

**DRUGOSTOPENJSKI UNIVERZITETNI ŠTUDIJSKI PROGRAM  
KEMIJA,  
UNIVERZA V LJUBLJANI, FAKULTETA ZA KEMIJO IN KEMIJSKO TEHNOLOGIJO**

**Predstavitev študijskega programa:**

**1. Podatki o študijskem programu:**

- Drugostopenjski univerzitetni študijski program *KEMIJA* traja 2 leti (4 semestre) in obsega skupaj 120 kreditnih točk.
- Strokovni naslov, ki ga pridobi magistrant je:
  - magister kemije ali
  - magistrica kemije oziroma
  - mag. kem.

**2. Temeljni cilji programa in splošne kompetence**

- Temeljni cilji** magistrskega študijskega programa Kemija je usposobiti strokovnjake, ki bodo:
- na temeljih znanja iz dodiplomskega študija razvili razširjeno znanje in razumevanje kemije, ki jim bo omogočilo originalnost ter razvoj in uporabo idej pri raziskovalnem delu;
  - imeli kompetence, primerne za zaposlitev na delovnih mestih profesionalnih kemikov v kemijski in sorodnih industrijah in javnih službah;
  - pridobili dovolj visok standard znanj, kompetenc in učnih veščin, ki jih potrebujejo za samostojen nadaljnji študij;

**Splošne kompetence:**

- sposobnost uporabe znanja, razumevanja in zmožnosti reševanja problemov v novih, neobičajnih okoliščinah znotraj širših (ali multidisciplinarnih) okolij, povezanih s kemijskimi znanostmi;
- sposobnost integracije znanja in obvladanja kompleksnosti ter formuliranja presoje kljub omejenim informacijam; ob tem pa se zavedati etične odgovornosti uporabe znanja in presoje;
- sposobnost jasnega in nedvoumnega sporočanja znanja, sklepov in utemeljitev, ki te sklepe podpirajo, tako strokovni kot nestrokovni javnosti v domačem in angleškem jeziku;
- študijske veščine, potrebne za veživljenjsko učenje in stalen, avtonomen, samousmerekvalen in odgovoren lastni strokovni razvoj.

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

V magistrski študijski program Kemija se lahko vpiše, kdor je končal:

- a) študijski program prve stopnje s strokovnega področja kemija,
- b) študijski program prve stopnje s strokovnega področja biokemija ali kemijsko inženirstvo in ob vpisu v prvi letnik s soglasjem mentorja raziskovalnega dela in vodja študija izbere med predmeti iz prve stopnje študijskega programa Kemija tri predmete v obsegu 15 ECTS.
- c) študijski program prve stopnje z drugih strokovnih področij, ki niso zajeta v prejšnjih dveh odstavkih, če je pred vpisom v študijski program opravil obveznosti v obsegu 30

ECTS iz predmetov prve stopnje študijskega programa Kemija. Predmete na prošnjo kandidata določi študijska komisija UL FKKT.

- d) visokošolski strokovni program, če je pred vpisom v študijski program opravil študijske obveznosti v obsegu 30 ECTS iz predmetov prve stopnje študijskega programa Kemija. Predmete na prošnjo kandidata določi študijska komisija UL FKKT.

V programu se predvideva **100** vpisnih mest.

V primeru omejitve vpisa bodo kandidati izbrani glede na doseženo povprečno oceno prvostopenjskega študija. Za kandidate, ki izpolnjujejo pogoje za vpis po točkah c) in d), se upošteva povprečna ocena prvostopenjskega študija 75% in povprečna ocena zahtevanih opravljenih študijskih obveznosti pod točkama c) in d) 25%.

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

Študentu se lahko priznajo znanja, ki po vsebini ustrezajo učnim vsebinam predmetov v magistrskem študijskem programu Kemija, pridobljena v različnih oblikah izobraževanja. O priznavanju znanj in spretnosti pridobljenih pred vpisom odloča Senat FKKT ali organ, ki ga določi Senat fakultete, na podlagi pisne vloge študenta, priloženih spričeval in drugih listin, ki dokazujejo uspešno pridobljeno znanje ter vsebino teh znanj.

Pri priznavanju znanja, pridobljenega pred vpisom, bo Senat FKKT ali organ, ki ga določi Senat fakultete upošteval naslednja merila:

- ustreznost pogojev za pristop v različne oblike izobraževanja (zahtevana predhodna izobrazba za vključitev v izobraževanje),
- primerljivost obsega izobraževanja (število ur predhodnega izobraževanja glede na obseg predmeta), pri katerem se obveznost priznava,
- ustreznost vsebine izobraževanja glede na vsebino predmeta, pri katerem se obveznost priznava.

Pridobljena znanja se lahko priznajo kot opravljena obveznost, če je bil pogoj za vključitev v izobraževanje skladen s pogoji za vključitev v magistrski študijski program Kemija, če je predhodno izobraževanje obsegalo najmanj 75 % obsega predmeta in najmanj 75 % vsebin ustreza vsebinam predmeta pri katerem se priznava študijska obveznost. V primeru, da Senat FKKT ali organ, ki ga določi Senat fakultete ugotovi, da se pridobljeno znanje lahko prizna, se to ovrednoti z enakim številom točk po ECTS, kot znaša število kreditnih točk pri predmetu.

#### **5. Pogoji za napredovanje po programu**

Za vpis v višji letnik mora imeti študent potrjen predhodni letnik, to je podpisano inškrpcijo in frekvenco iz vseh predmetov za posamezni letnik. Poleg tega veljajo še naslednji prestopni pogoji:

Za vpis v drugi letnik mora imeti kandidat zbranih 60 kreditnih točk.

Organ FKKT, določen v Pravilih fakultete lahko izjemoma odobri napredovanje v višji letnik študentu, ki je v predhodnem letniku dosegel najmanj 30 kreditnih točk po ECTS, če ima za to

opravičljive razloge. Za opravičene razloge štejejo razlogi navedeni v Statutu Univerze v Ljubljani.

Študent letnik lahko ponavlja v kolikor je zbral 20 zahtevanih kreditnih točk za letnik.

Študent lahko v času študija enkrat ponavlja letnik ali enkrat spremeni študijski program zaradi neizpolnitve obveznosti v prejšnjem študijskem programu.

Študentu se lahko po drugem letniku v skladu z zakonom in statutom podaljša status študenta za največ eno leto, če zato obstajajo upravičeni razlogi in ima opravljene vse obveznosti iz prvih dveh letnikov.

Svetovanje in usmerjanje pri izbirnih predmetih bodo opravljali mentorji letnikov in tutorji.

## **6. Pogoji za dokončanje študija**

Za dokončanje magistrskega študija mora študent opraviti študijske obveznosti pri vseh predmetih vpisanega študijskega programa ter izdelati in uspešno zagovarjati magistrsko delo skladno z določili Pravilnika o magistrskem delu, ki ga sprejme Senat Fakultete za kemijo in kemijsko tehnologijo Univerze v Ljubljani.

## **7. Prehodi med študijskimi programi**

Za prehod med študijskimi programi šteje prenehanje študentovega izobraževanja v študijskem programu, v katerega se je vpisal in nadaljevanje izobraževanja v novem študijskem programu. Za prehod se ne šteje sprememba študijskega programa ali smeri zaradi neizpolnitve obveznosti v prejšnjem študijskem programu ali smeri. Za prehod med študijskimi programi se ne šteje vpis v začetni letnik novega študijskega programa.

Magistrski študijski program 2. stopnje Kemija je odprt za študente drugih primerljivih magistrskih študijskih programov 2. stopnje in diplomante univerzitetnih študijskih programov, ki so bili sprejeti do 11. 6. 2004, zato se lahko v program vključijo študenti, ki so se usposabljali na drugih ustreznih študijskih programih.

Prehod študentov iz drugih magistrskih študijskih programov 2. stopnje in diplomantov univerzitetnih študijskih programov, ki so bili sprejeti do 11.6.2004 v 2. letnik magistrskega študijskega programa druge stopnje Kemija je mogoč, če je kandidatu pri vpisu v ta študijski program mogoče priznati vsaj polovico obveznosti, ki jih je opravil na prvem študijskem programu.

Študent, ki želi preiti na študijski program 2. stopnje Kemija, vloži prošnjo z dokazili o opravljenih obveznostih na dosedanjem študiju in dokazilo o izpolnjevanju pogojev za vpis na magistrski študijski program 2. stopnje Kemija. V 2. letnik se študent vključi, če izpolnjuje prehodne pogoje po tem programu, pri čemer mora opraviti vse tiste izpite, ki so specifični za ta program.

O prehodih med programi odloča Senat Fakultete za kemijo in kemijsko tehnologijo, ali organ, ki ga določi Senat fakultete.

## 8. Načini ocenjevanja

Znanje študentov se preverja in ocenjuje po posameznih predmetih tako, da se učni proces pri vsakem predmetu konča s preverjanjem znanja in pridobljenih veščin. 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.

Ocenjevalna lestvica za končne izpite in druge oblike preverjanja znanja:

- 10 odlično (izjemni rezultati z zanemarljivimi napakami)
- 9 prav dobro (nadpovprečno znanje, vendar z nekaj napakami)
- 8 prav dobro (solidni rezultati)
- 7 dobro (dobro znanje z večjimi napakami)
- 6 zadostno (znanje ustreza minimalnim kriterijem)
- 5-1 nezadostno (znanje ne ustreza minimalnim kriterijem)

Ocene iz ocenjevalne lestvice se pretvarjajo v ECTS sistem ocenjevanja:

- 10 = A
- 9 = B
- 8 = C
- 7 = D
- 6 = E
- 5-1 = F (fail)

**9. Predmetnik študijskega programa**

		Kontaktne ure				ECTS
	<b>1. letnik</b>	<b>P</b>	<b>V</b>	<b>S</b>	<b>D</b>	
	<b>1. semester</b>	<b>135</b>	<b>120</b>	<b>45</b>	<b>150</b>	<b>30</b>
1	Anorganska kemija	45	30			5
2	Numerične metode	30	30	15		5
3	Izbirni predmet - strokovni	30	30	15		5
4	Izbirni predmet - splošni	30	30	15		5
5	Raziskovalno delo				150	10
	<b>2. semester</b>	<b>150</b>	<b>90</b>	<b>60</b>	<b>150</b>	<b>30</b>
6	Organska kemija	45	30			5
7	Fizikalna kemija	45		30		5
8	Izbirni predmet - strokovni	30	30	15		5
9	Izbirni predmet - splošni	30	30	15		5
10	Raziskovalno delo				150	10
	<b>2. letnik</b>					
	<b>3. semester</b>	<b>165</b>	<b>75</b>	<b>60</b>	<b>150</b>	<b>30</b>
11	Molekularno modeliranje	45	15	15		5
12	Analizne metode za karakterizacijo materialov in bioloških sistemov	60		15		5
13	Izbirni predmet - strokovni	30	30	15		5
14	Izbirni predmet - strokovni	30	30	15		5
15	Magistrsko delo				150	10
	<b>4. semester</b>	<b>60</b>	<b>60</b>	<b>30</b>	<b>300</b>	<b>30</b>
16	Izbirni predmet - strokovni	30	30	15		5
17	Izbirni predmet - strokovni	30	30	15		5
18	Magistrsko delo				300	20

	<b>Izbirni predmeti 1. letnika - splošni</b>	<b>Kontaktne ure</b>				<b>ECTS</b>
	Matematika	45	30			5
	Izbirni predmet iz drugih programov					
	<b>Izbirni predmeti 1. in 2. Letnika - strokovni</b>					
	Koordinacijska kemija		60	15		5
	Analiza zgradbe kristalov	30	30	15		5
	Sodobni anorganski materiali in katalizatorji	15	45	15		5
	Biološko aktivne koordinacijske spojine v medicini	15	45	15		5
	Termična analiza	15	45	15		5
	Biološko pomembne spojine	30	30	15		5
	Izbrana poglavja iz organske kemije	30	30	15		5

Moderne metode organske sinteze	15	30	30		5
Moderne NMR metode	45	30			5
Kemometrija in zagotavljanje kakovosti analiznih rezultatov	30	30	15		5
Spektrokemijska analiza	45		30		5
Uporabna elektrokemija	30	10	20	15	5
Vode kot hidrogeološki, ekološki in analizni sistem	30	15	15	15	5
Karakterizacija in stabilnost materialov kulturne dediščine	15		15	45	5
Računalniško modeliranje povezav med molekularno strukturo in lastnostjo (QSAR/QSPR)	45	30			5
Eksperimentalna fizikalna kemija	30	25		20	5
Teorija tekočin in raztopin	45		30		5
Elektrokemija raztopin	45	15	15		5
Metode sipanja za določanje strukture in dinamike v nanosistemi	30	30	15		5
Biofizikalna kemija	45	20	10		5
Modeliranje kemijskih sistemov	45		30		5
Izbirni predmeti iz drugih programov					
<b>SKUPAJ</b>	<b>675</b>	<b>550</b>	<b>330</b>	<b>95</b>	<b>110</b>

P – predavanja; S – seminar; V – vaje; D – druge oblike neposrednega pedagoškega dela (predvsem projektno delo); ECTS – kreditne točke po evropskem sistemu kreditnih točk (1 kreditna točka pomeni 30 ur obremenitve študenta)

## 10. Podatki o možnostih izbirnih predmetov in mobilnosti

Zaradi mobilnosti ima študent možnost, da najmanj 10 kreditnih točk iz obveznih ali 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

**Anorganska kemija** (5 ECTS): Cilj predmeta je nadgraditi znanje iz predmetov prve stopnje Splošna kemija in Anorganska kemija s teoretsko poglobljenim predmetom, ki podaja sintezo, reaktivnost, lastnosti in uporabo anorganskih snovi.

**Vsebina:** kemijska vez in struktura anorganskih spojin *s,p*-elementov, spojin *d*-elementov, koordinacijskih in organokovinskih spojin; vrste in mehanizmi anorganskih reakcij v raztopinah in eksperimentalne metode za proučevanje, vpliv topila, substitucijske reakcije (disociacijski, asociacijski, enostopenjski mehanizem) v kvadratno-planarnih in oktaedričnih koordinacijskih spojinah, izmenjava koordiniranih molekul topila, stereokemijske pretvorbe

anorganskih spojin, redoks reakcije, mehanizmi bioanorganskih reakcij, aktivacija molekul z interakcijo s kovinskimi ioni, homogena kataliza; vpliv velikosti in oblike delcev na lastnosti snovi: anorganske snovi v obliki vlaken, nanožičk, nanodelcev, tankih plasti in poroznih snovi; sinteza, lastnosti; kemija elementov s poudarkom na zahtevnejših temah, ki niso bile zajete v Anorganski kemiji na prvi stopnji.

**Numerične metode** (5 ECTS): Pri predmetu naj bi študent dobil teoretično podlago in praktične izkušnje za samostojno reševanje matematično-fizikalnih problemov z različnih področij znanosti in tehnike s posebnim poudarkom na kemiji, in to z uporabo računalnika. Praktično naj bi se naučil osnov programiranja v enem izmed višjenivojskih programskih jezikov ter spoznal osnovne algoritme, ki se uporabljajo pri numeričnem reševanju raznih problemov. Seznanil pa naj bi se tudi s stanjem in problematiko numeričnega računanja na področjih, ki mejijo na kemijo.

**Vsebina:** ponovitev in obravnava matematičnih problemov na splošno s poudarkom na konkretnih primerih s področja kemije; osnove programiranja v enem izmed višjenivojskih programskih jezikov, v katerih je napisana večina programske opreme, ki se uporablja v kemiji (Fortran ali C); razčlenitev problema, prikaz poteka reševanja z blokovno shemo, opis in razlaga izbranega algoritma za dani problem ter konstruiranje računalniškega programa; zaokrožitvene napake, statistični račun (srednja vrednost, standardna deviacija), linearna regresijska analiza (korelacijski koeficienti), računanje s pomočjo rekruzijjskih formul, interpolacija in ekstrapolacija, reševanje sistemov linearnih enačb (Gaussova metoda eliminacije, Cramerjevo pravilo), matrike, inverzija matrik, lastni vektorji in lastne vrednosti matrik, reševanje nelinearnih enačb (metoda bisekcije, Newton-Raphsonova metoda), numerično integriranje (trapezna in Simpsonova formula, metoda Monte Carlo), naključna števila, minimizacija funkcij (iskanje ekstremov), numerično reševanje diferencialnih enačb (Eulerjeva metoda, metoda Runge-Kutta), diskretna Fourierova transformacija in njena uporaba pri analizi signalov merilnih inštrumentov, avtokorelacija.

**Organska kemija** (5 ECTS): Študent se na primerih enostavnejših kemijskih reakcij, ki jih je spoznal med študijem na prvi stopnji, nauči metod in principov določanja poteka reakcije – reakcijskega mehanizma. Pridobljeno znanje študentu omogoča samostojen pristop k določanju mehanizma kemijskih reakcij, predvidevanje vplivov na potek kemijske reakcije in s tem možnost kvalificirano odločanje o spremembi reakcijskih pogojev za doseganje želenega cilja.

**Vsebina:** mehanizem kemijske reakcije: definicija, elementarne in stopenjske reakcije, tvorba in cepitev vezi, molekularnost, formuliranje mehanizma; kinetika in termodinamika organskih reakcij: konstanta, sprememba proste energije, entalpije in entropije, kisline, baze, pH,  $pK_a$ , uporaba podatkov o  $pK_a$  pri ravnotežjih in reakcijah. Reakcijska hitrost, red reakcije, uporaba podatkov o reakcijski kinetiki pri predlaganju mehanizma reakcije, Arrheniusova enčba, aktivacijska energija, primarni kinetski izotopski efekt; prehodno stanje: teorija prehodnega stanja, zgodnje in kasno prehodno stanje, Hammondov postulat, vpliv topila na ravnotežje in reakcijsko hitrost, empirične skale polarnosti topil, elektronski efekti funkcionalnih skupin, Hammettove korelacije (LFER), sigma ( $\sigma$ ) in rho ( $\rho$ ) vrednosti, sklepanje na mehanizem na osnovi Hammettovih korelacij, sterični vplivi, stereokemija reakcij, kinetska in termodinamska kontrola reakcije, kataliza (splošna ter specifična kislinska in bazna kataliza, vpliv topila); intermediat pri kemijskih reakcijah: nastanek, struktura, detekcija, reakcije, anioni in nukleofilne reakcije, kationi in elektrofilne reakcije, radikali in karbeni; molekularne reakcije: simetrija molekularnih orbital pri molekularnih reakcijah, Diels-Alderjeva reakcija,

periciklične in elektrociklične reakcije, sigmatropne premestitve, Woodward-Hoffmanova pravila.

**Fizikalna kemija** (5 ECTS): Naloga statistične termodinamike je, da iz podatkov o lastnostih atomov in molekul ter sil med njimi izpelje makroskopske lastnosti snovi. Na ta način omogoča molekularno interpretacijo merskih podatkov. V prvem delu obravnavamo osnove statistične termodinamike, le-te omogočajo globlje razumevanje pojavov kot so toplota, entropija, termodinamično povprečje, kolebanje okoli povprečne vrednosti in drugi. Drugi del predmeta je namenjen prikazu posameznih primerov uporabe statistične termodinamike v kemiji in sorodnih vedah.

*Vsebina:* Osnove: merjenje, časovna odvisnost in časovno povprečje, zakona statistične termodinamike, opis mikroskopskega stanja, kanonična porazdelitev, povprečja in kolebanja okoli povprečne vrednosti, povezava s termodinamiko, izolirani sistem, odprt sistem, kolebanja koncentracije, stisljivost in stabilnost sistema, drugi sistemi; neodvisni pod sistemi: Einsteinov model kristala, paramagnetna snov, Fermi-Diracova in Bose-Einsteinova statistika, Boltzmannova statistika, razredčeni plini, izračun konstante kemijskega ravnotežja, adsorbcija, Langmuirjeva in B.E.T. izoterma, vezanje ligandov na makromolekulo; klasična statistična termodinamika, konfiguracioni integral in povprečja, parski potencial, računalniške simulacije, metoda Monte Carlo, molekulska dinamika, teorije na osnovi parske porazdelitvene funkcije, računanje termodinamičnih količin (notranja energija, enačbe stanja), osnove termodinamične perturbacijske teorije.

**Molekulskomodeliranje** (5 ECTS): Cilji modeliranja: poznavanje elektronske strukture in geometrije molekul (iz osnovnih podatkov), napoved lastnosti molekul in njihova povezava s strukturo, podobnost molekul, možnost načrtovanja molekul z vnaprej določenimi želenimi lastnostmi. Vloga računalniške grafike pri molekulskem modeliranju. Pregled najbolj znanih računalniških programov za uporabo pri modeliranju (Gaussian, Spartan, HyperChem ...), prikaz praktičnega dela na osebem računalniku, delovni postaji in velikem računalniku (preko računalniške mreže). Sistematični pregled celotne snovi.

*Vsebina:* ponovitev osnov kvantne mehanike ter fizike atomov in molekul (Schrödingerjev in Heisenbergov pristop, Schrödingerjeva enačba, Paulijev izključitveni princip); opis in reševanje modelnih primerov: delec in pregrade, togi rotator, harmonski oscilator, vodikov atom; metode za približno računanje: variacijska metoda in metoda motenj; modeli za obravnavanje molekulskih sistemov: teorija valenčnih vezi in teorija molekulskih orbital, Hartree-Fockov model; pregled metod, sistemov in ciljev modeliranja; elektronska struktura: ab initio, semiempirične metode, gostotni funkcionali; molekulska mehanika, molekulska dinamika, Monte Carlo; pomen in uporaba grafike pri modeliranju; skupine sistemov, primerne za modeliranje: manjše molekule v vakuumu, vpliv okolice, interakcije med molekulami, modeliranje kemijskih reakcij (prehodna stanja), pomoč eksperimentalnim rezultatom z metodami modeliranja; področje dela računalniške kvantne kemije, glavne metode in računski modeli, pregled pomembnih računalniških sistemov na tem področju, prikaz praktičnega dela z računalnikom na konkretnem problemu, individualno obravnavanje enostavnejših primerov s pomočjo metod kvantne kemije.

**Analizne metode za karakterizacijo materialov in bioloških sistemov** (5 ECTS): Študenti se seznanijo s kemometričnimi in numeričnimi pristopi v analizi praksi, spoznajo napredne metode za analizo in kontrolo bioloških učinkovin in snovi ter karakterizacijo in analizo anorganskih in organskih materialov. Seznanijo se z analitiko sledov, ugotavljanjem kemijskih zvrsti in avtomatizacijo analiznih metod in postopkov.



*Vsebina:* kemometrični pristopi v instrumentalni analizi, splošni metrološki koncepti, optimizacija merilnih postopkov, sekvenčna optimizacija (Simplex), grupiranje, večkomponentna analiza, modeliranje (linearni in nelinearni modeli) in statistično vrednotenje modelov; separacijske metode v analizi kemiji in postopki predpriprave vzorca: ekstrakcija (LL, SPME), dializa, ultrafiltracija, ionska izmenjava, gelska filtracija, velikostna in ionska izkjučitvena kromatografija; eno in večdimenzionalne separacije GC, HPLC, IC, CZE; molekulska masna spektrometrija in sklopljene tehnike; ionizacijske tehnike (EI, CI, ESI, APCI, FAB, MALDI), masni analizatorji (sektorski, kvadrupolni, ionska past-IT, čas preleta ionov -TOF), sklopitve (HPLC-MS, GC-MS, IC-MS, MS/MS); koncepti v sodobni atomski absorpcijski in emisijski spektrometriji; elementna masna spektrometrija in sklopljene tehnike ICP-MS, GD-MS, LA-MS, TI-MS, SI-MS; tehnike za karakterizacijo površin: elektronska spektroskopija (XPS, AES, UPS, EM) in elektronska mikroskopija (SEM, STM, AFM, TEM); analitika ultrasledov in speciacija (tehnike, pristopi, izbrani primeri); avtomatizirana analiza (CFA, FIA, SIA, robotizirana analiza, miniaturni sistemi – LOV, LOC, mikrosenzorji).

**Matematika** (5 ECTS): Cilj predmeta je seznaniti študente z nekaterimi pojmi in metodami matematične analize in verjetnostnega računa, ki jih naravoslovec pogosto potrebuje pri svojem delu in omogočajo boljše razumevanje drugih strokovnih predmetov.

*Vsebina:* dvojni in trojni integral: definicija in osnovne lastnosti (najprej za dvojni integral), računanje integralov v kartezičnih, polarnih, cilindričnih in sferičnih koordinatah, uporaba; Fourierova vrsta: skalarni produkt, prostor funkcij s skalarnim produktom (Hilbertov prostor), ortonormirana baza, periodične funkcije, primeri trigonometrijskih ortonormiranih baz in konkretnih razvojev v Fourierove vrste uporaba; Fourierova transformacija: osnovne lastnosti, konvolucija, inverzna formula, unitarnost, uporaba; verjetnost: osnovni pojmi, pogojna verjetnost, neodvisni dogodki in poskusi, Bernoullijevo zaporedje, slučajne spremenljivke (diskretne in zvezne) in porazdelitvene funkcije, primeri, povprečje, disperzija, korelacija, zakon velikih števil.

**Koordinacijska kemija** (5 ECTS): Cilj predmeta je izvedba projekta, ki obsega načrtovanje, iskanje literature za sintezni postopek, sintezo spojine, njeno analizo ter vrednotenje rezultatov s preverjanjem ujemanja rezultatov s podatki, navedenimi v objavljeni literaturi.

*Vsebina* predmeta predstavlja nadaljevanje in nadgradnjo vsebine predmetov s področja anorganske kemije z dodiplomske stopnje (predmet Anorganska kemija II); natančna karakterizacija spojin temelji na povezavi podatkov iz strukturne analize in analize realnega vzorca s povdarkom na: določanju čistosti in istovetnosti snovi z znano spojino, ugotavljanju vrste kemijskih vezi v spojini, določanju načina koordinacije ligandov, opisu koordinativne sfere kovinskega iona, primerjavi strukturnih in analiznih podatkov s podatki kemijsko sorodnih spojin. Vsebina vaj: sinteza koordinacijskih spojin na osnovi znanih literaturnih podatkov; temu sledi natančna karakterizacija spojin s spektroskopskimi metodami, merjenjem magnetnih lastnosti ter prevodnosti; vaje obsegajo uporabo metod rentgenske praškovne difrakcije, infra-rdeče in UV-vidne spektroskopije, magnetne susceptibilnosti ter električne prevodnosti; dodatno se študentom predstavita tudi metodi elektronske paramagnetne in nuklearne magnetne resonance (EPR, NMR).

**Analiza zgradbe kristalov** (5 ECTS): Cilj predmeta je razumevanje zgradbe anorganskih in organskih trdnih snovi ter strukturnih principov, ki jo določajo ter poznavanje principov uklanjanja rentgenskih žarkov na monokristalu.

*Vsebina:* osnovni principi zgradbe kristalov: tipi vezi v kristalih (ionska, kovalentna, kovinska), molekulska - Van der Waalsova vez, vodikova vez in druge interakcije med molekulami (npr.  $\pi\cdots\pi$  in  $\pi\cdots\sigma$  interakcije med aromatskimi molekulami), konkretni primeri kristalnih struktur za vsak tip vezi; strukturni principi (koordinacijski poliedri in števila, elektrostatska jakost vezi, Paulingova pravila) in možnost napovedovanja strukturnih značilnosti na njihovi osnovi; teoretične matematično-fizikalne osnove rentgenske strukturne analize: povezanost položajev in intenzitete uklonov s strukturo urejene trdne snovi – z obliko in velikostjo osnovne celice ter njeno vsebino (položaji atomov v asimetrični enoti ter njihovi odmiki od ravnovesnih leg in simetrije razporeditve atomov), obnovitev pojmov: direktna in recipročna mreža, uklonski kot in indeksi uklonov, prostorska skupina. Uvedba novih pojmov: strukturni faktor, faza in amplituda uklonov, funkcija elektronske gostote, Lauejeva simetrija, predstavitev faznega problema v kristalografiji ter njegovo reševanje, predvsem z metodo težkega atoma in direktnimi metodami, osnovni principi izboljševanja strukturnega modela, interpretacija in analiza strukture; predstavitev in uporaba kristalografskih zbirk, ki vsebujejo podatke o strukturah spojin v trdnem stanju z osredotočanjem na zbirki anorganskih (ICSD) ter organskih in organokovinskih spojin (CSD); Vsebina vaj: interpretacija struktur ter ugotavljanje strukturnih podrobnosti s pomočjo računalniških programov za risanje in vizualizacijo, interpretacija struktur s pomočjo tridimenzionalnih modelov, študenti, razdeljeni v majhne delovne skupine (s pomočjo učitelja) izvedejo projekt z naslednjo vsebino oziroma potekom: na osnovi prejetih uklonskih podatkov s pomočjo računalniških programov rešijo fazni problem, določijo strukturo ter jo narišejo in interpretirajo, s pomočjo ICSD ali CSD preverijo, ali je struktura že znana in poiščejo sorodne strukture, v primeru novih struktur pripravijo rezultate za objavo v strokovni reviji.

***Sodobni anorganski materiali in katalizatorji*** (5 ECTS): Cilj predeta je poglobljeno spoznavanje določenih tipov sodobnih anorganskih materialov in katalizatorjev, sinteznih tehnik in raznovrstnih metod za njihovo karakterizacijo.

*Vsebina:* poglobljen študij izbrane vrste materiala, med njimi: katalizatorjev, kovinskih materialov, anorganskih polimerov, polprevodniških (dopiranih) oksidnih materialov, kompozitnih materialov; poglobljen študij izbrane oblike materiala: »bulk« materiala, nanodelcev, tankih filmov, monodisperznih delcev, monolitov; povezava med tipom materiala in njegovo funkcijo, npr. zeoliti za katalizatorje, oksidi kovin prehoda za elektrokromne materiale, z lantanoidi dopirani oksidni materiali za fosforescente materiale,  $\text{TiO}_2$  kot fotokatalizator v funkciji samočistilnih in antibakterijskih prevlek, itd; definicija in osnovni principi katalize, heterogeni katalizatorji – struktura, priprava in uporaba, struktura zeolitov in opis nekaterih strukturnih tipov, kinetika katalizirane reakcije, specifična površina in poroznost, adsorpcija in kemisorpcija; odločitev za material, ki bo sintetiziran v izbrani obliki in karakteriziran; študij in izbira preparativne tehnike: reakcija v trdnem, hidrotermalna sinteza, sol-gel metoda, koprecipitacija, priprave nanodelcev, tankih filmov in monodisperznih delcev; sinteza materiala; karakterizacija materiala z izbranimi metodami: rentgenska difrakcija, NMR spektroskopija, termične metode, spektroskopske metode in elektronska mikroskopija.

***Biološko aktivne koordinacijske spojine v medicini*** (5 ECTS): Cilj predmeta je spoznavanje določenih koordinacijskih spojin, ki se uporabljajo kot biološko aktivne substance v medicini in razume njihovo delovanje.

*Vsebina:* Predavanja: pregled kovin, ki tvorijo biološko aktivne koordinacijske spojine, ki so že v uporabi kot zdravila ali pa so potencialni terapevtiki; obravnava koordinacijskih spojin (lastnosti, mehanizem delovanja, optimizacija biološke aktivnosti s spreminjanjem

koordinacijske sfere), ki so v uporabi kot protimikrobna sredstva, kardiovaskularna zdravila, citostatiki, protirevmatska zdravila, antidiabetiki, zdravila za zdravljenje ulkusa. Vsebina semianrjev: študentje bodo individualno ali v skupini pripravili projekt z določeno specifično tematiko s poudarkom na najnovejših dognanjih; praktični del projekta bodo izvedli pri laboratorijskih vajah. Vsebina laboratorijskih vaj: študentje bodo načrtovali in izvedli sinteze biološko aktivnih koordinacijskih spojin; sestavo in druge lastnosti kovinskih kompleksov bodo določali z različnimi spektroskopskimi metodami (NMR spektroskopijo, IR spektroskopijo, UV spektroskopijo), s termogravimetrično analizo (TGA, DSC), visokotlačno tekočinsko kromatografijo in z rentgensko praškovno analizo.

**Termična analiza** (5 ECTS): Namen je spoznavanje teoretske osnove termične analize in njeno uporabo na raznovrstnih področjih znanosti in tehnologije.

*Vsebina:* definicija pojma termična analiza. Termogravimetrija (TG), diferenčna termična analiza (DTA) in diferenčna dinamična kalorimetrija (DSC) – princip merjenja. Komplementarnost TG in DSC metode (termični razpad/fazni prehod); teoretske osnove termičnega razpada trdnih snovi; bazna linija pri TG in DSC krivulji; temperaturna kalibracija termoanalizatorja, kalibracija DSC instrumenta; fleksibilna kalibracija; analiza eksperimentalnih podatkov izmerjenih TG in DSC krivulj vzorcev z znano sestavo, primerjava z objavljenimi TG krivuljami; kvalitativna in kvantitativna analiza preprostih in kompleksnejših zmesi; termična analiza polimernih materialov - steklast prehod, hladna kristalizacija, spremljanje polikondenzacije duroplastnih materialov z visokotlačno DSC, termična stabilnost polimerov; termična analiza tankih plasti – posebnosti in priprava vzorca za merjenje; termična analiza kot orodje za študij materialov in optimiranje njihove toplotne obdelave; analiza farmacevtskih substanc, eksplozivnih snovi, kompozitnih materialov; primeri optimiranja toplotne obdelave materialov.

**Organokovinska in supramolekularna kemija** (5 ECTS): Cilj predmeta je spoznati tipične organokovinske in supramolekularne spojine, njihovo sintezo, laboratorijske tehnike, ki tako sintezo spremljajo, in metode karakterizacije. Predmet vključuje laboratorijske vaje, ki so zasnovane na principu povezave teorije in eksperimentalnega dela.

*Vsebina:* Upoštevajoč, da kovine prehoda predstavljajo v organokovinski kemiji pomembno poglavje, ki ga lahko neposredno uporabimo v organski sintezi, bo vsebina tega predmeta usmerjena k spoznavanju organokovinskih transformacij, vloge kovin v katalitskih ciklih in uporabi organokovin v sintezi kompleksnih organskih spojin. Med slednje spadajo tudi »supermolekule«, ki povezujejo znanja področij anorganske in organske kemije, potrebnih za sintezo supramolekularnih sistemov, kot tudi znanja fizikalno-organske kemije za razumevanje lastnosti in njihovega kompleksnega obnašanja. Na osnovi predhodnega znanja bo študent pridobil primerjalno znanje med »klasičnim« sinteznim pristopom in »modernimi« metodami v organokovinski in supramolekularni kemiji. Z osvojenimi znanji in praktičnim delom bo študent sposoben naslednjih veščin: dela v inertni atmosferi z uporabo Schlenkove tehnike, uporabo vakuumskih tehnik, načina dela v suhi komori, sušenja inertnih plinov in organskih topil ter uporabe modernih spektroskopskih analiznih tehnik.

**Biološko pomembne spojine** (5 ECTS): Študent pozna osnovne karakteristike nekaterih biološko pomembnih spojin. Obvlada principe njihove priprave, transformacij in uporabe pri sintezi primernih derivatov. Spozna uvedbo in odcep osnovnih zaščitnih skupin. Pridobljeno znanje mu omogoča načrtovanje sinteze različnih spojin, uporabnih v organski sintezi, farmaciji, agrokemiji, kemiji materialov in drugod.

*Vsebina:* Ogljikovi hidrati: Osnovne karakteristike. Kemijske in spektroskopske metode za določanje strukture monosaharidov. Pregled sinteznih metod. Sprememba konfiguracije na kiralnih centrih. Oligosaharidi in polisaharidi. Načini sinteze oligosaharidov. Polisaharidi. Heteropolisaharidi: glikoproteini in proteoglikani. Nekatere metode določanja strukture polisaharidov. *Aminokislina*. Priprava  $\alpha$ -aminokislin. Asimetrične sinteze.  $\beta$ -Aminokislina. Ostale aminokislina. Reakcije  $\alpha$ -aminokislin. Tvorba peptidne vezi. Aktivacija karboksilne komponente. Aktivacija aminske komponente. Azidna metoda, metoda mešanih anhidridov, uporaba karbodiimidov, etoksiacetilena, CDI in drugih reagentov. Sinteze na trdnih nosilcih. *Nukleozidi in nukleotidi*. Pomembni pirimidinski in purinski derivati. *N-nukleozidi*. Ciklo-nukleozidi. Aciklo nukleozidi. *C-nukleozidi*: primeri sintez, Noyori-jeva sinteza. Oksidativne pretvorbe nukleozidov. Halogeniranje na obroču in na stranski verigi. Reakcije ciklonukleozidov. Nukleotidi. Zaščite sladkorne komponente, amino skupine in fosfatne skupine. Tvorba vezi med nukleotidi. *Terpeni in steroidi*. Monoterpeni in seskviterpeni. Diterpeni. Sesterterpeni, triterpeni in tetraterpeni: skvalen,  $\beta$ -karoten, likopen. Primer izolacije in aplikacije monoterpena v večstopenjski sintezi. Steroidi. Osnovni tipi steroidov in strukturne značilnosti. Steroli. Žolčne kisline in žolč. Nekatere transformacije steroidov.

***Izbrana poglavja iz organske kemije*** (5 ECTS): Študent nadgradi osnovna znanja iz organske kemije z znanji iz dveh pomembnih, vendar sintezno malo manj uporabljenih področij, fotokemije in kemije radikalov. Predmet seznanja študente s spremembami organskih molekul pod vplivom svetlobe v plinasti fazi, raztopinah, v prisotnosti vzbujevalcev in v heterogenih sistemih. Študent spozna osnovne značilnosti in uporabo radikalnih reakcij in se nauči izvajati omenjene pretvorbe v laboratoriju.

*Vsebina:* organska fotokemija: uvod, absorpcija svetlobe, elektronska stanja in prehodi, fluorescenca, fosforescenca, Jablonskijev diagram, kvantni izkoristek; fotokemične reakcije, adicije, substitucije, eliminacije, fragmentacije, premestitve, izomerizacije, cikloadicije, oksidacije in redukcije; fotokemične reakcije v heterogenih sistemih (polprevodniki, trdni nosilci, zeoliti, miceli); kemija radikalov: uvod, lastnosti radikalov, reaktivnost in stabilnost radikalov, delokalizacija in elektronski efekti, nastanek radikalov; reakcije radikalov, značilnosti radikalnih reakcij, verižne reakcije, inhibicija; pomembne radikalne reakcije v organski sintezi, polimerizacija, avtooksidacije.

***Moderne metode organske sinteze*** (5 ECTS): Cilj predmeta je spoznavanje modernih pristopov k sintezi organskih spojin in sodobnih trendov na tem področju, spoznavanje principov stereoselektivne, asimetrične in kombinatorne sinteze, spoznavanje večkomponentnih in tandemskih reakcij ter 'klik' kemije in njihove uporabe v moderni organski sintezi, spoznavanje modernih eksperimentalnih metod, tehnik in reagentov v organski sintezi.

*Vsebina:* moderni trendi v organski sintezi: klasična organska sinteza: kratek pregled, zmožnosti in omejitve, načini povečanja učinkovitosti klasične organske sinteze; Kemosелеktivnost in uporaba zaščitnih skupin; konektivnost in regioselektivnost, 'klik' kemija; Večkomponentne in tandemске reakcije: večkomponentne reakcije: Petasis-Mannich, Bailys-Hillmann, Hantzsch, Biginelli, Ugi-Passerini; tandemске (domino, kaskadne) reakcije; stereoselektivna in asimetrična sinteza: osnovni principi stereoselektivne in asimetrične sinteze, stereoselektivne nekatalitske reakcije, asimetrične katalitske reakcije in asimetrična organokataliza; principi kombinatorne sinteze: kombinatorna sinteza na polimernih nosilcih, lastnosti, izbira in uporaba tipičnih polimernih nosilcev, distančnikov in veznikov, kombinatorna sinteza v raztopini, reagenti in izolacijske tehnike pri kombinatorni sintezi v raztopini.

**Moderne NMR metode** (5 ECTS): Študent pridobi znanja, ki so potrebna za razumevanje modernih NMR tehnik, načrtovanje in izvedbo eksperimentov njihovo uporabo in interpretacijo rezultatov. Pridobljeno znanje študentu omogoča samostojno načrtovanje NMR eksperimentov, njihovo praktično izvedbo in interpretacijo rezultatov.

*Vsebina:* Osnove NMR eksperimenta, kemijski premik, sklopitve, integrali, običajno merjeni nuklidi, klasične in pulzne tehnike. Magnetne lastnosti jeder. Jedro v magnetnem polju, energetski nivoji, relaksacije, vektorski opis vzorca, laboratorijski in rotirajoč koordinatni sistem, pulz. Sklopitvena konstanta. Spektri prvega in drugega reda, kemijska in magnetna ekvivalenca jeder, predznak in velikost sklopitvene konstante, sklopitev preko ene, dveh, treh in več vezi. Povezava strukture spojine in kemijskih premikov. Vplivi na kemijske premike v  $^1\text{H}$  in  $^{13}\text{C}$  spektrih, programska oprema za napoved kemijskih premikov. Merjenje NMR spektra. Magnet, CW in pulzni način, pulz in pulzni program, zajemanje podatkov, FID, Fourierjeva transformacija, matematične manipulacije FID, procesiranje spektra. Študij dinamičnih procesov z NMR. Moderne pulzne NMR tehnike. Manipulacija magnetizacije, spin-echo pulzna sekvenca in njene posledice, prenos polarizacije in editiranje spektrov, nuklearni Overhauserjev efekt, uvod v dvo- in večdimenzionalne NMR eksperimente. Dvodimenzionalne NMR tehnike. Pregled principov in uporabe dvodimenzionalnih NMR metod pri določanju kemijske strukture in konformacije molekul v raztopini COSY, TOCSY, HMQC, HMBC, gs-COSY, gs-HSQC, gs-HMBC, NOESY. Vaje: Priprava vzorca in inštrumenta; 1D eksperimenti ( $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ , X); 2D eksperimenti (COSY, TOCSY, HMQC, HMBC, gs-COSY, gs-HSQC, gs-HMBC).

**Kemometrija in zagotavljanje kakovosti analiznih rezultatov** (5 ECTS): Cilji predmeta so: seznaniti študente s teorijo in uporabo kemometričnih metod za: pripravo eksperimentov predobdelavo merskih podatkov vrednotenje podatkov in rezultatov dobljenih pri eksperimentih z večjim številom spremenljivk, podati osnove modeliranja, iskanja inverznih modelov ter vrednotenja statistične zanesljivosti dobljenih modelov, omogočiti študentom neposredni dostop do računalnikov ter ustrezne programske opreme za izvedbo naštetih testov.

*Vsebina:* Predstavitev merskega prostora (skalarji, vektorji, razdalje). Osnove napovedne statistike. Kalibracijska premica, meja zaznavnosti. Izdelava modelov (linearni, nelinearni). Transformacije merskega prostora. Filtriranje šuma. Optimizacija (Simplex, genetski algoritem) ter eksperimentalni načrt. Grupiranje. Vrednotenje modelov. Matematične reprezentacije kemijskih struktur.

**Spektrokemijska analiza** (5 ECTS): Študenti spoznajo teoretske osnove sodobnih spektroskopskih metod ter pridobijo nekatere praktične izkušnje za delo z zahtevno instrumentacijo.

*Vsebina:* Teoretske osnove optične spektroskopije Vrste prehodov (Zasedenost stanj in verjetnost prehodov), Širina spektralnih črt in njihova intenziteta. Spektroskopska instrumentacija Spektrokemijske informacije, spektrokemijske meritve; obravnava razmerja signal/šum pri spektroskopskih meritvah (vplivi na parametre analize), pristopi optimiranja pri spektroskopskih meritvah Uvajanje vzorcev v atomski spektroskopiji (tekočine, trdne snovi, plini) konvencionalni in sodobni pristopi (elektrotermično odparevanje in odparevanje s pomočjo laserjev) Pretočni sistemi v atomski spektroskopiji Teoretski vidiki Separacijske in koncentracijske tehnike Pregled metod atomske spektroskopije Atomska absorpcijska spektrometrija. Atomizacija v plamenu in grafitni cevni peči. Proces v plamenu in grafitni cevni peči. Vloga kemijskih modifikatorjev. Načini korekcije ozadja. Hidridne tehnike.

Analitika trdnih vzorcev. Atomska emisijska spektrometrija: Osnovni koncepti v atomski emisijski spektrometriji, značilnosti visokotemperaturnih izvorov – induktivno sklopljena plazma (temperatura, elektronska gostota, vertikalni profili, mehanizmi vzbujanja), ostali visokotemperaturni izvori: iskra, »glow discharge«. Spektralne motnje in kriteriji izbire analiznih črt. Analizne aplikacije (splošne značilnosti), priprava vzorcev. Elementna masna spektrometrija ICP-MS ICP kot izvor ionov, masni spektri, spektralne motnje. Koncepti ICP-masnih spektrometrov. Optimizacija instrumentalnih pogojev v ICP-MS Visoko ločljivi ICP-MS sistemi Analitske aplikacije: semikvantitativna analiza, kvantitativna analiza, analiza trdnih vzorcev, povezava s kromatografskimi tehnikami, izotopska analiza Uporaba v analitiki bioloških, geoloških, okoljskih vzorcev, industrijske aplikacije, forenzična analiza.

**Uporabna elektrokemija** (5 ECTS): Cilj predmeta je poglobljen študij elektrokemijskih zakonitosti, ki so podlaga za elektroanalizne metode ter raziskave na področju materialov, elektrokemijskih senzorjev in biomolekularnih ved. Pridobljena znanja so usmerjena v razumevanje in usposabljanje za raziskovalno delo na teh področjih.

*Vsebina:* Pregled teorije elektrodnih procesov: Električni dvosloj, kinetika elektrodnih procesov, Butler-Volmerjeva enačba in njene limitne oblike (Taflova relacija, polarizacijska upornost). Transport snovi (difuzija, konvekcija, migracija) in vpliv transporta na hitrost elektrodnih procesov. Metode za študij elektrodnih procesov in ugotavljanje mehanizma elektrodnih procesov: Potenciostatsko in galvanostatsko merjenje polarizacijskih krivulj, tranzientne tehnike (kronoamperometrija, kronokulometrija, kronopotenciometrija), ciklična voltometrija, impedančna spektroskopija. Simulacija elektrodnih procesov. Mehanizem redukcije vodika (HER) in izločanja kisika (OER). Elektrokemija materialov-Elektrodepozicija, elektrosinteza in tehnike za študij procesov. Samosestavljive monoplasti-SAM, podnapetostno izločanje-UPD, elektrokemijska kvarčna mikrotehnica - EQCMB. Elektrokemijska korozija: vrste korozije, termodinamski in kinetični vidiki (Pourbaix, Wagner-Traud), korozijski tok in korozijski potencial, Evansovi diagrami, elektrokemijske metode za študij korozijskih procesov, inhibicija korozije, pasivacija in protikorozijska zaščita. Elektrokemijski viri energije: elektrokemijski vidiki primarnih in sekundarnih virov energije (učinkovitost, gostota energije), pregled klasičnih in naprednih sistemov (Zn/MnO<sub>2</sub>, Pb/PbO<sub>2</sub>, Ni/Cd, Ni/MH, Li/Li+, gorivne celice), fotovoltaični sistemi. Elektrokemijski senzorji: principi delovanja aplikacija pri študiju ravnotežij, mikroelektrode, kemijsko modificirane elektrode, pretočne mikroelektrode, ultramikroelektrode. Elektroanalizne tehnike: Voltometrija (pulzna in diferenčna pulzna, square wave voltometrija), aplikacija v analitiki anorganskih in organskih komponent, speciaciji, študiju interakcij kovina-ligand, bioloških sistemih ter karakterizaciji in analizi materialov. Stripping tehnike: anodna in katodna stripping voltometrija, adsorpcijska voltometrija, aplikacija v analitiki sledov, okoljski kemiji in bioloških sistemih. Sestavljene tehnike: spektroelektrokemija (EC-UV-Vis, EC-IR, EC-MS, SEM, EC-STM, EC-AFM, ), elektrokemijska detekcija v pretočnih sistemih (EC-HPLC, EC-FIA).

**Vode kot hidrogeološki, ekološki in analizni sistem** (5 ECTS): Študent se pri predmetu usposobi za načrtovanje in implementacijo programov spremljanja in ocenjevanja kakovosti različnih vodnih virov ter za vrednotenje tovrstnih rezultatov, suveren nadzor nad kakovostjo pridobljenih podatkov ter za interpretacijo rezultatov.

*Vsebina:* kakovost vod, karakterizacija vodnih virov, definicije povezane s kakovostjo vod, antropogeni vplivi na kakovost vod, polucija - izvori in poti, prostorske in časovne spremembe, ekonomski razvoj in kakovost vod; strategije ocenjevanja kakovosti vod, proces ocenjevanja kakovosti vod, značilni primeri programov spremljanja, kakovosti vod,

načrtovanje programov ocenjevanja, implementacija programov ocenjevanja kakovosti vod, vrednotenje rezultatov, nadzor nad kakovostjo podatkov, interpretacija rezultatov; izbira spremenljivk kakovosti vod, hidrološke spremenljivke, splošne spremenljivke, hranilne snovi, organska snov, prevladujoči ioni, druge anorganske spremenljivke, kovine, organski kontaminanti, mikrobiološki indikatorji, izbira spremenljivk; podtalnica, značilnosti vodonosnikov, interakcije voda-prst-kamnina, vidiki kakovosti podtalnice, strategije ocenjevanja kakovosti, primeri ocenjevanj kakovosti podtalnice; reke, hidrološke značilnosti, kemijske značilnosti, biološke značilnosti, najpomembnejši vidiki kakovosti rek, strategije ocenjevanja kakovosti rečnih sistemov, pristopi k spremljanju in ocenjevanju kakovosti rečnih sistemov – študij primerov; jezera, značilnosti in tipologija, vidiki kakovosti, strategije ocenjevanja kakovosti jezer, pristopi k ocenjevanju jezer – študij primerov; analiza in interpretacija podatkov o kakovosti vod. preverjanje zanesljivosti podatkov (anionsko-kationska bilanca, različna preverjanja, relativni odnosi med ioni), sklepanje na kamninski izvor, grafične metode («Stiff» diagram, Piper diagram), prepoznavanje reakcij v podtalnici.

***Karakterizacija in stabilnost materialov kulturne dediščine*** (5 ECTS): Študent se pri predmetu usposobi za raziskovalno delo na področju študija materialov kulturne dediščine, z upoštevanjem konteksta uporabe materiala in naravnih razgradnih procesov. Študent se pri predmetu usposobi za raziskovalno delo na področju študija materialov kulturne dediščine, z upoštevanjem konteksta uporabe materiala in naravnih razgradnih procesov.

*Vsebina:* Materiali kulturne dediščine: osnove študija materialov kulturne dediščine – razumevanje kompleksnosti nehomogene in nedoločene sestave naravnih in naravno staranih materialov, starosti (metode datiranja) in provenience (arheometrija); Stabilnost: Termoliza. Termooksidacija. Procesi razgradnje materialov pod vplivom kisika, avtoooksidacija, antioksidanti. Fotoliza in fotoooksidacija. Razgradnja pod vplivom onesnaževal. Vpliv SO<sub>2</sub>, ozona, NO<sub>x</sub>. Metode stabilizacije materialov. Metode za študij trajnosti. Pospešena razgradnja, modelni eksperimenti in eksperimenti v realnem okolju. Analitika in karakterizacija razgradnih produktov, kinetika razgradnje, modeliranje, kontrolirana razgradnja. Modeliranje življenjske dobe. Metode za karakterizacijo Porušne in neporušne metode, definicija. Mikrovzorčevanje, prostorska resolucija in specifičnost. Prenosna instrumentacija. Kolorimetrija, rentgenske metode, spektroskopija infrardeče svetlobe, metode na osnovi laserjev. Metode analize umetnin na daljavo (LIDAR, LIF). Laserske metode strukturne diagnostike. Lasersko oslikovanje (skeniranje) predmetov, stavb, prostorov in izdelava 3D modelov. Uporaba za študij pigmentov in trajnosti organskih materialov. Monitoring okoljskih parametrov Senzorji, indikatorji in analize metode za spremljanje kemijskih onesnaževal. Senzorji za svetlobo in indikatorji (dozimetri) za osvetljenost.

***Računalniško modeliranje povezav med molekulsko strukturo in lastnostjo (QSAR/QSPR)*** (5 ECTS): Cilji predmeta: Spoznavanje računalniških metod za modeliranje lastnosti molekul. Povdarek je na lastnostih, ki so zanimive pri raziskavah novih zdravilnih učinkovin in za ocenjevanje nevarnosti spojin v okolju (kemijska regulativa). Spoznavanje ustreznih podatkovnih bank, ki vsebujejo podatke o strukturah in lastnosti spojin, in metod za delo s podatkovnimi bankami. Spoznavanje metod za kodiranje molekulskih struktur in za izračun molekulskih deskriptorjev. Spoznavanje statističnih metod modeliranja in validacije modelov. *Vsebina:* Predstavitev podatkovnih bank, ki so dostopne preko interneta in eventualno urejanje lastne banke podatkov za različne biološke lastnosti (doze in razredi toksičnosti, teratogenost, karcinogenost, vezavne konstante z določenimi encimi, itd.). Kodiranje kemijskih struktur (notacija SMILES, MDL, SDF, MOL). Izračun deskriptorjev (topološki, empirični, kvantno-kemijski, itd.) in uporaba ustreznih računalniških programov (DRAGON,

CODESSA, itd.). Uporaba različnih programskih paketov za gradnjo in validacijo QSPR modelov (linearna regresija, metoda glavnih osi, nevronske mreže, itd.).

***Eksperimentalna fizikalna kemija*** (5 ECTS): Cilj predmeta je študentom predstaviti osnovne koncepte različnih eksperimentalnih metod in inštrumentov, ki se uporabljajo na področju fizikalne kemije, jih podrobneje seznaniti z eksperimentalnimi veščinami ter aplikacijami teh metod in jih spodbuditi, da pridobljeno znanje in izkušnje s pridom uporabljajo pri svojem bodočem delu.

*Vsebina:* Izotermna titracijska kalorimetrija (ITC): Fizikalne osnove signala, merjenje in analiza signala, ITC-titracije, uporabnost pri študiju vezanja molekul. Diferenčna dinamična kalorimetrija (DSC): Fizikalne osnove signala, merjenje in analiza signala, uporabnost pri študiju strukturnih sprememb makromolekul. Spektropolarimetrija (CD): Polarizirana svetloba, molekularne osnove signala, merjenje in analiza signala, CD-titracije, uporabnost pri študiju (inducirane) asimetrije molekul. Fluorimetrija: Molekularne osnove signala, merjenje in analiza signala, uporabnost pri študiju vezanja in strukturnih sprememb molekul. Osnove metod sipanja: Uvod v statično in dinamično sipanje laserske svetlobe ter ozkokotno rentgensko sipanje, eksperimentalni sistemi, aplikacija, analiza in interpretacija rezultatov sipanja. Osmometrija: določanje molskih mas, osmotskih koeficientov in virialnih koeficientov z različnimi tipi osmometrov. Konduktometrične metode: Fizikalne osnove merjenja prevodnosti in transportnih števil v ionskih raztopinah, uporabnost pri določevanju stopnje vezave protiionov na polielektrolit. Ionoselektivne elektrode: Fizikalne osnove, klasifikacija, priprava elektrod, uporabnost pri študijah koeficientov aktivnosti enostavnih elektrolitov in surfaktantov. Eksperimentalne osnove merjenja fizikalnih lastnosti tekočin (gostota, površinska napetost, viskoznost)

***Teorija tekočin in raztopin*** (5 ECTS): Naloga statistične termodinamike je, da iz podatkov o lastnostih atomov in molekul ter sil med njimi izpelje makroskopske lastnosti snovi. Na ta način omogoča molekularno interpretacijo merskih podatkov. Program je sestavljen tako, da omogoča študij tudi tistim študentom, to je, na primer, študentom farmacije in kemijske tehnologije, ki nimajo ustreznega predznanja. V prvem delu zato ponovimo nekatere osnove statistične termodinamike. Glavni del predmeta je namenjen metodam študija kapljev in raztopin, saj so le-te za kemika zelo pomembne. Na koncu obravnavamo sisteme v polju zunanje sile oziroma ob površini.

*Vsebina:* Osnove statistične termodinamike: Opis mikroskopskega stanja, fazni prostor, kanonična porazdelitev, izoliran sistem, odprt sistem, N,P,T sistem, posplošeni (Gibbsov) sistem, fluktuacije. Klasična statistična termodinamika: Konfiguracijski integral, struktura tekočin in prostorske porazdelitvene funkcije, Računanje termodinamičnih količin (notranja energija, virijalna enačba stanja, stisljivostna enačba), eksperimentalno določanje strukture kapljev. Računalniške simulacije: Metoda Monte Carlo, simulacije v kanoničnem, velekanoničnem in Gibbsovem ansamblu, računanje proste energije. Študij dinamike molekul. Teorije kapljev in raztopin: Razvoj po gručah, enačba stanja, drugi virijalni koeficient, teorije na osnovi Ornstein–Zernikove enačbe (MSA, PY in HNC približki), numerično reševanje integralskih enačb. Perturbacijske metode, van der Waalsova enačba. Delci v zunanem polju: Teorija na osnovi gostotnega funkcionala, Poisson–Boltzmanova enačba in izboljšave. Časovno odvisne korelacijske funkcije.

***Elektrokemija raztopin*** (5 ECTS): Spoznavanje teorijskih pristopov pri obravnavi termodinamičnih in transportnih lastnosti raztopin elektrolitov in polielektrolitov. Te lastnosti so pomembne pri razumevanju pojavov tako pri tehnoloških kot pri bioloških procesih.



Vsebina predmeta je prilagojena študentom z različnim osnovnim predznanjem fizikalne kemije.

*Vsebina:* Osnovni pojmi Voda kot najpomembnejše topilo. Vodikova vez. Sile v raztopinah. Solvatacija ionov. Mešana topila. Hidrofobni efekt. Hoffmeisterova vrsta. Enostavni elektroliti. Polielektroliti. Termodinamične lastnosti raztopin elektrolitov McMillan-Mayerjeva teorija. Preprosti model raztopine elektrolita. Poisson-Boltzmannova enačba. Srednji elektrostatski potencial. Prostorske porazdelitvene funkcije. Termodinamične količine: notranja energija, osmozni tlak, koeficient aktivnosti, eksperimentalno določanje termodinamičnih količin. Pitzerjeva teorija. Mešanice elektrolitov. Asociacija ionov. Bjerrumova teorija. Moderne teorije raztopin elektrolitov. Transportne lastnosti raztopin elektrolitov Prevodnost. Viskoznost. Difuzija elektrolitov. Splošne teorije polielektrolitov Manningov model nabite premice. Valjasti (celični) model. Sferični (celični) model. Raztopina polielektrolita z dodatkom enostavnega elektrolita. Metode statistične mehanike: integralske enačbe, računalniške simulacije. Termodinamične lastnosti raztopin polielektrolitov Koeficienti aktivnosti. Osmozni koeficient. Razredčilne toplote. Raztopine polielektrolita ter mešanice protiionov različnih valenc. Membransko ravnotežje. Topnost polielektrolitov. Transportne lastnosti raztopin polielektrolitov Prevodnost. Transportno število. Elektroforeza. Viskoznost. Sedimentacija in difuzija. Elektrodika Električna dvojna plast ob elektrodi. Elektrokapilarnost. Kinetika elektrodnih procesov. Polarizacija elektrod. Prenapetost. Butler-Volmerjeva enačba. Gorivne celice. Korozija.

***Metode sipanja za določanje strukture in dinamike v nanosistemih*** (5 ECTS): Cilj predmeta je spoznavanje različnih eksperimentalnih metod, ki temeljijo na sipanju rentgenskih žarkov in nevtronov pod majhnimi koti ter sipanju laserske svetlobe. Te metode se uporabljajo za določevanje strukturnih in dinamičnih značilnosti nanosistemov.

*Vsebina:* Uvod v metode sipanja Lorentzov model. Lorentzova limita in limita sipanja. Interferenca. Ozkokotno rentgensko sipanje - metoda SAXS Rayleigh-Debye-Gansova (RDG) teorija. Sipanje in inverzni problem sipanja. Razredčeni monodisperzni sistemi. Radij giracije, molska masa. Indirektna Fourierova transformacija - metoda IFT. Parska porazdelitvena funkcija razdalj. Notranja struktura delcev. Koncentrirani sistemi. Posplošena indirektna Fourierova transformacija – metoda GIFT. Eksperimentalni sistem. Aplikacije metode SAXS. Osnove ozkokotnega nevtronskega sipanja: kontrast in variacija kontrasta, selektivno devteriranje. Statično sipanje laserske svetlobe – metoda SLS Rayleighovo sipanje, RDG področje. Teorija fluktuacij za razredčene sisteme. Zimmov diagram. Lorentz-Mieova teorija. Monodisperzni in polidisperzni sistemi. Eksperimentalni sistem. Dinamično sipanje laserske svetlobe – metoda DLS Difuzija in hidrodinamski radij delcev. Avtokorelacijska funkcija. Koncentracijski efekti. Inverzna Laplaceova transformacija avtokorelacijske funkcije. Rotacijski difuzijski koeficient. Ergodijski in neergodijski sistemi. Laboratorijske vaje Projektni vaji: Strukturni raziskavi izbranega nano-strukturiranega sistema z metodo SAXS in DLS – izvedba eksperimentov ter analiza eksperimentalnih sipalnih krivulj.

***Biofizikalna kemija*** (5 ECTS): Cilj predmeta je spoznavanje, razumevanje in obravnava fizikalno-kemijskih lastnosti bioloških makromolekul ter zakonitosti, ki te lastnosti določajo in povezujejo.

*Vsebina:* Molekulska interpretacija termodinamskih količin: Boltzmannova porazdelitev in statistična definicija entropije v povezavi s termodinamiko konformacijskih sprememb bioloških makromolekul. Termodinamika raztopin bioloških makromolekul: Osnove termodinamike raztopin, virialna enačba za kemijski potencial topila. Membransko ravnotežje, Donnansko ravnotežje, Prenos snovi preko bioloških membran. Interakcije v

raztopinah bioloških makromolekul: Interakcije topljenec-topilo, topilo-topilo in topljenec-topljenec opredeljene s pomočjo elementarnih interakcij (Coulombske, van der Waalove, vodikove vezi). Lastnosti vode in hidrofobne interakcije. Konformacijska ravnotežja: Intra- in intermolekularne interakcije, ki določajo stabilnost proteinov in nukleinskih kislin. Opis termodinamike denaturacije proteinov in nukleinskih kislin z modelom dveh stanj. Odvisnost stabilnosti od temperature, koncentracije denaturanta, pH, ionske moči... Določanje termodinamskih parametrov denaturacije. Vezanje bioloških makromolekul: Vezava na eno vezno mesto, na več med seboj neodvisnih in ekvivalentnih veznih mest ter vezava na neekvivalentna vezna mesta. Določanje ravnotežnih konstant vezanja. Alsterični efekti. Vezanje protonov, Henderson-Hasselbachova enačba.

**Modeliranja kemijskih sistemov** (5 ECTS): Pri predmetu naj bi dobil študent teoretično podlago in praktične izkušnje za samostojno reševanje matematičnih problemov, na katere naleti pri vsakodnevnem delu na različnih področjih znanosti in tehnike s posebnim poudarkom na kemijo. Cilj predmeta je študentom predstaviti metode za numerično reševanje matematičnih problemov, na katere lahko naleti pri vsakdanjem delu na področju znanosti, tehnike.

*Vsebina:* Osvežitev znanja računalništva, ponovitev osnov o programskih jezikih (fortran, c, phyton, perl), ki se bodo predvidoma uporabljali za praktično delo na računalniku. Statistične metode in pristopi pri obdelavi eksperimentalnih podatkov. Modeliranje podatkov (aproksimacija z nelinearnimi funkcijami). Filtriranje signalov in interpretacija (IR, NMR, masnih) spektrov (Fourierova transformacija in Fourierova analiza). Izračun časovnega poteka kemijskih reakcij (kemijska kinetika). Modeliranje dvoelektronskih sistemov v Hartree-Fockovem približku, primer helijevega atoma in vodikove molekule. Predstavitev in reševanje difuzijskih problemov, pretakanja tekočin in toplotnih sistemov (numerično reševanje parcialnih diferencialnih enačb). Določanje strukture tekočin in raztopin s pomočjo reševanja integralnih enačb. Modeliranje slučajnih procesov. Numerično integriranje s pomočjo Monte Carlo metode in Monte Carlo simulacije preprostih tekočin (Metropolisov algoritem). Molekulska dinamika preprostih kemijskih sistemov.

**Raziskovalno delo** (20 ECTS): Cilj predmeta je uvajanje študenta v vse faze raziskovalnega dela od pregleda obstoječega znanja (literature) o določeni vsebini, formuliranju problema, načrtovanju poti do rešitve, izbiri metod in izvedbi raziskave, kritičnim vrednotenjem rezultatov in oblikovanju sklepov ter predstavitvi rezultatov. Ta predmet je uvod v magistrsko delo.

**Magistrsko delo** (30 ECTS): Raziskovalna naloga, ki jo ob mentorskem vodstvu študent izvaja čimbolj samostojno v celotnem poteku od formuliranja znanstvenega ali strokovnega problema do njegove rešitve in pisne in ustne predstavitve rezultatov. Neposredna metodološka priprava za magistrsko delo je predmet Raziskovalno delo, vsebino magistrskega dela pa študent izbere ob pomoči mentorja iz vsebinskega področja študijskega programa (Kemija). S pisno in ustno predstavitvijo rezultatov študent zaključi drugo stopnjo študija.