodo skladno z 9. členom Meril za akreditacijo študijskih programov, priznavale pri izbiri ob omejitvi vpisa. O priznavanju znanj in spretnosti, ki jih je kandidat pridobil pred vpisom v program, odloča o priznavanju odloča senat FKKT oziroma organ, ki ta ga imenuje.

Pri priznavanju tovrstnih znanj in spretnosti se upoštevajo:

- strokovna specializacija,
- druga diploma visokošolskega zavoda,
- dosedanje znanstveno raziskovalno delo,
- objavljena znanstvena dela in
- strokovna izpopolnjevanja.

5. Pogoji za napredovanje po programu

Za vpis v drugi letnik mora imeti kandidat zbranih vsaj 45 kreditnih točk med katerimi mora biti vsaj 10 KT iz izbirnih predmetov in opravljena uspešna predstavitev raziskovalnih izhodišč za doktorsko disertacijo.

V 3. letnik podiplomskega doktorskega študija se lahko vpišejo kandidati, ki so opravili vse študijske obveznosti organiziranih oblik študija iz 1. in 2. letnika in imajo odobreno temo doktorske disertacije.

6. Pogoji za dokončanje študija

Za dokončanje študija mora študent opraviti vse s programom določene študijske obveznosti in izdelati ter uspešno zagovarjati doktorsko disertacijo skladno z določili Pravilnika o doktorskem delu, ki ga sprejme Senat Fakultete za kemijo in kemijsko tehnologijo Univerze v Ljubljani. Pred sprejetjem ocene na Senatu UL FKKT mora kandidat kot prvi avtor objaviti članek s področja svoje disertacije v mednarodni znanstveni literaturi.

7. Prehodi med študijskimi programi

S prehodom se razume prenehanje študentovega izobraževanja v študijskem programu, v katerega se je vpisal, ter nadaljevanje izobraževanja v doktorskem študijskem Kemijske znanosti. Za prehod se ne šteje vpis v prvi letnik. O prehodih skladno z določili Statuta UL in Meril za prehode med študijskimi programi individualno odloča Senat UL FKKT oziroma organ, ki ga Senat za to določi.

8. Načini ocenjevanja

Oblike preverjanja znanja so opredeljene v učnih načrtih predmetov. Postopek preverjanja in ocenjevanja znanja ureja Izpitni pravilnik Fakultete za kemijo in kemijsko tehnologijo Univerze v Ljubljani, ki ga sprejme Senat Fakultete za kemijo in kemijsko tehnologijo Univerze v Ljubljani.

Pri ocenjevanju se uporablja ocenjevalna lestvica skladno s Statutom Univerze v Ljubljani.

9. Predmetnik študijskega programa s predvidenimi nosilci predmetov

Doktorski študijski program Kemijske znanosti traja tri leta in obsega 180 kreditnih točk. Študijske obveznosti programa so v skladu s 36. in 37. členom Zakona o visokem šolstvu in Merili za akreditacijo visokošolskih zavodov in študijskih programov, ki jih je sprejel Svet RS za visoko šolstvo, ovrednotene po Evropskem prenosnem kreditnem sistemu (ECTS – European Credit Transfer System). S tem je omogočena direktna vključitev v mednarodno izmenjavo študentov v državah, ki sistem ECTS uporabljajo.

Ena KT v programu pomeni 30 ur študentovega dela.

Smer študija in področje doktorata sta določena z vsebino študentovega raziskovalnega dela, ki sta ji prilagojena tudi izbor izbirnih predmetov in vsebina drugih študijskih oblik.

Študijski program je sestavljen iz organiziranih oblik študija v obsegu 60 kreditnih točk, preostalih 120 kreditnih točk pa je namenjenih individualnemu raziskovalnemu delu za doktorsko disertacijo. Razdelitev po letnikih je naslednja:

- v prvem letniku 40 KT organiziranih oblik študija in 20 KT raziskovalnega dela,
- v drugem letniku 15 KT organiziranih oblik študija in 45 KT raziskovalnega dela in
- v tretjem letniku 5 KT organiziranih oblik študija in 55 KT raziskovalnega dela.

Organizirane oblike študija so naslednje:

- **javna predstavitev raziskovalnih izhodišč za doktorsko disertacijo**, ki je ovrednotena s 5 KT in jo mora študent opraviti pred vpisom v drugi letnik;
- **pridobitev soglasja za temo doktorske disertacije**, ki je ovrednoteno s 5 KT, tema pa mora biti odobrena pred vpisom v tretji letnik;
- **priprava in uspešen zagovor doktorske disertacije**, kar je ovrednoteno s 5 KT;
- **obvezna aktivna udeležba na organiziranih vabljenih predavanjih**; študent se mora udeležiti 10 organiziranih predavanj na leto, ki bodo tematsko uravnotežena in vsebinsko izbrana tako, da bodo povezana z raziskovalnimi problemi doktorskih študentov, njihova zahtevnost pa bo na nivoju, ki bo omogočal razumevanje študentom vseh treh smeri; aktivno udeležbo (tudi s postavljanjem vprašanj in razpravljanjem) bodo študenti prvega in drugega letnika za pet od desetih predavanj letno (izbiro bo potrdil mentor) dopolnili s poročilom o predavanju in pregledom literature na obravnavano temo ter povezavo z lastnim raziskovalnim delom; poročila pregleda in odobri mentor; udeležba na 10 predavanjih in izdelava 5 poročil v študijskem letu je v prvem in drugem letniku ovrednotena z 10 KT na letnik (skupno v dveh letnikih 20 KT za aktivno udeležbo na 20 predavanjih in izdelavo 10 poročil s pregledom literature); študent se bo tako seznanil z najnovejšimi raziskavami na različnih poročjih, pri pripravi poročila bo poglobil svoje znanje predvsem na področju problematike svojega raziskovalnega dela in dopolnil znanje na drugih področjih;

- **uvajalni seminar**, ki ga študent opravi v raziskovalni skupini mentorja in obsega 5 KT ter ob aktivni udeležbi mentorja obsega **uvajanje v zahtevno eksperimentalno** delo, posredovanje potrebnih teoretskih osnov in konkretizacijo metod karakterizacije na lastnih vzorcih ter po potrebi druge dejavnosti, ki so potrebne za uspešen začetek raziskovalnega dela na področju disertacije;
- **strokovno izpopolnjevanje**, ki obsega največ 5 KT in se študentu v ustreznem obsegu prizna za delo v tujem raziskovalnem okolju (5 KT ustreza enomesečnemu delu), ki lahko vključuje tudi teoretske podlage za metode in tehnike oz. raziskovalno delo po predhodno individualno pripravljenem programu, in/ali udeležbo na poletnih šolah (število KT ustrezno obsegu šole) in/ali pedagoško delo (število KT ustrezno obsegu pedagoškega dela);
- **izbirni predmeti**, ki so opisani v nadaljevanju.

Struktura programa z zgoraj opisanimi oblikami študija in kreditnimi točkami je prikazana v spodnji preglednici.

| Predmet-vsebina | 1. letnik | 2. letnik | 3. letnik | Skupaj |
|---|------------------|------------------|------------------|---------------|
| Raziskovalno delo | 20 KT | 45 KT | 55 KT | 120 KT |
| Izpolnjevanje pogojev * | 5 KT | 5 KT | 5 KT | 15 KT |
| Obvezna aktivna udeležba na organiziranih vabljenih predavanjih | 10 KT | 10 KT | | 20 KT |
| Uvajalni seminar | 5 KT | | | 5 KT |
| Strokovno izpopolnjevanje | 5 KT | | | 5 KT |
| Izbirni predmeti | 15 KT | | | 15 KT |
| Skupaj | 60 KT | 60 KT | 60 KT | 180 KT |

* Izpolnjevanje pogojev obsega: javno predstavitev raziskovalnih izhodišč za doktorsko disertacijo pred vpisom v 2. letnik, pridobitev soglasja za temo doktorske disertacije pred vpisom v 3. letnik in pripravo in uspešen zagovor doktorske disertacije.

Izbirnih predmetov je 23. Vsi obsegajo po 5 KT, študent pa poleg navedenih predmetov s soglasjem mentorja lahko izbira tudi predmete drugih doktorskih ali magistrskih programov na UL in/ali drugih univerzah doma in v svetu.

Spodaj navedeni izbirni predmeti so zasnovani tako, da vsebinsko omogočajo prilagajanje najnovejšim dosežkom znanosti na določenem področju in prilagoditev potrebam posameznih kandidatov (tudi študentom drugih programov, če bodo te predmete vpisali). To je doseženo z modularno zgradbo predmetov in večjim številom izvajalcev, ki se bodo v izvajanje vključili glede na potrebe vpisanih študentov, delo pa bosta koordinirala nosilec, ki bo poskrbel tudi za enoten izpit, in vodja študija.

Izbirni predmeti praviloma obsegajo 15-30 ur predavanj in 45-60 ur seminarskega oziroma projektnega dela, razlika do 150 ur (5 KT) predstavljajo druge oblike študija in individualno delo študenta.

Seznam izbirnih predmetov in nosilcev:

Izbrana poglavja iz anorganske kemije (prof. dr. Peter Bukovec)
Sodobne metode sinteze v anorganski kemiji (prof. dr. Alojz Demšar)
Sodobne difrakcijske tehnike (prof. dr. Ivan Leban)
Nova področja v analizni kemiji (prof. dr. Boris Pihlar)

Pristopi v sodobni analizni kemiji (prof. dr. Marjan Veber)
Izbrana poglavja iz eksperimentalne fizikalne kemije (prof. dr. Gorazd Vesnaver)
Teoretične metode v fizikalni kemiji (Prof. dr. Vojko Vlachy)
Izbrana poglavja iz organske kemije (prof. dr. Slovenko Polanc)
Izbrana poglavja iz heterociklične kemije (prof. dr. Jurij Svete)
Študij mehanizmov transformacij organskih spojin (prof. dr. Boris Šket)
Izbrana poglavja iz biokemije (prof. Dr. Brigita Lenarčič)
Moderne metode in tehnike v biokemiji (doc. dr. Marko Dolinar)
Sodobni NMR pristopi v karakterizaciji spojin (prof. dr. Janez Plavec)
Izbrana poglavja iz kemijskega reakcijskega inženirstva (prof. dr. Janez Levec)
Izbrana poglavja iz transportnih pojavov (prof. dr. Igor Plazl)
Izbrana poglavja iz separacijskih procesov (prof. dr. Janvit Golob)
Izbrana poglavja iz okoljskega inženirstva (prof. dr. Jana Zagorc-Končan)
Izbrana poglavja iz biotehnoloških procesov (prof. dr. Marin Berovič)
Izbrana poglavja iz polimernega inženirstva (prof. dr. Matjaž Krajnc)
Mehanika polimernih materialov (prof. dr. Matjaž Krajnc)
Izbrana poglavja iz inženirstva materialov (prof. dr. Stane Pejovnik)
Izbrana poglavja iz materialov za energetiko in varovanje okolja (prof. dr. Jadran Maček)
Tveganje pri prevozu kemikalij (prof. dr. Stojan Petelin)

10. Podatki o možnostih izbirnih predmetov in mobilnosti

Zaradi mobilnosti ima študent možnost, da najmanj 10 kreditnih točk iz izbirnih enot programa prenese iz enega študijskega programa v drugega (6. čl. Meril za kreditno vrednotenje).

Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo s sklepom senata določi postopke za priznavanje kreditnih točk, pridobljenih v drugih študijskih programih na istem ali drugih visokošolskih zavodih.

11. Predstavitev posameznih predmetov

IZBRANA POGLAVJA IZ ANORGANSKE KEMIJE

Cilji. Študent pridobi poglobljeno znanje o izbranih poglavjih anorganske kemije. Spozna strategije načrtovanja sintez ter se nauči iskati in interpretirati povezave med zgradbo, lastnostmi in potencialno uporabnostjo izbranih vrst spojin. Nauči se uporabljati različne eksperimentalne metode pri razreševanju problemov, povezanih z izbranimi vrstami spojin.

Vsebina predmeta. Študent s soglasjem mentorja med spodaj navedenimi temami izbere tiste, ki so najtesneje povezane z njegovim raziskovalnim delom. Nosilec predmeta in vodja študija poskrbita, da obseg študentovega dela ustreza 5 KT. Če je nosilec več, izvajanje koordinira nosilec.

Priprava in uporaba spojin kovinskih elementov:

- *Priprava spojin elementov, ki imajo praktične aplikacije.* Sistematičen pregled sinteznih principov za pripravo spojin in metod njihove karakterizacije.
- *Poglobljen pregled izbranih primerov sodobnih uporab:* modelne koordinacijske spojine, fotosenzitivne rutenijeve spojine v Graetzlovih celicah, fluorescenčne kovinske spojine in uporaba v analitiki, spojine zlata in nanotehnologija.
- *Pregled nekaterih najuspešnejših kovinskih katalizatorjev, ki se uporabljajo tudi v industriji (Noyori, Grubbs, Heck, itd.).* Mehanizmi delovanja.
- *Biološko aktivni kompleksi.* Pregled nekaterih spojin ki imajo dokazano biološko aktivnost in so že v klinični rabi ali pa v preizkusni fazi. Načrtovanje in sinteza novih biološko aktivnih koordinacijskih spojin, ki temeljijo na poznavanju mehanizma delovanje že obstoječih učinkovin, oziroma na podlagi najnovejših spoznanj o delovanju posameznih bioloških sistemov. Pri tem bodo uporabljene najnovejše strategije in metode. Pomembni vidiki tega načrtovanja so oblika/ struktura ter fiziološka dostopnost učinkovin, glede na njeno ciljno uporabo. Pri tem študent pridobi znanje, ki mu omogoča samostojno delo na področju biološko aktivnih spojin.
- *Kovinski kompleksi z makromolekulami.* Kovinski kompleksi z nekaterimi makromolekulami imajo velik aplikativni pomen. V splošnem ločimo dva sintezna pristopa k pripravi teh spojin. Pri prvi metodologiji gre za koordinacijo kovinskega kompleksa na že formiran polimer, pri drugi pa enostaven kovinski kompleks reagira z monomerno enoto in v reakciji polimerizacije nastane makromolekula, ki ima kovinski atom pogosto v osnovni polimerni verigi. Sintezne poti za pripravo kovinskih kompleksov z makromolekulami, strukturne značilnosti in tipične lastnosti teh kompleksov, biomedicinske aplikacije.
- *Organokovinske spojine.* Načrtovanje sinteze organokovinskih spojin, eksperimentalne tehnike pri sintezi, karakterizacija produkta. Dinamična NMR spektroskopija kot metoda za študij fluksionalnih organokovinskih in drugih molekul: osnove, določanje termodinamskih in kinetičnih parametrov in mehanizma dinamičnega procesa. Uporaba dinamične NMR spektroskopije za proučevanja mehanizma reakcij, kataliziranih z organokovinskimi katalizatorji.
- *Kovine v okolju.* Razporeditev kovin in kovinskih spojin v okolju, esencialni in toksični elementi, naravni in antropogeni izvori, pomen kovin za žive organizme. Reakcije in kroženje kovin in kovinskih spojin v okolju (topnost spojin, ligandi v okolju, nastanek koordinacijskih spojin, reakcije koordinacijskih spojin, stabilnost koordinacijskih spojin, obarjanje, adsorpcija, kemisorpcija, ionska izmenjava, redoks reakcije, frakcionacija kovin v tleh). Obremenitev okolja s kovinskimi spojinami (toksičnost, mejne vrednosti, zakonodaja). Povezovanje navedenih vsebine z aktualnimi okoljskimi problemi. Sanacija tal in vode,

SODOBNE METODE SINTEZE V ANORGANSKI KEMIJI

Cilji. Študenti spoznajo zahtevne sintezne poti, reagente in tehnike za pripravo anorganskih, koordinacijskih, organokovinskih in kovinsko-organskih spojin ter za pripravo posebnih oblik teh snovi, kot so nanodelci, tanki filmi, snovi z visoko poroznostjo. Poudarek je na perspektivnih metodah, ki se naglo razvijajo.

Vsebina predmeta. Študent s soglasjem mentorja izbere tiste metode, ki so najtesneje povezane z njegovim raziskovalnim delom. Nosilec predmeta in vodja študija poskrbita, da obseg študentovega dela ustreza 5 KT. Če je nosilec več, izvajanje koordinira nosilec.

– *Reakcije sintez:* pregled najpomembnejših reakcij in njihovih mehanizmov ter reagentov za pripravo anorganskih, koordinacijskih, organokovinskih in kovinsko-organskih spojin. Podrobnejša predstavitev nekaterih raziskovalnih dosežkov zadnjih let, ki so odprli nove možnosti na navedenem področju.

– *Pregled zahtevnejših sinteznih tehnik:* sinteze v kontrolirani atmosferi, solvotermalna sinteza, sol-gel sinteza, sonokemične sinteze, termični razpad prekurzorjev anorganskih spojin.

SODOBNE DIFRAKCIJSKE TEHNIKE

Cilji. Študenti spoznajo teoretične osnove in se naučijo praktično uporabljati nove zahtevne tehnike difrakcijske analize za različne vidike karakterizacije trdnih snovi.

Vsebina predmeta. Študent s soglasjem mentorja med spodaj navedenimi tehnikami izbere tiste, ki so najtesneje povezane z njegovim raziskovalnim delom. Nosilec predmeta in vodja študija poskrbita, da obseg študentovega dela ustreza 5 KT. Če je nosilec več, izvajanje koordinira nosilec.

Kratka osvežitev znanja o difrakciji rentgenskih žarkov, nevtronov in elektronov na trdnih snoveh.

Uporaba zahtevnejših tehnik na monokristalih (elektronska gostota, anomalna disperzija, absolutna konfiguracija, uporaba več valovnih dolžin v okolici absorpcijskega roba, strukturna analiza dvojčenih kristalov).

Uporaba zahtevnejših tehnik na polikristaliničnih in amorfni materialih (določevanje strukture, Rietveldova metoda za strukturno, mikrostrukturno in kvantitativno fazno analizo, kombinacija nevtronske in rentgenske difrakcije, totalno sipanje in porazdelitvena funkcija parov (lokalna urejenost kristaliničnih in amorfni snovi), difrakcija na nano-materialih).

NOVA PODROČJA V ANALIZNI KEMIJI

Cilji. Študenti nadgradijo znanja s področja instrumentalne analize, spoznajo trende razvoja in novejšje tehnike (tako teorijo kot možne praktične aplikacije), ki so jih pridobili na

magistrskem študiju. Kompetence s področja sodobne instrumentalne analitike razvijejo do ravni, ki jo terja raziskovalno delo in reševanje kompleksnih strokovnih problemov v praksi.

Vsebina predmeta. Študent s soglasjem mentorja med spodaj navedenimi temami izbere tiste, ki so najtesneje povezane z njegovim raziskovalnim delom. Nosilec predmeta in vodja študija poskrbita, da obseg študentovega dela ustreza 5 KT. Če je nosilec več, izvajanje koordinira nosilec.

- Metodologija in aplikacije novejših spektroskopskih metod v analizni kemiji. Problematika uvajanja plinastih, tekočih in trdnih vzorcev v atomski spektrometriji. Pomen laserske ablacije v elementni masni spektrometriji. Uporaba atomske spektrometrije (ICP-OES, ICP-MS) za karakterizacijo materialov, okoljskih in bioloških vzorcev.

- Masna spektrometrija v analizni kemiji; instrumentacija, tehnike ionizacije in interpretacija masnih spektrov. Nove tehnike v masni spektrometriji (MALDI, proton transfer mass spectrometry, desorption electrospray ionization - DESI).

- Teorija separacij in principov ločevanja v analizni kemiji, sklopitve GC-MS, HPLC-MS in HPLC-ICP-MS. Teoretski in praktični vidiki večdimenzionalnih kromatografskih tehnik.

- Elektroanalizne tehnike (voltometrija in stripping tehnike) in aplikacija v analitiki anorganskih in organskih komponent, v analitiki sledov, študiju interakcij kovina-ligand, bioloških sistemih ter karakterizaciji in analizi materialov in okoljski kemiji.

- Elektrokemijski senzorji, aplikacija pri študiju ravnotežij, mikroelektrode, kemijsko modificirane elektrode, pretočne mikroelektrode, ultramikroelektrode. Sestavljene tehnike: spektroelektrokemija (EC-UV-Vis, EC-IR, EC-MS, SEM, EC-STM, EC-AFM).

PRISTOPI V SODOBNI ANALIZNI KEMIJI

Cilji. Študenti nadgradijo znanja s področju analizne kemije, ki so jih pridobili na magistrskem študiju. Kompetence s področja poznavanja novih analiznih tehnik in analiznih pristopov razvijejo do ravni, ki jo terja raziskovalno delo in reševanje kompleksnih strokovnih problemov v praksi. Študentje spoznajo možnosti uporabe numeričnih metod v analizni kemiji.

Vsebina predmeta. Študent s soglasjem mentorja med spodaj navedenimi temami izbere tiste, ki so najtesneje povezane z njegovim raziskovalnim delom. Nosilec predmeta in vodja študija poskrbita, da obseg študentovega dela ustreza 5 KT. Če je nosilec več, izvajanje koordinira nosilec.

- Numerične metode v analizni kemiji.

- Speciatijska analitika; načini priprave vzorca in izbira primerne analize tehnike.

- Miniaturizacija v analizni kemiji: koncept laboratorija na čipu, celoviti mikroanalizni sistemi (μ TAS), izdelovalne tehnike za μ TAS in integracijo detekcije v mikropretočne sisteme, makro – mikro vmesniki za mikropretočne sisteme.

- Uporaba sodobnih analiznih tehnik za ugotavljanje pretvorbe in vezave antropogenih onesnaževal.

- Analizni problemi v atmosferski kemiji; karakterizacija aerosolov in modeliranje.

- Reševanje analiznih problemov v kontroli prehrabnih produktov; separacija in karakterizacija sestavin živil.

– Reševanje analiznih problemov v biomedicinskih in bioloških vedah, zaščiti okolja, varovanju kulturne dediščine in industriji.

IZBRANA POGLAVJA IZ EKSPERIMENTALNE FIZIKALNE KEMIJE

Cilj. V okviru tega predmeta študent pridobi specialistična znanja z ožjega področja. Ta znanja zadostujejo za samostojno vodenje znanstvene raziskave na izbranem raziskovalnem področju.

Vsebina predmeta. Študent skupaj z mentorjem izbere vsebine v obsegu 5 KT izmed spodaj navedenih, nosilec predmeta skladno z izbranimi vsebinami kooordinira izvajanje, če je izvajalcev več.

– *Raztopine biološko pomembnih makromolekul.*

Termodinamika in kinetika vodnih raztopin biopolimerov. Modelska analiza termodinamskih in kinetičnih količin merjenih s spektroskopskimi in kalorimetričnimi metodami v povezavi s strukturo in delovanjem bioloških makromolekul.

– *Strukturne raziskave nano-sistemov z metodo ozkokotnega rentgenskega sipanja.*

Splošna teorija rentgenskega sipanja. Modelni izračuni: sferični, paličasti in ploščati delci. Eksperimentalni sistem. Analiza eksperimentalnih podatkov. Primeri uporabe.

– *Raziskava ergodijskih in neergodijskih sistemov z metodo SLS in različnimi inačicami metode DLS.*

Splošna teorija sipanja laserske svetlobe. Specifične lastnosti eksperimentalnih sistemov običajne, 3D, 'echo' in 'multi-speckle' inačice DLS. Analiza eksperimentalnih podatkov. Primeri uporabe.

– *Termodinamske raziskave asociacijskih procesov v raztopinah.*

Asociacija ionov v raztopinah elektrolitov. Termodinamika micelizacije ionskih in neionskih površinsko aktivnih snovi (izotermna titracijska kalorimetija, izotermna titracijska konduktometrija, Philipsov kriterij, psevdofazni separacijski model, ravnotežni model, določanje stopnje ionizacije micel).

– *Kompleksni koloidni sistemi.*

Asociirajoči sistemi: surfaktanti, polimeri in polielektroliti ter mešani sistemi. Medmolekulska asociacija in geliranje. Fazno obnašanje in strukture. Eksperimentalne tehnike za študij asociacije.

– *Vodne raztopine polielektrolitov.*

Sintezni principi in analiza vzorcev polielektrolitov. Osnovna karakterizacija polielektrolitov: določanje topnostnih krivulj, ionizacijske konstante, titracijske krivulje. Modelska analiza izmerjenih termodinamskih in transportnih lastnosti polielektrolitov v povezavi s strukturo polielektrolita.

TEORETIČNE METODE V FIZIKALNI KEMIJI

Cilji. Predmet zahteva predznanje splošne in fizikalne kemije ter strukture atomov in molekul. Glede na izbrano študijsko snov v okviru tega predmeta se od študenta pričakuje tudi znanje s področja numerične matematike, fizike in računalništva.

Vsebina predmeta. Študent skupaj z mentorjem izbere vsebine v obsegu 5 KT izmed spodaj navedenih, nosilec predmeta skladno z izbranimi vsebinami koordinira izvajanje, če je izvajalcev več.

– *Potencialne metode.*

Ponovitev osnovnih pojmov. Poisson–Boltzmannova enačba, modificirana Poisson–Boltzmannova enačba. Robni pogoji in rešitve linearizirane in nelinearizirane oblike v različnih simetrijah.

– *Termodinamične perturbacijske teorije.*

Osnove, Gibbs–Bogoljubova neenakost. Barker–Hendersonova teorija. Weeks–Chandler–Andersenova teorija. Wertheimova perturbacijska teorija.

– *Porazdelitvene funkcije.*

Ornstein–Zernikova integralska enačba v različnih približkih. Razvoj po multipolih za molekularne sisteme. Wertheimova integralska enačba za sisteme z močno usmerjenimi silami.

– *Simulacijske metode.*

Metoda Monte Carlo v generaliziranem ansamblu. Uporaba adhezivnega (impulznega) potenciala za modeliranje privlačnih koloidov. Dinamika molekul. Polje sil. Molekulski docking. Simulacije biomolekul.

– *Sistemi v polju zunanje sile.*

Teorija gostotnega funkcionala.

– *Kvantno-kemijske metode.*

Periodični sistemi: Blochove funkcije, Hartree-Fockova metoda za periodične sisteme. Korelirano gibanje elektronov: korelacijska energija, metoda konfiguracione interakcije, multikonfiguracijska interakcija, metoda sklopljenih skupkov. Teorija gostotnih funkcionalov (DFT): Kohn-Shamove enačbe, Hohenberg-Kohnova teorema, približek lokalne gostote, približek nelokalne gostote. Metode kvantne dinamike in mehanike.

– *Kemijska kinetika.*

Hitrost kemijskih reakcij v raztopinah. Vpliv ionskih reaktantov. Kataliza.

IZBRANA POGlavJA IZ ORGANSKE KEMIJE

Cilji. Poglobljeno poznavanje izbranih področij organske kemije. Kandidat se seznani z modernimi metodami organske kemije, kar ga usposobi za samostojno reševanje problemov iz tega področja dejavnosti.

Vsebina predmeta. Študent s soglasjem mentorja med spodaj navedenimi temami izbere tiste, ki so najtesneje povezane z njegovim raziskovalnim delom. Nosilec predmeta in vodja študija poskrbita, da obseg študentovega dela ustreza 5 KT. Če je nosilcev več, izvajanje koordinira nosilec.

– *Diazeni v organski sintezi.*

Sinteze diazenov. Reakcije z alkeni in areni. Migracija halogena. Intramolekularne reakcije. Reakcije s karbonilnimi spojinami. Sinteze imidazolov, 1,2,4-triazolov in 1,3,4-oksadiazolov. Kemoselektivne oksidacije tiolov in selenolov; elektrokemijske lastnosti diazenov. Aplikacije diazenov v 'click' kemiji in v cikloadicijah. Mitsunobijeve reakcije. Biokemijske karakteristike diazenov. (prof. dr. Janez Košmrlj, prof. dr. Slovenko Polanc)

– *Moderne metode halogeniranja organskih molekul.*

Vloga halosubstituiranih organskih molekul v (biološki) kemiji, biološko aktivne halosubstituirane molekule, biohalogeniranje, vpliv fluorovega atoma na biološko aktivnost molekul. Trajnostni razvoj in ekološko sprejemljive meode uvedbe halogenov. Razvoj novih tehnik za halogeniranje: brez topil, na vodi, prisotnost par topil, difuzijske membrane, mikroreaktorji, kontinuirni procesi. Novi reagenti za uvedbo halogenov v organske molekule, enantioselektivno halogeniranje, sinteze halosubstituiranih kiralnih sintonov. (prof. dr. Marko Zupan, doc .dr. Marjan Jereb)

– *Izbrana poglavja iz selektivne sinteze.*

Selektivna sinteza, zaščitne skupine. Stereoselektivna sinteza, asimetrična indukcija. Uporaba katalize v selektivni sintezi. Selektivna sinteza s pomočjo mikrovalov, reakcije brez uporabe topil. Sinteza pod visokimi pritiski (nad 10 kbar), izbira topil, kemo-, regio- in stereoselektivnost, sintezni primeri. Cikloadicijske reakcije in druge pretvorbe 2*H*-piran-2-onov: sinteza in pretvorbe derivatov biciklo[2.2.2]oktena, α,β -didehidro- α -aminokislin, polisubstituiranih anilinov in sorodnih spojin in indolov. Sinteza in reaktivnost 1,3-diketo-BF₂ kompleksov. Tvorba C-C vezi preko katalizirane aktivacije inertne C-H vezi. Kovinski karbenski kompleksi in tvorba C=C vezi. (prof. dr. Marijan Kočevar, doc. dr. Bogdan Štefane).

– *Molekularne sonde za strukturno in funkcionalno slikanje.*

Pregled modernih metod strukturnega in funkcionalnega slikanja (MRI, konfokalna mikroskopija, pozitronska emisijska tomografija (PET)...). Sinteze in karakterizacija fluorescentnih ter z radioizotopi označenih molekularnih sond. Izbrani primeri: sonde za raziskave sprememb v centralnem živčnem sistemu. (prof. dr. Andrej Petrič)

IZBRANA POGlavJA IZ HETEROCIKLIČNE KEMIJE

Cilji. Poglobljeno poznavanje izbranih področij organske kemije. Kandidat se seznani z modernimi metodami organske kemije, kar ga usposobi za samostojno reševanje problemov iz tega področja dejavnosti.

Vsebina predmeta.

– *Heterociklizacije.*

Ciklosubstitucije, ciklokondenzacije, cikloadicije in ostale periciklične reakcije, transformacije obročev, molekulske premestitve, regio- in stereoselektivne heterociklizacije, Stereoselektivna in asimetrična sinteza (delno) nasičenih sistemov.

– *Modularni pristop k sintezi obročnih sistemov.*

Sintezni gradniki za pripravo heterociklov, metode heterociklizacije, modularni pristop k načrtovanju sinteze obročev, kontrola kemo-, regio- in stereoselektivnosti.

– *Sinteze in pretvorbe alkil 3-(dimetilamino)-propenoatov in sorodnih enaminonov; od heterociklov do naravnih spojin.*

Sinteza in struktura substituiranih alkil 3-(dimetilamino)-propenoatov in sorodnih enaminonov iz necikličnih in cikličnih spojin z metilensko ali potencialno metilensko skupino. Tipična reaktivnost 3-(dimetilamino)propenoatov in sorodnih enaminonov: reakcije z nukleofili in elektrofile, cikloadicije. Transformacije: sinteza heteroaril amino kislin, sinteza monocikličnih heterociklov: aziridinov, pirolov, oksazolov, izoksazolov, pirazolov, imidazolov, 1,2,4-oksadiazolov, 1,2,3-triazolov, piranonov, piridinov, piridazooov, pirimidinov, pirazinov in kondenziranih sistemov na osnovi omenjenih heterocikličnih

sistemov. Sinteza naravnih spojin in njihovih analogov, npr. indolovih alkaloidov kot so aplisinopsini, meridianini, dipodazini, triprostatini in drugi.

- *Sinteza funkcionaliziranih heterociklov.*

Sinteza s funkcionalizacijo obroča, sinteza s funkcionalizacijo gradnikov.

- *Kombinatorna sinteza heterociklov.*

ŠTUDIJ MEHANIZMOV TRANSFORMACIJ ORGANSKIH SPOJIN

Cilji. Poglobljeno poznavanje izbranih področij organske kemije. Kandidat se seznanja z modernimi metodami organske kemije, kar ga usposobi za samostojno reševanje problemov iz tega področja dejavnosti.

Vsebina predmeta. Študent s soglasjem mentorja med spodaj navedenimi temami izbere tiste, ki so najtesneje povezane z njegovim raziskovalnim delom. Nosilec predmeta in vodja študija poskrbita, da obseg študentovega dela ustreza 5 KT. Če je nosilec več, izvajanje koordinira nosilec.

- *Pregled metod študija mehanizmov organskih reakcij.*

Nekinetične metode: identifikacija produktov, reaktivni intermedii, kemijske in fizikalne metode (spektroskopske metode: NMR, ESR, UV/VIS, IR) detekcije in karakterizacije intermediatov, izotopsko zaznavanje, stereokemija in mehanizem. Kinetične metode: kinetični principi reakcij v raztopini, prehodno stanje, aktivacijski parametri in njihova interpretacija, Hammondov postulat, princip reaktivnost-selektivnost, kinetični izotopski efekti, korelacija strukture in reaktivnosti, linearno prosto energijske zveze in prehodno stanje. Empirične korelacije učinka topil na hitrost reakcij.

- *Študij mehanizmov oksidacij s posebnim poudarkom na oksidacijah s peroksidi in ozonom.*

Sinteza, fizikalne lastnosti in reaktivnost najpomembnejših razredov peroksidov, t.j. organskih derivatov vodikovega peroksida (HOOH). Mehanizem prenosa kisika pri nekataliziranih in kataliziranih reakcijah oksidacije različnih organskih substratov s peroksidi. Oksidacije organskih substratov s singletnim ($^1\text{O}_2$) in tripletnim ($^3\text{O}_2$) kisikom in ozonom. Peroksidi v bioloških sistemih. Kemija vodikovega trioksida (HOOOH) ter njegovih organskih in organokovinskih hidrotrioksidnih (ROOOH) derivatov.

- *Organska fotokemija.*

Nastanek in obnašanje vzbujenih stanj molekul je pomembno za razumevanje fotokemičnih reakcij. Te informacije lahko dobimo iz študija kinetike fotofizikalnih in kemičnih procesov in jih lahko uporabimo pri načrtovanju struktur molekul, ki bodo vodile do zelenih končnih produktov fotokemičnih procesov. a) Fotofizikalni procesi: absorpcija fotona, singletna in tripletna stanja. Emisija fotona (fluorescenca, fosforescenca, kemiluminiscenca). Izbirna pravila za prehode (medsistemsko križanje, interna konverzija) Franck-Condonovo načelo. b) Eksperimentalne tehnike: "time resolved" spektroskopija, omogoča opazovanje kratkoživih vzbujenih stanj in reakcijskih intermediatov, na nano- in femtosekundni skali. Merjenje kvantnega izkoristka emisijskih pojavov in fotokemičnih procesov. Razlikovanje med vrstami vzbujenih stanj s specifičnimi inhibitorji. c) Fotokemični procesi: Značilni kromoforji in njihova reaktivnost. Uporaba fotokemičnih procesov v organski sintezi.

- *Kemija radikalov.*

a) Struktura in reaktivnost radikalov. Uporaba eksperimentalnih tehnik za študij reaktivnosti: kinetične in "time resolved" spektroskopske metode (laserska bliskovna fotoliza na

nanosekundni skali idr.) elektronska spinska resonanca. Elektronski efekti pri radikalskih reakcijah. Uporaba računskih metod (DFT) za študij energetike radikalskih reakcij.

b) Uporaba radikalskih procesov v organski sintezi. Kemija stananov in sorodnih hidridov, redoks procesi idr. Kataliza z obratom polarnosti.

IZBRANA POGlavJA IZ BIOKEMIJE

Cilji. Podiplomski študenti bodo dobili pregled nad literaturo, znali bodo kritično ovrednotiti informacije in jih uporabiti za načrtovanje in ovrednotenje lastnega dela, znali poiskati informacije, ki jih bodo potrebovali. Po navodilih razpisne dokumentacije bodo znali pripraviti ustrezen opis ozadja raziskav in predlagati raziskovalno temo znotraj širšega področja biokemije.

Vsebina predmeta.

- uvodi v vsebinske sklope (predavanja)
- seminar iz tekoče literature
- poglobljena analiza novic s področja biokemije v medijih (seminarji)
- biokemijska obravnava izbrane bolezni
- priprava raziskovalnega projekta s področja biokemije

SODOBNE METODE IN TEHNIKE V BIOKEMIJI

Cilji. Podiplomski študenti se bodo naučili spremljati razvoj novih metod in tehnik v biokemiji, kritično ocenjevati prednosti in slabosti izboljšav in uporabnost novih metod.

Vsebina predmeta:

- uvodi v vsebinske sklope (predavanja)
- tehnološke novosti v biokemiji (seminarji)
- uvedba nove metode ali predlog izboljšave ene od metod, ki jih študent uporablja pri svojem raziskovalnem delu

SODOBNI NMR PRISTOPI V KARAKTERIZACIJI SPOJIN

Cilji. Študent teoretično in praktično spozna sodobne tehnike nuklearne magnetne resonance in njihovo uporabnost za reševanje znanstvenih problemov, (praviloma) povezanih z njegovim lastnim raziskovalnim delom.

Vsebina predmeta. Jedrski spin, NMR eksperiment, relaksacija, kompozitni pulzi, heteronuklearno razklapljanje, "spin lock", selektivno vzbujanje, gradientni pulzi, difuzija, obdelava NMR spektrov, heteronuklearni eksperimenti, editiranje spektrov, prenos polarizacije, večdimenzionalni NMR eksperimenti, povezave preko vezi in preko prostora, asignacija spektrov, računanje strukture iz NMR podatkov, ravnotežja in dinamične lastnosti molekul, NMR v trdnem agregatnem stanju, polimorfizem in solvatacija.

Vsebina oz. program izvajanja predmeta bosta individualno prilagojena raziskovalnim usmeritvam posameznega študenta. Vsebine je mogoče prilagoditi do te mere, da bo študent lahko sodobne NMR pristope po uspešno opravljenem predmetu samostojno uporabljal na organskih, anorganskih, farmacevtskih, biokemijskih in ostalih vzorcih, tako v trdnem kot v tekočem agregatnem stanju.

IZBRANA POGLAVJA IZ KEMIJSKEGA REAKCIJSKEGA INŽENIRSTVA

Cilji. Študent poglobljeno spozna interakcije med kinetiko reakcij na površini trdnega katalizatorja in transportnimi pojavi v reakcijskih sistemih z več fazami. Pridobljena znanja mu omogočajo: (i) interpretacijo eksperimentalnih rezultatov o poteku ene in ali več reakcij vodenih v večfaznih reaktorjih in (ii) optimalno načrtovati in upravljati večfazne reaktorje, ki jih pogosto najdemo v farmacevtski in sorodni industriji. Ta znanja študenta kvalificirajo tudi za samo izbiro procesa oziroma tipa reaktorja, ki bo zagotavljal želeno selektivnost in dobiček in pri študentu spodbujajo kritično uporabo osvojenih znanj za reševanje inženirskih problemov pri uvajanju sodobne procesne intenzifikacije.

Vsebina predmeta.

Kataliza. Trdni katalizatorji. Karakterizacija katalizatorjev (fizikalne metode, temperaturno programirane tehnike in tranzientne metode). *In situ* karakterizacija katalitske površine. Teorija reakcijske hitrosti. Reaktivnost površine. Modeli kemisorpcije. Mehanizmi in kinetika heterogeno kataliziranih reakcij. Heterogeno katalizirane reakcije oksidacije in redukcije (hidrogeniranje). Asimetrična kataliza. Heterogene katalitske reakcije v superkritičnih fluidih in ionskih tekočinah. Večfunkcionalni katalizatorji. Deaktivacija katalizatorjev. Kataliza na področju varstva okolja. Aplikacije v petrokemični in farmacevtski industriji.

Večfazni reaktorji z eno reakcijo. Vpliv transporta snovi in toplote pri reakcijah na zunanji površini in znotraj poroznega katalizatorja. Modeli reaktorjev za študij snovnega transporta v heterogenih sistemih (plin-kapljevina, kapljevina-kapljevina, fluid-trdno). Določitev transportnih koeficientov v večfaznih reaktorjih.

Večfazni reaktorji s kompleksno reakcijsko shemo. Simultani transport dveh reaktantov pri neodvisnih in odvisnih paralelnih reakcijah. Snovni transport pri konsektivnih reakcijah. Snovni transport pri paralelno-konsektivnih reakcijah.

Toplotni efekti v večfaznih reaktorjih. Reaktorji plin-kapljevina: kolona z mehurčki, reaktorji z mešalom. Reaktorji plin-trdno: katalitski in nekatalitski. Reaktorji plin-kapljevina-trdno.

IZBRANA POGLAVJA IZ TRANSPORTNIH POJAVOV

Cilji. Cilj predmeta je, da podiplomski študentje nadgradijo osvojena znanja iz transportnih pojavov, ki predstavljajo temelje kemijsko inženirske znanosti.

Študentje si pri predmetu pridobijo naslednje specifične kompetence:
poglobljeno razumevanje fluidne dinamike, prenosa toplote in prenosa snovi.

Vsebina predmeta.

- kompleksne tekočine – izvor ne-Newtonskega obnašanja;
- konstitutivne enačbe za ne-Newtonske tekočine;
- robni pogoji na trdnih stenah in na tekočih mejnih ploskvah (kinematični pogoji, termični robni pogoji, dinamični robni pogoji);
- neusmerjen in enodimenzijski tok in problemi prenosa toplote;
- uvod v asimptotične aproksimacije (vpliv oddane toplote zaradi viskoznosti na preprost strižni tok, tok tekočine skozi rahlo ukrivljeno cev – »the Dean problem«, difuzija v sferi s hitro reakcijo, dinamika mehurčkov v mirujočem toku – Rayleigh-Plessetova enačba);
- filmi s prosto površino;
- plazeči tokovi - splošne lastnosti in rešitve za 2D in asimetrične probleme;
- plazeči tokovi - 3D problemi;
- konvekcija in prenos toplote viskoznih tokov;
- teorija mejnega sloja za laminarne tokove;
- prenos toplote in snovi pri velikih Reynoldsovih številih.

IZBRANA POGLAVJA IZ SEPARACIJSKIH PROCESOV

Cilji. Podiplomski študentje bodo nadgradili temeljna inženirska znanja iz prenosa snovi, termodinamike in masno-toplotnih bilanc ter jih povezali v analizo oziroma načrtovanje zahtevnejših separacijskih procesov. Proučili bodo vlogo separacijskih procesov v procesnem, produktnem inženirstvu ter se poglobili v raziskovalno-razvojne naloge pri prenosu separacijskih tehnik iz laboratorija v pilotsko postrojenje in industrijo.

Vsebina predmeta:

- Reakcijski in separacijski procesi v procesnem in produktnem inženirstvu;
- masne in toplotne bilance zahtevnejših procesov;
- termodinamika neidealnih sistemov;
- prenos snovi v dvofaznih kompleksnih sistemih;
- metode za izračun časa separacije kot podlage za dimenzioniranje, razvoj modelov za čas separacije in parametrska občutljivost;
- razvoj znanj na nivojih produkta, opreme in procesa pri analizi oziroma načrtovanju separatorjev;
- vloga laboratorijskih raziskav in načrtovanje pilotskih enot
- posebej poudarjena poglavja iz izbranih separacijskih procesov: industrijska kristalizacija po konceptu kot sledi: termodinamske osnove, kinetika kristalizacijskih procesov, model procesa na osnovi populacijske bilance, vodenje kristalizacijskega procesa.

IZBRANA POGLAVJA IZ OKOLJSKEGA INŽENIRSTVA

Cilji. Študent nadgradi in poglobi znanja iz okoljskega inženirstva, ki so osnova za uspešno reševanje obstoječih okoljskih problemov. Razvija sposobnost za kritično ovrednotenje

možnih prednosti in slabosti uporabe različnih tehnologij in izboljšav v proizvodnih in drugih postopkih. Pridobi znanje za vrednotenje vpliva svojega dela na lokalni in globalni ravni ter zavedanje o družbenem vplivu svojih odločitev. Razvija sposobnost za kritično uporabo osvojenih znanj pri reševanju znanstvenih in družbenih problemov.

Vsebina predmeta:

Študent s soglasjem mentorja med spodaj navedenimi temami izbere tiste, ki so najtesneje povezane z njegovim raziskovalnim delom. Nosilec predmeta in vodja študija poskrbita, da obseg študentovega dela ustreza 5 KT. Če je nosilec več, izvajanje koordinira nosilec.

Sodobne tehnike identifikacije in kvantifikacije nevarnih snovi: Mikropolutanti (hormonski motilci, biocidi, PAH, PCB). *In vivo* in *in vitro* metode detekcije in kvantifikacije mikropolutantov. Sodobni postopki identifikacije in odstranjevanja nevarnih snovi v odpadnih vodah: TIE - Toxicity Identification Evaluation in TRE - Toxicity Reduction Evaluation.

Kemijski, membranski in biokemijski procesi v procesih zaščite in remediacije okolja:

- Kemijski procesi: Čiščenje odpadnih in pitnih voda s kemijskimi postopki. Sodobni oksidacijski procesi (AOP). Fotokatalitska oksidacija. Fentonova oksidacija. Ozonacija. Elektrokemijski procesi. Termična mokra oksidacija. Oksidacija v superkritični vodi. Heterogeni katalizatorji na področju varstva okolja. Večfazni reaktorski sistemi. Kapalni reaktor. Monolitni reaktor. Katalitski membranski kontaktorji. Integralne procesne sheme: sklopitev AOP procesov z biološkimi postopki. Aplikacija sodobnih oksidacijskih procesov pri odstranjevanju mikropolutantov iz zraka, odpadnih in pitnih vod.
- Membranski procesi.

Biokemijski procesi: Mikoremediacija. Bioremediacija z glivami. Bioaugmentacija. Bioremediacija disperznega onesnaženja. Dekolorizacija in degradacija organskih barvil. Faktorji, ki vplivajo na proces. Mehanizmi in metabolne poti ter produkti. Vloga encimov pri degradaciji organskih barvil. Bioreaktorji za mikoremediacijo. Primerjava z alternativnimi tehnologijami. Zaključki in perspektive: mikoremediacija mikropolutantov z glivami bele trohnobe.

IZBRANA POGLAVJA IZ BIOTEHNOLOŠKIH PROCESOV

Cilji. Cilj predmeta je poglobitev znanja za samostojno delo na področju načrtovanja in optimizacije bioprocsov in pripadajočih analiz s poudarkom na okolju in človeku sprejemljivejših tehnologijah.

Študentje si pri predmetu pridobijo naslednje specifične kompetence: usposobljenost za reševanje inženirskih problemov v bioprocsovih z uporabo osnovnih inženirskih principov in z najnovejšimi tehnologijami in inženirskimi orodji.

Vsebina predmeta.

– Biotransformacije v mikroreaktorjih; biotransformacije v nekonvencionalnih medijih (ionske kapljevine, organska topila); uporaba biotransformacij v papirni industriji.

– Miniaturizacija bioprocsov: uporaba mikronaprav v biotehnologiji; prednosti in slabosti biokemijskih procesov v mikroreaktorjih; uporaba mikrosistemov v zaključnih procesih ter integrirane lab-on-chip naprave; analitske naprave v mikrosistemih (micro total analysis systems - μ TAS): možnosti uporabe za sleditev bioprocsov; encimski mikroreaktorji.

– Morfologija nitastih gliv kot parameter v submerznih bioprocesih; mehanizmi rasti nitastih gliv v submerznih procesih in vpliv procesnih spremenljivk, karakterizacija morfologije (kvantitativna analiza slike, reološke lastnosti brozge); vpliv morfologije na tvorbo produkta; načrtovanje in vodenje bioprocesov z upoštevanjem morfoloških lastnosti micelija.

– Biosinteza farmacevtskih učinkovin Basidiomicet : sodobne metode kulture aktivne biomase za proizvodnjo intracelularnih in ekstracelularnih učinkovin (polisaharidov, terpenoidov, proteinov in proteoglikanov), metode izolacije in purifikacije, njihove imunostimulativne in terapevtske učinkovine na živalskih in človeških tkivnih kulturah in v medicini.

– Bioproceno inženirstvo v anaerobnih fermentativnih procesih : vodenje in povečevanje procesov z ozirom na mikrobiološke povečevalne faktorje, integrirani vplivi posameznih postopkov, vpliv zunanjih šokov na vodenje postopka (termični šoki, galvansko in magnetno polje, kombinirani vplivi).

IZBRANA POGLAVJA IZ POLIMERNEGA INŽENIRSTVA

Cilji. Podiplomski študenti bodo osvojili poglobljena znanja iz specifičnega področja polimerne inženirstva. Preučili bodo dostopno strokovno in znanstveno literaturo iz izbranega področja in jo kritično ovrednotili. Na osnovi preučene literature in zbranih dostopnih podatkov bodo sposobni načrtovati vsebino raziskovalnega dela in predvideti metode dela ter postaviti raziskovalne cilje.

Vsebina predmeta.

- pregled vsebinskih področij polimerne inženirstva (predavanja)
- seminar iz izbranega področja polimerne inženirstva, ki temelji na pregledu strokovne in znanstvene literature
- izdelava predloga raziskovalnega projekta za načrtovanje specifičnega procesa
- izdelava predloga raziskovalnega projekta za načrtovanje specifičnega produkta

MEHANIKA POLIMERNIH MATERIALOV

Cilji. Podiplomski študenti bodo osvojili poglobljena znanja iz mehanike polimernih materialov na makroskopskem nivoju in relacije mehanskega obnašanja v odvisnosti od strukture materiala in mehanizma deformacije. Osvojili bodo sodobne tehnike določanja mehanskih lastnosti polimernih materialov, interpretacijo rezultatov ter modeliranje viskoelastičnega obnašanja.

Vsebina predmeta. Fenomenološka obravnava viskoelastičnosti polimernih materialov s sodobnimi tehnikami določanja (dinamičnih) mehanskih lastnosti polimerov. Molekularni mehanizmi in matematični zapis mehanike kontinuuma. Soodvisnost frekvence in temperature. Prehodi in relaksacije v polimerih. Elastičnost polimernih mrež. Modeliranje mehanskih lastnosti kompozitnih materialov. Obravnava izbranih primerov.

IZBRANA POGlavJA IZ INŽENIRSTVA MATERIALOV

Cilji. Razumevanje splošnih odvisnosti med strukturo in lastnostmi materialov. Poleg tega v okviru tega predmeta študent pridobi specialistična znanja z ožjega področja. Ta znanja zadostujejo za samostojno vodenje znanstvene raziskave na izbranem raziskovalnem področju.

Vsebina predmeta. Študent skupaj z mentorjem izbere vsebine v obsegu 5 KT izmed spodaj navedenih glede na področje svojega raziskovalnega dela pa poglobi znanja z izborom ožje teme. Nosilec predmeta skladno z izbranimi vsebinami kooordinira izvajanje, če je izvajalcev več.

– *Razumevanje splošnih odvisnosti med strukturo in lastnostmi materialov.*

Poudarek je dan osnovam teorije mehanske lastnosti materialov, metodam mehanskega utrjevanja, plastičnosti polikristaliničnih materialov, lezenju in kinetiki faznih transformacij. Dodatna izbrana poglavja vključujejo znanja, potrebna za razumevanje električnih, magnetnih in optičnih lastnosti materialov, biokeramike ter nanomaterialov in nanotehnologij.

– *Načrtovanje materialov z določenimi lastnostmi.*

Vsi primeri so obdelani na posebnih študijskih primerih. Od materialov so posebej obravnavani: jekla (ogljikova in zlitine), aluminij, keramika, steklo, polimerni kompoziti, keramični kompoziti, kompoziti s kovinsko matrico, napredni keramični materiali (LTCC, FGM..).

– *Načrtovanje in izbor materialov ter procesov za njihovo pripravo.*

Obravnavane so lastnosti materialov, ki so izrazito pomembne za krojenje (dizajn) elementov in sklopov strukture, splošna metodologija izdelave konstrukcij, metodologija izbora materialov in kriteriji ter orodja za izbor materialov s posebnim poudarkom na obravnavi propada-korozije gradiv. Obravnavani so naslednji procesi za pripravo materialov: sinteza in določitev sestave ter lastnosti materialov, metode priprave prahov, načini oblikovanja, sušenje, sintranje; procesi za izboljšanje in krojenje lastnosti: termična, kemijska in mehanska obdelava. Vsi navedeni procesi so obravnavani na mikro in nano skali velikosti gradnikov (delcev, plasti, itd). Karakterizacija strukture in funkcionalnih lastnosti materialov. Študent izbere primere posebnih sodobnih fizikalnih in kemijskih sinteznih metod, ki jih obdela v seminarski nalogi.

IZBRANA POGlavJA IZ MATERIALOV ZA ENERGETIKO IN VAROVANJE OKOLJA

Cilji. Seznanjanje z materiali za sodobne aplikacije v energetiki in okoljevarstvu. V okviru tega predmeta študent pridobi specialistična znanja z ožjega področja. Ta znanja zadostujejo za samostojno vodenje znanstvene raziskave na izbranem raziskovalnem področju.

Vsebina predmeta. Študent s soglasjem mentorja med spodaj navedenimi temami izbere tiste, ki so najtesneje povezane z njegovim raziskovalnim delom. Nosilec predmeta in vodja študija poskrbita, da obseg študentovega dela ustreza 5 KT. Če je nosilec več, izvajanje kooordinira nosilec.

Materiali za sodobne energijske pretvornike

– *Vodikova tehnologija: Tehnologije za pridobivanje vodika* (predelava ogljikovodikov – parni reforming, WGSR, elektrolizni postopki, termokemijska disociacija vode, predelava biomase do vodika). *Shranjevanje in distribucija vodika* (tlačni sistemi, kriogeni sistemi, shranjevanje vodika v obliki hidridov, CNT idr.; distribucija vodika, varnost vodikovih tehnologij),

– *Gorivne celice: Vrste gorivnih celic in principi njihovega delovanja* (specifika glede uporabljenega goriva in zahtev po njegovi čistosti, temperature delovanja, uporabljenih materialov, prenosa naboja v celici). *Materiali za elektrolit, elektrodi in vmesnik* (zahtevane karakteristike za materiale v gorivnih celicah, elektrokatalizatorji. *Delovanje gorivnih celic njihov izkoristek in vplivi na okolje* (aktivacijske, omske, koncentracijske in druge polarizacijske izgube, sistemi gorivnih celic in potrebna infrastruktura, izkoristki gorivnih celic, kogeneracija toplote v gorivnih celicah, vplivi na okolje pri neposredni pretvorbi kemijske energije v električno).

– *Li ionski in drugi akumulatorji: Princip delovanja izbranih klasičnih in sodobnih insercijskih baterij in akumulatorjev* (shranjevanje naboja na površini oziroma v notranjosti strukture, homogena vgradnja ter vgradnja s faznimi prehodi, vpliv na termodinamske in kinetične lastnosti). *Materiali za anodo, elektrolit, in katodo* (grafitni materiali, litijeve zlitine, oksidni materiali, žveplova katoda, katoda z zračno depolarizacijo, tekoči elektroliti, polimerni elektroliti, elektroliti na osnovi ionskih tekočin). *Karakteristike najperspektivnejših akumulatorjev* (litijevi insercijski, litij zrak, polimerni, litij žveplo)

– *Superkondenzatorji: Princip delovanja superkondenzatorja* (fazna meja trdno-tekoče, električni dvosloj, termodinamika in kinetika tipičnega superkondenzatorja, vpliv poroznosti, vpliv površinskih skupin, razlika med kemijskim in elektrokemijskim shranjevanjem na površini). *Materiali za anodo, elektrolit, in katodo* (grafitni materiali, tekoči elektroliti, polimerni elektroliti). *Karakterizacija, lastnosti in uporaba izbranih superkondenzatorjev*.

Materiali in varovanje okolja (materiali za zmanjšanje emisij v okolje, odstranjevanje HOS – hlapnih organskih spojin (VOC – volatile organic compounds), razvoj katalitskih materialov in sistemov, življenjska doba in vplivi različnih skupin materialov na okolje).

TVEGANJE PRI PREVOZU KEMIKALIJ

Cilji. Predvideti in nadzorovati tveganja, povezana s transportom nevarnih snovi.

Razumeti kvantitativno analizo tveganj pri prevozu nevarnih snovi, kako komunicirati cilje analize tveganj izkušenemu analitiku za področje tveganj in kako narediti primerno natančen izračun na osnovi razpoložljivih podatkov o tveganjih.

Vsebina predmeta.

– Definicije osnovnih terminov analiz tveganj.

– Izvori podatkov, specifičnih za nezgode, verjetnostne porazdelitve velikosti energij nezgod in pogojne verjetnosti za odpoved kontejnerja. Baze podatkov za pogostosti in frekvence nezgod tipe in velikosti nezgodnih energij verjetnosti za odpoved kontejnerjev in količine izpustov. Ocenjevan bo zmanjšanje tveganja zaradi spremembe projekta kontejnerja.

– Metodologije za razvoj scenarijev nezgod, analiza frekvenc in posledic ter predstavitev tveganj.

– Matematične formulacije za kvantitativno analizo tveganja.

– Metodologije analiz tveganj in negotovosti podatkov.

- Drevesa odpovedi za različne tipe analize transportnih tveganj.
- Koraki kvalitativne analize tveganj od preliminarne analize do ocene alternativ za zmanjšanje tveganj.
- Primer kvantitativne analize za različne Transporte. Cevovod, tovornjak, vlak, trajekt, prekooceanka itd.