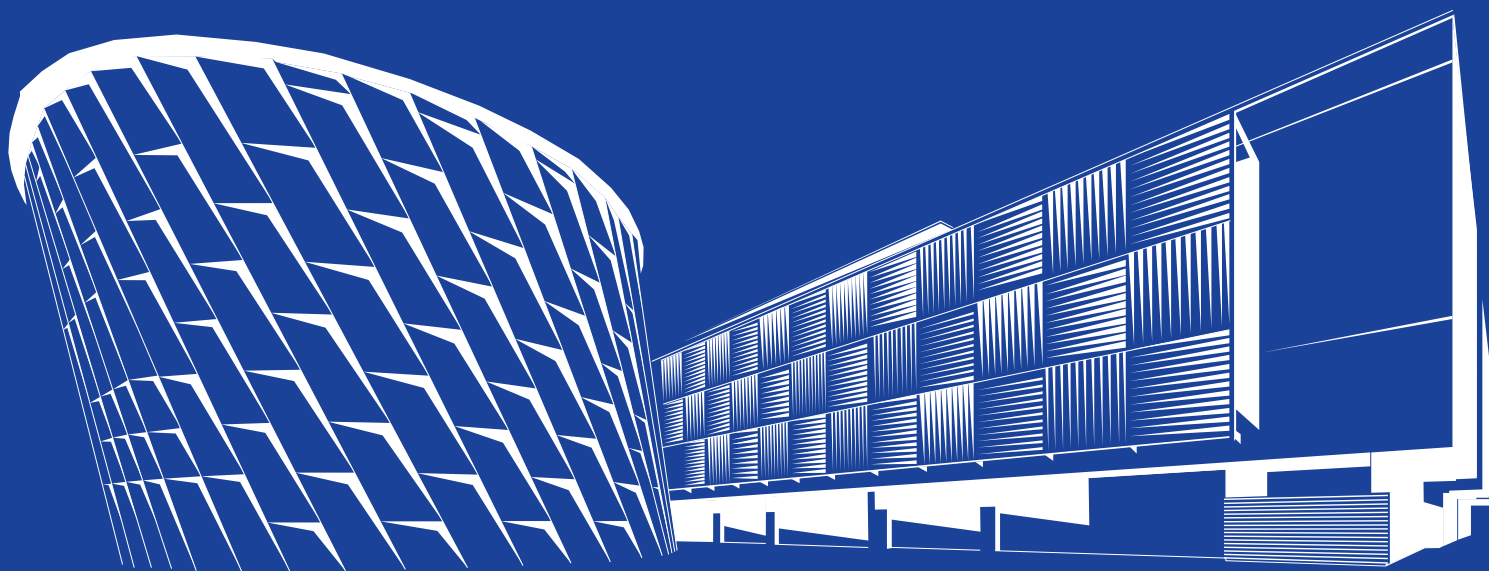
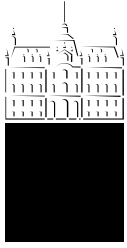




Univerza v Ljubljani
Fakulteta *za kemijo in kemijsko tehnologijo*

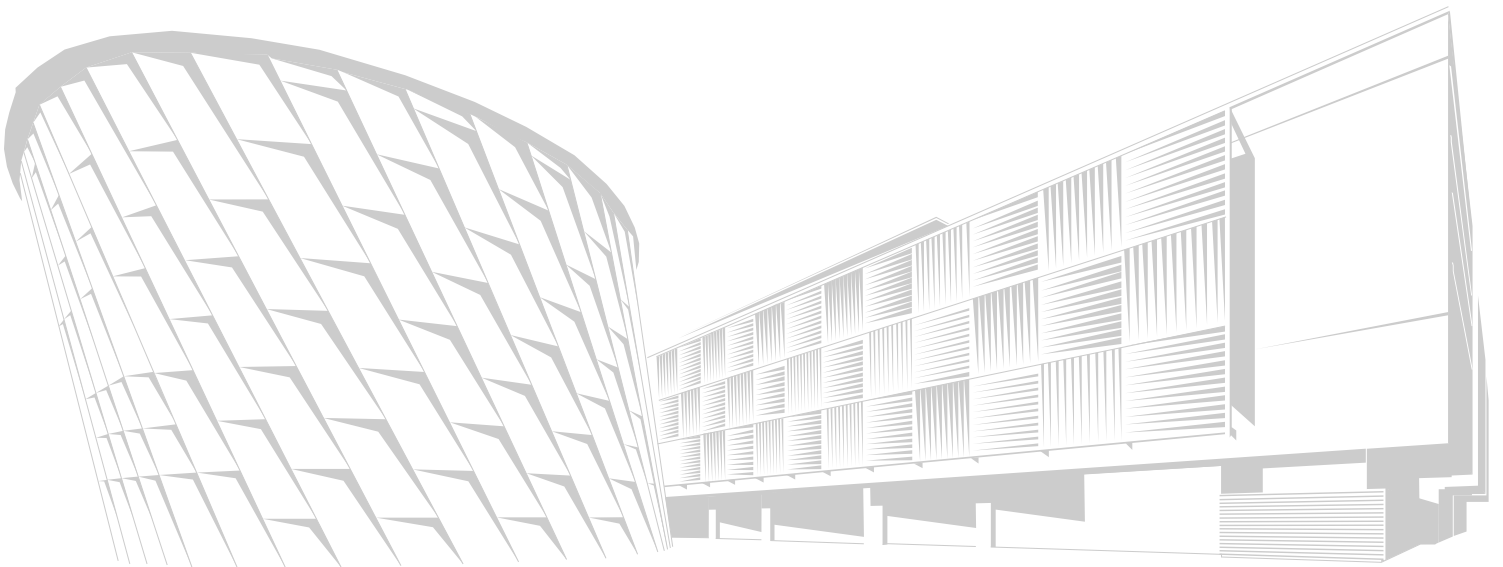
POROČILO O IZOBRAŽEVALNI IN RAZISKOVALNI DEJAVNOSTI V LETU 2014





Univerza v Ljubljani
Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo

**POROČILO O IZOBRAŽEVALNI IN
RAZISKOVALNI DEJAVNOSTI V LETU 2014**
ANNUAL REPORT 2014



POROČILO O IZOBRAŽEVALNI IN RAZISKOVALNI DEJAVNOSTI V LETU 2014

Izdala: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo,
Univerza v Ljubljani

Avtorji prispevkov: Peter Bukovec, Marko Dolinar,
Andrej Godec, Janvit Golob, Andrej Jamnik,
Marijan Kočevar, Matjaž Krajnc, Maja Lamovšek,
Brigita Lenarčič, Marjan Marinšek, Anton Meden,
Zdenka Modic, Barbara Novosel, Stojka Oman Vučkowska,
Radovan Stanislav Pejovnik, Andrej Petrič, Olga Skopec,
Dominika Slabajna, Branko Stanovnik, Jurij Svete,
Urška Šebenik, Janez Topovšek, Iztok Turel,
Marjan Veber, Vojeslav Vlachy, Klementina Zupan,
Andreja Žgajnar Gotvajn

Urejanje in oblikovanje: Maja Ramovš

Oblikovanje: Studio Signum

Tisk: Birografika Bori

Naklada: 35 izvodov

KAZALO

POSLANSTVO FAKULTETE	
MISSION STATEMENT	6
IZOBRAŽEVALNA IN RAZISKOVALNA DEJAVNOST	8
DELOVANJE INFRASTRUKTURNEGA CENTRA NA UL FKKT V LETU 2014	
ACTIVITIES OF THE INFRASTRUCTURE CENTRE AT THE UL FCCT IN 2014	10
MEDNARODNO SODELOVANJE	14
46. MEDNARODNA KEMIJSKA OLIMPIJADA 2014 V HANOJU, VIETNAM	15
POLETNA ŠOLA KEMIJSKIH ZNANOSTI 2014	18
POROČILO O NEVARNIH ODPADKIH NA FAKULTETI V LETU 2014	21
ORGANIZACIJSKA SHEMA	22
DIPLOME, MAGISTERIJI IN DOKTORATI V LETU 2014	23
RAZISKOVALNI PROGRAMI V LETU 2014	
RESEARCH PROGRAMMES IN 2014	39
Kemija za trajnostni razvoj	
Chemistry for sustainable development	41
Raziskave in razvoj analiznih metod in postopkov	
Research and development of analytical methods and procedures	48
Sinteza, struktura, lastnosti snovi in materialov	
Synthesis, structure, properties of compounds and materials	55
Sinteze in transformacije organskih spojin. Novi reagenti v stereoselektivni in regioselektivni sintezi aminokislin kot intermediatov v organski sintezi	
Syntheses and transformations of organic compounds. New reagents in stereoselective and regioselective synthesis of amino acids as intermediates in organic synthesis	63
Fizikalna kemija	
Physical chemistry	75
Organska kemija: sinteza, struktura, aplikacija	
Organic chemistry: synthesis, structure and application	82
Kemijsko inženirstvo	
Chemical engineering	105
Separacijski in drugi procesi za zmanjševanje toplogrednih plinov na podlagi načel trajnostnega razvoja	
Separation and other processes for minimisation of greenhouse gases upon the principals of sustainable development	122
ENOTE SKUPNE DEJAVNOSTI	130
KATEDRE V LETU 2014	
CHAIRS IN 2014	131
Katedra za analizno kemijo	
Chair of Analytical Chemistry	133
Katedra za anorgansko kemijo	
Chair of Inorganic Chemistry	139

Katedra za biokemijo	
Chair of Biochemistry	151
Katedra za fizikalno kemijo	
Chair of Physical Chemistry	163
Katedra za organsko kemijo	
Chair of Organic Chemistry	175
Katedra za anorgansko kemijsko tehnologijo in materiale	
Chair of Inorganic Chemical Technology and Materials	190
Katedra za kemijsko, biokemijsko in ekološko inženirstvo	
Chair of Chemical, Biochemical and Environmental Engineering	196
Katedra za polimerno inženirstvo, organsko kemijsko tehnologijo in materiale	
Chair of Polymer Engineering, Organic Chemical Technology and Materials	205
Katedra za varstvo pri delu	
Chair of Safety at Work	210

Modernega življenja si brez sodobne kemije ne moremo niti zamisliti, pa čeprav se tega v vsakdanjem življenju ne zavedamo. Brez kemije ni moderne biologije, ni farmacevtskih ved, ni razumevanja v medicini. Brez kemijskega inženirstva ne bi bilo racionalne proizvodnje nešteti izdelkov, za katere se nam zdi samoumevno, da nam pripadajo.

V naših krajih imata študij in raziskovalno delo na področju kemijskih ved dolgo tradicijo. Prvi začetki segajo že v sedemnajsto stoletje, o začetku rednega študija na področju kemijskih ved pa lahko govorimo od leta 1919, ko je bila ustanovljena ljubljanska univerza.

Kot zanimivost velja poudariti, da je bil prvi doktorat ljubljanske univerze podeljen leta 1920 iz kemije Anki Mayer.

POSLANSTVO FAKULTETE

Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo Univerze v Ljubljani:

Goji temeljno, aplikativno in razvojno raziskovanje na področjih kemije, biokemije, kemijskega inženirstva in požarne ter varnosti pri delu pri čemer si prizadeva dosegati odličnost in najvišjo kakovost.

Na osnovi lastnega raziskovanja ter lastnih in tujih raziskovalnih dosežkov izobražuje vodilne znanstvenike in strokovnjake, ki so usposobljeni za vodenje trajnostnega razvoja, ob upoštevanju izročila evropskega razsvetljenstva in humanizma ter ob upoštevanju človekovih pravic. Pri tem spodbuja interdisciplinarni in multidisciplinarni študij.

Izmenjuje svoje dosežke na področju znanosti in umetnosti z drugimi univerzami in znanstveno raziskovalnimi ustanovami. Tako prispeva svoj delež v svetovno zakladnico znanja in iz nje prenaša znanje v slovenski prostor. Sodeluje z gospodarstvom in s tem pospešuje uporabo svojih raziskovalnih in izobraževalnih dosežkov ter prispeva k družbenemu razvoju.

Fakulteta utrjuje akademsko skupnost profesorjev, raziskovalcev, študentov in drugih sodelavcev ter si prizadeva za svojo uveljavitev doma in v svetu.

Svoje raziskovanje, izobraževanje, javno delovanje in razmerja med člani utemeljuje na načelih profesionalne odličnosti, oziroma zagotavljanja čim višje kakovosti ter akademske svobode sodelavcev in študentov, posebej svobode ustvarjalnosti.

(Prirejeno po dokumentu Poslanstvo Univerze v Ljubljani, ki ga je sprejel Senat UL, 7. 5. 1996)

MISSION STATEMENT

The FKKT members individually and collectively strive to:

- Perform basic, applied and development research in the fields of chemistry, biochemistry, chemical engineering, fire safety and occupational safety endeavouring to achieve excellence and top quality of their work.
- Promote high quality teaching standards based on the results of their own research and other research groups to generate scientists and professionals who will be able to support and manage sustainable development based on the principles of European enlightenment and humanism and human rights. The Faculty promotes interdisciplinary and multidisciplinary studies.
- Exchange the results with other universities and scientific research institutions in the fields of sciences and arts, in order to contribute to the world depository of knowledge as well as drawing on its knowledge.
- Develop cooperation with Slovenian industry and foster the application of its research and educational achievements, thus contributing its share to the general social development.
- Endeavour to establish itself nation wise and abroad by creating and academic community of teachers, researchers, students and other associates.
- Ground their research and educational activities, as well as public relations among its members on the principles of professional excellence, and promote highest quality and creative freedom by allowing academic freedom to the Faculty staff and students.

IZOBRAŽEVALNA IN RAZISKOVALNA DEJAVNOST

Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo Univerze v Ljubljani (UL FKKT) izvaja Nacionalni program visokega šolstva in Nacionalni raziskovalni in razvojni program na področju kemije, biokemije, kemijskega izobraževanja, kemijskega inženirstva, polimernih ter keramičnih materialov in tehnologij, uporabne kemije, kemijske tehnologije, tehniške varnosti in požarne varnosti. Obenem opravlja na njihovih mejnih področjih izobraževalno, znanstveno-raziskovalno, razvojno, svetovalno ter druge s tem povezane dejavnosti. Osnovne izobraževalne in raziskovalne enote so katedre.

IZOBRAŽEVALNA DEJAVNOST

UL FKKT je v študijskem letu 2013/2014 izvajala štiri univerzitetne študijske programe prve stopnje:

- Kemija,
- Biokemija,
- Kemijsko inženirstvo,
- Tehniška varnost,

visokošolski strokovni študijski program prve stopnje

- Kemijska tehnologija,

magistrske študijske programe druge stopnje:

- Kemija,
- Kemijsko izobraževanje
- Biokemija,
- Kemijsko inženirstvo,
- Tehniška varnost,

ter doktorski študijski program

- Kemijske znanosti.

Poleg tega pa je UL FKKT sodelovala z drugimi fakultetami pri izvajanju naslednjih podiplomskih študijskih programov:

- Biomedicina za področje Biokemije in molekularne biologije,
- Znanost in inženirstvo materialov,
- Varstvo okolja,
- Bioznanosti.

Za izvedbo študijskih programov, skupaj z zunanjimi dopolnilno zaposlenimi sodelavci, skrbi 27 rednih profesorjev, 11 izrednih profesorjev, 13 docentov, 43 asistentov, 2 učitelja veččin ter 24 samostojnih strokovnih delavcev.

RAZISKOVALNA DEJAVNOST

Na Fakulteti za kemijo in kemijsko tehnologijo so raziskave pomemben del dejavnosti učiteljev in sodelavcev. Temeljne raziskave omogočajo spremljanje svetovnega razvoja in napredka na področju naravoslovja in tehnologije, razvojne in uporabne raziskave pa predstavljajo stik med fakulteto in gospodarstvom.

Znanstveno in raziskovalno delo na fakulteti je bistveno povezano s podiplomskim izobraževanjem, saj lahko fakulteta le tako zagotavlja mednarodno konkurenčen študij. Raziskave v kemiji pokrivajo aktualna področja iz anorganske in organske sinteze, študij anorganskih in organskih spojin, analize kemije, fizikalne in biofizikalne kemije, različnih vej biokemije, kot so encimatika, molekularna

genetika in genski inženiring. Kemijsko inženirske raziskave pokrivajo področja razvoja procesov za anorganske in organske produkte ter materiale, reakcijskega inženirstva, transportnih pojavov, reologije, bioinženirstva, ekološkega inženirstva idr.

Raziskovalno delo je povezano tudi z industrijsko problematiko, predvsem za kemijsko, farmacevtsko, živilsko industrijo in biotehnologijo, gradbeništvo, varovanje okolja idr.

Pomembne so tudi interdisciplinarne raziskave, ki se izvajajo med različnimi fakultetami slovenskih univerz in drugimi slovenskimi znanstvenimi institucijami, ter mednarodne povezave v sklopu mednarodnih projektov in sodelovanja s tujimi univerzami ali raziskovalnimi laboratoriji.

DELOVANJE INFRASTRUKTURNEGA CENTRA NA UL FKKT V LETU 2014

Infrastrukturni center na UL FKKT (IC UL FKKT) je del Mreže raziskovalnih infrastrukturnih centrov Univerze v Ljubljani (MRIC UL), materialne stroške delovanja opreme sofinancira Javna agencija za raziskovalno dejavnost Republike Slovenije (ARRS). IC UL FKKT od leta 2014 dalje sestavljajo štiri enote: Enota za NMR spektroskopijo (NMR), Enota za masno spektrometrijo (LC-MS), Enota za elektronsko mikroskopijo (EM) in Enota za rentgensko difrakcijo.

Oprema vseh štirih enot infrastrukturnega centra UL FKKT je bila uporabnikom na razpolago v skladu z načeli, objavljenimi na spletu (<http://www.fkkt.uni-lj.si/sl/raziskovalna-infrastruktura/>). Na tej spletni strani uporabniki lahko rezervirajo inštrumentalni čas za uporabo NMR inštrumentov in SEM, zaradi zahtevnosti izvajanja meritve z LC MS spektrometrom in rentgensko difrakcijske analize pa meritve izvaja osebje IC. Uporabniki oddajo vzorce, rezultate prejmejo v pisni in po želji tudi elektronski obliki. Usluge IC UL FKKT so dostopne vsem raziskovalcem z UL in ostalih raziskovalnih ustanov.

Enota za NMR spektroskopijo. NMR inštrumenta delujeta v režimu 24/7 (8760 ur letno). Povprečna letna izkoriščenost inštrumentalnega časa v obdobju 2009 do 2013 je bila 244% pri 300 MHz NMR inštrumentu ter 233% pri 500 MHz NMR inštrumentu (izražena v odstotkih izkoriščenosti pri režimu 8 ur dnevno, 7 dni v tednu). Inštrumenta so pri raziskovalnem in pedagoškem delu uporabljali sodelavci UL Fakultete za kemijo in kemijsko tehnologijo in Fakultete za farmacijo (do ustanovitve samostojnega IC na FFA).

Enota za masno spektrometrijo. Agilent 6224 Accurate Mass TOF LC/MS sistem je v uporabi od leta 2012 in je bil do sedaj izkoriščen 100% (režim 8 ur dnevno, 5 dni v tednu). LC-MS spektrometer je na voljo v režimu 24/7 a je zaradi zahteve po stalni prisotnosti operaterja izkoriščenost podana na običajen deloven čas. Od vsega inštrumentalnega časa je bilo 93% časa porabljeno za meritve za sodelavce Fakultete za kemijo in kemijsko tehnologijo ter približno 7% delu za trg.

Enota za elektronsko mikroskopijo. V enoti za elektronsko mikroskopijo IC UL FKKT je bil v letu 2013 Elektronski mikroskop FE-SEM Zeiss Ultra Plus je v uporabi od leta 2012 in je bil do sedaj izkoriščen 100% (režim 8 ur dnevno, 5 dni v tednu). Mikroskop je na voljo v režimu 24/7 a je zaradi zahteve po stalni prisotnosti operaterja izkoriščenost podana na običajen deloven čas. Inštrument so uporabljali sodelavci UL FKKT ter raziskovalci iz partnerskih organizacij IJS, KI, ZAG in Calcit d.o.o., kakor tudi drugi raziskovalci iz UL in raziskovalnih inštitutov.

Inštrumenti so bili uporabljeni tudi za izvajanje pedagoškega dela na UL FKKT pri doktorskih, magistrskih in diplomskih delih ter pri izvedbi vaj za študente kemijskega inženirstva, kemije, kemijske tehnologije in tehniške varnosti.

Enota za rentgensko difrakcijo. Difraktometer Nnius Kappa CCD je v uporebi od leta 1999, pred dvema letoma se mu je pridružil Agilent SuperNova, ki lahko uporablja dve valovni dolžini. Slednji instrument je v lasti Centra odličnosti EN-FIST, je pa v upravljanju UL FKKT, ki mora poskrbeti za vse stroške vzdrževanja. Oba instrumenta sta polno zasedena, saj vzorci prihajajo iz cele Slovenije in tudi iz tujine, na FKKT pa je več kot 15 usposobljenih operaterjev, ki vzdržujejo licenco za delo z viri sevanja in so pod predpisano dozimetrično kontrolo. Zunanji uporabniki zato sami uporabljajo instrumente le izjemoma (če imajo operaterja z licenco in pod dozimetrično kontrolo), pravilo pa analize opravijo za to usposobljeni raziskovalci UL FKKT.

Rentgenska difrakcija na monokristalu je klasična metoda določanja strukture trdnih snovi. Zaradi zanesljivosti in natančnosti lahko v veliko primerih služi kot referenčna metoda za druge eksperimentalne tehnike strukturne analize in teoretične kvantno-kemijske računske metode. Seveda pa je do teh rezultatov mogoče priti le pri kristaliničnih snoveh, ki jih je mogoče izkristalizirati v dovolj

kvalitetne monokristale (dimenzij okrog 0,1 mm). Ker temu pogoju ustrezajo številne nove e s področja organske, anorganske, organokovinske kemije, je naša aparatura zelo dobro izkoriščena. Letno posnamemo difrakcijske podatke za 200 do 300 monokristalov. Podatki o njihovih kristalni strukturi pa so praviloma vključeni med osnovne informacije o novih spojinah. Ker so nekateri vzorci pri sobnih pogojih neobstojni ali pa zato, ker se pri povišani ali znižani temperaturi dogajajo strukturne spremembe, moramo kristale velikokrat snemati pri nizki ali visoki temperaturi. Na difraktometru imamo dodatek, ki omogoča hlajenje oz. segrevanje kristala med snemanjem na 100 – 700 K, za kar se uporablja tekoči dušik in predstavlja precejšen obratovalni strošek. Skupaj z visoko ceno in specializiranim znanjem ter posebnimi ukrepi varstva pri delu za skupino raziskovalcev, ki aparaturo uporabljajo, je to dejavnik, ki pogojuje uporabo aparature kot infrastrukturne naprave, ki služi vsem raziskovalcem fakultete in še precejšnjemu delu drugih slovenskih raziskovalcev.

Rezultati raziskav, pri katerih so raziskovalci in študenti uporabljali usluge IC UL FKKT, so bili v obdobju 2009-2014 objavljeni v 320 izvirnih, 13 preglednih znanstvenih člankih, 46 vabljenih predavanjih, 354 prispevkih na konferencah, 29 patentih oziroma patentnih prijavih. Oprema infrastrukturnega centra je bila uporabljena tudi pri raziskavah v sklopu 49 zaključenih doktorskih in magistrskih ter 202 diplomskih del.

Cilji infrastrukturnega programa so bili v obdobju 2009-2014 popolnoma doseženi. Oprema IC UL FKKT je omogočila pripravo kvalitetnih znanstvenih objav v mednarodnih strokovnih revijah, referate na konferencah, vabljeni predavanja, prijavljene in podeljene patente ter doktorska, magistrska in diplomska dela. Visoka izkoriščenost razpoložljivega eksperimentalnega časa kaže na primerno organiziranost dostopa do inštrumentov. Načela in način dostopa do inštrumentalnega časa so javno objavljeni na svetovnem spletu. Oprema je pod objavljenimi pogoji na voljo vsem raziskovalcem v Sloveniji in Evropi.

Od leta 1995 do začetka Infrastrukturnega projekta v letu 2009 je na FKKT deloval del Nacionalnega centra za NMR spektroskopijo. V prostorih FKKT je bil inštaliran 300 MHz NMR inštrument, ki so ga večinsko uporabljali raziskovalci s FKKT in FFA. V obdobju od 2009 dalje se je dejavnost v sklopu infrastrukturnega projekta razvijala. Najprej sta bila v sodelovanju med Fakulteto za kemijo in kemijsko tehnologijo in Fakulteto za farmacijo v sklopu poziva za nakup raziskovalne opreme (14. paket) pridobljena dva nova NMR spektrometra: 500 MHz na FKKT in 400 MHz na FFA. Zaradi selitve FKKT na novo lokacijo so na FFA do organizirali svoj infrastrukturni center in vanj prenesli 400 MHz NMR inštrument. V sklopu 14. paketa je FKKT uspela pridobiti tudi elektronski mikroskop. Na FKKT smo se leta 2010 odločili dobljena dodatna sredstva za opremo nameniti za nakup visoko- ločljivostnega masnega spektrometra s tekočinskim kromatografom. Povečanje števila kosov večje raziskovalne opreme je zahtevala reorganizacijo upravljanja z infrastrukturo. Zato smo NMR center preoblikovali v Infrastrukturni center na UL FKKT, ki je bil najprej sestavljen iz treh enot (NMR, LC-MS in EM), sedaj pa je v IC še četrta (Rentgenska difrakcija).

V letu 2014 smo vso raziskovalno opremo IC UL FKKT uspešno preselili iz prostorov na Aškerčevi 5 v prostore nove stavbe FKKT na Večni poti 113.

ACTIVITIES OF THE INFRASTRUCTURE CENTRE AT THE UL FCCT IN 2014

The Infrastructure Centre at the UL FCCT (IC UL FCCT) is part of the Network of Research Infrastructure Centres of the University of Ljubljana (NRIC), and the material costs of equipment operation are co-financed by the Slovenian Research Agency (SRA). From 2014 the IC UL FCCT consists of four units: the NMR Spectroscopy Unit, the Mass Spectrometry Unit, the Electron Microscopy Unit and X-ray Diffraction Unit.

The equipment of all four units of the UL FCCT Infrastructure Centre was available to users in accordance with the principles posted online (<http://www.fkkt.uni-lj.si/sl/raziskovalna-infrastruktura/>). On this website, users can book an instrument time slot to use NMR instruments and SEM, whereas measurements made with an LC MS spectrometer are carried out by the IC staff owing to the high level of skill required. The users hand in the samples and receive the results in writing and on request also in electronic form. IC UL FCCT services are available to all researchers of the UL and other research institutions.

The NMR Spectroscopy Unit. Based on the 8h/5d operation, the average usage in the period 2009-2014 was 244% on the Bruker 300 DPX NMR 233 % for the Bruker Avance II 500 MHz NMR instrument. Both instruments were used in teaching and research work by the staff of the UL Faculty of Chemistry and Chemical Technology and Faculty of Pharmacy (until FFA founded its own center).

The Mass Spectrometry Unit. The Agilent 6224 Accurate Mass TOF LC/MS system is in use since 2012 and has been so far used for 100% of the available time (8 hours per day, 5 days in a week – an operator has to be present at the instrument during measurements). In average, the instrument maintenance and calibration and the measurements involved in the teaching and research work of the UL Faculty of Chemistry and Chemical Technology staff accounted for 93% and market commissions for 7% of this time.

The Electron Microscopy Unit. At the Electron Microscopy Unit of the IC UL FCCT, the FE-SEM Zeiss Ultra Plus electron microscope is available since 2012 to all users 24 hours a day, 7 days a week and 52 weeks a year (with the exception of the time set aside for microscope maintenance and servicing). Based on the methodology of calculating instrument usage time, the electron microscope was occupied for more than 100% of the available hours (100% instrument usage is considered to be usage for at least 8 hours/day working days only). Night-time slots and weekend slots in particular remain unused, since work with the microscope requires the operator to be present throughout. The 7 a.m. to 4 p.m. slot on Mondays is allocated to external users. The instrument is used by UL FCCT staff, researchers of partner organisations - Jožef Stefan Institute, Chemical Institute, Building and Civil Engineering Institute and Calcit d.o.o., and by other researchers from the UL and research institutes. The instrument is also used for teaching at the UL FCCT to conduct practicals for students of chemical engineering, chemistry, chemical technology and technical safety.

X-ray diffraction unit. The Nonius Kappa CCD diffractometer is in use since 1999, two years ago an Agilent SuperNova, capable of dual-wavelength operation was purchased by the EN-FIST Centre of Excellence and is operated by the UL FCCT. Both instruments are fully occupied. The samples are supplied from throughout Slovenia and also from abroad. FCCT provides more than 15 skilled operators that are maintaining the required license for operating radiation sources and are monitored by dosimetry control, also required by law. Almost all external samples are thus analysed by the UL FCCT staff, because other institutions generally do not have trained operators and are not performing regular dosimetry control.

X-ray diffraction is a classical method of structure determination of solids. Due to its accuracy, it is many times used as a reference method for other structure-related experimental techniques and also for quantum chemical calculations. The method requires well grown single crystals of about 0.1 mm in size. A lot of newly synthesized organic, inorganic and coordination compounds fulfil this require-

ment, so that 200 to 300 crystals are analysed yearly, keeping both instruments well used. Crystals, instable at room conditions can be measured at low temperatures. Temperature range from 100 to 700 K is available also for studying temperature dependent structural changes. For operating non-ambient conditions, liquid nitrogen is used, which represents a rather high cost. Together with high cost of the instruments themselves, legal regulation of their use due to ionizing radiation, this requires rational operation and the use of the equipment as an infrastructure, maintained at one place and serving a broad community of researchers in Slovenia.

The results of studies in which researchers and students used the services of the IC UL FCCT in the period from 2009-2014 were published in 320 original scientific articles and 13 review articles, 46 invited lectures, 354 papers at conferences, 29 patents or patent applications. The equipment of the Infrastructure Centre was also employed in the research involved in 49 completed doctoral dissertations and 202 bachelor's theses.

The goals of the IC UL FCCT were fully achieved in the period 2009-2014. The equipment enabled sound research work and good teaching. High usage of the available time shows adequate organization of access. The access policy is published on the web and is available to all researchers from Slovenia and Europe. In this period the infrastructural center developed from one 300 Hz NMR spectrometer to the present assembly of six pieces of so-called large research equipment, which required also new organization in the form of four subunits.

In the year 2014 all the equipment was successfully moved from Aškerčeva 5 to the new building of the FCCT on Večna pot 113.

MEDNARODNO SODELOVANJE

Mednarodno sodelovanje na Fakulteti za kemijo in kemijsko tehnologijo poteka tako na izobraževalnem kot na raziskovalnem področju.

Na izobraževalnem področju, v okviru programov Erasmus+ in EGS NFM potekajo izmenjave študentov na dodiplomskem in podiplomskem študiju. Oba programa ponujata sofinanciranje izmenjav študentov za študij in prakso, učiteljev in administrativnega osebja.

Za izmenjave študentov na FKKT obstajata dobra strokovna podpora in svetovanje. V tujino je v okviru študijske mobilnosti programa Erasmus+ šlo šest naših študentov, na praktično usposabljanje štirje študenti, trije pa so odšli na praktično usposabljanje v okviru projekta EGS NFM. Za 2014 smo načrtovali 15 mobilnosti naših študentov, izvedli pa smo jih 13. Tujih študentov smo gostili preko programa Erasmus+ devet. Za tuje študente smo načrtovali deset mobilnosti, izvedli pa smo jih 9. Od naših sodelavcev sta bili dve sodelavki na izmenjavi za poučevanje po programu Erasmus+ in ena sodelavka po programu EGS NFM.

V tujini je bilo na usposabljanju, preko Javnega sklada RS za štipendije, sedem mladih raziskovalcev.

V okviru doktorskega študija smo imeli predavanja 12 tujih predavateljev, ki so sodelovali v projektu Internacionalizacija UL.

Fakulteta je tudi tokrat intenzivno sodelovala pri pripravi dijakov za kemijsko olimpijado, ki se je udeležujejo najboljši slovenski dijaki. Štirje so se udeležili tekmovanja v Hanoju v Vietnamu in osvojili dve bronasti medalji in eno častno omembo. Ekipo sta spremljala dva učitelja naše fakultete.

Vsako leto imamo nekaj študentov, ki se vpišejo na naše programe. Na doktorski stopnji študija je bilo v študijskem letu 2013/14 vpisanih devet študentov iz tujine, od tega štirje iz Zahodne Evrope, trije iz nekdanjih jugoslovanskih republik, en študent iz Rusije in en iz Indije. Študij je z doktoratom zaključilo sedem tujcev. Na drugi stopnji študija še vedno nismo imeli vpisanih tujih državljanov, na prvi stopnji pa jih je bilo vpisanih skupaj 16, od teh štirje ponovno v isti letnik. Podatkov o morebitnih štipendijah tujih študentov fakulteta nima.

V mednarodne mreže smo vpeti s sodelovanjem na treh EU projekti 7OP, s sodelovanjem na projektu Internacionalizacija UL v okviru Strukturnih skladov EU in enem projektu z ameriško univerzo Stony Brook iz New Yorka.

Na raziskovalnem področju poteka sodelovanje na številnih dvostranskih projektih. V letu 2014 je fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo sodelovala na 11 bilateralnih projektih. Na področju raziskovalnega dela sodeluje fakulteta tudi na projektih COST.

S tujimi univerzami sodelujemo posredno preko podpisanih sporazumov o izmenjavi študentov, neposredno pa predvsem na doktorski stopnji, kjer naši študentje delno opravljajo eksperimentalno delo v tujini, pa tudi obratno.

46. MEDNARODNA KEMIJSKA OLIMPIJADA 2014 V HANOJU, VIETNAM

Olimpijada je potekala od 20.7. do 29.7.2014. Slovensko ekipo so zastopali Bruno Marinič (II. gimnazija Maribor), Nejc Kejžar (I. gimnazija Celje), Jan Jelen (gimnazija Bežigrad) in Andraž Oštrek (gimnazija Kranj). Mentorja ekipe sta bila dr. Darko Dolenc in dr. Andrej Godec, oba FKKT.

Bruno Marinič in Nejc Kejžar sta osvojila bronasti medalji, Jan pa priznanje za dosežen rezultat.

Ekipa je bila v celoti zelo uspešna, zato vsem čestitamo!



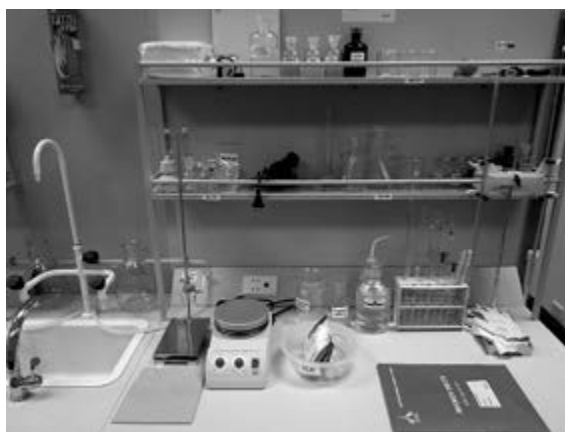
Naša ekipa na kemijski olimpijadi. Z leve proti desni so Darko Dolenc, Nejc Kejžar, Bruno Marinič, Jan Jelen, Andraž Oštrek in Andrej Godec.

Na olimpijado se uvrstijo po štirje najboljši dijaki ali dijakinje iz vsake države, in dva mentorja. Dva dneva sta tekmovalna: najprej je na vrsti peturno praktično delo v laboratoriju, nato pa še peturni teoretični test. Naloge so praviloma zelo zahtevne, zato pripravljamo dijake na Fakulteti za kemijo in kemijsko tehnologijo v Ljubljani. Letos je priprave izvajala naslednja ekipa: dr. Marta Kasunič, dr. Helena Prosen, dr. Boris Šket, dr. Darko Dolenc, dr. Črtomir Podlipnik in dr. Andrej Godec, pri organizaciji pa sodeluje Zveza za tehnično kulturo Slovenije. Vsem se najlepše zahvaljujemo.

Zahvaljujemo se tudi naši fakulteti za podporo, in Slovenskemu kemijskemu društvu, kjer je sedež Odbora za pripravo kemijske olimpijade.

Letošnjo olimpijado (<http://icho2014.hus.edu.vn/>) je organizirala Vietnamska narodna univerza VNU v Hanoju. Udeležilo se je 291 dijakov iz 77 držav.

Uradni del kemijske olimpijade se je začel v ponedeljek, 21.7.2014, z otvoritveno slovesnostjo v Kongresnem centru v Hanoju. To je dogodek velikega pomena, ki se ga udeležijo predstavniki Univerze in tudi politiki, zato so ga spremljale televizijske kamere. Na otvoritveni slovesnosti smo lahko videli nastope različnih etničnih skupin z značilnimi inštrumenti, predstavijo pa se tudi ekipe tekmovalcev. Takoj po prireditvi smo mentorji odšli na pregled laboratorijev, v katerih bodo dijaki čez dva dni opravljali praktični del tekmovanja.



Naša ekipa z vodičko Trang na otvoritveni slovesnosti, in delovni pult za eksperimentalni del tekmovanja.

Dijake sicer že prvi dan ločijo od mentorjev. Nas so preselili v naselje Sonh Hong, provinca Vinh Phuc severno od Hanoja. To je od glavnega mesta oddaljeno samo kakšnih 40 km, vendar je povprečna hitrost prometa po regionalnih in hitrih cestah v Vietnamu manj od 50 kilometrov na uro, pripravljeni pa morate biti na množico motoristov in na to, da hitro cesto občasno prečka tudi kakšna krava.

Dijaki imajo urnik natrpan z raznimi prireditvami in izleti, dva dneva pa imajo tekmovalna. Celoten program in urnik si lahko ogledate na spletnih straneh letošnje olimpijade (<http://icho2014.hus.edu.vn/>).

Tekmovanje je sestavljeno iz praktičnega in teoretičnega dela, od katerih traja vsak po 5 ur. Naloge pokrivajo vsa področja kemije; tukaj jih bom na kratko opisal, celotna besedila pa so objavljena v naši spletni učilnici olimpijad Kemljub (<http://skupnost.sio.si/login/index.php>).

Prva praktična naloga je bila oksidacija jodida z železovimi(III) ioni; šlo je za kinetično študijo tiosulfatne oscilirajoče reakcije z metodo merjenja njenih začetnih hitrosti v_0 . Za ta primer lahko napišemo hitrostni zakon $v_0 = k[\text{Fe}^{3+}]_0[\text{I}^-]_0^y$. Dijaki so morali grafično določiti red te reakcije y glede na $[\text{I}^-]$, pri čemer so spreminjali koncentracijo raztopin teh ionov.

Druga naloga je bila sinteza derivata artemizina z redukcijo, in analiza produkta s tankoplastno kromatografijo TLC. Artemizinin je sicer antimalarično zdravilo, ki so ga izolirali iz rastline *Artemisia annua* L. v Vietnamu.

Tretja praktična naloga je bila analiza hidrata dvojne soli cink železovega(II) oksalata in določitev empirične formule te spojine s titracijo s KMnO_4 in z EDTA. Ta spojina je običajen prekursor v sintezi cinkovega ferita, ki se veliko uporablja v različnih elektronskih napravah zaradi svojih magnetnih lastnosti. Soli imajo lahko različne sestave in različno vsebnost vode, odvisno od načina sinteze.

Teoretičnih nalog je bilo letos devet, zato je bilo časovno omejeno tekmovanje zelo naporno.

Prva naloga je bila iz kvantne kemije: dijaki so morali narediti razne izračune za poliene na osnovi modela delca v škatli, na primer energijo fotona, ki je potrebna za prehod elektrona iz HOMO v LUMO, določiti število konjugiranih dvojnih vezi v polienu in podobno.

Druga naloga je bila analiza krožnega procesa za plin didušikov tetroksid, ki disociira v ravnotežni reakciji $\text{N}_2\text{O}_4(\text{g}) \rightleftharpoons 2\text{NO}_2(\text{g})$. Najprej so izračunali ΔG^0 (298K), ΔH^0 in ΔS^0 , nato pa še delo, ki je potrebno za reverzibilno adiabatno ekspanzijo določene množine tega plina.

Tretja naloga je bila sinteza višjevalentnih srebrovih spojin (od +2 do +5), ki so zaradi težnje po redukciji nestabilne in zato manj pogoste. Višjevalentne srebrove spojine so zelo reaktivne, in jih lahko sintetiziramo iz Ag(I) spojin z elektrokemijskimi oksidacijami, ali pa s kemijskimi oksidacijami z

uporabo močnih oksidantov. Dijaki so morali napisati reakcije nastanka teh spojin, ugibati njihovo sestavo, in z uporabo termokemijskih podatkov izračunati mrežno disociacijsko notranjo energijo za na primer $\text{Ag}^{\text{I}}\text{Ag}^{\text{III}}\text{O}_2$ in za $\text{Cu}^{\text{II}}\text{O}$. Poleg tega so morali sklepati na magnetne lastnosti, in izračunati število nesparjenih elektronov z uporabo enačbe za efektivni dipolni moment.

Tema četrte naloge je bila Zeisejeva sol, $\text{K}[\text{PtCl}_3\text{C}_2\text{H}_4]$, ki je bila ena prvih organokovinskih spojin, odkrita leta 1827. Dijaki so morali urediti enačbe priprave te soli, okarakterizirati njen masni spekter, in napisati njeno strukturo ter strukture produktov pri reakciji te soli z različnimi kompleksi.

Peta naloga je bila kislinsko-bazno ravnotežje v vodni raztopini dveh šibkih monoprotičnih kislin. Dijaki so morali izračunati pH raztopine, pa stopnjo disociacije vsake od kislin v razredčeni raztopini in podobno.

Šesta naloga je bila študij hitrosti reakcije aril halogenidov z amini v prisotnosti katalizatorjev, ki je postala ena od najboljših metod za sintezo arilaminov Ar-NHR. Reakcija poteka v več stopnjah, dijaki pa so morali izpeljati hitrostno enačbo za reakcijo nastanka arilaminov z uporabo aproksimacije stacionarnega stanja, in izračunati red reakcije glede na vse reaktante.

V sedmi nalogi so morali določati strukture in stereokemijo spojin, ki nastajajo pri postopni sintezi artemizina iz izhodnih spojin v prisotnosti najrazličnejših reagentov.

Tema osme naloge je bil *Illicium verum*, ki ga običajno imenujemo *zvezdasti janež*. To je majhno zimzeleno drevo, ki ga gojijo v severovzhodnem Vietnamu. Plod se uporablja v tradicionalni medicini, in kot začimba za pripravo priljubljene juhe '*phở*'. Dijaki so morali določati strukture vmesnih spojin pri reakcijah $\text{C}_7\text{H}_{10}\text{O}_5$, ki so jo sintetizirali iz plodu zvezdastega janeža. Poleg tega so analizirali NMR spektre produktov anetola, ki je glavna sestavina eteričnega olja zvezdastega janeža. Anetol je sicer poceni prekursor za pripravo številnih farmacevtskih učinkovin.

Deveta naloga je bila reaktivnost tetrametiluram disulfida, ki se kaže kot uporaben reagent za pripravo funkcionalnih skupin na osnovi žvepla in dušika ter različnih heterociklov. Dijaki so morali proučevati mehanizem reakcij te spojine s primarnimi amini in nekatere kasnejše transformacije primarnih produktov, in prikazati strukture vmesnih spojin.

Naloge so bile predvsem obsežne, zato je bil predvsem premalo časa za reševanje. Kljub temu se je naša ekipa z njimi kar dobro spopadla. Na zaključni slovesnosti so bile podeljene medalje, sledila pa je slavnostna večerja vseh udeležencev z glasbo in plesom.

Leta 2015 bo olimpijada v Azerbejdžanu.

POLETNA ŠOLA KEMIJSKIH ZNANOSTI 2014

Poletna šola kemijskih znanosti 2014 je začela z delom 30.6.2014. Na Fakulteti za kemijo in kemijsko tehnologijo v Ljubljani smo gostili 16 slovenskih dijakin in dijakov. Poletno šolo organizira naša Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo v sodelovanju z Zvezo za tehnično kulturo Slovenije.

Poletno šolo sta v imenu fakultete otvorila prof. dr. Barbara Hribar Lee, prodekanja za študijske zadeve, in dr. Andrej Godec, vodja poletne šole. V imenu Zveze za tehnično kulturo Slovenije je udeleženske in udeležence pozdravil glavni tajnik Jožef Školč.



Po otvoritvi in predavanju o varnem delu v laboratoriju so udeleženci takoj pričeli z delom. Prvi dan je bila na vrsti delavnica iz organske kemije, v kateri so dijakinje in dijaki iz semen izolirali spojine s kontinuirno ekstrakcijo s Soxhletovim aparatom, in določevali nenasičene vezi s titracijo s halogeni in analizo z IR spektroskopijo. Takšni spojini sta naprimer *oleinska* in *linolenska* kislina, ki povečujeta odpornost organizma, zmanjšujeta razna vnetja in možnost pojavitve različnih tumorjev.

Sintetizirali in analizirali so tudi paracetamol, pa kafro in holesteril benzoat, ter preučili obnašanje tekočih kristalov pri taljenju. Delavnico je vodil dr. Janez Cerkovnik, pomagala pa mu je tehnična sodelavka Irena Povalej.



Drugi dan poletne šole so dijaki preživel na katedrah biokemije in za analizo kemijo. Delavnico biokemije je vodil Matevž Korenč, bila pa je forenzično obarvana. Udeleženci so izvedli kislinsko in encimsko koagulacijo mleka. Nato pa so izvedli kontrolo avtentičnosti ovčjega in kozjega mleka; zaradi nižje cene kravjega mleka proizvajalci ovčjega in kozjega sira in dobavitelji mleka mešajo ovčje ali kozje mleko s kravjim mlekom. Kontrola je zato potrebna tako zaradi kontrole surovin kot tudi za zaščito potrošnika, saj mora biti deklaracija na proizvodu v skladu z njegovo kvaliteto. Doda-

tek kravjega mleka pri proizvodnji ovčjega sira lahko ugotovimo s pomočjo protiteles, ki specifično vežejo goveje IgG. Na nitrocelulozno membrano so udeleženci najprej vezali proteine iz vzorca in blokirali prosta mesta na membrani z jajčnim albuminom. Nato so dodali protitelesa, ki reagirajo z govejimi IgG in so konjugirana z encimom peroksidazo (horseradish peroxidase – HRP). Peroksidaza katalizira oksidacijo 4-kloro-1-naftola do vijoličasto obarvanega produkta.



V delavnici iz analize kemije so udeleženci spoznali nekaj osnovnih kvalitativnih testov, s katerimi preverimo, ali so v vzorcu prisotni posamezni ioni. Nato so se seznanili z eno izmed atomskih spektroskopskih metod in jo uporabili za določitev vsebnosti mikroelementov bakra, cinka in mangana v vitaminsko-mineralni tableti. Delavnico iz analize kemije je vodila dr. Polonca Kralj, pomagala pa je Jolanda Furlan.

Naslednji dan sta bili na vrsti delavnici iz anorganske kemije in kemijskega inženirstva. V delavnici anorganske kemije so sintetizirali bis(glicinato)bakrov(II) monohidrat iz bakrovega(II) acetata in glicina. Najprej so udeleženci sintetizirali cis spojino, nato še trans. Posneli so IR spektra obeh sintetiziranih spojin, se spoznali s termično analizo in s pomočjo merjenja prevodnosti raztopin spojin ugotovili, kakšne vezi sprevladujejo v spojinah. Delavnico je vodila dr. Irena Kozjek Škofic, pomagal pa je Damjan Erčulj.

V delavnici iz kemijskega inženirstva so se udeleženci seznanili z eksperimentalnim merjenjem viskoznosti kompleksnih tekočin; delavnica je bila zelo sladka, saj so preučevali čokolado. Viskoznost čokolade je eden od pomembnih procesnih parametrov pri proizvodnji čokolade in močno vpliva na končne lastnosti, torej na njen okus. Udeleženci so opredelili temperaturno in strižno odvisnost viskoznosti različnih čokolad, ki so se razlikovale po vsebnosti kakavovega masla, torej tudi po namenu uporabe in okusu. Delavnico je vodila dr. Andreja Zupančič Valant, pomagal pa je Klemen Birtič.



V četrtek, 3.7.2014, smo zaključili poletno šolo. Na zaključni slovesnosti je udeležence v imenu fakultete pozdravila prof. dr. Barbara Hribar Lee, ter zatem še prof. dr. Radovan Stanislav Pejovnik, predsednik upravnega odbora Zotks.

Nato pa so dobile besedo udeleženke in udeleženci, ki so predstavili posamezne delavnice v poletni šoli.



Predstavitve so bile zelo dobre, vsebinske in jedrnate, včasih pa tudi duhovite. Na koncu so udeleženci dobili potrdila o udeležbi, prosili pa smo jih še, da izpolnijo vprašalnik v zvezi s poletno šolo. Med vtisi so navedli, da so bile delavnice zelo raznovrstne in zanimive. Pripombe pa so bile, da bi morale biti delavnice na isti lokaciji (to se bo kmalu uresničilo), da so nekatere delavnice preveč povezane s teorijo, in da je celodnevno »posedanje v laboratoriju težavno«.

Zahvaljujemo se sodelavkam in sodelavcem, ki so pripravili delavnice poletne šole; to so bili dr. Irena Kozjek Škofic, dr. Polona Kralj, dr. Andreja Zupančič Valant, dr. Janez Cerkovnik in Matevž Korenč. Pomagali so Jolanda Furlan, Irena Povalej, Damjan Erčulj in Klemen Birtič.

Vodja poletne šole je bil dr. Andrej Godec. Pri organizaciji pa sta pomagali še Maja Ramovš, FKKT, in Tjaša Toni; Zvezi za tehnično kulturo Slovenije se zahvaljujemo za pomoč pri organizaciji.

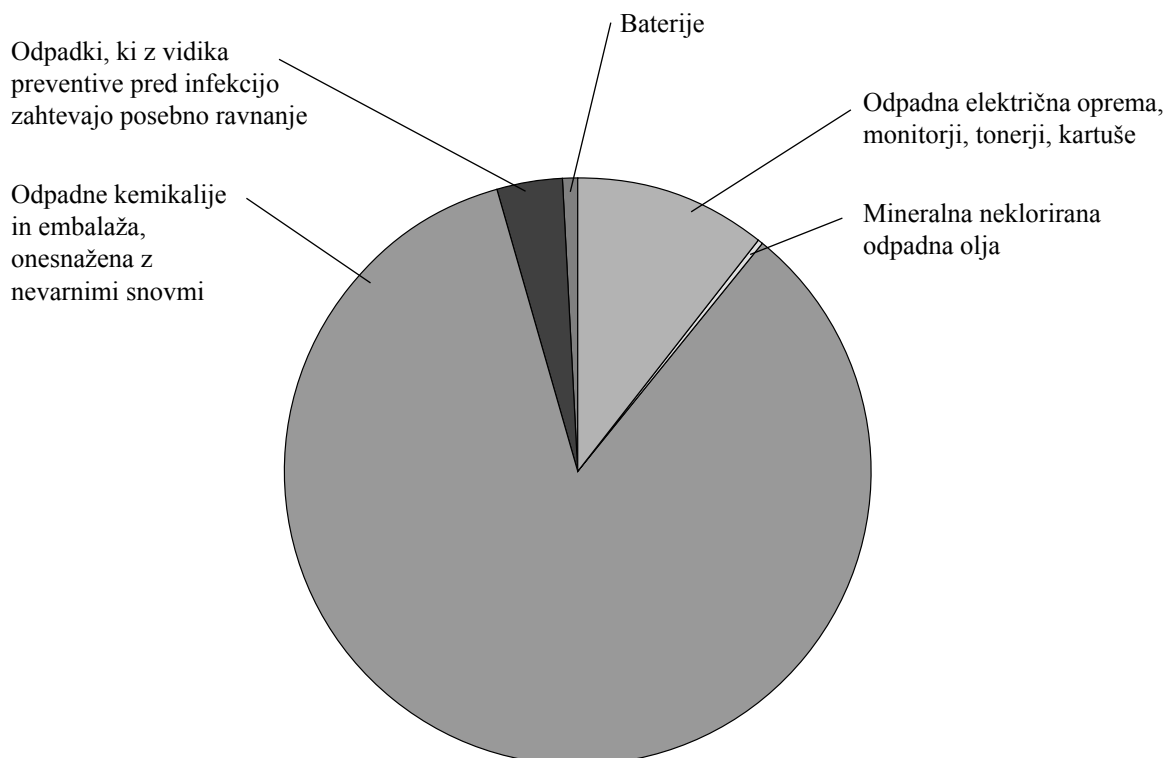
POROČILO O NEVARNIH ODPADKIH NA FAKULTETI V LETU 2014

V letu 2014 je bilo zbranih in odpeljanih 7,4 t nevarnih odpadkov, ki jih ločeno zbiramo po skupinah, navedenih v tabeli št. 1.

Vrsta nevarnega odpadka	Količina v kg
Odpadna električna oprema, monitorji, tonerji, kartuše	800
Mineralna neklorirana odpadna olja	5
Odpadne kemikalije in embalaža, onesnažena z nevarnimi snovmi	6287
Odpadki, ki z vidika preventive pred infekcijo zahtevajo posebno ravnanje	275
Baterije	47
Skupaj	7414

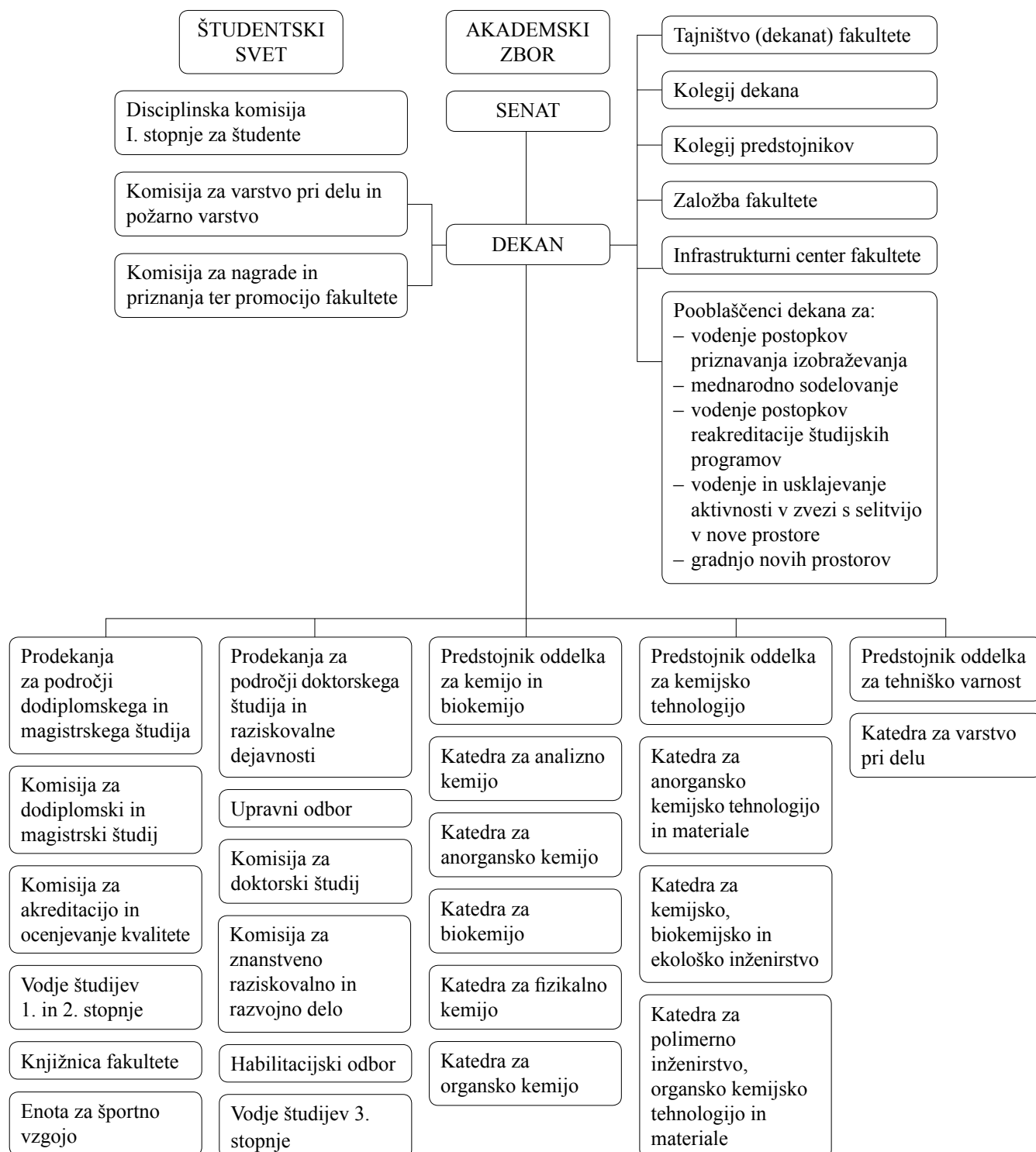
Tabela št. 1: Količine nevarnih odpadkov po vrsti odpadka

V primerjavi z obdobjem zadnjih štirih let (2010–2013) so bile količine odpadnih kemikalij bistveno večje (za 184%) zaradi selitve fakultete na novo lokacijo. V naslednjem letu pričakujemo količine na povprečni ravni obdobja 2010–2013, to je okoli 4t. Delež posameznih odpadkov prikazuje spodnji grafikon:



Na lokaciji Večna pot 113 poleg nevarnih odpadkov ločeno zbiramo tudi papir in karton ter plastično embalažo. V štirih mesecih smo zbrali 6t papirja in kartona ter 250 kg plastične embalaže. Velike količine odpadnega papirja in kartona v so 4 mesecih nastale zaradi selitve, saj se vsa manjša oprema selila v kartonskih škatlah.

ORGANIZACIJSKA SHEMA



DIPLOME, MAGISTERIJI IN DOKTORATI V LETU 2014

DIPLOME – PREDBOLONJSKI PROGRAM

UNIVERZITETNI ŠTUDIJSKI PROGRAMI

KEMIJA

IME IN PRIIMEK	MENTOR	DATUM ZAKLJUČKA	NASLOV DIPLOME
Anita Andolšek	izr. prof. dr. Lucija Zupančič Kralj	27.03.2014	Vezava nekaterih kloriranih spojin na različne huminske kisline
Maša Benedičič	doc. dr. Krištof Kranjc	29.09.2014	2 <i>H</i> -piran-2-on z 2,4,5-trifluorofenilnim substituentom kot dien pri izbranih Diels-Alderjevih reakcijah
Jaka Brzin	doc. dr. Črtomir Podlipnik	30.09.2014	Strukturno podprto reševanje inhibitorjev glikogen sintaze kinaze (GSK-3B)
Nejc Cvilak	prof. dr. Anton Meden	11.02.2014	Sinteza novih aluminijevih kovino-organskih materialov za shranjevanje plinov
Klara Čebular	prof. dr. Branko Stanovnik	04.09.2014	Sinteza substituiranih imidazo[1,2-a]-, pirazolo[1,5-a]- in s-triazolo[1,5-a]pirimidinov ter njihovih bromiranih derivatov
Ornela Čebulec	prof. dr. Marjan Veber somentorica: doc. dr. Nives Kovač	03.07.2014	Kemična karakterizacija zooplanktona
Mateja Čubej	izr. prof. dr. Helena Prosen	25.09.2014	Razvoj metod za določitev klora in žvepla v trdnem recikliranem gorivu
Špela Erman	doc. dr. Irena Kralj Cigić	17.09.2014	Določevanje citostatikov v vodah s tekočinsko kromatografijo in masno spektrometrijo
Polona Fras	prof. dr. Jurij Lah	13.03.2014	Termodinamika denaturacije antitoksina VapB
Kaja Gosak	izr. prof. dr. Marjan Jereb	25.02.2014	Elektrofilna uvedba trifluorometilne skupine v fenole
Metka Gostečnik	prof. dr. Andrej Jamnik	05.06.2014	Modeliranje koloidne mešanice z adhezivnim medmolekulskim potencialom
Ema Javornik	prof. dr. Barbara Hribar Lee	04.11.2014	Parcialni molski volumen aminokislin v vodni raztopini magnezijevega klorida pri temperaturah (278,15, 288,15, 298,15 in 308,15) K
Andrej Jerič	izr. prof. dr. Matevž Pompe	07.05.2014	Določevanje in opazovanje migracije heksanala v kartonski embalaži
Sarah Klemenak	prof. dr. Branko Stanovnik	29.09.2014	Sinteze in pretvorbe pirazolo[1,5-a]-, imidazo[1,2-a]- in [1,2,4]triazolo[1,5-a]pirimidinov
Darja Koklič	prof. dr. Marjan Veber	14.10.2014	Ekstrakcija kovinskih kelatov s surfaktanti
Petra Metul	prof. dr. Ksenija Kogej	18.04.2014	Vpliv koncentracije NaCl na dimenzije in obliko verig ataktične polimetakrilne kisline v vodnih raztopinah
Anja Miklavčič	izr. prof. dr. Matevž Pompe	03.07.2014	Določanje taksifolina v ribjih proizvodih
David Miličević	izr. prof. dr. Matevž Pompe	21.03.2014	Sinteza in določevanje kovinskih glicinatov s tekočinsko kromatografijo
Jože Mužerlin	prof. dr. Branko Stanovnik	03.07.2014	Sinteza in reaktivnost pirazolo[1,5-a]-, imidazo[1,2-a]- in triazolo[1,5-a]pirimidinov iz substituiranih 3-(dimetilamino)prop-2-en-1-onov
Ema Novinec	prof. dr. Peter Bukovec somentor: izr. prof. dr. Albin Pintar	19.06.2014	Študij imobiliziranih TiO ₂ nanodelcev v procesu heterogene fotokatalitske oksidacije onesnažila bisfenola A
Stefan Ognjanović	izr. prof. dr. Helena Prosen	10.09.2014	Razvoj SPE-HPLC metode za določitev vsebnosti in obstojnosti neonikotinoidov v tleh
Tjaša Opačak	izr. prof. dr. Drago Kočar	30.09.2014	Določanje prostega formaldehida v sečninsko-melaminsko formaldehidni smoli po dodatku lovilcev prostega formaldehida
Danijela Pešl	prof. dr. Marjan Veber	12.12.2014	Določitev porazdelitve velikosti delcev amoksicilina z uporabo NIR soektroskopije

Kim Pjevović	prof. dr. Marjan Veber somentorica: doc. dr. Nives Kovač	11.06.2014	Kemijska karakterizacija mikrobne plasti Sečoveljskih solin
Matic Poberžnik	izr. prof. dr. Tomaž Urbič	05.09.2014	Kooperativni efekti pri hidrataciji monovalentnih ionov
Monika Podgoršek	doc. dr. Irena Kralj Cigić	19.06.2014	Razvoj in validacija HPLC metode za določanje vsebnosti mikofenolat mofetila
Anita Podgoršek	doc. dr. Irena Kralj Cigić	19.06.2014	Vsebnost glicerola, glukoze in maltoze v fermentacijski brozgi
Miha Purg	prof. dr. Janez Plavec somentor: doc. dr. Janez Mavri	06.01.2014	Molekularna simulacija razgradnje serotonina z monoamin-oksido A
Alenka Pušar	doc. dr. Irena Kralj Cigić	11.02.2014	Analiza rastlinskih olj z dvodimenzionalno tankoplastno in plinsko kromatografijo
Jan Robin	izr. prof. dr. Marjan Jereb	29.05.2014	Elektrofilno trifluorometiloliranje tiolov
Petra Rusjan	prof. dr. Alojz Demšar	13.03.2014	Priprava in karakterizacija termokromnega vanadijevega(IV) oksida
Sara Savović	prof. dr. Marjan Veber	07.05.2014	Študij sorpcije izbranih ionov na oglju z uporabo ionske kromatografije
Špela Smrkolj	izr. prof. dr. Drago Kočar	05.06.2014	Validacija metode za določanje askorbinske in dehidro-askorbinske kisline v zmesi askorbinska kislina-škrob
Miha Starc	izr. prof. dr. Helena Prosen	22.04.2014	Razvoj metode za določevanje neonicotinoïdov v vodnih vzorcih
Maks Sušnik	prof. dr. Anton Meden	25.09.2014	Kvalitativna in kvantitativna fazna analiza kompozitov iz odpadnega mulja in lesnega pepela
Tim Tome	izr. prof. dr. Drago Kočar	12.05.2014	Določevanje glioksalne kisline v suspenziji nanodelcev železovega oksida
Tomaž Tomše	izr. prof. dr. Marjan Jereb somentor: izr. prof. dr. Albin Pintar	20.10.2014	Piroliza polietilena v prisotnosti modificiranih naravnih aluminosilikatov kot katalizatorjev
Tina Trobec	izr. prof. dr. Helena Prosen	12.05.2014	Primerjava metod za določanje skupnih fenolnih spojin v zeliščnih čajih
Lea Zajec	prof. dr. Marjan Veber	22.12.2014	Optimizacija analiznega postopka za določanje izotopskega razmerja ⁸⁷ Sr/ ⁸⁶ Sr v okoljskih vzorcih s kvadrupolnim ICP-MS
Žiga Zupanek	izr. prof. dr. Helena Prosen somentorica: prof. dr. Ksenija Šinigoj Gačnik	05.09.2014	Optimizacija ekstrakcije in kromatografske ločbe za določanje pomirjeval v različnih živalskih vzorcih

BIOKEMIJA

IME IN PRIIMEK	MENTOR	DATUM ZAKLJUČKA	NASLOV DIPLOME
Alenka Bombač	doc. dr. Barbara Ostanek somentor: prof. dr. Branko Zakotnik	19.08.2014	Določanje mutacij na genih c-KIT in PDGFRA pri bolnikih z gastrointestinalnimi stromalnimi tumorji
Lea Colja	prof. dr. Brigita Lenarčič	05.09.2014	Priprava in karakterizacija rekombinante domene LIM4 proteina FHL2
Mira Dolenc	prof. dr. Matic Legiša	18.11.2014	Priprava rekombinantnega proteinskega sistema za spremljanje proteolitične aktivnosti v celicah glive <i>Aspergillus niger</i>
Sašo Hojnik	doc. dr. Irena Kralj Cigić somentor: doc. dr. Blaž Cigić	12.12.2014	Karakterizacija aminopeptidazne aktivnosti v ekstraktih fižola in redkve
Jelena Koron	doc. dr. Elizabeta Tratar Pirc	10.07.2014	Določanje antioksidativnih lastnosti paladijevih ksanturenatov z uporabo metode DPPH
Klemen Kržišnik	izr. prof. dr. Tomaž Urbič	11.04.2014	Porazdelitvene funkcije aminokislin v strukturah proteinov
Zorica Latinović	prof. dr. Igor Križaj	26.09.2014	Primerjalna proteomika strupov gada in modrasa ter antivenomika modrasovega strupa
Urška Martinuč	izr. prof. dr. Marko Dolinar	03.02.2014	Primerjava metod za določanje nečistoč med zaključnimi postopki izolacije plazmidnega vektorja pMD204 in analiza s histaminskimi kromatografskimi monoliti

Špela Medic	prof. dr. Janez Plavec	27.02.2014	Strukturna študija G-kvadrupleksa protipripronskega aptamera
Špela Mevec	prof. dr. Jurij Svete	10.07.2014	Regioselektivna sinteza N-alkiliranih 7-oksopirazolo[1,5-a]pirimidin-3-karboksamidov
Mateja More	prof. dr. Tamara Lah Turnšek somentor: prof. dr. Joško Osredkar	28.11.2014	Klinična uporabnost tumorskih označevalcev v diagnostiki raka jeter
Saška Polanc	doc. dr. Barbara Ostanek somentor: prof. dr. Joško Osredkar	24.04.2014	Klinični pomen določanja serumskih koncentracij srčnega proteina, ki se veže na maščobne kisline (H-FABP), pri bolnikih s sumom na srčni infarkt
Žan Rojc	prof. dr. Radovan Komel somentor: prof. dr. Alja Videtič Paska	05.06.2014	Preiskava polimorfizmov v genu za DRD2 pri žrtvah samomora
Urška Slapšak	prof. dr. Janez Plavec somentorica: prof. dr. Kristina Djinović Carugo	29.08.2014	Določanje struktur apo in holo oblike CaM domene α -aktinina 1 z NMR spektroskopijo
Karmen Stopar	prof. dr. Jurij Svete	10.07.2014	Sinteza in atropizomerija derivatov 5-(2-nitrofenil)-1H-pirazol-4-karboksilne kisline
Janvit Teržan	doc. dr. Irena Kozjek Škofic	25.03.2014	Primerjava protimikrobnih lastnosti plasti TiO ₂ in TiO ₂ dopiranih z železom
Simona Winkler	doc. dr. Andreja Žgajnar Gotvajn	16.09.2014	Vpliv temperature in pH na učinkovitost dveh biocidnih pripravkov za zaščito stenskih barv
Petra Zorič	doc. dr. Marko Novinec	02.07.2014	Kinetika inhibicije holinesteraz z nekaterimi karabamatnimi inhibitorji

KEMIJSKO INŽENIRSTVO

IME IN PRIIMEK	MENTOR	DATUM ZAKLJUČKA	NASLOV DIPLOME
Klemen Arlič	izr. prof. dr. Polona Žnidaršič Plazl	11.07.2014	Integrirana separacija proteinov v sistemu miniaturiziranih naprav
Darja Bajc	doc. dr. Andreja Žgajnar Gotvajn	06.03.2014	Vrednotenje vpliva evtektičnih topil na višje rastline
Bine Bezjak	prof. dr. Janez Levec	25.03.2014	Vpliv atmosfere, vlažnosti in velikosti granul vhodnega materiala na hitrost nastajanja faze rutila v laboratorijski peči za kalcinacijo
Gregor Blatnik	doc. dr. Klementina Zupan	18.11.2014	Priprava materiala na osnovi lantan, stroncij, mangan, krom oksida s koprecipitacijo
Sven Burnik	izr. prof. dr. Marjan Marinšek	30.06.2014	Vpliv plazemske obdelave grafitnega kompozita na adhezijo kovinskega nanosa
Sabina Dolar	doc. dr. Andreja Žgajnar Gotvajn	13.10.2014	Uporaba male vodne leče za fitoremediacijo površinskih voda, onesnaženih s kromom
Luka Fideršek	izr. prof. dr. Marjan Marinšek	21.03.2014	Morfološka analiza pigmentnih delcev titanovega dioksida pripravljenih po sulfatnem postopku
Matej Gantar	izr. prof. dr. Marjan Marinšek	26.09.2014	Soobarjanje oksida La-Sr-Cr-Mn in njegova karakterizacija
Aleš Golja	doc. dr. Blaž Likozar	26.09.2014	Vpliv procesnih pogojev na sintezo poliuretanskega prepolimera
Matic Grojzdek	doc. dr. Blaž Likozar	26.09.2014	Hidrodeoksigenacija levulinke kisline z uporabo heterogenega katalizatorja na osnovi niklja in molibdena
Ivana Herak	prof. dr. Igor Plazl	11.09.2014	Ozonacija antibiotika v mikroreaktorju
Tamara Hercigonja	prof. dr. Marin Berovič	05.09.2014	Priprava kiralnih kislin iz prokiralnih estrov in nitrilov s pomočjo biokataliznih reakcij
Eva Jelen	izr. prof. dr. Marjan Marinšek	30.09.2014	Odžig ogljika z anodnega materiala v visokotemperaturnih gorivnih celicah
Anja Jug	izr. prof. dr. Polona Žnidaršič Plazl	05.09.2014	Vpliv mikroniziranih delcev na proizvodnjo ekstracelularnih encimov gliv <i>Gloeophyllum trabeum</i> in <i>Pleurotus ostreatus</i>
Ivor Jurin	doc. dr. Blaž Likozar	30.06.2014	Primerjava delovanja nizko- in visokotemperaturnih gorivnih celic s protonsko prevodnimi membranami
Aleš Kamnikar	prof. dr. Aleksander Pavko	13.10.2014	Primerjava ambr TM mikrobioreaktorskega sistema s 5L laboratorijskim mešalnim bioreaktorjem

Ana Klančič	izr. prof. dr. Urška Šebenik	06.03.2014	Funkcionalizacija sojinega olja
Eva Kovič	prof. dr. Janez Levec	21.03.2014	Sočasno utekočinjanje in hidroleoksidacija lignocelulozne biomase v reaktorju z goščo
Blaž Kramer	prof. dr. Igor Plazl	06.02.2014	Študij transportnih pojavov pri procesu depolimerizacije najlona 6
Ema Lampelj	doc. dr. Andreja Žgajnar Gotvajn	30.10.2014	Elektrokoagulacija tekočih odpadkov
Marko Lukek	doc. dr. Andreja Žgajnar Gotvajn	06.03.2014	Vrednotenje vpliva izbranih evtektičnih topil na biološko čistilno napravo
Anja Lukić	prof. dr. Aleksander Pavko	30.06.2014	Karakterizacija nekaterih stacionarnih faz pri ločevanju modelnega sistem fenol-toluen
Aljaž Medved	prof. dr. Janvit Golob	17.11.2014	Adsorpcija hlapnih organskih topil na silikatnih adsorbentih
Alja Novak	doc. dr. Blaž Likozar	27.05.2014	Nadgradnja utekočinjenega lesa s kovinskimi prahovi
Borut Orel	izr. prof. dr. Polona Žnidaršič Plazl	11.09.2014	Razvoj aptamernih preparativnih orodij na magnetnih nosilcih za detekcijo ohratoksina A
Damjan Jan Pavlica	doc. dr. Črtomir Podlipnik	27.05.2014	Študija retenzijskih lastnosti metil estrov maščobnih kislin pri temperaturno programirani plinski kromatografiji
Karmina Špilar	doc. dr. Blaž Likozar	26.09.2014	Sinteza in uporaba CuZnGaOx katalizatorja za parni reforming metanola pri nizkih temperaturah
Ana Vahčić	doc. dr. Blaž Likozar	05.09.2014	Deoksigenacija modelnih komponent in piroliznega olja s kovinskimi prahovi
Alenka Zeme	prof. dr. Matjaž Krajnc	14.03.2014	Sinteza blokopolimerov metilmetakrilata in metakrilne ali akrilne kisline z radikalsko polimerizacijo z reverzibilnim prenosom verige z adicijo in fragmentacijo za oplaščenje nanodelcev cinkovega(II) oksida
Grega Zupanec	doc. dr. Andreja Zupančič Valant	18.11.2014	Razvoj in uporaba metode za vrednotenje začetne lepilne trdnosti
Jasmina Žagar	prof. dr. Aleksander Pavko	21.03.2014	Vpliv mediatorja na razbarvanje barvila RO16 z encimi glive <i>Dichomitus squalens</i>
Tadej Žumbar	izr. prof. dr. Marjan Marinšek	09.07.2014	Priprava zeolitnih granulotov brez veziv za adsorpcijo plinov

VISOKOŠOLSKA ŠTUDIJSKA PROGRAMA

KEMIJSKA TEHNOLOGIJA

IME IN PRIIMEK	MENTOR	DATUM ZAKLJUČKA	NASLOV DIPLOME
Primož Brifah	izr. prof. dr. Polona Žnidaršič Plazl	11.09.2014	Priprava in uporaba mikrofibrilirane celuloze v proizvodnji papirja
Andreja Cemič	doc. dr. Franc Perdih	08.05.2014	Derivatizacija piridin-2,6-karboksilne kisline za pripravo cinkovih koordinacijskih spojin s potencialnimi antidiabetičnimi lastnostmi
Kristina Dražumerič	doc. dr. Bojan Kozlevčar	24.06.2014	Kobaltove spojine z vanilinom in vanilinsko kislino
Primož Galič	prof. dr. Janez Košmrlj	23.04.2014	Spremljanje sinteze atorvastatina z inprocesnim IR in HPLC
Tea Gorenc	izr. prof. dr. Helena Prosen	10.10.2014	Razvoj analizne metode za določevanje sorodnih substanc klopidogreljevega hidrogensulfata z uporaba superkritične kromatografije
Kristina Gorišek	doc. dr. Nives Kitanovski	05.03.2014	Bakrove spojine z metilnim estrom bis(3,5-dimetilpirazol-1-il)ocetne kisline
Goran Jezerčič	izr. prof. dr. Matevž Pompe	22.05.2014	Kvalifikacija tekočinskih kromatografov visoke ločljivosti pri kontroli kakovosti zdravil
Barbara Koželjnik	doc. dr. Andreja Žgajnar Gotvajn	25.09.2014	Zakonodaja na področju ravnanja z odpadnim prahom livarn železa in izdelava ocene odpadka
Tone Krašovec	doc. dr. Ana Lakota	09.05.2014	Optimizacija sinteze intermedata za farmacevtsko učinkovino

Maja Kukić	prof. dr. Matjaž Krajnc	27.02.2014	Kinetika zamreževanja benzoksazina na osnovi bisfenola A
Tina Likar	doc. dr. Franc Požgan	27.02.2014	Raziskave reakcij prekurzorjev v barvah za lase
Petra Makorič	izr. prof. dr. Nataša Gros	13.01.2014	Mikrodifuzija amonijaka v čipu
Petra Manojlović	doc. dr. Irena Kralj Cigić	30.09.2014	Določanje hidroksiprolina v mesu in mesnih izdelkih
Polona Mikešič	doc. dr. Andreja Žgajnar Gotvajn	24.01.2014	Karakterizacija deponijskih izcednih vod obstoječih in novih komunalnih deponij
Tjaša Pečnik	doc. dr. Klementina Zupan	20.06.2014	Določanje zveznosti faz v anodnih kompozitih za srednje-temperaturne keramične gorivne celice
Ema Petek	doc. dr. Krištof Kranjc	03.07.2014	Cikloadicija stirena na 2H-piran-2-one in uporaba dobljenih cikloheksadienskih aduktov za nadaljnje pretvorbe
Jože Plahuta	doc. dr. Ana Lakota	29.09.2014	Primerjava vrednotenja kontejnerskega mešanja s tekočinsko kromatografijo in metodo bližnje infrardeče spektroskopije
Iris Štucin	prof. dr. Marjan Veber	17.04.2014	Vpliv organskih komponent pri meritvah z atomsko emisijsko in masno spektrometrijo z vzbujanjem v induktivno sklopljeni plazmi
Nika Vrlinič	doc. dr. Andrej Pevec	08.05.2014	Strukturna pestrost karboksipiridinijevih heksafluoridotitanatov
Katja Žagar	doc. dr. Franc Perdih	19.03.2014	Bakrove, cinkove in srebrove koordinacijske spojine s 4,4,4-trifluoro-1-fenilbutan-1,3-dionatnim ligandom

VARSTVO PRI DELU IN POŽARNO VARSTVO

IME IN PRIIMEK	MENTOR	DATUM ZAKLJUČKA	NASLOV DIPLOME
Sara Berk	doc. dr. Mitja Robert Kožuh	24.06.2014	Proces ravnanja z odpadnimi zdravili kot nevarnimi odpadki
Suzana Brajer	doc. dr. Jože Šrekl	28.02.2014	Varno delo kuharjev in natakarjev
Vanja Čokorilo	pred. dr. Aleš Jug	28.02.2014	Neformalne oblike usposabljanja na področju varstva pred požarom
Matej Elsner	doc. dr. Boris Jerman	30.01.2014	Stroj za recikliranje električnih vodnikov
Vesna Fajon	doc. dr. Mitja Robert Kožuh	28.02.2014	Varno delo v laboratoriju
Miran Gabrijelčič	doc. dr. Mitja Robert Kožuh	24.07.2014	Problemi hrupa v cementni industriji
Janja Golob	doc. dr. Barbara Novosel	17.10.2014	Prašne eksplozije v prehrabeni industriji
Ana – Marija Horvat	doc. dr. Barbara Novosel	24.06.2014	Varnostni pregled fizikalno - kemijskega laboratorija
Urban Hren	pred. dr. Aleš Jug	24.07.2014	Operativni postopki gasilskih enot v dvocevnih cestnih predorih na odseku Ljubljana Celje
Irena Jermančič	doc. dr. Mitja Robert Kožuh	17.10.2014	Postopki pridobitve okoljevarstvenega dovoljenja in stroški obratovanja za odlagališče nenevarnih odpadkov Globoko
Tomaž Juršič	pred. dr. Aleš Jug	24.09.2014	Zunanji dejavniki pri pooglenitvi lesa, ki kažejo na varno uporabo pri gasilskih intervencijah
Klemen Kerpan	pred. dr. Aleš Jug	24.06.2014	Gorljivost in požarna varnost detajlov termoizolacijskih sistemov
Sonja Keršmanc	pred. dr. Aleš Jug	25.04.2014	Gašenje naprav pod napetostjo
Matjaž Korošec	pred. dr. Aleš Jug	30.01.2014	Upoštevanje zahtev za varstvo okolja med gasilskimi intervencijami
Aleksander Kramar	pred. dr. Aleš Jug	24.07.2014	Varna uporaba metana in propan - butana v objektih
Maja Križnar	pred. dr. Aleš Jug	24.09.2014	Portalno vodenje intervencij v predoru Karavanke
Tanja Lončar	doc. dr. Marija Molan	27.03.2014	Vpliv stresa na zaposlene v javnem zavodu RTV Slovenija
Lucija Pecko	doc. dr. Jože Šrekl	17.10.2014	Varstvo pred požarom na gradbiščih
Miran Praznik	pred. dr. Aleš Jug	20.11.2014	Organizacijsko tehnični ukrepi ob izrednih razmerah na zaokroženem gospodarskem območju Ravne na Koroškem

Andrej Rogelja	pred. dr. Aleš Jug	24.07.2014	Gašenje požarov v naravi na območjih neeksploziranih ubojnih sredstev
Damjan Rožencvet	doc. dr. Jože Šrekl	19.08.2014	Pregledi in preizkusi otroških igrišč in igral v podjetju Sprinkler, Grobelno
Katarina Rutar	doc. dr. Mitja Robert Kožuh	24.07.2014	Primerjava obremenjenosti s hrupom na dveh različnih delovnih mestih
Martina Škarja	doc. dr. Marija Molan	17.10.2014	Poklicno usmerjanje za občino Šentrupert
Veter Matija Učakar	prof. dr. Marjan Bilban	11.12.2014	Program promocije zdravja v podjetju Iskra ISD – Livarna d.o.o.
Katja Velikonja	doc. dr. Barbara Novosel	17.10.2014	Nevarnost neeksploziranih ubojnih sredstev v Sloveniji
Sandra Zupan	prof. dr. Marjan Bilban	07.07.2014	Promocija zdravja na delovnem mestu - projekt zdravje za posavje
Petra Žerdin	doc. dr. Barbara Novosel	24.06.2014	Plinske in prašne eksplozije ter protieksplozijska zaščita
Blaž Židanek	pred. dr. Aleš Jug	27.03.2014	Možnost notranjega napada gasilskih enot v požarnem načrtu

ZNANSTVENI MAGISTERIJI – PREDBOLONJSKI PROGRAM

KEMIJA

IME IN PRIIMEK	MENTOR	DATUM ZAKLJUČKA	NASLOV DIPLOME
Blaž Vidmar	izr. prof. dr. Helena Prosen	30.06.2014	Stabilnost zmesi ibuprofena in natrijeve soli omeprazola v prisotnosti nekaterih farmacevtsko pomembnih pomožnih snovi
Margita Gal	izr. prof. dr. Helena Prosen	19. 12.2014	Razvoj in validacija metode za določanje nečistot v učinkovini mefenoksalonu

DOKTORATI – PREDBOLONJSKI PROGRAM

KEMIJA

IME IN PRIIMEK	MENTOR	DATUM ZAKLJUČKA	NASLOV DIPLOME
Boštjan Gabor	doc. dr. Aleš Štrancar somentorica: izr. prof. dr. Lucija Zupančič Kralj	05.12.2014	Razvoj analitskih monolitnih kolon za ločevanje plazmidne DNA in proteinov
Giovanna Piantanida	izr. prof. dr. Matija Strlič	06.01.2014	Vibracijske spektroskopske metode za karakterizacijo črnih in njihovih interakcij s papirjem
Tanja Trafela	izr. prof. dr. Matija Strlič	06.01.2014	Karakterizacija papirja s spektroskopskimi metodami in kemometrično obdelavo podatkov

MATERIALI

IME IN PRIIMEK	MENTOR	DATUM ZAKLJUČKA	NASLOV DIPLOME
Tina Skalar	prof. dr. Jadran Maček	20.03.2014	Sinteza materialov za gorivne celice s trdnim elektrolitom na osnovi cerijevega oksida, dopiranega s samarijem

KEMIJSKO INŽENIRSTVO

IME IN PRIIMEK	MENTOR	DATUM ZAKLJUČKA	NASLOV DIPLOME
Alen Kljajić	prof. dr. Radovan Stanislav Pejovnik	11.07.2014	Razvoj in uporaba emulzijskih sistemov za selektivno kristalizacijo organskih spojin v kemijski industriji
Maja Šoštarich	prof. dr. Janvit Golob somentor: doc. dr. Dušan Klinar	06.03.2014	Raziskave tvorbe lipidov z mikroalga <i>Chlorella vulgaris</i> v bioreaktorju

UNIVERZITETNI PODIPLOMSKI ŠTUDIJSKI PROGRAM VARSTVA OKOLJA

IME IN PRIIMEK	MENTOR	DATUM ZAKLJUČKA	NASLOV DIPLOME
Mojca Loncnar	prof. dr. Peter Bukovec somentor: prof. dr. Jakob Lamut	27.06.2014	Vpliv hlajenja na izluževalne karakteristike žlinder

DIPLOME – BOLONJSKI PROGRAM

BOLONJSKI PROGRAMI 1. STOPNJE

UNIVERZITETNI ŠTUDIJSKI PROGRAM KEMIJA

IME IN PRIIMEK	MENTOR	DATUM ZAKLJUČKA	NASLOV DIPLOME
Irena Abramovič	izr. prof. dr. Drago Kočar	30.09.2014	Basal-plane functionalisation of chemically-exfoliated molybdenum disulphide by diazonium salts
Varja Božič	doc. dr. Matjaž Bončina	19.09.2014	Vpliv zamenjave timinov z uracili na termodinamsko stabilnost G-kvadrupleksov DNK
Sandi Brudar	doc. dr. Iztok Prislan	17.09.2014	Vpliv pH na termično denaturacijo albumina in krvne plazme
Jure Cerar	doc. dr. Matija Tomšič	10.09.2014	Strukturne raziskave gelirajočih polimernih raztopin z metodo ozkokotnega rentgenskega sipanja
Ema Demšar	prof. dr. Slovenko Polanc	15.09.2014	Sinteze novih analogov kombretastina A-4
Jernej Ekar	prof. dr. Boris Šket	10.09.2014	Nitro hidroksi disubstituirani kurkuminski analogi: sinteza, bromiranje in priprava BF ₂ kompleksov
Primož Gabrovšek	doc. dr. Barbara Modec	16.09.2014	Sinteza in karakterizacija spojin z W ₂ Cl ₉ 3- ionom
Kristina Gavranich	doc. dr. Bojan Kozlevčar	10.09.2014	Cinkove spojine s heksanojsko, heptanojsko in oktanojsko kislino
Evelin Gruden	doc. dr. Marija Zupančič	10.09.2014	Možnost uporabe biooglja kot sredstva za oplemenitenje degradiranih področij
Damir Hamulić	doc. dr. Bogdan Štefane	10.09.2014	Sinteza 8-halokinolinov
Rok Hočevnar	doc. dr. Franc Požgan	10.09.2014	Sinteza multiarilnih sistemov preko aktivacije C-H vezi
Patricija Hribar	doc. dr. Andrej Pevec	10.09.2014	Reakcije tiosemikarbazidov z nekaterimi kovinskimi ioni
Tanja Hrovat	izr. prof. dr. Helena Prosen	11.09.2014	Meje zaznave nitroimidazolov v odvisnosti od različnih detektorjev na niz diod
Tina Kapitler	doc. dr. Nina Lah	08.09.2014	Zasledovanje reakcij bakrovega acetata s piridinskimi alkoholi s spektroskopsko titracijo
Gorazd Koderman Podboršek	doc. dr. Irena Kozjek Škofic	04.09.2014	Priprava prevodnih plasti platine
Jožica Koračin	doc. dr. Elizabeta Tratar Pirc	20.06.2014	Določanje anaerobne biorazgradljivosti škrobne plastike
Anja Kristl	izr. prof. dr. Matevž Pompe	04.09.2014	Proučevanje separacijskih mehanizmov pri ionski kromatografiji
Jure Kuhar	prof. dr. Marija Bešter Rogač	04.09.2014	Lastnosti mešanih topil: 1,2-dimetoksietan - voda
Lovel Kukuljan	doc. dr. Krištof Kranjc	10.09.2014	Sinteza 5,6-disubstituiranih indolov in njihovih graminskih derivatov

Nika Kurinčič	doc. dr. Romana Cerc Korošec	10.09.2014	Vpliv dodatka silicija na fazni prehod anatas- rutil
Tanja Lipec	prof. dr. Iztok Turel	10.09.2014	Sinteza in karakterizacija rutenijevih(II) kompleksov z 1,1,1-trifluoroacetilacetoni
Maja Makarovič	prof. dr. Alojz Demšar	10.09.2014	Sinteza trdne raztopine $0,7\text{BiFeO}_3-0,3\text{SrTiO}_3$
Alja Marolt	prof. dr. Jurij Lah	11.09.2014	Vpliv topila in ionov na tvorbo $d(\text{G}_4\text{T}_4\text{G}_4)_2$ kvadrupleksa
Bruno Aleksander Martek	doc. dr. Bogdan Štefane	10.09.2014	Optimizacija enantioselektivne biokatalizirane sinteze (S)-3-ciano-5-metilheksanojske kisline iz racemnega 2-izobutilsukcinonitrila z encimom nitrilaz
Sarah Merlini	prof. dr. Darko Dolenc	10.09.2014	Reakcije 2-(4-dietilamino-2-hidroksibenzoil)benzojske kisline z elektrofilnimi klorinimi reagenti
Mateja Mihelač	izr. prof. dr. Marjan Jereb	10.09.2014	Pretvorbe karbonilnih spojin pod pogoji brez topil
Urška Mohorič	prof. dr. Marjan Veber	18.09.2014	Določanje cinka, svınca, bakra in kadmija v prsti in bioloških vzorcih z atomsko absorpcijsko spektrometrijo
Tilen Oražem	doc. dr. Polonca Kralj	11.09.2014	Vpliv načina vzorčenja na določitev svınca, bakra in kadmija v prsti
Nina Pavlovič	doc. dr. Nives Kitanovski	12.09.2014	Sinteza in karakterizacija $\text{Cu}(\text{nia})_2\text{X}_2$ ($\text{nia} = \text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O}$, $\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}$)
Nejc Petek	prof. dr. Jurij Svete	04.09.2014	SINTEZA NOVIH (S)-1-(PIRAZOLO[1,5-a]PIRIMIDINIL)ETAN-1-AMINOV
Eva Petkovšek	izr. prof. dr. Matevž Pompe	09.07.2014	Določevanje biogenih aminov s kapilarno ionsko kromatografijo
Matic Pfeifer	doc. dr. Amalija Golobič	11.09.2014	Sinteza in karakterizacija zeolita MnFeS-1 v mikrovalovni pečici
Sebastian Pleško	doc. dr. Miha Lukšič	17.09.2014	Krioskopska določitev osmognih koeficientov nekaterih alkaljskih halogenidov
Uroš Prah	doc. dr. Irena Kozjek Škofic	10.09.2014	Vpliv fosforja na pretvorbo anatas v rutil
Simon Preložnik	doc. dr. Franc Perdiš	10.09.2014	Sinteza kelatnih ligandov za koordinacijo lantanovih ionov
Sara Ražman	izr. prof. dr. Helena Prosen	04.09.2014	Določanje spojin arome vina z metodo plinske kromatografije z masno spektrometrično detekcijo
Luka Rifelj	doc. dr. Janez Cerar	19.09.2014	Fulerenheksamalonska kislina: sinteza in teoretični študij njenih elektrostatskih interakcij s protiioni
Leja Rovan	izr. prof. dr. Helena Prosen	08.09.2014	Določitev koncentracije aktivnosti naravnih radionuklidov v pitnih vodah iz okolice bivšega rudnika urana Žirovski Vrh
Martin Rozman	doc. dr. Irena Kralj Cigič	04.09.2014	Primerjava potenciometrične in spektrofotometrične titracije anorganskih kislin
Petra Savandič	doc. dr. Polonca Kralj	11.09.2014	Določanje izbranih kovin v jedilnih semenih
Mateja Škratek	izr. prof. dr. Boris Čeh	10.09.2014	Koordinacijske spojine niklja(II) s tiocianatnim ligandom in N-donorskimi organskimi ligandi
Mojca Šušteršič	doc. dr. Elizabeta Tratar Pirc	10.09.2014	Identifikacija virov onesnaženja z monitoringom kanalizacijskega sistema
Žiga Tkalec	izr. prof. dr. Marjan Jereb	04.09.2014	Sinteza nekaterih ionskih tekočin
Matic Urlep	prof. dr. Marijan Kočever	10.09.2014	Sinteza izhodnih spojin za analoge talidomida
Mateja Vodlan	doc. dr. Saša Petriček	10.09.2014	Kompleksi vanadijevega(III) klorida s hidroksipiridini
Tilen Volčanšek	prof. dr. Marijan Kočever	10.09.2014	Mikrovalovna sinteza polisubstituiranih derivatov benzena
Dolores Zimerl	doc. dr. Uroš Grošelj	03.09.2014	Sinteza 5-substituiranih-1-benzil-4-okso-4,5-dihidro-1H-pirazolo[4,3-c]piridin-7-karbonsamidov iz dibenzil-1,3-acetondikarboksilata
Gašper Žakelj	izr. prof. dr. Tomaž Urbič	10.09.2014	Anomalije mešanic vode in metanola
Nataša Žigante	prof. dr. Marija Bešter Rogač	17.09.2014	Lastnosti mešanih topil: acetonitril - voda
Ana Župec	izr. prof. dr. Drago Kočar	27.01.2014	Validacija metode za določanje celotnih ogljikovodikov v odpadnih vodah z IR-spektrometrom

UNIVERZITETNI ŠTUDIJSKI PROGRAM BIOKEMIJA

IME IN PRIIMEK	MENTOR	DATUM ZAKLJUČKA	NASLOV DIPLOME
Matevž Ambrožič	doc. dr. Gregor Gunčar	14.07.2014	Načrtovanje kombinatorne knjižnice nanoteles
Teja Banič	prof. dr. Metoda Lipnik Štangelj	01.09.2014	Vpliv peroralnih antidiabetikov na za semikarbazid občutljivo amin oksidazo pri morskem prašičku v <i>in vitro</i> razmerah
Špela Baus	doc. dr. Martina Turk	15.09.2014	Ugotavljanje biotehnološko pomembnih ekstracelularnih encimskih aktivnosti pri izbranih glivah
Aleksander Benčič	prof. dr. Gregor Anderluh	15.09.2014	Izolacija, karakterizacija in označevanje mutantov listeriolizina O
Barbara Berki	izr. prof. dr. Polona Žnidaršič Plazl	15.09.2014	Imobilizacija mikroorganizmov v mikrokanale na osnovi magnetizma
Monika Biasizzo	doc. dr. Gregor Gunčar	02.09.2014	Priprava nanotelesa M79 in vezava na N-končno domeno proteina MLKL
Sandi Botonjič	prof. dr. Brigita Lenarčič	14.07.2014	Priprava in karakterizacija rekombinantnega α -AKTININA-4
Sara Draščič	izr. prof. dr. Marko Dolinar somentorica: doc. dr. Katarina Trebušak Podkrajšek	01.09.2014	Analiza gena MC4R v slovenski in slovaški populaciji bolezensko debelih otrok in mladostnikov
Maja Grdadolnik	doc. dr. Daša Zupančič	15.09.2014	Citotoksični učinek detonacijskih nanodiamantov na urotelijske celice RT4 in T24 <i>in vitro</i>
Ana Grom	doc. dr. Marko Novinec	02.09.2014	Identifikacija novih alosteričnih modifikatorjev katepsina L
Karmen Hrovat	prof. dr. Jurij Lah	01.09.2014	Toplotna denaturacija antitoksina CcdA
Daša Janeš	prof. dr. Nina Gunde Cimerman	04.09.2014	Izolacija in identifikacija kvasovk iz naravnih in antropogenih vodnih okolij
Janja Juvančič	prof. dr. Rok Romih	14.01.2014	Premeščanje epitelijskih Na ⁺ kanalčkov in K ⁺ kanalčkov Kir6.1 v površinskih urotelijskih celicah med krčenjem in raztezanjem sečnega mehurja.
Taja Karner	prof. dr. Uroš Petrovič	27.06.2014	Prenos alela MKT1 med sevoma <i>Saccharomyces cerevisiae</i> z različno vsebnostjo založnih lipidov
Ines Kerin	doc. dr. Gregor Gunčar	02.09.2014	Priprava nanotelesa M33 in vezava na N-končno domeno proteina MLKL
Dominik Kert	izr. prof. dr. Roman Jerala	14.07.2014	Vpliv mutacij aminokislin v hidrofobnem žepu proteina MD-2 na vezavo endotoksina
Mirjam Kmetič	prof. dr. Kristina Gruden	02.07.2014	Preverjanje medproteinske interakcije med protein kinazami MKK6 in MAPK4, MAPK6, MAPK12 ter MAPK13 pri krompirju
Tanja Korpar	izr. prof. dr. Tanja Kunej	15.09.2014	Pogostost dinukleotidnih zamenjav v genih za mikro RNA (miRNA) pri nekaterih vrstah sesalcev
Maja Kostanjevec	prof. dr. Brigita Lenarčič	02.09.2014	Iskanje in identifikacija interakcijskih partnerjev testikana-2 v možganih
Jakob Gašper Lavrenčič	prof. dr. Simon Horvat	17.09.2014	Razvoj različnih tipov genetskih označevalcev za prenos mutacij v drugo genetsko ozadje pri miših
Katja Leben	izr. prof. dr. Roman Jerala	15.09.2014	Vplivi sprememb v nukleotidnem zaporedju ODN in načinu stimulacije celic B na aktivacijo receptorjev TLR9
Sara Lorbek	prof. ddr. Boris Turk	02.09.2014	Izražanje človeških KASPAZ 3 in 7 ter njuna potencialna vloga pri zunajcelični proteolizi
Mirjana Malnar	prof. dr. Damjana Rozman	10.09.2014	Učinek formalina na izolacijo ribonukleinskih kislin iz mišjih jeter
Dejan Marjanovič	izr. prof. dr. Marko Dolinar	12.09.2014	Priprava konstruktov za uvedbo delecije v regiji slr0664/ssr1114 genoma cianobakterije <i>Synechocystis</i> sp. PCC 6803

Ester Merljak	izr. prof. dr. Roman Jerala	10.09.2014	Karakterizacija peptidnih modulov za namen sestavljanja proteinskih nanostruktur
Maša Mirkovič	prof. dr. Radovan Komel	15.09.2014	Analiza izbranih proteinov pri bolnikih z adenokarcinomom želodca s prenosom western in imunodetekcijo
Erik Mršnik	doc. dr. Marko Novinec	02.09.2014	Identifikacija alosteričnih modifikatorjev človeškega katapsina V
Iza Ogris	prof. dr. Radovan Komel	10.09.2014	Polimorfizma v genih BUB1B in PTTG1 pri slovenskih bolnikih z rakom želodca
Nastja Pirman	prof. dr. Nina Gunde Cimerman	02.09.2014	Genotipska in fenotipska raznolikost glive <i>Wallemia sebi</i>
Griša Prinčič	doc. dr. Mateja Erdani Kreft	12.09.2014	Indukcija frap in podaljševanje opazovanja gfp z osvetljevanjem s kratkovalovno svetlobo
Jernej Pušnik	prof. dr. Igor Križaj	11.09.2014	Analiza cDNA-knjižnice strupnih žlez modrasa: iskanje zapisov za metaloproteinaze tipa P-III
Marko Radojkovič	prof. dr. Brigita Lenarčič	11.09.2014	Priprava in karakterizacija rekombinantnih domen proteina SMOC-1
Urška Rauter	prof. dr. Nina Gunde Cimerman	03.09.2014	Glive v aerosolih - Identifikacija in sposobnost nukleacije ledu
Rok Razpotnik	prof. dr. Brigita Lenarčič	15.09.2014	Priprava tretje imunoglobulinu podobne domene miopaladina in njena vezava na G-aktin
Ajda Rojc	prof. dr. Gregor Anderluh	02.09.2014	Karakterizacija komercialno dostopnih oblik proteina g in testiranje vpliva sestave raztopin na stabilnost teh proteinov
Kaja Rupar	prof. dr. Marko Živin	20.08.2014	Uporaba tehnologije CRISPR-Cas za uravnavanje izražanja proteina sinaptotagmina IV v celični kulturi Sh-Sy5y
Suzana Semič	doc. dr. Katarina Černe somentor: doc. dr. Borut Kobal	02.09.2014	Kvantitativna analiza topne žilne adhezijske molekule 1 v serumu in peritonealni tekočini pri bolnicah z rakom jajčnika
Monika Škrjanc	prof. dr. Tamara Lah Turnšek	17.09.2014	Vsebnost proteaz v celicah glioblastoma
Ines Šterbal	prof. dr. Jurij Svete	04.09.2014	Sinteza nekaterih heteroarenkarboksamidov
Ula Štok	izr. prof. dr. Tanja Kunej	03.07.2014	Analiza prekrivajočih se genomskih regij: miRNA, snoRNA ter genov, ki zapisujejo proteine
Špela Tomaž	prof. dr. Tatjana Avšič Zupanc	01.09.2014	Vpeljava metode obratne transkripcije in verižne reakcije s polimerazo v realnem času za ugotavljanje virusa dobrava-kurkino
Samo Zakotnik	prof. dr. Uroš Petrovič	02.09.2014	Določanje mehanizma delovanja fenilbutirata s kemogenetskimi interakcijami pri kvasovki
Petra Zgaga	prof. dr. Jurij Svete	11.09.2014	Sinteza vinilognih peptidomimetikov na osnovi N-Boc-D-fenilalanina

UNIVERZITETNI ŠTUDIJSKI PROGRAM KEMIJSKO INŽENIRSTVO

IME IN PRIIMEK	MENTOR	DATUM ZAKLJUČKA	NASLOV DIPLOME
David Bajec	izr. prof. dr. Urška Šebenik	05.09.2014	Določanje toplotne prevodnosti s pomočjo diferenčne dinamične kalorimetrije
Veronika Berdajs	izr. prof. dr. Polona Žnidaršič Plazl	03.09.2014	Mikroreaktorji z imobiliziranimi encimi
Matic Bevec	prof. dr. Marin Berovič	05.09.2014	Biosinteza in izolacija farmacevtskih učinkovin glive <i>Cordyceps militaris</i> s kultivacijo na trdnem gojišču
Klemen Cezar	prof. dr. Aleksander Pavko	19.09.2014	Sinteza dveh kandesartanskih nečistot kot referenčnih standardov za uporabo v kromatografski analitiki
Eva Cizel	doc. dr. Klementina Zupan	19.09.2014	Spremljanje točkaste korozije v nerjavnem jeklu AISI 321 s konfokalno mikroskopijo
Kristina Tadeja Cuznar	doc. dr. Barbara Novosel	19.09.2014	Določanje fosforja v odpadnem, stabiliziranem blatu in v termično obdelanih preostankih

Karin Česnik	izr. prof. dr. Marjan Marinšek	09.09.2014	Korelativna mikroskopija jekla
Alen Đalapa	doc. dr. Jernej Kajtna	19.09.2014	Določanje maksimalne suhe snovi za sintezo stabilne suspenzije pri polimerizaciji mikrosfernih akrilatnih lepil
Janja Fortin	izr. prof. dr. Urška Šebenik	05.09.2014	Kopolimerizacija vinilnih monomerov inicirana z UV svetlobo
Urban Gartner	izr. prof. dr. Marjan Marinšek	09.09.2014	Priprava nano bakrovih disperzij na večstenskih ogljikovih nanocevkah
Rok Grm	prof. dr. Radovan Stanislav Pejovnik	18.09.2014	Naprava za merjenje električne prevednosti v odvisnosti od temperature
Barbara Jeras	izr. prof. dr. Polona Žnidaršič Plazl	01.09.2014	Uporaba encimov v proizvodnji nanoceluloze
Antonija Kirac	doc. dr. Klementina Zupan	09.09.2014	Analiza kristalnih faz v sintranem materialu na osnovi La, Sr, Mn, Cr oksida
Sabina Kolšek	doc. dr. Andreja Žgajnar Gotvajn	05.09.2014	UV filtri iz kozmetičnih sredstev v okolju
Kaja Kušar	doc. dr. Klementina Zupan	09.09.2014	Zasledovanje točkaste korozije v nerjavnem jeklu AISI 316L s konfokalno mikroskopijo
Matej Lesar	prof. dr. Danilo Suvorov	19.09.2014	Vpliv dodatka pepela na lastnosti melaminske pene
Ines Marot	prof. dr. Igor Plazl	12.09.2014	Uporaba ogljikovih nanovlakn in nanocevk v okoljskih tehnologijah
Tomaž Meško	izr. prof. dr. Miran Gaberšček	10.09.2014	Priprava katodnih nanosov za litijev ionski akumulator na osnovi LiMnPO ₄ s pirolizo karboksimetil celuloze
Alen Oblak	izr. prof. dr. Urška Šebenik	05.09.2014	Vodne emulzije epoksidnih smol z benzoksazinskim emulgatorjem
Nuška Perc	prof. dr. Matjaž Krajnc	14.07.2014	Sinteza benzoksazinov na osnovi kardanola
Blaž Perič	izr. prof. dr. Marjan Marinšek	19.09.2014	Priprava katalizatorjev za suhi reforming metana na osnovi cerijevega oksida-cirkonijevega oksida-kobalta in niklja
Sanja Popović	prof. dr. Aleksander Pavko	19.09.2014	Določanje kinetike reakcije hidrolize anhidrida očetne kisline
Anže Prašnikar	prof. dr. Igor Plazl	09.09.2014	Povečevanje sistema mikroreaktorjev v področju prevladujočega upora pri difuziji
Ivan Pribec	prof. dr. Radovan Stanislav Pejovnik	09.09.2014	Fotokatalitska oksidacija vode
Katarina Pucelj	doc. dr. Andreja Zupančič Valant	19.09.2014	Določevanje reoloških lastnosti suspenzij
Maja Ramić	doc. dr. Klementina Zupan	19.09.2014	Karakterizacija kristalnih faz v sintranem materialu za oksidno anodo v gorivni celici s trdnim elektrolitom
Neža Rangus	izr. prof. dr. Urška Šebenik	24.06.2014	Vpliv uporabe 4,4'-tiodifenola na polimerizacijo benzoksazina na osnovi bisfenola A
Polona Selan	prof. dr. Marin Berovič	05.09.2014	Biosinteza in izolacija farmacevtskih učinkovin glive <i>Hericium erinaceus</i> s fermentacijo na tekočem gojišču
Filip Strniša	prof. dr. Igor Plazl	09.09.2014	Mezo nivo modeliranja procesov v mikrosistemih
Dani Šavli	izr. prof. dr. Marjan Marinšek	19.06.2014	Modeliranje električnih lastnosti kompozitnih materialov na osnovi Ni-GDC in Ni-SDC
Aneja Tuljak	prof. dr. Marin Berovič	05.09.2014	Magnetna separacija z nanodelci
Vitan Turšič	prof. dr. Igor Plazl	20.06.2014	Implementacija mikropretočnih sistemov v sintezni kemiji
Belkisa Velagić	prof. dr. Aleksander Pavko	05.09.2014	Določanje kvalitete mešanja v CSTR reaktorju z vzbujevalno - odzivno tehniko
Naja Vrankar	doc. dr. Andreja Zupančič Valant	19.09.2014	Reološke značilnosti gelskih struktur
David Zajc	prof. dr. Igor Plazl	10.09.2014	Sinteza derivatov 3-anilino-n-(benzoi)dehidroalanina v mikroreaktorju
Jaka Žagar	doc. dr. Andreja Žgajnar Gotvajn	19.09.2014	Proizvodnja in uporaba biooglja

UNIVERZITETNI ŠTUDIJSKI PROGRAM TEHNIŠKA VARNOST

IME IN PRIIMEK	MENTOR	DATUM ZAKLJUČKA	NASLOV DIPLOME
Izidor Bitenc	doc. dr. Mitja Robert Kožuh	19.09.2014	Meritve hrupa v neposredni okolici letališča Jožeta Pučnika Ljubljana
Katja Čavčič	doc. dr. Barbara Novosel	19.09.2014	Nevarne snovi v gostinskem objektu
Dea Govc Pušnik	doc. dr. Marija Molan	19.09.2014	Vpliv aktualnih gospodarskih razmer na zaposlene v mikro in srednje velikem podjetju
Aljaž Hrovatin	doc. dr. Jože Šrekl	22.09.2014	Primerjava dejanskega stanja z oceno tveganja v podjetju v kovinski industriji
Jernej Jamnik	doc. dr. Romana Cerc Korošec	24.06.2014	Dimniški požari
Marko Košuta	doc. dr. Mitja Robert Kožuh	11.09.2014	Nevarnosti skladiščenja naftnih derivatov
Neža Luštrik	doc. dr. Marija Molan	19.09.2014	Obremenitve trenerja biatlona
Matic Pogačnik	doc. dr. Saša Petriček	19.09.2014	Požari na plovilih v marinah
Jan Poglajen	doc. dr. Andreja Žgajnar Gotvajn	05.12.2014	Uporaba katalitične depolimerizacije za pridobivanje dizelskega goriva iz nenevarnih odpadkov Odlagališča Barje
Klemen Putar	prof. dr. Marjan Bilban	18.09.2014	Vibracije v osebnih vozilih
Ciril Štern	prof. dr. Grega Strban	11.09.2014	Pravna ureditev gasilstva v Sloveniji
Luka Tamše	prof. dr. Andrej Polajnar	19.09.2014	Ergonomske obremenitve v proizvodnji kovinske galanterije
Ana Veternik	prof. dr. Andrej Polajnar	19.09.2014	Ergonomska analiza delavca na stroju
Martina Zadnik	doc. dr. Jože Šrekl	19.09.2014	Izvajanje predpisov požarne varnosti v praksi
Allen Zrimšek	doc. dr. Mitja Robert Kožuh	22.09.2014	Analiza nesreče oljne ploščadi Piper Alpha

VISOKOŠOLSKI ŠTUDIJSKI PROGRAM KEMIJSKA TEHNOLOGIJA

IME IN PRIIMEK	MENTOR	DATUM ZAKLJUČKA	NASLOV DIPLOME
Sanja Balagović	izr. prof. dr. Helena Prosen	03.07.2014	Določitev pentaklorofenola v okoljskih vodnih vzorcih
Katja Benčina	prof. dr. Alojz Demšar	18.09.2014	Sinteze in karakterizacija novih fluoridooksidovanadotatov(V)
Barbara Bevk	doc. dr. Andreja Zupančič Valant	17.09.2014	Določanje reoloških lastnosti suspenzij CaCO ₃
Alenka Bradeško	doc. dr. Bojan Kozlevčar	17.09.2014	Bakrove(ii) oktanoatne spojine z nikotinamidnimi ligandi
Vladimir Brdar	prof. dr. Jadran Maček	16.07.2014	Določanje vpliva vlage na minimalno vžigno energijo prahov
Sonja Gorišek	prof. dr. Ksenija Kogej	12.02.2014	Solubilizacija polietakrilne kisline v vodnih raztopinah z dodatkom raznih sotopljenec
Mitja Gračner	izr. prof. dr. Marjan Marinšek	17.09.2014	Razgradnja mravljinčne kisline z magnetnim fotokatalizatorjem na osnovi titanovega dioksida
Matjaž Grapulin	izr. prof. dr. Urška Šebenik	11.02.2014	Vpliv temperature na epoksidacijo sojinega olja
Irena Jevšek	prof. dr. Barbara Hribar Lee	27.02.2014	Viskoznost in površinska napetost vodnih in etilenglikolnih raztopin
Sanja Kebeľj	izr. prof. dr. Janez Cerkovnik	17.09.2014	Priprava silil substituiranih fenolov
Tanja Kerme	doc. dr. Barbara Novosel	17.09.2014	Postopek izpraznitve laboratorija
Dejan Kobe	doc. dr. Andrej Pevec	18.09.2014	Sinteza in karakterizacija nekaterih halopiridinijevih heksafluorosilikatov
Elvis Kovačević	izr. prof. dr. Nataša Gros	30.06.2014	Ovrednotenje konduktometrične celice za hitro merjenje prevodnosti v majhnih volumnih
Rok Marolt	prof. dr. Aleksander Pavko	03.07.2014	Vpliv temperature na hidrogeniranje utekočinjenega lesa
David Matoh	doc. dr. Uroš Grošelj	04.09.2014	Sinteza 5-benzil-1-metil-4-okso-4,5-dihidro-1H-pirazolo[4,3-c]piridin-7-karboksamidov iz dietil-1,3-acetondikarboksilata

Denis Matoh	doc. dr. Barbara Novosel	04.09.2014	Vpliv dodatkov na prašno eksplozijo
Matija Mencinger	prof. dr. Aleksander Pavko	02.07.2014	Vpliv geometrije laboratorijskega mešalnega sistema na porabo moči za mešanje
Slaviša Miljevič	doc. dr. Andreja Zupančič Valant	22.09.2014	Vpliv dodatkov PMMA/ATH in SASOBIT na reološke lastnosti cestogradbenega bitumna
Elizabeta Nikolaj	doc. dr. Andreja Žgajnar Gotvajn	10.06.2014	Vrednotenje vpliva NaCl na aktivno blato
Nina Novak	prof. dr. Barbara Hribar Lee	10.07.2014	Vpliv anionov na kritično micelno koncentracijo surfaktantov SDS in DPC
Peter Novak Canič	izr. prof. dr. Helena Prosen	05.12.2014	Validacija HPLC metode za spremljanje sinteze intermedijata metil 4'-((1,7'-dimetil-2'-propil-1H,3'H-[2,5'-bibenzo[d]imidazol]-3'-il)metil)-[1,1'-bifenil]-2-karbonsilata
Iris Obrič	prof. dr. Darko Dolenc	10.06.2014	Sinteza enostransko zaščiteneh diaminov za vezavo na epoksi funkcionalizirane polimerne nosilce
Vanja Pangerc	prof. dr. Barbara Hribar Lee	25.09.2014	Vpliv kationov na kritično micelno koncentracijo surfaktanta natrijevega dodecil sulfata
Nika Pečar	doc. dr. Saša Petriček	20.01.2014	Kompleksi kobaltovega(II) bromida z O- in N-donorskimi ligandi
Mateja Pepel	doc. dr. Nina Lah	03.09.2014	Reakcije bakrovih halogenidov z 2-metil-4(5) nitroimidazolom
Darja Peterlin	izr. prof. dr. Marjan Marinšek	04.09.2014	Priprava nanodisperzij bakra na večstenskih ogljikovih nanocerkah
Meta Praprotnik	prof. dr. Radovan Stanislav Pejovnik	03.07.2014	Kvantitativna analiza mikrostrukture materiala na osnovi NiO-GDC
Rok Radovan	doc. dr. Nives Kitanovski	16.06.2014	Trans-tetra(tiocianato N)di(γ pikolin)molibdati(III)
Ivan Samaržija	doc. dr. Bogdan Štefane	18.06.2014	Sinteza derivatov 3-fenilpropenojskih kislin
Adis Šahinović	doc. dr. Ana Lakota	12.03.2014	Vpliv izbranega distributorja pilna na delovanje kolone z mehurčki
Mateja Šilc	prof. dr. Slovenko Polanc	18.09.2014	Sinteze N-substituiranih sulfonamidov in njihove reakcije z vilsmeierjevimi reagenti
Simona Šinkovec	doc. dr. Andreja Zupančič Valant	25.03.2014	Določanje reoloških lastnosti bitumnov s testi lezenja in obnove
Andreja Špringar	doc. dr. Barbara Modec	17.09.2014	Določitev vsebnosti dekstrometorfanijevega bromida s fluorometrijo
Aleš Tomažin	doc. dr. Klementina Zupan	17.09.2014	Priprava oksidnega anodnega materiala za visokotemperaturne gorivne celice
Klavdija Tomše	doc. dr. Jernej Kajtna	30.06.2014	Sinteza nanokompozitnega PSA lepila s suspenzijsko polimerizacijo
Elvis Troha	prof. dr. Janez Košmrlj	11.08.2014	Katalitska sposobnost izbranih triazolijevih soli
Doris Trupi	doc. dr. Nina Lah	11.09.2014	Določevanje vsebnosti železa v vitaminskih tabletah
Urška Vide	izr. prof. dr. Boris Čeh	03.07.2014	Sinteza in karakterizacija koordinacijskih spojin molibdena z bis(3,5-dimetilpirazol-1-il)ocetno kislino in halogenidnimi ligandi
Žiga Vidic	doc. dr. Andreja Zupančič Valant	16.06.2014	Določanje reoloških lastnosti bitumenskih veziv z dodatkom odpadnih elektrofiltrskih prahov
Sonja Virant	doc. dr. Polonca Kralj	19.06.2014	Določevanje vsebnosti formaldehida v zraku
Jan Vrabič	prof. dr. Jadran Maček	17.09.2014	Vpliv velikosti delcev na minimalno vžigno energijo prahov

BOLONJSKI PROGRAMI 2. STOPNJE

MAGISTRSKI ŠTUDIJSKI PROGRAM KEMIJA

IME IN PRIIMEK	MENTOR	DATUM ZAKLJUČKA	NASLOV DIPLOME
Martin Gladovič	izr. prof. dr. Tomaž Urbič	08.09.2014	Študija lastnosti vode v poroznih materialih z metodo Monte Carlo
Urša Hönigsman	doc. dr. Nives Kitanovski	29.09.2014	Spojine bakra in kobalta z naftalentriazolom
Andraž Mavrič	prof. dr. Boris Pihlar	09.09.2014	Kulometrična separacija klorida pred določitvijo anionov z ionsko izmenjevalno kromatografijo
Elvisa Mejremič	doc. dr. Elizabeta Tratar Pirc	15.09.2014	Anaerobna razgradnja bioplastike
Urša Petek	doc. dr. Irena Kozjek Škofic	10.09.2014	Priprava in karakterizacija električno prevodnih nanostrukturiranih tankih plasti zlata
Taja Pöschl	doc. dr. Vojmir Francetič	30.09.2014	Optimizacija priprave napajalne vode v vodno parnem krogu visokotlačnih kotlov s hidrazinom
Zala Rot	prof. dr. Marjan Veber	04.09.2014	Določevanje purinskih in pirimidinskih baz s kapilarno elektroforezo
Žiga Štirn	prof. dr. Marijan Kočevnar	09.09.2014	Derivati maleimida kot dienofili pri cikloadicijah na 2H-piran-2-one: ekso/endo stereoselektivnost
Urša Tiringar	doc. dr. Črtomir Podlipnik	08.09.2014	Teoretična študija reakcijskih intermediatov pri reakciji ozona s poliaromatskimi spojinami
Urša Tomažin	prof. dr. Darko Dolenc	09.09.2014	Preestrenje in hidroliza estrov katalizirana z amini
Matija Uršič	prof. dr. Iztok Turel	10.09.2014	Rutenijeve spojine s substituiranimi hidroksikinolini

MAGISTRSKI ŠTUDIJSKI PROGRAM BIOKEMIJA

IME IN PRIIMEK	MENTOR	DATUM ZAKLJUČKA	NASLOV DIPLOME
Aleksander Krajnc	prof. dr. Brigita Lenarčič	12.09.2014	Biokemijska karakterizacija človeškega katepsina O
Anja Kerš	prof. ddr. Boris Turk	12.09.2014	Cepitve človeških avtofaginov s kaspazo-3
Sara Sajko	doc. dr. Iztok Prislan	15.09.2014	Termodinamika nastanka G-kvadrupleksnih struktur tandemskih telomernih ponovitev 5'-TTAGGG-3

MAGISTRSKI ŠTUDIJSKI PROGRAM KEMIJSKO INŽENIRSTVO

IME IN PRIIMEK	MENTOR	DATUM ZAKLJUČKA	NASLOV DIPLOME
Rok Brišar	prof. dr. Marin Berovič somentor: Darko Makovec	18.12.2014	Uporaba magnetiziranih kvasovk v fermentaciji piva

MAGISTRSKI ŠTUDIJSKI PROGRAM KEMIJSKO IZOBRAŽEVANJE

IME IN PRIIMEK	MENTOR	DATUM ZAKLJUČKA	NASLOV DIPLOME
Brigita Žnidaršič	prof. dr. Boh Bojana	04.09.2014	Kvalitativna raziskava e-učenja pri pouku kemije na gimnaziji

MAGISTRSKI ŠTUDIJSKI PROGRAM TEHNIŠKA VARNOST

IME IN PRIIMEK	MENTOR	DATUM ZAKLJUČKA	NASLOV DIPLOME
Jure Gašparut	doc. dr. Mitja Robert Kožuh	24.06.2014	Zbiranje in organizacija podatkov za sistem vodenja varnosti
Benjamin Kocjančič	doc. dr. Jože Šrekl	23.10.2014	Zagotavljanje varnosti in zdravja ob izvajanju vzdrževalnih del zunanjih izvjalcev

Vesna Oman	prof. dr. Grega Bizjak	23.10.2014	Izpostavljenost elektromagnetnim sevanjem v delovnem in domačem okolju
Benjamin Ošlak	prof. dr. Darko Dolenc	23.10.2014	Termična analiza fotovoltaičnih panelov s pregledom vplivov na gasilce
Primož Per	prof. dr. Grega Bizjak somentor: doc. dr. Peter Gajšek	07.02.2014	Obremenitev z umetnim optičnim sevanjem pri razsvetljavi z različnimi svetlobnimi viri
Andrejka Podbregar	doc. dr. Jože Šrekl	23.10.2014	Varno upravljanje informacijskih sistemov
Žiga Rozman	doc. dr. Barbara Novosel	28.08.2014	Karakterizacija lesenih prahov in določevanje eksplozijskih lastnosti
Blaž Turk	doc. dr. Saša Petriček	15.05.2014	Preventivni požig - nov ukrep varstva pred požari v naravnem okolju

DOKTORATI – BOLONJSKI PROGRAM

DOKTORSKI ŠTUDIJSKI PROGRAM KEMIJSKE ZNANOSTI

KEMIJA

IME IN PRIIMEK	MENTOR	DATUM ZAKLJUČKA	NASLOV DIPLOME
Lev Matoh	prof. dr. Peter Bukovec	11.03.2014	Nizkotemperaturna priprava elektrodnih plasti za fleksibilne Grätzlove celice
Simona Sitar	prof. dr. Ksenija Kogej	27.03.2014	Raziskave asociacijskih pojavov v vodnih raztopinah močno asociirajočih sistemov z metodami sipanja svetlobe
Andrea Lodolo	prof. dr. Peter Bukovec	27.03.2014	Reakcije arzenovih spojin v piritnem pepelu in njihov potencialni vpliv na kvaliteto podtalnice
Rok Prebil	znan. svet. dr. Stojan Stavber somentor: izr. prof. dr. Marjan Jereb	24.04.2014	Aerobne oksidativne transformacije organskih spojin katalizirane z nitrati
Andrej Mernik	prof. dr. Jurij Lah	25.04.2014	Termodinamika medproteinskih interakcij in delovanje bakterijskih modulov toksin-antitoksin
Marko Krivec	prof. dr. Marijan Kočevar	02.06.2014	[4+2] cikloadicije izbranih 2H-piran-2-onov in nadaljnje pretvorbe nastalih produktov
Sebastiano Dal Borgo	viš. znan. sod. dr. Samo Hočevar somentor: prof. dr. Boris Pihlar	30.06.2014	Študij novih pristopov uporabe bizmutove in antimonove elektrode v analizi elektrokemiji
Petra Galer	prof. dr. Boris Šket	10.07.2014	Sinteza, transformacije in lastnosti fenil substituiranih derivatov 1,3-diketonov
Peter Perdih	znan. sod. dr. Ema Žagar somentor: doc. dr. Franc Požgan	02.10.2014	Sinteza kopolimerov različnih arhitektur na osnovi polipeptidov in hitosana
Peter Rodič	znan. svet. dr. Ingrid Milošev somentor: prof. dr. Boris Pihlar	24.11.2014	Protikorozijska zaščita aluminija in aluminijevih zlitin s hibridnimi sol-gel prevlekami
Andrea Kišić	viš. znan. sod. dr. Barbara Mohar somentor: prof. dr. Boris Šket	02.12.2014	Razvoj rutenijevih katalizatorjev za asimetrično hidrogeniranje s prenosom vodika
Slavko Rast	viš. znan. sod. dr. Barbara Mohar somentor: prof. dr. Boris Šket	02.12.2014	Razvoj ligandov za asimetrične redukcije katalizirane z rutenijem in rodijem
Benjamin Prek	akademik prof. dr. Branko Stanovnik	19.12.2014	Sinteza enamionov iz metil ketonov in njihova nadaljnja pretvorba v aromatske in heteroaromatske sisteme

BIOKEMIJA

IME IN PRIIMEK	MENTOR	DATUM ZAKLJUČKA	NASLOV DIPLOME
Tilen Vidmar	prof. dr. Brigita Lenarčič	02.06.2014	Strukturna karakterizacija transmembranskega proteina Trop-2

KEMIJSKO INŽENIRSTVO

IME IN PRIIMEK	MENTOR	DATUM ZAKLJUČKA	NASLOV DIPLOME
Martin Lubej	prof. dr. Igor Plazl	25.02.2014	Sinteza ogljikovih nanocevk v mikrostrukturirani napravi in njihova uporaba za katalitske reakcije
Matjaž Ravnjak	izr. prof. dr. Albin Pintar somentorica: izr. prof. dr. Jana Zagorc Končan	31.03.2014	Denitrifikacija podtalnice v hibridnem membranskem bioreaktorju
Miha Narobe	prof. dr. Janvit Golob	05.05.2014	Tehnologija uplinjanja ogljik vsebujočih surovin
Ema Šušteršič	doc. dr. Andreja Zupančič Valant somentor: doc. dr. Marjan Vračko Grobelšek	30.05.2014	Optimizacija sestave asfaltne zmesi z odpadnim kompozitom poli (metil metakrilat) / aluminijev hidroksid
Manu Patel U M	doc. dr. Robert Dominko Somentor: prof. dr. Radovan Stanislav Pejovnik	23.06.2014	Nova generacija kompozitnih elektrod za litij žveplove akumulatorje
Uroš Novak	izr. prof. dr. Polona Žnidaršič Plazl	04.07.2014	Izolacija biomolekul z dvofaznimi vodnimi sistemi v mikrofluidnih napravah
Aleksander Rauter	prof. dr. Boris Orel Somentor: prof. dr. Matjaž Krajnc	02.10.2014	Razvoj sol gel plasti in njihova uporaba za zaščito kovinskih površin
Ana Obradović	akademik prof. dr. Janez Levec	02.10.2014	Proces parnega reforminga metana z uporabo sorbenta CaO v reaktorju s strnjenim slojem
Robin Amisse	doc. dr. Robert Dominko prof. dr. Christian Masquelier Somentor: prof. dr. Radovan Stanislav Pejovnik	17.11.2014	Nestehiometrični efekti v katodnih materialih z mešano polianionsko strukturo
Žiga Velišček	izr. prof. dr. Miran Gaberšček Somentor: prof. dr. Erik M. Kelder	24.11.2014	Silicijevi nanodelci za velikoserijsko proizvodnjo baterij

RAZISKOVALNI PROGRAMI V LETU 2014

RESEARCH PROGRAMMES IN 2014

NOSILEC / PRINCIPAL RESEARCHER	NASLOV / TITLE
Prof. dr. Peter Bukovec	Kemija za trajnostni razvoj <i>Chemistry for sustainable development</i>
Prof. dr. Marjan Veber	Raziskave in razvoj analiznih metod in postopkov <i>Research and development of analytical methods and procedures</i>
Prof. dr. Anton Meden	Sinteza, struktura, lastnosti snovi in materialov <i>Synthesis, structure, properties of compounds and materials</i>
Akad. prof. dr. Branko Stanovnik	Sinteze in transformacije organskih spojin. Novi reagenti v stereoselektivni in regioselektivni sintezi aminokislin kot intermediatov v organski sintezi <i>Syntheses and transformations of organic compounds. New reagents in stereoselective and regioselective synthesis of amino acids as intermediates in organic synthesis</i>
Prof. dr. Vojeslav Vlachy	Fizikalna kemija <i>Physical chemistry</i>
Prof. dr. Marijan Kočever	Organska kemija: sinteza, struktura, aplikacija <i>Organic chemistry: synthesis, structure and application</i>
Prof. dr. Matjaž Krajnc	Kemijsko inženirstvo <i>Chemical engineering</i>
Prof. dr. Janvit Golob	Separacijski in drugi procesi za zmanjševanje toplogrednih plinov na podlagi načel trajnostnega razvoja <i>Separation and other processes for minimisation of greenhouse gases upon the principals of sustainable development</i>
Prof. dr. Dušan Turk*	Strukturna biologija <i>Structural biology</i>
Prof. dr. Igor Križaj*	Toksini in biomembrane <i>Toxins and biomembranes</i>
Prof. ddr. Boris Turk*	Proteoliza in njena regulacija <i>Proteolysis and its regulation</i>

* Institut "Jožef Stefan" / *Jožef Stefan Institute*

KEMIJA ZA TRAJNOSTNI RAZVOJ

CHEMISTRY FOR SUSTAINABLE DEVELOPMENT

PROGRAMSKA SKUPINA / RESEARCH PROGRAMME GROUP

P1 - 0134

VODJA PROGRAMSKE SKUPINE / PRINCIPAL RESEARCHER

prof. dr. Peter Bukovec

SODELAVCI PROGRAMSKE SKUPINE / RESEARCH PROGRAMME STAFF

Raziskovalci / Researchers

prof. dr. Peter Bukovec

doc. dr. Barbara Modec

doc. dr. Romana Cerc Korošec

doc. dr. Marija Zupančič

doc. dr. Irena Kozjek Škofic

doc. dr. Marjan Jereb

dr. Nataša Čelan Korošin

dr. Darko Dolenc

Mladi raziskovalci / Young Researchers

Tehniki / Technicians

Damjan Erčulj

Urška Levec

Sodelujoče institucije / Participating Institutions

Institut Jožef Stefan

POROČILO O REALIZACIJI PROGRAMA

CILJI PROGRAMA

Sintetske poti in procesi, razpoznavni pod imenom **zelena kemija**, so v kemijski skupnosti sprejeti kot ključne rešitve za tehnologije prihodnosti. Funkcionalni **materiali za trajnostne energetske tehnologije in trajnostna kemija okolja sodijo med vodilna področja raziskav v kemiji**. Modelne spojine v bioanorganski in bioorganski kemiji, sinteze novih organskih in anorganskih spojin z biološko aktivnostjo, antioksidanti, kovinske spojine v okolju in njihova imobilizacija, razvoj novih sintetskih metod, študij mehanizmov halogeniranja.

OSREDNJE TEME PROGRAMA

Kemija molibdenovih klastrov, bioaktivni kompleksi, kovine v okolju, emulzije in zelena kemija, jodiranje z elementarnim jodom, nove metode halogeniranja.

ZNANSTVENI IN DRUGI RELEVANTNI DOSEŽKI

V tem letu so bile uspešno zaključene raziskave dvo- in tro-jedrnih spojin volframa v višjih oksidacijskih stanjih. Pripravili smo monokristale spojin z $\{W^{V}_2O_4\}^{2+}$ in $\{W^{IV}_3O_4\}^{4+}$ strukturnima enotama. Oksidacija $K_3[W^{III}_2Cl_9]$ je vodila do dveh produktov, *trans*-(PyH)₂[W^V₂O₄(η²-C₂O₄)₂(Py)₂] (Py = piridin, PyH⁺ = piridinijev kation) in (PyH)₂[W^{IV}₃O₄(η²-C₂O₄)₃(Py)₃]·Py. Rentgenska strukturna analiza je potrdila, da prva spojina vsebuje $\{W^{V}_2O_4\}^{2+}$, druga pa $\{W^{IV}_3O_4\}^{4+}$ strukturno enoto. Spojine s slednjo strukturno enoto je moč dobiti tudi z redukcijo ustrezne spojine volframa(V): pri solvotermalni reakciji $\{(C_4H_9)_4N\}[WOCl_4(H_2O)]$ ($(C_4H_9)_4N^+$ = *terc*-butilamonijev kation) v prisotnosti oksalne kisline prav tako nastane produkt z $\{W^{IV}_3O_4\}^{4+}$ enoto. Volframove spojine z omenjenima strukturnima fragmentoma so napram homolognim spojinam molibdena izjemno redke. Nadaljevanje raziskav na področju molibdenovih klastrov je vodilo do izolacije do sedaj največjega klastra tj. $[Mo^V_4Mo^{VI}_{12}O_{50}]^{8-}$. V nasprotju s pričakovanji nastane ta klaster v etanolu pri milih reakcijskih pogojih, tj. sobni temperaturi, iz enojedrne reaktivne molibdenove(V) zvrsti s sestavo $[Mo^VOCl_4(H_2O)]^-$ v prisotnosti trietilamina kot baze in ftalne kisline kot "templatnega" reagenta. Z rentgensko strukturno analizo $(Et_3NH)_8[Mo^V_4Mo^{VI}_{12}O_{50}] \cdot 2Py$ je bila nedvoumno potrjena tako struktura klastra kot tudi prisotnost kovinskih ionov v dveh oksidacijskih stanjih, +5 in +6.

Vzrok za bistveno manjšo antitumorsko in protivnetno delovanje kurkumina ((1,7-bis(4-hidroksi-3-metoksifenil)hepta-1,6-dien-3,5-dion)) v *in vivo* testih v primerjavi s testi *in vitro* je hidrofobnost kurkumina in s tem povezana njegova nizka biološka razpoložljivost. Zato je bil namen našega preparativnega dela predvsem sinteza vodotopnega derivata kurkumina. Pripravili smo derivat z močno hidrofilno skupino npr. glukozo, vezano na kurkumin preko triazola. To smo dosegli funkcionalizacijo ene od fenolnih skupin s propargil bromidom in nadaljnjo reakcijo z azidoglukozo. Sintetizirali smo koordinacijske spojine derivata kurkumina z ioni kovin prehoda za nadaljnje biološke raziskave možnega sinergističnega delovanja organske molekule v kombinaciji s kovinskimi ioni za terapevtske namene.

V preteklem letu smo se ukvarjali s termično analizo različnih materialov. Preučevali smo kreozotne depozite, ki se nalagajo v dimnikih peči na trdna goriva. Vzorci so se predvsem razlikovali glede na celokupno izgubo mase, iz dobljenih rezultatov pa smo lahko sklepali na učinkovitost zgorevanja goriva v peči. Kvalitativno smo določevali tudi pline, ki pri emisijah nastajajo.

Študirali smo tudi polimorfne prehode in temperature tališča BF₂ kompleksa 1-fenil-3-(3,5-dimetoksifenil)-propan-1,3-diona; ta spojina izkazuje mehanokromni, termokromni in solvatokromni efekt.

Pripravili smo viskozne disperzije srebrovih nanodelcev, ki smo jih uporabili kot substrat za detekcijo majhnih količin organskih barvil s tehniko površinsko ojačene ramanske spektroskopije (SERS). Učinkovitost substrata smo preverjali z dobljenimi ramanskimi spektri, različno pripravljene substrate pa karakterizirali z UV-Vis spektroskopijo in SEM-EDS analizo.

Grätzlove sončne celice predstavljajo cenovno ugodno alternativo proizvodnje energije, ki kot vir energije uporablja sončno svetlobo. Kljub slabšim izkoristkom, v primerjavi s klasičnimi silicijevimi sončnimi celicami, imajo najboljše razmerje med ceno in proizvedeno energijo. Namen raziskovalnega dela je poiskati način nanosa platinastega katalizatorja na plastične substrate, kar bi omogočilo proizvodnjo fleksibilnih Grätzlovih celic. Standardni način priprave katalizatorja vključuje termično redukcijo pri temperaturah nad 450 °C, česar plastični substrati ne zdržijo. Uporaba organskih reductentov v plinastem stanju bi omogočila nanos enakomernih slojev platine na plastičnih substratih.

Titanovi dioksid spada med dobre katalizatorje s širokim območjem uporabe, posebno pomembno področje predstavlja razgradnja okoljskih onesnaževalcev. Zaradi svojih lastnosti, dostopnosti in nizke cene je eden najbolj učinkovitih in ekološko sprejemljivih materialov. Raziskave bomo usmerili v izboljšanje njegovih fotokatalitskih in katalitskih lastnosti, pripravo nizekotemperaturnih TiO₂ past, pripravo anatasne oblike TiO₂, stabilne do čim višje temperature in ostalih možnih aplikacij.

Selektivna elektrofilna uvedba SCF₃ skupine v organske spojine je pomembna, a relativno malo raziskana pretvorba v organski kemiji. Spojine, ki vsebujejo SCF₃ skupino so pomembne zaradi biološke aktivnosti, še posebej v farmacevtski industriji in zaščiti pridelkov v kmetijstvu. Primerna lipofilnost je izrednega pomena za ustrezno biološko učinkovitost in SCF₃ skupina ima še to prednost, da ima visok parameter hidrofobnosti ($\pi_R = 1.44$). Tako smo pričeli s študijem selektivne elektrofilne uvedbe SCF₃ skupine v fenole z reagentom PhNHSCF₃. Ugotovili smo, da pretvorbe uspešno potekajo v prisotnosti Lewisovih ali Brønstedovih kislin. Reakcijo odlikuje odlična regioselektivnost, saj nastajajo izključno *p*-SCF₃ substituirani produkti, nismo pa ugotovili nastanka *o*-SCF₃ substituiranih ali katerih drugih produktov. Produkte smo izolirali z dobrimi izkoristki in jih karakterizirali, saj so z izjemo nekaterih nastali do sedaj neznani produkti. V nadaljevanju bomo raziskali vpliv strukture fenolov na Mills_Nixonov efekt in razširili nabor substratov.

Pričeli smo s študijem reaktivnosti tiolov z reagentom PhNHSCF₃. Zanima nas primerjava reaktivnosti tioenolov in fenolov. Potencialnih možnosti je več: funkcionalizacija aromatskega jedra, oksidacija tiolov v ustrezne disulfide ali pa nastanek trifluorometil disulfidov. Ugotovili smo, da reakcije uspešno potekajo v prisotnosti Brønstedovih kislin, pod optimiziranimi reakcijskimi pogoji pa nastanejo trifluorometil disulfidi. V nadaljevanju bomo raziskali vpliv strukture tiolov in reakcijskih pogojev na potek transformacij.

NAJPOMEMBNEJŠE PUBLIKACIJE

1. TRATAR-PIRC, Elizabeta, MODEC, Barbara, CER KERČMAR, Ksenija, BUKOVEC, Peter. Synthesis, structure, antioxidant and SOD-mimetic activity of [Cu(xanthurenate)(nicotinamide) (H₂O)] complexes. *Monatshefte für Chemie*, ISSN 0026-9247, 2014, vol. 145, no. 6, str. 911-920, ilustr. http://download.springer.com/static/pdf/420/art%253A10.1007%252Fs00706-014-1168-y.pdf?auth66=1400131338_975fd7c023a9405f882560a31a20aac7&ext=.pdf, doi: [10.1007/s00706-014-1168-y](https://doi.org/10.1007/s00706-014-1168-y). [COBISS.SI-ID 1706031]
2. LAVTIŽAR, Vesna, GESTEL, Cornelis A. M. van, DOLENC, Darko, TREBŠE, Polonca. Chemical and photochemical degradation of chlorantraniliprole and characterization of its transformation products. *Chemosphere*, ISSN 0045-6535. [Print ed.], 2014, vol. 95, str. 408-414, doi: [10.1016/j.chemosphere.2013.09.057](https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2013.09.057). [COBISS.SI-ID 2922491]
3. CERC KOROŠEC, Romana, BUKOVEC, Peter. Composition of water-in-oil ammonium nitrate emulsions using TGA and DSC. *User Com*, 2014, no. 39, str. 18-21, ilustr. [COBISS.SI-ID 1783599]
4. GALER, Petra, CERC KOROŠEC, Romana, VIDMAR, Maja, ŠKET, Boris. Crystal structures and emission properties of the BF₃ complex 1-phenyl-3-(3,5-dimethoxyphenyl)-propane-1,3-dione : multiple chromisms, aggregation- or crystallization-induced emission, and the self-assembly effect. *Journal of the American Chemical Society*, ISSN 0002-7863, 2014, vol. 136, no. 20, str. 7383-7394, ilustr. <http://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/ja501977a>, doi: [10.1021/ja501977a](https://doi.org/10.1021/ja501977a). [COBISS.SI-ID 1718063]
5. ŽEPIČ, Vesna, ŠVARA FABJAN, Erika, KASUNIČ, Marta, CERC KOROŠEC, Romana, HANČIČ, Aleš, OVEN, Primož, SLEMENIK PERŠE, Lidija, POLJANŠEK, Ida. Morphological, thermal, and structural aspects of dried and redispersed nanofibrillated cellulose (NFC). *Holzforschung*, ISSN 0018-3830. Tiskana izdaja, 2014, vol. 68, no. 6, str. 657-667. <http://www.degruyter.com/view/j/hfsg-ahead-of-print/hf-2013-0132/hf-2013-0132.xml?format=INT>, doi: [10.1515/hf-2013-0132](https://doi.org/10.1515/hf-2013-0132). [COBISS.SI-ID 2176905]
6. RETKO, Klara, ROPRET, Polonca, CERC KOROŠEC, Romana. Surface-enhanced Raman spectroscopy (SERS) analysis of organic colourants utilising a new UV-photoreduced substrate. *Journal of Raman spectroscopy*, ISSN 0377-0486, 2014, 7 str. <http://www.spectroscopynow.com/details/earlyview/10.1002/jrs.4533/Surfaceenhanced-Raman-spectroscopy-SERS-analysis-of-organic-colourants-utilising.html>, doi: [10.1002/jrs.4533](https://doi.org/10.1002/jrs.4533). [COBISS.SI-ID 513147947]

7. BADEA, Mihaela, PĂTRAȘCU, Florentina, CERC KOROȘEC, Romana, BUKOVEC, Peter, RAITA, Monica, CHIFIRIUC, Mariana Carmen, MĂRUȚESCU, Luminița, BLEOTU, Coralina, VELESCU, Bruno, MARINESCU, Dana, UIVAROSI, Valentina, OLAR, Rodica. Thermal, spectral, magnetic and biologic characterization of new Ni(II), Cu(II) and Zn(II) complexes with a hexaazamacrocyclic ligand bearing ketopyridine moieties. *Journal of thermal analysis and calorimetry*, ISSN 1388-6150, 2014, vol. 118, issue 2, str. 1183-1193, ilustr. http://download.springer.com/static/pdf/338/art%253A10.1007%252Fs10973-014-3857-5.pdf?auth66=1405854522_3dd4a85b694916092fbef03eda0c7c5&ext=.pdf, doi: [10.1007/s10973-014-3857-5](https://doi.org/10.1007/s10973-014-3857-5). [COBISS.SI-ID 1741615]
8. MATOH, Lev, KOZJEK-ŠKOFIC, Irena, BUKOVEC, Nataša, BUKOVEC, Peter. *Metoda za nanos platinskega in paladijevega katalizatorja z uporabo reducentov v plinski fazi : patent SI 24372(A), 2014-12-08*. Ljubljana: Urad Republike Slovenije za intelektualno lastnino, 8. 12. 2014. 6 str., ilustr. [COBISS.SI-ID 1536105667]

DRUGI POMEMBNI ZNANSTVENI DOSEŽKI

Nekateri člani programske skupine so vključeni v centre odličnosti:

- CO NOT – Center odličnosti: Nizkoogljične tehnologije: Peter Bukovec, Nataša Bukovec, Irena Kozjek Škofic, Damjan Erčulj.
- CO ENFIST – Center odličnosti: Raziskave na področju zdravja, znanosti o življenju in naprednih novih materialov: Peter Bukovec, Elizabeta Tratar Pirc.

RESEARCH PROGRAMME REPORT

PROGRAMME GOALS

Synthetic pathways and processes designated as **Green Chemistry**, have already been recognized in chemical community as key solutions for future technologies. Functional materials for **Sustainable Energy Technologies** and **Chemistry for a Sustainable Environment** belong to frontiers of chemical research.

Model compounds in bioinorganic and bioorganic chemistry, synthesis of new organic and inorganic compounds with biological activity, antioxidants, metal compounds in the environment and their immobilization, new synthetic methods, mechanisms of halogenation.

RESEARCH TOPICS

Chemistry of molybdenum clusters, bioactive metal complexes, metals in the environment, emulsions and green chemistry, iodination with elemental iodine, new methods of halogenation.

SCIENTIFIC AND OTHER RELEVANT ACHIEVEMENTS

Research on a series of high-valent two- and tri-nuclear tungsten coordination compounds was successfully completed in the past year. Single-crystals of compounds containing the $\{W^V_2O_4\}^{2+}$ and $\{W^{IV}_3O_4\}^{4+}$ structural units were prepared. The oxidation of the well-known $K_3[W^{III}_2Cl_9]$ has afforded two products: *trans*-(PyH)₂[W^V₂O₄(η²-C₂O₄)₂(Py)₂] (Py = pyridine, PyH⁺ = pyridinium cation) and (PyH)₂[W^{IV}₃O₄(η²-C₂O₄)₃(Py)₃]·Py. The X-ray structure analysis has revealed that the former compound contains the $\{W^V_2O_4\}^{2+}$ structural unit, whereas the latter the $\{W^{IV}_3O_4\}^{4+}$ structural unit. Compounds containing the trinuclear core form also upon the reduction of the corresponding tungsten(V)

compound. Namely, the solvothermal reaction of $\{(C_4H_9)_4N\}[WOCl_4(H_2O)]$ ($(C_4H_9)_4N^+ = \textit{tert}$ -butylammonium cation) results in the presence of oxalic acid in a product with the $\{W^{IV}_3O_4\}^{4+}$ core. Tungsten compounds containing either the $\{W^V_2O_4\}^{2+}$ or the $\{W^{IV}_3O_4\}^{4+}$ core are in comparison with the molybdenum homologues extremely rare.

The continuation of our research on the molybdenum cluster compounds has resulted in the preparation of the largest cluster species, *i.e.*, $[Mo^V_4Mo^{VI}_{12}O_{50}]^{8-}$, prepared so far in our laboratory. Contrary to the expectations, the cluster forms at mild reaction conditions, *i.e.*, at ambient temperature, in ethanol from a reactive mononuclear molybdenum(V) precursor with the $[Mo^VOCl_4(H_2O)]^-$ composition in the presence of triethylamine as base and phthalic acid as templating agent. The X-ray structure analysis of $(Et_3NH)_8[Mo^V_4Mo^{VI}_{12}O_{50}] \cdot 2Py$ has unambiguously revealed both the structure of the cluster and the presence of metal ions in two oxidation states, +5 and +6.

The cause of significantly reduced antitumor and antiinflammatory activity of curcumin ((1,7-bis(4-hydroxy-3-methoxyphenyl) hepta-1,6-diene-3,5-dione)), *in vivo* assays, as compared to those *in vitro* is the hydrophobicity of curcumin and as a consequence its low bioavailability. Therefore, the purpose of our preparative work was the synthesis of derivative of curcumin with improved solubility in water. We prepared a derivative with a strong hydrophilic group, *e.g.* glucose, linked to curcumin via triazole. This was achieved by functionalization of one of the phenolic groups with propargyl bromide, and further reacting with azido glucose. Complexes of curcumin derivative with transition metal ions were synthesized for further biological studies due to their possible synergistic effect of organic molecule in combination with metal ions for therapeutic purposes.

In the past year, thermal analysis of different materials was performed.

Creosote samples, deposited on the inner surface of chimneys of wood fired furnaces, were analyzed. The measured samples differ with regard to the total mass loss and from the obtained results burning efficiency of wood was estimated. Qualitative analysis of evolved gases was also performed.

Polymorphic transitions and melting temperatures of BF_2 complex of 1-phenyl-3-(3,5-dimethoxyphenyl)-propane-1,3 dione were studied; this compound exhibits mechanochromic, thermochromic and solvatochromic effect.

Viscous dispersions of silver nanoparticles were prepared, used as substrates for detection of small amounts of organic colourants using surface-enhanced Raman spectroscopy (SERS). Substrate efficiency was checked with regard to obtained raman spectra, whereas UV-VIS spectroscopy and SEM-EDS analyses were used to characterize the prepared substrates.

Grätzel solar cells represent a cheap and viable alternative that uses solar power to produce electricity. Even though the efficiency of such cells is lower than that of silicon based solar cells, they have the best cost to power production ratio to date. The aim of our research was to develop a method that would allow the deposition of platinum particles on plastic substrates and subsequently the fabrication of flexible Grätzel solar cells. The standard preparation of such catalysts requires thermal reduction of the platinum precursor at temperatures exceeding 450 °C which most plastic substrates can't withstand. The use of organic reducing agents in gaseous form, has allowed deposition of uniform layers of platinum nano-particles on plastic substrates.

Titanium dioxide is one of the catalysts with a broad range of use, especially the area of decomposition of environmental pollutants. Due to their properties, abundance and low cost, TiO_2 is one of the most efficient and ecologically acceptable materials. That is why our research will be focused on improving its photo-catalytic and catalytic properties, the preparation of low temperature TiO_2 pastes, thermally stable anatase as well as other possible applications.

The selective electrophilic introduction of SCF_3 group into organic molecules is an important, but relatively poorly explored transformation in organic chemistry. SCF_3 -substituted molecules are important due to the biological activity, in particular in pharmaceutical industry and crop protection in

agriculture. A suitable lipophilicity is of vital importance for the suitable biological activity, and additional advantage of the SCF_3 group is its high hydrophobicity parameter ($\pi_R = 1.44$). We have initiated a study on a selective electrophilic introduction of the SCF_3 group into phenols with PhNHSCF_3 reagent. It was established that functionalization took place effectively in the presence of the Lewis or Brønsted acids. The transformation is remarkably regioselective thus producing *p*- SCF_3 substituted products exclusively, while no *o*- SCF_3 substituted or any other products were noted. The products were isolated in good yields and fully characterized because majority of the products were new compounds, only a few were known. In continuation, we are going to investigate the role of structure of phenols on the Mills-Nixon effect and extend a list of substrates.

We have begun a study on reactivity of thiols with PhNHSCF_3 reagent. We are interested in comparison of reactivity of phenols and thiophenols. There are several possibilities: functionalization of the aromatic ring, oxidation of thiols into the corresponding disulfides or formation of trifluoromethyl disulfides. It was established that reactions proceeded efficiently in the presence of the Brønsted acids, and under the optimized reaction conditions trifluoromethyl disulfides were formed. In continuation, we are going to investigate the role of structure of thiols and reaction conditions on the course of transformation.

RELEVANT PUBLICATIONS

1. TRATAR-PIRC, Elizabeta, MODEC, Barbara, CER KERČMAR, Ksenija, BUKOVEC, Peter. Synthesis, structure, antioxidant and SOD-mimetic activity of $[\text{Cu}(\text{xanthurenate})(\text{nicotinamide})(\text{H}_2\text{O})_2]$ complexes. *Monatshefte für Chemie*, ISSN 0026-9247, 2014, vol. 145, no. 6, str. 911-920, ilustr. http://download.springer.com/static/pdf/420/art%253A10.1007%252Fs00706-014-1168-y.pdf?auth66=1400131338_975fd7c023a9405f882560a31a20aac7&ext=.pdf, doi: 10.1007/s00706-014-1168-y. [COBISS.SI-ID 1706031]
2. LAVTIŽAR, Vesna, GESTEL, Cornelis A. M. van, DOLENC, Darko, TREBŠE, Polonca. Chemical and photochemical degradation of chlorantraniliprole and characterization of its transformation products. *Chemosphere*, ISSN 0045-6535. [Print ed.], 2014, vol. 95, str. 408-414, doi: 10.1016/j.chemosphere.2013.09.057. [COBISS.SI-ID 2922491]
3. CERC KOROŠEC, Romana, BUKOVEC, Peter. Composition of water-in-oil ammonium nitrate emulsions using TGA and DSC. *User Com*, 2014, no. 39, str. 18-21, ilustr. [COBISS.SI-ID 1783599]
4. GALER, Petra, CERC KOROŠEC, Romana, VIDMAR, Maja, ŠKET, Boris. Crystal structures and emission properties of the BF_2 complex 1-phenyl-3-(3,5-dimethoxyphenyl)-propane-1,3-dione : multiple chromisms, aggregation- or crystallization-induced emission, and the self-assembly effect. *Journal of the American Chemical Society*, ISSN 0002-7863, 2014, vol. 136, no. 20, str. 7383-7394, ilustr. <http://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/ja501977a>, doi: 10.1021/ja501977a. [COBISS.SI-ID 1718063]
5. ŽEPIČ, Vesna, ŠVARAFABJAN, Erika, KASUNIČ, Marta, CERC KOROŠEC, Romana, HANČIČ, Aleš, OVEN, Primož, SLEMENIK PERŠE, Lidija, POLJANŠEK, Ida. Morphological, thermal, and structural aspects of dried and redispersed nanofibrillated cellulose (NFC). *Holzforschung*, ISSN 0018-3830. Tiskana izdaja, 2014, vol. 68, no. 6, str. 657-667. <http://www.degruyter.com/view/j/hfsg-ahead-of-print/hf-2013-0132/hf-2013-0132.xml?format=INT>, doi: 10.1515/hf-2013-0132. [COBISS.SI-ID 2176905]
6. RETKO, Klara, ROPRET, Polonca, CERC KOROŠEC, Romana. Surface-enhanced Raman spectroscopy (SERS) analysis of organic colourants utilising a new UV-photoreduced substrate. *Journal of Raman spectroscopy*, ISSN 0377-0486, 2014, 7 str. <http://www.spectroscopynow.com/details/earlyview/10.1002/jrs.4533/Surfaceenhanced-Raman-spectroscopy-SERS-analysis-of-organic-colourants-utilising.html>, doi: 10.1002/jrs.4533. [COBISS.SI-ID 513147947]
7. BADEA, Mihaela, PĂTRAȘCU, Florentina, CERC KOROŠEC, Romana, BUKOVEC, Peter, RAITA, Monica, CHIFIRIUC, Mariana Carmen, MĂRUȚESCU, Luminița, BLEOTU, Coralina,

VELESCU, Bruno, MARINESCU, Dana, UIVAROSI, Valentina, OLAR, Rodica. Thermal, spectral, magnetic and biologic characterization of new Ni(II), Cu(II) and Zn(II) complexes with a hexaazamacrocyclic ligand bearing ketopyridine moieties. *Journal of thermal analysis and calorimetry*, ISSN 1388-6150, 2014, vol. 118, issue 2, str. 1183-1193, ilustr. http://download.springer.com/static/pdf/338/art%253A10.1007%252Fs10973-014-3857-5.pdf?auth66=1405854522_3dd4a85b694916092fbef03eda0c7c5&ext=.pdf, doi: [10.1007/s10973-014-3857-5](https://doi.org/10.1007/s10973-014-3857-5). [COBISS.SI-ID 1741615]

8. MATOH, Lev, KOZJEK-ŠKOFIC, Irena, BUKOVEC, Nataša, BUKOVEC, Peter. *Metoda za nanos platinskega in paladijevega katalizatorja z uporabo reducentov v plinski fazi : patent SI 24372(A), 2014-12-08*. Ljubljana: Urad Republike Slovenije za intelektualno lastnino, 8. 12. 2014. 6 str., ilustr. [COBISS.SI-ID 1536105667]

OTHER IMPORTANT SCIENTIFIC ACHIEVEMENTS

Some members of the programme group have been active in two Centers of Excellence:

- CO NOT – Center of Excellence: Low Carbon Technologies: Peter Bukovec, Nataša Bukovec, Irena Kozjek Škofic, Damjan Erčulj.
- CO ENFIST – Center of Excellence: Multidisciplinary Research in Life Sciences and Advanced New Materials: Peter Bukovec, Elizabeta Tratar Pirc.

RAZISKAVE IN RAZVOJ ANALIZNIH METOD IN POSTOPKOV **RESEARCH AND DEVELOPMENT OF ANALYTICAL METHODS AND PROCEDURES**

PROGRAMSKA SKUPINA / RESEARCH PROGRAMME GROUP

P1-0153

VODJA PROGRAMSKE SKUPINE / PRINCIPAL RESEARCHER

prof. dr. Marjan Veber

SODELAVCI PROGRAMSKE SKUPINE / RESEARCH PROGRAMME STAFF

Raziskovalci / *Researchers*

red. prof. dr. Marjan Veber
izr. prof. dr. Nataša Gros
izr. prof. dr. Matija Strlič
izr. prof. dr. Helena Prosen
izr. prof. dr. Matevž Pompe
doc. dr. Drago Kočar
dr. Milko Novič
dr. Robert Susič
dr. Tatjana Zupančič
doc. dr. Irena Kralj Cigić
dr. Polonca Kralj

Mladi raziskovalci / *Young Researchers*

Tanja Trafela
Andrej Ščavničar
Alenka Možir
Gregor Marolt
Jernej Markelj

Tehniki / *Technicians*

Ivanka Keber
Zdenka Držaj
Jolanda Furlan
Mojca Žitko

POROČILO O REALIZACIJI PROGRAMA

CILJI, OSREDNJE TEME IN ZNANSTVENI DOSEŽKI PROGRAMA

V obdobju od leta 2009 do 2014 smo v okviru raziskovalnega programa “Raziskave in razvoj analiznih metod in postopkov” opravljali raziskave na treh glavnih področjih: a) temeljne raziskave analiznih metod in pristopov; b) raziskave in razvoj metod za analizo in karakterizacijo materialov; c) razvoj metod in postopkov za kontrolo kakovosti v industriji, varnosti živil in okolja.

V omenjenem obdobju smo objavili 127 znanstvenih člankov in 8 preglednih člankov, predstavili raziskovalne dosežke na številnih konferencah, napisali 5 poglavij v znanstvenih monografijah in prijavi mednarodni patent. Z raziskavami smo pomembno prispevali k varovanju zdravja in okolja ter ohranjanju kulturne dediščine. Vpetost naše programske skupine v mednarodne raziskave se kaže tudi v sodelovanju v mednarodnih projektih ter neformalnem sodelovanju s številnimi univerzami in raziskovalnimi inštituti v tujini, kar je razvidno iz naših skupnih publikacij. Podrobnejši opis raziskav v omenjenem obdobju je razdeljen glede na raziskovalna področja. V opisu so navedene le izbrane raziskave z referencami.

- a) Raziskave novih analiznih postopkov smo izvajali na področjih kjer smo že uveljavljeni in imamo na voljo ustrezno instrumentacijo. To so predvsem področja atomske spektrometrije, elektrokemije, separacijskih tehnik in priprave vzorcev za analizo. Atomske spektroskopske tehnike smo uporabili za proučevanje kovin v bioloških sistemih ter okolju. Pri tovrstnih raziskavah smo se soočali z zahtevnimi matričnimi efekti kot tudi problemov določevanja nizkih koncentracij iskanih elementov.

Tako smo raziskovali vsebnost elementov v sledovih v ekstraktu zobnega cementsa [COBISS 36005893] ter interakcije kovin s farmacevtskimi učinkovinami [COBISS 34749701], [COBISS 33810437], [COBISS 2854257]. V raziskavah okolja smo razvili atomsko spektroskopsko analizo metodo za opazovanje spiranja nekaterih elementov iz zemlje [COBISS 4448538] in za določevanje težkih kovin v rečnem sedimentu [COBISS 23362599]. Razvili smo tudi priročne spektrofotometrične metode in nizkocenovno instrumentacijo, ki se lahko uporablja tudi v šoli [COBISS 35545605], [COBISS 9165897]. Elektrokemijske raziskave so potekale v smeri razvoja elektrokemijskih senzorjev za detekcijo glukoze [COBISS 4345370], vodikovega peroksida [COBISS 24239655], [COBISS 26051111] in sildenafil citrata [COBISS 4863770] in delovnih elektrod za voltometričnouporabo [COBISS 36731141], [COBISS 27452967]. Raziskali smo sočasno elektrokemijsko depozicijo Pd(II) in Fe(II) na Au substratu. Proučevali smo kinetične in hidrodinamske parametre, ki vplivajo na sestavo izločene FePd zlitine, ki je zaradi svojih magnetnih lastnosti zanimiva za številne industrijske aplikacije [COBISS 27452967]. Raziskave separacijskih tehnik so vključevale razlage separacijskih mehanizmov, razvoj novih stacionarnih faz oziroma izdelavo novih detekcijskih sistemov. Predlagali smo predlagali nov retencijski mehanizem za razlago ločbe pri ionski izključitveni kromatografiji [COBISS 1609007]. Sodelovali smo pri razvoju monolitnih stacionarnih faz in preverili njihovo uporabnost na realnih sistemih [COBISS 3614328], [COBISS 30266117], [COBISS 35012101], [COBISS 35012613]. Prav tako smo razvili nov amperometrični detekcijski sistem pri ionski kromatografiji [COBISS 4824090] ter originalni kalibracijski sistem pri GC/MS tehniki, ki nam omogoča netarčno analizo [COBISS 1448796], [COBISS 34555141]. Raziskave masne spektrometrije smo ostredotočili na raziskavah povezave masnega spektrometra pripojenih ionov z infrardečo pečico. Razvito tehniko smo uporabljali za spremljanje pirolize vzorcev [COBISS 30312965]. Razvili in validirali smo metodo tekočinske kromatografije sklopljene s tandemskim masnim spektrometrom za določevanje atropine in skopolamina v majhnem volumnu človeške plazme [COBISS 1712431]. Poleg razvoja analiznih tehnik smo se ukvarjali z inovativno predpripravo vzorcev, ki je potrebna za odstranitev zelo zahtevnih matriksov. Raziskali smo nov način predkoncentriranja monoterpenov za določitev geografskega porekla sirov [COBISS 3267464], ovrednotili vpliv matriksa pri določevanju bioflavonoidov [COBISS 36369157] ter razvili postopke karakterizacije arome v živilih [COBISS 2763121], [COBISS 33728005] in knjigah, ki se je uporabljal kot indikator njihove razgradnje [COBISS 33296901], [COBISS 33984261], [COBISS 34838277]. Posebno poglavje raziskav je predstavljala raziskava raztapljanja vzorca prsti za pravilno določevanje urana z instrumentalno aktivacijsko analizo [COBISS 27495207]. Zaradi dobrega poznavanja področja priprave vzorcev smo pripravili pregledni članek o uporabi mikro ekstrakcije s topili pri pripravi trdnih okoljskih vzorcev [COBISS 1712175]. Posebno področje analize kemije predstavljajo nedestruktivne tehnike, ki so zelo primerne za proučevanje dragocenih vzorcev kulturne dediščine. Del programa se je ukvarjal z uporabo mikro destruktivnih tehnik za spremljanje razgradnje zgodovinskih pergamentov [COBISS 5314586].

Pomembno področje analize kemije predstavlja ugotavljanje in opredeljevanje merske negotovosti, ki smo ga obravnavali na primeru hematoloških meritev [COBISS 36397061] in meritev ionskih zvrsti [COBISS 33467909].

- b) Na področju raziskav materialov, predstavljajo predmeti kulturne dediščine posebej pomembno in z analiznega vidika zelo zahtevno področje. Nadaljevali smo z raziskavami korozivnih lastnosti črnih [COBISS 36309253], [COBISS 33743365], [COBISS 33496837], [COBISS 36890629], [COBISS 36976133] ter preučevanjem lastnosti polimerov in njihovih razgradnih procesov [COBISS 30426117], [COBISS 4104218], [COBISS 34621957], [COBISS 34622469], [COBISS 34458629], [COBISS 34838533], [COBISS 35488773], [COBISS 35930373], [COBISS 35750405], [COBISS 36602629], [COBISS 3086449], [COBISS 36573957], [COBISS 259804928]. Pomembni del raziskav kulturne dediščine so predstavljale nedestruktivne študije arheoloških ali dragocenih kulturnih izdelkov, kot je analiza platen [COBISS 5314842], [COBISS 35749381], fotografij [COBISS 35749893], [COBISS 35799813], [COBISS 36663813] in arheoloških posod [COBISS 34839045]. Razen tega smo se ukvarjali z raziskavami procesov korozije različnih materialov, kot so nerjavno jeklo [COBISS 707498], [COBISS 720042], ortopedske zlitine [COBISS 25686567] in baker [COBISS 4152858] ter z analitsko karakterizacijo novih materialov [COBISS 34710021], [COBISS 23550759], [COBISS 4384794], [COBISS 34723589], [COBISS 35935493], [COBISS 1687945]. Na področju zaščite materialov pred korozijo smo preučevali inhibicijo korozije bakra v prisotnosti klorida s fitinsko kislino [COBISS 27970087] ter zaščito starih rokopisov pred korozijo papirja zaradi uporabe galnih črnih [COBISS 5504026]. Pomembno področje uporabe analiznih pristopov pri karakterizaciji materialov, ki ga bomo razvijali tudi v prihodnosti, je povezano z ravnanjem in predelavo lesne biomase in odpadkov [COBISS 5457690], [COBISS 1703049], [COBISS 1809801] ter študij biofilmov. Rezultate TG analize zmesi biomase in plastike smo uporabili pri kinetičnih izračunih v vrtničastem 100 kW pilotnem reaktorju, pri čemer smo za izračun uporabili izpopolnjeno izokonverzijsko neizotermno metodo [COBISS 5528090]. Pri raziskavi biofilmov smo določili strukturne in dinamične lastnosti vodnih raztopin levana različnega izvora [COBISS 4381304]. Nenazadnje je potrebno omeniti razvoj analiznih metod za identifikacijo ter določevanje novo sintetiziranih spojin [COBISS 1695535], [COBISS 1608495], [COBISS 36122373], [COBISS 35944709], [COBISS 35308549], [COBISS 1666351] kot tudi parametrov za spremljanje sinteznega postopka. Primera tovrstnih raziskav sta spremljanje vsebnosti vode pri sintezi kromovih koordinacijskih spojin [COBISS 1666351] in optimizacija procesa utrjevanja elektrokromnih nanosov [COBISS 5528090].
- c) V zadnje področje raziskav sodijo študije procesov v okolju, kot so fotokemijski procesi [COBISS 34920197] in študije nastanka sekundarnih organskih aerosolov [COBISS 36692741], [COBISS 4657946] ter raziskave vpliva okolja na kulturno dediščino [COBISS 35749125], [COBISS 36663301]. Pri raziskavah živil smo se posvetili razvoju analiznih tehnik za določevanje bioaktivnih snovi [COBISS 36618757], [COBISS 30810373], [COBISS 3097900], [COBISS 3461745] oziroma različnim alergenim ali toksičnim spojinam [COBISS 36720645], [COBISS 36261637], [COBISS 30096389]. Na tem področju smo vzpostavili močno mednarodno sodelovanje z raziskovalnimi inštitucijami v Evropi, saj smo bili vključeni v FP6 integrirani evropski projekt »Truefood.« V okviru projekta smo izvajali prepletene interdisciplinarne in internacionalne študije, ki smo jih na koncu povezali v končne zaključke projekta.

DRUGI POMEMBNI DOSEŽKI

Rezultati raziskav programske skupine so v veliki meri uporabni za različne industrijske, kemijske, farmacevtske, živilske, ekološke in druge laboratorije. Z raziskavami smo pomembno prispevali k varovanju zdravja in okolja ter ohranjanju kulturne dediščine. Vpetost naše programske skupine v mednarodne raziskave se kaže tudi v sodelovanju v mednarodnih projektih ter neformalnem sodelovanju s številnimi univerzami in raziskovalnimi inštituti v tujini, kar je razvidno iz naših skupnih

publikacij. Spoznanja so bila v veliki meri neposredno prenešana študentom in mlajšim raziskovalcem preko predavanj na dodiplomskem in podiplomskem študiju in mentorstev pri diplomah, magisterijih in doktoratih. V obdobju od 2009 do 2014 so bili sodelavci programske skupine mentorji 14 doktorandom, 17 magistrantom, somentorji 20 doktorandom, mentorji pri 88 diplomah na univerzitetnem študiju, pri 46 diplomah 1. bolonjske stopnje in 59 diplomah visokošolskih študijskih programov.

Med pomembna dosežka, ki nista zajeta v opisu raziskovalnih del sodi patent in razvoj programske opreme za napovedovanje reakcijskih hitrosti organskih spojin z različnimi oksidanti v atmosferi.

Patent (COBISS 26939909) patent: EP 1664431 (B1), 20100804. [S. l.]: European Patent Office, 2010. 21 str.

Avtorji: M. Anders, D.A. Lichtblau, J. Kolar, J. Malešič, M. Strlič, M. Šala, M. Kočevar. Antioxidant for anorganic material and method for treating the same.

V zvezi s staranjem in razgradnjo papirja in s tem pisne kulturne dediščine, je bil izdelan postopek in metoda za kemijsko stabilizacijo papirja. Patent se nanaša na sintezo antioksidanta in metodo za njegovo aplikacijo za zaščito pisnih gradiv na papirju. Antioksidant ima lastnost preprečevanja, upočasnitve ali poprave poškodb zaradi oksidacije in/ali kislinske hidrolize in ne kaže slabosti prej uporabljenih formulacij.

Izdelali smo računalniški program za napovedovanje reakcijskih hitrosti organskih spojin z različnimi oksidanti v atmosferi. Poglavitni cilj je bil razviti postopke za napovedovanje omenjenih reakcijskih hitrosti na osnovi kemijske strukture. Izračun mora biti enostaven in hiter ter sočasno omogočati točne napovedi. Program z imenom MACI, je zasnovan širše in smo ga že testirali tudi za napovedovanje drugih atmosfersko pomembnih procesov. Primeren je tudi za splošno QSPR modeliranje v kemiji.

RESEARCH PROGRAMME REPORT

RESEARCH TOPICS, GOALS AND SCIENTIFIC ACHIEVEMENTS

In the period 2009–2014 we have focused on the three fields in accordance with the research programme: a) fundamental research of new approaches in analytical chemistry, b) research and development of methods for the characterization of materials and c) development of methods and procedures for quality control in industry, food safety and environment.

In this period we have published 127 scientific papers, 8 review papers and presented our research at several scientific meetings, we have written 5 chapters in scientific monographies, and submitted a patent. Through our research, we have significantly contributed to the protection of health and the environment and the preservation of cultural heritage. International collaboration is indicated in participation in several EU and bilateral projects and in informal collaboration with several universities and research institutions abroad. A more detailed description of our research in this period is divided according to the research areas. In the below text only selected topics are described in more details together with references.

- a) Research on new analytical procedures was carried out in areas where we are already established and we have appropriate instrumentation. These are mainly atomic spectrometry, electrochemistry, separation techniques and sample preparation. In such investigations we are faced with a complex matrix effects as well as the problem of determination of low concentration levels of individual analytes. We have examined traces of elements in materials used in dental medicine [COBISS 36005893], and studied interactions of metals with pharmaceutical substances [COBISS 34749701], [COBISS 33810437], [COBISS 2854257]. Atomic spectrometry was applied for leaching studies of toxic elements from soils [COBISS 4448538] and for the determination of metals

in river sediment [COBISS.SI-ID 23362599]. Spectrophotometric methods as well as simple and inexpensive instrumentation, which can be used as a teaching tool in high schools were developed [COBISS 35545605], [COBISS 9165897].

Electrochemical research was oriented into development of electrochemical sensors for detection of glucosis [COBISS 4345370], hydrogen peroxide, [COBISS 24239655], [COBISS 26051111] in sildenafil citrate [COBISS 4863770] and working electrodes for voltammetric application [COBISS 36731141]. We have investigated the simultaneous electrochemical deposition of a Pd (II) and Fe (II) on the Au substrate. We studied the kinetic and hydrodynamic parameters that influence the composition of the formed FePd alloy, which is very interesting for the industrial applications due to its magnetic properties [COBISS 27452967]. Research of separation techniques was focused on explanation of separation mechanisms [COBISS 1609007], development of new stationary phases [COBISS 3614328], [COBISS 30266117], [COBISS 35012101], [COBISS 35012613] and application of new detection systems in chromatography [COBISS 4824090]. An original calibration system for GC/MS analysis was developed [COBISS 1448796], [COBISS 34555141]. Research of mass spectrometry was focused on the investigation of pyrolysis of samples and hyphenation of mass spectrometer with infra red oven [COBISS 30312965]. We develop and validate the HPLC/MS/MS procedure for the determination of atropine and scopolamine in a small volume of human plasma [COBISS 1712431]. In addition to the development of analytical techniques, we investigated an innovative sample pretreatment, which are necessary for the removal of very complex matrices. An original preconcentration procedure was applied for the determination of geographical origin of cheese [COBISS 3267464], the influence of analytical matrix on determination of bioflavonoids was studied [COBISS 36369157] and a new procedures for the characterization of aroma in food products were elaborated [COBISS 2763121], [COBISS 33728005]. The procedure for the determination of volatile organic compounds in historic documents which can be used as an indicator for their decomposition was developed [COBISS 33296901], [COBISS 33984261], [COBISS 34838277].

A special area of the research was an investigation of dissolution of soil samples for the proper determination of uranium with an instrumental activation analysis [COBISS 27495207]. Due to the good knowledge in the sample preparation we have prepared a review article on the use of micro extraction solvents in the preparation of solid environmental samples [COBISS 1712175]. The specific area of analytical chemistry represent non-destructive techniques that are very suitable for the study of valuable samples of cultural heritage. Part of the research program was concerned with the use of micro-destructive techniques for the monitoring of the degradation of historical parchments [COBISS 5314586].

An important issue in modern analytical chemistry is evaluation of measurement uncertainty which was shown on example of hematological measurements and measurements of ionic species [COBISS 36397061], [COBISS 33467909].

- b) In the area of characterization of materials, the corrosion properties of ink which influence on the decomposition of cellulose and paper [COBISS 36309253], [COBISS 33743365], [COBISS 33496837], [COBISS 36890629], [COBISS 36976133] were studied. Properties and degradation of selected polymers were also investigated [COBISS 30426117], [COBISS 4104218], [COBISS 34621957], [COBISS 34622469], [COBISS 34458629], [COBISS 34838533], [COBISS 35488773], [COBISS 35930373], [COBISS 35750405], [COBISS 36602629], [COBISS 3086449], [COBISS 36573957], [COBISS 259804928]. An important part of research related with preservation of cultural heritage represents nondestructive investigation of archeological artefacts [COBISS 34839045], analysis of canvases [COBISS 5314842], [COBISS 35749381] and old photographs [COBISS 35749893], [COBISS 35799813], [COBISS 36663813].

Corrosion of different metallic materials, such as stainless steel [COBISS 707498], [COBISS 720042], alloys for orthopedics [COBISS 25686567] and copper [COBISS 4152858] were studied

and different electro analytical methods for the characterization of new materials were developed [COBISS 34710021], [COBISS 23550759], [COBISS 4384794], [COBISS 34723589], [COBISS 35935493], [COBISS 1687945]. The corrosion prevention was studied by investigating the inhibition properties of phytic acid against corrosion of copper in the presence of chloride [COBISS 27970087] and the protection of ancient manuscripts from corrosion due to the use of gallic ink [COBISS 5504026].

The research was also oriented into the treatment of wood biomasses and wastes [COBISS 5457690], [COBISS 1703049], [COBISS 1809801]. The results of the TG analysis of mixture of biomass and plastics were used for the calculation of the kinetics inside the turbulent 100kW pilot reactor [COBISS 5528090]. We have contributed to the development of methods for the identification and characterization of newly synthesized compounds [COBISS 1695535], [COBISS 1608495], [COBISS 36122373], [COBISS 35944709], [COBISS 35308549], [COBISS 1666351] as well as the parameters for the monitoring of the synthesis process. Examples of such type of research is monitoring of water content in the synthesis of chromium coordination compounds [COBISS 1666351] and optimization of the process of consolidation of electrochromium deposits [COBISS 5528090].

- c) The last group of research is related with studies of photochemical processes in the environment [COBISS 34920197], studies of secondary organic aerosols formation [COBISS 36692741], [COBISS 4657946] and research of the influence of the environment on the stability of historic documents [COBISS 35749125], [COBISS 36663301]. We have also developed analytical procedures for the determination of bio active and toxic compounds and allergens [COBISS 36618757], [COBISS 30810373], [COBISS 3097900], [COBISS 3461745], [COBISS 36720645], [COBISS 36261637], [COBISS 30096389]. In this field, we have established a strong international cooperation with research institutions in Europe, since we have been involved in FP6 integrated European project "TRUEFOOD."

Besides experimental studies also some theoretical research has been carried out. For modelling of pKa values the partial connectivity index based on interatomic distances was introduced [COBISS 36863493] and transition states for fullerene system were calculated [COBISS4103450].

OTHER IMPORTANT ACHIEVEMENTS

The results of the studies of our programme group are largely applicable to various industrial, chemical, pharmaceutical, food, ecological and other laboratories. Moreover, the publication of results in the international scientific literature and their presentation at national and international conferences gives interested users access to all the findings that were made by our programme group researchers in their studies. The programme group staff is actively working with many researchers and groups both at home and abroad.

Knowledge obtained through research activities was to a large extent directly passed on to students and young researchers through lectures within graduate and postgraduate courses. In the period 2009-2014, the programme group staff supervised 14 PhD thesis and co-supervised 20 PhD, 17 master theis, thesis, 88 univeristy diplomas , 46 diploms of first Bologna cycle ang 59 diplomas of professional study programmes.

Among important achievements which are not described above are international patent and software programe for the calculation of reaction kinetics of organic compounds with different oxidants in the atmosphere.

Patent (COBISS 26939909) M. Anders, D.A. Lichtblau, J. Kolar, J. Malešič, M. Strlič, M. Šala, M. Kočevar. Antioxidant for an organic material and method for treating the same: patent: EP 1664431 (B1), 2010-08-04. [S. I.]: European Patent Office, 2010. 21 str. Antioxidant for an organic material and method for treating the same.

Object of the patent is to provide alternative antioxidants for treating organic material, particularly paper, which prevent, slow down or reverse damage due to oxidation reactions and/or acid hydrolysis reactions and do not exhibit the disadvantages of the prior used formulations.

Within the research project we have developed a software program for the prediction of reaction rates of various organic compounds with atmospheric oxidants. The reaction rates were calculated based on the structure of the organic molecules. The calculation was simple in order to be used by non-specialist, however it has to produce accurate predictions. Although the software program named MACI was initially designed for the prediction of reaction rates, it can be used for the prediction of other relevant properties in the atmospheric chemistry as well as for the general QSPR modeling in chemistry.

SINTEZA, STRUKTURA, LASTNOSTI SNOVI IN MATERIALOV **SYNTHESIS, STRUCTURE AND PROPERTIES OF COMPOUNDS AND MATERIALS**

PROGRAMSKA SKUPINA / RESEARCH PROGRAMME GROUP

P1-0175

VODJA PROGRAMSKE SKUPINE / PRINCIPAL RESEARCHER

prof. dr. Anton Meden

SODELAVCI PROGRAMSKE SKUPINE / RESEARCH PROGRAMME STAFF

Raziskovalci / *Researchers*

prof. dr. Stane Pejovnik
izr. prof. dr. Boris Čeh
prof. dr. Alojz Demšar
doc. dr. Klementina Zupan
doc. dr. Saša Petriček
prof. dr. Iztok Turel
doc. dr. Amalija Golobič
doc. dr. Marjan Marinšek
doc. dr. Bojan Kozlevčar
dr. Nives Kitanovski
doc. dr. Andrej Pevec
doc. dr. Nina Lah
doc. dr. Franc Perdih
dr. Boštjan Genorio
dr. Marta Počkaj
dr. Tina Skalar

Mladi raziskovalci / *Young Researchers*

Katja Krančan
Maja Vidmar
Tanja Koleša Dobravec
Miha Trdin
Sara Seršen
Petra Kuzman
Matija Uršič

Tehniki / *Technicians*

Aleš Knez

POROČILO O REALIZACIJI PROGRAMA

CILJI IN OSREDNJE TEME PROGRAMA

Programska skupina ima dve težišči delovanja in sicer koordinacijsko kemijo in nove materiale za različne aplikacije. Oboje pa povezuje ekspertiza in oprema za strukturno analizo, ki omogoča razumevanje povezav med zgradbo in funkcijo sintetiziranih spojin in materialov.

Na področju koordinacijske kemije smo pridobili in objavili rezultate na več področjih:

V sodelovanju s skupino prof. G. Psomasa (Aristotlova univerza, Solun, GR) smo raziskovali strukturne, fizikalno-kemijske in biološke lastnosti koordinacijskih spojin cinka, niklja, mangana in bakra s protibakterijskimi sredstvi iz družine kinolonov oz. nesteroidnimi protivnetnimi sredstvi. V sodelovanju s prof. E. Alessiem (Univerza v Trstu, ITA) smo raziskovali strukturne in biološke lastnosti protirakovih rutenijevih kompleksov s terpiridinskimi in triazolnimi ligandi. Uspešno smo tudi začeli sodelovanje s prof. K. Andjelković z Univerze v Beogradu na področju bakrovih in cinkovih koordinacijskih spojin biološko aktivnih derivatov 3-acetilpiridina.

Sintetizirali smo vanadijeve, kobaltove, bakrove in cinkove spojine z derivati diketonov in pikolinske kisline. V sodelovanju s prof. Liujem (East China Normal University, Šanghaj, CN) smo razvili s Pd katalizirane reakcije pripajanja substratov na heterociklične sisteme. S pomočjo kvantno-mehanskih metod smo ugotovili pomemben vpliv porazdelitve elektronske gostote po molekuli barvila na selektivnost vezave na celulozna vlakna. V sodelovanju s prof. Kočvarjem in prof. Obrezo (Univerza v Ljubljani) smo raziskovali strukturne lastnosti različnih organskih spojin.

Po uspešni sintezi in karakterizaciji kompleksov lantanoidnih halogenidov z nekaterimi enostavnimi O- in N-donorskimi ligandi smo princip sinteze in istovrstne ligande uporabili še pri sintezi kompleksov kloridov oziroma bromidov prehodnih kovin z enostavnejšimi polietri. Dokazali smo, da je strukturna pestrost tovrstnih kompleksov zaradi lastnosti elementov d-bloka še večja kot v primeru lantanoidov; tako smo izolirali različne eno- in dvojedrne komplekse ter polimerne 1-D komplekse. V primeru kromovih kompleksov smo izolirali izomerni strukturi.

Uspeli smo izolirati nove modelne spojine za encime z različnimi kovinskimi ioni (s pirazol-karboxilatnimi ligandi) ter spojine z modeli za lignin (guaiaicilne enote) za oceno načina vezave bakrovih(II) ionov na zaščitenih lesenih površinah. Magnetne interakcije teh spojin smo preverjali z magnetno odzivnostjo vzorcev, ter s teoretsko povezavo s praktičnimi podatki, kar smo našli v magnetno gostih snoveh, kot tudi nepričakovano preko šibkejših nekovalentnih povezavah.

Na področju materialov smo dosegli naslednje rezultate:

Sintetizirali in karakterizirali smo materiale za različne elektrokemijske sisteme, med njimi katodni material lantanov manganit substituiran s stroncijem (LSM) z visoko elektronsko prevodnostjo in visoko katalitsko aktivnostjo za redukcijo kisika. Električne lastnosti sintranih vzorcev smo pojasnili s teoretičnim modelom vrtenine za opis električne prevodnost porozne keramike.

Materiale na osnovi NiO-YSZ (nikelj oksid in cirkonijev dioksid stabiliziran z itrijevimi oksidom), ki jih uporabljamo za anode, smo sintetizirali z zgorevalno sintezo. Največja prednost te metode je, da sta obe fazi NiO in YSZ v kompozitu naključno porazdeljeni na nanometrskem nivoju.

V sklopu študijev materialov za visokotemperaturne gorivne celice (SOFC) smo se posvetili tudi problemu deaktivacije v primeru, da gorivna celica uporablja za gorivo metan ali višje ogljikovodike in ugotovili, da pri tem nastajajo različne ogljikove oblike.

Druga skupina materialov so bili katalizatorji. Katalizator na osnovi Cu/ZnO smo pripravili v dvostopenjskem postopku z ureo iz vodne raztopine pri temperaturi 90 °C. Nastali delci so tudi po termični obdelavi ohranili tako velikost kot obliko. Cu/ZnO produkti so pokazali katalitsko aktivnost za reakcijo parnega reforminga metana.

Priravili smo tudi Pd-CNT katalizatorje za oksidacijo mravljinčne kisline. uporabili smo različne impregnacijske metode v različnih reakcijskih medijih (EtOH, MeOH, THF, H₂O) in z različnimi redukcijskimi reagenti (hidrokinon ali SDS). Povprečna velikost precipitiranih Pd nanodelcev na CNT nosilcu je bila med 2,6 nm in 18,0 nm, lahko pa jo kontroliramo z izbiro različnih reakcijskih medijev oziroma eksperimentalnih pogojev.

Kot učinkoviti katalizatorji za oksidacijo vodika in redukcijo kisika so se pokazali platinski materiali, na površini dekorirani z molekulami calix[4] arenov, o katerih smo poročali v najprestižnejši mednarodni reviji Nature materials.

Tretja skupina materialov so bili polimerni funkcionalizirani grafenski nanotrakovi (PF-GNR-ji). Pripravili smo jih s sintezo v eni posodi. Med plasti večstenskih ogljikovih nanocevk (MWCNTs) so vrinjeni kalijevi atomi v plinasti ali tekoči fazi, čemur sledi dodajanje vinilnih ali epoksidnih monomerov, kar se odraža na PF-GNR-jih. Polimerni funkcionalizirani nanotrakovi (PF-GNR) imajo potencialne uporabe v prevodnih kompozitih, prozornih elektrodah, toplotnih vezjih in superkondenzatorjih.

Strukturna analiza v programski skupini je pomembno prispevala h kakovosti objavljenih rezultatov, na področju strukturne analize pa smo sodelovali tudi s številnimi drugimi raziskovalnimi skupinami v Sloveniji in svetu.

ZNANSTVENI DOSEŽKI

- Selektivni katalizatorji za reakcije oksidacije vodika in redukcije kisika z nanosom molekul calix[4]arenov na platino
Nature Pub. Group; Nature materials; 2010; Vol. 9, no. 12; str. 998–1003; Impact Factor: 29.897; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.13; A⁺: 1; A¹: 1; WoS: EI, PM, UB, UK; Avtorji / Authors: Genorio Boštjan, Strmčnik Dušan, Subbaraman Ram, Tripkovic Dusan, Karapetrov Goran, Stamenkovic Vojislav, Pejovnik Stane, Markovic Nenad M.
Priprava novih katalizatorjev za gorivne celice s polimernimi membranami mora upoštevati dva enako pomembna temeljna principa: optimiziranje katalitskega delovanja in dolgoročno stabilnost katalizatorja in nosilca. Metode za izboljšanje aktivnosti so različne, od legiranja platine do sinteze platinskih jedro-ovoj katalizatorjev. Metode za izboljšanje stabilnosti ogljikovih nosilcev katalitskih nanodelcev pa so omejene. Še posebej ob izklopu (ko se vodik izpihuje z anode z zrakom) in vklopu (ko se z anode z vodikom izpihuje zrak), ko lahko katodni potencial doseže 1.5 V. Pri teh pogojih je stabilnost katode (oksidacija ogljika) močno odvisna od neželenih procesov redukcije kisika na anodni strani. To poudari pomen priprave selektivnih katalizatorjev, ki zavrejo redukcijo kisika, medtem, ko popolnoma ohranijo Pt-podobno aktivnost za oksidacijo vodika. Pokazali smo, da kemijsko modificirana platina s samourejeno monoplastjo calix[4]arenskih molekul ustreza temu zahtevnemu kriteriju.
- Novi organorutenijevi (II) β-diketonati kot katalizatorji za orto ariliranje s C-H aktivacijo
American Chemical Society; Organometallics; 2013; Vol. 32, issue 2; str. 609-616; Impact Factor: 4.145; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.608; A⁺: 1; WoS: EC, EE; Avtorji / Authors: Seršen Sara, Kljun Jakob, Požgan Franc, Štefane Bogdan, Turel Iztok Poleg kinolonov, ki so O,O ligandi, smo pripravili tudi rutenijeve komplekse z β-diketonati. Takšni ligandi se koordinirajo podobno kot kinoloni, znano pa je, da imajo zanimive fizikalno-kemijske ter biološke lastnosti. Pripravili smo pet organorutenijevih kompleksov, ki imajo značilno strukturo pianističnega stolčka. Spojine smo izolirali iz organokovinskega rutenijevega prekursorja, fluoriranih β-diketonatov v prisotnosti natrijevega metoksida. Vse spojine smo okarakterizirali s standardnimi fizikalno-kemijskimi tehnikami (NMR, rentgenska strukturna analiza, itd). Ugotovljeno je bilo, da so te spojine uporabni katalizatorji za direktno arilacijo 2-fenilpiridina. Literaturni podatki kažejo, da so spojine, ki izražajo katalitske lastnosti, pogosto biološko aktivne. Zato v prihodnje nameravamo testirati tudi biološke lastnosti teh spojin.
- Študija izboljšanih katalizatorjev za elektrooksidacijo mravljinčne kisline na osnovi Pd-CNT disperzij: priprava, lastnosti, karakterizacija
Elsevier Sequoia; Journal of power sources; 2013; Vol. 235, no. 1; str. 111–116; Impact Factor: 4.675; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.368; A⁺: 1; WoS: HQ, ID; Avtorji / Authors: Marinšek Marjan, Šala Martin, Jančar Boštjan

V delu je opisana priprava in karakterizacija Pd-CNT katalizatorjev za oksidacijo mravljinčne kisline. Karakterizacija katalizatorjev je predstavljena s primerjavo med elektrokemijskimi karakteristikami vzorcev in njihovo morfologijo. Pd.CNT katalizatorji so bili pripravljene z različni impregnacijskimi metodami, v različnih reakcijskih medijih (EtOH, MeOH, THF, H₂O) in z različnimi redukcijskimi reagenti (hidrokinon ali SDS). Povprečna velikost precipitiranih Pd nanodelcev na CNT nosilcu je bila med 2,6 nm in 18,0 nm. V delu je bilo pokazano, da lahko velikost precipitiranih Pd nanodelcev uspešno kontroliramo z izbiro različnih reakcijskih medijev oziroma eksperimentalnih pogojev priprave katalizatorja. Karakterizacija katalizatorjev z metodo ciklovoltometrije je pokazala, da je maksimalna gostota anodnega toka močno odvisna od velikosti Pd nanodelcev. Elektrooksidacija mravljinčne kisline je lahko kinetično ali difuzijsko kontrolirana elektrodna reakcija, odvisno od morfoloških karakteristik Pd nanodelcev.

- Funkcionalizirani grafenski nanotrakovi preko anionske polimerizacije, sprožene z ogljikovimi nanocevkami, interkaliranimi z alkalijskimi kovinami
American Chemical Society; ACS nano; 2013; Vol. 7, no. 3; str. 2669–2675; Impact Factor: 12.062; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.402; A": 1; A': 1; WoS: DY, EI, NS, PM; Avtorji / Authors: Lu Wei, Ruan Gedeng, Genorio Boštjan, Zhu Yu, Novosel Barbara, Peng Zhiwei, Tour James M. Opisana je priprava polimernih funkcionaliziranih graphene nanotrakov (PF-GNR-ji) s sintezo v eni posodi. Med plasti večstenskih ogljikovih nanocevk (MWCNTs) so vrinjeni kalijevi atomi v plinasti ali tekoči fazi, čemur sledi dodajanje vinilnih ali epoksidnih monomerov, kar se odraža na PF-GNR-jih. Vrstična elektronska mikroskopija, termogravimetrična masna spektrometrija in X-ray fotoelektronski spekter smo uporabili za označevanje PF-GNRs. Pojasnjene so tudi povezave med delitvijo MWCNTs, intrinzične lastnosti intekalantov in stopnjo okvar grafitnih izhodnih MWCNTs. Polimerni funkcionalizirani nanotrakovi (PF-GNR) bi bili lahko uporabni v prevodnih kompozitov, prozorne elektrode, toplotnih vezij in superkondenzatorjih.
- [pi]-zlaganje kinoidnih obročev v kristalih diakva vodikovih kloranilatov Royal Society of Chemistry; CrystEngComm; 2009; Vol. 11, iss. 7; str. 1407-1415; Impact Factor: 4.183; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 3.755; A": 1; WoS: DY, FI; Avtorji / Authors: Molčanov Krešimir, Kojić-Prodić Biserka, Meden Anton Alkalijski diakva kompleksi vodikove kloranilne kisline [KHCA(H₂O)₂], [RbHCA(H₂O)₂] and [CsHCA(H₂O)₂], in solif NH₄HCA·2H₂O so bili sintetizirani in strukturno analizirani. Homologi litija in natrija niso stabilni, dobili smo njuna analoga [LiHCAEtOH] in [Na₅HCA(CA)₂(H₂O)₁₀]. Vse strukture razen [LiHCAEtOH] kažejo 3-D z vodikovo povezana ogrodjas poudarjenimi ππ interakcijami med anioni, ki jih ojačujejo privlačne polarne interakcije. Najkraša razdalja emed centroidi kloranilatnih obročev [3.229(2) Å] je bila opažena v strukturi [KHCA(H₂O)₂]. Analiza je osredotočena na nekovalentne interakcijek ki usmerjajo samourejanje, kar je pomembno za razumevanje le tega tudi v bioloških sistemih.

DRUGI POMEMBNI ZNANSTVENI DOSEŽKI

- Kompleksi kobaltovega (I) bromida z O-donorskimi ligandi
Croatian Academy of Sciences and Arts, Croatian Crystallographic Association, Croatian Association of Crystallographers; Book of abstracts and program; 2013; Str. 48; Avtorji / Authors: Petriček Saša Vabljeno predavanje na Mednarodnem kristalografkem srečanju. Podan je bil pregled večletnega dela na tem področju.
- Metode na osnovi topil za proizvodnjo grafenskih nanotrakov
European Patent Office; 2013; Str. 1–103; Avtorji / Authors: Tour James M., Lu Wei, Genorio Boštjan Rezultat mednarodnega sodelovanja. Prijavljen je je nov način proizvodnje grafenskih nanotrakov..
- Podobe znanja: dr. Iztok Turel
2013; Avtorji / Authors: Turel Iztok Intervju o znanstvenih dosežkih na nacionalnem radiu.

- Novi materiali: oddaja Sadovi znanja na TV Pika, četrtek 27. nov. 2008. Ljubljana: TV Pika, 2008. Ivan Leban, Stane Pejovnik. TV Pika, četrtek 27. nov. 2008. Ljubljana. Poljudna predstavitev novih materialov, ki so v veliki meri plod raziskovalnega dela znotraj programske skupine.
- Kristalne oblike ksanturinske kisline in postopki za njihovo pripravo Urad Republike Slovenije za intelektualno lastnino; 2013; 19 str.; Avtorji / Authors: Tratar-Pirc Elizabeta, Cer Kerčmar Ksenija, Bukovec Peter, Modec Barbara, Stare Katarina, Meden Anton. Ksanturinska kislina je znan antioksidant in v patentu so zaščitene novo odkrite polimorfne oblike, ki bi lahko imele še ugodnejšo biodostopnost od doslej znane oblike.

RESEARCH PROGRAMME REPORT

RESEARCH TOPICS AND GOALS

Program group has two main focuses. These are coordination chemistry and novel materials for various applications. Both of them are linked by the expertise and equipment for structural analysis that enables understanding of the dependence of function of the synthesized compounds and materials on their structure.

In the field of coordination compounds, the following achievements were accomplished:

In collaboration with the group of prof. G. Psomas (Aristotle University of Thessaloniki, GR) we studied the structural, physicochemical and biological properties of zinc, nickel, manganese and copper compounds with antibacterial agents quinolones as well as non-steroidal anti-inflammatory agents. In collaboration with the research group of prof. E. Alessio (University of Trieste, ITA) we studied the structural and biological properties of ruthenium potential anticancer agents bearing terpyridine or triazole ligands. We also successfully started a new collaboration with prof. K. Andjelković from the University of Belgrade in the field of copper and zinc complexes of biologically active 2-acetylpyridine derivatives.

Vanadium, cobalt, copper and zinc compounds with the derivatives of diketones and picolinic acid were synthesized. In collaboration with Prof. Liu (East China Normal University, Shanghai, CN) an efficient method of Pd-catalyzed crosscoupling on heteroaromatics was. Using quantum-mechanical methods, we found a significant effect of electron density distribution of the dye molecule on the selectivity of binding to cellulose fibers. In collaboration with prof. Kočevar and prof. Obreza (University of Ljubljana) we investigated the structural properties of different organic compounds.

In syntheses of transition metal halide complexes with simple O- and N-donor ligands were applied similar procedures and the same ligands as before in the syntheses of lanthanide halide complexes. A higher variation of nuclearities and coordination geometries were found for transition metal halide complexes in comparison to lanthanide halide complexes with the same ligands; mononuclear, dinuclear and polymeric 1-D complexes of transition metal halide complexes were isolated. A complex of chromium was isolated in two polymorphic forms.

We were able to isolate the new model compounds for enzymes with various metal ions (with pyrazole - carboxylate ligands) and compounds with the lignin models (guayacil units) for the copper(II) ions connection evaluation at the protected wooden surfaces. Magnetic interactions of these compounds were examined by the magnetic response of the samples, as well as with the theoretical connection to the practical information, which we found in dense magnetic materials, and unexpectedly through non-covalent linkages.

In the field of materials, the following results were obtained:

Materials for solid oxide fuel cells were synthesized and their properties were determined, including cathode material lanthanum manganite doped with strontium (LSM) with high electronic conductivity

and high catalytic activity for oxygen reduction. The electrical characteristics of the sintered LSM elements were, for the first time in the literature, described with respect to a model for the sine-wave approximation of the conductivity change for porous materials.

NiO-YSZ based cermets used as SOFC anodes materials were prepared by the citrate-nitrate combustion. The main advantage of the preparation method used was reflected in the fact that after the synthesis both phases are randomly mixed on a nanometer scale.

In the frame study of materials for high temperature solid oxide fuel cells (SOFC) we also studied a problem of deactivation when the cell uses methane or higher hydrocarbons as a fuel. The results show methane dissociation on Ni-YSZ (nickel-yttrium stabilized zirconia) under the temperature-programmed mode in three general steps.

The second type of materials studied were catalysts. Cu/ZnO based catalysts was prepared by two step urea aqueous solution process at low temperature (90 °C). The particles preserved their size and shape after the heat treatment. Prepared Cu/ZnO samples showed catalytic activity for the reaction of steam reforming of methane.

We have synthesized several CNT-supported Pd-based catalysts and compares their morphological as well as electrochemical characteristics for formic acid electro-oxidation. Pd/C catalysts were prepared via various impregnation methods, using different reaction media (EtOH, MeOH, THF, H₂O) or reducing agents (hydroquinone or SDS). The average mean particle sizes of the precipitated Pd varied from 2.6 nm to 18.0 nm. It was further shown that the particle size of Pd/C dispersions can be easily controlled by changing the solvent and experimental conditions during the preparation procedure.

The third type of materials studied were the polymer-functionalized graphene nanoribbons (PF-GNRs) in a one-pot synthesis. Multiwalled carbon nanotubes (MWCNTs) were intercalated by potassium under vapor- or liquid-phase conditions, followed by the addition of vinyl or epoxide monomers, resulting in PF-GNRs. The PF-GNRs could have applications in conductive composites, transparent electrodes, heat circuits, and supercapacitors.

Structure analysis, performed in our group, contributed significantly to the quality of the results. Furthermore, the structure analysis was a bridge to many other research groups in Slovenia and in the world.

SCIENTIFIC ACHIEVEMENTS

- Selective catalysts for the hydrogen oxidation and oxygen reduction reactions by patterning of platinum with calix[4]arene molecules

Nature Pub. Group; Nature materials; 2010; Vol. 9, no. 12; str. 998–1003; Impact Factor: 29.897; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.13; A²: 1; A¹: 1; WoS: EI, PM, UB, UK; Avtorji / Authors: Genorio Boštjan, Strmčnik Dušan, Subbaraman Ram, Tripkovic Dusan, Karapetrov Goran, Stamenkovic Vojislav, Pejovnik Stane, Markovic Nenad M.

The design of new catalysts for polymer electrolyte membrane fuel cells must be guided by two equally important fundamental principles: optimization of their catalytic behaviour as well as the long-term stability of the metal catalysts and supports in hostile electrochemical. The methods used to improve catalytic activity are diverse, ranging from the alloying and de-alloying of platinum to the synthesis of platinum core-shell catalysts. However, methods to improve the stability of the carbon supports and catalyst nanoparticles are limited, especially during shutdown (when hydrogen is purged from the anode by air) and startup (when air is purged from the anode by hydrogen) conditions when the cathode potential can be pushed up to 1.5 V. Under the latter conditions, stability of the cathode materials is strongly affected (carbon oxidation reaction) by the undesired oxygen reduction reaction (ORR) on the anode side. This emphasizes the importance of designing selective anode catalysts that can efficiently suppress the ORR while fully preserving the Pt-like activity for

the hydrogen oxidation reaction. Here, we demonstrate that chemically modified platinum with a self-assembled monolayer of calix[4]arene molecules meets this challenging requirement.

- Novel organoruthenium(II) β -diketonates as catalysts for ortho arylation via C-H activation
American Chemical Society; *Organometallics*; 2013; Vol. 32, issue 2; pp. 609-616; Impact Factor: 4.145; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.608; A': 1; WoS: EC, EE; Avtorji / Authors: Seršen Sara, Kljun Jakob, Požgan Franc, Štefane Bogdan, Turel Iztok
In addition to quinolones, which are O,O ligands, we prepared ruthenium complexes of various β -diketonates. Such ligands coordinate similarly as quinolones and it is known that their metal complexes have interesting physico-chemical and biological properties. In the presence of sodium methoxide five different fluorinated β -diketone ligands easily reacted with the organoruthenium precursor generating neutral complexes 1–5 with typical “piano-stool” geometry. All synthesized compounds were characterized by multinuclear NMR, X-ray diffraction and other standard physico-chemical methods. It was found that these compounds are ready-to-use catalysts, which are efficient in direct arylation of 2-phenylpyridine. The literature data indicates that frequently compounds with catalytic properties also exert biological activity, and we plan to test the biological activity of the isolated compounds in the future.
- A study towards superior carbon nanotubes-supported Pd-based catalysts for formic acid electro-oxidation
Elsevier Sequoia; *Journal of Power Sources*; 2013; Vol. 235, no. 1; pp. 111-116; Impact Factor: 4.675; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.368; A': 1; WoS: HQ, ID; Avtorji / Authors: Marinšek Marjan, Šala Martin, Jančar Boštjan
This study investigated several CNT-supported Pd-based catalysts and compared their morphological as well as electrochemical characteristics for formic acid electro-oxidation. Pd/C catalysts were prepared via various impregnation methods, using different reaction media (EtOH, MeOH, THF, H₂O) or reducing agents (hydroquinone or SDS). The average mean particle sizes of the precipitated Pd varied from 2.6 nm to 18.0 nm. It was further shown that the particle size of Pd/C dispersions can be easily controlled by changing the solvent and experimental conditions during the preparation procedure. Measurements of catalytic activity using cyclic voltammetry revealed the strong dependence of particle size on the anodic peak current density. The electro-oxidation of formic acid may be kinetically-controlled or diffusion-controlled with respect to the morphological characteristics of Pd.
- Functionalized graphene nanoribbons via anionic polymerization initiated by alkali metal-intercalated carbon nanotubes
American Chemical Society; *ACS nano*; 2013; Vol. 7, no. 3; str. 2669-2675; Impact Factor: 12.062; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.402; A'': 1; A': 1; WoS: DY, EI, NS, PM; Avtorji / Authors: Lu Wei, Ruan Gedeng, Genorio Boštjan, Zhu Yu, Novosel Barbara, Peng Zhiwei, Tour James M.
The preparation of polymer-functionalized graphene nanoribbons (PF-GNRs) in a one-pot synthesis is described. Multiwalled carbon nanotubes (MWCNTs) were intercalated by potassium under vapor- or liquid-phase conditions, followed by the addition of vinyl or epoxide monomers, resulting in PF-GNRs. Scanning electron microscopy, thermogravimetric mass spectrometry, and X-ray photoelectron spectroscopy were used to characterize the PF-GNRs. Also explored here is the correlation between the splitting of MWCNTs, the intrinsic properties of the intercalants and the degree of defects and graphitization of the starting MWCNTs. The PF-GNRs could have applications in conductive composites, transparent electrodes, heat circuits, and supercapacitors.
- [pi]-Stacking of quinoid rings in crystals of alkali diaqua hydrogen chloranilates
Royal Society of Chemistry; *CrystEngComm*; 2009; Vol. 11, iss. 7; str. 1407-1415; Impact Factor: 4.183; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 3.755; A': 1; WoS: DY, FI; Avtorji / Authors: Molčanov Krešimir, Kojić-Prodić Biserka, Meden Anton

The alkali diaqua complexes of hydrogen chloranilic acid of [KHCA(H₂O)₂], [RbHCA(H₂O)₂] and [CsHCA(H₂O)₂], and the salt of NH₄HCA·2H₂O were prepared and their crystal structures determined. The homologues of lithium and sodium are not stable, but their analogues [LiHCAEtOH] and [Na₅HCA(CA)₂(H₂O)₁₀] were obtained. All crystal structures studied, with exception of [LiHCAEtOH], reveal 3D-hydrogen bond networks with pronounced $\pi\pi$ interactions between anions supported by attractive polar interactions; the shortest separation distance between the centroids [3.229(2) Å] of the hydrogen chloranilate rings in a face-to-face stack is observed in the structure of [KHCA(H₂O)₂]. The analysis presented is focused on noncovalent interactions that direct self-assembly of molecules, which is important also for biological systems.

OTHER IMPORTANT SCIENTIFIC ACHIEVEMENTS

- Complexes of cobalt (II) bromide with O-donor ligands
Croatian Academy of Sciences and Arts, Croatian Crystallographic Association, Croatian Association of Crystallographers; Book of abstracts and programme; 2013; p. 48; Avtorji / Authors: Petriček Saša
Invited plenary lecture at international crystallographic meeting. A survey of several-years' work in this area was given.
- Solvent-based methods for production of graphene nanoribbons
European Patent Office; 2013; pp. 1–103; Avtorji / Authors: Tour James M., Lu Wei, Genorio Boštjan
Patent application. As a result of international collaboration, a novel method of production of graphene nanoribbons is claimed.
- Forms of knowledge: dr. Iztok Turel
2013; Avtorji / Authors: Turel Iztok; Interview about scientific achievements on a national radio programme.
- New materials, TV show Fruits of knowledge, TV Pika, 27. nov. 2008. Ljubljana: TV Pika, 2008. Ivan Leban, Stane Pejovnik. TV Pika, 27. nov. 2008. Ljubljana. Public presentation of new materials that are in a large part product of the research activity of the members of the programme group.
- Crystal forms of xanturenic acid and procedures for preparation thereof
Urad Republike Slovenije za intelektualno lastnino; 2013; 19 p.; Avtorji / Authors: Tratar-Pirc Elizabeta, Cer Kerčmar Ksenija, Bukovec Peter, Modec Barbara, Stare Katarina, Meden Anton. Xanturenic acid is a known antioxidant. In this Slovene patent, new crystalline forms and methods of producing them are given.

**SINTEZE IN TRANSFORMACIJE ORGANSKIH SPOJIN. NOVI
REAGENTI V STEREOSELEKTIVNI IN REGIOSELEKTIVNI SINTEZI
AMINOKISLIN KOT INTERMEDIATOV V ORGANSKI SINTEZI**
SYNTHESSES AND TRANSFORMATIONS OF ORGANIC COMPOUNDS.
NEW REAGENTS IN STEREOSELECTIVE AND REGIOSELECTIVE
SYNTHESIS OF AMINO ACIDS AS INTERMEDIATES IN ORGANIC
SYNTHESIS

PROGRAMSKA SKUPINA / RESEARCH PROGRAMME GROUP

P1-0179

VODJA PROGRAMSKE SKUPINE / PRINCIPAL RESEARCHER

akademik prof. dr. Branko Stanovnik

SODELAVCI PROGRAMSKE SKUPINE / RESEARCH PROGRAMME STAFF

Raziskovalci / *Researchers*

akad. prof. dr. Branko Stanovnik

prof. dr. Jurij Svete

dr. Uroš Grošelj

doc. dr. Franc Požgan

doc. dr. Bogdan Štefane

Mladi raziskovalci / *Young Researchers*

Jona Mirnik

Ana Novak

Eva Pušavec

Sebastijan Ričko

Luka Šenica

Podiplomska študenta / *Postgraduate Students*

Helena Brodnik

Benjamin Prek

Tehniki / *Technicians*

Tončka Kozamernik Hudeček

Tatjana Toporiš Stipanovič

POROČILO O REALIZACIJI PROGRAMA / RESEARCH PROGRAMME REPORT

V letu 2014 smo nadaljevali z raziskavami v skladu z zastavljenimi cilji na naslednjih področjih:
In 2014 the programme was continued in agreement with the aims and goals in the following fields:

ZNANSTVENI IN DRUGI RELEVANTNI DOSEŽKI / SCIENTIFIC AND OTHER RELEVANT ACHIEVEMENTS

ORIGINALNI ZNANSTVENI ČLANKI / ORIGINAL SCIENTIFIC ARTICLES

1. Cikloadicije in alternativne Michaelove adicije elektronsko revnih sistemov na enaminone in sorodne spojine

a) Enostavna sinteza derivatov 4-aroil-5-metil-1H-imidazol-2(3H)-ona (analogov Enoksimona) iz aril ketonov preko enaminonov. / *A simple synthesis of 4-aroil-5-methyl-1H-imidazol-2(3H)-one derivatives (Enoxymone analogues) from aryl methyl ketones via enaminones.*

Razvita je bila enostavna petstopenjska sinteza analogov Enoksimona. Reakcija aril metil ketonov z DMFDMA je vodila do ustreznih N,N-dimetilenaminonov, ki smo jih s substitucijo z amonijevim acetatom pretvorili v ustrezne amino spojine. Sledila je adicija na dietil azodikarboksilat, dobljene adukte pa smo z bazno katalizo ciklizirali do ustreznih imidazonov. Hidroliza estrskih skupin s sledečo dekarboksilacijo in deaminiranjem je nato vodila do tarčnih 4-aroil-5-metil-1H-imidazol-2(3H)-onov.

Aryl methyl ketones gave with N,N-dimethylacetamide dimethylacetal (DMADMA) (E)-1-aryl-3-(dimethylamino)-but-2-en-1-ones. Substitution of the N,N-(dimethylamino) group in the reaction with ammonium acetate afforded the corresponding (Z)-3-amino-1-aryl-but-2-en-1-ones. In the reaction with diethyl azodicarboxylate intermediates were formed, which were, in most cases without isolation, cyclized into ethyl (5-aroil-4-methyl-2-oxo-2,3-dihydro-1H-imidazol-1-yl)carbamates. Hydrolysis of the ester group, followed by the decarboxylation and deamination of intermediates produced 4-aroil-5-methyl-1H-imidazol-2(3H)-ones.

1. BEZENŠEK, Jure, GROŠELJ, Uroš, STARE, Katarina, SVETE, Jurij, STANOVNIK, Branko. A simple synthesis of 4-aroil-5-methyl-1H-imidazol-2(3H)-one derivatives (Enoxymone analogues) from aryl methyl ketones via enaminones. *ARKIVOC*, ISSN 1551-7004, 2014, no. II, str. 294-307 [COBISS.SI-ID 1649455]

b) Reakcije enaminonov z DMADMA. Enostavna enolončna sinteza polisubstituiranih benzenov brez uporabe kovin. / *Reactions of enaminones and related compounds with N,N-dimethylacetamide dimethyl acetal. A simple one-pot metal-free synthesis of polysubstituted benzene derivatives.*

Razvita je bila enostavna enolončna sinteza alkil, aril, heteroari in alkoksikarbonil substituiranih 1,3-bis(dimetilamino)benzenov. Produkti so bili pripravljene iz ustreznih metil ketonov ali aktivnih metilenskih spojin (alfa glede na karbonilno skupino) z uporabo N,N-dimetilacetamida (DMADMA) kot reagenta.

Herein a simple one-pot metal-free synthesis of alkyl-, aryl-, heteroaryl- and alkoxy-carbonyl substituted 1,3-bis(dimethylamino)benzene derivatives is described. The products were prepared from the corresponding methyl ketones or compounds with an α -methylene group in regard to the carbonyl group, using N,N-dimethylacetamide dimethyl acetal (DMADMA) as the reagent.

2. PREK, Benjamin, BEZENŠEK, Jure, KASUNIC, Marta, GROŠELJ, Uroš, SVETE, Jurij, STANOVNIK, Branko. Reactions of enaminones and related compounds with N,N-dimethylacetamide dimethyl acetal. A simple one-pot metal-free synthesis of polysubstituted benzene

derivatives. *Tetrahedron*, ISSN 0040-4020. [Print ed.], 2014, vol. 70, no. 14, str. 2359-2369, doi: [10.1016/j.tet.2014.02.039](https://doi.org/10.1016/j.tet.2014.02.039). [COBISS.SI-ID [1681711](#)]

c) Enostavna sinteza 2,4,5-trisubstituiranih piridinov in piridin-N-oksidov v odsotnosti kovin. / A simple metal-free synthesis of 2,4,5-trisubstituted pyridines and pyridine N-oxides by [2+2] cycloaddition of enaminones to propyne iminium salts.

Opisana je enostavna sinteza 2,4,5-trisubstituiranih piridinov in piridin-N-oksidov v odsotnosti kovin. Sinteza bazira na [2+2] cikloadiciji enaminonov, pripravljenih in situ iz alkil-, aril- in heteroaryl metil ketonov, N,N-dimetilformamid dimetil acetala (DMFDMA) in propin iminijevih soli kot elektronsko revnih acetilenov.

Herein a simple one-pot metal-free synthesis of 2,4,5-trisubstituted pyridines and pyridine N-oxides by [2+2] cycloaddition of enaminones, which are prepared in situ from alkyl, aryl and heteroaryl methyl ketones using N,N-dimethylformamide dimethyl acetal (DMFDMA), and propyne iminium salts as electron-poor acetylenes, is described.

3. BEZENŠEK, Jure, PREK, Benjamin, GROŠELJ, Uroš, GOLOBIČ, Amalija, STARE, Katarina, SVETE, Jurij, KANTLEHNER, Willi, MAAS, Gerhard, STANOVNIK, Branko. A simple metal-free synthesis of 2,4,5-trisubstituted pyridines and pyridine N-oxides by [2+2] cycloaddition of enaminones to propyne iminium salts. *Zeitschrift für Naturforschung. B, A journal of chemical sciences*, ISSN 0932-0776, 2014, vol. 69b, no. 5, str. 554-566, doi: [10.5560/ZNB.2014-4021](https://doi.org/10.5560/ZNB.2014-4021). [COBISS.SI-ID [1714479](#)]

2. Nove metode sinteze heterocikličnih sistemov in sinteze novih heterocikličnih sistemov / New methods for the synthesis of heterocyclic systems and syntheses of novel heterocyclic systems

a) Sinteza pirazolo[1,5-a]pirimidin-3-karboksamidov / Synthesis of pyrazolo[1,5-a]pyrimidine-3-carboxamides

Razvili smo sintezo 7-substituiranih pirazolo[1,5-a]pirimidin-3-karboksamidov. Najprej smo pripravili 7-hidroksipirazolo[1,5-a]pirimidin-3-karboksilat, ki smo ga s POCl_3 pretvorili v reaktivni klorid, ki smo ga naprej pretvarjali z amini, benzil alkoholom in fenilborovo kislino v prisotnosti Pd-katalizatorja v različne 7-substituirane derivate. Hidroliza estra s sledečim amidiranjem je vodila do ciljnih spojin. Regioselektivnost N-alkiliranja je bila odvisna od tipa karboksi skupine. Reakcije s sekundarnimi amidi so vodile do 1-alkiliranih, reakcije z estri in terciarnimi amidi pa do 4-alkiliranih produktov.

The synthesis of 7-substituted pyrazolo[1,5-a]pyrimidine-3-carboxamides was studied. First, methyl 7-hydroxypyrazolo[1,5-a]pyrimidine-3-carboxylate was prepared and treated with POCl_3 to give the highly reactive 7-chloro derivative, which was reacted with amines, benzyl alcohol, and phenylboronic acid in the presence of Pd-catalyst to give the corresponding 7-substituted derivatives. Hydrolysis of the esters followed by amidation gave the corresponding carboxamides. Regioselectivity of N-alkylation of 7-hydroxypyrazolo[1,5-a]pyrimidine-3-carboxylic acid derivatives was tunable by the carboxy function. Alkylation of the secondary amides furnished the 1-alkyl derivatives, whereas the esters and the tertiary amides gave the 4-alkyl derivatives, selectively.

4. DREV, Miha, GROŠELJ, Uroš, MEVEC, Špela, PUŠAVEC, Eva, ŠTREKELJ, Janja, GOLOBIČ, Amalija, DAHMANN, Georg, STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. Regioselective synthesis of 1- and 4-substituted 7-oxopyrazolo[1,5-a]pyrimidine-3-carboxamides. *Tetrahedron*, ISSN 0040-4020. [Print ed.], 2014, vol. 70, no. 44, str. 8267-8279, doi: [10.1016/j.tet.2014.09.020](https://doi.org/10.1016/j.tet.2014.09.020). [COBISS.SI-ID [1781039](#)]

3. Sinteza analogov peptidov / *Synthesis of peptide analogues.*

a) Sinteza vinilognih peptidov na osnovi enamionov / *Synthesis of enamionone-based vinylogous peptides*

Sintetizirali smo prve predstavnike novega tipa vinilognih peptidov z vinilnim fragmentom vrnjenim v peptidno C–N vez. Ciljne spojine smo pripravili iz ininskih intermediatov, ki so lahko dostopni iz Boc-amino kislin. Pripajanje na 'C-terminalu' smo dosegli z 1,4-adicijo amino estra, medtem ko je pripajanje na 'N-terminalu' zahtevalo začasno zaščito acidolitsko labilnega enamionskega fragmenta. S ciklizacijo inona s hidroksilaminom, acidolitsko odstranitvijo Boc skupine, aciliranjem amina in hidrogenolitsko odščito enamina v prisotnosti GlyOMe smo pripravili tripeptide z vinilognim amidom kot osrednjo enoto.

The synthesis of a novel type of vinylogous peptides with the vinyl fragment inserted into the peptide C–N bond was developed. Title compounds were prepared via ynone intermediates that are easily available from Boc-amino acids. Coupling at the 'C-terminal' was achieved by 1,4-addition of amino esters, whereas coupling at the 'N-terminal' required temporary protection of the acidolytically labile enamino moiety. Thus, cyclisation of the ynone with hydroxylamine, acidolytic removal of the Boc group, acylation of the free amine, and hydrogenolytic deprotection of the enamino moiety in the presence of GlyOMe led to the tripeptides with vinylogous amide as the central building block.

5. ŠENICA, Luka, GROŠELJ, Uroš, KASUNIČ, Marta, KOČAR, Drago, STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. Synthesis of enamionone-based vinylogous peptides. *European journal of organic chemistry*, ISSN 1434-193X, 2014, vol. 2014, no. 15, str. 3067-3071, doi: [10.1002/ejoc.20140203](https://doi.org/10.1002/ejoc.20140203). [COBISS.SI-ID 1695535]

4. Sinteza in pretvorbe 3-pirazolidinonov / *Synthesis and transformations of 3-pyrazolidinones.*

a) Sinteza aza-deoksa analogov D-cikloserina / *Synthesis of aza-deoxa analogues of D-cycloserine*

Razvili smo enostavno petstopenjsko sintezo (4R*,5R*)-4-aminopirazolidin-3-onov kot analogov D-cikloserina. Metoda izhaja iz dvostopenjske priprave (4R*,5R*)-4-(benziloksikarbonilamino)pirazolidin-3-onov, ki ji sledi reduktivno alkiliranje na položaju N(1), alkiliranje amidnega dušika z alkil halidi in simultano hidrogenolitsko odščito in reduktivnim alkiliranjem primarne amino skupine. Metoda omogoča enostavno sekvenčno funkcionalizacijo pirazolidinonskega sistema z uporabo le dveh vrst splošno dostopnih reagentov, aldehydov/ketonov in alkil halidov. Strukture spojin smo določili z NMR spektroskopijo in z rentgensko difrakcijo.

A simple five-step synthesis of fully substituted (4R,5R*)-4-aminopyrazolidin-3-ones as analogs of D-cycloserine was developed. It comprises a two-step preparation of 5-substituted (4R*,5R*)-4-(benzyloxycarbonylamino)pyrazolidin-3-ones, reductive alkylation at N(1), alkylation of the amidic N(2) with alkyl halides, and simultaneous hydrogenolytic deprotection/reductive alkylation of the primary NH₂ group. The synthesis enables an easy stepwise functionalization of the pyrazolidin-3-one core with only two types of common reagents, aldehydes (or ketones) and alkyl halides. The structures of products were elucidated by NMR spectroscopy and X-ray diffraction.*

6. NOVAK, Ana, ŠTEFANIČ, Matej, GROŠELJ, Uroš, HRAST, Martina, KASUNIČ, Marta, GOBEC, Stanislav, STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. A simple synthesis of polyfunctionalized 4-aminopyrazolidin-3-ones as aza-deoxa analogs of D-cycloserine. *Helvetica Chimica Acta*, ISSN 0018-019X, feb. 2014, vol. 97, no. 2, str. 245-267, doi: [10.1002/hlca.201300169](https://doi.org/10.1002/hlca.201300169). [COBISS.SI-ID 1679919]

5. Regio- in stereoselektivne [3+2] cikloadicije 3-pirazolidinon-1-azometin iminov / *Regio- and stereoselective [3+2] cycloadditions of 3-pyrazolidinon-1-azomethine imines*

a) Cu(I)-katalizirane [3+2] cikloadicije *tert*-butil (S)-(3-oksopent-4-in-2-il)karbamata na 1-benzilidenpirazol-3-on-1-azometin imine. / *Cu(I)-catalyzed [3+2] cycloadditions of tert-butyl (S)-(3-oxopent-4-yn-2-yl)carbamate to 1-benzylidenepyrasole-3-one-derived azomethine imines.*

Paralelno iskanje primernih reakcijskih pogojev v Cu(I)-kataliziranih [3+2] cikloadicijah (1*Z*,4*R**,5*R**)-4-benzoilamino-1-benziliden-5-fenil-3-oksopirazolidin-1-ium-2-idov na metil propiolat je privedlo do najdbe optimalnih reakcijskih pogojev, pod katerimi reakcija poteče gladko pri sobni temperaturi v acetonitrilu v prisotnosti Hunigove baze. Ti reakcijski pogoji so bili nato uporabljeni v regio- in stereoselektivnih 1,3-dipolarnih cikloadicijah racemnih azometin iminov na *tert*-butil (S)-(3-oksopent-4-in-2-il)karbamata, ki so vodile do zmesi diastereomernih, neracemnih, kromatografsko ločljivih cikloaduktov. Strukture produktov so bile potrjene z NMR spektroskopijo.

*Parallel screening of suitable reaction conditions for Cu(I)-catalyzed [3+2] cycloadditions of (1*Z*,4*R**,5*R**)-4-benzoylamino-1-benzylidene-5-phenyl-3-oxopyrazolidin-1-ium-2-ide to methyl propiolate has established that this reaction proceeds smoothly at room temperature in acetonitrile in the presence of CuI and Hünig's base. The optimized reaction conditions were then applied in regio- and stereo-selective 1,3-dipolar cycloadditions of racemic azomethine imines to tert-butyl (S)-(3-oxopent-4-yn-2-yl)carbamate leading to mixtures of diastereomeric non-racemic chromatographically separable cycloadducts. The structures of the products were confirmed by NMR spectroscopy.*

7. PUŠAVEC, Eva, MIRNIK, Jona, ŠENICA, Luka, GROŠELJ, Uroš, STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. Cu(I)-catalyzed [3+2] cycloadditions of tert-butyl (S)-(3-oksopent-4-yn-2-yl)karbamata na 1-benzilidenepyrasole-3-one-derivirane azometin imine. *Zeitschrift für Naturforschung. B, A journal of chemical sciences*, ISSN 0932-0776, 2014, vol. 69b, no. 5, str. 615-626, doi: [10.5560/ZNB.2014-4011](https://doi.org/10.5560/ZNB.2014-4011). [COBISS.SI-ID [1714223](https://www.cobiss.si/id/1714223)].

6. Organokataliza / *Organocatalysis*

a) Priprava in strukture 2-substituiranih 5-benzil-3-metilimidazolidin-4-onih derivatov iminijevih soli kot reaktivnih intermediatov pri organokatalitskih pretvorbah α,β -nenasičenih aldehydov / *Preparation and Structures of 2-Substituted 5-Benzyl-3-methylimidazolidin-4-one-derived Iminium Salts, Reactive Intermediates in Organocatalytic Transformations Involving α,β -Unsaturated Aldehydes*

Objavljene so sinteze 2-substituiranih 5-benzil-3-metilimidazolidin-4-onov, njihovih amonijevih soli in ustreznih iminijevih soli pripravljenih iz cinamaldehyda. Določene so bile rentgenske strukture monokristalov 15-tih cinamil-iminijevih PF₆ soli. Obravnavani so ¹H-NMR podatki amonijevih in iminijevih soli, strukture v raztopini so primerjane s tistimi v trdni fazi.

Preparations of the 2-substituted 5-benzyl-3-methylimidazolidin-4-ones, of their ammonium salts, and of the corresponding cinnamaldehyde-derived iminium salts are reported. The X-ray crystal structures of 15 cinnamyl-iminium PF₆ salts have been determined. Selected ¹H-NMR data of the ammonium and iminium salts are discussed, and structures in solution are compared with those in the solid state.

8. GROŠELJ, Uroš, BECK, Albert K., SCHWEIZER, W. Bernd, SEEBACH, Dieter. Preparation and structures of 2-substituted 5-benzyl-3-methylimidazolidin-4-one-derivirane iminium salts, reaktivni intermediati v organokatalitskih pretvorbah α,β -nenasičenih aldehydov. *Helvetica Chimica Acta*, ISSN 0018-019X, jun. 2014, vol. 97, iss. 6, str. 751-796, doi: [10.1002/hlca.201400110](https://doi.org/10.1002/hlca.201400110). [COBISS.SI-ID [1536179139](https://www.cobiss.si/id/1536179139)]

7. Materiali / *Material science*

a) Modifikacija površin / *Surface modification*

Raziskali smo modifikacijo SiO₂ površin s 3-aminopropiltrimetoksisilanom v različnih topilih. Nanosi v etanolu, acetonu in DMF vodijo do nastanka relativno tankih APTMS plasti z majhnim številom skupkov, ki so višji od 1 nm (okoli 23 skupkov na μm²), medtem ko nanosi v toluenu in acetonitrilu vodijo do nastanka debelejših APTMS plasti. Nanosi v acetonitrilu so nekoliko debelejši od nanosov v toluenu. V primeru nanosov iz etanola, tudi po daljših reakcijskih časih in pri povišani temperaturi (60 °C), ni opazne polimerizacije molekul in tvorbe debelejših APTMS plasti.

3-aminopropyltrimethoxysilane (APTMS) was used for the modification of single-crystal silicon wafers (1 x 1). We deposited the self-assembled layers from a solution of APTMS in five solvents with different polarities under various reaction conditions. The influence of the different solvents on the morphology of the modified surfaces was studied, since the possible heterogeneity may significantly influence the application of such surfaces.

9. JAKŠA, Gregor, ŠTEFANE, Bogdan, KOVAČ, Janez. Influence of different solvents on the morphology of APTMS-modified silicon surfaces. *Applied Surface Science*, ISSN 0169-4332. [Print ed.], 2014, vol. 315, no. 1, str. 516-522, ilustr. doi: [10.1016/j.apsusc.2014.05.157](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2014.05.157). [COBISS.SI-ID [1715759](#)] in

10. JAKŠA, Gregor, ŠTEFANE, Bogdan, KOVAČ, Janez. XPS- in AFM-preiskava silicijevih površin, modificiranih z različnimi aminosilani. *Vakuumist*, ISSN 0351-9716, sep. 2014, letn. 34, št. 2, str. 4-8, ilustr. [COBISS.SI-ID [28279335](#)]

Raziskovali smo aromatizacijo izbranih 3-acilamino-5,6,7,8-tetrahidro-2H-benzopiran-2,5-dionov do ustreznih 3-acilamino-5-hidroksikumarinov z uporabo aktivnega oglja v kombinaciji z molekularnim kisikom. Uporaba nepolarnih topil in visokih temperatur je bila ključnega pomena za doseganje zadovoljivih konverzij. 3-benzoilamino-5,6,7,8-tetrahidrokumarini brez 5-keto skupine in 8-okso analogi kakor tudi 5-okso-5,6,7,8-tetrahidrokumarini s prosto 3-amino skupino so izkazali manjšo reaktivnost v reakciji aromatizacije.

The aromatization of selected 3-acylamino-5,6,7,8-tetrahydro-2H-1-benzopyran-2,5-diones towards the corresponding 3-acylamino-5-hydroxycoumarins employing activated carbon in combination with molecular oxygen was investigated. The use of non-polar solvents and high temperatures was crucial for attaining satisfactory conversions. The 3-benzoylamino-5,6,7,8-tetrahydrocoumarin without a 5-keto group and the 8-oxo analogue as well as the 5-oxo-5,6,7,8-tetrahydrocoumarins containing a free 3-amino group were less efficiently aromatized.

11. ŠTEFANE, Bogdan, POŽGAN, Franc. Oxydehydrogenative aromatization of fused 3-aminopyran-2-ones on carbon surfaces : a simple approach towards 3-amino-5- hydroxycoumarin derivatives. *Monatshefte für Chemie*, ISSN 0026-9247, 2014, vol. 145, no. 8, str. 1329-1335, doi: [10.1007/s00706-014-1227-4](https://doi.org/10.1007/s00706-014-1227-4). [COBISS.SI-ID [1716527](#)]

b) Kemosenzorji / *Chemosensors*

Prispevek opisuje primerjavo odzivnosti dveh različnih senzorjev za detekcijo razstreliv. Predstavljena sta kemo-mehanski sensor, ki temelji na modificiranih lističih AFM tipala in kapacitivni sensor z organosilani modificiranimi kondenzatorskimi površinami.

The article offers a comparison of the sensitivities for vapour trace detection of Trinitrotoluene (TNT) explosives of two different sensor systems: a chemo-mechanical sensor based on chemically modified Atomic Force Microscope (AFM) cantilevers based on Micro Electro Mechanical System (MEMS) technology with optical detection (CMO), and a miniature system based on capacitive detection of chemically functionalized planar capacitors with interdigitated electrodes with a comb-like structure with electronic detection (CE).

12. STRLE, Drago, ŠTEFANE, Bogdan, ZUPANIČ, Erik, TRIFKOVIĆ, Mario, MAČEK, Marijan, JAKŠA, Gregor, KVASIĆ, Ivan, MUŠEVIČ, Igor. Sensitivity comparison of vapor trace detection of explosives based on chemo-mechanical sensing with optical detection and capacitive sensing with electronic detection. *Sensors*, ISSN 1424-8220, Jul. 2014, vol. 14, no. 7, str. 11467-11491, doi: [10.3390/s140711467](https://doi.org/10.3390/s140711467). [COBISS.SI-ID [10678868](https://www.cobiss.si/id/10678868)]

8. Sintezne metode / *Synthetic methods*

Izvedli smo sintezo intermediatov aliskirena s pripojitvijo 3,4-dialkoksifenilne skupine na C-8 laktanske derivate karboksilnih kislin z uporabo organokovinskih reagentov. Opazili smo popolnoma različno reaktivnost organomagnezijevih in organoborovih reagentov pri reakciji s kislinskim kloridom.

The synthesis of aliskiren intermediates was accomplished by attaching the 3,4-dialkoxyphenyl unit to precursor C-8 lactone-carboxylic acid derivatives using organometallic reagents. Totally different reactivities of the lactone-carboxylic acid chloride substrate towards organomagnesium and organoboron reagents were observed.

13. POŽGAN, Franc, ŠTEFANE, Bogdan, KIDEMET, Davor, SMODIŠ, Janez, ZUPET, Rok. A new synthetic route towards aliskiren intermediates. *Synthesis*, ISSN 0039-7881, 2014, vol. 46, issue 23, str. 3221-3228, doi: [10.1055/s-0034-1378616](https://doi.org/10.1055/s-0034-1378616). [COBISS.SI-ID [1763375](https://www.cobiss.si/id/1763375)]

PREGLEDNI ZNANSTVENI ČLANEK / REVIEW ARTICLE

14. STANOVNIK, Branko. [2+2] Cycloaddition of electron-poor acetylenes to enamines, enamino esters and related systems. Rearrangements and ring-expansion reactions. *Organic preparations and procedures international*, ISSN 0030-4948, 2014, vol. 46, no. 1, str. 24-65, ilustr., doi: [10.1080/00304948.2014.866468](https://doi.org/10.1080/00304948.2014.866468). [COBISS.SI-ID [1660719](https://www.cobiss.si/id/1660719)]
15. ŠTEFANE, Bogdan, POŽGAN, Franc. Advances in catalyst systems for the asymmetric hydrogenation and transfer hydrogenation of ketones. *Catalysis reviews: science and engineering*, ISSN 0161-4940, 2014, vol. 56, no. 1, str. 82-174, doi: [10.1080/01614940.2013.869461](https://doi.org/10.1080/01614940.2013.869461). [COBISS.SI-ID [1674543](https://www.cobiss.si/id/1674543)]

SAMOSTOJNI ZNANSTVENI SESTAVEK ALI POGlavJE V MONOGRAFski PUBLIKACIJI MONOGRAPH CHAPTER

16. STANOVNIK, Branko. Application of highly functionalized buta-1,3-dienes to the synthesis of heterocyclic systems. V: KARTSEV, Viktor Georgievich (ur.). *Himija geterocikličeskikh soedinenij. Sovremenyje aspekty*, (Serij monografij Interbioscreen, Tom 1). Moskva: ICSPF, 2014, str. 53-60. [COBISS.SI-ID [1536024515](https://www.cobiss.si/id/1536024515)]
17. STANOVNIK, Branko. Synthesis of highly functionalized buta-1,3-dienes - intermediates in the synthesis of heterocyclic systems. V: KARTSEV, Viktor Georgievich (ur.). *Himija geterocikličeskikh soedinenij. Sovremenyje aspekty*, (Serij monografij Interbioscreen, Tom 1). Moskva: ICSPF, 2014, str. 61-70. [COBISS.SI-ID [1536024259](https://www.cobiss.si/id/1536024259)]

PATENT / PATENT

18. BAŠKOVČ, Jernej, MILOŠEVIĆ, Mladena, GROŠELJ, Uroš, STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. *Amidiranje alkil 5-hidroksi-1H-pirazol-4-karboksilatov in sorodnih enolizabilnih alkil heteroarilkarboksilatov pod mikrovalovi : patent SI 24289(A), 2014-09-14*. Ljubljana: Urad Republike Slovenije za intelektualno lastnino, 16. 9. 2014. 14 str., ilustr. [COBISS.SI-ID [36572677](https://www.cobiss.si/id/36572677)]
19. NOVAK, Ana, ŠTEFANIČ, Matej, GROŠELJ, Uroš, STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. *Sinteza aza-deoksa-analogov cikloserina : patent SI 24315 A, 2014-09-30*. Ljubljana: Urad Republike Slovenije za intelektualno lastnino, 30. 9. 2014. 28 f., ilustr. [COBISS.SI-ID [36735493](https://www.cobiss.si/id/36735493)]

PLENARNA IN VABLJENA PREDAVANJA / PLENARY AND INVITED LECTURES

20. SVETE, Jurij. Synthesis of 3-pyrazolidinone-based heterocycles and peptide mimetics : [invited lecture]. V: *FloHet-2014 Florida Heterocyclic and Synthetic Conference : March 2nd - March 5th, 2014*. [S. l.: s. n.], 2014, str. 45. [COBISS.SI-ID [1695023](#)]
21. STANOVNIK, Branko. Heterocyclic compounds - building blocks of life : [invited lecture]. V: 9th International Summer School/Conference at the University of Maribor, 22 June - 6 July 2014, Maribor, Slovenia. ROBNIK, Marko (ur.). *Let's face chaos through nonlinear dynamics : 9th International Summer School/Conference at the University of Maribor, 22 June - 6 July 2014, Maribor, Slovenia*. Maribor: CAMTP, Center for Applied Mathematics and Theoretical Physics, 2014, str. 58. [COBISS.SI-ID [1737007](#)]
22. STANOVNIK, Branko. Enaminones in the synthesis of heterocyclic systems : [2+2] cycloadditions, ring expansion reactions and other transformations : [plenary lecture]. V: 8th Eurasian Meeting on Heterocyclic Chemistry, Tbilisi, Georgia, 20 - 24 September, 2014. *Program, abstract book, notebook*. Tbilisi: Universal, [2014], str. 17-18. [COBISS.SI-ID [1536018883](#)]

PREDAVANJE NA TUJI UNIVERZI / INVITED LECTURE AT FOREIGN UNIVERSITY

23. SVETE, Jurij. Enaminones as versatile reagents in combinatorial synthesis : Hochschule Aalen, Fakultät Chemie, Aalen, 28th October 2014. 2014. [COBISS.SI-ID [1536016067](#)]
24. SVETE, Jurij. Some recent synthetic applications of enaminones and azomethine imines : Universität Ulm, Fakultät für Naturwissenschaften, Institut für Organische Chemie I, Ulm, 30th October 2014. 2014. [COBISS.SI-ID [1536016579](#)]
25. SVETE, Jurij. Update on Cooperation between BI and Univ. Ljubljana; Synthesis of functionalized heterocycles as CPO library templates : Boehringer-Ingelheim Pharma, Biberach, 29th October 2014. 2014. [COBISS.SI-ID [1536016323](#)]

OBJAVLJENI POVZETEK ZNANSTVENEGA PRISPEVKA NA KONFERENCI / PUBLISHED ABSTRACT OF THE CONTRIBUTION AT THE SCIENTIFIC CONFERENCE

26. TRAVEN, Katja, KLJUN, Jakob, BEZENŠEK, Jure, STANOVNIK, Branko, TUREL, Iztok. New ruthenium(II) compounds with N,N-donor ligands : [lecture]. V: Twenty-third Slovenian-Croatian Crystallographic Meeting, 19 - 22 June, 2014, Logar Valley, Hotel Plesnik, Slovenia. KASUNIČ, Marta (ur.), PEVEC, Andrej (ur.). *Book of abstracts [and] programme*. Ljubljana: Faculty of Chemistry and Chemical Technology, 2014, str. 39. [COBISS.SI-ID [1726255](#)]
27. TRAVEN, Katja, SINREIH, Maša, STOJAN, Jure, SERŠEN, Sara, KLJUN, Jakob, STANOVNIK, Branko, BEZENŠEK, Jure, TUREL, Iztok, LANIŠNIK-RIŽNER, Tea. Interactions between aldo-keto reductase 1C1 and various ruthenium-complexes. V: 17th international workshop, July 8 - 13, 2014, Skytop Lodge, Poconos, [Pennsylvania, USA]. *The enzymology and molecular biology of carbonyl metabolism*. [S. l.: National Institute on Alcohol Abuse and Alcoholism, 2014], str. 77. [COBISS.SI-ID [31469017](#)]
28. ŠENICA, Luka, GROŠELJ, Uroš, STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. Sinteza enaminonskih vinilognih peptidov : [predavanje]. V: Slovenski kemijski dnevi 2014, Maribor, 11.-12. september 2014. KRAVANJA, Zdravko (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.), NOVAK-PINTARIČ, Zorka (ur.). *Zbornik povzetkov referatov s posvetovanja*. Maribor: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2014, str. 11. [COBISS.SI-ID [1787695](#)]
29. PREK, Benjamin, GROŠELJ, Uroš, SVETE, Jurij, STANOVNIK, Branko. Reakcije metil ketonov in (hetero)arilkarboksamidov z N,N-dimetilacetamid dimetil acetalom. Enostavna nekatalizirana sinteza 2,4,6-trisubstituiranih piridinov : [predavanje]. V: Slovenski kemijski dnevi

- 2014, Maribor, 11.-12. september 2014. KRAVANJA, Zdravko (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.), NOVAK-PINTARIČ, Zorka (ur.). *Zbornik povzetkov referatov s posvetovanja*. Maribor: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2014, str. 12. [COBISS.SI-ID 1788207]
30. PUŠAVEC, Eva, GROŠELJ, Uroš, STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. 1,3-dipolarne cikloadicije azometin iminov na terc-butil (S)-(3-oksopent-4-in-2-il)karbamat : [predavanje]. V: Slovenski kemijski dnevi 2014, Maribor, 11.-12. september 2014. KRAVANJA, Zdravko (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.), NOVAK-PINTARIČ, Zorka (ur.). *Zbornik povzetkov referatov s posvetovanja*. Maribor: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2014, str. 13. [COBISS.SI-ID 1787951]
31. RIČKO, Sebastijan, GROŠELJ, Uroš, GOLOBIČ, Amalija, SVETE, Jurij, STANOVNIK, Branko. Bifunkcionalni tiiosečninski organokatalizatorji na osnovi kafre : [predavanje]. V: Slovenski kemijski dnevi 2014, Maribor, 11.-12. september 2014. KRAVANJA, Zdravko (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.), NOVAK-PINTARIČ, Zorka (ur.). *Zbornik povzetkov referatov s posvetovanja*. Maribor: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2014, str. 14. [COBISS.SI-ID 1789231]
32. ŠTEFANE, Bogdan, POŽGAN, Franc. Sinteza (R)- in (S)-benzilidenciklopentanolov = Synthesis of (R)- and (S)-benzylidenecyclopentanol : [predavanje]. V: Slovenski kemijski dnevi 2014, Maribor, 11.-12. september 2014. KRAVANJA, Zdravko (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.), NOVAK-PINTARIČ, Zorka (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2014, Maribor, 11. - 12. september 2014*. Maribor: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2014, str. [1-4], ilustr. [COBISS.SI-ID 1785391]
33. POŽGAN, Franc, ŠTEFANE, Bogdan. Katalitska aromatizacija pripojenih 3-aminopiran-2-onov = Catalytic aromatization of fused 3-aminopyran-2-ones : [predavanje]. V: Slovenski kemijski dnevi 2014, Maribor, 11.-12. september 2014. KRAVANJA, Zdravko (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.), NOVAK-PINTARIČ, Zorka (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2014, Maribor, 11. - 12. september 2014*. Maribor: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2014, str. [1-6], ilustr. [COBISS.SI-ID 1785647]
34. ŠTEFANE, Bogdan, POŽGAN, Franc. Transition-metal-catalyzed direct arylation of quinazolines. V: 2nd International Symposium on C-H Activation, June 30th - July 3rd, 2014, Rennes, France. *Book of abstracts*. [S. l.: s. n., 2014?], str. P - 114. [COBISS.SI-ID 1738799]
35. DIZDAR, M., VIDIC, Danijela, ČAVAR, Sanja, POŽGAN, Franc, ŠTEFANE, Bogdan, MAKSIMOVIĆ, Milka. Antioxidant activity of chlorogenic acid and ester analogues : [poster presentation at 14th Congress of Chemists and Chemical Engineers of B&H with International Participation, 10. - 12. 10. 2014]. *Glasnik hemičara i tehnologa Bosne i Hercegovine*, ISSN 0367-4444, 2014, spec. iss.1, str. 127. [COBISS.SI-ID 1536003267]
36. TARIĆ, E., VIDIC, Danijela, POŽGAN, Franc, ŠTEFANE, Bogdan, MAKSIMOVIĆ, Milka. Antioxidant activity of rosmarinic acid, gallic acid and their derivatives : [poster presentation at 14th Congress of Chemists and Chemical Engineers of B&H with International Participation, 10. - 12. 10. 2014]. *Glasnik hemičara i tehnologa Bosne i Hercegovine*, ISSN 0367-4444, 2014, spec. iss.1, str. 128. [COBISS.SI-ID 1536003523]
37. KOVAČ, Janez, JAKŠA, Gregor, FILIPIČ, Tatjana, ŠTEFANE, Bogdan. Comparison of aliphatic and aromatic aminosilane thin films deposited on silicon wafer. V: 21. međunarodni znanstveni sastanak Vakumska znanost i tehnika, Samobor 8.5.- 9.5. 2014 = 21st International Scientific Meeting on Vacuum Science and Technologies. KRSTULOVIĆ, Nikša (ur.), KREGAR, Zlatko (ur.). *Program i knjiga sažetaka = Programme and book of abstracts*. Zagreb: Hrvatsko Vakuumsko Društvo = Croatian Vacuum Society, 2014, str. 28. [COBISS.SI-ID 27687975]
38. JAKŠA, Gregor, KOVAČ, Janez, FILIPIČ, Tatjana, ŠTEFANE, Bogdan. ToF-SIMS, XPS and AFM study of technologically important surfaces modified with (3-aminopropyl)trimethoxysilane. V: WERNER, Wolfgang S.M. (ur.), BELLISSIMO, Alessandra (ur.). *Programme schedule and book of abstracts*. [S. l.: s. n.], 2014, str. 77. [COBISS.SI-ID 27817511]

DOKTORSKI DISERTACIJI / PhD THESES

39. PREK, Benjamin. *Sinteza enamionov iz metil ketonov in njihova nadaljnja pretvorba v aromatske in heteroaromske sisteme : doktorska disertacija*. Ljubljana: [B. Prek], 2014. VIII, 308 str., ilustr. [COBISS.SI-ID [277433856](#)] (Mentor B. Stanovnik)
40. PERDIH, Peter. *Sinteza kopolimerov različnih arhitektur na osnovi polipeptidov in hitosana : doktorska disertacija*. Ljubljana: [P. Perdih], 2014. 165 str., ilustr. [COBISS.SI-ID [276099584](#)] (Somentor: F. Požgan)

DIPLOMSKA DELA / BsC THESES

41. MEVEC, Špela. *Regioselektivna sinteza N-alkiliranih 7-oksopirazolo[1,5-a]pirimidin-3-karboksamidov : diplomsko delo*. Ljubljana: [Š. Mevec], 2014. VI, 44 f., ilustr. [COBISS.SI-ID [37443845](#)] (Mentor J. Svete)
42. STOPAR, Karmen. *Sinteza in atropizomerija derivatov 5-(2-nitrofenil)-1H-pirazol-4-karbonsilne kisline : diplomsko delo*. Ljubljana: [K. Stopar], 2014. VII, 57 f., ilustr. [COBISS.SI-ID [37444101](#)] (Mentor J. Svete)
43. MUŽERLIN, Jože. *Sinteza in reaktivnost pirazolo[1,5-a]-, imidazolo[1,2-a]- in triazolo[1,5-a]pirimidinov iz substituiranih 3-(dimetilamino)prop-2-en-1-onov : diplomsko delo*. Ljubljana: [J. Mužerlin], 2014. 72 f., ilustr. [COBISS.SI-ID [37428741](#)] (Mentor B. Stanovnik)
44. ČEBULAR, Klara. *Sinteza substituiranih imidazo[1,2-a]-, pirazolo[1,5-a]- in s-triazolo[1,5-a]pirimidinov ter njihovih bromiranih derivatov : diplomsko delo*. Ljubljana: [K. Čebular], 2014. 82 f., ilustr. [COBISS.SI-ID [1536012739](#)] (Mentor B. Stanovnik)
45. KLEMENAK, Sarah. *Sinteze in pretvorbe pirazolo[1,5-a]-, imidazo[1,2-a]- in [1,2,4]triazolo[1,5-a]pirimidinov : diplomsko delo*. Ljubljana: [S. Klemenak], 2014. 63 f., ilustr. [COBISS.SI-ID [1536127171](#)] (Mentor B. Stanovnik)
46. LIKAR, Tina. *Raziskave reakcij prekurzorjev v barvah za lase = Study of reactions of hair dye precursors : diplomsko delo*. Ljubljana: [T. Likar], 2014. 42 f., ilustr. [COBISS.SI-ID [37256453](#)] (Mentor F. Požgan)

DIPLOMSKA DELA (BOLONJSKI ŠTUDIJ 1. STOPNJE) / BsC THESES (BOLOGNA 1ST CYCLE)

47. HROVAT, Marjetka. *Pretvorbe 10-jodokafre z različnimi amini = Transformations of 10-iodocamphor with various amines : diplomsko delo*. Ljubljana: [M. Hrovat], 2014. 44 f., ilustr. [COBISS.SI-ID [1536103363](#)] (Mentor U. Grošelj)
48. MATOH, David. *Sinteza 5-benzil-1-metil-4-okso-4,5-dihidro-1H-pirazolo[4,3-c]piridin-7-karboksamidov iz dietil-1,3-acetondikarboksilata = Synthesis of 5-benzyl-1-methyl-4-oxo-4,5-dihydro-1H-pyrazolo[4,3-c]pyridine-7-carboxamides from diethyl-1,3-acetonedicarboxylate : diplomsko delo*. Ljubljana: [D. Matoh], 2014. VI, 43 f., ilustr. [COBISS.SI-ID [1536015043](#)] (Mentor U. Grošelj)
49. ZIMERL, Dolores. *Sinteza 5-substituiranih-1-benzil-4-okso-4,5-dihidro-1H-pirazolo[4,3-c]piridin-7-karboksamidov iz dibenzil-1,3-acetondikarboksilata : diplomsko delo*. Ljubljana: [D. Zimerl], 2014. V, 40 f., ilustr. [COBISS.SI-ID [37443333](#)] (Mentor U. Grošelj)
50. PETEK, Nejc. *Sinteza novih (S)-1-(pirazolo[1,5-*alfa*])pirimidinil)etan-1-aminov : diplomsko delo*. Ljubljana: [N. Petek], 2014. 29 f., ilustr., graf. prikazi. [COBISS.SI-ID [1536044483](#)] (Mentor J. Svete)
51. ZGAGA, Petra. *Sinteza vinilognih peptidomimetikov na osnovi N-Boc-D-fenilalanina : diplomsko delo*. Ljubljana: [P. Zgaga], 2014. 31 f., ilustr. [COBISS.SI-ID [1536094915](#)] (Mentor J. Svete)

52. MARTEK, Bruno Aleksander. *Optimizacija enantioselektivne biokatalizirane sinteze (S)-3-ciano-5-metilheksanojske kisline iz racemnega 2-izobutilsukcinonitrila z encimom nitrilaz : diplomsko delo*. Ljubljana: [B. A. Martek], 2014. VI, 28 f., ilustr. [COBISS.SI-ID [1536090563](#)] (Mentor B. Štefane)
53. HAMULIĆ, Damir. *Sinteza 8-halokinolinov = Synthesis of 8-haloquinoline : diplomsko delo*. Ljubljana: [D. Hamulić], 2014. 26 f., ilustr. [COBISS.SI-ID [1536091075](#)] (Mentor B. Štefane)
54. HOČEVAR, Rok. *Sinteza multiarilnih sistemov preko aktivacije C-H vezi = Synthesis of multi-arylated systems through C-H bond activation : diplomsko delo*. Ljubljana: [R. Hočevar], 2014. 30 str., ilustr. [COBISS.SI-ID [1536091331](#)] (Mentor F. Požgan)

NAGRADE / AWARDS

a) Krka Award / Krka Award

55. MUŽERLIN, Jože. *Sinteza in reaktivnost pirazolo[1,5-a]-, imidazo[1,2-a]- in triazolo[1,5-a] pirimidinov iz substituiranih 3-(dimetilamino)prop-2-en-1-onov = Synthesis and reactivity of pyrazolo[1,5-a]-, imidazo[1,2-a]-, and triazolo[1,5-a]pyrimidines from substituted 3-(dimethylamino)prop-2-en-1-ones*. V: PLEVNIK, Miha (ur.). *44. Krkine nagrade : znanost povezuje : zbornik povzetkov : 24. simpozij, Novo mesto, 17. oktober 2014*. Novo mesto: Krka, [2014], str. 69. [COBISS.SI-ID [1536181187](#)] (Mentor B. Stanovnik).

b) Prešernova nagrada UL FKKT 2014 / Prešeren Award UL FCCT 2014

56. Miha Drev (mentor J. Svete) *Sinteza novih pirazolo[1,5-a]pirimidin-3-karboksamidov / Synthesis of novel pyrazolo[1,5-a]pyrimidin-3-carboxamides*.

SODELOVANJE S TUJIMI UNIVERZAMI IN DRUGIMI INSTITUCIJAMI / COOPERATION WITH FOREIGN UNIVERSITIES AND OTHER INSTITUTIONS

57. Zelo uspešno sodelovanje s skupino prof. dr. A. O. Attanasija z univerze v Urbino (Italija) na področju reakcij 3-dimetilaminopropenoatov in sorodnih enaminonov in 1,2-diaza-1,3-butadienov (vodja: B. Stanovnik).
58. Sodelovanje s prof. dr. W. Kantlehnerjem z univerze v Stuttgartu (Nemčija) na področju amid acetalov in sorodnih spojin kot reagentov v organski sintezni kemiji (vodja: B. Stanovnik).
59. Sodelovanje s prof. dr. G. Maasom z univerze v Ulmu (Nemčija) na področju amid acetalov in sorodnih spojin kot reagentov v organski sintezni kemiji (vodja: B. Stanovnik).
60. Sodelovanje s prof. Saverijem Florijem, z univerze v Bariju (Italija) na področju reakcij enaminonov in sorodnih spojin s kiralinimi aziridini in epoksidi (vodja B. Stanovnik).
61. Zelo aktivno sodelovanje na področju sinteze heterocikličnih spojin s farmacevtsko tovarno BOEHRINGER-Biberach, Ingelheim (Nemčija) (vodja: J. Svete).
62. Sodelovanje na področju organske sinteze s farmacevtsko tovarno Lek Sandoz (Slovenija) (vodja: B. Štefane).

UREDNIŠTVO IN ČLANSTVO V UREDNIŠKIH ODBORIH / EDITORIAL BOARD MEMBER

63. *Acta chimica slovenica*. Stanovnik, Branko (predsednik uredniškega sveta 1995-, član uredniškega odbora 1976-). [Tiskana izd.]. Ljubljana: Slovensko kemijsko društvo: =Slovenian Chemical Society, 1993-. ISSN 1318-0207. <http://acta.chem-soc.si/>. [COBISS.SI-ID [14086149](#)]
64. *Acta chimica slovenica*. Svete, Jurij (član uredniškega odbora 2014-). [Tiskana izd.]. Ljubljana: Slovensko kemijsko društvo: =Slovenian Chemical Society, 1993-. ISSN 1318-0207. <http://acta.chem-soc.si/>. [COBISS.SI-ID [14086149](#)]

65. *Advances in heterocyclic chemistry*. Stanovnik, Branko (član uredniškega odbora 2003-). New York [etc.]: Academic Press, 1963-. ISSN 0065-2725. [COBISS.SI-ID [486917](#)]
66. *ARKIVOC*. Stanovnik, Branko (urednik 2010-, član uredniškega sveta 2010-, gostujoči urednik 2013). [Print ed.]. Gainesville: Arkat USA Inc., 2000-. ISSN 1424-6376. [COBISS.SI-ID [28057605](#)]
67. *Croatica chemica acta*. Stanovnik, Branko (član uredniškega odbora 1985-). Zagreb: Hrvatsko kemijsko društvo, 1956-. ISSN 0011-1643. [COBISS.SI-ID [22807](#)]
68. *International journal of organic chemistry*. Stanovnik, Branko (član uredniškega odbora 2011-). [Print ed.]. Irvine, CA: Scientific Research Pub., 2011-. ISSN 2161-4687. <http://www.scirp.org/journal/ijoc>. [COBISS.SI-ID [35113989](#)]
69. *Journal of heterocyclic chemistry*. Stanovnik, Branko (član uredniškega odbora 1997-). Provo, Utah, etc.: HeteroCorporation. ISSN 0022-152X. [COBISS.SI-ID [25749248](#)]
70. *Molecules*. Stanovnik, Branko (član uredniškega odbora 1998-). Berlin: Springer; Basel: Molecular Diversity Preservation International. ISSN 1420-3049. [COBISS.SI-ID [18462981](#)]
71. *Monatshefte fuer Chemie*. Svete, Jurij (član uredniškega odbora 2014-). Wien; New York: Springer, 1968-. ISSN 0026-9247. [COBISS.SI-ID [1914628](#)]
72. *Targets in heterocyclic systems chemistry and properties*. Stanovnik, Branko (član uredniškega odbora 2000-). Roma: Società Chimica Italiana. ISSN 1724-9449. [COBISS.SI-ID [1365807](#)]
73. *TheScientificWorldjournal*. Stanovnik, Branko (član uredniškega odbora 2013-). Boynton Beach (FL): Scientific World, 2001-. ISSN 1537-744X. [COBISS.SI-ID [2607642](#)]
74. *Trends in Heterocyclic Chemistry*. Stanovnik, Branko (član uredniškega odbora 2006-). Trivandrum: Research Trends. ISSN 0972-432X. [COBISS.SI-ID [1365551](#)]
75. *Glasnik hemičara i tehnologa Bosne i Hercegovine*. Požgan, Franc (član uredniškega odbora 2010-). Sarajevo: Hemijski institut Prirodno-matematičkog fakulteta. ISSN 0367-4444. [COBISS.SI-ID [16153346](#)]
76. *Recent patents on catalysis*. Požgan, Franc (član uredniškega odbora 2012-2014). [Print ed.]. Bussum: Benthan Science Publisher, 2012-. ISSN 2211-548X. <http://www.benthamscience.com/rpcat/>. [COBISS.SI-ID [35774981](#)]

FIZIKALNA KEMIJA

PHYSICAL CHEMISTRY

PROGRAMSKA SKUPINA / RESEARCH PROGRAMME GROUP

P1-0201

VODJA PROGRAMSKE SKUPINE / PRINCIPAL RESEARCHER

prof. dr. Vojeslav Vlachy

SODELAVCI PROGRAMSKE SKUPINE / RESEARCH PROGRAMME STAFF

Raziskovalci / Researchers

prof. dr. Marija Bešter-Rogač

doc. dr. Matjaž Bončina

doc. dr. Janez Cerar

dr. Andrej Godec

prof. dr. Barbara Hribar-Lee

prof. dr. Andrej Jamnik

prof. dr. Ksenija Kogej

prof. dr. Jurij Lah

doc. dr. Miha Lukšič

doc. dr. Črtomir Podlipnik

prof. dr. Ciril Pohar

doc. dr. Iztok Prislan

izr. prof. dr. Jurij Reščič

dr. Bojan Šarac

doc. dr. Matija Tomšič

doc. dr. Tomaž Urbič

prof. dr. Vojeslav Vlachy

Zaslužna profesorja (v pokoju) / Professors Emeriti (retired)

prof. dr. Jože Koller

prof. dr. Gorazd Vesnaver

Mladi raziskovalci / Young Researchers

Elizabeta Benigar

Jure Gujt

Gregor Hostnik

Matej Huš

Miha Kastelic

Tadeja Janc

Andrej Mernik

Tomaž Mohorič

Simona Sitar

Ostali podiplomski študenti, ki niso v rednem delovnem razmerju /

Other Postgraduate Students

San Hadži: doktorski študij (mentor J. Lah)

Tehniki / Technicians

Vesna Arrigler

Anton Kelbl

Anton Kokalj

POROČILO O REALIZACIJI PROGRAMA

CILJI IN OSREDNJE TEME PROGRAMA

Naše raziskave prispevajo k razumevanju fizikalnih in kemijskih procesov, ki se dogajajo v živih bitjih in/ali so pomembni v industriji. Zanimajo nas predvsem raztopine elektrolitov, površinsko aktivnih snovi in polielektrolitov pa tudi suspenzije nanodelcev in ionske tekočine. Nekatere od teh snovi so biološko pomembne (proteini in DNK), druge, to so površinsko aktivne snovi, ionske tekočine in sintetični polielektroliti, pa se na široko uporabljajo v industriji. Raziskave stabilnosti proteinov in njihovega prepoznavanja z drugimi molekulami, vezave ligandov na te molekule in študije podobnosti molekul so pomembne v farmacevtski industriji in bioinženirstvu; prav na teh področjih sodelujemo tudi z industrijo. Merjenja se dopolnjujejo s teoretičnimi raziskavami; namen našega dela je boljše razumevanje procesov na molekularnem nivoju in posredovanje tega znanja našim študentom ter kolegom v industriji.

ZNANSTVENI DOSEŽKI

1. Izmerili smo koncentracijske odvisnosti molske prevodnosti, transportnih števil in osmotskih koeficientov litijeve, natrijeve in cezijeve soli poli(tiofen-3-il očetne kisline) v vodnih raztopinah. Ti rezultati kažejo, da se tudi konjugirani polielektroliti v vodnih raztopinah vedejo podobno kot ostali polielektroliti, vpliv vrste alkaljskega protiiona pa na te lastnosti ni bistven oziroma je dobro napovedljiv z upoštevanjem Coulombskih interakcij [COBISS.SI-ID [1739311](#)].
2. S pomočjo metode ozkokotnega rentgenskega sipanja (SAXS) in simulacij molekulske dinamike smo raziskali strukturo arhealnih lipidnih membran [COBISS.SI-ID [1752879](#)] in obnašanje teh membran med procesom elektroporacije [COBISS.SI-ID [4362104](#)]. Metodo SAXS smo uporabili tudi v kombinaciji z metodama statičnega in dinamičnega sipanja laserske svetlobe pri raziskavi strukture in dinamike vodnih sistemov polisaharida karboksimetil celuloze [COBISS.SI-ID [4392568](#)] in biološko relevantnega neionskega polisaharida levan različnih bakterij [COBISS.SI-ID [4381304](#)], ki ima pomembno vlogo pri tvorbi bakterijskih biofilmov. Podobno smo izvedli tudi raziskavo zmesi neionskega surfaktanta s kompleksno soljo polianiona [COBISS.SI-ID [1753135](#)] in eksperimentalno ter teoretično raziskavo interakcij med nabitimi koloidnimi delci silike in večvalentnimi ioni spermidina, ki so paličaste oblike.
3. Z metodama statičnega in dinamičnega sipanja svetlobe smo študirali asociacijsko obnašanje ataktične (aPMA) in izotaktične polimetakrilne kisline (iPMA) v vodni raztopini v prisotnosti NaCl [COBISS.SI-ID [1675823](#)]. Ugotovili smo, da obe stereoisomeri tvorita agregate, ki so podobni delcem mikrogela z veliko gostoto v sredici in nabreklo lupino. Strižna obremenitev raztopine (tok tekočine) agregate iPMA razbije, a se le-ti v mirovanju ponovno tvorijo. Nasprotno pa se agregati aPMA pod vplivom striga množijo, v mirovanju pa razpadejo, vendar ne izginejo popolnoma. Nadalje smo izvedli primerjalno študijo vodnih raztopin izotaktične (iPMA) in ataktične (aPMA) polimetakrilne kisline v prisotnosti 0.1 M alkaljskih soli (LiCl, NaCl, CsCl) [COBISS.SI-ID [1754927](#)]. Pokazali smo, da obe kislini tvorita agregate z arhitekturo mikrogelskih delcev, torej gosto sredico in manj gosto lupino. Velikost agregatov je odvisna od stereoregularne strukture polimera in od dodane soli. V prisotnosti ionov Li^+ in Na^+ se tvorijo večji agregati kot v prisotnosti ionov Cs^+ in hkrati so verige iPMA močnejše asociirane med seboj kot verige aPMA, kljub temu, da imajo okrog 25% karboksilnih skupin ioniziranih. Predlagali smo model agregacije za iPMA. Študirali smo tudi obe kislini vse do 100% stopnje ionizacije. Pri višjih nabojih smo opazili tako imenovano počasno difuzijo, ki je posledica elektrostatskih interakcij med polioni. Rezultati kažejo, da ima veriga iPMA večji efektivni naboj ob enakih eksperimentalnih pogojih. Vpliv ionov na počasno difuzijo je manj izrazit kot na agregacijo.

4. Opazili smo nov intermediat pri zvitju DNA iz telomerne regije organizma *Oxytricha nova* v G-kvadrupleks [COBISS.SI-ID 1701423]. Identificirali smo ga v vodni raztopini z uporabo NMR spektroskopije, gelske elektroforeze, UV absorpcijske in CD spektroskopije ter diferenčne dinamične kalorimetrije (DSC). Študija kaže, da lahko z gvaninom bogata zaporedja DNA obstajajo v predorganiziranih strukturah, ki imajo veliko težnjo po zvitju v G-kvadrupleks ob prisotnosti kationov, kot so kalijevi. Članek je prejel odlične znanstvene ocene, bil nagrajen z naslovnico v ugledni reviji *Angewandte Chemie International Edition* (<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/anie.v53.19/issuetoc>) in pritegnil pozornost javnih medijev (novice: <http://www.24ur.com/slovenski-znanstveniki-odkrili-nov-mehanizem-zvijanja-dnk.html>). Upamo, da bo pripomogel k boljšemu razumevanju tvorbe G-kvadrupleksov, kot fiziološko pomembnih struktur, v katere se lahko zvijejo deli DNA in RNA.
Poleg tega smo prvi pokazali, kako lahko z uporabo DSC, kot neodvisne analize metode, pridobimo podatke o termodinamiki micelizacije površinsko aktivnih snovi [COBISS.SI-ID 1703727]. Ta študija je bila nagrajena z naslovnico v reviji *ChemPhysChem*.
5. Razvili smo metodo za kvantitativni izračun proste energije hidratacije poljubnih dveh ionov kot funkcijo njune medsebojne razdalje [COBISS.SI-ID 1744431]. Algoritem, imenovan »interpolirani PMF« (i-PMF), daje izjemno dobro ujemanje z rezultati dinamike molekul, a mnogo hitreje (pet velikostnih razredov!) v primerjavi s simulacijami. Ta pohitritev in izboljšana točnost je poglavitna za doseg končnega cilja: izračunati fizikalno točne potenciale srednje sile za kompleksne sisteme (denimo protein-protein ali ligand-protein).
6. S fluorescenčnimi meritvami in dodatno analizo z metodami molekulskega modeliranja smo predpostavili model za vezavo različnih flavonoidov na enterotoksin B bakterije *Staphylococcal Aureus* [COBISS.SI-ID 4417400]. Na osnovi naših študij smo prišli do zaključka, da flavonoidi verjetno ovirajo vezavo SEB na T-celico in s tem preprečijo hiperaktivacijo imunskega sistema.
7. Raziskave vpliva lokalnega okolja na jakost vodikove vezi smo razširili na vpliv ionov in električnega polja na jakost [COBISS.SI-ID 1748015]. Ugotovili smo preprosto empirično zvezo med jakostjo električnega polja in močjo vodikove vezi v dimeru vode.
Raziskave modelov z vodi podobnimi lastnostmi in modelom metanola podajamo v šestih člankih.
i) V prvem smo preverili primernost omenjenega modela za študij hidrofobnega efekta [COBISS.SI-ID 1701935]. Ugotovili smo, da preprost model s sferično simetrično interakcijo pravilno napove hidrofobni efekt. ii) V drugem [COBISS.SI-ID 1753391] smo parametrizirali model, da je pravilno napovedal eksperimentalne lastnosti in ugotovili, da v omejenem območju model dobro napove lastnosti vode in hidrofobni efekt. iii) Tretji prispevek [COBISS.SI-ID 1536097475] obravnava model metanola in njegov fazni diagram. Ugotovili smo, da ima model dve kritični točki, klasično za prehod tekoče-plinasto in drugo za prehod med redko in gosto tekočo fazo. iv) V tem prispevku [COBISS.SI-ID 1536004803] smo uporabili teorijo integralnih enačb za opis lastnosti metanola in ugotovili dobro ujemanje med teorijo in rezultati simulacije. v) Peti prispevek obravnava lastnosti 2D MB modela vode v poroznem materialu [COBISS.SI-ID 1620271] in vi) Šesti [COBISS.SI-ID 1536048835] vpliv poroznega materiala na hidrofobni efekt. Ugotovili smo, da gostota in velikost delcev poroznega materiala močno vpliva na lastnosti vode in hidrofobnega efekta.
Za dvodimenzionalne dimere [COBISS.SI-ID 1685295] smo testirali primernost RISM integralnih enačb in ugotovili, da se integralske enačbe zadovoljivo ujemajo z rezultati simulacij. Prav tako smo preverili uporabnost teorije integralnih enačb za študij lastnosti dvodimenzionalnih 1:1 elektrolitov [COBISS.SI-ID 1707567].
Z molekulsko dinamiko smo preučevali hidratacijo antiparalelnih beta ploskev [COBISS.SI-ID 1704239] in ugotovili, da je več molekul vode v okolici kisikovih atomov peptidov kot v okolici dušikovih atomov.

8. Nadaljevanje raziskav polielektrolitov, ki vsebujejo hidrofobne skupine je bilo objavljeno v dveh člankih: [COBISS.SI-ID 1707823] in [COBISS.SI-ID 1739311]. V članku objavljenem v *Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics*, [COBISS.SI-ID 1748271], smo proučevali model raztopine proteina v vodni raztopini soli. Kolikor nam je znano je to prva teorija kjer so vse komponente, vključno z vodo, enakovredno vključene v Hamiltonovo funkcijo. Naslednji članek [COBISS.SI-ID 1708079] obravnava vpliv mikrovalov na solvatacijo ionov in hidrofobnih delcev. V *Encyclopedia of applied electrochemistry*. Springer, NY 2014, je lani izšel naš prispevek Polyelectrolytes: simulation. [COBISS.SI-ID 1793071].

DRUGI POMEMBNI ZNANSTVENI DOSEŽKI

Jurij Lah: Preglova nagrada za izjemne raziskovalne dosežke na področju kemije in sorodnih ved (http://www.siol.net/novice/slovenija/2014/06/preglova_nagrada_jurij_lah.aspx).

Bončina, Matjaž, Prislan, Iztok, Lah, Jurij: *[What drives binding-coupled folding of G-quadruplex DNA? : [plenary lecture]. V: 7th Central Europe Conference, Katowice, Poland, September 9-12th 2014. Chemistry towards biology. Katowice]*, [2014] [COBISS.SI-ID 1536158403].

Janez Cerar: Sodelovanje s Krko d.d.; št. pog. I-8-106259/2008; naslov »Študij in analiza farmacevtskih materialov«.

Mladi raziskovalec Gregor Hostnik je bil od 3. 5. 2014 – 4. 8. 2014 na strokovnem izpopolnjevanju pri doc. dr. Guillaume Mériquetu na Université Pierre-et-Marie-Curie v Parizu.

Miha Lukšič z začetkom februarja zaključi podoktorsko usposabljanje v ZDA. Med 7. 7. in 8. 8. 2014 gostuje kot raziskovalec na SUNY Stony Brook (ZDA).

Sodelovali smo v bilateralnih projektih z ZDA, Hrvaško, Finsko, Francijo (CEA), Ukrajino in Srbijo. Sodelovali smo pri dveh COST projektih (MP-0802 J. Lah in CM-1101 M. Bešter-Rogač). Za obdobje 2010-2014 smo pri NIH (National Institute of Health U.S.A.) pridobili sredstva za projekt Solvation in Biology, glavna raziskovalca: V. Vlachy in K. A. Dill (Stony Brook University, and Laufer Center for Physical and Quantitative Biology, NY, USA) . Sodelovali smo v evropskem FP7 projektu »Enhancement of the innovation potential in SEE through new molecular solutions in research and development – InnoMol».

Na obisku smo imeli nekaj uglednih raziskovalcev iz tujine, med njimi Chaok Seok iz Koreje, Natalie Malikovo iz Francije, Kena A. Dilla iz ZDA, Arturja J. Valenteja s Portugalske in Remyja Loris iz Belgije

RESEARCH PROGRAM REPORT

PROGRAM GOALS

Our research focuses on physico-chemical processes which occur in living organisms and are relevant for technology. We are primarily interested in solutions and dispersions of charged nanoparticles. Some of them, e.g. proteins and DNA, are of biological importance, while others, e.g. surfactants and synthetic polyelectrolytes, are used in industrial applications. Studies of protein and DNA stability and their recognition by other molecules are invaluable for pharmaceutical industry and bioengineering. Wherever possible, the experimental research has been complemented with theoretical analysis, the main purpose being to understand these processes on the molecular level and to communicate this knowledge to students and our colleagues in industry.

RESEARCH TOPICS AND SCIENTIFIC ACHIEVEMENTS

1. Concentration dependence of molar conductivity, transport numbers, and osmotic coefficients of lithium, sodium, and caesium salt of poly(thiophene-3-ylacetic acid) in aqueous solutions were measured. These results show that conjugated polyelectrolytes behave similarly as ordinary polyelectrolytes and that the specific influence of alkali metal ion is negligible or can be easily estimated by taking into account Coulomb interactions [COBISS.SI-ID [1739311](#)].
2. Structural study of archeal lipid membranes was performed utilizing the small-angle x-ray scattering (SAXS) and molecular dynamic simulations [COBISS.SI-ID [1752879](#)] and was further extended to the behaviour of these membranes during the electroporation [COBISS.SI-ID [4362104](#)]. The experimental SAXS technique was also used in combination with the static and dynamic light scattering to investigate the structure and dynamics in the aqueous polysaccharide systems of carboxymethyl cellulose [COBISS.SI-ID [4392568](#)] and systems of biologically relevant nonionic polysaccharide levan of various bacteria, which is important for the formation of bacterial biofilms [COBISS.SI-ID [4381304](#)]. We have also studied the soluble aggregates in aqueous solutions of polyion-surfactant ion complex salts and a nonionic surfactant [COBISS.SI-ID [1753135](#)] and the combined experimental-theoretical study of interactions between the charged colloidal silica particles and multivalent rod-like ions of spermidine.
3. The association behaviour of atactic (aPMA) and isotactic poly(methacrylic acid) (iPMA) in aqueous solution in the presence of NaCl was studied [COBISS.SI-ID [1675823](#)]. It was demonstrated that both stereoisomers form aggregates that resemble microgel particles with a higher density in the center and a swollen shell. Aggregates of iPMA are disrupted by shear stress and gradually reform in solution at rest, whereas the aPMA ones multiply as a result of mechanical stress and gradually decrease in number after its cessation. However, they are present in solution in equilibrium.
Moreover, a comparative light scattering study of aPMA and iPMA in aqueous 0.1 M alkali chlorides (LiCl, NaCl, CsCl) solutions was done [COBISS.SI-ID [1754927](#)]. It was demonstrated that both PMA isomers are strongly associated in the form of microgel particles with a dense core surrounded by a less dense shell. The extent of aggregation depends on the stereoregular structure of the polymer and on the type of the added cation. Li⁺ and Na⁺ ions better support aggregation than do Cs⁺ ones. Besides, iPMA chains are stronger aggregated than aPMA ones and form particles with a denser core. A model of the aggregation process is suggested for iPMA. At high degrees of ionization, a slow diffusive process (so called extraordinary or anomalous mode in diffusion of polyelectrolytes) arising from electrostatic interactions between charged chains, is observed for both PMAs. Results suggest that under the same experimental conditions iPMA is effectively more charged than aPMA. The role of ions in the slow mode phenomenon is less pronounced than in aggregation.
4. A new folding intermediate of *Oxytricha nova* telomeric G-quadruplex was characterized in aqueous solution using NMR spectroscopy, native gel electrophoresis, thermal differential spectra, CD spectroscopy, and differential scanning calorimetry (DSC) [COBISS.SI-ID [1701423](#)]. This study provides evidence that G-rich DNA sequences can self-assemble into specific preorganized DNA structures that are predisposed to fold into G-quadruplex when interacting with cations such as potassium ions. This study, awarded with the cover-page in a reputable journal *Angewandte Chemie* (<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/anie.v53.19/issuetoc>), attracted significant attention of the public media (news: <http://www.24ur.com/slovenski-znanstveniki-odkrili-nov-mehanizem-zvijanja-dnk.html>).
In addition, we demonstrated that DSC can be used as an independent method to obtain thermodynamic parameters of surfactant micelization in aqueous solutions [COBISS.SI-ID [1703727](#)]. This study has been awarded with the cover-page in a journal *ChemPhysChem*.

5. We developed a method for quantitative prediction of the hydration free energy of arbitrary ions as a function of their separation distance [COBISS.SI-ID [1744431](#)]. Our algorithm, called i-PMF (interpolation PMF), gives accurate representations of PMFs simulated by Molecular Dynamics, but with a 10 to the power of 5 fold speed-up compared to simulations. This speed-up and improved accuracy is crucial because our final goal is physically accurate calculations of PMFs for complex systems that we will use in protein-protein and protein-ligand modelling.
6. A model of flavonoid binding to *Staphylococcal* enterotoxin B (SEB) was evaluated with fluorescence measurements and with use of molecular modeling methods [COBISS-ID [4417400](#)]. In this study we have shown that selected flavonoids can bind to the SEB channel, which is likely to influence the adhesion of SEB to T-cells, and thus prevent hyper-activation of the immune system.
7. Our research of the influence of local environment on strength of hydrogen bond was extended to take into account the environment of ions and electric field of ions on strength [COBISS.SI-ID [1748015](#)]. Simple empirical relationship between electric field and strength of hydrogen bond was found for dimer of water.

Research of models with water-like properties and methanol was presented in six articles. i) In first we checked how simple model with spherical symmetric interaction with two characteristic distance can describe hydrophobic effect [COBISS.SI-ID [1701935](#)] and found out that agreement with experiment was very reasonable. ii) In second paper [COBISS.SI-ID [1753391](#)] we parametrized model so that we were able to correctly predict experimental properties. Model gives correct prediction for water properties and hydrophobic effect in temperatures around room temperature. iii) In third work [COBISS.SI-ID [1536097475](#)] we developed model for methanol and calculated phase diagram. We found two critical points, one for liquid-gas transition and second for transition between low density and high density liquid. iv) Here [COBISS.SI-ID [1536004803](#)] we applied theory of integral equations to study properties of methanol model and found that agreement is reasonable with data obtained by computer simulation. v) Fifth paper study properties of 2D MB model of water in confined environment [COBISS.SI-ID [1620271](#)] and vi) Sixth [COBISS.SI-ID [1536048835](#)] effect of confinement on hydrophobic effect. Density and size of particles which are composing matrix is effecting on water properties and hydrophobic effect.

For two dimensional dimers we tested [COBISS.SI-ID [1685295](#)] how good is RISM integral equation theory and found satisfactory agreement with simulation data. We also checked how integral equations are able to capture properties of two-dimensional 1:1 electrolytes [COBISS.SI-ID [1707567](#)].

With molecular dynamics we studied hydration of antiparallel beta sheets [COBISS.SI-ID [1704239](#)]. It was found that there is more water molecules around oxygen atoms of backbone than around nitrogen atoms.

8. The continuation of our polyelectrolyte studies was published in two papers [COBISS.SI-ID [1707823](#)] and [COBISS.SI-ID [1739311](#)]. In the paper published in *Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics*, [COBISS.SI-ID [1748271](#)], we examined the model of protein solution in which all the components were treated explicitly. To our knowledge this is the very first theory on the Hamiltonian level, which includes water explicitly. The next paper [COBISS.SI-ID [1708079](#)], examines the effects of microwaves on solvation of ionic and hydrophobic solutes. We contributed a paper to *Encyclopedia of applied electrochemistry*. New York: Springer NY 2014, [COBISS.SI-ID [1793071](#)].

OTHER IMPORTANT SCIENTIFIC ACHIEVEMENTS

Jurij Lah: Pregl Award for outstanding research achievements in chemistry and related sciences (http://www.siol.net/novice/slovenija/2014/06/preglova_nagrada_jurij_lah.aspx).

Bončina, Matjaž, Prislán, Iztok, Lah, Jurij: *[What drives binding-coupled folding of G-quadruplex DNA? : [plenary lecture]. V: 7th Central Europe Conference, Katowice, Poland, September 9-12th 2014. Chemistry towards biology. Katowice]*, [2014] [COBISS.SI-ID 1536158403].

Janez Cerar: Cooperation with pharmaceutical company Krka, d. d., contract No. I-8-106259/2008, "Studies and analysis of pharmaceutical materials".

Young researcher Gregor Hostnik visited prof. Guillaume Mériguet at Université Pierre-et-Marie-Curie in Paris between 5/3/14 and 8/4/14.

Miha Lukšič finishes in February his postdoctoral training in USA. Between 7. 7. in 8. 8. 2014 he participates as a guest researcher on SUNY Stony Brook (USA).

Participation in bilateral projects with the USA, Croatia, Finland, France (CEA), Ukraine in Serbia. Participation in two COST projects (MP-0802 J. Lah and CM-1101 M. Bešter-Rogač). We obtained the NIH (National Institute of Health U.S.A.) grant for Solvation in Biology, Principal investigators: V. Vlachy and K. A. Dill (Stony Brook University, and Laufer Center for Physical and Quantitative Biology, NY, USA) for 2010-2014. We participated in European FP7 project »Enhancement of the innovation potential in SEE through new molecular solutions in research and development – InnoMol«.

Visit of several renowned foreign researchers, including professors Chaok Seok from Korea, Natalie Malikova from France, Ken A. Dill from USA, Artur J. Valente from Portugal and Remy Loris from Belgium

ORGANSKA KEMIJA: SINTEZA, STRUKTURA IN APLIKACIJA **ORGANIC CHEMISTRY: SYNTHESIS, STRUCTURE, AND APPLICATION**

PROGRAMSKA SKUPINA / RESEARCH PROGRAMME GROUP

P1-0230

VODJA PROGRAMSKE SKUPINE / PRINCIPAL RESEARCHER

prof. dr. Marijan Kočever

SODELAVCI PROGRAMSKE SKUPINE / RESEARCH PROGRAMME STAFF

Raziskovalci / *Researchers*

prof. dr. Marijan Kočever
prof. dr. Janez Košmrlj
prof. dr. Andrej Petrič
prof. dr. Slovenko Polanc
izr. prof. dr. Janez Cerkovnik
doc. dr. Franc Požgan
doc. dr. Bogdan Štefane
doc. dr. Krištof Kranjc
dr. Damijana Urankar
dr. Martin Gazvoda
dr. Nenad Maraš
dr. Marko Krivec

Mladi raziskovalci / *Young Researchers*

Jure Hren
Amadej Juranovič
Mitja Martelanc
Bojan Burja
Vita Majce
Ana Bergant
Matjaž Koželj
Boštjan Genorio
Martin Gazvoda
Marko Krivec
Aljoša Bolje
Luka Rejc
Gregor Strle
Jure Vajs

Tehniki / *Technicians*

Irena Povalej

POROČILO O REALIZACIJI PROGRAMA V CELOTNEM OBDOBJU TRAJANJA

CILJI PROGRAMA

Naša programska skupina je razvijala sinteze spojin za znanstvene in aplikativne namene, pod okolju čim bolj prijaznimi pogoji (mikrovalovi, visoki tlaki, zelena topila itd.) in z visoko atomsko ekonomičnostjo. Zastavljene cilje smo dosegali z lastnim kreativnim delom, s sodelovanjem z znanstveniki iz 10 držav po svetu, kot tudi z več akademskimi, raziskovalnimi in industrijskimi partnerji. Sodelovali smo tudi v programih COST (COST D 40; 2006–2011 in CM0905 Organocatalysis; 2011-2014) in s centrom odličnosti EN-FIST pri raziskavah in razvoju spojin za diagnozo in terapijo v medicini. Več naših mladih raziskovalcev je bilo na 3- do 5-mesečnem izpopolnjevanju v tujini. Pridobili smo tudi 18-mesečni podoktorski projekt (dr. M. Gazvoda) in 10-mesečni projekt iz EU (Erasmus Mundus Action 2 Basileus IV).

Raziskovali smo naslednja glavna področja:

(1) *Kovinsko katalizirane in druge reakcije*. Naša skupina je razvijala nove ligande in njihove komplekse s kovinami prehoda. Cilj teh raziskav je bil razvoj novih biološko učinkovitih spojin in uporaba kovinskih kompleksov v homogeni katalizi za tvorbo vezi ogljik-ogljik med sicer nereaktivnimi molekulami. Prav tako smo raziskovali heterogeno katalizo s kovinami prehoda, s poudarkom na uporabi katalitskega hidrogeniranja, pa tudi organokatalizo v COST akciji o organokatalizi.

(2) *Sinteza biološko aktivnih spojin in razvoj metod za medicinske raziskave*. Intenzivno smo raziskovali sintezo biološko relevantnih spojin, to je antitumorskih spojin (analogi kombretastatina in druge spojine), spojin aktivnih proti TBC (analogi izoniazida), spojin za zaščito rastlin (analogi boskalida), inhibitorjev privzema histamina (analogi vanokserina), molekularnih prob za *in vitro* ter *in vivo* označevanje amiloidnih agregatov, ki so značilni za nevrodegenerativne bolezni (Alzheimerjeva in sorodne bolezni) itd. V sodelovanju z industrijskimi partnerji iz Slovenije smo sodelovali pri sintezah številnih strateških farmacevtskih produktov, vključno s statini.

(3) Naša programska skupina je raziskovala tudi združevanje posameznih učinkovin v močnejše sinergijsko delujoče hibridne molekule. Tako smo npr. razvili diazene, ki so citotoksični za različne tumorske celične linije. Te spojine so močni modulatorji znotrajcelične koncentracije glutationa in delujejo sinergijsko z zelo učinkovito protitumorsko spojino cisplatinom. *In vitro* testi na različnih humanih tumorskih celičnih linijah so namreč pokazali, da terapija s kombinacijo diazena in cisplatina vidno zmanjša odpornost in s tem preživetje tumorja. Te raziskave smo nadgradili s tvorbo kompleksov diazenov s platino in rutenijem; v teku so *in vivo* testi na miših. Prav tako smo uspešno povezali izoniazid z drugimi učinkovinami (*p*-aminosalicilno kislino, pirazinamidom, norfloksacinom itd.) in tako pripravili nove hibridne molekule, ki so pokazale obetavno antituberkulozno aktivnost.

OSREDNJE TEME PROGRAMA IN ZNANSTVENI DOSEŽKI

GLAVNI POUĐARKI IZ PROGRAMA

A. Posebni poudarki

Kataliza, ki temelji na nanodelcih, se zelo hitro razvija. Kot rezultat sodelovanja v COST smo v tem članku objavili metodo za pripravo in zajetje rodijevih nanodelcev v enostavnih amonijevih soleh, izhajajoč iz kvaternih amonijevih soli, rodijevih spojin, vodika in CO₂. Nastanejo nanodelci, ki smo jih uporabili kot selektivne katalizatorje za hidrogeniranje enostavnih substratov, pa tudi za bolj kompleksne, ki se jih pod standardnimi pogoji ne da enostavno hidrogenirati. Prof. Leitner je za opisane rezultate dobil Wöhlerjevo nagrado za 2009 (gl.: *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2009, 48, 6587).

(CIMPEANU, Valentin, KOČEVAR, Marijan, PÂRVULESCU, Vasile I., LEITNER, Walter. Preparation of rhodium nanoparticles in carbon dioxide induced ionic liquids and their application to selective hydrogenation. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2009**, *48*, 1085-1088, doi: [10.1002/anie.200803773](https://doi.org/10.1002/anie.200803773) [COBISS.SI-ID [30100997](https://www.cobiss.si/urn:nbn:si:coibis:30100997)])

Pokazali smo, da lahko heteroaromate (furan, tiofen, izoksazol, tiazol), substituirane s hidroksialkilno skupino, direktno ariliramo z uporabo nizkih koncentracij Pd(OAc)₂ (0.01-0.5 mol%) kot predkatalizatorja brez dodatka liganda in brez zaščite hidroksilne skupine. Reakcija je potekla preko aktivacije C-H vezi na heteroaromatu, nadaljnja funkcionalizacija s (hetero)aryl bromidi pa je selektivno vodila do nastanka 5-ariliranih produktov. V primerjavi s klasičnimi reakcijami predstavlja naše pripajanje ekološko in ekonomsko učinkovitejši pristop do tovrstnih produktov. 55 čistih SCI citatov. (ROGER, Julien, POŽGAN, Franc, DOUCET, Henri. Palladium-catalysed direct arylation of heteroaromatics bearing unprotected hydroxyalkyl functions using aryl bromides. *Adv. Synth. Catal.*, **2010**, *352*, 696-710, doi: [10.1002/adsc.200900793](https://doi.org/10.1002/adsc.200900793) [COBISS.SI-ID [33849861](https://www.cobiss.si/urn:nbn:si:coibis:33849861)])

Sintetizirali smo serijo analogov FDDNP, uveljavljene molekulske sonde za detekcijo sprememb v možganih bolnikov z Alzheimerjevo boleznijo, in vse spojine okarakterizirali s spektroskopskimi in računskimi metodami. Izmerjene vezavne lastnosti smo razložili z uporabo računskega modela. S sistematičnim spreminjanjem donorskega in akceptorskega dela molekule smo raziskali strukturne zahteve za optimalno vezavo na A β agregate. FDDNP in analogi so nevtralne spojine in kažejo na okolje občutljive fluorescentne lastnosti. Imajo velik dipolni moment, kar dokazujejo spektroskopske lastnosti in potrjujejo izračunani dipolni momenti. Najugodnejša konformacija teh spojin je v neposredni zvezi z vezavnimi lastnostmi. Ekstremna primera v sintetizirani seriji sta neplanarni analog terc-butyl-FDDNP, ki in vitro kaže le šibko vezavo (520 nM Ki) in skoraj planarni cDDNP analog, ki kaže izredno močno vezavo (10 pM Ki). Z uporabo predhodno objavljenega kristalografskega modela DDNP, vezanega na A β amiloidogeni model, smo dokazali, da je jakost vezave obratno sorazmerna z energijo, ki je potrebna za deformacijo molekule v konformacijo, pri kateri je minimalno sterično oviranje z notranjo površino vezavnega kanala. (PETRIČ, Andrej, JOHNSON, Scott A., PHAM, Hung V., LI, Ying, ČEH, Simon, GOLOBIČ, Amalija, AGDEPPA, Eric D., TIMBOL, Gerald, LIU, Jie, KEUM, Gyochang, SATYAMURTHY, Nagichettiar, KEPE, Vladimir, HOUK, Kendall N., BARRIO, Jorge R. Dicyanovinyl naphthalenes for neuroimaging of amyloids and relationships of electronic structures and geometries to binding affinities. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, **2012**, *109*, 16492-16497, doi: [10.1073/pnas.1214134109](https://doi.org/10.1073/pnas.1214134109) [COBISS.SI-ID [36232965](https://www.cobiss.si/urn:nbn:si:coibis:36232965)])

V preglednem prispevku je podan pregled najnovejših spoznanj na področju kemije vodikovega trioksida, HOOOH, najenostavnejšega predstavnika iz družine polioksidov s splošno formulo, ROnR, kjer R predstavlja vodik ali druge atome ali skupine, in je $n \geq 3$. Te spojine, ki jih lahko smatramo kot višje homologe vodikovega peroksida, so namreč ključni intermediati pri nizkotemperaturnih oksidacijah, v atmosferi in okolju, pri procesu gorenja in pri biokemijskih oksidacijah. Z različnimi kemijskimi metodami smo pripravili raztopine vodikovega trioksida v relativno visokih koncentracijah, kar je omogočilo njegovo nedvoumno karakterizacijo (¹H in ¹⁷O NMR, IR (matrica in raztopina), mikrovalovi in kvantnomehanski izračuni). Teoretične in NMR študije so pokazale, da je tvorba (HOOOH) n ($n = 2, 3, 4, \dots$) skupkov najbolj značilna za nepolarna, inertna okolja; medtem ko lahko organske kisikove baze (B) kot topila takšne skupke razbijejo in tvorijo močne intermolekularne komplekse, HOOOH—B. Voda ima ključno vlogo pri razpadu tega polioksida, saj deluje kot bifunkcionalni katalizator in močno skrajša življenjsko dobo tega polioksida (> 1000 krat). HOOOH pri tem razpade v vodo in singletni kisik. Vodikov trioksid je bolj lipofilen kot voda in vodikov peroksid ter je tudi močnejša kislina. Protonacija najbolj bazičnih terminalnih kisikovih atomov v molekuli HOOOH privede do nastanka HOOO(H)H⁺, ki je zelo kratkoživ intermediat in hitro razpade v H₃O⁺ in singletni kisik. HOOOH (skupaj s HOOO• radikalom in HOOO⁻ anionom) lahko smatramo kot zelo reaktivno kisikovo zvrst, ki sodeluje pri »peroksonskem procesu« v okolju in atmosferi. Ta polioksid lahko tudi resno poškoduje različne pomembne biomolekule kot so DNA, lipidi in proteini (arterioskleroza, rak, nevrodegenerativni procesi). (CERKOVNIK, Janez, PLESNIČAR, Božo. Recent advances in the

chemistry of hydrogen trioxide (HOOOH). *Chem. Rev.*, **2013**, *113*, 7930-7951, doi: [10.1021/cr300512s](https://doi.org/10.1021/cr300512s) [COBISS.SI-ID [1615407](#)])

Od odkritja z bakrom katalizirane cikloadicije organskega azida in alkina v klik-triazol (1,2,3-triazol) so triazolilideni (1,2,3-triazol-5-ilideni) postali nepogrešljiva skupina N-heterocikličnih karbenskih ligandov s posebnimi sposobnostmi koordinacije na kovine prehoda. Še posebej atraktivni so ligandi z naprednimi strukturami, kot so piridil-triazolilideni, ki lahko s pomočjo različnih bi- in multidentatnih načinov koordinacije natančno uravnavaajo katalitske, spektroskopske in elektrokemijske lastnosti kovinskih centrov. Kljub ogromnemu potencialu piridil-triazolilidenov predstavlja njihova priprava, zaradi težav s selektivnostjo obstoječih metod, poseben izziv. V tej komunikaciji smo razkrili nadvse selektiven in učinkovit način za enostavno pripravo različnih izomernih in homolognih piridil-triazolilidnih soli. Ta temelji na enostavni, pa vendar skrbno izbrani, zanesljivi in selektivni zaščiti s piridinom funkcionaliziranega klik-triazola z N-oksidacijo piridina, ki ji sledi alkiliranje triazolskega obroča in odščita. Naša metoda nudi osnovo za pripravo strukturno raznolikih piridil-triazolilidenov skoraj po želji. Koncept in aplikativnost smo prikazali na 'in situ' tvorbi paladijevega N-heterocikličnega karbenskega kompleksa in njegovi uporabi v Suzuki–Miyaura katalizi. Za izbrano tvorbo C–C vezi, izpeljano v vodi, pri sobni temperaturi in s samo 0.01 mol% 'in situ' generiranega katalizatorja, smo dosegli do 9000 ponovitev katalitskega cikla. Članek je bil kot poseben dosežek izpostavljen v *Chemistry & Industry* 2013, *77* (12), p. 57), DOI: [10.1002/cind.7712_19.x](https://doi.org/10.1002/cind.7712_19.x) (http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/cind.7712_18.x/abstract). (BOLJE, Aljoša, KOŠMRLJ, Janez. A selective approach to pyridine appended 1,2,3-triazolium salts. *Org. Lett.*, **2013**, *15*, 5084-5087. [COBISS.SI-ID [1623855](#)])

B. Drugi poudarki

Raziskali smo dvojno Diels–Alderjevo reakcijo 2*H*-piran-2-onov z *N*-substituiranimi maleimidi in z maleinanhidridom v biciklo[2.2.2]oktenske derivate. Pri tem smo opazili nenavaden vpliv velikosti obroča, pripojenega k 2*H*-piran-2-onu, na *ekso/endo* selektivnost (*J. Org. Chem.* **2009**, *74*, 6303). Uporaba aktivnega oglja (Darco KB) kot nekovinskega katalizatorja reakcijo 2*H*-piran-2-onov z maleimidi pospeši in jo usmerja v izoindole (*J. Org. Chem.* **2012**, *77*, 2857). S to metodo smo pripravili derivate boskalida iz 2*H*-piran-2-onov in stirenov, kot nadomestkov za fenilaceten (*Synthesis* **2014**, *46*, 909). V nadaljevanju smo Darco KB uporabili kot katalizator za dehidrogeniranje tudi pri domino reakciji 9,10-dihidroantracena z *N*-substituiranimi maleimidi, pri čemer so nastali policiklični cikloadicijski produkti, vloga katalizatorja pri tej reakciji pa je bila pretvorba 9,10-dihidroantracena v antracen, ki je v naslednji stopnji reagiral z maleimidi (*Curr. Org. Chem.* **2014**, *18*, 1520). Z vinilnimi dienofili smo 2*H*-piran-2-one pretvorili v visoko substituirane aniline (*Tetrahedron* **2011**, *67*, 3490). To metodologijo smo razširili še na pripojene sisteme (*Monatsh. Chem.* **2012**, *143*, 771). Z DFT izračuni smo dokazali, da zgoraj omenjene Diels–Alderjeve reakcije z alkini potekajo preko zelo polarnih prehodnih stanj (*Eur. J. Org. Chem.* **2010**, 5870).

Opisali smo učinkovito esterifikacijo derivatov dianhidrida biciklo[2.2.2]okt-7-en-2,3,5,6-tetrakarbonsilne kisline v ustrezne tetraestre in njihovo izomerizacijo (*Eur. J. Org. Chem.* **2011**, 3368).

Na področju reakcij tvorbe C–C vezi smo raziskali aktivacijo in funkcionalizacijo C–H vezi dušikovih heterociklov v prisotnosti kovin prehoda. 1,3-Diketonatni Ru(II)-kompleksi in Ru(II)-karboksilat so katalizirali ariliranje fenilpiridinov in fenilpirimidinov (*Organometallics* **2013**, *32*, 609; *Eur. J. Org. Chem.* **2011**, 3474; *Adv. Synth. Catal.* **2009**, *351*, 1737). Paladijev acetat v nizkih koncentracijah in brez liganda je zelo učinkovit katalizator za direktno ariliranje heteroaromatov (tiofen, furan, tiazol, izoksazol) preko aktivacije C–H vezi (*Green Chem.* **2009**, *11*, 425; *Green Chem.* **2009**, *11*, 1832; *J. Org. Chem.* **2009**, *74*, 1179; *Adv. Synth. Catal.* **2010**, *352*, 696).

Raziskovali smo pripravo multidentatnega liganda in njegovega kompleksa z Ru(II) in ugotovili, da ligandne ročice omogočajo hkratno kompleksiranje šestih rutenijevih centrov, kar lahko vodi do povečanja aktivnosti takšnih kompleksov za morebitno uporabo v katalizi (*Dalton Trans.* **2011**, *40*, 6619).

Opisali smo učinkovit postopek za tvorbo 12-členskih makrocikličnih sistemov, ki vsebujejo alkeno enoto z osmimi ogljikovimi atomi, preko alkenске metateze z uporabo rutenijevih katalizatorjev (*Tetrahedron* **2012**, *68*, 5081). Študirali smo tudi reaktivnost 1-funkcionaliziranih 2-fenilpent-4-enov (ester, alkohol, mezilat, amid, Weinrebov amid, bromid) kot substratov v križni metatezni reakciji katalizirani z rutenijevimi alkilidenski kompleksimi (Grubbs katalizator), ki vodi do linearnega C8-alkena (*Monatsh. Chem.* **2013**, *144*, 633).

Poročali smo o enostavni metodi za pripravo 8-amino analogov farmakološko zanimivega nitroksolina in s tem smo tudi prvič pokazali, da cianometoksi skupina lahko nastopa kot dobra izstopajoča skupina v reakcijah nukleofilne aromatske substitucije na kinolinskem sistemu (*Tetrahedron Lett.* **2012**, *53*, 1964).

V sodelovanju z industrijo smo sintetizirali farmakopejske nečistote, ki se uporabljajo kot HPLC standardi pri analitski podpori v proizvodnji kabergolina (*RSC Advances*, **2013**, *3*, 23146).

Raziskovali smo možnosti katalitske aromatizacije pripojenega 6-členskega obroča 3-amino-5,6,7,8-tetrahidro-2H-1-benzopiran-2-onov do ustreznih kumarinov (*Monatsh. Chem.* **2014**, *145*, 1329).

V sodelovanju z inštitutom Jožef Stefan in Fakulteto za elektrotehniko smo raziskovali funkcionalizacijo senzorskih površin in njihovo uporabo za selektivno detekcijo majhnih molekul v plinasti fazi (*IEEE Sens. J.* **2012**, *12*, 1048).

Raziskovali smo selektivne adicije organolitijevih spojin na BF₂-kelate beta-ketoestrov, pri čemer natanejo ustrezni 1,3-dioksa-BF₂ kompleksi. Nadaljnja pretvorba le-teh pa omogoča pripravo različnih 1,3-diketonov, ki imajo v organski kemiji veliko sintezno uporabnost. Opisali smo tudi fluorescenčne lastnosti pripravljenih 1,3-dioksa-BF₂ kelatov (*Org. Lett.* **2010**, *12*, 2900).

V okviru sodelovanja z Inštitutom Jožef Stefan in Fakulteto za elektrotehniko smo raziskovali možnosti modifikacije SiO₂ senzorskih površin z organosilani (*Surface and Interface Analysis* **2013**, *45*, 2421; *Applied Surface Science* **2014**, *315*, 516).

Razvili smo novo sintezno pot, ki vodo do ključnih intermediatov pri sintezi farmacevtske učinkovine Aliskiren (*Synthesis* **2014**, *46*, 3221).

Razvili smo modularen način za pripravo diazenkarboksamidov, funkcionaliziranih s piridil- in aminoalkil-triazolsko skupino, za koordinacijo na kovine (*Synlett* **2009**, 2217). Sinteza je temeljila na Cu(I)-katalizirani cikloadiciji med azidi in alkinu v 1,2,3-triazol, vendar so v našem primeru v prisotnosti Cu(II) nastali triazoli (*Tetrahedron* **2010**, *66*, 2602).

1,2,3-Triazol smo študirali kot ligand za koordinacijo na Pt, Pd, Ag, Ru, Cu, Rh, Au in Hg (*Cryst. Growth Des.* **2010**, *10*, 4920 [članek spada med 20 najbolj branih člankov v novembru 2010]; *Inorg. Chim. Acta* **2010**, *363*, 3817; *Eur. J. Inorg. Chem.* **2011**, 1921; *Polyhedron* **2011**, *30*, 2368). Prvi smo pokazali, da je s kovino možna stabilna koordinacija 1,2,3-triazolnega N2 atoma (*Inorg. Chem.* **2010**, *49*, 4820 [Scopus čisti citati: 52]). Prvi smo tudi odkrili, da platina iz organskega azida povzroči eliminacijo dušika (*Inorg. Chem.* **2013**, *52*, 4528). Nekatere izmed teh spojin so se izkazale kot potencialne učinkovine proti raku (*Dalton Trans.* **2011**, *40*, 5188). Da bi omogočili sistematične študije koordinacije substituiranih 1,2,3-triazolov kot bidentatnih ligandov na kovine, smo sintetizirali knjižnico piridil, pirimidil in pirazinil substituiranih analogov (*Eur. J. Org. Chem.* **2014**, 8167). Poleg tega smo pokazali selektiven pristop do piridil substituiranih 1,2,3-triazolijevih soli (*Org. Lett.* **2013**, *15*, 5084). Izbrane 1,2,3-triazolijeve soli smo uporabili kot prekurzorje v pripravi N-heterocikličnih karbenskih ligandov, za koordinacijo na rutenij. Komplekse smo testirali kot katalizatorje v selektivni oksidaciji alkoholov v karbonilne spojine (*Organometallics* **2014**, *33*, 2588 [članek spada med 20 najbolj branih člankov v juniju 2014]).

Pri kinolinonih smo študirali nove metode odpiranja obroča, razvili selektiven način za tvorbo glikozidne vezi in preizkusili tvorbo 1,2,3-triazolov (*Carbohydr. Res.* **2010**, *345*, 768; *Molecules* **2011**, *16*, 4070; *Tetrahedron* **2013**, *69*, 10826).

Razvili smo tudi učinkovito metodo za sintezo pirazol-3-onov (*Tetrahedron*, **2009**, 65, 8690), enostavno metodo za sintezo nesimetričnih diamidov fumarne kisline (*Tetrahedron Lett.* **2011**, 52, 3287) in selektivno sintezo za pripravo *N*-sulfonilformamidinov (*Eur. J. Org. Chem.* **2013**, 5381).

Pripravili smo kombretastatine s pripojenim pirazolonskim obročem in ugotovili, da učinkovito inhibirajo polimerizacijo tubulina (*Bioorg. Med. Chem.* **2010**, 18, 2375). Nekateri njihovi prekursorji so novi selektivni inhibitorji aldo-keto reduktaze AKR1C3 (*Eur. J. Med. Chem.* **2013**, 62, 89). Sintetizirali smo tudi številne 1,3-diariltriazene. Spojine so bile zelo citotoksične na različne tumorske celice, vključno s tistimi, ki so rezistentne na cisplatin (*Eur. J. Med. Chem.* **2011**, 46, 2971; *Anti-Cancer Drugs*, **2014**, 25, 289). Več triazenov in diazenov je bilo aktivnih tudi na *M. tuberculosis* in na druge klinično relevantne mikobakterijske seve (*Eur. J. Med. Chem.* **2014**, 77, 193; *Eur. J. Med. Chem.* **2014**, 74, 85 [članek je bil izpostavljen v *Global Medical Discovery*, 28. maj, 2014]). Z izbranim diazenkarboksamidom smo pripravili [Aren–Ru] komplekse s citotoksičnimi lastnostmi (*Chem. Eur. J.* **2014**, 20, 17296).

Več novih fluor-vsebujočih hidrazonov in izoniazid hidrazonov je pokazalo visoko aktivnost na *Mycobacterium kansasii* (*Eur. J. Med. Chem.* **2011**, 46, 4937; *Eur. J. Med. Chem.* **2011**, 46, 5902; *Molecules*, **2014**, 19, 3851).

Iz DABCO smo sintetizirali 1-alkil-4-(2-fenoksietil)piperazine in sorodne spojine in ga uporabili za pripravo etrskega izostera Vanokserina (GBR-12909), kot prototipa za serijo inhibitorjev dopaminskega privzema (*Org. Biomol. Chem.* **2012**, 10, 1300).

BF₂-kelate 1,3-ketoestrov z zanimivimi fluorescenčnimi lastnostmi, smo pretvorili v 1,3-diketone in 1,3-ketoamide (*Org. Lett.* **2010**, 12, 2900; *Tetrahedron* **2009**, 65, 2339).

Sintetizirali in okarakterizirali smo analoge spojine vodnice DDNP, namenjene za raziskavo vplivov velikosti in polarnosti molekulske sonde na vezavo na proteinske agregate, ki jih najdemo v možganih bolnikov z nekaterimi nevrodegenerativnimi boleznimi (*Brain Pathol.* **2010**, 20, 419; *Acta Chim. Slov.* **2012**, 59, 431-435; *Tetrahedron Lett.* **2014**, 55, 1218 itd.).

Ugotovili smo, da micelizacija dodeciltrimetilamonijevega klorida v vodnih raztopinah natrijevega salicilata in metil- ter etil-4-hidroksibenzoata poteče že pri zelo nizkih koncentracijah, kar omogoča tvorbo visokoorganiziranih agregatov (*Colloid Polym. Sci.* **2011**, 289, 1597; *Colloids Surf. A* **2014**, 460, 108).

Sodelovali smo pri določitvi kristalne strukture substituiranih benzamidov (*J. Chem. Cryst.* **2012**, 42, 443; *Acta Cryst.* **2011**, C67, o201). S paladijem katalizirana intramolekularna ciklizacija je omogočila pripravo pripojenih indolokarbazolov (*Tetrahedron Lett.* **2012**, 53, 5248).

Rezultati na osnovi povečanja financiranja raziskovalnega programa v letu 2014 (Projekt predložen 31. 10. 2014)

A. *Cikloadicije 2H-piran-2-onov in maleimidov*. Pri naših dosedanjih raziskavah Diels–Alderjeve reakcije različnih derivatov 2H-piran-2-onov in pripojenih piran-2-onov, pri katerih nastanejo biciklo[2.2.2]okteni, smo ugotovili, da je tovrstne reakcije z maleimidom in njegovimi derivati mogoče voditi skoraj izključno do simetričnih *ekso,ekso*-pripojenih biciklooktenskih derivatov. Predvidevali smo, da bi ob prisotnosti zelo velikih skupin na dušikovem atomu maleimida lahko nastali ustrezni *ekso,endo*-produkti tudi pri ostalih 2H-piran-2-onih. To domnevo smo potrdili z uporabo tritilne skupine kot stereoselektivnega pomožnika. Članek je že v pripravi.

B. *Vpliv terciarnih aminov kot organokatalizatorjev na regioselektivnost kloriranja s trikloroizocianurno kislino*. Kot nadaljevanje naših raziskav na področju katalize s kovinskimi katalizatorji in dušikovim organokatalizatorjem DABCO, smo raziskali vpliv različnih katalizatorjev, vključno z organokatalizatorji (DABCO in drugi terciarni amini), na kloriranje anizola in sorodnih spojin s trikloroizocianurno kislino. Pri tem smo ugotovili, da topila in aditivi pomembno vplivajo na regiose-

lektivnost kloriranja anizola s trikloroizocianurno kislino. (*Monatsh. Chem.* **2014**, Online first article; doi: [10.1007/s00706-014-1383-6](https://doi.org/10.1007/s00706-014-1383-6); [COBISS.SI-ID 1536125123])

C. *Sinteza in aplikacija derivatov N-(α -ketoacil)antranilne kisline*. V nadaljevanju študije odpiranja obroča pri kinolinonih smo razvili nov način za pripravo derivatov 2-(indol-2-karboksamido)benzojske kisline in 2-indolil-3,1-benzoksazin-4-onov. Metoda je blaga in učinkovita in temelji na Fischerjevi indolni sintezi. Ker se omenjeni heterociklični sistemi nahajajo v mnogih naravnih produktih in učinkovinah, smo naredili temeljito protonsko, ogljikovo in dušikovo NMR spektroskopsko karakterizacijo. (*Org. Biomol. Chem.* **2014**, *12*, 9650)

Izbrani pregledni članki: *Acc. Chem. Res.* **2009**, *42*, 842; *Curr. Org. Chem.* **2010**, *14*, 1050; *Curr. Org. Chem.* **2013**, *17*, 448; *Curr. Org. Chem.* **2013**, *17*, 457; *Chem. Rev.* **2013**, *113*, 7930; *Catal. Rev.: Science and Engineering* **2014**, *56*, 82; *Curr. Green Chem.* **2014**, *1*, 202.

DRUGI RELEVANTNI DOSEŽKI

POSEBNI DOSEŽKI

Mednarodni patenti

1. Pri naših raziskavah v 5. okvirnem programu (FP project InkCor, EVKA4-CT-2001-00049 (koordinatorica J. Kolar) nas je zanimala inhibicija propadanja galnih črnih zaradi prisotnosti železovih ionov. Vložili smo mednarodno patentno prijavo (2005); leta 2010 pa je bil za prijavo dodeljen EU patent. Pripravili smo dve ciljni spojini (mio-inozitol fosfata) in za obe dokazali, da na podobnem nivoju kot dodekanatrijeva sol fitinske kisline preprečujeta propadanje galnih črnih ob prisotnosti železa v različnih celuloznih vzorcih. Zaradi tega sta spojini uporabni za zaščito papirnih dokumentov. (ANDERS, Manfred, LICHTBLAU, Dirk Andreas, KOLAR, Jana, MALEŠIČ, Jasna, STRLIČ, Matija, ŠALA, Martin, KOČEVAR, Marijan. *Antioxidant for an organic material and method for treating the same : patent : EP 1664431 (B1), 2010-08-04*. [S. l.]: European Patent Office, 2010. 21 str., ilustr. [COBISS.SI-ID 26939909])

2. V patentu poročamo o analogih 1,3-bis(4-nitrofenil)triazenov, njihovih farmacevtsko sprejemljivih soleh in N-aciliranih derivatih kot novih spojinah za zdravljenje različnih vrst raka. Opisane spojine so citotoksične že pri nizkih koncentracijah, saj so 300-600-krat bolj učinkovite od doslej najbolj učinkovitega triazenskega derivata berenila. To so dejansko 4-nitro- substituirani 1,3-diariltriazeni, ki imajo dve dodatni elektron-privlačni skupini in so visoko citotoksični. Aciliranje na triazenskem dušiku poveča topnost. Nadalje, N-aciltriazene lahko obravnavamo kot 'prozdravila' neaciliranih analogov. Antiproliferativna aktivnost novih spojin je odvisna od substituentov na orto mestih na benzenskih obročih. Izkazalo se je, da trifluorometilna skupina poveča citotoksičnost spojine bolj kot drugi substituenti. Patent je plod našega sodelovanja z raziskovalno skupino dr. Maje Osmak (Institut Ruđer Bošković, Zagreb), ki temelji na večletni pogodbi med obema institucijama. (OSMAK, Maja, POLANC, Slovenko, ČIMBORA, Tamara, BROZOVIĆ, A., KOČEVAR, Marijan, MAJCE, Vita, ALIČ, Branko. *Analogues of 1, 3-bis(4-nitrophenyl)triazenes, their pharmaceutically acceptable salts and N-acyl derivatives for tumor treatment : patent : US 8217022 (B2), 2012-07-20*. [S. l.]: World Intellectual Property Organization, 2012. 7 str. [COBISS.SI-ID 30639621])

3. Patent opisuje pripravo ključnih intermediatov za sintezo rosuvastatina in njihovih farmacevtsko sprejemljivih soli. Patent je uspešen zaključek enega od skupnih projektov med Vodjo Projekta in farmacevtsko družbo Lek na področju sinteze statinov. V okviru tega smo razvili popolnoma nov način za sintezo rosuvastatina, ki je za razliko od obstoječih metodologij veliko bolj učinkovit, ekonomičen in okoljsko sprejemljiv tako na laboratorijskem kot industrijskem merilu. Nov konvergenten pristop temelji na sintezi preko laktonskega intermediata in ga odlikuje dejstvo, da ne zahteva kriogenih reakcijskih pogojev in je boljši od vseh do sedaj opisanih načinov. Pričujoči patent je odličen primer prenosa znanja v industrijo in iz industrije. Omeniti je potrebno, da je Lek prvi v Sloveniji ponudil

generični rosuvastatin kot zdravilo za zniževanje holesterola (pod imenom Coupet). Rezultat sodelovanja na omenjenem projektu je tudi znanstvena objava "Lactone Pathway to Statins Utilizing the Wittig Reaction. The Synthesis of Rosuvastatin", Z. Časar, M. Steinbücher, J. Košmrlj *J. Org. Chem.* 2010, 75, 6681–6684. Ta članek je bil oktobra 2010 uvrščen med 20 najbolj branih člankov v reviji *The Journal of Organic Chemistry* in izpostavljen v "Highlights from the Literature" v reviji *Organic Process Research & Development* 2010, 14, 1276–1286. (ČASAR, Zdenko, KOŠMRLJ, Janez. *Key intermediates for the synthesis of rosuvastatin or pharmaceutically acceptable salts thereof*: JP 5558492 B2, 23 July 2014. Tokyo: Japan Patent Office, 2014. 27 str. [COBISS.SI-ID 34323205])

VKLJUČEVANJE V RAZISKOVALNE PROGRAME EVROPSKE UNIJE IN V DRUGE MEDNARODNE RAZISKOVALNE IN RAZVOJNE PROGRAME TER DRUGO MEDNARODNO SODELOVANJE

- (1) Projekt EU: "Collect, analyse, organize, evaluate, share - a response to challenges in forensic drugs analyses -RESPONSE" JUST/2013/ISEC/DRUGS/AG/6413 (Kordinator: MNZ RS POLICIJA; partner UL FKKT, nosilec: J. Košmrlj).
- (2) M. Kočevar in J. Cerkovnik: člana upravnega odbora v COST CM0905 Organokataliza (ORCA) in koaplikanta v delovni skupini WG 4: Interdisciplinarni vidiki, pod vodstvom prof. A. Berkesela (<https://www.jyu.fi/kemia/en/research/cm0905>; 2010–2014).
- (3) M. Kočevar: član upravnega odbora COST COST D 40 (Innovative Catalysis: New Processes and Selectivities; 2006–2011) in neformalni član delovne skupine.
- (4) M. Kočevar: Nacionalni predstavnik v odboru (komiteju) Organic and Biomolecular Chemistry Division (III) IUPAC (za obdobje 2008–2009).
- (5) Erasmus Mundus Action 2 Basileus IV programme iz EU (10 mesecev; J. Suljagić, Univerza v Tuzli, BiH).
- (6) Postdoktorski projekt (18 mesecev) iz EU (M. Gazvoda).

BILATERALNI PROJEKTI

- (1) M. Kočevar: Projekt med Slovenijo in Hrvaško, BI-HR/14-15-007: Novi rutenijevi kompleksi kot potencialne učinkovine proti raku, 2014-15.
- (2) J. Košmrlj: Projekt med Slovenijo in Hrvaško, BI-HR/12-13-028: Kompleksi platine in diazenkarboksamidov kot potencialne učinkovine proti raku, 2012-2013.
- (3) A. Petrič: BI-RO/12-13-04 Slovensko-romunski bilateralni projekt: Inovativno načrtovanje novih biološko aktivnih peptidov s specifičnimi lastnostmi, 2012-2013.
- (4) F. Požgan: Projekt med Slovenijo in Bosno in Hercegovino, BI-BA/12-13-007: Kemijsko raziskovanje fenolnih kislin iz nekaterih rastlin iz družine *Lamiaceae* in njihova modifikacija z namenom povečanja biološkega delovanja, 2012-2013.
- (5) J. Košmrlj: Projekt med Slovenijo in Flamsko skupnostjo ter Flamsko regijo, BI-BE/11-12-F-007: Eksperimentalne in teoretične študije kompleksov kovin prehoda s »klik triazol« ligandi, 2011-2012.
- (6) M. Kočevar: Projekt med Slovenijo in Madžarsko, BI-HU/11-12-005: Uporaba mikrovalov v organski sintezi, 2011-2012.
- (7) S. Polanc: Projekt med Slovenijo in Češko, BI-CZ/10-11/005: Razvoj novih antituberkuloznih agensov in predzdravil učinkovitih proti MDR tuberkulozi, 2010-2011.
- (8) M. Kočevar: Projekt med Slovenijo in Romunijo, BI-RO/10-11/008: Sintaza in katalitsko hidrogeniranje prokiralnih nenasičenih aminokislin, 2010-2011.
- (9) S. Polanc: Projekt med Slovenijo in Argentino, BI-AR/09-11/010: Funkcionalizacija izbranih organskih substratov in razvoj strategij za trajnostno organsko sintezo, 2009-2010.
- (10) S. Polanc: Projekt med Slovenijo in Hrvaško, BI-HR/09-10-018: Diariltriazeni – nova skupina potencialnih protitumorskih zdravil, 2009-2010.

- (11) S. Polanc: Projekt med Slovenijo in Češko, BI-CZ/08-09/004: Sinteza novih antibakterijsko aktivnih spojin, 2008-2009.
- (12) M. Kočevar: Projekt med Slovenijo in Romunijo, BI-RO/08-09/006: Aminokisljine kot gradniki v selektivni sintezi, 2008-2009.

ČLANSTVO UREDNIŠKIH ODBOROV MEDNARODNIH REVIJ

- M. Kočevar: *Periodica polytechnica. Chemical engineering*
M. Kočevar: *American journal of chemistry*
M. Kočevar: *Current organic chemistry (faktor vpliva revije za leto 2012: 3.039)*
M. Kočevar: *E-Journal of Chemistry*
M. Kočevar: *Pure and Applied Chemical Sciences*
M. Kočevar: *Current Green Chemistry*
J. Košmrlj: *Acta Chimica Slovenica*.
S. Polanc: *Topics in Heterocyclic Chemistry* (2008–2012).
F. Požgan: *Glasnik hemičara i tehnologa Bosne i Hercegovine* (2010-)
F. Požgan: *Recent Patents on Catalysis* (2012-2014).

UREDNIK

- J. Cerkovnik: *Acta Chimica Slovenica (član uredniškega sveta)*.
K. Kranjc: *Acta Chimica Slovenica (član uredniškega sveta)*.
J. Košmrlj: *Topics in heterocyclic chemistry* (gostujoči urednik 2012).
S. Polanc: *Topics in Heterocyclic Chemistry* (eden od urednikov znanstvene serije, 2013–).

VKLJUČENOST V PROJEKTE ZA UPORABNIKE

- (1) J. Košmrlj: Pogodba med UL FKKT in Sandoz GmbH - Austria: "Sinteza diastereomera beta-laktama" (2013-2014).
- (2) J. Košmrlj: Pogodba med UL FKKT in LEK/Sandoz: Pogodbo o sodelovanju pri raziskovalnem programu lekov raziskovalec 2013-2014 ŠT. 1795 (2013-2014).
- (3) J. Košmrlj: Pogodba med UL FKKT in LEK/Sandoz, 2226-2013: "Sinteza štirih ciklopropil aminov" (2013).
- (4) J. Košmrlj: Pogodba med UL FKKT in LEK/Sandoz, 753-2013: "Asimetrična sinteza nekaterih ciklopropilaminov" (2013).
- (5) B. Štefane: Pogodba med UL FKKT in LEK/Sandoz, CROS-4393/2013: "Optimizacija sinteze farmacevtske učinkovine". (2013).
- (6) B. Štefane: Pogodba med UL FKKT in LEK/Sandoz, CROS-12287/2013: "Sinteza standardov nečistot". (2013).
- (7) B. Štefane: Raziskovalni projekt med UL FKKT in KRKO, aneks k pogodbi št.:I/14-106632/2012: "Sinteza racemnega intermediata" (2012).
- (8) B. Štefane: Raziskovalni projekt med UL FKKT in KRKO, aneks k pogodbi št.:I/14-106632/2012: "Izvedba sinteznega postopka za pripravo farmacevtske učinkovine" (2013).
- (9) B. Štefane: Raziskovalni projekt med UL FKKT in KRKO, I/13-106632/2011: "Enantioselektivna sinteza intermediata farmacevtske učinkovine" (2012).
- (10) J. Košmrlj: Pogodba med UL FKKT in LEK/Sandoz, 2011/348: "Sinteza stereokemijskih nečistoč ciklopentan-1,2-diola in njegovih prekurzorjev" (2011-2012).
- (11) J. Košmrlj: Pogodba med UL FKKT in LEK/Sandoz o izvedbi sinteze substance 1-bromopirrolidin-2-ona (2011).
- (12) J. Košmrlj: Pogodba med UL FKKT in LEK/Sandoz, 24/2010: "Sinteza in pretvorbe organoborovih spojin" (2011-2012).

- (13) M. Kočevar: Pogodba med UL FKKT in LEK/Sandoz, 2010/15: “*Sinteza, izolacija in karakterizacija intermediatov pri sintezi neke učinkovine*” (2010).
- (14) J. Košmrlj: Pogodba med UL FKKT in LEK/Sandoz, 2010_8: “*Sinteza titanovega kompleksa*” (2010).
- (15) J. Košmrlj: Pogodba med UL FKKT in LEK/Sandoz, 2010/9: “*Sinteza 1,2-disubstituiranih tetrahidronaftalenskih derivatov*” (2010).
- (16) M. Kočevar: Pogodba med UL FKKT in LEK/Sandoz, 16/2009 z aneksom: “*Sinteza ključnega intermediata pri sintezi učinkovine*” (2009).
- (17) J. Košmrlj: Pogodba med UL FKKT in LEK/Sandoz: “*Sinteza imunosupresanta*” (2009).
- (18) J. Košmrlj: Pogodba med UL FKKT in LEK/Sandoz, 27/2009: “*Sinteza statinskega analoga*” (2009).
- (19) B. Štefane: Pogodba o sodelovanju med UL FKKT in KRKO (I/7-106632/2007-krovna pogodba z aneksi I, II in III) z naslovom “*Sinteze organskih molekul*” (2007-2010).

PROJEKT ZA MINISTRSTVO ZA OBRAMBO RS

Pridruženi projekt razvojne narave (izvajalci: IJS, UL EF, UL FKKT). Naročnik Ministrstvo za obrambo Republike Slovenije. »*Umetni nos za eksplozive*« - Unos, Pogodba št. PR-07-014, z dne 26.10.2007- 2010. (Nosilec na UL FKKT: B. Štefane).

DRUGI DOSEŽKI

UČBENIKI IN UČNA GRADIVA

PETRIČ, Andrej. *Moderne NMR metode (Modern NMR Methods): interno študijsko gradivo za izbirni predmet magistrskega študijskega programa Kemija*. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za organsko kemijo, **2012**. 136 f., ilustr. [COBISS.SI-ID [36340997](#)].

PETRIČ, Andrej. *Splošna in organska kemija. 2. del, Organska kemija : interno študijsko gradivo : za obvezni predmet prvostopenjskih študijskih programov UL FFA Laboratorijska biomedicina in kozmetologija : V 1.0*. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za organsko kemijo, **2013**. 219 f., ilustr. [COBISS.SI-ID [36431621](#)]

PETRIČ, Andrej. *Organska kemija (KE213, Magistrski program Kemija, obvezni predmet), interno študijsko gradivo*. Ljubljana, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za organsko kemijo, 2014. 199str.[COBISS.SI-ID [1681199](#)].

PLENARNA IN VABLJENA PREDAVANJA

Člani programske skupine smo opravili serijo plenarnih in vabljenih predavanj na mednarodnih in domačih konferencah ter univerzah in drugih institucijah.

PLENARNA PREDAVANJA

- (1) M. Kočevar: Microwave-assisted catalyzed organic transformations. 9th International Symposium of the Romanian Catalysis Society, 2010, Iasi, Romunija.
- (2) M. Kočevar: 2H-Pyran-2-ones and fused pyran-2-ones as useful building blocks in medicinal chemistry. 38. konference Syntéza a analýza léčiv, pořádaná při příležitosti 40. výročí založení Farmaceutické fakulty UK v Hradci Králové, 2009, Hradec Králové, Češka republika.
- (3) M. Kočevar: Selective organic synthesis: from conventional reaction conditions to green chemistry; Catalysis in organic chemistry Workshop, 2009, Bucharest, Romunija.
- (4) S. Polanc: Various applications of nitrogen-containing molecules in organic synthesis, 2010, 48th Meeting of the Serbian Chemical Society, Novi Sad, Srbija.

- (5) S. Polanc: Chemistry and biological potential of diazenes and analogues, 2011, 40th Conference drug synthesis and analysis, Brno, Češka Republika.

IZBRANA VABLJENA PREDAVANJA NA KONFERENCAH

- (6) M. Krivec, J. Hren, A. Berkessel, M. Kočevar: Synthesis and desymmetrization of prochiral bicyclo[2.2.2]octene derivatives. 6th Organocatalysis COST - meeting CM0905, May 2014, Palermo, Italija.
- (7) K. Kranjc, M. Kočevar: Regio- and stereoselectivity of cycloadditions of 2H-pyran-2-one derivatives. Florida Heterocyclic and Synthetic Conference, 2012, Gainesville, ZDA.
- (8) G. Strle, J. Cerkovnik: Preparation of substrates for the synthesis of dihydrogen trioxide (HO-OOH). Second ORCA Summit, COST, 2012, Aix-Marseille, Francija.
- (9) M. Kočevar: Pyran-2-ones as synthons in organic synthesis. ORCA summit, COST, 2011, Berlin, Nemčija.
- (10) K. Kranjc, M. Kočevar: Recent advances in the application of 2H-pyran-2-ones as dienes in various environmentally benign cycloadditions: syntheses of indoles, anilines, biphenyls, bicyclo[2.2.2]octenes and other adducts. 13th Blue Danube Symposium on Heterocyclic Chemistry, 2009, Bled, Slovenija.
- (11) N. Maraš, M. Kočevar: Direct cyclocondensation of carboxylic acids with 1,2-diaminobenzenes to benzimidazoles employing boric acid catalysis. Symposium International de Chimie Hétérocyclique, 2011, Fès, Maroko.
- (12) M. Gazvoda, B. Burja, M. Kočevar, S. Polanc: Biological activity of pyrazolones and their precursors synthesised via diazenes. 14th Conference on Heterocycles in Bio-organic Chemistry, 2011, Brno, Češka republika.
- (13) K. Kranjc: Cycloadditions of 2H-pyran-2-ones and fused analogues under green reaction conditions. Catalysis in organic chemistry, Workshop, 2009, Bucharest, Romunija.

VABLJENA PREDAVANJA NA UNIVERZAH IN DRUGIH INSTITUCIJAH

- (14) S. Polanc: Several adventures associated with C-N bond formation, 2009, University of Buenos Aires, Argentina.
- (15) F. Požgan: Pyran-2-one derivatives as building blocks for a variety of heterocyclic compounds, 2009, University of Sarajevo, Bosnia and Herzegovina.
- (16) F. Požgan: Transition-metal-catalyzed selective carbon-carbon bond formations, 2012, University of Sarajevo, Bosnia and Herzegovina.
- (17) B. Štefane: Olefin metathesis as an industrial synthetic step: yes or no?, 2012, University of Sarajevo, Bosnia and Herzegovina.
- (18) M. Kočevar: Transformations of 2H-pyran-2-ones and their fused systems, Department of Organic Chemistry and Technology, Budapest University of Technology and Economics, 2012, Budapest, Hungary.
- (19) K. Kranjc: A multitude of reaction pathways starting from 2H-pyran-2-ones and their fused derivatives, 2014, J. J. Strossmayer University, Osijek, Croatia.
- (20) K. Kranjc: Asymmetric vs. symmetric bicyclo[2.2.2]octenes prepared with cycloadditions of 2H-pyran-2-ones, 2013, East China Normal University, Shanghai, China.
- (21) K. Kranjc: 2H-Pyran-2-ones and their fused derivatives as dienes in Diels-Alder reactions, 2012, East China Normal University, Shanghai, China.
- (22) J. Košmrlj: Exploring Copper-Catalyzed Azide-Alkyne Cycloaddition in the Synthesis of Diazenecarboxamide-Platinum Conjugates, 2011, University of Antwerp, Belgium.
- (23) J. Košmrlj: "Click" Chemistry Assisted Preparation of Diazenecarboxamide-Platinum Conjugates as Potential Anti-Cancer Agents, 2011, Free University of Brussels, Belgium.
- (24) J. Košmrlj: Application of Copper(I)-Catalyzed 1,2,3-Triazole Formation in the Synthesis of Diazenecarboxamide-Platinum Conjugates, June, Katholieke Universiteit Leuven, Belgium, 2011.

-
- (25) J. Košmrlj: Collaboration between LEK Pharmaceuticals, d.d., Sandoz Development Center Slovenia and Department of Organic Chemistry, UL FKKT, 2012, Sandoz GmbH, Austria.
 - (26) J. Košmrlj: Diazeno-metal conjugates for potential anti-cancer treatment, 2012, Ruđer Bošković Institute, Croatia.
 - (27) J. Košmrlj: Collaboration between Sandoz - Austria and Department of Organic Chemistry, 2013, Sandoz GmbH, Austria.

DRUGE AKTIVNOSTI

Naša skupina je uspešno sodelovala pri bilateralnih raziskovalnih projektih in tudi koordinirala ter izvedla več projektov za industrijo in drugih projektov.

SODELOVANJE V EU PROGRAMIH IN DRUGA MEDNARODNA SODELOVANJA

Sodelavca PS (Petrič, Košmrlj) intenzivno sodelujeta pri organizaciji in delovanju Infrastrukturnega centra na UL FKKT, kar omogoča nemoteno in kvalitetno podporo pedagoškemu delu in znanstveno-raziskovalnemu delu članov, projektov in programov FKKT.

Trije člani PS (Petrič, Štefane, Požgan) so sodelovali pri delovanju Centra odličnosti EN-FIST v okviru raziskovalno razvojnega programa RRP11 Spojine za diagnostiko in terapijo v medicini.

DRUGA MEDNARODNA SODELOVANJA

- (1) Marko Krivec je opravil del raziskav v sklopu trimesečnega usposabljanja v okviru COST projekta CM0905 Organocatalysis (ORCA), financiranega s strani COST, na Univerzi v Kölnu v raziskovalni skupini prof. Berkessela, ki koordinira raziskovalno skupino 4.
- (2) Jure Vajs je opravil del raziskav v sklopu trimesečnega usposabljanja na School of Life Sciences, University of Warwick, Gibbet Hill Road, Coventry, Združeno kraljestvo, v raziskovalni skupini prof. dr. Davida Roperja. Obisk je bil financiran s strani Javnega sklada Republike Slovenije za razvoj kadrov in štipendije kot rezultat razpisa na »Javnem razpisu štipendij oziroma sofinanciranja raziskovalnega sodelovanja doktorskih študentov v tujini v letu 2012 (146. JR)«.
- (3) Aljoša Bolje je opravil del raziskav v sklopu usposabljanja (3,5 meseca) na Freie Universität Berlin, Institut für Chemie und Biochemie, Inorganic Chemistry, v raziskovalni skupini prof. dr. Biprajita Sarkarja. Obisk je bil financiran s strani Javnega sklada Republike Slovenije za razvoj kadrov in štipendije kot rezultat razpisa na »Javnem razpisu štipendij oziroma sofinanciranja raziskovalnega sodelovanja doktorskih študentov v tujini v letu 2012(146. JR)«.
- (4) Luka Rejc je opravil del raziskav v sklopu usposabljanja (4,5 meseca) na University of California at Los Angeles v raziskovalni skupini prof. dr. J. R. Barria. Usposabljanje je financiral Javni sklad Republike Slovenije za razvoj kadrov in štipendije (Javni razpis štipendij oziroma sofinanciranja raziskovalnega sodelovanja doktorskih študentov v tujini v letu 2013 (JR 163)).

RESEARCH PROGRAMME REPORT

PROGRAMME GOALS

The goal of our programme group was focused on the development of the syntheses of target molecules for scientific purposes and their applications, with the emphasis on eco-friendly conditions (i.e., microwaves, high-pressure, use of green media) and high atom economy. We were pursuing these goals by our creative work, through cooperation with scientists from 10 foreign countries, as well as by cooperation with several academic, research and industrial partners. We participated in the COST programmes (COST D 40; 2006–2011 and CM0905 Organocatalysis, 2011–2014) and in the

activities of the Centre of Excellence EN-FIST within the framework of the research and development of the compounds for diagnosis and therapy in medicine. Several of our young researchers were on 3- to 5-month studies abroad. We obtained an 18-month postdoctoral project (Dr. M. Gazvoda) and a 10-month project from EU (Erasmus Mundus Action 2 Basileus IV programme).

The following were the main subjects of our investigations:

(1) *Metal-catalyzed and other reactions.* Our group was involved in the design of new ligands and their transition metal complexes. The aim of this investigation was the development of novel biologically relevant compounds and the use of metal complexes in homogeneous catalysis for a carbon-carbon bond formation from apparently unreactive molecules. Heterogeneous transition metal catalysis has also been investigated, with the emphasis on the application of hydrogenation reaction, as well as organocatalysis within COST action programme on Organocatalysis.

(2) *Synthesis of biologically-active compounds and development of tools for medical investigation.* We extensively investigated synthesis of biologically important compounds, such as antitumor agents (combretastatin analogs and others), compounds active against TBC (analogs of isoniazid), plant protection agents (analogs of boscalid), inhibitors of dopamine reuptake (vanoxerine analogs), molecular probes for »*in vitro*« and »*in vivo*« labelling of amyloid aggregates, hallmarks of neurodegenerative diseases (Alzheimer's and related diseases), etc. In collaboration with the partners from Slovenian industry, we participated on several strategic pharmaceutical products including statins.

(3) Furthermore, we were interested in combining distinct molecules of drugs into superior, synergistically acting hybrid molecules. For example, we have developed diazenes that are cytotoxic to various tumor cell lines. These compounds are powerful modulators of intracellular glutathione concentration and act synergistically with cisplatin, a well-known antitumor agent. *In vitro* tests on different human carcinoma cell lines revealed that a combined diazene-cisplatin treatment leads to the reversal of the acquired tumor resistances. The research evolved into diazene-extended platinum and ruthenium complexes and *in vivo* tests on mice are currently underway. Additionally, drugs like *p*-aminosalicylic acid, pyrazinamide, norfloxacin, etc. were conjugated with isoniazid into new hybrid molecules possessing promising antitubercular activity.

RESEARCH TOPICS AND SCIENTIFIC ACHIEVEMENTS

THE MAIN ACHIEVEMENTS FROM THE PROGRAMME

A. Special achievements

Catalysis based on nanoparticles is evolving very rapidly. As a result of our cooperation in COST, we reported here a method for the generation and entrapment of rhodium nanoparticles in simple solid ammonium salts, starting from quaternary ammonium salts, rhodium compounds, hydrogen and CO₂. Nanoparticles thus obtained were used as selective catalysts for the hydrogenation of simple substrates and for more complex that cannot be easily hydrogenated. Prof. Leitner received Wöhler Prize for 2009 for the presented results (See: *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2009**, *48*, 6587). (CIMPEANU, Valentin, KOČEVAR, Marijan, PÂRVULESCU, Vasile I., LEITNER, Walter. Preparation of rhodium nanoparticles in carbon dioxide induced ionic liquids and their application to selective hydrogenation. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2009**, *48*, 1085-1088, doi: [10.1002/anie.200803773](https://doi.org/10.1002/anie.200803773) [COBISS.SI-ID [30100997](https://www.cobiss.si/urn:nbn:si:coibis:30100997)])

Heteroaromatics (furan, thiophene, isoxazole, thiazole) bearing hydroxyalkyl group were directly arylated using low-loading ligand-free Pd(OAc)₂ (0.01-0.5 mol%) as precatalyst without any protection of hydroxy group. Reaction proceeded via activation of C-H bond of heteroaromatic, which was further functionalized with (hetero)aryl bromides thus selectively leading to 5-arylated products. Our methodology represents a more environmentally and economically attractive access to such arylated products in comparison with classical cross-coupling reactions. 55 independent SCI cita-

tions. (ROGER, Julien, POŽGAN, Franc, DOUCET, Henri. Palladium-catalysed direct arylation of heteroaromatics bearing unprotected hydroxyalkyl functions using aryl bromides. *Adv. Synth. Catal.*, **2010**, *352*, 696-710, doi: [10.1002/adsc.200900793](https://doi.org/10.1002/adsc.200900793) [COBISS.SI-ID [33849861](https://www.cobiss.si/id/33849861)])

A series of analogs of FDDNP, a well-established molecular probe for the detection of changes in the CNS of Alzheimer disease patients, has been synthesized and characterized using spectroscopic and computational methods. The binding affinities of these molecules have been measured experimentally and explained with a computational model. The analogs were created by systematically modifying the donor and the acceptor sides of FDDNP to learn the structural requirements for optimal binding to A β aggregates. FDDNP and its analogs are neutral, environmentally sensitive, fluorescent molecules with high dipole moments, as evidenced by their spectroscopic properties and dipole moment calculations. The preferred solution-state conformation of these compounds is directly related to the binding affinities. The extreme cases were a nonplanar analog *tert*-butyl-FDDNP, which shows low binding affinity for A β aggregates (520 nM Ki) in vitro and a nearly planar tricyclic analog cDDNP, which displayed the highest binding affinity (10 pM Ki). Using a previously published X-ray crystallographic model of DDNP bound to an amyloidogenic A β peptide model, we show that the binding affinity is inversely related to the distortion energy necessary to avoid steric clashes along the internal surface of the binding channel. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, **2012**, *109*, 16492-16497, doi: [10.1073/pnas.1214134109](https://doi.org/10.1073/pnas.1214134109) [COBISS.SI-ID [36232965](https://www.cobiss.si/id/36232965)])

The review account deals with recent advances in the chemistry of hydrogen trioxide, HOOOH, the simplest member of the family of polyoxides of the general formula ROnR, where R stands for hydrogen or other atoms or groups and $n \geq 3$. These species, which may be regarded as higher homologues of hydrogen peroxide, are believed to be key intermediates in the low-temperature oxidations, atmospheric and environmental chemistry, chemistry of combustion and in biochemical oxidations. Various chemical methods were used for the preparation of relatively highly concentrated solutions of HOOOH, thus enabling unambiguous identification (^1H and ^{17}O NMR, IR (matrix and solution) and microwave spectroscopy, and state-of-the-art ab initio calculations). Theoretical and NMR spectroscopic evidence indicates that (HOOOH) $_n$ ($n = 2, 3, 4, \dots$) assemblies are the characteristic structural feature of the polyoxide in the gas phase and in inert (nonpolar) solvents. Organic oxygen bases (B) as solvents are capable of disrupting these assemblies by forming intermolecularly hydrogen-bonded complexes, HOOOH–B. Water plays a crucial role in the decomposition of this polyoxide by acting as a bifunctional catalyst and accelerates the decomposition of HOOOH (> 1000 times) to produce water and singlet oxygen. Hydrogen trioxide is more lipophilic than water and hydrogen peroxide, and a stronger acid than HOOH as well. Protonation of terminal oxygen atoms (the most basic sites in HOOOH) gives HOOO(H)H $^+$, a short-lived intermediate, which rapidly decomposes to produce H $_3\text{O}^+$ and singlet oxygen. HOOOH (together with the HOOO $^{\cdot}$ radical and the HOOO $^-$ anion) may be regarded as an effective reactive oxygen species involved in the “peroxone process” and in the atmosphere. This polyoxide can also seriously damage different important biomolecules including DNA, lipids, and proteins (atherosclerosis, cancer, neurodegenerative disorders). *Chem. Rev.*, **2013**, *113*, 7930-7951, doi: [10.1021/cr300512s](https://doi.org/10.1021/cr300512s) [COBISS.SI-ID [1615407](https://www.cobiss.si/id/1615407)])

Since the discovery of copper catalyzed cycloaddition of organic azides and alkynes into Click triazoles (1,2,3-triazoles), the corresponding triazolylidenes (1,2,3-triazol-5-ylidenes) have emerged as a powerful subclass of N-heterocyclic carbene ligands possessing unique complexation ability to transition metals. Especially attractive are the ligands of advanced architecture such as pyridyl-triazolylidenes, which can through a variety of bi- and multidentate coordination fine-tune the catalytic, spectroscopic and electrochemical properties of the metal centre. Despite the tremendous potential of pyridyl-triazolylidenes their preparation, even starting from easily derived Click triazoles, remains a significant challenge due to some serious selectivity issues that are connected to the existing methods. In this communication, we reported on highly selective and efficient protocol to easily access a variety of isomeric and homologous pyridyl-triazolium salts. It is based on a simple, yet carefully selected, reliable and selective protection of pyridine functionalized Click triazoles through the pyri-

dine N-oxidation with subsequent triazole ring alkylation and deprotection. Our methodology offers a platform for the preparation of structurally diverse pyridyl-triazolylienes almost at will. The concept and the applicability was demonstrated on in situ generated palladium N-heterocyclic carbene complex of this type and its use in Suzuki–Miyaura catalysis. Turnover of 9000 was achieved in selected C–C coupling reactions at room temperature in the environmentally benign water as a solvent, with as low as 0.01 mol% loading of the in situ generated catalyst. This article was highlighted in *Chemistry & Industry* 2013, 77 (12), p. 57, DOI: 10.1002/cind.7712_19.x (http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/cind.7712_18.x/abstract). (BOLJE, Aljoša, KOŠMRLJ, Janez. A selective approach to pyridine appended 1,2,3-triazolium salts. *Org. Lett.*, **2013**, 15, 5084–5087 [COBISS.SI-ID 1623855])

B. Other achievements

We investigated double Diels–Alder cycloaddition of fused pyran-2-ones with maleimides and maleic anhydride into bicyclo[2.2.2]octene derivatives and observed an unusual effect of the size of the ring fused to 2*H*-pyran-2-ones on the *exo/endo* selectivity (*J. Org. Chem.* **2009**, 74, 6303). The application of activated carbon (Darco KB) as a metal-free catalyst resulted in the acceleration and direction of the transformation toward isoindoles (*J. Org. Chem.* **2012**, 77, 2857). With this method boscalid derivatives were prepared from 2*H*-pyran-2-ones and styrenes as phenylacetylene substitutes (*Synthesis* **2014**, 46, 909). In continuation, we applied Darco KB as the catalyst for dehydrogenation in a domino reaction of 9,10-dihydroanthracene with *N*-substituted maleimides yielding polycyclic cycloaddition products; the role of the catalyst being conversion of 9,10-dihydroanthracene into anthracene, which in the next step reacted with maleimides (*Curr. Org. Chem.* **2014**, 18, 1520). When applying various vinyl-containing dienophiles we transformed 2*H*-pyran-2-ones into highly substituted anilines (*Tetrahedron* **2011**, 67, 3490). This methodology was extended to fused systems as well (*Monatsh. Chem.* **2012**, 143, 771). A DFT computational study of the above Diels–Alder reaction with alkynes revealed a large charge transfer in the transition state (*Eur. J. Org. Chem.* **2010**, 5870).

An efficient esterification of bicyclo[2.2.2]oct-7-ene-2,3,5,6-tetracarboxylic acid dianhydride derivatives into the corresponding tetraesters and their isomerization was described (*Eur. J. Org. Chem.* **2011**, 3368).

In the field of C–C bond formation, activation and functionalization of C–H bonds at nitrogen heterocycles in the presence of transition metals was investigated. 1,3-Diketonate Ru(II)-complexes and Ru(II)-carboxylates were identified as catalysts for direct arylation of phenylpyridines and phenylpyrimidines, respectively (*Organometallics* **2013**, 32, 609; *Eur. J. Org. Chem.* **2011**, 3474; *Adv. Synth. Catal.* **2009**, 351, 1737). Ligand-free palladium acetate at low loadings catalyzed direct arylation of heteroaromatics (thiophene, furan, thiazole, isoxazole) via C–H bond activation (*Green Chem.* **2009**, 11, 425; *Green Chem.* **2009**, 11, 1832; *J. Org. Chem.* **2009**, 74, 1179).

Preparation of a multidentate ligand and its Ru(II) complex was investigated. The ligand branches enabled the simultaneous complexation of six ruthenium centers, which can lead to enhanced activity of such complexes for potential use in catalysis (*Dalton Trans.* **2011**, 40, 6619).

An efficient procedure for the formation of 12-membered macrocyclic systems containing an 8-carbon-atom alkene moiety *via* metathesis reaction in the presence of Ru catalysts was described (*Tetrahedron* **2012**, 68, 5081). The reactivity of 1-functionalized 2-phenylpent-4-enes (ester, alcohol, mesylate, amide, Weinreb amide, bromide) as substrates in a cross metathesis reaction catalyzed by ruthenium alkylidene complexes (Grubb's catalyst) leading to linear C8-alkene was also studied (*Monatsh. Chem.* **2013**, 144, 633).

A simple method for the preparation of 8-amino analogues of pharmacologically interesting nitroline was described and shown for the first time that cyanomethoxy group can act as a leaving group in nucleophilic substitutions in a quinoline system (*Tetrahedron Lett.* **2012**, 53, 1964).

In a collaboration with industry pharmacopeian impurities used as HPLC standards in the production of cabergoline were synthesized (*RSC Advances*, **2013**, 3, 23146).

Possibilities of catalytic aromatization of fused 6-membered ring of 3-amino-5,6,7,8-tetrahydro-2H-1-benzopyran-2-ones towards corresponding coumarin were investigated (*Monatsh.Chem.* **2014**, *145*, 1329).

In collaboration with Jožef Stefan Institute and Faculty of Electrical Engineering functionalization of sensor surfaces and their application in selective detection of small molecules in gas phase has been investigated (*IEEE Sens. J.* **2012**, *12*, 1048).

We have demonstrated a short, mild and chemoselective addition of organolithium reagents to BF₂ complexes of β-ketoesters yielding the corresponding 1,3-dioxa-BF₂ complexes. The latter can be easily transformed to various 1,3-diketones. The method, in general, enables direct transformation of 3-oxopropenoates into the 1,3-diketones, which have as starting materials great synthetic value in the organic chemistry. In addition, the fluorescent properties of 1,3-dioxa-BF₂ kelates were investigated (*Org. Lett.* **2010**, *12*, 2900).

In collaboration with Institute Jožef Stefan and Faculty of Electrical Engineering we have investigated the possibilities of SiO₂ sensors surface modifications using organosilanes (*Surface and Interface Analysis* **2013**, *45*, 2421; *Applied Surface Science* **2014**, *315*, 516).

We have developed new synthetic route towards the Aliskirene intermediates (*Synthesis* **2014**, *46*, 3221).

We developed a modular approach to the diazenecarboxamides having pyridyl- and aminoalkyl-triazole group as 'ligand arms' for metal coordination (*Synlett* **2009**, 2217). The synthesis was based on 1,2,3-triazole forming Cu(I)-catalyzed azide-alkyne cycloaddition, but in our case the triazoles were readily formed with Cu(II) (*Tetrahedron* **2010**, *66*, 2602).

The 1,2,3-triazole was investigated as the ligand for coordination to Pt, Pd, Ag, Ru, Cu, Rh, Au and Hg (*Cryst. Growth Des.* **2010**, *10*, 4920 [The journal's top 20 most read articles in November 2010]; *Inorg. Chim. Acta* **2010**, *363*, 3817; *Eur. J. Inorg. Chem.* **2011**, 1921; *Polyhedron* **2011**, *30*, 2368). For the first time we demonstrated that the coordination of the 1,2,3-triazole N₂ to the metal can be stable (*Inorg. Chem.* **2010**, *49*, 4820 [Scopus independent citations: 52]). We discovered platinum-mediated dinitrogen liberation from organic azides (*Inorg. Chem.* **2013**, *52*, 4528). Some of the resulting compounds were identified as potential anti-cancer agents (*Dalton Trans.* **2011**, *40*, 5188). To enable systematic studies of the coordinative properties of functionalized 1,2,3-triazoles as bidentate ligands to metal ions, we synthesized a library of pyridyl, pyrimidyl and pyrazinyl substituted analogues (*Eur. J. Org. Chem.* **2014**, 8167). In addition, we demonstrated a selective approach to pyridyl substituted 1,2,3-triazolium salts (*Org. Lett.* **2013**, *15*, 5084 [article was highlighted in *Chemistry & Industry* **2013**, *77*(12), 57]). Selected 1,2,3-triazolium salts were used as precursors for the preparation of N-heterocyclic carbene ligands in coordination to ruthenium. The corresponding complexes were tested as catalysts in selective oxidation of alcohols into carbonyl compounds (*Organometallics* **2014**, *33*, 2588 [The journal's top 20 most read articles in June 2014]).

In the quinolinone chemistry we investigated new oxidative ring opening methods, developed a selective formation of glycosidic linkage, and tested the formation of 1,2,3-triazoles (*Carbohydr. Res.* **2010**, *345*, 768; *Molecules* **2011**, *16*, 4070; *Tetrahedron* **2013**, *69*, 10826).

We developed an efficient method for the synthesis of pyrazol-3-ones (*Tetrahedron*, **2009**, *65*, 8690), a simple method for the synthesis of nonsymmetrical diamides of fumaric acid (*Tetrahedron Lett.* **2011**, *52*, 3287) and a selective approach to N-sulfonylformamidines (*Eur. J. Org. Chem.* **2013**, 5381).

Pyrazolone-fused combretastatins were prepared and described as effective inhibitors of tubulin polymerization (*Bioorg. Med. Chem.* **2010**, *18*, 2375). Some of their precursors were found to be new selective inhibitors of aldo-keto reductase AKR1C3 (*Eur. J. Med. Chem.* **2013**, *62*, 89). A number of 1,3-diaryltriazenes was also synthesized. These compounds were highly cytotoxic against various tumor cell lines and drug resistant cells (*Eur. J. Med. Chem.* **2011**, *46*, 2971; *Anti-Cancer Drugs*, **2014**,

25, 289). Several triazenes and diazenes were also active against *M. tuberculosis* and other clinically relevant mycobacterial species (*Eur. J. Med. Chem.* **2014**, 77, 193; *Eur. J. Med. Chem.* **2014**, 74, 85 [Featured on Global Medical Discovery, May 28, 2014]). With selected diazenecarboxamide, we prepared [Aren–Ru] complexes with cytotoxic properties (*Chem. Eur. J.* **2014**, 20, 17296).

New fluorine-containing hydrazones and isoniazid hydrazones exhibited high activity against *Mycobacterium kansasii* (*Eur. J. Med. Chem.* **2011**, 46, 4937; *Eur. J. Med. Chem.* **2011**, 46, 5902; *Molecules*, **2014**, 19, 3851).

DABCO was transformed into 1-alkyl-4-(2-phenoxyethyl)piperazines including ether isostere of Vanoxerine (GBR-12909), as a prototype of potential dopamine reuptake inhibitors (*Org. Biomol. Chem.* **2012**, 10, 1300).

BF₂-chelates of 1,3-ketoesters, with interesting fluorescent properties, were transformed into 1,3-diketones and 1,3-ketoamides (*Org. Lett.* **2010**, 12, 2900; *Tetrahedron* **2009**, 65, 2339).

A series of lead DDNP analogs, intended for investigation of the impact of molecular size and polarity on the efficacy of binding to protein aggregates in the brain tissue of patients with some neurodegenerative diseases, were synthesized and characterized (*Brain Pathol.* **2010**, 20, 419; *Acta Chim. Slov.* **2012**, 59, 431-435; *Tetrahedron Lett.* **2014**, 55, 1218; etc.).

The micellization process of dodecyltrimethylammonium chloride in aqueous solutions of sodium salicylate, and methyl- and ethyl-4-hydroxybenzoate sodium salt occurs at very low concentrations enabling the formation of higher organized aggregates (*Colloid Polym. Sci.* **2011**, 289, 1597; *Colloids Surf. A* **2014**, 460, 108).

We participated in the elucidation of crystal structure of substituted benzamides (*J. Chem. Cryst.* **2012**, 42, 443; *Acta Cryst.* **2011**, C67, o201). With the application of a palladium-catalyzed intramolecular cyclization we were able to prepare fused indolocarbazoles (*Tetrahedron Lett.* **2012**, 53, 5248).

Results based on enhanced financial support of the research programme in 2014
(Project proposal date: 31.10.2014)

A. *Cycloaddition of 2H-pyran-2-ones and maleimides.* Our investigation of the Diels–Alder reaction of different 2H-pyran-2-ones and fused pyran-2-ones with maleimides resulting in the formation of bicyclo[2.2.2]octenes has shown that such reactions stereochemically result almost exclusively in symmetric *exo,exo*-fused bicyclooctene derivatives. Only with pyran-2-ones containing fused larger cyclooctane ring it was possible to prepare also *exo,endo*-products. On this basis, we predicted and obtained the corresponding *exo,endo*-products also with other 2H-pyran-2-ones in the presence of very large groups on the maleimide nitrogen atom. This idea was verified by the application of trityl group as a stereoselective auxiliary. This investigation is at the final stage and the manuscript is under preparation.

B. *Effect of tertiary amines as organocatalysts on the regioselectivity of chlorination with trichloroisocyanuric acid.* As a continuation of our investigation in the field of catalysis with metal catalysts and nitrogen organocatalyst DABCO, we investigated the influence of different catalysts including organocatalysts (DABCO and other tertiary amines) on the chlorination of anisole and related compounds with trichloroisocyanuric acid. We established that solvents and additives significantly influence the regioselectivity of chlorination of anisole with trichloroisocyanuric acid (*Monatsh. Chem.* **2014**, published on the Web; [COBISS.SI-ID [1536125123](#)]).

C. *Synthesis and application of N-(α -ketoacyl)anthranilic acid derivative.* In continuation of our study related to ring opening methods at quinolinones we developed a new method for the preparation of 2-(indol-2-carboxamido)benzoic acids and 2-indolyl-3,1-benzoxazin-4-ones. The method is mild and efficient and is based on Fischer indolisation. Due to the fact that the above mentioned heterocyclic systems are found in many natural products and drugs, a thorough proton, carbon and nitrogen NMR characterisation was performed (*Org. Biomol. Chem.* **2014**, 12, 9650).

Selected Reviews: *Acc. Chem. Res.* **2009**, *42*, 842; *Curr. Org. Chem.* **2010**, *14*, 1050; *Curr. Org. Chem.* **2013**, *17*, 448; *Curr. Org. Chem.* **2013**, *17*, 457; *Chem. Rev.* **2013**, *113*, 7930; *Catal. Rev.: Science and Engineering* **2014**, *56*, 82; *Curr. Green Chem.* **2014**, *1*, 202.

OTHER IMPORTANT SCIENTIFIC ACHIEVEMENTS

SPECIAL ACHIEVEMENTS

International patents

1. In our investigations within the 5th FP project InkCor, EVKA4-CT-2001-00049 (coordinator J. Kolar) we were interested in the inhibition of iron-gall-ink corrosion. The result of this investigation was an international patent application (in 2005); in 2010 the EU patent was assigned to this application. In our laboratory two target compounds (myo-inositol phosphates) were prepared; they were shown to prevent iron-gall-ink decay in cellulose items at the same level as phytic acid dodecasodium salt. As such they can serve as a tool for the paper documents stabilisation. (ANDERS, Manfred, LICHTBLAU, Dirk Andreas, KOLAR, Jana, MALEŠIČ, Jasna, STRLIČ, Matija, ŠALA, Martin, KOČEVAR, Marijan. *Antioxidant for an organic material and method for treating the same : patent : EP 1664431 (B1), 2010-08-04.* [S. 1.]: European Patent Office, 2010. 21 str., illustr. [COBISS.SI-ID 26939909])
2. Our patent reports on the analogues of 1,3-bis(4-nitrophenyl)triazenes, their pharmaceutically acceptable salts and N-acyl derivatives as new agents for the treatment of different types of tumors. The described compounds show cytotoxicity at very low concentrations, they are 300-600-times more efficient than up-to now most efficient triazene derivative berenil. They are in fact 4-nitro-1,3-diaryltriazenes that possess two additional electron-withdrawing groups and are highly cytotoxic compounds. Their acylation at the triazene nitrogen increases the solubility. Furthermore, N-acyltriazenes can be considered as prodrugs of their non-acylated analogues. The antiproliferative activity of new compounds also depends on the type of the substituent introduced at the ortho position of the two benzene rings. It turned out that trifluoromethyl substituent increased cytotoxicity of the compound more than other groups. This patent is a result of our cooperation with the research group of Dr. Maja Osmak (Institut Ruđer Bošković, Zagreb) based upon the long-term agreement between our institutions. (OSMAK, Maja, POLANC, Slovenko, ČIMBORA, Tamara, BROZOVIĆ, A., KOČEVAR, Marijan, MAJCE, Vita, ALIČ, Branko. *Analogues of 1, 3-bis(4-nitrophenyl)triazenes, their pharmaceutically acceptable salts and N-acyl derivatives for tumor treatment : patent : US 8217022 (B2), 2012-07-20.* [S. 1.]: World Intellectual Property Organization, 2012. 7 str., [COBISS.SI-ID 30639621])
3. The patent describes the synthesis of key intermediates for the synthesis of rosuvastatin and their pharmaceutically acceptable salts. The patent is a successful finish of one of the joint projects between the Project Leader and Lek Pharmaceuticals on the synthesis of statins. In this joint research work we developed a completely new methodology for the preparation of the above mentioned drug. The chemistry is based on a new principle via a lactone intermediate and represents a new convergent route, which is also free of any steps requiring cryogenic conditions. It is superior to other methods for the preparation of statins as it is truly efficient, economically and environmentally acceptable on both laboratory and industrial scale. This is an exemplary case of transfer of knowledge into and from the industry. It is worth mentioning that in Slovenia Lek Pharmaceuticals first launched generic rosuvastatin, called "Coupet". The result of the above mentioned collaboration is also scientific publication "Lactone Pathway to Statins Utilizing the Wittig Reaction. The Synthesis of Rosuvastatin", authored by Z. Časar, M. Steinbücher, J. Košmrlj in *J. Org. Chem.* **2010**, *75*, 6681–6684. This article was listed among the journal's top "20 most read articles in October 2010" and highlighted in "Highlights from the Literature" in *Organic Process Research & Development* **2010**, *14*, 1276–1286. (ČASAR, Zdenko, KOŠMRLJ, Janez. *Key intermediates for the synthesis of rosuvastatin or pharmaceutically acceptable salts thereof : JP 5558492 B2, 23 July 2014.* Tokyo: Japan Patent Office, 2014. 27 str. [COBISS.SI-ID 34323205])

PARTICIPATION IN RESEARCH PROGRAMMES OF EU AND OTHER INTERNATIONAL RESEARCH AND DEVELOPING PROGRAMMES AS WELL AS OTHER INTERNATIONAL COOPERATION

- (1) Project EU: "Collect, analyse, organize, evaluate, share - a response to challenges in forensic drugs analyses -RESPONSE" JUST/2013/ISEC/DRUGS/AG/6413 (Kordinator: MNZ RS POLICIJA; partner UL FKKT, Principal investigator: J. Košmrlj).
- (2) M. Kočevar and J. Cerkovnik: members of the management committee COST CM0905 Organocatalysis (ORCA) and coapplicants in working group WG 4: Interdisciplinary aspects, coordinator Prof. A. Berkessel (<https://www.jyu.fi/kemia/en/research/cm0905>; 2010–2014).
- (3) M. Kočevar: member of the management committee COST COST D 40 (Innovative Catalysis: New Processes and Selectivities; 2006–2011) and informal WG member.
- (4) M. Kočevar: Nacional representative in the committee Organic and Biomolecular Chemistry Division (III) IUPAC (for the period of time 2008–2009).
- (5) Erasmus Mundus Action 2 Basileus IV programme from EU (10 months; J. Suljagić, University of Tuzla, BiH).
- (6) Postdoctoral project (18 months) from EU (M. Gazvoda).

BILATERAL PROJECTS

- (1) M. Kočevar: Project between Slovenia and Croatia, BI-HR/14-15-007: Novel ruthenium complexes with potential anti-cancer activity, 2014-15.
- (2) J. Košmrlj: Project between Slovenia and Croatia, BI-HR/12-13-028: Platinum complexes with diazenecarboxamides as potential anti-cancer drugs, 2012-2013.
- (3) A. Petrič: Bilateral Slovenian Romanian project BI-RO/12-13-04: Innovative design of new biologically active peptide systems with specific properties .
- (4) F. Požgan: Project between Slovenia and Bosnia and Herzegovina, BI-BA/12-13-007: Chemical investigation of phenolic acids from species belonging to the family *Lamiaceae* and searching for enhanced biological activity via their modifications., 2012-2013.
- (5) J. Košmrlj: Project between Slovenia and Belgium, BI-BE/11-12-F-007: Experimental and theoretical studies of transition metal complexes with "Click triazole" ligands, 2011-2012.
- (6) M. Kočevar: Projekt med Slovenijo in Madžarsko, BI-HU/11-12-005: Application of microwaves in organic synthesis, 2011-2012.
- (7) S. Polanc: Project between Slovenia and Czech Republic, BI-CZ/10-11/005: Development of Novel Antituberculosis Agents and Prodrugs Effective Against Multidrug Resistant Tuberculosis, 2010-2011.
- (8) M. Kočevar: Project between Slovenia and Romania, BI-RO/10-11/008: Synthesis and catalytic hydrogenation of prochiral unsaturated amino acids, 2010-2011.
- (9) S. Polanc: Project between Slovenia and Czech Republic, BI-CZ/10-11/005: Development of Novel Antituberculosis Agents and Prodrugs Effective Against Multidrug Resistant Tuberculosis, 2010-2011.
- (10) S. Polanc: Project between Slovenia and Croatia, BI-HR/09-10-018: Diaryltriazenes: a new group of potential anticancer drugs, 2009-2010.
- (11) S. Polanc: Project between Slovenia and Czech Republic BI-CZ/08-09/004: Synthesis of New Antibacterial Active Compounds, 2008-2009.
- (12) M. Kočevar: Project between Slovenia and Romania, BI-RO/08-09/006: Amino acids as building blocks in selective synthesis, 2008-2009.

MEMBERSHIP IN EDITORIAL BOARDS OF INTERNATIONAL JOURNALS

M. Kočevar: *Periodica polytechnica. Chemical engineering*

M. Kočevar: *American journal of chemistry*

M. Kočevar: *Current organic chemistry (faktor vpliva revije za leto 2012: 3.039)*

M. Kočevar: *E-Journal of Chemistry*
M. Kočevar: *Pure and Applied Chemical Sciences*
M. Kočevar: *Current Green Chemistry*
J. Košmrlj: *Acta Chimica Slovenica*.
S. Polanc: *Topics in Heterocyclic Chemistry* (2008–2012).
F. Požgan: *Glasnik hemičara i tehnologa Bosne i Hercegovine* (2010-)
F. Požgan: *Recent Patents on Catalysis* (2012-2014).

EDITOR

J. Cerkovnik: *Acta Chimica Slovenica (član uredniškega sveta)*.
K. Kranjc: *Acta Chimica Slovenica (član uredniškega sveta)*.
J. Košmrlj: *Topics in heterocyclic chemistry* (gostujoči urednik 2012).
S. Polanc: *Topics in Heterocyclic Chemistry* (one of the series editor, 2013–).

PARTICIPATION IN APPLIED PROJECTS

- (1) J. Košmrlj: Contract between UL FKKT and Sandoz GmbH - Austria: "Synthesis of beta-lactam diastereomer" (2013-2014).
- (2) J. Košmrlj: Contract between UL FKKT and LEK/Sandoz: Contract of collaboration in a research programme Lek's researcher 2013-2014 ŠT. 1795 (2013-2014).
- (3) J. Košmrlj: Contract between UL FKKT and LEK/Sandoz, 2226-2013: "The Synthesis of Four Cyclopropyl Amines" (2013).
- (4) J. Košmrlj: Contract between UL FKKT and LEK/Sandoz, 753-2013: "Asymmetric synthesis of some cyclopropylamines" (2013).
- (5) B. Štefane: Contract between UL FKKT and LEK/Sandoz, CROS-4393/2013: "Optimization of a synthesis of a pharmaceutical compound". (2013).
- (6) B. Štefane: Contract between UL FKKT and LEK/Sandoz, CROS-12287/2013: "Synthesis of impurities standards". (2013).
- (7) B. Štefane: Research project between UL FKKT and KRKA, anex to the contract:I/14-106632/2012: "Synthesis of a racemic intermediate" (2012).
- (8) B. Štefane: Research project between UL FKKT and KRKA, anex to the contract:I/14-106632/2012: "Implementation of a synthetic procedure for the preparation of a pharmaceutical compound" (2013).
- (9) B. Štefane: Research project between UL FKKT and KRKA, I/13-106632/2011: "Enantioselective synthesis of an intermediate of a pharmaceutical compound" (2012).
- (10) J. Košmrlj: Contract between UL FKKT and LEK/Sandoz, 2011/348: "The synthesis of stereochemical impurities of cyclopentane-1,2-diol derivative and its precursors" (2011-2012).
- (11) J. Košmrlj: Contract between UL FKKT and LEK/Sandoz about the synthesis of 1-bromopyrrolidin-2-one (2011).
- (12) J. Košmrlj: Contract between FKKT and LEK/Sandoz, 24/2010: "Synthesis and transformation of some organoboron compounds" (2011-2012).
- (13) M. Kočevar: Agreement between UL FKKT and LEK/Sandoz, 2010/15: "Synthesis, isolation and characterization of intermediates in the synthesis of drug" (2010).
- (14) J. Košmrlj: Contract between UL FKKT and LEK/Sandoz, 2010_8: "The Synthesis of a Titanium Complex" (2010).
- (15) J. Košmrlj: Contract between UL FKKT and LEK/Sandoz, 2010/9: "The Synthesis of 1,2-Disubstituted Tetrahydronaphthalene Derivatives" (2010).
- (16) M. Kočevar: Agreement between UL FKKT and LEK/Sandoz, 16/2009 with annex: "Synthesis of key intermediate in the synthesis of biologically active compound" (2009).
- (17) J. Košmrlj: Contract between UL FKKT and LEK/Sandoz: "The Synthesis of an immunosuppressant" (2009).

- (18) J. Košmrlj: Contract between UL FKKT and LEK/Sandoz, 27/2009: "The Synthesis of statin analogue" (2009).
- (19) B. Štefane: Contract of cooperation between UL FKKT and KRKA (I/7-106632/2007-contract and supplements I, II in III): "Synthesis of organic molecules" (2007-2010).

PROJECT FOR THE MINISTRY OF DEFENCE OF THE REPUBLIC OF SLOVENIA

Joint development project (partners: IJS, UL EF, UL FKKT); call for applications by Ministry of Defence of the Republic of Slovenia. "Artificial Nose for Explosives" - Unos, Contract number PR-07-014, date: 26.10.2007- 2010. (Principal investigator at UL FKKT: B. Štefane).

OTHER ACHIEVEMENTS

TEXTBOOKS AND STUDY MATERIALS

PETRIČ, Andrej. *Moderne NMR metode (Modern NMR Methods): study material for elective course in master study programme Chemistry*. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za organsko kemijo, **2012**. 136 f., illustr. [COBISS.SI-ID [36340997](#)].

PETRIČ, Andrej. *General and organic chemistry. Part 2: Organic Chemistry: study material for obligatory course of 1st cycle study programs Laboratory biomedicine and Cosmetology at the Faculty of Pharmacy: V 1.0*. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za organsko kemijo, **2013**. 219 pp. (in Slovene). [COBISS.SI-ID [36431621](#)]

PETRIČ, Andrej: *Organic Chemistry (Course code: KE213): study material for obligatory course of 2nd cycle study program Chemistry*: Ljubljana, Faculty of Chemistry and Chemical Technology, Chair of Organic Chemistry **2014**. 199 pp. (in Slovene) [COBISS.SI-ID [1681199](#)].

PLENARY AND INVITED LECTURES

Programme group members carried out (besides title lecture) a series of plenary and invited lectures at international and domestic conferences and universities or other institutions.

PLENARY LECTURES

- (1) M. Kočevar: Microwave-assisted catalyzed organic transformations, 9th International Symposium of the Romanian Catalysis Society, 2010, Iasi, Romania.
- (2) M. Kočevar: 2H-Pyran-2-ones and fused pyran-2-ones as useful building blocks in medicinal chemistry, 38. konference Syntéza a analýza léčiv, pořádaná při příležitosti 40. výročí založení Farmaceutické fakulty UK v Hradci Králové, 2009, Hradec Králové, Czech Republic.
- (3) M. Kočevar: Selective organic synthesis: from conventional reaction conditions to green chemistry, Catalysis in organic chemistry Workshop, 2009, Bucharest, Romania.
- (4) S. Polanc: Various applications of nitrogen-containing molecules in organic synthesis, 2010, 48th Meeting of the Serbian Chemical Society, Novi Sad, Serbia.
- (5) S. Polanc: Chemistry and biological potential of diazenes and analogues, 2011, 40th Conference drug synthesis and analysis, Brno, Czech Republic.

SELECTED INVITED LECTURES AT CONFERENCES

- (6) M. Krivec, J. Hren, A. Berkessel, M. Kočevar: Synthesis and desymmetrization of prochiral bicyclo[2.2.2]octene derivatives. 6th Organocatalysis COST - meeting CM0905, May 2014, Palermo, Italy.
- (7) K. Kranjc, M. Kočevar: Regio- and stereoselectivity of cycloadditions of 2*H*-pyran-2-one derivatives. Florida Heterocyclic and Synthetic Conference, 2012, Gainesville, U.S.A.
- (8) G. Strle, J. Cerkovnik: Preparation of substrates for the synthesis of dihydrogen trioxide (HOOH). Second ORCA Summit, COST, 2012, Aix-Marseille, France.
- (9) M. Kočevar: Pyran-2-ones as synthons in organic synthesis. ORCA summit, COST, 2011, Berlin, Germany.
- (10) K. Kranjc, M. Kočevar: Recent advances in the application of 2*H*-pyran-2-ones as dienes in various environmentally benign cycloadditions: syntheses of indoles, anilines, biphenyls, bicyclo[2.2.2]octenes and other adducts. 13th Blue Danube Symposium on Heterocyclic Chemistry, 2009, Bled; Slovenia.
- (11) N. Maraš, M. Kočevar: Direct cyclocondensation of carboxylic acids with 1,2-diaminobenzenes to benzimidazoles employing boric acid catalysis. Symposium International de Chimie Hétéro-cyclique, 2011, Fès, Morocco.
- (12) M. Gazvoda, B. Burja, M. Kočevar, S. Polanc: Biological activity of pyrazolones and their precursors synthesised via diazenes. 14th Conference on Heterocycles in Bio-organic Chemistry, 2011, Brno, Czech Republic.
- (13) K. Kranjc: Cycloadditions of 2*H*-pyran-2-ones and fused analogues under green reaction conditions. Catalysis in organic chemistry, Workshop, 2009, Bucharest, Romania.

INVITED LECTURES AT UNIVERSITIES AND OTHER INSTITUTIONS

- (14) S. Polanc: Several adventures associated with C-N bond formation, 2009, University of Buenos Aires, Argentina.
- (15) F. Požgan: Pyran-2-one derivatives as building blocks for a variety of heterocyclic compounds, 2009, University of Sarajevo, Bosnia and Herzegovina.
- (16) F. Požgan: Transition-metal-catalyzed selective carbon-carbon bond formations, 2012, University of Sarajevo, Bosnia and Herzegovina.
- (17) B. Štefane: Olefin metathesis as an industrial synthetic step: yes or no? 2012, University of Sarajevo, Bosnia and Herzegovina.
- (18) M. Kočevar: Transformations of 2*H*-pyran-2-ones and their fused systems, Department of Organic Chemistry and Technology, Budapest University of Technology and Economics, 2012, Budapest, Hungary.
- (19) K. Kranjc: A multitude of reaction pathways starting from 2*H*-pyran-2-ones and their fused derivatives, 2014, J. J. Strossmayer University, Osijek, Croatia.
- (20) K. Kranjc: Asymmetric vs. symmetric bicyclo[2.2.2]octenes prepared with cycloadditions of 2*H*-pyran-2-ones, 2013, East China Normal University, Shanghai, China.
21. K. Kranjc: 2*H*-Pyran-2-ones and their fused derivatives as dienes in Diels-Alder reactions, 2012, East China Normal University, Shanghai, China.
- (22) J. Košmrlj: Exploring Copper-Catalyzed Azide-Alkyne Cycloaddition in the Synthesis of Diazenecarboxamide-Platinum Conjugates, 2011, University of Antwerp, Belgium.
- (23) J. Košmrlj: "Click" Chemistry Assisted Preparation of Diazenecarboxamide-Platinum Conjugates as Potential Anti-Cancer Agents, 2011, Free University of Brussels, Belgium.
- (24) J. Košmrlj: Application of Copper(I)-Catalyzed 1,2,3-Triazole Formation in the Synthesis of Diazenecarboxamide-Platinum Conjugates, June, Katholieke Universiteit Leuven, Belgium, 2011.
- (25) J. Košmrlj: Collaboration between LEK Pharmaceuticals, d.d., Sandoz Development Center Slovenia and Department of Organic Chemistry, UL FKKT, 2012, Sandoz GmbH, Austria.

- (26) J. Košmrlj: Diazene-metal conjugates for potential anti-cancer treatment, 2012, Ruđer Bošković Institute, Croatia.
- (27) J. Košmrlj: Collaboration between Sandoz - Austria and Department of Organic Chemistry, 2013, Sandoz GmbH, Austria.

OTHER ACTIVITIES

Our group has also participated in bilateral research projects, as well as coordinated and successfully completed several industrial and other research projects.

COOPERATION IN EU PROGRAMMES AND OTHER INTERNATIONAL COOPERATION

Members of the research group (Prof. A. Petrič and Prof. J. Košmrlj) were involved in the organisation and operation of the Center for Research Infrastructure (IC) at the Faculty of Chemistry and Chemical Technology (FCCT).

Three members of the research group (Prof. A. Petrič, Doc. Dr. B. Štefane, Doc. Dr. F. Požgan) have cooperated in the the Centre of Excellence EN-FIST in the frame of research and development programme RRP11 "Compounds for Diagnosis and Therapy in Medicine".

OTHER INTERNATIONAL COOPERATION

- (1) Marko Krivec carried out a part of his research work in a three-month stay under the frame of COST project CM0905 Organocatalysis (ORCA), financially covered by the COST, at the University of Cologne in the research team of Prof. Berkessel, the coordinator of the research group 4.
- (2) Jure Vajs carried out a part of his research work at the School of Life Sciences, University of Warwick, Gibbet Hill Road, Coventry, UK, in the research group of Prof. Dr. David Roper. His three-month visit to the University of Warwick was financed by Slovene human resources development and scholarship fund (call for applications 146. JR, 2012).
- (3) Aljoša Bolje carried out a part of his research work at the Freie Universität Berlin, Institut für Chemie und Biochemie, Inorganic Chemistry, Berlin, in the group of Prof. Dr. Biprajit Sarkar. His 5-month visit to the Freie Universität Berlin was financed by Slovene human resources development and scholarship fund (call for applications 146. JR, 2012).
- (4) Luka Rejc performed part of his research at the University of California at Los Angeles in Dr. Jorge R. Barrio's research group. His four-and-a-half-month visit to the UCLA laboratory was financed by Slovene human resources development and scholarship fund (call for applications JR 163, 2013).

KEMIJSKO INŽENIRSTVO

CHEMICAL ENGINEERING

PROGRAMSKA SKUPINA / RESEARCH PROGRAMME GROUP

P2-0191

VODJA PROGRAMSKE SKUPINE / PRINCIPAL RESEARCHER

prof. dr. Matjaž Krajnc

SODELAVCI PROGRAMSKE SKUPINE / RESEARCH PROGRAMME STAFF

Raziskovalci / *Researchers*

red. prof. dr. Matjaž Krajnc

red. prof. dr. Marin Berovič

red. prof. dr. Aleksander Pavko

red. prof. dr. Igor Plazl

izr. prof. dr. Urška Šebenik

izr. prof. dr. Polona Žnidaršič Plazl

doc. dr. Andreja Zupančič Valant

doc. dr. Andreja Žgajnar Gotvajn

dr. Branko Alič

dr. Martin Lubej

dr. Gabriela Kalčikova

doc. dr. Mitja Lakner (UL FGG)

Mladi raziskovalci / *Young Researchers*

Uroš Novak

Aleš Ručigaj

Rok Ambrožič

Natalija Pokeržnik

Žiga Štirn

Tehniki / *Technicians*

Vesna Delalut

Klemen Birtič

Janez Malovrh

Sodelujoče institucije / *Participating Institutions*

UL, Fakulteta za gradbeništvo in geodezijo

POROČILO O REALIZACIJI PROGRAMA

CILJI PROGRAMA

Vsebinsko izhodišče programa Kemijsko inženirstvo je študij transportnih pojavov v heterogenih reakcijsko-difuzijskih sistemih, ki vključuje matematično-fizikalni zapis procesov na različnih nivojih opazovanja od molekularnega do makroskopskega, razvoj nelinearnih sistemov za opis procesov ter razvoj produktov za aplikacije, ki zahtevajo podrobno poznavanje kompleksnih transportnih mehaniz-

mov. Raziskovalni program ja zasnovan tako, da omogoča integriran multidisciplinaren sistematičen pristop, s katerim bo mogoče razvijati osnovna kemijsko inženirska znanja in jih aplicirati na specifičnih kemijsko inženirskih področjih. Cilji programa so opredeljeni po delitvi vsebine programa na specifična kemijsko inženirska področja, ki so: *kemijsko procesno inženirstvo z reologijo, polimerno inženirstvo, biokemijsko inženirstvo in ekološko inženirstvo*.

KEMIJSKO PROCESNO INŽENIRSTVO Z REOLOGIJO

Mikrotehnologija predstavlja pomemben dejavnik razvoja na številnih področjih, od industrije elektronike, proizvodnje gorivnih celic, do farmacevtske in kemijske industrije, medicinske tehnologije, biotehnologije in okoljevarstva. Vpeljava mikroreaktorjev v (bio)kemijske procese v zadnjih letih zavzema precejšnjo pozornost, predvsem zaradi majhne porabe kemikalij in zelo učinkovitega prenosa toplote in snovi kot posledice visokega razmerja med površino in volumnom reaktorjev, lažjega nadzora procesnih pogojev in novega koncepta postavitve proizvodnje na osnovi povečanja števila enot (numbering-up) namesto klasičnega povečevanja (scale-up). V sklopu raziskav študiramo mikrofluidne pojave in reakcijsko-difuzijsko dinamiko različnih (bio)kemijskih procesov v mikrostrukturiranih napravah. Pridobljeno znanje bomo uporabili pri razvoju integriranih »lab-on-a-chip« sistemov.

Večfazni sistemi zavzemajo pomembno vlogo v večini proizvodnih procesov. Visoka stopnja znanja pri načrtovanju izbrane naprave je ključnega pomena za njeno optimalno delovanje tako glede kvalitete produkcije kot ekonomike proizvodnje na okolju prijazen način. Glede na stopnjo izbranega kontrolnega volumna načrtovanje multifaznega sistema sloni na sofisticiranem numeričnem reševanju bilanc transportnih količin ali na postavitvi fenomenoloških modelov, ki bazirajo na eksperimentalnem opazovanju tokovne slike. Končni cilj je verodostojna napoved fluidne dinamike in transporta ter kinetično-adsorpcijskih pojavov v odvisnosti od operativnih parametrov. Kljub hitremu razvoju dosegljivih matematičnih orodij, ki omogočajo simulacijo tokovnih oblik v velikih napravah, je eksperimentalna verifikacija tista, ki potrdi pravilnost izbire zaprtja (enclosure) sistema. Ne-newtonski mediji so z svojo kompleksno reološko sliko prisotni v večini procesov v bio-proizvodnji, vendar kljub temu v odprti literaturi primanjkuje eksperimentalnih študij o njihovem vplivu na performanco aparature. Smernice: v primeru ne-newtonskih medijev s poudarjeno elastično komponento se je pokazala izredno kompleksna slika hidrodinamskega dogajanja v koloni, ki jo je težko podvreči volumskemu ali časovnemu povprečenju, kar je običajno pri razvoju manjparametrijskih zveznih ali stopenjskih modelov. Zato je potrebno raziskave usmeriti v pridobivanje lokalnih vrednosti hidrodinamskih parametrov in snovnega transporta, ter tako ustvariti podatkovno bazo za razvoj večparametrijskega modela celic in pristop s CFD metodo.

V izolacijskem postopku farmacevtskih učinkovin predstavlja pomembno fazo koncentriranje vodne raztopine produkta. Ena izmed možnosti je uparjanje, ki se zaradi morebitne termične nestabilnosti produkta lahko izvaja pri nižjih tlakih, vendar jo zaradi nižjih investicijskih in obratovalnih stroškov upravičeno nadomeščajo membranske separacije, ki jo lahko izvajamo pri nizkih temperaturah. V zadnjem času se raziskave in aplikacije koncentriranja s pomočjo membranskih operacij intenzivirajo tudi na sistemih raztopin z organskimi topili. V literaturi najdemo nekaj modelov transporta snovi skozi membrano, ki upoštevajo na primer porozno strukturo membrane, »raztapljanje« topila v membrani, model zaporednih uporov ter površinske napetosti membrane in topila. Z izbiro industrijsko uporabnih topil in učinkovin ter določanjem fluksov in zadrževalnih faktorjev pri različnih obratovalnih pogojih so raziskave aplikativno naravnane. Vendar so po svoji vsebini tudi temeljne, ker poskušajo najti razlago za transport topila in separacijo topljenca s pomočjo obstoječih modelov ali postavijo novega modela. Poudarek raziskav je v laminarnem sloju ob membrani na strani koncentrata in interakciji membrana-topilo-topljenec. Cilj raziskav je izračun potrebne površine membran za izbrane obratovalne pogoje in ekonomska primerjava nanofiltracije z uparjanjem.

Poznavanje pretočnosti reološko kompleksnih tekočin je pomembno pri razumevanju tehnoloških procesov v katerih le te nastopajo kot procesne tekočine, ali kot produkti. Realne tekočine (hetero-

geni sistemi) so ne-newtonske, ker izkazujejo različne odzive na delovanje strižnih sil in strižni tok. Vzrok je kompleksna notranja struktura materiala (tekočine), ki je odvisna od molekularnih interakcij in kombinacije delovanja privlačnih in odbojnih sil med posameznimi komponentami heterogenega sistema. Kot notranjo strukturo materiala lahko smatramo že samo konfiguracijo polimernih molekul, v heterogenih sistemih pa poleg primarnih molekularnih lastnosti tudi sestavo, vsebnost in kompatibilnost osnovnih lastnosti posameznih komponent. Zaradi delovanja sil v strižnem toku, se reološko kompleksne snovi odzivajo ne-izotropno, zato izkazujejo viskoelastične lastnosti. Pri proučevanju reoloških lastnosti se pogosto poslužujemo fenomenoloških pristopov. To pomeni, da na osnovi reološke karakterizacije, določene iz eksperimentalnih podatkov pri različnih strižnih pogojih, določimo materialne funkcije, iz katerih lahko sklepamo na fizikalno-kemijske vplive posameznih komponent v sistemu. Pri raziskovalnem delu preučujemo reološke lastnosti heterogenih polimernih talin z namenom določiti ključne dejavnike sestave, ki vplivajo na mehanske lastnosti polimernih materialov. Na osnovi eksperimentalnih podatkov določamo reološke modele (konstitutivne enačbe stanja) za opis strižno odvisnega obnašanja polimernih talin različne sestave. Na ta način bomo določili primerno formulacijo polimernega materiala, ki bo izkazovala zahtevane lastnosti in proučili transportne parametre notranje strukture heterogenih sistemov.

Poznavanje pretočnosti krvi, kardioplegičnih in fizioloških raztopin je pomembno pri razumevanju delovanja kardiovaskularnih sistemov pri normalnih pogojih in v obolenosti. Za natančen opis hidrodinamskega obnašanja krvi in modelnih telesnih tekočin je treba določiti primeren reološki model, ki podaja odvisnost viskoznosti tekočine od strižne hitrosti v širokem območju strižnih hitrosti. V okviru raziskovalnega dela iz izmerjenih eksperimentalnih podatkov določamo reološke modele za opis strižno odvisnega obnašanja krvi, kardioplegičnih raztopin in modelnih telesnih tekočin in njihovo temperaturno odvisnost. Na osnovi poznavanja reologije krvi opredeljujemo učinek različnih dodatkov (volumski ekspanderji in drugi polisaharidi) na tokovno obnašanje modelnih telesnih tekočin pri različnih temperaturnih režimih. Konstitutivne enačbe za opis strižno odvisnega obnašanja preučevanih telesnih tekočin, ki vsebujejo temperaturno odvisne materialne parametre, uporabljamo pri simulaciji pretoka v 2D in 3D geometrijah. Rezultati simulacij lahko vodijo k izboljšanju nekaterih sestavin modelnih telesnih tekočin in k njihovi optimalni rabi v praksi. Numerične simulacije pretočnosti in tokov preučevanih raztopin in krvi v realnih geometrijah kot so koronarne žile in srčne poti pri različnih temperaturnih režimih dajejo koristne informacije v kirurgiji srca.

POLIMERNO INŽENIRSTVO

Mikroenkapsulacija je proces, s katerim se drobni delci ali kapljice obdajo z ovojem, kar daje kapsulam majhnih dimenzij številne uporabne lastnosti. Material, ki se nahaja v notranjosti kapsul, imenujemo jedro, notranja faza ali polnilo, medtem ko material, ki obdaja jedro, imenujemo lupina, ovoj ali membrana. Razlogov za mikroenkapsulacijo je mnogo. V nekaterih primerih jedro izoliramo od njegove okolice in tako preprečimo izhlapevanje lahkih hlapnega materiala, izboljšamo ali omogočimo rokovanje z lepljivimi materiali ali pa preprečimo kemijsko reakcijo reaktivnega jedra. V drugih primerih pa želimo nadzorovati hitrost transporta učinkovin (npr.: zdravilne učinkovine, pesticidi, ...) iz jedra preko membrane. Razlogi so lahko različni, od tako preprostih, kot je prekrivanje okusa ali vonja jedra, do tako kompleksnih, kot je povečana selektivnost procesa adsorpcije ali ekstrakcije. Cilj raziskovalnega programa je razvoj metod mikroenkapsulacije različnih materialov, ki predstavljajo jedro, s polimernimi ovoji. Raziskujemo polimerizacijski proces, s katerim nastaja ovoj. Aplikativne lastnosti mikrokapsul raziskujemo z različnimi tehnikami, tudi s študijo prenosa snovi iz jedra preko polimerne membrane v okolico.

PSA ("Pressure Sensitive Adhesives") so lepila občutljiva na pritisk. Med PSA lepila spadajo materiali, ki imajo agresivno in trajno začetno adhezijo, se prilepijo z uporabo pritiska prsta, ne potrebujejo aktivacijske energije za tvorbo vezi in imajo zadostno kohezijo za omogočanje enostavne odstranitve nosilca iz površine materiala (brez vidnih ostankov adheziva). Za sintezo PSA lepil se na svetovnem trgu v veliki meri uporabljajo akrilatni monomeri, katerih polimeri imajo edinstvene lastnosti. Glede

na vrsto uporabljene tehnologije za pridobitev končnega produkta razdelimo PSA lepila na: lepila na osnovi organskih topil, lepila na vodni osnovi (emulzije in suspenzije), lepila v talini („hot melt“ lepila) in radiacijsko zamrežljiva lepila. V prvem delu raziskav študiramo suspenzijsko polimerizacijo, s katero nastajajo mikrosferna PSA lepila na vodni osnovi. Cilj je razvoj metode in procesa za sintezo produkta želenih lastnosti. Raziskave vključujejo razvoj novega nanokompozitnega PSA lepila. Drugi cilj raziskav je razvoj prav tako novega, komercialno uporabnega radiacijsko zamrežljivega PSA akrilatnega lepila, ki se lahko nanaša na substrat in se zamrežuje pri sobni temperaturi s pomočjo UV sevanja. Vzporedno raziskujemo prenos toplote med polimerizacijo akrilatnih monomerov v masi.

Raziskujemo sintezo polisiloksanskih emulzij z emulzijsko polimerizacijo po anionskem mehanizmu z odpiranjem monomernega obroča. Cilj je preučiti vpliv sestave in reakcijskih parametrov na končne lastnosti emulzij ter pri tem raziskati zelo kompleksen mehanizem sinteze.

Preučujemo kinetiko sinteze in zamreževanja formaldehidnih smol s ciljem optimizirati proizvodni postopek sečninsko-formaldehidnih smol in razviti tehnologijo priprave melaminskih pen.

Študirali smo kinetiko vulkanizacije in prenos toplote med vulkanizacijo izbranih mešanic kavčukov. Proces smo opisali z matematičnim modeliranjem. Pripravili smo nove gumene nanokompozite in raziskovali ter modelirali njihove viskoelastične lastnosti v širokem razponu temperatur in frekvenc. Določali smo tudi druge relevantne lastnosti nanokompozitnih materialov in jih povezali s sestavo in strukturo materiala.

BIOKEMIJSKO INŽENIRSTVO

Biotransformacije in biodegradacije kemijskih spojin naravnega ali umetnega izvora se uporabljajo v številnih kemijskih, farmacevtskih in živilskih industrijah, ter še posebno v proizvodnji finih kemikalij ter pri zaščiti okolja. Med glavne cilje področja sodi načrtovanje procesov z imobiliziranimi encimi ali celotnimi celicami, ki jih lahko ponovno uporabljamo vse dokler ostanejo aktivni, s čimer minimiziramo stroške ter omogočimo ekonomsko ugodnejši kontinuirni način obratovanja. Nadaljnja integracija procesov z drugimi kemijskimi procesi ter z zaključnimi procesi bi omogočila zelo učinkovite in okolju prijazne proizvodnje. Povezava biokatalitskih procesov z mikroreaktorsko tehnologijo predstavlja velik potencial razvoja na tem področju. V zadnjih letih precej študij obravnava razvoj encimskih mikroreaktorjev in njihova uporaba je v glavnem usmerjena v kemijsko analizo in kinetične študije. V okviru raziskovalnega programa nameravamo razvijati kontinuirne procese izbranih biotransformacij v mikroreaktorjih z uporabo imobiliziranih celic ali encimov z integriranim ločevanjem produktov. Razvoj mikroreaktorske tehnologije je osnovan na uporabi povezave med nanotehnologijo in ionskimi kapljevinami, ki v zadnjem času pritegujejo pozornost kot »zelena« topila v organskih sintezah ter še posebno v katalitskih procesih. Nedavno se je uporaba ionskih kapljev kot reakcijskega medija razširila tudi na encimsko katalizo in biotransformacije s celotnimi celicami, vendar pa je njihova uporaba v industrijskem merilu zelo omejena zaradi visokih cen na trgu. Zaradi tega je razvoj procesov s temi topili na mikro nivoju obetavna alternativa.

Raziskujemo vpliv transportnih pojavov v reološko spremenljivih medijih v heterogenem reakcijsko-difuzijskem sistemu kulture basidiomicet in njihov vpliv na razvoj farmacevtsko aktivnih produktov, polisaharidov in proteinov v smislu produkcije proti tumorskih, proti rakavih in imunostimulativnih učinkovin, ter njihov vpliv na tehnologijo produkcije, izolacije in purifikacije aktivnih komponent, njihovo testiranje in vitro in izdelava tržnih produktov za uporabo v veterini in humani medicini v smislu zdravil brez receptov.

EKOLOŠKO INŽENIRSTVO

Uporabna biokataliza je relativno mlada znanost, ki si skozi bioremediacijo utira pot na področje ekološkega inženirstva. Encimi in mikroorganizmi so namreč zanimivi za ekološko prijazno reševanje problema industrijskih odplak z organskimi polutanti. V zadnjem desetletju se je močno povečalo

zanimanje za možnost bioremediacije s pomočjo gliv bele trohnobe, ki razgradnjo organskih aromatskih polutantov povzročajo z značilnimi lignin peroksidaznimi, mangan peroksidaznimi in lakaznimi aktivnostimi, posebno če rastejo v imobilizirani obliki na ustreznem nosilcu. Na aktivnosti vezanih in prostih encimov je mogoče vplivati z izbiro primerne gojišča ter nosilca in načinom gojenja oziroma vodenja procesa. Izkušnje kažejo, da je v te namene najprimernejši reaktor z rotirajočimi diski. Raziskave obsegajo študije vpliva sestave gojišča in vpliva vrste nosilca na specifične encimske aktivnosti in hitrosti razgradnje izbranih organskih polutantov, predvidoma organskih barvil. Primarni cilj je pridobiti nova spoznanja o potencialni uporabnosti gliv in encimov pri ekološko prijaznem načinu reševanja problema organskih industrijskih odplak z bioremediacijo. Iz ekonomskega aspekta je razgradnja pod nesterilnimi pogoji cenejša, zato je zanimiva primerjava učinkovitosti procesa pri sterilnih oziroma nesterilnih pogojih. Cilj je tudi preizkus uporabnosti tehnologije na realnih vzorcih odpadnih vod in v perspektivi prenos v industrijsko prakso.

OSREDNJE TEME PROGRAMA

Kemijsko procesno inženirstvo z reologijo:

- Mikroreaktorska tehnologija
- Desorpcija kovin iz prsti v kontinuirnem sistemu
- Eksperimentalni študij hidrodinamskih in kinetično-adsorpcijskih parametrov kolone z ekspanimiranim slojem
- Izolacija aktivnih farmacevtskih učinkovin
- Reološko kompleksne tekočine

Polimerno inženirstvo:

- Raziskave na področju mikroenkapsulacije
- Sinteza, karakterizacija in optimizacija procesa sinteze akrilatnih lepil
- Sinteza, priprava in karakterizacija nanokompozitnih materialov
- Sinteza, karakterizacija in optimizacija procesa sinteze polisiloksanskih emulzij
- Sinteza, karakterizacija in optimizacija procesa sinteze različnih formeldehidnih smol
- Raziskave na področju tehnologije priprave melaminskih pen
- Študij kinetike vulkanizacije različnih gumenih zmesi in modeliranje
- Študij prenosa toplote med vulkanizacijo različnih gumenih zmesi in modeliranje
- Mehanskih lastnosti gume in gumenih kompozitov

Biokemijsko inženirstvo:

- Kontinuirni proces biotransformacije steroidov
- Ekstrakcija steroidov v mikroreaktorju
- Biokatalitske reakcije v mikroreaktorju
- Študij encimsko katalizirane sinteze izoamil acetata
- Optimizacija tehnološkega postopka vodenja kultivacije farmacevtsko aktivne glivine biomase
- Biosinteze ekstra in intracelularnih učinkovin s submerzno kultivacijo in kultivacijo glivine biomase na trdnem gojišču
- Gojenje *Grifole frondose* na sekundarnih surovinah kmetijske in lesno predelovalne industrije na eksperimentalni farmi gob
- Izolacija in purifikacija glivinih polisaharidov
- Testiranje aktivnosti indukcije citokinov na človeških celičnih linijah

Ekološko inženirstvo:

- Raziskave na področju bioremediacije
- Nitrifikacija v biološkem reaktorju s pritrjeno biomaso

- Biološki in fizikalno-kemijski postopki čiščenja odpadnih vod
- Napredni oksidacijski procesi za odstranjevanje biološko stabilnih nevarnih organskih onesnaževal iz odpadnih vod
- Razvoj novih kroničnih strupenostnih testov z organizmom *Artemia salina*
- Razvoj strupenostnih testov z višjimi rastlinami z merjenjem encimskih odzivov
- Okoljski vplivi različnih ionskih tekočin kot sodobnih topil in reakcijskih medijev

RESEARCH PROGRAMME REPORT

PROGRAMME GOALS

The programme of our research group focuses on the studies of transport phenomena in heterogeneous reaction-diffusion systems, i.e. mathematical and physical description of processes at different levels of observation, from molecular to macroscopic, development of nonlinear systems for process description, and tailor-made product development for specific applications, which require detailed knowledge of complex transport mechanisms. This research enables an integrated multidisciplinary systematic approach, the development of fundamental chemical engineering scientific knowledge and its application in specific areas of chemical engineering. Programme goals have been set up according to the specific branches of chemical engineering: *chemical process engineering with rheology, polymer engineering, biochemical engineering and environmental engineering.*

CHEMICAL PROCESS ENGINEERING WITH RHEOLOGY

Microtechnology has opened completely new scientific challenges and useful solutions in a broad range of fields, from electronic industry, medical technology, fuel production and processing, biotechnology, chemical industry, environmental protection and process safety. Microstructured devices have demonstrated several advantages in (bio)chemical processes, due to a very large surface-area-to-volume ratio connected with highly effective heat and mass transfer, easier control of process parameters and new production concepts. There are suggestions that there could be benefits for fine chemical/pharmaceutical industries where about 50% of the reactions could be used in a continuous process based mainly on microreactor technology. In this research the microfluids phenomena and reaction-diffusion dynamics of different (bio)chemical processes in microstructured devices were studied and applied in developed integrated lab-on-a-chip systems.

Multiphase systems have been integrated into many industrial processes. High level of fundamental knowledge is crucial for a suitable and effective design of a selected device. According to the selected level of control volume it is possible to describe the behaviour of multiphase system through sophisticated numerical solutions of the balances of transport quantities, or through phenomenological models, based on a thorough experimental work and exact observations of the system. In both cases the goal is to predict fluid dynamic behaviour and transport phenomena in the system as a function of given operating conditions. Non-Newtonian liquids are involved in most bio-chemical processes, yet in literature there is still a certain gap in understanding the impacts of such complex liquids on the performance of a multiphase system. In our previous research with bubble column it was clearly shown that the presence of a non-Newtonian liquid with elastic properties causes highly complex hydrodynamic behaviour of the system; instead of time and volume-averaged approach in evaluation of the measured quantities, local time-dependant measurements of the experimental data is needed, which would allow for the development of a discrete cell model, or a reliable CFD model approach.

Concentration of the product in water solution is one of the important steps in downstream process technologies. Evaporation is one of the possibilities, where low pressure conditions need to be taken

into account in case of a thermally unstable solute. Evaporation has been often successfully replaced by membrane separation technologies due to lower investment and operating costs as well as low temperature operating conditions. In the last decade, the research and applications of product concentration in organic solvents with nanofiltration have increased. Several models, which take into account porous structure of the membrane, molecule diffusion in the membrane, resistances in series, as well as surface tension of the membrane and solvent, have been developed to describe the organic solvent flux and solute rejection. By the selection of industrial solvents and solutes and by measuring the solvent flux and solute rejection the research is applicative. However, by the explanation of solvent and solute transport through membrane and solute separation with the existing models, or newly developed model, the basic nature of the research will be given. The research focuses on laminar film on the concentrate side of the membrane and interactions between membrane, solute and solvent. The goal is to assess the membrane area and make economical comparison between nanofiltration and evaporation for a selected system.

Rheology and applications, i.e. the knowledge about flow behaviour of rheologically complex fluids, is essential for understanding the peculiarity of technological process in which fluids function as process fluids or as final products. Real fluids, such as heterogeneous systems, are non-Newtonian since they exhibit various responses on the action of shear forces and on shear flow. This is due to complex internal structures present in liquid material. The internal liquid structure of polymer material can be considered as a configuration of polymer molecules. The responses on shear flow depend on molecular interactions and on the combination of attractive and repulsive interactions between the components present in heterogeneous liquids. In the research study, rheological properties of heterogeneous polymer melts will be examined in order to determine key factors in the composition, which tailor mechanical properties of polymer materials. Rheological models for describing shear dependent behaviour (constitutive equations) of heterogeneous polymer systems of different compositions will be determined from experimental data. These models will be used to determine appropriate formulation of the polymer material with target mechanical properties and to examine transport parameters of microstructures.

Characterization of blood flow is important for understanding the function of cardiovascular system under normal and diseased conditions. For a complete description of thermodynamics phenomena, it is essential to define an appropriate viscous model, which takes into account the low and high shear rate behaviour of blood. During the course of the project some rheological models for describing shear dependent properties of blood, physiological and cardioplegic solutions and their temperature dependence will be determined on the basis of experimental rheological data. Rheological properties of blood will be compared with some model body fluids of different composition (volume expanders and other polysaccharides) in order to determine the main factors that influence their flow properties and the dependence on temperature. Proper constitutive equations with temperature-dependent material parameters will be proposed for the biological fluids investigated based on experimental data, and will be tested in models of two- and three- dimensional geometries. These results may lead to the improvement of certain physiological and cardioplegic solutions and their optimal use in practice. The numerical simulation of the flow of these fluids in realistic geometries, such as arteries and other blood vessels at different temperatures will provide useful information for heart surgery.

POLYMER ENGINEERING

Micro-encapsulation is a process in which tiny particles or droplets are surrounded by a coating to give small capsules with many useful properties. The material inside the microcapsule is referred to as the core, internal phase, or a fill, whereas the wall is sometimes called a shell, coating, or membrane. The reasons for microencapsulation are countless. In some cases, the core must be isolated from its surroundings, as in isolating vitamins from the deteriorating effects of oxygen, retarding evaporation of a volatile core, improving the handling properties of a sticky material, or isolating a reactive core from chemical attack. In other cases, the objective is not to isolate the core completely but rather to control

the rate at which the core leaves the microcapsule, as in the controlled release of drugs or pesticides. The problem may be simple, i.e. masking the taste or odour of the core, or complex, i.e. increasing the selectivity of the adsorption or extraction process. The goal of the research program is to develop a method for micro-encapsulation of different core substances in a polymeric shell. Different polymers, such as melamine-formaldehyde resin, will be used as shell material. The polymerization and curing processes by which the shell is formed have been studied. The application properties of microcapsules are also described by studying the mass release from the core through the shell into the environment.

Pressure sensitive adhesives (PSA) are defined as materials, which in dry form are aggressive and permanently tacky at room temperature and firmly adhere to a variety of dissimilar surfaces upon mere contact, without the need of more than finger pressure. PSAs are used for numerous products in many different ways. Acrylic polymers are one of the most widely used materials for the production of pressure sensitive adhesives. The PSAs can be segmented by type of technology used to convert the adhesive into its final form: solvent-based, water-based, hot melt, UV cured, etc. The first part of the research is focused on the suspension polymerization by which microspheric water-based PSA adhesives are obtained. The main goal is to develop a method and a process by which tailor-made product can be made. The research work includes nanocomposite PSA adhesives synthesis and characterization. Another goal of the research is to develop a new, commercially suitable RT UV PSA acrylic adhesive, which may be applied on the substrate and cross linked by UV light at room temperature. Heat transfer during bulk polymerization of acrylic monomers is being studied as well.

The synthesis of polysiloxane emulsions by anionic emulsion polymerization with ring opening reaction is being studied. The goal is to investigate the effect of composition and reaction parameters on emulsions end properties. At the same time complex mechanisms of the synthesis will be proposed.

The kinetics of synthesis and cross linking of different formaldehyde resins is being studied to optimize the production process and develop a technology of melamine foam production.

The kinetics of vulcanization process and heat transfer during vulcanization process for selected rubber blends have been studied. The processes were described by mathematical modelling. New rubber nanocomposites were prepared and their viscoelastic behaviour was determined and modelled on a wide range of temperatures and frequencies. Other relevant nanocomposite properties were determined by different characterization methods. The dependence of the properties on the composition and structure were studied as well.

BIOCHEMICAL ENGINEERING

Biotransformations and biodegradations of chemical compounds of natural and synthetic origin are applied in several chemical, pharmaceutical and food industries, particularly in the processes of fine chemicals and environmental protection. Among priority goals is the design of processes employing immobilized enzymes or whole cells, which can be used repeatedly for as long as they remain active, by minimizing costs and enabling economically feasible operation in a continuous mode. Furthermore, integrated process operation with chemical operations and downstream processes would enable highly efficient and environmentally sustainable production. Integration of biocatalytic processes with microreactor technology is of a great potential in this field. In recent years, a successful application of enzymatic microreactors has been reported, mainly in chemical analysis and kinetic studies. Within the research programme, the development of a continuous process of selected biotransformations in a microreactor with immobilized cells/enzymes and with integrated product separation is envisaged. Microreactor technology will further gain from the useful symbiosis between nanotechnology and ionic liquids which have recently received an increased attention as “green” solvents for organic synthesis in general and catalytic processes in particular. Recently, the use of ionic liquids as reaction media has been extended to enzymatic catalysis and whole cell biotransformations. However, their use in industrial processes is restricted due to high market prices, so the development of the processes with these solvents at a microscale level is suggested as a promising alternative.

The influence of transport phenomena of rheological changeable cultivation media in heterogeneous reaction-diffusive system and its influence on basidiomycetes biosynthesis of pharmaceutically active compounds with antitumor, anticancer and immunostimulatory activities, as well its influence on technology of production, isolation and purification of the products and their *in – vitro* testing has been studied.

ENVIRONMENTAL ENGINEERING

Applied biocatalysis in the field of bioremediation is a relatively young science yet gaining significance in environmental engineering. The problems of industrial organic waste streams can be solved with enzymes and microbes in environmentally friendly way. The interest to use white rot fungi for the bioremediation purposes has substantially increased in the last decade. These microorganisms degrade organic aromatic pollutants with lignin degrading enzymes, e.g. manganese peroxidase, lignin peroxidase and laccase, especially if they grow immobilized on a proper solid support. The extracellular, as well as the intracellular enzyme activities can be induced by proper selection of a liquid substrate composition and support material as well as selection of growth conditions. On the basis of previous investigations the rotating discs reactor seems to be a promising reactor type. In the proposed research, the effect of liquid substrate composition and solid support material on specific enzyme activities and degradation rates for selected organic pollutant – industrial organic dyes are currently being investigated. The main goal is to acquire new knowledge about the use of fungi and enzymes in solving the problems of industrial organic waste effluents by bioremediation using environmentally friendly technology. From the economic perspective, the bioremediation under non-sterile conditions is cheaper; therefore the comparison of the process efficiency under sterile and non-sterile conditions is interesting. Experimenting with real samples the industrial applicability is being evaluated.

RESEARCH TOPICS

Chemical process engineering with rheology:

- Microreactor technology
- Desorption of metals from soil in continuous system
- Experimental study of hydrodynamics and kinetic/adsorption parameters of expanded-bed column
- Isolation of active pharmaceutical agents
- Rheologically complex fluids

Polymer engineering:

- Microencapsulation research
- Synthesis, characterization and synthesis process optimization of acrylic adhesives
- Synthesis, characterization and synthesis process optimization of nanocomposite materials
- Synthesis, characterization and synthesis process optimization of polysiloxane emulsions
- Synthesis, characterization and optimization of the synthesis process of formaldehyde resins
- Research and development of a technology for the production of melamine foams
- Kinetic investigations during vulcanization process for different rubber blends and modelling
- Heat transfer investigations during vulcanization process for different rubber blends and modelling
- Testing of rubber and rubber composites

Bioengineering and biotechnology:

- Continuous biotransformation of progesterone
- Steroid extraction in a microchannel system
- Biocatalytic reactions in a microchannel system

- Enzyme catalyzed synthesis of isoamyl acetate in a microreactor
- Optimization of submerged and solid state cultivation of pharmaceutically active fungal biomass
- Biosynthesis of extra and intracellular fungal polysaccharides on secondary wastes generated by wood and agricultural industries
- Cultivation of *Grifola frondosa* fungal fruit bodies on secondary wastes generated by wood and agricultural industry
- Isolation and purification of extra and intracellular fungal polysaccharides
- In-vitro testing of immunostimulatory activities of isolates by induction of cytokines in human peripheral mononuclear blood cells (PBMC)

Environmental engineering:

- Bioremediation research
- Nitrification in the moving-bed biofilm process
- Biological and physico-chemical methods of wastewater treatment
- Advanced oxidation processes for toxic organic pollutants removal from wastewaters
- New chronic test with *Artemia salina*
- Toxicity tests with higher plants on enzymatic level
- Environmental impact of ionic liquids as solvents

DRUGI POMEMBNI ZNANSTVENI DOSEŽKI / OTHER IMPORTANT SCIENTIFIC ACHIEVEMENTS

IZVIRNI ZNANSTVENI ČLANEK / ORIGINAL SCIENTIFIC ARTICLE

1. BEROVIČ, Marin, HABIJANIČ, Jožica, BOH PODGORNIK, Bojana, GREGORI, Andrej, ŠVAGELJ, Mirjan, WRABER-HERZOG, Branka. Production of antitumor fungal polysaccharides of *Ganoderma lucidum* and *Grifola frondosa* by solid state cultivation of wood industry wastes. *Annals of Agrarian Science*, ISSN 1512-1887, 2014, vol. 12, no. 3, str. 8-14. [COBISS.SI-ID 1024554602]
2. STOJKOVIČ, Gorazd, KRIVEC, Matic, VESEL, Alenka, MARINŠEK, Marjan, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. Surface cell immobilization within perfluoroalkoxy microchannels. *Applied Surface Science*, ISSN 0169-4332. [Print ed.], 2014, vol. 320, no. 1, str. 810-817, ilustr. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169433214020558>, doi: 10.1016/j.apsusc.2014.09.064. [COBISS.SI-ID 1791791]
3. BEROVIČ, Marin, BERLOT, Matjaž, KRALJ, Slavko, MAKOVEC, Darko. A new method for the rapid separation of magnetized yeast in sparkling wine. *Biochemical engineering journal*, ISSN 1369-703X. [Print ed.], 2014, vol. 88, str. 77-84, doi: 10.1016/j.bej.2014.03.014. [COBISS.SI-ID 27660839]
4. LAKNER, Mitja, PETEK, Peter, ŠKAPIN-RUGELJ, Marjeta. The continued fractions ladder of specific pairs of irrationals. *British journal of mathematics and computer science*, ISSN 2231-0851, 2014, vol. 4, iss. 13, str. 1827-1834. <http://www.sciencedomain.org/abstract.php?iid=509&id=6&aid=4504#.U3m-Xk2KDL8>. [COBISS.SI-ID 17010265]
5. MILOŽIČ, Nataša, LUBEJ, Martin, NOVAK, Uroš, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona, PLAZL, Igor. Evaluation of diffusion coefficient determination using a microfluidic device. *Chemical and biochemical engineering quarterly*, ISSN 0352-9568, 2014, vol. 28, no. 2, str. 215-223. http://hrcak.srce.hr/index.php?show=clanak&id_clanak_jezik=178411, doi: 10.15255/CABEQ.2014.1938. [COBISS.SI-ID 1705263]
6. LUBEJ, Martin, PLAZL, Igor. Theoretical and experimental study of iron catalyst preparation by chemical vapor deposition of ferrocene in air. *The chemical engineering journal*, ISSN 1385-8947. [Print ed.], 2014, vol. 242, no. 1, str. 306-312, ilustr. http://ac.els-cdn.com/S1385894713016197/1-s2.0-S1385894713016197-main.pdf?_tid=568a5608-838f-11e3-8ff4-00000aab0f01&acdnat=1

- 390413920_5760389be8b7015ba95acfae3491d187, doi: 10.1016/j.cej.2013.12.038. [COBISS.SI-ID 1664303]
7. ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. Enzymatic microreactors utilizing non-aqueous media. *Chimica oggi = Chemistry today*, ISSN 0392-839X, 2014, vol. 32, no. 1, str. 54-61, ilustr. <http://www.teknoscienze.com/Articles/Chimica-Oggi-Chemistry-Today-Enzymatic-microreactors-utilizing-non-aqueous-media.aspx#.UxRET4UwwuI>. [COBISS.SI-ID 1681455]
 8. DROBNE, Samo, LAKNER, Mitja. Which distance-decay function for migration and which one for commuting? : the case study of Slovenia. *Croatian operational research review*, ISSN 1848-0225. [Tiskana izd.], 2014, letn. 5, št. 2, str. 259-272, ilustr. <http://hrcak.srce.hr/ojs/index.php/crorr/article/view/2726>. [COBISS.SI-ID 6937441]
 9. KALČIKOVÁ, Gabriela, ENGLERT, Dominic, ROSENFELDT, Ricki R., SEITZ, Frank, SCHULZ, Ralf, BUNDSCHUH, Mirco. Combined effect of UV-irradiation and TiO₂-nanoparticles on the predator-prey interaction of gammarids and mayfly nymphs. *Environmental pollution*, ISSN 0269-7491. [Print ed.], 2014, vol. 186, no. 1, str. 136-140. http://ac.els-cdn.com/S0269749113006179/1-s2.0-S0269749113006179-main.pdf?_tid=4b5a57be-712f-11e3-98c5-00000aab0f02&acdnat=1388393549_1099f897d8f9dc01760113dba1f8faf8, doi: 10.1016/j.envpol.2013.11.028. [COBISS.SI-ID 1665583]
 10. RUČIGAJ, Aleš, ALIČ, Branko, KRAJNC, Matjaž, ŠEBENIK, Urška. Investigation of cure kinetics in a system with reactant evaporation : epoxidized soybean oil and maleic anhydride case study. *European Polymer Journal*, ISSN 0014-3057. [Print ed.], 2014, vol. 52, no. 1, str. 105-116, ilustr. <http://dx.doi.org/10.1016/j.eurpolymj.2014.01.009>, doi: 10.1016/j.eurpolymj.2014.01.009. [COBISS.SI-ID 1667887]
 11. AMBROŽIČ, Rok, ŠEBENIK, Urška, KRAJNC, Matjaž. Novel epoxy-benzoxazine water-based emulsions with reactive benzoxazine surfactants for coatings. *Express polymer letters*, ISSN 1788-618X, 2014, vol. 8, no. 8, str. 574-587, ilustr. <http://www.expresspolymlett.com/>, doi: 10.3144/expresspolymlett.2014.61. [COBISS.SI-ID 1715503]
 12. KREGAR, Klemen, LAKNER, Mitja, KOGOJ, Dušan. Rotacija z enotskim kvaternionom = Rotation with unit quaternion. *Geodetski vestnik*, ISSN 0351-0271. [Tiskana izd.], 2014, letn. 58, št. 2, str. 231-242, ilustr. http://geodetski-vestnik.com/58/2/gv58-2_kregar.pdf, doi: 10.15292/geodetski-vestnik.2014.02.231-242. [COBISS.SI-ID 6652513]
 13. KAJTNA, Jernej, ŠEBENIK, Urška, KRAJNC, Matjaž. Synthesis and dynamic mechanical analysis of nanocomposite UV crosslinkable 100% solid acrylic pressure sensitive adhesives. *International journal of adhesion and adhesives*, ISSN 0143-7496. [Print ed.], 2014, vol. 49, no. 1, str. 18-25, ilustr. http://ac.els-cdn.com/S0143749613002212/1-s2.0-S0143749613002212-main.pdf?_tid=0be1f984-6c7a-11e3-b240-00000aab0f6c&acdnat=1387875899_0bee10364d8f1fce86b5ce0adea1f8d5, doi: 10.1016/j.ijadhadh.2013.12.010. [COBISS.SI-ID 1663791]
 14. KAJTNA, Jernej, ALIČ, Branko, KRAJNC, Matjaž, ŠEBENIK, Urška. Influence of hydrogen bond on rheological properties of solventless UV crosslinkable pressure sensitive acrylic adhesive prepolymers. *International journal of adhesion and adhesives*, ISSN 0143-7496. [Print ed.], 2014, vol. 49, no. 1, str. 103-108, ilustr. http://ac.els-cdn.com/S0143749613002273/1-s2.0-S0143749613002273-main.pdf?_tid=1f9b954e-7921-11e3-9740-00000aacb35e&acdnat=1389267072_2b2c514569d4f86a66d77b0b12a891ad, doi: 10.1016/j.ijadhadh.2013.12.016. [COBISS.SI-ID 1664047]
 15. ZUPAN, Nastja, BABIČ, Janja, PAVKO, Aleksander. Biodegradation kinetics of phenol, 2,4,6-trichlorophenol and pentachlorophenol with ligninolytic enzymes from *Dichomitus squalens*. *Journal of advances in chemistry*, ISSN 2321-807X, 9. apr. 2014, vol. 8, no. 3, str. 1736-1744, ilustr. <http://cirworld.com/index.php/jac/article/view/4067>. [COBISS.SI-ID 1702703]
 16. SKALAR, Tina, MARINŠEK, Marjan, LUBEJ, Martin, LUKEŽIČ, Marjan, SKALAR, Tomaž, MAČEK, Jadran. Modelling of operating parameters in an SOFC testing system = Modeliranje in parametri delovanja sistema za preizkušanje SOFC. *Materiali in tehnologije*, ISSN 1580-2949. [Tiskana izd.], no. 6, 2014, str. 861-867. [COBISS.SI-ID 1536129731]

17. ŠUŠTERŠIČ, Ema, TUŠAR, Marjan, ZUPANČIČ-VALANT, Andreja. Asphalt concrete modification with waste PMMA/ATH. *Materials and structures*, ISSN 1359-5997, Nov. 2014, vol. 47, iss. 11, str. 1817-1824, ilustr. http://download.springer.com/static/pdf/915/art%253A10.1617%252Fs11527-013-0152-z.pdf?auth66=1421668632_5cb361caaaa118728170c48cceb23a6&ext=.pdf, doi: 10.1617/s11527-013-0152-z. [COBISS.SI-ID 5308442]
18. LIU, Mingqiang, NOVAK, Uroš, PLAZL, Igor, FRANKO, Mladen. Optimization of a thermal lens microscope for detection in a microfluidic chip. V: *Selected papers presented at 18th Workshop on Photoacoustics and Thermal Wave Methods and 9th Workshop on Molecular Acoustics, Relaxation and Calorimetric Methods*, (International journal of thermophysics, ISSN 0195-928X, vol. 35, no. 11). New York: Plenum Press, 2014, vol. 35, no. 11, str. 2011-2022, doi: 10.1007/s10765-013-1515-y. [COBISS.SI-ID 2895867]
19. TUŠAR, Marjan, ŠUŠTERŠIČ, Ema, ZUPANČIČ-VALANT, Andreja. Alternative PMB produced from recycling waste PMMA/ATH = Alternatywne PMB produkowane z odpadów recyklingowych PMMA/ATH. *Transport problems*, ISSN 1896-0596. [Printed ed.], 2014, vol. 9, iss. 2, str. 5-9. http://transportproblems.polsl.pl/pl/Archiwum/2014/zeszyt2/2014t9z2_01.pdf. [COBISS.SI-ID 5531418]
20. KALČIKOVÁ, Gabriela, BABIČ, Janja, PAVKO, Aleksander, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Fungal and enzymatic treatment of mature municipal landfill leachate. *Waste management*, ISSN 0956-053X. [Print ed.], 2014, vol. 34, no. 4, str. 798-803, ilustr. http://ac.els-cdn.com/S0956053X13005849/1-s2.0-S0956053X13005849-main.pdf?_tid=d802160e-b651-11e3-bfb7-00000aab0f6c&acdnat=1395995018_44da13caa3a14e97c8a30d1f9b3453cd, doi: 10.1016/j.wasman.2013.12.017. [COBISS.SI-ID 1671983]
21. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, TRATAR-PIRC, Elizabeta, BUKOVEC, Peter, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. Evaluation of biotreatability of ionic liquids in aerobic and anaerobic conditions. *Water science and technology*, ISSN 0273-1223, 2014, vol. 70, no. 4, str. 698-704, ilustr., doi: 10.2166/wst.2014.283. [COBISS.SI-ID 1751855]

OBJAVLJEN ZNANSTVENI PRISPEVEK NA KONFERENCI / PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTION

22. NOVAK, Uroš, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona, PLAZL, Igor. Microfluidics application in biotechnology : [lecture]. V: *13th International Conference on Management of Innovative Technologies*, Fiesa, Slovenia, 28th - 30th September 2014. JUNKAR, Mihael (ur.), et al. MIT 2014 : proceedings of the 13th International Conference on Management of Innovative Technologies, Fiesa, Slovenia, 28th - 30th September 2014. Ljubljana: LAT - Laboratory for Alternative Technologies, Faculty of Mechanical Engineering, 2014, str. 34-38, ilustr. [COBISS.SI-ID 1536195779]
23. BEROVIČ, Marin, ŠVAGELJ, Mirjan, BOH PODGORNİK, Bojana, PLANKL, Mojca, WRABER-HERZOG, Branka, KREFT, Samo. Advances in cultivation of medicinal fungi biomass and pharmaceutical compounds in bioreactors : [keynote presentation]. V: *Proceedings of 8th International Conference on Mushroom Biology and Mushroom Products*, [19-22 November 2014, New Delhi, India]. [S. l.: s. n, 2014], vol. 2, str. 379-384, ilustr. [COBISS.SI-ID 1536121027]
24. TRATAR-PIRC, Elizabeta, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Anaerobna razgradljivost škrobne plastike : [predavanje]. V: *Slovenski kemijski dnevi 2014*, Maribor, 11.-12. september 2014. KRAVANJA, Zdravko (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.), NOVAK-PINTARIČ, Zorka (ur.). Slovenski kemijski dnevi 2014, Maribor, 11. - 12. september 2014. Maribor: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2014, str. [1-6], ilustr. [COBISS.SI-ID 1784367]
25. LAMPELJ, Ema, LEVSTEK, Meta, STRAŽAR, Marjeta, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Fizikalno-kemijska obdelava tekočih odpadkov. V: *Slovenski kemijski dnevi 2014*, Maribor, 11.-12. september 2014. KRAVANJA, Zdravko (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.), NOVAK-PINTARIČ, Zorka (ur.). Slovenski kemijski dnevi 2014, Maribor, 11. - 12. september 2014. Maribor: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2014, str. [1-17], ilustr. [COBISS.SI-ID 1789743]

**OBJAVLJENI POVZETEK PRISPEVKA NA KONFERENCI / PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE
CONTRIBUTION ABSTRACT**

26. RUČIGAJ, Aleš, ALIČ, Branko, ŠEBENIK, Urška, KRAJNC, Matjaž. Cure kinetics of epoxidized soybean oil with maleic anhydride in an open system. V: 2nd International Conference on Bio-Based Polymers and Composites, August 24-28, 2014, Visegrád, Hungary. BiPoCo e-abstracts : [lectures and posters]. [S. l.: s. n.], 2014, str. [1-2]. [COBISS.SI-ID 1777967]
27. POKERŽNIK, Natalija, ŠEBENIK, Urška, KRAJNC, Matjaž. Glucose-based surfactants and surfmers. V: 2nd International Conference on Bio-Based Polymers and Composites, August 24-28, 2014, Visegrád, Hungary. BiPoCo e-abstracts : [lectures and posters]. [S. l.: s. n.], 2014, str. [1-2]. [COBISS.SI-ID 1778223]
28. LUBEJ, Martin, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, PLAZL, Igor. Intensification of heterogeneous catalysis in microfluidic device using a carbon nanofibers based catalytic support. V: 13th International Conference on Microreaction Technology, June 23 - 25, 2014, Budapest, Hungary. Book of abstracts : IMRET. Budapest: Budapest University of technology and economics, Hungary, 2014, str. 141-142. [COBISS.SI-ID 1763887]
29. MILOŽIČ, Nataša, PETERNEL, Špela, BAJIČ, Marijan, PLAZL, Igor, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. Development of a continuous biotransformation in a microreactor with immobilized omega-transaminase. V: 13th International Conference on Microreaction Technology, June 23 - 25, 2014, Budapest, Hungary. Book of abstracts : IMRET. Budapest: Budapest University of technology and economics, Hungary, 2014, str. 199. [COBISS.SI-ID 1764143]
30. DROBNE, Samo, LAKNER, Mitja. Which distance-decay function for migration and which one for commuting? : the case study of Slovenia. V: 15th International Conference on Operational Research, Osijek, Croatia, 24-26 September, 2014. SCITOVSKI, Rudolf (ur.). Book of abstracts, (Croatian operational research review, ISSN 1849-5141). Osijek: Croatian Operational Research Society, 2014, str. 81. [COBISS.SI-ID 6776673]
31. BEROVIČ, Marin, MAKOVEC, Darko. New method for fast separation of magnetized yeast *Saccharomyces bayanus* in sparkling wine production : [lecture]. V: 31st International Specialised Symposium on Yeast, Nova Gorica, Vipava, Slovenia, October 9 -12, 2014. Book of abstracts. Farum: Jubi kinase, 2014, str. 112. [COBISS.SI-ID 1536111555]
32. BEROVIČ, Marin. Problems in submerged cultivation of medicinal fungi biomass in bioreactors : [lecture]. V: International Conference on Food and Biotechnology, September 11-12, 2014, Agricultural University of Georgia, Tbilisi, Georgia. Book of abstracts. [S. l.: s. n.], 2014, str. 14-15. [COBISS.SI-ID 1536111043]
33. NOVAK, Uroš, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. Study of flow regimes of ionic liquid/n-heptane two-phase system comprising free lipase B in a flow focusing microfluidic device : [poster presentation at 4th International Conference of the Flow Chemistry Society, 18 - 19 February 2014, Barcelona, Spain]. ePosters.net, ISSN 1754-1417, str. [1]. <http://www.eposters.net/pdfs/study-of-flow-regimes-of-ionic-liquidn-heptane-two-phase-system-comprising-free-lipase-b-in-a-flow.pdf>. [COBISS.SI-ID 1693999]
34. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, KALČIKOVÁ, Gabriela. Comparison of phytotoxicity of ionic liquids and deep eutectic solvents. V: 2nd International Conference on Ionic Liquids in Separation and Purification Technology, June 29 July 2, 2014, The Westin Harbour Castle, Toronto, Canada. ILSEPT. [S. l.: s. n.], 2014, str. [1]. [COBISS.SI-ID 1717551]
35. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, KALČIKOVÁ, Gabriela. The impact of solvent in toxicity and biodegradability testing of selected hydrophobic imidazolium-based ionic liquids. V: 2nd International Conference on Ionic Liquids in Separation and Purification Technology, June 29 July 2, 2014, The Westin Harbour Castle, Toronto, Canada. ILSEPT. [S. l.: s. n.], 2014, str. [1]. [COBISS.SI-ID 1717295]
36. SKALAR, Tina, LUBEJ, Martin, MARINŠEK, Marjan. Optimization of operating conditions in a laboratory SOFC testing device. V: 22. mednarodna konferenca o materialih in tehnologijah, 20.-22. oktober 2014, Portorož, Slovenija. GODEC, Matjaž (ur.), et al. Program in knjiga povzetkov

= Program and book of abstracts. Ljubljana: Inštitut za kovinske materiale in tehnologije, 2014, str. 210. [COBISS.SI-ID 1536004291]

VABLJENO PREDAVANJE NA KONFERENCI BREZ NATISA / INVITED LECTURE AT SCIENTIFIC CONFERENCE WITHOUT PUBLICATION

37. ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. [Biotransformations in two-liquid phase systems at the microreactor scale : invited lecture at 4th International Conference of the Flow Chemistry Society, 18 - 19 February 2014, Barcelona, Spain]. [2014]. [COBISS.SI-ID 1682991]
38. PLAZL, Igor. [Transport phenomena of two-phase flows in a microreactor: on-line model validation : invited lecture at 4th International Conference of the Flow Chemistry Society, 18 - 19 February 2014, Barcelona, Spain]. [2014]. [COBISS.SI-ID 1683247]

PRISPEVEK NA KONFERENCI BREZ NATISA / CONTRIBUTION AT SCIENTIFIC CONFERENCE WITHOUT PUBLICATION

39. BEROVIČ, Marin. [The advances in cultivation of medicinal fungi biomass and pharmaceutical compounds : lecture at International Summer School for Young Scientists, Bazaleti, Georgia, September 8-10, 2014]. [2014]. [COBISS.SI-ID 1536112323]
40. AMBROŽIČ, Rok, ŠEBENIK, Urška, KRAJNC, Matjaž. Epoxy coatings made from aqueous emulsions stabilized with polymerizable epoxidized cardanol based benzoxazine surfactant : poster presentation at 2nd International Conference on Bio-Based Polymers and Composites, August 24-28, 2014, Visegrád, Hungary. [COBISS.SI-ID 1778479]
41. ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. [Intensification and integration of biocatalytic processes within microfluidic devices : lecture at ACTION CM13013 SysBiot, Kick-off Workshop, Madrid, April 11, 2014]. [2014]. <https://www.mecp14.es/costmeeting>. [COBISS.SI-ID 1708591]

DRUGI RELEVANTNI DOSEŽKI / OTHER RELEVANT ACHIEVEMENTS

PATENT / PATENT

42. OSMAK, Maja, POLANC, Slovenko, ČIMBORA, Tamara, BROZOVIĆ, A., KOČEVAR, Marijan, MAJCE, Vita, ALIČ, Branko. Analogues of 1, 3-bis(4-nitrophenyl)triazenes, their pharmaceutically acceptable salts and N-acyl derivatives for tumor treatment : patent : US 8217022 (B2), 2012-07-20. [S. 1.]: World Intellectual Property Organization, 2012. 7 str., ilustr. [COBISS.SI-ID 30639621]

UREDNIŠTVO / EDITORIAL WORK

43. Acta chimica slovenica. Pavko, Aleksander (glavni urednik 2006-). [Tiskana izd.]. Ljubljana: Slovensko kemijsko društvo: =Slovenian Chemical Society, 1993-. ISSN 1318-0207. <http://acta.chem-soc.si/>. [COBISS.SI-ID 14086149]
44. International journal of adhesion and adhesives. Krajnc, Matjaž (član uredniškega odbora 2011-). [Print ed.]. Oxford: Elsevier Science, 1980-. ISSN 0143-7496. [COBISS.SI-ID 25636096]
45. Biotechnology annual review. Berovič, Marin (član uredniškega odbora 2002-). Amsterdam; Lausanne; New York; Oxford; Shannon; Tokyo: Elsevier. ISSN 1387-2656. [COBISS.SI-ID 23725061]
46. Chemical and biochemical engineering quarterly. Plazl, Igor (urednik 2009-), Žnidaršič Plazl, Polona (član uredniškega odbora 2009-, gostujoči urednik 2014). Zagreb: Croatian Society of Chemical Engineers, 1987-. ISSN 0352-9568. [COBISS.SI-ID 49186]
47. Food technology and biotechnology. Pavko, Aleksander (član uredniškega odbora 2004-). Zagreb: Faculty of Food Technology and Biotechnology, 1996-. ISSN 1330-9862. <http://www.ftb.com.hr/>. [COBISS.SI-ID 40116737]

48. International journal of medicinal mushrooms. Berovič, Marin (član uredniškega odbora 2010-). New York, NY: Begell House. ISSN 1521-9437. [COBISS.SI-ID 1979418]
49. Journal of biotechnology & biomaterials. Berovič, Marin (član uredniškega odbora 2011-). Henderson: OMICS Publishing Group. <http://www.omicsonline.org/AimsandScopeJBTBM.php>. [COBISS.SI-ID 35604485]
50. Kemija u industriji. Plazl, Igor (član uredniškega odbora 2009-). [Print ed.]. Zagreb: Hrvatsko društvo kemijskih inženjera i tehnologa, 1952-. ISSN 0022-9830. <http://nippur.irb.hr/hrv/kui>. [COBISS.SI-ID 747524]
51. Phytomedicine. Berovič, Marin (član uredniškega odbora 2010-). Stuttgart; Jena; New York: Fischer, 1994-. ISSN 0944-7113. [COBISS.SI-ID 17566981]
52. BEROVIČ, Marin (urednik), LÜBBERT, Andreas (urednik). Principles of bioprocess engineering : doctoral/post-doctoral. Ljubljana: University, 2014. V, 593 str., ilustr. ISBN 978-961-6410-45-8. [COBISS.SI-ID 275189760]

PREDAVANJE NA TUJI UNIVERZI ALI RAZISKOVALNI INSTITUCIJI / LECTURES AT FOREIGN UNIVERSITIES OR RESEARCH INSTITUTIONS

53. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. [Advanced treatment of wastewaters : University of Lisbon, Faculty of Sciences, Department of Chemistry and Biochemistry, Lisbon, May 8th, 2014]. [2014]. [COBISS.SI-ID 1707055]
54. PAVKO, Aleksander. [Biochemical engineering aspects of fungal bioremediation of organic pollutants in waste waters : University of Nova Gorica, Nova Gorica, the 24th April 2014]. [2014]. [COBISS.SI-ID 1706287]
55. BEROVIČ, Marin. Cultivation of active fungal biomass in bioreactors : Universidad de Santiago de Chile, LAMAP-USACH, Núcleo Milenio FISB, June 12th, 2014. 2014. [COBISS.SI-ID 1747503]
56. BEROVIČ, Marin. [Engineering problems in cultivation of medicinal mushroom biomass in bioreactors : invited lecture at Indian Agricultural Research Institute, New Delhi, 19. 11. 2014]. [2014]. [COBISS.SI-ID 1536113859]
57. BEROVIČ, Marin. Magnetic yeast in sparkling wine production : Pontificia Universidad Católica de Santiago, Departamento de Ingeniería Química and Bioprocesos, Santiago de Chile, June 5th, 2014. 2014. [COBISS.SI-ID 1747759]
58. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. [Persistent organic pollutants in the environment : University of Lisbon, Faculty of Sciences, Department of Chemistry and Biochemistry, Lisbon, May 8th, 2014]. [2014]. [COBISS.SI-ID 1707311]
59. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. [Solid waste disposal: from conventional to sustainable landfills? : University of Malta, Department of Chemistry, on April 2nd, 2014]. [2014]. [COBISS.SI-ID 1700655]

MENTOR PRI DOKTORSKIH DISERTACIJAH / SUPERVISOR FOR DOCTORAL DISSERTATIONS

60. NOVAK, Uroš. Izolacija biomolekul z dvofaznimi vodnimi sistemi v mikrofluidnih napravah : doktorska disertacija. Ljubljana: [U. Novak], 2014. XIII, 154 str., ilustr. [COBISS.SI-ID 37431045]
61. ŠUŠTERŠIČ, Ema. Optimizacija sestave asfaltne zmesi z odpadnim kompozitom poli (metil metakrilat) / aluminijev hidroksid : doktorska disertacija. Ljubljana: [E. Šušteršič], 2014. VII, 132 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 37379845]
62. LUBEJ, Martin. Sinteza ogljikovih nanocevk v mikrostrukturirani napravi in njihova uporaba za katalitske reakcije : doktorska disertacija. Ljubljana: [M. Lubej], 2014. VII, 111 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 272771072]

**UNIVERZITETNI, VISOKOŠOLSKI ALI VIŠJEŠOLSKI UČBENIK Z RECENZIJO / REVIEWED
UNIVERSITY, HIGHER EDUCATION OR HIGHER VOCATIONAL EDUCATION TEXTBOOK**

63. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, KALČÍKOVÁ, Gabriela, ZAGORC-KONČAN, Jana. Ekotoksikološki praktikum : (navodila za izvedbo ekotoksikoloških preiskav). 1. izd. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2014. 41 str., ilustr. ISBN 978-961-6756-50-1. [COBISS.SI-ID 271009792]

KONČNO POROČILO O REZULTATIH RAZISKAV / FINAL RESEARCH REPORT

64. AMBROŽIČ, Rok, ŠEBENIK, Urška. Dinamična mehanska analiza vulkaniziranih gumenih zmesi za Siliko d.o.o. : poročilo o opravljenih analizah. Ljubljana: Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2014. 10 f., graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 1670447]
65. KRAJNC, Matjaž, ŠEBENIK, Urška, ALIČ, Branko. Poročilo o DSC analizi vzorcev pen in voskov. Ljubljana: Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za polimerno inženirstvo, organsko kemijsko tehnologijo in materiale, 2014. 4 f., graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 1793327]
66. KRAJNC, Matjaž, ŠEBENIK, Urška, ALIČ, Branko. Poročilo o DSC analizi vzorcev voskov. Ljubljana: Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za polimerno inženirstvo, organsko kemijsko tehnologijo in materiale, 2014. 9 f., graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 1536138691]
67. ŠEBENIK, Urška. Poročilo o rezultatih preiskav za Akrapovič d.d.. Ljubljana: Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za polimerno inženirstvo, organsko kemijsko tehnologijo in materiale, 2014. 20 f., graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 1536153539]

APLIKATIVNI PROJEKTI / APPLIED RESEARCH

- L4-2024 Vpliv tehnoloških postopkov na ohranjanje aromatskega potenciala v tehnologiji pridelave vin / *Influence of Process Technology on Aromatic Potential in Wine Fermentation*
Nosilec / *Principal Researcher*: M. Berovič
Sofinancer / *Co-sponsored by*: Perutnina Ptuj

RAZVOJNI PROJEKTI / INDUSTRIAL RESEARCH AND DEVELOPMENT

- Vrednotenje polimernih materialov / *Characterization of polymer materials*
Nosilec / *Principal Researcher*: M. Krajnc
Financer / *Sponsored by*: Krka d.d.

- Aplikativne raziskave na področju adsorpcije / *Applied Research in the Field of Adsorption*
Nosilec / *Principal Researcher*: A. Pavko
Financer / *Sponsored by*: Lek d.d., Ljubljana

- Raziskave procesa depolimerizacije / *Research of depolymerization processes*
Nosilec / *Principal Researcher*: I.Plazl
Sofinancer / *Co-sponsored by*: JULON d.d.

- Razvoj programskega orodja za napoved delovanja komunalne čistilne naprave / *Development of numerical tools for simulation of wastewater treatment plant operation*
Nosilec / *Principal Researcher*: Igor Plazl
Financer / *Sponsored by*: Riko d.o.o., Ljubljana

EU PROJEKTI / EU PROJECTS

Projekt 7OP / FP7 Project *BIOINTENSE - Mastering bioprocess Integration and intensification across scales*

Vodja / *Principal Researcher*: P. Žnidaršič Plazl.

Projekt 7OP / FP7 Project *EUROMBR - European network for innovative microbioreactor applications in bioprocess development*

Vodja / *Principal Researcher*: P. Žnidaršič Plazl.

BILATERALNI PROJEKTI / BILATERAL PROJECTS

Slovenija–Kitajska
Slovenia-China

Sinteza nanodelcev v mikrokanalih pod vplivom mikrovalov /
Microwave-assisted nanoparticles synthesis in microchannels

Nosilec / *Principal Researcher*: I. Plazl

Slovenija–Rusija
Slovenia-Russia

Modeliranje dinamičnih pojavov v ne-newtonskih viskoznih tekočinah /
Modelling of dynamic processes in non-newtonian viscous fluids

Nosilec / *Principal Researcher*: A. Zupančič Valant

SEPARACIJSKI IN DRUGI PROCESI ZA ZMANJŠEVANJE TOPLOGREDNIH PLINOV NA PODLAGI NAČEL TRAJNOSTNEGA RAZVOJA

SEPARATION AND OTHER PROCESSES OF GREENHOUSE GASES
MINIMIZATION ON PRICIPLES OF SUSTAINABLE DEVELOPMENT

PROGRAMSKA SKUPINA / RESEARCH PROGRAMME GROUP

P2-0346

VODJA PROGRAMSKE SKUPINE / PRINCIPAL RESEARCHER

prof. dr. Janvit Golob

SODELAVCI PROGRAMSKE SKUPINE / RESEARCH PROGRAMME STAFF

Raziskovalci / *Researchers*

prof. dr. Janvit Golob

doc. dr. Dušan Klinar

dr. Aleksandra Pivec

dr. Klavdija Rižnar

dr. Štefan Čelan

Mladi raziskovalci / *Young Researchers*

Nataša Belšak Šel

Franci Malin

Miha Narobe

Maja Šoštarič

Sodelujoče institucije / *Participating Institutions*

Znanstveno-raziskovalno središče Bistra Ptuj

POROČILO O REALIZACIJI PROGRAMA

CILJI IN OSREDNJE TEME PROGRAMA

1. Raziskovalna hipoteza in opis raziskovanja:

Raziskovalno delo je usmerjeno v podporo sonaravnemu razvoju in produktnemu inženirstvu kot osnovnemu orodju za ustvarjanje proizvodov z višjo vrednostjo, upoštevajoč nivoje dela na procesu in opremi. Na osnovi razvoja znanj na področju zajemanja ogljikovega dioksida in njegovega shranjevanja se vključujemo v vodilne raziskovalne tokove pri zaščiti človekovega okolja (disertacije, vabljeni predavanja, publikacije, prenosi znanj v gospodarstvo). Z osvajanjem novih znanj pri razvoju novih tehnologij omogočamo nastajanje novih razvojnih možnosti za uvajanje Nizkoogljične ekonomije. Nove tehnologije omogočajo uporabo biomase kot zamenjavo za fosilna goriva ter pridobivanje biooglja kot novega materiala, ki omogoča shranjevanje ogljika na lokalnem nivoju v trajni obliki. Izdelava biooglja v soproizvodnji z energijo omogoča tudi recikliranje hranil za rastline v naravne kroge in proizvodnjo brez odpadkov (Zero Waste proizvodnja) ob hkratnem uvajanju nizkoogljične proizvodnje.

2. Ključne ugotovitve in znanstvena spoznanja:

Elektroporacija kot metoda za ločevanje lipidov. Metoda predstavlja ključno operacijo pri ločevanju z algami proizvedenih lipidov (olja) iz celičnega sistema. Ločevanje lipidov iz celičnega sistema alg je izredno zahtevno, saj se lipidi nahajajo v celicah v mikro količinah oziroma so v primeru porušanja (uničenja) celičnih struktur z njimi pomešani in se ne ločujejo. S procesom elektroporacije smo uspeli doseči učinkovito izločevanje lipidov iz reakcijske brozge. Na tej podlagi sta bili izdelani tudi dve diplomski nalogi in vzpostavljeno mednarodno sodelovanje za bodoče prijave na razpise Horizont.

Razvit je bil model procesa uplinjanja z uporabo različnih zmesi goriv (predvsem bio in alternativnih goriv kot sta lesna biomasa in ostanki plastike po recikliranju) za pridobivanje sinteznega plina. Sintezni plin po očiščenju služi kot energent za kogeneracijo elektrike in toplote. V modelu nismo upoštevali le možnosti uporabe različnih goriv (multifuel) ampak tudi hkratno izdelavo biooglja kot soproizvodnjo. Prav hkratna izdelava biooglja omogoča, da razviti model procesa podpira proizvodnjo brez odpadkov (Zero Waste princip). Takšen pristop hkrati omogoča tudi ohranjanje hranil kot so K, N in P ter njihovo vračanje v naravni krog.

Razvoj procesa in opreme za vrednotenje adsorbentov in metode za načrtovanje in dimenzioniranje adsorpcijskih naprav. Adsorbenti predstavljajo ključne materiale pri varovanju in zaščiti okolja pri onesnaževanju s topili v izpušnih zrakah. Adsorbente izdeluje slovenski proizvajalec Silkem s katerim poteka tudi sodelovanje. Granulirani adsorbenti predstavljajo proizvode z najvišjo dodano vrednostjo v tej skupini proizvodov. Pilotna naprava za testiranje in vrednotenje predstavlja ključno napravo pri razvoju novih proizvodov – adsorbentov. Testiranje novo razvitih adsorbentov v razmerah simuliranja realnih pogojev delovanja omogoča merjenje lastnosti razvitih adsorbentov, primerjavo s konkurenčnimi izdelki in opredelitev potrebnih procesnih parametrov za načrtovanje realnih industrijskih naprav in procesov.

3. Rezultati in učinki raziskovalnega programa ter njihova uporaba:

Bazni inženiring kot podlaga izvedbenemu inženiringu na področju čiščenja zraka iz obratov kemijske in farmacevtske proizvodnje. Bazni inženiring je bil izdelan na podlagi izmerjenih podatkov iz lastno razvite naprave za testiranje adsorbentov v realnih okoliščinah (dinamično testiranje vhodnih koncentracij topil v odpadnem zraku). Na podlagi baznega inženiringa je naročnik (farmacevtska industrija) izdelala industrijsko napravo.

Izdelali smo bazni inženiring za izdelavo mikro naprave (100 kW vhod) za uplinjanje različnih vrst biomase z možnostjo uporabe goriv različnih granulacij. Uplinjevalnik skupaj s plinskim motorjem in generatorjem proizvaja elektriko in toploto – kogeneracija ter biooglje kot soproizvodnja. Inovativnost rešitve je predvsem v možnosti uporabe različnih goriv na vhodu in v možnostih soproizvodnje različnih produktov ter njihovega spreminjanja glede na ekonomiko. Na podlagi baznega inženiringa je podjetje Pišek Vitli-Krpan d.o.o. izdelalo prototipno napravo in jo pričelo v letu 2014 testirati.

4. Sodelovanje s tujimi partnerji:

Sodelovanje s tujimi partnerji poteka intenzivno preko oblikovanja konzorcijev za skupne prijave na EU projekte. Tako je nastal konzorcij za delo na Biooglju kot ključnem materialu za razvoj nizko ogljičnih tehnologij v lokalnih okoljih. Konzorcij Univerza Bologna - I, Univerza Udine - I, Ostrava Tehnična Univerza-CZ, Inštitut za Keramiko Opole Polska in Alpska regija UNCEM Torino. Konzorcij je uspešno zaključil projekt na biooglju in se pripravlja na nove razpise v letu 2015.

Pri razvoju mikro naprav za uplinjanje smo uspešno vzpostavili konzorcij majhno podjetje (SME) v Sloveniji, Italiji in Inženiring podjetje v Franciji za prijavo na razpis Horizont iniciativa SME.

OPIS REALIZACIJE RAZISKOVALNEGA PROGRAMA V 2014

1. Uplinjanje biomase in plastike: študija kinetike pirolize, poskusi na 100 kw dvojno zvrtničeni plasti pilotnega obrata in razvoj termodinamičnega ravnotežnega modela in ravnovesij

Izvedena je bila termo-gravimetrična analiza (TGA) izhlapevanja reakcijske kinetike za 50 mas.% mešanico plastike (PE) in biomase (leseni peleti) kot tudi za 100 mas.% plastiko z napovedjo razkroja pri 850-900°C, z uporabo metode iso-pretvorbenega modela. Za zmesi je dogovor o zadrževalnem času, dvojno zvrtničene plasti (DFB) reaktorja, znan tudi kot kontinuirni mešalni reaktor (CSTR), pridobljen pri velikih konverzijah. Enkratno uplinjanje plastike in njegovo ko-uplinjanje biomase je bilo izvedeno v DFB pilotnem obratu z uporabo olivina kot heterogenega katalizatorja in prenosa toplote. Ugotovljeno je bilo, da je ko-uplinjanje pripeljalo do uspešne termične pretvorbe plastike v nasprotju z enojnim uplinjanjem. Neznane stopnje pretokov v DFB uplinjevalni enoti so bile določene z uporabo nelinearne regresije na področju energije in masne bilance, ne samo za zgorevanja goriva, zraka, pare, surovine, temveč tudi za izhodne snovi kot so oglje, katran, para in druge komponente. Premik ravnotežja voda-plin in zahteve za sintezo metanola so bile vključene v uplinjevalni model, ki temelji na meritvah.

2. Testiranje prototipa pulznega generatorja za pretočni sistem in njegovo uporabo za inaktivacijo E.coli ter ekstrakcijo lipidov mikroalg

Med drugimi aplikacijami se elektroporacija uporablja za inaktivacijo patogenov in ekstrakcijo snovi iz mikroorganizmov v tekočinah, kjer so sistemi pretoka obsežni. Namen našega dela je bil, preizkusiti impulzni generator, ki omogoča neprekinjeno impulzno električno polje (PEF), obravnavano za inaktivacijo E.coli in ekstrakcijo lipidov mikroalg.

V neprekinjenem toku PEF sistema je bila stopnja pretoka nastavljena tako, da je vsaka baterijska celica prejela določeno število impulzov. Rezultati zdravljenja s PEF tokom so pokazali, da število impulzov vpliva na inaktivacijo E.coli v enakem obsegu kot v predhodno opisanem »kivnetnem sistemu«, to je, serijskem sistemu. Sistem neprekinjenega PEF toka je bil tudi preizkušen in ocenjen za ekstrakcijo lipidov iz mikroalg *Chlorella vulgaris*. V kontrolnih poskusih so bili lipidi pridobljeni s pomočjo koncentrirane biomase, posušene in celično pretrgane z uporabo pritiska ali organskega topila. V nasprotju s tem, elektroporacija zaobide vse faze, saj so celice neposredno pretrgane v brozgo in olje, ki je na površini, posneto. Začetni poskusi so pokazali 50% izkoristek olja z uporabo sistema pretoka elektroporacije, v primerjavi z ekstrakcijo z organskim topilom.

3. Uporaba spinskega nanosa pri izdelavi optičnih senzorjev za kisik

Izdelani so bili tankoslojni optični kisikovi senzorji s pomočjo spin coating tehnike. Pri tem so bile uporabljene različne koncentracije tris (4,7-difenil-1,10-fenantrolin) rutenij(II) diklorid kompleksa (RuDPP), različna topila, polimerni nosilci, silikoni in spin coating parametri. Naš namen je bil pripraviti najbolj homogen nanos senzorske raztopine in tako dobiti najbolj optimalne lastnosti senzorjev. Preučevali smo tudi vpliv hitrosti in čas vrtenja spin coaterja na odziv senzorjev, saj so bili senzorji po izdelavi izpostavljeni različnim koncentracijam kisika v območju od 0 do 100%. Pri našem delu smo najboljši nanos senzorske raztopine dobili z nanosom 150 µL senzorske raztopine v kloroformu uporabo silikona E4 z nanosom na folijo Dataline. Pri tem smo uporabili tri različne stopnje vrtenja: 3 s pri 750/700 obr, 3 s pri 300 obr in 4 s pri 150 obr. Prednost uporabe spin coatinga je, da je ta tehnika zelo hitra, enostavna za uporabo in je primerna za nanos majhnih volumnov. Omogoča izdelavo več serij senzorjev z različnimi lastnostmi ob minimalni porabi reagentov. Nanos senzorske raztopine na polimernem nosilcu v radialni smeri, je v veliki meri odvisen od eksperimentalnih pogojev: volumna nanosa, hitrosti vrtenja, viskoznosti in hlapnosti topil. Spin coating metoda se je izkazala kot učinkovita metoda za nanos senzorskih raztopin v laboratorijskem merilu, vendar je po celotni senzorski površini težko pripraviti popolnoma homogen nanos, zato je za pripravo večjih količin identičnih senzorjev, po optimiranju vseh ostalih eksperimentalnih pogojev, smiselno preučiti še alternativne metode nanašanja.

ZNANSTVENI DOSEŽKI

1. Prispevek k nizko-ogljčni družbi s trajnostnim razvojem

Prispevek obravnava raziskovalno aktivnosti na področju razvoja potencialnih tehnoloških procesov za zniževanje emisij ogljikovega dioksida oziroma njegovo zajemanje in nadaljno predelavo v gorivo.

2. Doseganje učinkovitosti rabe virov s kombiniranjem snovne in energetske izrabe

V prispevku obravnavamo možnosti uporabe sortiranih odpadkov ali njihovih ostankov za razvoj novih proizvodov in SPTE. Razvoj procesa pirolize s katalizatorjem v tekoči fazi omogoča razvoj novih vrst proizvodov iz odpadnih materialov. Obravnavana sta dva primera razvoja novih materialov za zamenjavo fosilnega bitumna in proizvodnja biooglja ob hkratni uporabi ostalega dela odpadka za energetske rabo.

RESEARCH PROGRAMME REPORT

PROGRAMME GOALS AND RESEARCH TOPICS

1. The research hypothesis and a description of research:

The research work is focused on supporting sustainable development and product engineering as a basic tool for creating products with higher value, taking into account the levels of work in process and equipment. On the basis of the development of the knowledge in the field of carbon capture and storage times are included in the leading research activities in the protection of the human environment (dissertation, invited lectures, publications transfer of knowledge in the economy). With the acquisition of a new knowledge in the development of new technologies enable the creation of new development opportunities for the introduction of Low-Carbon Economy. New technologies enable the use of biomass as a replacement for fossil fuels and getting biochar as a new material that allows carbon storage at the local level in a permanent form. Making the biochar cogeneration power also allows the recycling of nutrients for plants in natural cycles and produce no waste (Zero Waste production), while the introduction of low-carbon production.

2. Key findings and scientific knowledge:

Electroporation as a method for separating lipids. The method is a key operation in separating algae produced lipids (oils) from a cellular system. The separation of lipid from a cellular system the algae is extremely difficult, because of the lipids found in the cells of micro-quantities or in the case of collapse (destruction) of cell structures of them are mixed and not separated. The process of electroporation, we managed to achieve effective separation of lipids from the reaction broth. On this basis, were prepared two thesis and established international cooperation for future tenders of Horizon.

The gasification model was developed to process using a mixture of different fuels (mainly bio and alternative fuels such as biomass and scrap plastic recycling) for the production of synthesis gas. The synthesis gas after cleaning serves as the energy source for cogeneration of electricity and heat. In the model, we consider only the possibility of using different fuels (Multi fuel) but also the simultaneous production of biochar as a co-generation. It allows the simultaneous production of biochar, to develop a process model supports production without waste (Zero Waste principle). This approach also allows for the preservation of nutrients such as K, N and P and returning them to the natural circle.

The development process and equipment for the evaluation of adsorbents and methods for planning and design of adsorption chillers. Adsorbents are the key materials in conservation and protection of the environment pollution in the solvents in the air exhaust. Adsorbents manufactured Slovenian

manufacturer Silkem which is also cooperation. Granular adsorbents represent products with the highest added value in this product group. Pilot plant for testing and evaluation is a key device in the development of new products - adsorbents. Testing of newly developed adsorbent in a situation to simulate realistic conditions of operation allows the measurement properties of the developed adsorbents, comparison of competing products and the definition of the necessary process parameters for the design of real industrial processes and devices.

3. Results and impacts of the research program and their use:

Basic engineering as a means of implementing engineering in the field of air purification installations, chemical and pharmaceutical manufacturing. Basic engineering has been designed on the basis of measured data from developed its own test facilities adsorbents in the real world (dynamic testing of incoming solvent concentration in the exhaust air). Based on the basic engineering contracting authority (pharmaceutical industry) have developed an industrial device.

We have basic engineering for the production of micro devices (100 kW input) for the gasification of various types of biomass fuels the possibility of using various grits. Gasifier along with the gas engine and the generator produces electricity and heat - cogeneration and biochar as cogeneration. Innovative solutions lies in the possibility of using different fuels at the entrance and in the possibilities of cogeneration different products and their changing with respect to economics. Based on the basic engineering company Pišek Winches Krpan-doo was produced a prototype device and it started in 2014 to test.

4. Cooperation with foreign partners:

Cooperation with foreign partners is carried out intensively through the formation of consortium for joint application to EU projects. This has created a consortium to work on Biochar as a key material for the development of low carbon technologies in local environments. Consortium of University of Bologna - I, University of Udine - I, Technical University of Ostrava-CZ, Institute of ceramics Opole Poland and the Alpine region UNCEM Torino. The consortium has successfully completed the project on biochar and is preparing for new tenders in 2015.

In the development of micro-gas plant was successfully established a consortium of small enterprise (SME) in Slovenia, Italy and Engineering company in France for submission of applications Horizon SME initiative.

5. The revised work program in 2014 due to the increased volume of financing of the research program:

Following the demanding environmental criteria is needed in the field of chemical engineering sciences to create new knowledge for environmentally friendly processes and products. To this end, we have expanded the research to the field of product engineering. In addition to scientific research base product such as precipitated calcium carbonate, silicate adsorbent polymeric binder and coating lipids from algae for carbon sequestration, synthesis gas after gasification biomass for high-quality implementation of the knowledge necessary to take into account all levels of work required to create and implement chemical engineering sciences to the product, process and equipment. At the product level, this means creating skills that are necessary for its commercial promotion, at the level of software to create knowledge for "Scale-up" in the specific process conditions. From solutions for special cases we will create a need for a general cross-section of skills and methods as necessary to enforce chemical engineering sciences in the field of product engineering.

THE ACHIEVED RESEARCH RESULTS IN 2014

1. Co-gasification of biomass and plastics pyrolysis: kinetics studies, experiments on 100 kw dual fluidized bed pilot plant and development of thermodynamic equilibrium model and balances

Thermo-gravimetric analysis (TGA) of volatilization reaction kinetics for 50 wt.% mixtures of plastics (PE) and biomass (wood pellets) as well as for 100 wt.% plastics was conducted to predict decomposition times at 850 °C and 900 °C using iso-conversional model method. For mixtures, agreement with residence time of dual fluidized bed (DFB) reactor, treated as continuous stirred-tank reactor (CSTR), was obtained at large conversions. Mono-gasification of plastics and its co-gasification with biomass were performed in DFB pilot plant, using olivine as heterogeneous catalyst and heat transfer agent. It was found that co-gasification led to successful thermochemical conversion of plastics as opposed to mono-gasification. Unknown flow rates were determined applying nonlinear regression to energy and mass balances acknowledging combustion fuel, air, steam, feedstock, but also exiting char, tar, steam and other components in DFB gasification unit. Water–gas shift equilibrium and methanol synthesis requirements were incorporated into gasification model, based on measurements.

2. Testing a prototype pulse generator for a continuous flow system and its use for E. coli inactivation and microalgae lipid extraction

Among other applications, electroporation is used for the inactivation of pathogens and extraction of substances from microorganisms in liquids where large scale flow systems are used. The aim of our work was therefore to test a pulse generator that enables continuous pulsed electric field (PEF) treatment for *Escherichia coli* inactivation and microalgae lipid extraction.

In the continuous flow PEF system, the flow rate was adjusted so that each bacterial cell received a defined number of pulses. The results of PEF flow treatment showed that the number of pulses influences *E. coli* inactivation to the same extent as in the previously described cuvette system, i.e., batch system.

The continuous flow PEF system was also tested and evaluated for lipid extraction from microalgae *Chlorella vulgaris*. In control experiments, lipids were extracted via concentration of biomass, drying and cell rupture using pressure or an organic solvent. In contrast, electroporation bypasses all stages, since cells were directly ruptured in the broth and the oil that floated on the broth was skimmed off. The initial experiments showed a 50% oil yield using the electroporation flow system in comparison to extraction with organic solvent.

3. Spin-coating for optical-oxygen-sensor preparation

Thin-film oxygen sensors were prepared using a spin-coating technique, where a tris (4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline) ruthenium(II) dichloride complex - (RuDPP) in various solvents and silicones deposited on different substrates, was used for sensor production. By changing the spin-coating set-up's parameters, the homogeneous sensor coatings and optimal sensor response to oxygen was studied - the sensors were exposed to various concentrations of oxygen within the range from 0 to 100%. During the presented study, the optimal results were obtained when 150 µL of sensor solution was applied onto Dataline foil using silicone E4 and solvent chloroform. A spin-coater at three different stages and rotation at speeds was used: 750/700 rpm for 3 s, 300 rpm for 3 s and 150 rpm for 4 s. The spin-coating technique has several benefits: fast process time, easy to use, and is an appropriate technique for low-volume operations. It allows for the modification and preparation of several sensor series using minimal reagent consumption. Disadvantage of this technique has to be mentioned namely the uneven film thickness in the radial direction. This mainly depends on the experimental set-up (volume, rotation-time and speed, solvent viscosity, and evaporation). Spin-coating as an alternative and very flexible technique for oxygen-sensors' preparation is suggested for laboratory-scale work, where the majority of experimental data could be used when new-coating methods are researched or implemented.

SCIENTIFIC ACHIEVEMENTS

1. Contribution to low carbon society through sustainable development

The contribution is concerned to research activities for development of potencial technological processes for CO₂ emission reduction and its sequestration and further conversion to fuels.

2. Resources efficiency by combination of material and energy recovery path

This paper discusses the possibility of using sorted waste or residues thereof for the development of new products and CHP. The development of a catalytic pyrolysis process in the liquid phase allows the development of new types of products from waste materials. There are discussed two examples of the development of new materials for the replacement of the fossil bitumen and production of biochar while using the rest of the waste for energy use.

DRUGI POMEMBNI ZNANSTVENI DOSEŽKI / OTHER IMPORTANT SCIENTIFIC ACHIEVEMENTS

- Somentorstvo pri doktorskih disertacijah / *Co-mentor for the doctoral dissertation* – dr. Dušan Klinar
- MELE, Jernej. Katalitično uplinjanje biomase v lebdeči plasti z visokotemperaturno vodno paro: doktorsko delo. Ljubljana: [J. Mele], 2014. XVIII, 137 str., ilustr. [COBISS.SI-ID13522715]
- ŠOŠTARIČ, Maja. Raziskave tvorbe lipidov z mikroalgo *Chlorella vulgaris* v bioreaktorju: doktorska disertacija. Ljubljana: [M. Šoštarič], 2014, XVIII, 123, [15] f., ilustr.[COBISS.SI-ID37276421]
- Organizacija strokovnega posveta »Gospodarno in odgovorno do okolja«, Moravske Toplice, 20. In 21.3.2014 in izdaja zbornika strokovnih prispevkov / *Organization expert conference »Economic and environmentally responsible,« Moravia Spa, 20 and 03/21/2014 and publish a collection of scientific articles.*
- Organizacija mednarodne okoljske konference »Krožna ekonomija za nova delovna mesta in trajnostno rast«, Ptuj, 19.11.2014 / *Organization of international environmental conference »circular economy for jobs and sustainable growth«, Ptuj, 19/11/2014*

IZVIRNI ZNANSTVENI ČLANEK / ORIGINAL SCIENTIFIC ARTICLE

1. NAROBÉ, Miha, GOLOB, Janvit, KLINAR, Dušan, FRANČETIČ, Vojmir, LIKOZAR, Blaž. Co-gasification of biomass and plastics : pyrolysis kinetics studies, experiments on 100 kW dual fluidized bed pilot plant and development of thermodynamic equilibrium model and balances. *Bioresource technology*, ISSN 0960-8524. [Print ed.], Jun. 2014, vol. 162, str. 21-29. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S096085241400426X>, doi: [10.1016/j.biortech.2014.03.121](https://doi.org/10.1016/j.biortech.2014.03.121). [COBISS.SI-ID 5457690]
2. FLISAR, Karel, HABERL MEGLIČ, Saša, MORELJ, Jernej, GOLOB, Janvit, MIKLAVČIČ, Damijan. Testing a prototype pulse generator for a continuous flow system and its use for *E. coli* inactivation and microalgae lipid extraction. V: MIKLAVČIČ, Damijan (ur.), TEISSIE, Justin (ur.), NEUMANN, Eberhard (ur.). *Bio-Electroporation*, (Bioelectrochemistry, ISSN 1567-5394, vol. 100 (Dec. 2014)). [Amsterdam]: Elsevier, 2014, str. 44-51, ilustr. <http://dx.doi.org/10.1016/j.bioelechem.2014.03.008>, doi: [10.1016/j.bioelechem.2014.03.008](https://doi.org/10.1016/j.bioelechem.2014.03.008). [COBISS.SI-ID 10505556]

PREDAVANJE NA TUJI UNIVERZI ALI RAZISKOVALNI INSTITUCIJI / LECTURES AT FOREIGN UNIVERSITIES OR RESEARCH INSTITUTIONS

3. GOLOB, Janvit. *[Contribution to low carbon society through sustainable development : Virginia Tech, College of Engineering, August 2014]*. [2014]. [COBISS.SI-ID 1536015811]

MENTOR PRI DOKTORSKIH DISERTACIJAH / SUPERVISOR FOR DOCTORAL DISSERTATIONS

4. ŠOŠTARIČ, Maja. *Raziskave tvorbe lipidov z mikroalgo Chlorella vulgaris v bioreaktorju : doktorska disertacija*. Ljubljana: [M. Šoštarič], 2014. XVIII, 123, [15] f., ilustr. [COBISS.SI-ID [37276421](#)]
5. NAROBÉ, Miha. *The technology of gasification of carbon-containing raw materials : doctoral thesis*. Ljubljana: [M. Narobe], 2014. 84 f., [11] f. pril., ilustr. [COBISS.SI-ID [37364997](#)]

MENTOR PRI DIPLOMSKIH DELIH / SUPERVISOR FOR DIPLOMA THESIS

6. MEDVED, Aljaž. *Adsorpcija hlapnih organskih topil na silikatnih adsorbentih : diplomsko delo*. Ljubljana: [A. Medved], 2014. VIII, 49 f., ilustr. [COBISS.SI-ID [1536142019](#)]

ENOTE SKUPNE DEJAVNOSTI

Infrastrukturni center FKKT UL, Enota za športno vzgojo, Knjižnica fakultete, Založba fakultete in Tajništvo (dekanat) fakultete, so enote, ki izvajajo skupno dejavnost fakultete.

INFRASTRUKTURNI CENTER

Fakultete za kemijo in kemijsko tehnologijo Univerze v Ljubljani (IC FKKT UL) deluje v sklopu Mreže raziskovalnih infrastrukturnih centrov Univerze v Ljubljani (MRIC UL) in je namenjen podpori raziskovalnega dela na področju kemije, biokemije, farmacije, kemijske tehnologije in kemijskega inženirstva. Izvajanje dejavnosti zagotavlja javna agencija za raziskovalno dejavnost RS (ARRS). Oprema IC FKKT UL je na razpolago raziskovalcem, pedagoškim delavcem in študentom UL ter ostalih izobraževalnih in raziskovalnih ustanov. Dostop do meritev z opremo IC FKKT UL je omogočen tudi raziskovalcem državnih ustanov in proizvodnih organizacij, ki ustrezne opreme nimajo.

ENOTA ZA ŠPORTNO VZGOJO

skrbi za izvajanje športne vzgoje študentov fakultete

KNJIŽNICA FAKULTETE

skrbi za izposajo, nabavo in katalogizacijo strokovne literature ter za vnos biografskih in bibliografskih podatkov visokošolskih učiteljev, znanstvenih delavcev in sodelavcev fakultete v COBISS.

ZALOŽBA FAKULTETE

skrbi za izdajo učbenikov in drugega strokovnega gradiva potrebnega za izvajanje izobraževalne ter znanstveno-raziskovalne in razvojne dejavnosti.

TAJNIŠTVO (DEKANAT) FAKULTETE

skrbi za razreševanje organizacijskih in pravnih zadev, za vodenje strokovno-administrativnih opravil s študijskega, znanstveno-raziskovalnega in razvojnega, personalnega, gospodarsko-finančnega in računovodskega področja, za knjižnico, izdajanje in prodajo učbenikov ter učnih pripomočkov, za vodenje habilitacijskih postopkov, področja varnosti in zdravja pri delu, podporo mednarodnemu sodelovanju, promocijske aktivnosti, izvajanje postopkov javnega naročanja, vzdrževanje nepremičnin, vzdrževanje spletnih strani fakultete, vzdrževanje stavb in opreme, delovanje računalniške opreme fakultete in za administrativno-tehnična dela pri izvajanju nacionalnega programa visokega šolstva in nacionalnega raziskovalnega in razvojnega programa. Tajništvo sestavljajo naslednje podenote:

- pisarna (P),
- finančno računovodska služba (FRS):
- knjigovodstvo,
- finančne zadeve in obračun,
- kadrovska služba (KS),
- služba za varstvo pri delu (SVPD),
- študentski referat (ŠR):
- služba za dodiplomski in magistrski študij (SDMŠ),
- služba za doktorski študij (SDŠ),
- služba za raziskovalne zadeve in mednarodno sodelovanje (SRMS),
- služba za promocijo in javna naročila (SPJN),
- služba za vzdrževanje opreme in inventarja (SVOI):
- finomehanična delavnica,
- steklopihaška delavnica,
- računalniški center (RC) in
- služba za vzdrževanje prostorov (SVP).

KATEDRE V LETU 2014
CHAIRS IN 2014

KATEDRA ZA ANALIZNO KEMIJO CHAIR OF ANALYTICAL CHEMISTRY

PREDSTOJNIK KATEDRE / HEAD

prof. dr. Marjan Veber

SODELAVCI KATEDRE / PERSONNEL

Visokošolski učitelji / *Faculty*

izr. prof. dr. Nataša Gros
izr. prof. dr. Matevž Pompe
izr. prof. dr. Helena Prosen
prof. dr. Marjan Veber

Upokojeni visokošolski učitelji / *Retired Faculty*

Boris Pihlar
(zaslužni profesor / *Professor Emeritus*)

Visokošolski sodelavci / *Assistants*

doc. dr. Vojmir Francetič
doc. dr. Drago Kočar (do 14.12.2014)
doc. dr. Polonca Kralj
doc. dr. Irena Kralj Cigić
dr. Robert Susič
dr. Tatjana Zupančič

Znanstveni sodelavec / *Assistant*

dr. Milko Novič (do 31. 10. 2014)

Tehniki / *Technicians*

Zdenka Držaj
Jolanda Furlan
Dušan Komel
Mojca Žitko

Mladi raziskovalci *Young Researchers*

Jernej Markelj
Gregor Marolt

Mentor
Mentor

M. Pompe
M. Veber

Čas usposabljanja
Programme Duration

2012–2016
2012–2015

Oblika usposabljanja
Degree

doktorski študij / *PhD*
doktorski študij / *PhD*

IZOBRAŽEVALNA IN RAZISKOVALNA DEJAVNOST KATEDRE EDUCATIONAL AND RESEARCH ACTIVITIES

IZOBRAŽEVALNA DEJAVNOST / LECTURED COURSES

FKKT / FACULTY OF CHEMISTRY AND CHEMICAL TECHNOLOGY

Bolonjski programi 1. stopnje / *Bologna 1st Cycle Study Programmes*

Kemija / *Chemistry* – UN:

Analizna kemija I, II / *Analytical Chemistry I, II*

Praktikum iz analizne kemije / *Practical course in analytical chemistry*

Instrumentalna analiza / *Instrumental analysis*

Praktikum iz instrumentalnih metod in instrumentalne analize / *Practical course in instrumental methods and instrumental analysis*

Kemija okolja (izbirni predmet) / *Environmental Chemistry (elective course)*

Praktični pristopi v analizni kemiji (izbirni predmet) / *Practical approaches in analytical chemistry (elective course)*

Biokemija / *Biochemistry* – UN:

Instrumentalne metode analize / *Instrumental Analytical Methods*

Kemijska analiza živil (izbirni predmet) / *Chemical analysis of foodstuffs (elective course)*

Kemijsko inženirstvo / *Chemical Engineering* – UN:

Intrumentalne metode analize / *Instrumental Analytical Methods*

Praktikum iz instrumentalnih metod analize / *Practicals in Instrumental Analysis*

Tehniška varnost / *Technical Safety* – UN:

Meritve v delovnem okolju (izbirni predmet) / *Measurements in Work Environment (elective course)*

Kemijska tehnologija / *Chemical Technology* – VS:

Analizna kemija I, II, III / *Analytical Chemistry I, II, III*

Praktikum iz kemije / *General practical courses*

Kemija okolja / *Environmental Chemistry*

Zagotavljanje kakovosti v analiznem laboratoriju (izbirni predmet) / *Quality assurance in analytical laboratory (elective course)*

Predbolonjski dodiplomski programi / *Pre-Bologna Undergraduate Programmes*

Analitika in spektroskopija / *Chemical Analysis and Spectroscopy* – VS

Avtomatizirana analiza / *Automated Analysis* – UN

Instrumentalna analiza / *Instrumental Analysis* – UN

Izbrana poglavja iz kemijske analize / *Selected Topics in Analytical Chemistry* – UN

Kemija okolja / *Environmental Chemistry* – UN

Kemijska analiza živil / *Food Analysis* – UN

Kemometrija v analizni kemiji / *Chemometrics in Analytical Chemistry* – UN

Bolonjski programi 2. stopnje / *Bologna 2nd Cycle Study Programmes*

Kemija / *Chemistry* - UN:

Analizne metode za karakterizacijo materialov in bioloških sistemov / *Analytical methods for characterization of materials and biological systems*

Vode kot hidrogeološki, ekološki in analizni sistem (izbirni predmet) / *Water as a hydrogeological, ecological and analytical system (elective course)*

Kemometrija in zagotavljanje kakovosti analiznih rezultatov (izbirni predmet) / *Chemometry and quality assurance of analytical results (elective course)*

Spektrokemijska analiza (izbirni predmet) / *Spectrochemical Analysis (elective course)*
Uporabna elektrokemija (izbirni predmet) / *Applied electrochemistry (elective course)*
Karakterizacija in stabilnost materialov kulturne dediščine (izbirni predmet) / *Characterization and stability of materials of cultural heritage (elective course)*

Kemijsko izobraževanje / *Chemical education*
Analizna kemija v šoli / *Analytical Chemistry in schools*

Biokemija / *Biochemistry – UN:*
Bioanalizna kemija (izbirni predmet) / *Bioanalytical chemistry (elective course)*

Tehniška varnost / *Technical Safety:*
Instrumentalna analiza in monitoring (izbirni predmet) / *Instrumental Analysis and Monitoring (elective course)*

Bolonjski programi 3. stopnje / *Bologna 3rd Cycle Doctoral Study Programmes*

Nova področja v analizni kemiji / *New Fields in Analytical Chemistry*
Pristopi v sodobni analizni kemiji / *Approaches in Modern Analytical Chemistry*

IZVEN FKKT / EXTRAMURAL COURSES

Bolonjski programi 1. stopnje / *Bologna 1st Cycle Study Programmes*

Analizna kemija, FFA – Farmacija UN in Laboratorijska biomedicina UN / *Analytical Chemistry / Uniform Master Study Programme in Pharmacy and Undergraduate Study Programme in Laboratory Biomedicine*

Analizna kemija / *Analytical Chemistry, PEF – UN*

Kemija okolja / *Environmental Chemistry, PEF – UN*

Bolonjski programi 3. stopnje / *Bologna 3rd Cycle Doctoral Study Programmes*

Analizna kemija v kontroli okolja / *Analytical Chemistry in Environmental Control – UL Interdisciplinarni doktorski študijski program Varstvo okolja / UL Interdisciplinary Doctoral Study Programme in Environmental Protection*

Kemijski procesi v okolju / *Chemical Processes in the Environment – UL Interdisciplinarni doktorski študijski program Varstvo okolja / UL Interdisciplinary Doctoral Study Programme in Environmental Protection*

RAZISKOVALNA DEJAVNOST / RESEARCH ACTIVITIES

Temeljna raziskovalna dejavnost Katedre za analizno kemijo je razvoj novih analiznih metod in instrumentacije za analizo in karakterizacijo materialov, razvoj metod in postopkov za kontrolo kakovosti v industriji in okolju ter varnosti živil, študij procesov, ki so pomembni za stabilnost in razgradnjo zgodovinskih dokumentov in pisne kulturne dediščine ter študij reakcijskih sistemov in ravnotežij, pomembnih v analizni kemiji. Med pomembnejša raziskovalna področja spadajo kromatografija, spektroskopija, elektroanalizne tehnike, pretočna analiza, kemometrija ter avtomatizirana in robotizirana analiza.

Področja, ki jim posvečamo več pozornosti, so zlasti študij interakcij med kovinami in antibiotiki/kemoterapevtiki, pesticidi in huminskimi substancami; raziskave in opredeljevanje kemijskih zvrsti; raziskave vloge prehodnih kovin v oksidativnih medijih; karakterizacija in stabilizacija organskih materialov, zlasti polimernih; študij elektrodnih procesov in razvoj voltametričnih analiznih tehnik ter senzorjev; študij separacijskih in predkoncentracijskih postopkov (dializa, ekstrakcija na trdni fazi); analitika živil, (vina, mesa in sira); analitika sledov kovin; razvoj postopkov atomske spektroskopije (AAS, ICP-MS); atmosferska kemija ter konzervacijska kemija; uporabe kemometričnih pristopov v analizni kemiji.

Research activities of the Department of Analytical Chemistry are focused on the development of new analytical methods and instrumentation for the analysis and characterization of materials, quality control in industry and environment, food safety, as well as the study of processes important for stability and degradation of historic documents, and studies of important equilibria in analytical chemistry. The main research topics include chromatography, spectroscopy, electroanalytical techniques, flow injection analysis, chemometry, automated analysis and robotics in analytical chemistry.

Our research focuses on studying interactions between metals and antibiotics, pesticides, humic substances, speciation studies and the role of transition elements in oxidative media, characterization and stabilization of organic matter with special focus on polymers, studies of processes on electrodes and development of new voltammetric techniques and sensors, studies of separation and preconcentration procedures (dialysis, solid phase extraction), food analysis (wine products, meat products and cheese), development of methods and procedures in atomic spectroscopy (AAS ICP-MS), atmospheric chemistry and chemical studies of preservation of cultural heritage; the application of chemometric approaches in analytical chemistry.

ČLANSTVO V MEDNARODNIH UREDNIŠKIH ODBORIH / MEMBERSHIP IN INTERNATIONAL EDITORIAL BOARDS

- M. Veber, B. Pihlar, H. Prosen *Acta Chimica Slovenica*
- M. Veber, *Chemia Analytyczna*
- N. Gros, *Chemical Sensors journal*

RAZISKOVALNA OPREMA / RESEARCH EQUIPMENT

- Plinski kromatograf s kvadrupolnim masnim spektrometrom GC: Agilent Technologies 7890A, MS: Agilent Technologies 5975C / *Gas Chromatograph with Mass-Spectrometric Detection Agilent Technologies 7890A, MS Agilent Technologies 5975C*
- Sklopljeni instrument plinski kromatograf- masni spektrometer Varian mod. Saturn 2000 / *GC-MS / Gas Chromatograph with Mass-Spectrometric Detection Varian Mod. Saturn 2000 / GC – MS*
- Sklopljeni instrument plinski kromatograf- masni spektrometer Thermo Scientific Focus/ISQ/ GC-MS / *Gas Chromatograph with Mass-Spectrometric Detection Thermo Scientific Focus/ISQ/ GC – MS*
- Plinski kromatograf z ECD in FID detektorjema HP 6890 / *Gas Chromatograph with ECD and FID Detectors HP 6890*
- Robotski sistem Zymark Prelude / *Benchtop Robotic System Zymark Prelude*
- Kemiluminometer / *Chemiluminometer*
- 3 HPLC kromatografski sistemi HP 1100 / *3 HPLC- Systems (Hewlett Packard 1100 Series)*
- Potenciostat/Galvanostat M283, M273, EG&G PARC
- Atomski absorpcijski spektrometer Perkin-Elmer AAnalyst 600 / *AAS Spectrometer Perkin Elmer AAnalyst 600*
- Atomski absorpcijski spektrometer Varian AA 240
- Emisijski spektrometer z mikrovalovno plazmo Agilent Technologies 4100 MP-AES MIP/ *Micro-wave plasma emission spectrometer Agilent Technologies 4100 MP-AES MIP*
- Ionski kromatograf-Dionex DX 500 / *Ion Chromatograph*
- Kapilarna elektroforeza-Applied Biosystems, 270A-HT / *Capillary Electrophoresis*
- Klimatska komora / *Climate Chamber Vötsch 0030*
- Avtotitator Metrohm, Tinet / *Autotitrator*
- FTIR Perkin Elmer 1000
- IR spektrometer ADS Labspec 5000 / *IR Spectrometer ADS Labspec 5000*
- UV-VIS Varian Cary 50 spektrofotometer / *Spectrophotometer*
- Skupaj z NUK / *Shared with the National and University Library:*

- FT-NIR-MidIR-IR Perkin Elmer GX/ z DRIFT NIR celico / *with a DRIFT NIR Cell*
- Pretočni analizni sistem za viskozimetrijo / *Flow Analysis System for Viscometry*
- Spektrofluorimeter Varian Cary Elipse / *Spectrofluorimeter Varian Cary Elipse*

SKUPAJ S KI / SHARED WITH THE NATIONAL INSTITUTE OF CHEMISTRY

- ICP-MS-LA Agilent 7500 CE - UP-213

SKUPAJ Z UNG IN KMETIJSKIM INŠTITUTOM SLOVENIJE / SHARED WITH THE UNIVERSITY OF NOVA GORICA AND THE AGRICULTURAL INSTITUTE OF SLOVENIA

- Sklopljeni tekočinski kromatograf/ masni spektrometer / *HPLC-MS /MS (Perkin Elmer Series 200, Applied Biosystems 3200 Q Trap)*

RAZISKOVALNI PROGRAMI IN PROJEKTI / RESEARCH PROGRAMMES AND PROJECTS

RAZISKOVALNI PROGRAMI / RESEARCH PROGRAMMES

- P1-0153 Raziskave in razvoj analiznih metod in postopkov / *Research and Development of Analytical Methods and Procedures*
Vodja programa / *Principal Researcher*: M. Veber

MEDNARODNO ZNANSTVENO SODELOVANJE / INTERNATIONAL RESEARCH COOPERATION

Bilateralno mednarodno sodelovanje / *Bilateral Cooperation*

- Slovenija –Turčija Vpliv dodatka naravnih antioksidantov in antimikrobnih spojin na BI-Slovenia-Turkey podaljšanje življenjske dobe in kvalitete ribjih juh / *Investigating the of fortified fish soup with natural antioxidant and antimicrobial compounds to improve its shelf life effects*
Nosilec / *Principal Researcher*: D. Kočar

BIBLIOGRAFIJA 2014 / REFERENCES 2014

IZVIRNI ZNANSTVENI ČLANEK / ORIGINAL SCIENTIFIC ARTICLE

- AL1.** MIHELČIČ, Mohor, FRANCETIČ, Vojmir, PORI, Pavel, GRADIŠAR, Helena, OREL, Boris, KOVAČ, Janez. Electrochromic coatings made of surface modified rutile and anatase pigments : influence of trisilanol POSS dispersant on electrochromic effect. *Applied Surface Science*, ISSN 0169-4332. [Print ed.], Sep. 2014, vol. 313, str. 484-497, ilustr. http://ac.els-cdn.com/S0169433214012811/1-s2.0-S0169433214012811-main.pdf?_tid=89998c68-1ecf-11e4-89b4-00000aab0f26&acdnat=1407483924_e95b181eed1dcb3b1f0f1af2e70ccc43, doi: [10.1016/j.apsusc.2014.06.010](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2014.06.010). [COBISS.SI-ID 5528090]
- AL2.** NAROBÉ, Miha, GOLOB, Janvit, KLINAR, Dušan, FRANCETIČ, Vojmir, LIKOZAR, Blaž. Co-gasification of biomass and plastics : pyrolysis kinetics studies, experiments on 100 kW dual fluidized bed pilot plant and development of thermodynamic equilibrium model and balances. *Bioresource technology*, ISSN 0960-8524. [Print ed.], Jun. 2014, vol. 162, str. 21-29. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S096085241400426X>, doi: [10.1016/j.biortech.2014.03.121](https://doi.org/10.1016/j.biortech.2014.03.121). [COBISS.SI-ID 5457690]
- AL3.** MALEŠIČ, Jasna, ŠALA, Martin, ŠELIH, Vid Simon, KOČAR, Drago. Evaluation of a method for treatment of iron gall ink corrosion on paper. *Cellulose*, ISSN 0969-0239, Aug. 2014, vol. 21, iss. 4, str. 2925-2936, ilustr. http://download.springer.com/static/pdf/859/art%253A10.1007%252Fs10570-014-0311-6.pdf?auth66=1404025878_26357877de0848626c1d4a23ecd1ae80&ext=.pdf, doi: [10.1007/s10570-014-0311-6](https://doi.org/10.1007/s10570-014-0311-6). [COBISS.SI-ID 5504026]
- AL4.** ŠENICA, Luka, GROŠELJ, Uroš, KASUNIČ, Marta, KOČAR, Drago, STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. Synthesis of enamine-based vinylogous peptides. *European journal of organic chemistry*, ISSN 1434-193X, 2014, vol. 2014, no. 15, str. 3067-3071, ilustr. <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/ejoc.201402033/pdf>, doi: [10.1002/ejoc.201402033](https://doi.org/10.1002/ejoc.201402033). [COBISS.SI-ID 1695535]
- AL5.** KOŽELJ, Gordana, PERHARIČ, Lucija, STANOVNIK, Lovro, PROSEN, Helena. Simple validated LC-MS/MS method for the determination of atropine and scopolamine in plasma for clinical and forensic toxicological purposes. *Journal of pharmaceutical and biomedical analysis*, ISSN 0731-7085. [Print ed.], 2014, vol. 96, no. 1, str. 197-206. http://ac.els-cdn.com/S0731708514001642/1-s2.0-S0731708514001642-main.pdf?_tid=34b79050-e4c3-11e3-99a8-00000aab0f01&acdnat=1401101460_f3b956497d6b9c00d-c3f05eb1dfeea2e, doi: [10.1016/j.jpba.2014.03.037](https://doi.org/10.1016/j.jpba.2014.03.037). [COBISS.SI-ID 1712431]

- AL6.** BENIGAR, Elizabeta, DOGŠA, Iztok, STOPAR, David, JAMNIK, Andrej, KRALJ CIGIČ, Irena, TOMŠIČ, Matija. Structure and dynamics of a polysaccharide matrix : aqueous solutions of bacterial levan. *Langmuir*, ISSN 0743-7463, 2014, vol. 30, issue 14, str. 4172-4182, doi: [10.1021/la500830j](https://doi.org/10.1021/la500830j). [COBISS.SI-ID 4381304]
- AL7.** KITANOVSKI, Nives, BORSAN, Nataša, KASUNIČ, Marta, FRANČETIČ, Vojmir, POPOVIČ, Jasminka, DJERDJ, Igor, ROCQUEFELTE, Xavier, REEDIJK, Jan, KOZLEVČAR, Bojan. Chromium coordination compounds with bis(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)acetic acid or its anion. *Polyhedron*, ISSN 0277-5387. [Print ed.], 2014, vol. 70, no. 1, str. 119-124, ilustr. http://ac.els-cdn.com/S0277538713008395/1-s2.0-S0277538713008395-main.pdf?_tid=7b6e5c70-84d7-11e3-9285-00000aab0f02&acdnat=1390554857_77d47d0700054f0e87f351368_e042312, doi: [10.1016/j.poly.2013.12.029](https://doi.org/10.1016/j.poly.2013.12.029). [COBISS.SI-ID 1666351]
- AL8.** MOŽIR, Alenka, KRALJ CIGIČ, Irena, MARINŠEK, Marjan, STRLIČ, Matija. Material properties of historic parchment : a reference collection survey. *Studies in conservation*, ISSN 0039-3630, May 2014, vol. 59, no. 3, str. 136-149. <http://www.maneyonline.com/doi/abs/10.1179/2047058413Y.0000000100?journalCode=sic>, doi: [10.1179/2047058413Y.0000000100](https://doi.org/10.1179/2047058413Y.0000000100). [COBISS.SI-ID 5314586]
- AL9.** JUREČIČ, Smiljana, BENEDIK, Ljudmila, PLANINŠEK, Petra, NEČEMER, Marijan, KUMP, Peter, PIHLAR, Boris. Analysis of uranium in the insoluble residues after decomposition of soil samples by various techniques. V: Proceedings of the 19th International Conference on Radionuclide Metrology and its Applications 17-21 June 2013, Antwerp. *Proceedings*, (Applied radiation and isotopes, ISSN 0969-8043, vol. 87). Antwerp: Elsevier, 2014, vol. 87, str. 61-65, doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.apradiso.2013.11.077>. [COBISS.SI-ID 27495207]
- AL10.** KOSTEVŠEK, Nina, ŽUŽEK ROŽMAN, Kristina, PEČKO, Darja, PIHLAR, Boris, KOBE, Spomenka. A comparative study of the electrochemical deposition kinetics of iron-palladium alloys on a flat electrode and in a porous alumina template. *Electrochimica Acta*, ISSN 0013-4686. [Print ed.], 2014, vol. 125, str. 320-329, doi: [10.1016/j.electacta.2014.01.115](https://doi.org/10.1016/j.electacta.2014.01.115). [COBISS.SI-ID 27452967]
- AL11.** PECA, Dunja, PIHLAR, Boris, MILOŠEV, Ingrid. Protection of copper surface with phytic acid against corrosion in chloride solution. *Acta chimica slovenica*, ISSN 1318-0207. [Tiskana izd.], 2014, vol. 61, no. 3, str. 457-467. [COBISS.SI-ID 27970087]

PREGLEDNI ZNANSTVENI ČLANEK / REVIEW ARTICLE

- AL12.** PROSEN, Helena. Applications of liquid-phase microextraction in the sample preparation of environmental solid samples. *Molecules*, ISSN 1420-3049, 2014, vol. 19, no. 5, str. 6776-6808. <http://www.mdpi.com/1420-3049/19/5/6776>, doi: [10.3390/molecules19056776](https://doi.org/10.3390/molecules19056776). [COBISS.SI-ID 1712175]

OBJAVLJENI POVZETEK ZNANSTVENEGA PRISPEVKA NA KONFERENCI (VABLJENO PREDAVANJE) PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTION ABSTRACT (INVITED LECTURE)

- AL13.** BENEDIK, Ljudmila, ROVAN, Leja, KLEMENČIČ, Hiacinta, SMRKE, Janja, GANTAR, Ivan, PROSEN, Helena. Natural radionuclides in drinking water from the surroundings of the former Žirovski vrh uranium mine. V: 17th Radiochemical Conference, 11-16 May 2014, Mariánské Lázně, Czech Republic. BEČKOVÁ, Věra (ur.). *Booklet of abstracts*. Praha: České vysoké učení technické v Praze, 2014. <http://www.radchem.cz/babstr/Babstr14.pdf>. [COBISS.SI-ID 27714599]

UNIVERZITETNI, VISOKOŠOLSKI ALI VIŠJEŠOLSKI UČBENIK Z RECENZIJO / REVIEWED UNIVERSITY AND ACADEMIC TEXTBOOK

- AL14.** PROSEN, Helena, KRALJ CIGIČ, Irena, STRLIČ, Matija. *Praktikum iz analize kemije : za univerzitetni študij kemije*. 1. izd. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2014. 140 str., ilustr. ISBN 978-961-6756-55-6. [COBISS.SI-ID 275846912]

DRUGO UČNO GRADIVO / OTHER EDUCATIONAL MATERIAL

- AL15.** ZUPANČIČ, Tatjana. *Navodila za vaje iz instrumentalnih metod analize za študente biokemije*. Ljubljana: Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za analizo kemijo, 2014. 1 USB ključ, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 1536030403]
- AL16.** ZUPANČIČ, Tatjana. *Navodila za vaje Praktični pristopi v analizi kemiji*. Ljubljana: Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za analizo kemijo, 2014. 1 USB ključ, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 1536041667]
- AL17.** FRANČETIČ, Vojmir. *Navodila za vaje predmeta meritve v delovnem okolju : (interno gradivo)*. Ljubljana: Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za analizo kemijo, 2014. 1 USB ključ, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 1536104387]

UREDNIK / EDITORSHIP

- AL18.** *Acta chimica slovenica*. Veber, Marjan (član uredniškega odbora 1998-), Prosen, Helena (član uredniškega sveta 2012-), Boris Pihlar (član uredniškega odbora 1998-) [Tiskana izd.]. Ljubljana: Slovensko kemijsko društvo: =Slovenian Chemical Society, 1993-. ISSN 1318-0207. <http://acta.chem-soc.si/>. [COBISS.SI-ID 14086149]

KATEDRA ZA ANORGANSKO KEMIJO

CHAIR OF INORGANIC CHEMISTRY

PREDSTOJNIK KATEDRE / HEAD

prof. dr. Iztok Turel

SODELAVCI KATEDRE / PERSONNEL

Visokošolski učitelji / Faculty

prof. dr. Peter Bukovec, znanstveni svetnik (upokojen 50% / *retired 50%*)

doc. dr. Romana Cerc Korošec

izr. prof. dr. Boris Čeh

prof. dr. Alojz Demšar

prof. dr. Anton Meden

doc. dr. Barbara Modec

doc. dr. Saša Petriček

prof. dr. Iztok Turel

Visokošolski sodelavci / Assistants

dr. Nataša Čelan Korošin

doc. dr. Amalija Golobič

dr. Sabina Grabner

doc. dr. Nives Kitanovski

doc. dr. Irena Kozjek Škofic

doc. dr. Bojan Kozlevčar

doc. dr. Nina Lah

doc. dr. Franc Perdih

doc. dr. Andrej Pevec

dr. Marta Počkaj

doc. dr. Elizabeta Tratar Pirc (do 30. 9. 2014)

doc. dr. Marija Zupančič

Podoktorski raziskovalec / Postdoctoral Researcher

dr. Jakob Kljun

Tehniki / Technicians

Damjan Erčulj

Karmen Klančar

Aleš Knez

Urška Levec Jazbinšek

Jasna Mikola

Igor Ponikvar

Petra Vuković Vesel

Mladi raziskovalci <i>Young Researchers</i>	Mentor <i>Mentor</i>	Čas usposabljanja <i>Programme Duration</i>	Oblika usposabljanja <i>Degree</i>
Maja Vidmar	A. Golobič	2010–2015	doktorski študij / PhD
Sara Seršen	I. Turel	2011–2015	doktorski študij / PhD
Tanja Koleša Dobravec	A. Meden	2011–2015	doktorski študij / PhD
Miha Trdin	A. Golobič	2011–2015	doktorski študij / PhD
Katja Traven	I. Turel	2012–2016	doktorski študij / PhD
Petra Kuzman	A. Meden	2013–2017	doktorski študij / PhD
Matija Uršič	A. Meden	2014–2017	doktorski študij / PhD

IZOBRAŽEVALNA IN RAZISKOVALNA DEJAVNOST KATEDRE **EDUCATIONAL AND RESEARCH ACTIVITIES**

IZOBRAŽEVALNA DEJAVNOST / LECTURED COURSES

FKKT / FACULTY OF CHEMISTRY AND CHEMICAL TECHNOLOGY

Bolonjski programi 1. stopnje / *Bologna 1st Cycle Study Programmes*

Kemija / *Chemistry* – UN:

Splošna kemija / *General Chemistry*

Praktikum iz splošne in anorganske kemije / *Laboratory Practice in General and Inorganic Chemistry*

Anorganska kemija / *Inorganic Chemistry*

Zgradba in lastnosti trdnin / *Structure and Properties of Solids*

Spektroskopija / *Spectroscopy*

Anorganska sinteza (izbirni predmet) / *Inorganic Synthesis (elective course)*

Kemija za trajnostni razvoj (izbirni predmet) / *Chemistry for Sustainable Development (elective course)*

Anorganska kemija II (izbirni predmet) / *Inorganic Chemistry II (elective course)*

Biokemija / *Biochemistry* – UN:

Splošna kemija / *General Chemistry*

Kemijski praktikum / *Practicals in Chemistry*

Anorganska kemija / *Inorganic Chemistry*

Kemijsko inženirstvo / *Chemical Engineering* – UN:

Splošna kemija / *General Chemistry*

Anorganska kemija / *Inorganic Chemistry*

Praktikum iz splošne in anorganske kemije / *Laboratory Practice in General and Inorganic Chemistry*

Tehniška varnost / *Technical Safety* – UN:

Kemija / *Chemistry*

Gorenje in dinamika požarov / *Fire and Fire Dynamics*

Kemijska tehnologija / *Chemical Technology* – VS:

Splošna kemija I / *General Chemistry I*

Splošna kemija II / *General Chemistry II*

Anorganska kemija I / *Inorganic Chemistry I*

Anorganska kemija II / *Inorganic Chemistry II*

Praktikum iz kemije / *General Laboratory Practice*

Sintezne metode v anorganski kemiji (izbirni predmet) / *Methods of Syntheses in Inorganic Chemistry (elective course)*

Bolonjski programi 2. stopnje / *Bologna 2nd Cycle Study Programmes*

Kemija / *Chemistry* – MAG:

Anorganska kemija / *Inorganic Chemistry*

Analiza zgradbe kristalov (izbirni predmet) / *Crystal Structure Analysis (elective course)*

Koordinacijska kemija (izbirni predmet) / *Coordination Chemistry (elective course)*

Termična analiza (izbirni predmet) / *Thermal analysis (elective course)*

Sodobni anorganski materiali in katalizatorji (izbirni predmet) / *Advanced Inorganic Materials and Catalysts (elective course)*

Organokovinska in supramolekularna kemija (izbirni predmet) / *Organometallic and Supramolecular Chemistry (elective course)*

Biološko aktivne koordinacijske spojine v medicini (izbirni predmet) / *Biologically Active Coordination Compounds in Medicine (elective course)*

Biokemija / *Biochemistry* – MAG

Bioanorganska kemija / *Bioinorganic Chemistry*

Tehniška varnost / *Technical Safety* – MAG:

Požarnovarnostna analiza objektov (izbirni predmet skupine B) / *Fire Safety Analysis of Constructions (elective course)*

Kemijsko izobraževanje / *Chemical Education* – MAG:

Eksperimenti iz splošne in anorganske kemije v šoli / *Experiments in General and Inorganic Chemistry at School*

Bolonjski programi 3. stopnje / *Bologna 3rd Cycle Doctoral Study Programmes*

Izbrana poglavja iz anorganske kemije / *Selected Topics in Inorganic Chemistry*

Sodobne metode sinteze v anorganski kemiji / *Synthesis and Reactivity of Inorganic Compounds*

Sodobne difrakcijske tehnike / *Contemporary Diffraction Techniques*

IZVEN FKKT / EXTRAMURAL COURSES

Bolonjski programi 1. stopnje / *Bologna 1st Cycle Study Programmes*

Kemija / *Chemistry*, FS – UN

Kemija I, II / *Chemistry I, II*, NTF – UN

Anorganska kemija I, II / *Inorganic Chemistry I, II*, NTF – UN

Kemija / *Chemistry*, FMF – UN in VS

Osnove kemije / *Fundamentals of Chemistry*, FGG – UN

Splošna kemija / *General Chemistry*, BF – UN

Splošna in anorganska kemija / *General and Inorganic Chemistry*, FFA – UN

Splošna in organska kemija / *General and Organic Chemistry*, FFA – UN

Anorganska kemija / *Inorganic Chemistry*, NTF – VS

Osnove kemije / *Fundamentals of Chemistry*, NTF – VS

Splošna kemija / *General Chemistry*, PEF – UN

Anorganska kemija / *Inorganic Chemistry*, PEF – UN

Kemija I, II / *Chemistry I, II*, FMF – UN

RAZISKOVALNA DEJAVNOST / RESEARCH ACTIVITIES

- Sinteze kovinskih karboksilatov in njihovih derivatov ter raziskave njihove uporabe kot zaščitnih premazov za les ter načina vezave kovinskih ionov na les. Uporaba novih škorpjonatnih tipov ligandov v spojinah – modelih za aktivna mesta v encimih / *Syntheses of Metal Carboxylates and*

their Derivatives; Research into their Application as Protecting Layers for Wood, and Type of Metal Ion Bonding in Wood. Application of New Scorpionate-type Ligands in compounds – models for the enzyme active sites.

- Kemija rutenijevih spojin. Sinteza, fizikalno-kemijska in biološka karakterizacija. Praktične aplikacije (kataliza, barvila za sončne celice, itd) / *Chemistry of Ruthenium Compounds. Synthesis, Physico-Chemical and Biological Characterization. Practical Applications (catalysis, dyes for solar cells, etc)*
- Raziskave v kemiji kroma, molibdena in volframa: koordinacijske spojine in okso skupki / *Chemistry of Chromium, Molybdenum and Tungsten: Coordination Compounds and Oxo-Clusters*
- Sinteze novih brezvodnih lantanoidnih kompleksov iz oksidov / *Syntheses of Novel Anhydrous Lanthanoid Complexes from Oxides*
- Organokovinske spojine: raziskave novih organokovinskih fluoridov in njihove uporabe v katalizi / *Metal-Organic Compounds: Research into Novel Metal-Organic Fluorides and their Applications in Catalysis*
- Študij interakcij kovinskih ionov z biološko aktivnimi ligandi kinoloni in protiviralnimi nukleotidnimi analogi / *Studies of Interactions of Metal Ions with Biologically Active Quinolone Ligands and Anti-Viral Nucleotide Analogues*
- Sinteza koordinacijskih spojin vanadija in cinka, potencialnih ojačevalcev inzulina / *Synthesis of Vanadium and Zinc Coordination Compounds, Potent Insulin Enhancers.*
- Rentgenska strukturna analiza monokristalov (koordinacijske in organske spojine) ter prahov (keramika) / *X-Ray Structure Analysis of Single Crystals (Coordination and Organic Compounds) and Powders (Ceramics)*
- Sol-gel priprava organsko-anorganskih hibridov z ionsko prevodnostjo / *Sol-Gel Preparation of Organic-Inorganic Hybrids Exhibiting Ionic Conductivity*
- Koordinacijske spojine kovin prehoda in redkih zemelj s kurkuminom in njegovimi derivati / *Coordination Compounds of transition and rare-earth metals with curcumin and its derivatives*
- Vezava kovinskih ionov na biološke makromolekule, kot je npr. hialuronska kislina / *Bonding of Metal Ions on Biological Macromolecules, e.g. Hialuronic Acid*
- Kemijska stabilizacija kovin v onesnaženih tleh in trdnih odpadkih / *Chemical Stabilization of Metals in Contaminated Soil and Solid Waste*
- Anaerobna razgradnja glukoze v prisotnosti cianida / *Anaerobic Degradation of Glucose in the Presence of Cyanide*
- Študij nanosa in strukture tankih plasti / *Studies on the Deposition of Thin Films*
- Razvoj ionskih hranilnikov / *Development of Ionic Containers*
- Termična analiza / *Thermal Analysis*

POMEMBNI DOSEŽKI SODELAVCEV KATEDRE / SIGNIFICANT ACHIEVEMENTS OF THE CHAIR STAFF

ČLANSTVO V MEDNARODNIH UREDNIŠKIH ODBORIH / MEMBERSHIP IN INTERNATIONAL EDITORIAL BOARDS

- I. Turel, regionalni urednik / *Regional Editor of "Molecules", A Journal of Synthetic Organic Chemistry and Natural Product Chemistry*
- I. Turel, član uredniškega odbora / *member of review board "Frontiers in chemistry"*.
- F. Perdih, sourednik / *Associate Editor, Acta Chimica Slovenica*

DRUGO / OTHER

- I. Turel, namestnik slovenskega predstavnika COST DC CMST (Chemistry and Molecular Sciences and Technologies) / *substitute of Slovenian representative in COST DC CMST (Chemistry and Molecular Sciences and Technologies).*

- F. Perdih, predsednik Državne predmetne komisije za splošno maturo iz kemije / *Chairman of the Subject Testing Committee for the Matura Exam in Chemistry*

RAZISKOVALNA OPREMA / RESEARCH EQUIPMENT

- Modularni sistem za termično analizo - Mettler Toledo (TGA/SDTA 851, DSC 1, sklopjen z digitalnim optičnim mikroskopom Olympus Navitar, HP DSC 827 + modul za termoluminiscenco s CCD kamero PRO. sensicam) / *Modular System for Thermal Analysis - Mettler Toledo (TGA/SDTA 851, DSC 1, coupled with digital Optical Microscope Olympus Navitar, HP DSC 827 + Module for Thermoluminescence with CCD Camera PRO. sensicam)*
- Modularni sistem za termično analizo – Mettler Toledo (TGA/DSC 1), sklopjen s kvadrupolnim masnim spektrometrom Pfeiffer Vacuum Thermostar oziroma FTIR spektrometrom Nicolet 6700 + / *Modular System for Thermal Analysis Mettler Toledo (TGA/DSC 1), coupled with quadrupole Mass Spectrometer Pfeiffer Vacuum Thermostar or FTIR Spectrometer Nicolet 6700*
- Modularni sistem za termično analizo - Perkin Elmer (TGA7, DTA7) / *Modular System for Thermal Analysis - Perkin Elmer*
- HPLC kromatograf / *HPLC Chromatograph*
- Polarizacijski mikroskop / *Polarisation Microscope*
- Stereomikroskop / *Stereomicroscope*
- Difraktometer za monokristale Nonius Kappa CCD + kriostat za tekoči dušik Oxford Cryosystem 700 / *Single-Crystal Diffractometer Nonius Kappa CCD + Oxford Cryosystem 700 for Liquid Nitrogen*
- Difraktometer za monokristale Agilent SuperNova z dvema valovnima dolžinama in Atlas detektorjem + kriostat za tekoči dušik Cryojet - Oxford Instruments (lastnik CO EN-FIST) / *Single-Crystal Diffractometer Agilent SuperNova (Dual Wavelength) with Atlas detector + Liquid Nitrogen Cryojet - Oxford Instruments (property of CO EN-FIST)*
- Visoko ločljivi rentgenski praškovni difraktometer s $\text{CuK}_{\alpha 1}$ radiacijo (50% solastništvo s Kemijskim inštitutom) / *High Resolution X-ray Powder Diffractometer (Shared with the National Institute of Chemistry)*
- Spektrometer Perkin Elmer SPECTRUM 100 / *Perkin Elmer SPECTRUM 100 Spectrometer*
- ATR Specac Diamond Golden Gate z grelnim upravljalnikom WEST 6100+ / *ATR Specac Diamond Golden Gate with heated controller WEST 6100+*
- Spektrometer Perkin Elmer Lambda 750 / *Perkin Elmer Lambda 750 Spectrometer*
- Spektrometer Perkin Elmer UV/VIS/NIR Lambda 19 / *Perkin Elmer UV/VIS/NIR Lambda 19 Spectrometer*
- Fluorimeter Perkin Elmer LS 55 / *Perkin Elmer Fluorescence Spectrometer LS 55*
- Magnetna tehtnica AVTO, Sherwood Scientific / *Magnetic Susceptibility Balance AVTO, Sherwood Scientific*
- Suha komora MBraun Unilab / *Dry Box MBraun Unilab*
- Planetarni mlin PM100 Retsch / *Planetary Mill PM100 Retsch*
- OxiTop WTW / *OxiTop WTW*
- Spektrometer Varian Carry 50 z zunanjo optično sondo / *Spectrometer Varian Carry 50 with Optical Probe*
- Cevna peč Carbolite CTF 12/65/550 / *Tube Furnance Carbolite CFT 12/65/550*

SODELOVANJE V CENTRIH ODLIČNOSTI / CENTRES OF EXCELLENCE

- Center odličnosti: CO NOT – Nizkoogljične tehnologije / *Centre of Excellence: Low-Carbon Technologies*
- Center odličnosti: CO EN-FIST – Raziskave na področju zdravja, znanosti o življenju in naprednih novih materialov / *Centre of Excellence: Multidisciplinary Research in Life Sciences and Advanced New Materials*

- Center odličnosti: CO NAMASTE – Napredni nekovinski materiali in tehnologije prihodnosti / *Center of Excellence: Advanced Materials and Technologies for the Future*

RAZISKOVALNI PROGRAMI IN PROJEKTI / RESEARCH PROGRAMMES AND PROJECTS

RAZISKOVALNI PROGRAMI / RESEARCH PROGRAMMES

- P1-0175 Sinteza, struktura, lastnosti snovi in materialov / *Synthesis, Structure and Properties of Compounds and Materials*
Vodja programa / *Principal Researcher*: A. Meden
- P1-0134 Bioanorganska in bioorganska kemija / *Bioinorganic and Bioorganic Chemistry*
Vodja programa / *Principal Researcher*: P. Bukovec

TEMELJNI PROJEKTI / BASIC RESEARCH

- J1-4131 Sinteza, karakterizacija in uporaba novih rutenijevih spojin v elektrokemoterapiji tumorjev / *Synthesis, Characterisation and Use of Novel Ruthenium Compounds in Electrochemotherapy of Tumors*
Nosilec / *Principal Researcher*: I. Turel

APLIKATIVNI PROJEKTI / APPLIED RESEARCH

- L2-5484 Protikorozijske prevleke za elektronska vezja / *Anticorrosion Coatings for Electronic Circuits*
Nosilec / *Principal Researcher*: P. Bukovec
Sofinancer / *Co-sponsored by*: Iskratel d.o.o.

SODELOVANJE Z INDUSTRIJSKIMI IN DRUGIMI PARTNERJI V RS / COLLABORATION WITH INDUSTRIAL AND OTHER PARTNERS IN SLOVENIA

- **Krka d.d.**: Ekspertne storitve (letna pogodba) / *Expert Services (Annual Contract)*

PODOKTORSKI RAZISKOVALNI PROJECT / POSTDOCTORAL RESEARCH PROJECT

- Z1-6735 Nove tarče za stare učinkovine – organorutenijevi derivati hidroksikinolinov in beta-karbolinov kot potencialna protirakava sredstva / *New targets for old drugs – organoruthenium derivatives of hydroxyquinolines and beta-carbolines as potential anticancer drugs*
Vodja projekta / *Principal researcher*: J. Kljun

RAZVOJNI PROJEKTI / INDUSTRIAL RESEARCH AND DEVELOPMENT

PETEK, Urša, PRAH, Uroš, KURINČIČ, Nika, VIDRIH, Žan. *Priprava visokotemperaturnega TiO[spodaj]2 katalizatorja : končno poročilo o izvedenih projektih aktivnostih: projekt Po kreativni poti do praktičnega znanja, Javni sklad Republike Slovenije za razvoj kadrov in štipendije, za obdobje od 17. 3. 2014 do 30. 9. 2014. Ljubljana: Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2014. 9 f. [COBISS.SI-ID 1536254403], mentorja: Dejan Verhovšek, Irena Kozjek Škofic*

MEDNARODNO SODELOVANJE NA PODROČJU IZOBRAŽEVANJA / INTERNATIONAL COOPERATION IN THE FIELD OF EDUCATION

- **F. Perdih**: *Erasmus Teaching Exchange, J. J. Strossmayer University of Osijek, Osijek, Hrvaška.*

MEDNARODNO ZNANSTVENO SODELOVANJE / INTERNATIONAL RESEARCH COOPERATION

VEČSTRANSKO MEDNARODNO SODELOVANJE / MULTILATERAL COOPERATION

- COST CM1105 Functional metal complexes that bind to biomolecules.
Nosilec / *Principal Researcher*: I. Turel
- COST CM1305 *Explicit control over spin-states in technology and biochemistry (ECOSTBIO)*.
Nosilec in član upravnega odbora / *Principal Researcher and Management Committee Member*: I. Turel

BILATERALNO MEDNARODNO SODELOVANJE / BILATERAL INTERNATIONAL COOPERATION

- Slovenija-LR Kitajska
Slovenia-PR of China Novi Ru(II) kompleksi: bioaktivnost in luminescenčno zasledovanje v živih sistemih / *Novel Ru(II) complexes: bioactivity and luminescence tracking in living systems*
Nosilec / *Principal Researcher*: I. Turel
- Slovenija-Hrvaška
Slovenia-Croatia Katalitske in biološke lastnosti kovinskih kompleksov z dušikovimi ligandi / *Catalytic and biological properties of metal complexes with nitrogen ligands*
Nosilec / *Principal Researcher*: I. Turel
- Slovenija-Hrvaška
Slovenia-Croatia Nekonvencionalni multiferoiki / *Nonconventional multiferroics*
Nosilec / *Principal Researcher*: B. Kozlevčar

BIBLIOGRAFIJA 2014 / REFERENCES 2014

IZVIRNI ZNANSTVENI ČLANEK / ORIGINAL SCIENTIFIC ARTICLE

- AK1. MAZAJ, Matjaž, KASUNIČ, Marta, KAUČIČ, Venčeslav, ZABUKOVEC LOGAR, Nataša. New Mg-based 4,4'-biphenyldicarboxylate coordination polymer with layered crystal structure. *Acta chimica slovenica*, ISSN 1318-0207. [Tiskana izd.], 2014, vol. 61, no. 3, str. 432-438. <https://journals.matheo.si/index.php/ACSi/article/view/976>. [COBISS.SI-ID 37566981]
- AK2. MARINŠEK, Marjan, MEDEN, Anton, SKALAR, Tina, KASUNIČ, Marta. The novel crystal structure with Zr[sub]4(OH)[sub]4 core and hydrazine carboxylate ligands, and its thermal properties. *Acta chimica slovenica*, ISSN 1318-0207. [Tiskana izd.], 2014, vol. 61, no. 3, str. 439-446, ilustr. <https://journals.matheo.si/index.php/ACSi/article/view/977>. [COBISS.SI-ID 1781807]
- AK3. KATHIKEYAN, Ammasai, MUTHIAH, Packianathan Thomas, PERDIH, Franc. Crystal structure of 4-amino-5-fluoro-2-oxo-2,3-dihydropyrimidin-1-ium 3-hydroxypyridine-2-carboxylate. *Acta crystallographica. Section E, Structure reports online*, ISSN 1600-5368, 2014, vol. E70, no. 11, str. 328-330 (4 str. suppl.). <http://journals.iucr.org/e/issues/2014/11/00/tk5344/tk5344.pdf>, doi: 10.1107/S1600536814021898. [COBISS.SI-ID 37609477]
- AK4. HOJNIK, Nuša, KRISTL, Matjaž, GOLOBIČ, Amalija, JAGLIČIČ, Zvonko, DROFENIK, Mihael. The synthesis, structure and physical properties of lanthanide(III) complexes with nicotinic acid. *Central European Journal of Chemistry*, ISSN 1895-1066, Feb. 2014, vol. 12, iss. 2, str. 220-226, ilustr., doi: 10.2478/s11532-013-0366-5. [COBISS.SI-ID 17388822]
- AK5. TRAVEN, Katja, SINREIH, Maša, STOJAN, Jure, SERŠEN, Sara, KLJUN, Jakob, BEZENŠEK, Jure, STANOVIČ, Branko, TUREL, Iztok, LANIŠNIK-RIŽNER, Tea. Ruthenium complexes as inhibitors of the aldo-keto reductases AKR1C1-1C3. *Chemico-biological interactions*, ISSN 0009-2797. [Print ed.], 2014, vol. , iss. , str., ilustr., doi: 10.1016/j.cbi.2014.11.005. [COBISS.SI-ID 31698649]
- AK6. GOBEC, Martina, KLJUN, Jakob, SOSIČ, Izidor, MLINARIČ-RAŠČAN, Irena, URŠIČ, Matija, GOBEC, Stanislav, TUREL, Iztok. Structural characterization and biological evaluation of a clioquinol-ruthenium complex with copper- independent antileukaemic activity. *Dalton transactions*, ISSN 1477-9226, 2014, vol. 43, no. 24, str. 9045-9051, ilustr. <http://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2014/dt/c4dt00463a>, doi: 10.1039/C4DT00463A. [COBISS.SI-ID 1699631]
- AK7. TARUSHI, Alketa, TOTTA, Xanthippi, PAPADOPOULOS, Athanasios N., KLJUN, Jakob, TUREL, Iztok, KESSISSOGLU, Dimitris P., PSOMAS, George. Antioxidant activity and interaction with DNA and albumins of zinc-tolfenamate complexes. Crystal structure of [Zn(tolfenamate)[sub]2(2,2'-dipyridylketoneoxime)[sub]2]. *European Journal of Medicinal Chemistry*, ISSN 0223-5234. [Print ed.], 2014, vol. 74, no. 1, str. 187-198, ilustr. http://ac.els-cdn.com/S0223523413008076/1-s2.0-S0223523413008076-main.pdf?_tid=e789f488-8a5b-11e3-90df-00000aabb0f6c&acdnat=1391161488_bc3096c3fb36df5a756675cb60e9b1e1, doi: 10.1016/j.ejmech.2013.12.019. [COBISS.SI-ID 1674287]
- AK8. PROTOGERAKI, Catherine, ANDREADOU, Eleni G., PERDIH, Franc, TUREL, Iztok, PANTAZAKI, A. A., PSOMAS, George. Cobalt(II) complexes with the antimicrobial drug enrofloxacin : structure, antimicrobial activity, DNA- and albumin-binding. *European Journal of Medicinal Chemistry*, ISSN 0223-5234. [Print ed.], 2014, vol. 86, no. 1, str. 189-201, ilustr. http://ac.els-cdn.com/S0223523414007788/1-s2.0-S0223523414007788-main.pdf?_tid=c96533ca-3198-11e4-84af-00000aabb0f6c&acdnat=1409549481_419ea477752953400b4560c6e4d06234, doi: 10.1016/j.ejmech.2014.08.043. [COBISS.SI-ID 1764655]

- AK9.** MILENKOVIĆ, Milica, PEVEC, Andrej, TUREL, Iztok, VUJČIĆ, Miroslava, MILENKOVIĆ, M., JOVANOVIĆ, Katarina, GLIGORIJEVIĆ, Nevenka, RADULOVIĆ, Siniša, SWART, Marcel, GRUDEN-PAVLOVIĆ, M., ADAILA, Kawther, ČOBELJIĆ, B. R., ANDELKOVIĆ, Katarina. Synthesis, characterization, DFT calculation and biological activity of square-planar Ni(II) complexes with tridentate PNO ligands and monodentate pseudohalides. Part II. *European Journal of Medicinal Chemistry*, ISSN 0223-5234. [Print ed.], 2014, vol. 87, str. 284-297, ilustr. http://ac.els-cdn.com/S0223523414008824/1-s2.0-S0223523414008824-main.pdf?_tid=d6534a80-4800-11e4-8f5b-00000aab0f27&acdnat=1412013096_5d7aefb2d18a8c9dba23ffc54eb886e7, doi: 10.1016/j.ejmech.2014.06.079. [COBISS.SI-ID 1785135]
- AK10.** ŠENICA, Luka, GROŠELJ, Uroš, KASUNIĆ, Marta, KOČAR, Drago, STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. Synthesis of enamine-based vinylogous peptides. *European journal of organic chemistry*, ISSN 1434-193X, 2014, vol. 2014, no. 15, str. 3067-3071, ilustr. <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/ejoc.201402033/pdf>, doi: 10.1002/ejoc.20140203. [COBISS.SI-ID 1695535]
- AK11.** NOVAK, Ana, ŠTEFANIČ, Matej, GROŠELJ, Uroš, HRAST, Martina, KASUNIĆ, Marta, GOBEC, Stanislav, STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. A simple synthesis of polyfunctionalized 4-aminopyrazolidin-3-ones as aza-deoxa analogs of D-cycloserine. *Helvetica Chimica Acta*, ISSN 0018-019X, feb. 2014, vol. 97, no. 2, str. 245-267, ilustr. <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/hlca.201300169/pdf>, doi: 10.1002/hlca.201300169. [COBISS.SI-ID 1679919]
- AK12.** ŽEPIČ, Vesna, ŠVARA FABJAN, Erika, KASUNIĆ, Marta, CERC KOROŠEC, Romana, HANČIČ, Aleš, OVEN, Primož, SLEMENIK PERŠE, Lidija, POLJANŠEK, Ida. Morphological, thermal, and structural aspects of dried and redispersed nanofibrillated cellulose (NFC). *Holzforchung*, ISSN 0018-3830. Tiskana izdaja, 2014, vol. 68, no. 6, str. 657-667. <http://www.degruyter.com/view/j/hfsg-ahead-of-print/hf-2013-0132/hf-2013-0132.xml?format=INT>, doi: 10.1515/hf-2013-0132. [COBISS.SI-ID 2176905]
- AK13.** ZAMPAKOU, M., RIZEQ, N., TANGOULIS, Vassilis, PAPAPOULOS, Athanasios N., PERDIH, Franc, TUREL, Iztok, PSOMAS, George. Manganese(II) complexes with the non-steroidal anti-inflammatory drug tolfenamic acid : structure and biological perspectives. *Inorganic chemistry*, ISSN 0020-1669, 2014, vol. 53, no. 4, str. 2040-2052, ilustr. http://ac.els-cdn.com/S0223523413008076/1-s2.0-S0223523413008076-main.pdf?_tid=e789f488-8a5b-11e3-90df-00000aab0f6c&acdnat=1391161488_bc3096c3fb36df5a756675cb60e9b1e1, doi: 10.1021/ic4025487. [COBISS.SI-ID 1680687]
- AK14.** RILAK, Ana, BRATSOS, Ioannis, ZANGRANDO, Ennio, KLJUN, Jakob, TUREL, Iztok, BUGARČIČ, Živadina D., ALESSIO, Enzo. New water-soluble ruthenium(II) terpyridine complexes for anticancer activity : synthesis, characterization, activation kinetics, and interaction with guanine derivatives. *Inorganic chemistry*, ISSN 0020-1669, jun. 2014, vol. 53, iss. 12, str. 6113-6126, ilustr. <http://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/ic5005215>, doi: 10.1021/ic5005215. [COBISS.SI-ID 1721647]
- AK15.** KOLEŠA DOBRAVC, Tanja, LODYGA-CHRUSCINSKA, Elzbieta, SYMONOWICZ, Marzena, SANNA, Daniele, MEDEN, Anton, PERDIH, Franc, GARRIBBA, Eugenio. Synthesis and characterization of V[sup](IV)O complexes of picolinate and pyrazine derivatives. Behavior in the solid state and aqueous solution and biotransformation in the presence of blood plasma proteins. *Inorganic chemistry*, ISSN 0020-1669, 2014, vol. 53, no. 15, str. 7960-7976, ilustr. <http://pubs.acs.org/doi/pdfplus/10.1021/ic500766t>, doi: 10.1021/ic500766t. [COBISS.SI-ID 1739567]
- AK16.** JAAFAR, Mohammed, PEVEC, Andrej, AKERBOOM, Sebastian, ALSALME, Ali Mohammed, AL-FARHAN, Khalid, GHAZZALI, Mohamed, REEDIJK, Jan. Synthesis, structure and spectroscopic properties of two new cyanido-bridged trinuclear 9-atom molecular Ag-N[equivalent]C-Cu-N[equivalent]C-Au-C[equivalent]N assembly of formula [AgCuAu(CN)₃(PPh₃)₃]₂(H₂O)₂ and a dinuclear gold copper one-dimensional coordination polymer of formula [AuCu(CN)₂(PPh₃)₃]₂(H₂O)₂. *Inorganica Chimica Acta*, ISSN 0020-1693. [Print ed.], 2014, vol. 423, no. 1, str. 233-237, ilustr. http://ac.els-cdn.com/S0020169314005167/1-s2.0-S0020169314005167-main.pdf?_tid=4e00e830-3816-11e4-9489-00000aach362&acdnat=1410263098_8eefd6c40f310a258bd31c0e1fe10766, doi: 10.1016/j.ica.2014.08.017. [COBISS.SI-ID 1778735]
- AK17.** MARTINČIČ, Anže, MILAČIČ, Radmila, VIDMAR, Janja, TUREL, Iztok, KEPPLER, Bernhard K., ŠČANČAR, Janez. New method for the speciation of Ru-based chemotherapeutics in human serum by conjoint liquid chromatography on affinity and anion-exchange monolithic disks. *Journal of chromatography. A*, ISSN 0021-9673, 2014, vol. 1371, str. 168-176, doi: 10.1016/j.chroma.2014.10.054. [COBISS.SI-ID 28056103]
- AK18.** PAVŠIČ, Primož, MLADENOVIČ, Ana, MAUKO, Alenka, KRAMAR, Sabina, DOLENEC, Matej, VONČINA, Ernest, PAVŠIČ VRTAČ, Katarina, BUKOVEC, Peter. Sewage sludge / biomass ash based products for sustainable construction. *Journal of cleaner production*, ISSN 0959-6526. [Print ed.], mar. 2014, vol. 67, str. 117-124, ilustr. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0959652613008883>, doi: dx.doi.org/10.1016/j.jclepro.2013.12.034. [COBISS.SI-ID 1998695]
- AK19.** KRISTL, Matjaž, DOJER, Brina, HOJNIK, Nuša, GOLOBIČ, Amalija. Synthesis and characterization of new hydroxylammonium fluoromanganates and fluoroscandates. *Journal of fluorine chemistry*, ISSN 0022-1139. [Print ed.], Sep. 2014, vol. 166, str. 15-21, doi: 10.1016/j.jfluchem.2014.07.006. [COBISS.SI-ID 18000662]
- AK20.** HUDEJ, Rosana, MIKLAVČIČ, Damijan, ČEMAŽAR, Maja, TODROVIČ, Vesna, SERŠA, Gregor, BERGAMO, Alberta, SAVA, Gianni, MARTINČIČ, Anže, ŠČANČAR, Janez, KEPPLER, Bernhard K., TUREL, Iztok. Modulation of activity of known cytotoxic ruthenium(III) compound (KP418) with hampered transmembrane transport in electrochemotherapy in vitro and in vivo. *The journal of membrane biology*, ISSN 0022-2631, 2014, vol. 247, no. 12, str. 1239-1251, ilustr. http://download.springer.com/static/pdf/538/art%253A10.1007%252Fs00232-014-9696-2.pdf?auth66=1404038415_489b183463effef93a3f24dee43bc3ef&xt=pdf, doi: 10.1007/s00232-014-9696-2. [COBISS.SI-ID 1722671]
- AK21.** DOJER, Brina, PEVEC, Andrej, BELAJ, Ferdinand, JAGLIČIČ, Zvonko, KRISTL, Matjaž, DROFENIK, Mihael. Structural and magnetic properties of cobalt(II) complexes with pyridinecarboxamide ligands. *Journal of molecular structure*, ISSN 0022-2860. [Print ed.], 2014, vol. 1076, str. 713-718, ilustr., doi: 10.1016/j.molstruc.2014.08.031. [COBISS.SI-ID 20804616]
- AK22.** LEE, Jin Bae, KIM, Hae Jin, LUŽNIK, Janez, JELEN, Andreja, PAJIČ, Damir, WENCKA, Magdalena, JAGLIČIČ, Zvonko, MEDEN, Anton, DOLINŠEK, Janez. Synthesis and magnetic properties of hematite particles in a »nanomedusa« morphology. *Journal of nanomaterials*, ISSN 1687-4110, 2014, vol. 2014, str. 902968-1-902968-9, doi: 10.1155/2014/902968. [COBISS.SI-ID 28173095]
- AK23.** ŠPEC, Tanja, RETKO, Klara, ROPRET, Polonca, MEDEN, Anton, BERNARD, Janez. The influence of UV-Vis radiation, and oscillations of temperature and relative humidity, on malachite alteration in the presence of different organic binders and varnishes. *Journal of Raman spectroscopy*, ISSN 0377-0486, 2014, 7 str. <http://www.spectroscopynow.com/details/earlyview/10.1002/jrs.4518/The-influence-of-UVVis-radiation-and-oscillations-of-temperature-and-relative-hu.html>, doi: 10.1002/jrs.4518. [COBISS.SI-ID 513147691]
- AK24.** RETKO, Klara, ROPRET, Polonca, CERC KOROŠEC, Romana. Surface-enhanced Raman spectroscopy (SERS) analysis of organic colourants utilising a new UV-photoreduced substrate. *Journal of Raman spectroscopy*, ISSN 0377-0486, 2014, 7 str. <http://www.spectroscopynow.com/details/earlyview/10.1002/jrs.4533/Surfaceenhanced-Raman-spectroscopy-SERS-analysis-of-organic-colourants-utilising.html>, doi: 10.1002/jrs.4533. [COBISS.SI-ID 513147947]

- AK25.** GALER, Petra, CERC KOROŠEC, Romana, VIDMAR, Maja, ŠKET, Boris. Crystal structures and emission properties of the BF₃ complex 1-phenyl-3-(3,5-dimethoxyphenyl)-propane-1,3-dione : multiple chromisms, aggregation- or crystallization-induced emission, and the self-assembly effect. *Journal of the American Chemical Society*, ISSN 0002-7863, 2014, vol. 136, no. 20, str. 7383-7394, ilustr. <http://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/ja501977a>, doi: [10.1021/ja501977a](https://doi.org/10.1021/ja501977a). [COBISS.SI-ID 1718063]
- AK26.** BADEA, Mihaela, PĂTRAȘCU, Florentina, CERC KOROŠEC, Romana, BUKOVEC, Peter, RAITA, Monica, CHIFIRIUC, Mariana Carmen, MĂRUȚESCU, Luminița, BLEOTU, Coralina, VELESCU, Bruno, MARINESCU, Dana, UIVAROSI, Valentina, OLAR, Rodica. Thermal, spectral, magnetic and biologic characterization of new Ni(II), Cu(II) and Zn(II) complexes with a hexazamacrocyclic ligand bearing ketopyridine moieties. *Journal of thermal analysis and calorimetry*, ISSN 1388-6150, 2014, vol. 118, issue 2, str. 1183-1193, ilustr. http://download.springer.com/static/pdf/338/art%253A10.1007%252Fs10973-014-3857-5.pdf?auth66=1405854522_3dd4a85b694916092fbef03eda0c7c5&ext=.pdf, doi: [10.1007/s10973-014-3857-5](https://doi.org/10.1007/s10973-014-3857-5). [COBISS.SI-ID 1741615]
- AK27.** TRATAR-PIRC, Elizabeta, MODEC, Barbara, CER KERČMAR, Ksenija, BUKOVEC, Peter. Synthesis, structure, antioxidant and SOD-mimetic activity of [Cu(xanthurene)(nicotinamide)(H₂O)] complexes. *Monatshefte für Chemie*, ISSN 0026-9247, 2014, vol. 145, no. 6, str. 911-920, ilustr. http://download.springer.com/static/pdf/420/art%253A10.1007%252Fs00706-014-1168-y.pdf?auth66=1400131338_975fd7c023a9405f882560a31a20aac7&ext=.pdf, doi: [10.1007/s00706-014-1168-y](https://doi.org/10.1007/s00706-014-1168-y). [COBISS.SI-ID 1706031]
- AK28.** BALA, Ritu, KAUR, Amrinder, KASHYAP, Monika, GOLOBIČ, Amalija. Binding of p-aminobenzoate anion to bis(diethylenetriamine)cobalt(III) cation in solution and solid phases : synthesis, characterization, and x-ray structure determination of s-fac-[Co(dien)₂]Cl(p-aminobenzoate)₂[3H₂O]. *Monatshefte für Chemie*, ISSN 0026-9247, 2014, vol. 145, no. 6, str. 937-944, ilustr. http://download.springer.com/static/pdf/386/art%253A10.1007%252Fs00706-014-1170-4.pdf?auth66=1411101941_f65777ca179e027e5793dce4afa3ff9&ext=.pdf, doi: [10.1007/s00706-014-1170-4](https://doi.org/10.1007/s00706-014-1170-4). [COBISS.SI-ID 1781295]
- AK29.** KOLEŠA DOBRAVC, Tanja, MEDEN, Anton, PERDIH, Franc. Structural variations of the adducts of insulin-enhancing VO(pic)₂ compound with neutral O- and N-ligands : x-ray and DFT quantum-mechanical study. *Monatshefte für Chemie*, ISSN 0026-9247, 2014, vol. 145, no. 8, str. 1263-1275, ilustr. <http://link.springer.com/article/10.1007%2Fs00706-014-1215-8>, doi: [10.1007/s00706-014-1215-8](https://doi.org/10.1007/s00706-014-1215-8). [COBISS.SI-ID 1713711]
- AK30.** KOZJEK-ŠKOFIC, Irena, MATOH, Lev, BUKOVEC, Peter. Preparation of electro-catalytic Pt nano-particles using gaseous reducing agents. *Monatshefte für Chemie*, ISSN 0026-9247, 2014, vol. 145, issue 12, str. 1873-1878, ilustr. http://download.springer.com/static/pdf/477/art%253A10.1007%252Fs00706-014-1295-5.pdf?auth66=1410498774_b0190cc21bde3d6840e1ba711f809469&ext=.pdf, doi: [10.1007/s00706-014-1295-5](https://doi.org/10.1007/s00706-014-1295-5). [COBISS.SI-ID 1778991]
- AK31.** KLJUN, Jakob, SCOTT, Antony James, LANIŠNIK-RIZNER, Tea, KEISER, Jennifer, TUREL, Iztok. Synthesis and biological evaluation of organoruthenium complexes with azole antifungal agents. First crystal structure of a tioconazole metal complex. *Organometallics*, ISSN 0276-7333, 2014, vol. 33, iss. 7, str. 1594-1601, ilustr. <http://pubs.acs.org/doi/ipdf/10.1021/om401096y>, doi: [10.1021/om401096y](https://doi.org/10.1021/om401096y). [COBISS.SI-ID 1695791]
- AK32.** BOLJE, Aljoša, HOHLOCH, Stephan, URANKAR, Damijana, PEVEC, Andrej, GAZVODA, Martin, SARKAR, Biprajit, KOŠMRLJ, Janez. Exploring the scope of pyridyl- and picolyl-functionalized 1,2,3-triazol-5-ylidenes in bidentate coordination to ruthenium(II) cymene chloride complexes. *Organometallics*, ISSN 0276-7333, 2014, vol. 33, no. 10, str. 2588-2598, ilustr. <http://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/om500287t>, doi: [10.1021/om500287t](https://doi.org/10.1021/om500287t). [COBISS.SI-ID 1708335]
- AK33.** COBELJIC, B. R., PEVEC, Andrej, TUREL, Iztok, SPASOJEVIC, Vojislav, MILČIĆ, Miloš, MITIĆ, D., SLADIĆ, Dušan M., ANĐELKOVIĆ, Katarina. Analysis of the structures of the Cu(I) and Cu(II) complexes with 3-acetylpyridine and thiocyanate. *Polyhedron*, ISSN 0277-5387. [Print ed.], 2014, vol. 69, no. 1, str. 77-83, ilustr. http://ac.els-cdn.com/S0277538713007869/1-s2.0-S0277538713007869-main.pdf?tid=3141f698-67ac-11e3-b563-00000aacb35d&acdnat=1387347681_b59bb761de364ae5740b7012948a2a64, doi: [10.1016/j.poly.2013.11.027](https://doi.org/10.1016/j.poly.2013.11.027). [COBISS.SI-ID 1661487]
- AK34.** KITANOVSKI, Nives, BORSAN, Nataša, KASUNIĆ, Marta, FRANCETIĆ, Vojmir, POPOVIĆ, Jasminka, DJERDJI, Igor, ROQUEFELTE, Xavier, REEDIJK, Jan, KOZLEVČAR, Bojan. Chromium coordination compounds with bis(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)acetic acid or its anion. *Polyhedron*, ISSN 0277-5387. [Print ed.], 2014, vol. 70, no. 1, str. 119-124, ilustr. http://ac.els-cdn.com/S0277538713008395/1-s2.0-S0277538713008395-main.pdf?tid=7b6c5c70-84d7-11e3-9285-00000aab0f02&acdnat=1390554857_77d47d0700054f0e87f351368e042312, doi: [10.1016/j.poly.2013.12.029](https://doi.org/10.1016/j.poly.2013.12.029). [COBISS.SI-ID 1666351]
- AK35.** VASKOVÁ, Zuzana, KITANOVSKI, Nives, JAGLIČIĆ, Zvonko, STRAUCH, Peter, RŮŽICKOVÁ, Zdeňka, VALIGURA, Dušan, KOMAN, Marian, KOZLEVČAR, Bojan, MONCOL, Jan. Synthesis and magneto-structural characterization of copper(II) nitrobenzoate complexes containing nicotinamide or methylnicotinamide ligands. *Polyhedron*, ISSN 0277-5387. [Print ed.], 2014, vol. 81, no. 1, str. 555-563, ilustr. http://ac.els-cdn.com/S0277538714004872/1-s2.0-S0277538714004872-main.pdf?tid=98921f96-2cdf-11e4-957f-00000aab0f02&acdnat=1409030137_ef9bd989d2ab2621d3a032c4458ed607, doi: [10.1016/j.poly.2014.07.017](https://doi.org/10.1016/j.poly.2014.07.017). [COBISS.SI-ID 1741103]
- AK36.** JUG, Aleš, PETELIN, Stojan, BUKOVEC, Peter. Probability of fire brigade suppression success in an underground car park fire. *Sigurnost*, ISSN 0350-6886, 2014, vol. 56, no. 1, str. 1-10, ilustr. [COBISS.SI-ID 1700399]
- AK37.** PERDIH, Franc. Benzoylacetate and its fluorinated derivatives as ligands for Co(II) complexes : the effect of the presence of fluorine atoms on the crystal packing. *Structural chemistry*, ISSN 1040-0400, 2014, vol. 25, no. 3, str. 809-819, ilustr. http://download.springer.com/static/pdf/536/art%253A10.1007%252Fs11224-013-0344-8.pdf?auth66=1397634474_2e579c03e7f7a800065630961fbf0f55&ext=.pdf, doi: [10.1007/s11224-013-0344-8](https://doi.org/10.1007/s11224-013-0344-8). [COBISS.SI-ID 1624111]
- AK38.** REJC, Luka, FABRIS, Jan, ADROVIĆ, Armin, KASUNIĆ, Marta, PETRIČ, Andrej. Elongation of the molecular probe DDNP with phenylethynylidene or phenyldiazonylidene spacers. *Tetrahedron letters*, ISSN 0040-4039. [Print ed.], 2014, vol. 55, no. 6, str. 1218-1221, ilustr. http://ac.els-cdn.com/S0040403914000070/1-s2.0-S0040403914000070-main.pdf?tid=1959c042-b653-11e3-8e35-00000aab0f26&acdnat=1395995557_c993c67e8e206b669ca63ff36d2f7c60, doi: [10.1016/j.tetlet.2014.01.002](https://doi.org/10.1016/j.tetlet.2014.01.002). [COBISS.SI-ID 1666863]
- AK39.** DREV, Miha, GROŠELJ, Uroš, MEVEC, Špela, PUŠAVEC, Eva, ŠTREKELJ, Janja, GOLOBIČ, Amalija, DAHMAN, Georg, STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. Regioselective synthesis of 1- and 4-substituted 7-oxopyrazolo[1,5-a]pyrimidine-3-carboxamides. *Tetrahedron*, ISSN 0040-4020. [Print ed.], 2014, vol. 70, no. 44, str. 8267-8279, ilustr. http://ac.els-cdn.com/S004040201401309X/1-s2.0-S004040201401309X-main.pdf?tid=bfe41b68-64b5-11e4-9cf0-00000aab0f6c&acdnat=1415169430_7438909113baa2fcbaa54220f65c0c68, doi: [10.1016/j.tet.2014.09.020](https://doi.org/10.1016/j.tet.2014.09.020). [COBISS.SI-ID 1781039]

- AK40.** GROŠELJ, Uroš, PUŠAVEC, Eva, GOLOBIČ, Amalija, DAHMANN, Georg, STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. Synthesis of 1, 5-disubstituted-4-oxo-4,5-dihydro-1H-pyrazolo[4,3-c]pyridine-7- carboxamides. *Tetrahedron*, ISSN 0040-4020. [Print ed.], str. 1-42, ilustr. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0040402014016068#>, doi: 10.1016/j.tet.2014.11.034. [COBISS.SI-ID 1536061891]
- AK41.** PREK, Benjamin, BEZENŠEK, Jure, KASUNIČ, Marta, GROŠELJ, Uroš, SVETE, Jurij, STANOVNIK, Branko. Reactions of enamines and related compounds with N,N-dimethylacetamide dimethyl acetal. A simple one-pot metal-free synthesis of polysubstituted benzene derivatives. *Tetrahedron*, ISSN 0040-4020. [Print ed.], 2014, vol. 70, no. 14, str. 2359-2369, ilustr. http://ac.els-cdn.com/S0040402014002099/1-s2.0-S0040402014002099-main.pdf?_tid=606859b8-9eb0-11e3-8d4b-00000aacb35f&acdnat=1393396792_c96484aad363a274c360ebe1d7d21082, doi: 10.1016/j.tet.2014.02.039. [COBISS.SI-ID 1681711]
- AK42.** ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, TRATAR-PIRC, Elizabeta, BUKOVEC, Peter, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. Evaluation of biotreatability of ionic liquids in aerobic and anaerobic conditions. *Water science and technology*, ISSN 0273-1223, 2014, vol. 70, no. 4, str. 698-704, ilustr., doi: 10.2166/wst.2014.283. [COBISS.SI-ID 1751855]
- AK43.** BEZENŠEK, Jure, PREK, Benjamin, GROŠELJ, Uroš, GOLOBIČ, Amalija, STARE, Katarina, SVETE, Jurij, KANTLEHNER, Willi, MAAS, Gerhard, STANOVNIK, Branko. A simple metal-free synthesis of 2,4,5-trisubstituted pyridines and pyridine N-oxides by [2+2] cycloaddition of enamines to propyne iminium salts. *Zeitschrift für Naturforschung. B. A journal of chemical sciences*, ISSN 0932-0776, 2014, vol. 69b, no. 5, str. 554-566, ilustr. <http://www.znaturforsch.com/ab/v69b/69b0554.htm>, doi: 10.5560/ZNB.2014-4021. [COBISS.SI-ID 1714479]
- AK44.** LAH, Nina, CLÉRAC, Rodolphe. Cu(II) oxalate coordination polymer based on 3-pyridinepropanol bridging ligand : synthesis, characterization and magnetic properties. *Inorganic chemistry communications*, ISSN 1387-7003. [Print ed.], 2014, vol. 41, no. 1, str. 62-64, ilustr. http://ac.els-cdn.com/S1387700313005601/1-s2.0-S1387700313005601-main.pdf?_tid=d4128240-84c9-11e3-b7b2-00000aab0f01&acdnat=1390548993_fac9622d565c2551d473d773a22fe31d, doi: 10.1016/j.inoche.2013.12.006. [COBISS.SI-ID 1672239]
- AK45.** EGART, Mateja, ILIĆ, Ilija, JANKOVIĆ, Biljana, LAH, Nina, SRČIČ, Stanko. Compaction properties of crystalline pharmaceutical ingredients according to the walker model and nanomechanical attributes. *International journal of pharmaceutics*, ISSN 0378-5173. [Print ed.], 2014, vol. 472, iss. 1-2, str. 347-355, ilustr. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378517314004761>, http://ac.els-cdn.com/S0378517314004761/1-s2.0-S0378517314004761-main.pdf?_tid=be247f66-0024-11e4-88c9-00000aacb362&acdnat=1404112034_31786838769d5301ece0a615126e3ac3, doi: 10.1016/j.ijpharm.2014.06.047. [COBISS.SI-ID 3679089]

PREGLJEDNI ZNANSTVENI ČLANEK / REVIEW ARTICLE

- AK46.** VERDEL, Nada, BUKOVEC, Peter. Possible further evidence for the thixotropic phenomenon of water. *Entropy*, ISSN 1099-4300, 2014, vol. 16, no. 4, str. 2146-2160. <http://www.mdpi.com/1099-4300/16/4/2146>, doi: 10.3390/e16042146. [COBISS.SI-ID 1703215]

OBJAVLJENI ZNANSTVENI PRISPEVEK NA KONFERENCI / PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTION

- AK47.** KOZJEK-ŠKOFIC, Irena. Elektrokatalitske lastnosti paladija in platine : [predavanje]. V: Slovenski kemijski dnevi 2014, Maribor, 11.-12. september 2014. KRAVANJA, Zdravko (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.), NOVAK-PINTARIČ, Zorka (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2014, Maribor, 11. - 12. september 2014*. Maribor: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2014, str. [1-5], ilustr. [COBISS.SI-ID 1785903]
- AK48.** KRISTL, Matjaž, DOJER, Brina, PEVEC, Andrej. Bakrov(II) kompleks z 2-aminobenzotiazolom - strukturne in termične lastnosti = Copper(II) complex with 2-aminobenzothiazole - structural and thermal properties. V: Slovenski kemijski dnevi 2014, Maribor, 11.-12. september 2014. KRAVANJA, Zdravko (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.), NOVAK-PINTARIČ, Zorka (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2014, Maribor, 11. - 12. september 2014*. Maribor: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2014, str. 1-6, ilustr. [COBISS.SI-ID 20797704]
- AK49.** PETEK, Urša, KOZJEK-ŠKOFIC, Irena. Priprava električno prevodnih tankih plasti zlata iz kolooidov : [predavanje]. V: Slovenski kemijski dnevi 2014, Maribor, 11.-12. september 2014. KRAVANJA, Zdravko (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.), NOVAK-PINTARIČ, Zorka (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2014, Maribor, 11. - 12. september 2014*. Maribor: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2014, str. [1-7], ilustr. [COBISS.SI-ID 1786159]
- AK50.** TRATAR-PIRC, Elizabeta, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Anaerobna razgradljivost škrobne plastike : [predavanje]. V: Slovenski kemijski dnevi 2014, Maribor, 11.-12. september 2014. KRAVANJA, Zdravko (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.), NOVAK-PINTARIČ, Zorka (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2014, Maribor, 11. - 12. september 2014*. Maribor: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2014, str. [1-6], ilustr. [COBISS.SI-ID 1784367]

OBJAVLJENI POVZETEK ZNANSTVENEGA PRISPEVKA NA KONFERENCI (VABLJENO PREDAVANJE) PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTION ABSTRACT (INVITED LECTURE)

- AK51.** KOKALJ, Anton, DOMINKO, Robert, MALI, Gregor, MEDEN, Anton, GABERŠČEK, Miran, JAMNIK, Janez. Designing $\text{Li}_{2-x}\text{Mn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{SiO}_4$ as a potential Li-battery cathode material. V: 1st Workshop on Materials Science for Energy Related Applications, [and] 12th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry - Physical Chemistry 2014, September 26-27, 2014, Belgrade, Serbia 970. *Book of abstracts*. Belgrade: Faculty of Physical Chemistry, 2014, str. 10. [COBISS.SI-ID 28026151]
- AK52.** ŠKRLEP, Luka, KRAMAR, Sabina, BAJUK, Silvija, ŽAGAR, Katarina, CERC KOROŠEC, Romana, BIZJAK, Matjaž, ŽUPANEK, Bernarda, KIKELJ, Martina L., SEVER ŠKAPIN, Andrijana. Evaluation of transparent coatings efficiency for the protection of the ancient in situ mosaics exposed to the outdoor environment. V: *Mosaic : archaeometry, technology and conservation : workshop, CNR-Institute of Science and Technology for Ceramics, 20th - 22th November, Faenza*. 7th ed. Faenza: CNR, 2014, str. 13-14. [COBISS.SI-ID 2076007]

UNIVERZITETNI, VISOKOŠOLSKI ALI VIŠJEŠOLSKI UČBENIK Z RECENZIJO / REVIEWED UNIVERSITY AND ACADEMIC TEXTBOOK

- AK53.** OBREZA, Aleš, MRAVLJAK, Janez, PERDIH, Franc. *Farmaceutvska kemija I : univerzitetni učbenik*. Ljubljana: Fakulteta za farmacijo, 2014. 235 str., ilustr. ISBN 978-961-6378-58-1. [COBISS.SI-ID 273290752]
- AK54.** PETRIČEK, Saša, PERDIH, Franc, DEMŠAR, Alojz. *Vaje iz anorganske kemije za visokošolski strokovni študij kemijske tehnologije*. 3. dopolnjena izd. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2014. 120 str., ilustr. ISBN 978-961-6756-19-8. [COBISS.SI-ID 275969536]

SREDNJEŠOLSKI, OSNOVNOŠOLSKI ALI DRUGI UČBENIK Z RECENZIJO / SECONDARY AND PRIMARY SCHOOL TEXTBOOK OR OTHER TEXTBOOK

- AK55.** KOŠMRLJ, Berta, MOZER, Alenka, PETRIČEK, Saša, SMRDU, Andrej, ZMAZEK, Boris, WISSIAK GRM, Katarina Senta, KRAFOGEL, Bernarda (urednik), TRKOV, Joži (urednik). *Kemija, Zbirka maturitetnih nalog z rešitvami 2005-2010*, (Maturitetni izpiti). 3. ponatis. Ljubljana: Državni izpitni center, 2011 [i. e.] 2014. 297 str., ilustr. ISBN 978-961-6322-96-6. [COBISS.SI-ID 274367744]

DRUGO UČNO GRADIVO / OTHER EDUCATIONAL MATERIAL

- AK56.** GLAŽAR, Saša A., GRAUNAR, Mojca, MODEC, Barbara, ŠKET, Barbara, ŠKET, Boris. *Kemija danes : učenje z nalogami : zbirka nalog za 8. in 9. razred devetletne osnovne šole*, (Raziskovalec 8), (Raziskovalec 9). 1. izd. Ljubljana: DZS, 2014. 184 str., ilustr. ISBN 978-86-341-3645-6. [COBISS.SI-ID 275618048]
- AK57.** ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, KALČIKOVÁ, Gabriela, ZUPANČIČ, Marija. *Praktikum s področja okoljske kemije in tehnologije : (skripta za vaje za interno uporabo)*. 1. izd. Ljubljana: Univ. v Ljubljani, Fak. za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za kemijsko, biokemijsko in ekološko inženirstvo, 2014. [38] f., ilustr. [COBISS.SI-ID 1697839]
- AK58.** PERDIH, Franc. *Zapiski predavanj iz Anorganske kemije I za izredni študij Kemijske tehnologije (1. letnik)*. Ljubljana: Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2014. 1 USB ključ, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 1704751]
- AK59.** PERDIH, Franc. *Zapiski predavanj iz Splošne kemije I za izredni študij Kemijske tehnologije (1. letnik)*. Ljubljana: Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2014. 1 USB ključ, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 1705007]
- AK60.** MEDEN, Anton, GOLOBIČ, Amalija. *Zgradba in lastnosti trdnin : vaje*. 1. izd. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2014. 72 str., ilustr. ISBN 978-961-6756-12-9. [COBISS.SI-ID 276155392] (ponatis)

KONČNO POROČILO O REZULTATIH RAZISKAV / FINAL RESEARCH REPORT

- AK61.** ČERNÝ, Radovan, MEDEN, Anton, ZABUKOVEC LOGAR, Nataša, MALI, Gregor, KASUNIČ, Marta, et al. *Metal-hydride organic frameworks (HOF)-new solids for gas adsorption and separation : joint research projects (SCOPES)*. Bern: Swiss National Science Foundation, 2014. 55 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 1739055]

PATENT / PATENT

- AK62.** MATOH, Lev, KOZJEK-ŠKOFIC, Irena, BUKOVEC, Nataša, BUKOVEC, Peter. *Metoda za nanos platinskega in paladijevega katalizatorja z uporabo reducentov v plinski fazi : patent SI 24372(A), 2014-12-08*. Ljubljana: Urad Republike Slovenije za intelektualno lastnino, 8. 12. 2014. 6 str., ilustr. [COBISS.SI-ID 1536105667]
- AK63.** LUNDER, Mojca, RAVNIKAR, Matjaž, ŠTRUKELJ, Borut, BERLEC, Aleš, ČEH, Boris. *Modified food grade microorganism for treatment of inflammatory bowel disease : patent US 8754198 B2, 2014-06-17*. [S. I.]: United State Patent Office, 17. jun. 2014. [COBISS.SI-ID 27820583]

PREDAVANJE NA TUJI UNIVERZI / INVITED LECTURE AT FOREIGN UNIVERSITY

- AK64.** TRATAR-PIRC, Elizabeta. *[Anaerobic digestion as wastewater treatment method : University of Lisbon, Faculty of Sciences, Department of Chemistry and Biochemistry, Lisbon, May 8th, 2014]*. [2014]. [COBISS.SI-ID 1706543]
- AK65.** TUREL, Iztok. *[Applicability of ruthenium compounds in the electrochemotherapy of tumours : University of Trieste, April 11th, 2014, Trieste, Italy]*. [2014]. [COBISS.SI-ID 1701679]
- AK66.** TRATAR-PIRC, Elizabeta. *[Harvesting solar energy : University of Malta, Valletta, April 10th, 2014]*. [2014]. [COBISS.SI-ID 1784623]
- AK67.** TRATAR-PIRC, Elizabeta. *[Laboratory scale greenhouse effect : University of Malta, Valletta, from April 7th to April 11th, 2014]*. [2014]. [COBISS.SI-ID 1784879]
- AK68.** TRATAR-PIRC, Elizabeta. *[Renewable energy : University of Lisbon, Faculty of Sciences, Department of Chemistry and Biochemistry, Lisbon, May 8th, 2014]*. [2014]. [COBISS.SI-ID 1706799]
- AK69.** PERDIH, Franc. *Structural diversity and argentophilic interactions in silver β -diketonates : J. J. Strossmayer University of Osijek, 19th November 2014, Osijek, Croatia*. 2014. [COBISS.SI-ID 1536076483]

UREDNIK / EDITORSHIP

- AK70.** *Acta chimica slovenica*. Perdih, Franc (član uredniškega sveta 2013-). [Tiskana izd.]. Ljubljana: Slovensko kemijsko društvo: =Slovenian Chemical Society, 1993-. ISSN 1318-0207. <http://acta.chem-soc.si/>. [COBISS.SI-ID 14086149]
- AK71.** *Frontiers in chemistry*. Turel, Iztok (član uredniškega odbora 2013-). [Online ed.]. Lausanne: Frontiers Editorial Office, 2013-. ISSN 2296-2646. <http://www.frontiersin.org/Chemistry/about>. [COBISS.SI-ID 1647919]
- AK72.** *Molecules*. Turel, Iztok (član uredniškega odbora 2003-, gostujoči urednik 2014). Berlin: Springer; Basel: Molecular Diversity Preservation International. ISSN 1420-3049. [COBISS.SI-ID 18462981]

- AK73.** Twenty-third Slovenian-Croatian Crystallographic Meeting, 19 - 22 June, 2014, Logar Valley, Hotel Plesnik, Slovenia, KASUNIČ, Marta (urednik), PEVEC, Andrej (urednik). *Book of abstracts [and] programme*. Ljubljana: Faculty of Chemistry and Chemical Technology, 2014. 68 str., ilustr. [COBISS.SI-ID [1723695](#)]
- AK74.** *SCCM 2014*. 23rd Slovenian-Croatian Crystallographic Meeting 2014, TRDIN, Miha (urednik). [S. l.: s. n.], 2014. <http://slocro23.fkkt.uni-lj.si/index.html>. [COBISS.SI-ID [1741359](#)]

KATEDRA ZA BIOKEMIJO CHAIR OF BIOCHEMISTRY

PREDSTOJNICA KATEDRE / HEAD

prof. dr. Brigita Lenarčič

SODELAVCI KATEDRE / PERSONNEL

Visokošolski učitelji / *Faculty*

izr. prof. dr. Marko Dolinar

doc. dr. Gregor Gunčar

prof. dr. Brigita Lenarčič

doc. dr. Marko Novinec

v dopolnilnem razmerju / *part-time*

prof. dr. Kristina Djinović Carugo (od 17.12.2014)

prof. dr. Igor Križaj

prof. dr. Tamara Lah Turnšek

prof. dr. Janez Plavec

prof. ddr. Boris Turk

Visokošolski sodelavci / *Assistants*

Aljaž Gaber, univ. dipl. biokem.

Katja Hrovat Arnež, univ. dipl. mikrobiol. (od 1.10.2014)

dr. Marina Klemenčič

dr. Miha Pavšič

dr. Vera Župunski

Raziskovalka / *Researcher*

dr. Helena Sabina Čelešnik

Strokovna sodelavka / *Research Assistant*

dr. Petra Prijatelj Žnidaršič

Tehniki / *Technicians*

Matevž Korenč, univ. dipl. biokem.

dr. Nataša Lindič, univ. dipl. mikrobiol. (do 30. 6. 2014)

Matjaž Malavašič

Mateja Presečnik, univ. dipl. inž. živ. tehnol. (do 24. 2. 2014)

Mladi raziskovalci <i>Young Researchers</i>	Mentor <i>Mentor</i>	Čas usposabljanja <i>Programme Duration</i>	Oblika usposabljanja <i>Degree</i>
Sara Drmota	K. Djinović Carugo	2010–2015	doktorski študij / PhD
Katja Hrovat Arnež	G. Gunčar	2010–2015	doktorski študij / PhD
Tilen Vidmar	B. Lenarčič	2010–2014 (do 30. 4. 2014)	doktorski študij / PhD
Vid Puž	K. Djinović Carugo	2012–2016	doktorski študij / PhD
Anja Kerš	K. Djinović Carugo	2014–2018	doktorski študij / PhD

IZOBRAŽEVALNA IN RAZISKOVALNA DEJAVNOST KATEDRE EDUCATIONAL AND RESEARCH ACTIVITIES

IZOBRAŽEVALNA DEJAVNOST / LECTURED COURSES

FKKT / FACULTY OF CHEMISTRY AND CHEMICAL TECHNOLOGY

Bolonjski programi 1. stopnje / *Bologna 1st Cycle Study Programmes*

Biokemija / *Biochemistry* – UN:

Temelji biokemije / *Biochemistry Fundamentals*

Biokemijski praktikum / *Biochemistry Practicals*

Biokemija / *Biochemistry*

Molekularna biologija / *Molecular Biology*

Biokemijska informatika / *Bioinformatics*

Molekularno kloniranje / *Molecular Cloning*

Encimatika / *Enzymology*

Celična in molekularna imunologija / *Cell and Molecular Immunology*

Uporaba encimov / *Applied Enzymology*

Struktura proteinov / *Protein Structure*

Kemija / *Chemistry* – UN:

Molekularne osnove ved o življenju / *Molecular Fundamentals of Life Sciences*

Biološka kemija / *Biological Chemistry*

Kemijsko inženirstvo / *Chemical Engineering* – UN:

Molekularne osnove ved o življenju / *Molecular Fundamentals of Life Sciences*

Bolonjski programi 2. stopnje / *Bologna 2nd Cycle Study Programmes*

Biokemija / *Biochemistry* – UN:

Biokemija raka / *Cancer Biochemistry*

Biokemija večceličnih sistemov / *Biochemistry of Heterocellular Systems*

Biološke membrane / *Biological Membranes*

Bionanotehnologija / *Bionanotechnology*

Izbrana poglavja iz biomedicinske kemije / *Selected Topics in Biomedical Chemistry*

Metode določanja strukture 3D makromolekul / *Methods of Macromolecular 3D Structure Determination*

Moderni in komplementarni pristopi v strukturalni biologiji / *Modern and Complementary Approaches in Structural Biology*

Molekularna biotehnologija / *Molecular Biotechnology*

Sintezna biologija / *Synthetic Biology*

Strukturalni in funkcijski vidiki bioloških interakcij / *Structural and Functional Aspects of Biological Interactions*

Tehnologija DNA / *DNA Technology*

Bolonjski programi 3. stopnje / *Bologna 3rd Cycle Doctoral Study Programmes*

Izbrana poglavja iz biokemije / *Selected Topics in Biochemistry*

Moderne metode in tehnike v biokemiji / *Modern Methods and Techniques in Biochemistry*

Sodobni NMR pristopi v karakterizaciji spojin / *Modern NMR Approaches to Compound Characterization*

IZVEN FKKT / EXTRAMURAL COURSES

Bolonjski programi 1. stopnje / *Bologna 1st Cycle Study Programmes*

Biokemija / *Biochemistry*, FFA – UN - Laboratorijska biomedicina / *Faculty of Pharmacy – Laboratory Biomedicine*

Bolonjski programi 3. stopnje / *Bologna 3rd Cycle Doctoral Study Programmes*

Izbrani procesi v biokemiji in molekularni biologiji / *Selected Advanced Topics in Biochemistry and Molecular Biology*

Glikozilacija proteinov / *Protein Glycosylation*

Rekombinantni proteini / *Recombinant Proteins*

Struktura proteinov / *Protein Structure*

(UL Interdisciplinarni doktorski študijski program Biomedicina / *UL Interdisciplinary Doctoral Study Programme in Biomedicine*)

RAZISKOVALNA DEJAVNOST / RESEARCH ACTIVITIES

Raziskovalno delo članov katedre je potekalo na petih raziskovalnih projektih ter v okviru treh raziskovalnih programov: Toksini in biomembrane, Proteoliza in njena regulacija ter Strukturna biologija.

V okviru proučevanja epitelijske celične adhezije in signaliziranja v normalnih in karcinomskih celicah smo nadaljevali s strukturnimi študijami označevalnih molekul karcinomskih in izvornih celic EpCAM (epitelijska celična adhezijska molekula) in Trop2. Posebej nas zanimajo strukturne značilnosti medceličnih homo-oligomernih skupkov in kompleksov teh proteinov z drugimi transmembranskimi (klavdin-7), zunajceličnimi (IGF-1) in znotraceličnimi proteini (a-aktinin 4, protein kinaza Cd). S strukturnega vidika smo podrobneje preučevali citosolni del Trop2, predvsem z vidika konformacijskih sprememb ob fosforilaciji, rezultati pa nudijo vpogled v mehanizem delovanja tega proteina pri signaliziranju.

Ponovno smo pričeli tudi s proučevanjem testikanov, ki predvidoma tvorijo interakcije s komponentami zunajceličnega matriksa ter sodelujejo pri tvorjenju medceličnih povezav in pritrjevanju celic na elemente medceličnine.

Nadaljevali smo s strukturno karakterizacijo kalmodulinu podobne domene α -aktinina 1 in dokazali, da je v tej domeni eno aktivno vezavno mesto za kalcij.

Z metodo mikrotermoforeze (MST) smo določili vezavni konstanti za interakcijo med miotilinom, α -aktininom 2 in G-aktinom. S prečnim povezovanjem in masno spektrometrijo smo določili prečno povezane aminokislinske ostanke, s tem pa mesto vezave obeh vezavnih partnerjev na miotilin.

Nadaljevali smo raziskovanje mehanizmov alosterične regulacije katepsina K ter modifikatorjev, ki njegovo aktivnost regulirajo preko alosteričnih mehanizmov. Objavili smo članek, v katerem opisujemo kristalno strukturo encima v kompleksu z alosteričnim modifikatorjem NSC13345, ki smo ga tudi podrobno okarakterizirali. To je prvi primer alosteričnega inhibitorja cisteinskih katepsinov. Poleg NSC13345 smo objavili tudi kinetično karakterizacijo osmih novih alosteričnih modifikatorjev, ki delujejo po raznolikih mehanizmih in lahko vplivajo na aktivnost in stabilnost katepsina K.

Eden od vzrokov za nastanek nevrodegenerativnih bolezni amiotrofične lateralne skleroze in frontotemporalne demence je kopičenje ponovitev heksanukleotida GGGGCC v prvem intronu gena C9orf72. Ugotovili smo, da ponovitve GGGGCC tvorijo strukturo G-kvadrupeksov, kar lahko vpliva na izražanje proteina C9orf72 ter na razvoj teh bolezni. Nadaljne študije temeljijo na pripravi večjih količin proteina C9orf72, da raziščemo njegovo funkcijo in vlogo pri nevrodegenerativnih boleznih.

Raziskujemo tudi mehanizme delovanja človeškega retrotranspozona LINE1 ter evolucijo multigenске družine Kunitz/BPTI iz modrasovega strupa in njihovih kačjih homologov.

V cianobakterijo *Synechocystis sp.* PCC 6803 smo ločeno vstavili več plazmidnih konstruktov za regulirano izražanje lastnih cianobakterijskih endotoksinov in antitoksinov ter za izražanje endonukleaze in inhibitorja endonukleaze. Pri tem se je izkazalo, da oba tipa konstruktov lahko povzročita zmanjšanje cianobakterijske populacije. To je solidna osnova za pripravo kombiniranih sistemov za večjo biološko varnost v biotehnologiji. Za določanje ravni reguliranega izražanja smo pripravili promotorske fuzije z beta-galaktozidaznim reporterjem. Začeli smo tudi s pripravo genskih konstruktov za vstavljanje biovarnostnih sistemov v cianobakterijsko genomsko DNA.

Začeli smo z raziskavami proteina, ki je zapisan v genomu nekaterih sevov cianobakterije *Microcystis aeruginosa* in je podoben kaspazam, encimom, ki sodelujejo pri programirani celični smrti. Pripravili smo rekombinantni protein in ugotovili, kakšna je njegova substratna specifičnost ter določili, na kakšen način se iz neaktivne oblike pretvori v aktivno.

Lotili smo se raziskav biološke pestrosti enoceličnih cianobakterij, pri čemer uporabljamo molekularnobioška orodja za identifikacijo. Pristop temelji na določitvi posebnosti hipervariabilnih odsekov genoma in na primerjavi dobljenih rezultatov z bazami podatkov.

Nadaljevali smo raziskave na področju vloge MLKL v nekroptozni. Gre za psevdokinazo, ki jo na C-končnem delu s fosforilacijo aktivira kinaza RIP3 in s tem omogoča potek nekroptoze. Protein se nahaja v dveh izooblikah, daljši izoobliki 1 ter krajši izoobliki 2, ki ne vsebuje psevdokinaznega aktivacijskega dela. V sodelovanju z raziskovalci z Univeristy of Queensland, Avstralija, smo uspeli dokazati pomembnost N-končnega dela MLKL za nekroptozno aktivnost ter določili različno nekroptozno aktivnost med izooblikama. Pokazali smo, da je za potek nekroptoze znotraj človeških in mišjih makrofagov nujno povečano izražanje MLKL ter da nekroptozna znotraj mišjih in človeških makrofagov poteče ob stimulaciji z LPS. V sodelovanju s prof. Sergom Muyldermansom (VIB, Belgija) smo razvili specifična nanotelesa proti MLKL, ki jih bomo uporabili za detekcijo, kristalizacijo in *in vivo* študije vloge MLKL.

Chair members were engaged in five research projects and in three different research programmes: Toxins and Biomembranes, Proteolysis and its Regulation, and Structural Biology.

In 2014, we continued our research on epithelial cell adhesion and signaling in normal and carcinoma cells. Here, we focused on structural studies of carcinoma and stem cell marker proteins EpCAM (epithelial cell adhesion molecule) and Trop2. We are particularly interested in structural features of intercellular homo-oligomers and complexes of these proteins with other transmembrane (claudin-7), extracellular (IGF-1) and cytosolic proteins (α -actinin 4, protein kinase C δ). Results of our structural studies of cytosolic part of Trop2 will enable us to get insight into the mechanism of signaling function of this protein.

We resumed our work on testicans, which presumably interact with extracellular matrix components and participate in formation of cell-cell and cell-extracellular matrix interactions.

In 2014, we have continued with structural characterization of α -actinin 1 calmodulin like domain (CAMD) and showed that there is one active calcium binding site.

We determined binding affinities for interaction of myotilin with α -actinin 2 and G-actin using microscale thermophoresis (MST). Chemical cross-linking and subsequent mass spectrometry analysis revealed cross-linked residues and binding sites of both interaction partners on myotilin.

We continued our investigation of the mechanisms of allosteric regulation in cathepsin K and modifiers that act via these mechanisms. We published the crystal structure of cathepsin K in complex with the allosteric modifier NSC13345 which we have also extensively characterized. This is the first example of a small molecule allosteric inhibitor of a cysteine cathepsin peptidase. In addition, we have published the kinetic characterization of eight further allosteric modifiers that act via diverse kinetic mechanisms and affect the activity and stability of cathepsin K.

Expanded hexanucleotide repeat mutation GGGGCC in the first intron of the C9orf72 gene is the most common mutation in ALS and FTD, two fatal neurodegenerative diseases. We have determined G-quadruplex structure of GGGGCC repeats which might be important in protein expression and disease development. Further, we plan to express large amounts of C9orf72 protein to look into its function and to elucidate its role in neurodegenerative diseases.

Our research is also focused on mechanisms of human retrotransposon LINE1 and on the evolution of Kunitz/BPTI multigene family from Vipera ammodytes and its snake venom homologues.

Several constructs for regulated expression of endogenous cyanobacterial endotoxins and antitoxins and for regulated expression of a cyanobacterial endonuclease and its inhibitor have been individually introduced into the cyanobacterium Synechocystis sp. PCC 6803. Both types of constructs caused a reduction in the cyanobacterial population, validating them as a good starting point for further development of combined biosafety systems in biotechnology. For measuring regulated expression levels, beta-galactosidase promoter fusions have been prepared. We have also begun making genetic constructs for introduction of biosafety systems into cyanobacterial genomic DNA.

We started investigating a caspase-like protein encoded in the genome of certain species of the cyanobacterium Microcystis aeruginosa. Caspases are enzymes involved in programmed cell death. We prepared a recombinant protein, determined its substrate specificity and investigated its transition from inactive to active form.

We set out to investigate biological diversity of unicellular cyanobacteria using molecular biology tools. Our species identification method involves analyzing hypervariable genomic regions and comparing the data to available genome databases.

We continued our work on importance of MLKL in necroptosis. This pseudokinase is activated by RIP3 phosphorylation of the C-terminal domain. Two isoforms have been detected in human cell lines. Isoform 1 is a full-length protein, whereas isoform 2 is shorter and lacks the C-terminal activation domain. In collaboration with the researchers of University of Queensland Australia, we have mapped the death-initiating properties of MLKL to the N-terminal domain. A more potent necroptotic activity was shown for isoform 2 in comparison to isoform 1. We have also shown the importance of MLKL up-regulation in human and mouse macrophages which is urgent for LPS induced necroptosis. In collaboration with prof. Serge Muyldermans (VIB, Belgija) we have developed MLKL specific nanobodies, which we will use for detection, crystallization and in vivo studies of MLKL.

POMEMBNI DOSEŽKI SODELAVCEV KATEDRE / SIGNIFICANT ACHIEVEMENTS OF THE CHAIR STAFF

NAGRADE, PRIZNANJA / AWARDS, RECOGNITIONS

Prof. Boris Turk je prejel Lapanjetovo nagrado Slovenskega biokemijskega društva za vrhunske dosežke na področju biokemijskih znanosti. Doc. dr. Marko Novinec pa je bil prejemnik Lapanjetovega priznanja za mlajše člane društva, ki jo prav tako podeljujejo za vrhunske dosežke raziskovalcev, mlajših od 35 let. / *Prof. Boris Turk received the Lapanje Prize of the Slovenian Biochemical Society for his major achievements in the field of biochemical sciences. Asst. Prof. Marko Novinec was awarded with the Lapanje Recognition for top research achievements in the category under 35 years of age.*

Določitev zgradbe proteina EpCAM, objavljena v ugledni reviji Nature Communications, je bila izbrana kot eden izmed najodmevnejših raziskovalnih dosežkov Univerze v Ljubljani v letu 2014 (avtorji M. Pavšič, G. Gunčar, K. Djinović-Carugo in B. Lenarčič). / *Solved structure of protein EpCAM published in Nature Communications was selected as one of the most prominent research achievements at the University of Ljubljana in the year 2014 (authors M. Pavšič, G. Gunčar, K. Djinović-Carugo, and B. Lenarčič).*

Prešernovo nagrado FKKT za leto 2014 sta za svoji diplomski nalogi prejeli študentki biokemije Špela Alič (mentor doc. dr. Marko Novinec z naše katedre) in Tea Lenarčič (mentor prof. dr. Janez Plavec, somentor prof. dr. Gregor Anderluh). / *Špela Alič and Tea Lenarčič were the recipients of Faculty Prešeren Awards for 2014 for their BSc theses in the Biochemistry programme, prepared under the mentorship of Asst. Prof. Marko Novinec and Prof. Janez Plavec (co-mentor Prof. Gregor Anderluh), respectively.*

J. Plavec je bil mentor diplomantke biokemije Špela Medic, ki je dobila Krkino nagrado za raziskovalno nalogo Strukturna študija G-kvadrupleksa protiprionskega aptamera. / *J. Plavec was mentor of a research project completed by Špela Medic, Biochemistry programme student, and awarded with the "Krka prize for undergraduate and postgraduate research".*

Doc. dr. Marko Novinec je dobil priznanje Študentskega sveta fakultete za pedagoško delo na študijskem programu Biokemija. / *Asst. Prof. Marko Novinec received a written recognition of the faculty Student Council for his pedagogic work within the Biochemistry programme.*

RAZISKOVALNA OPREMA / RESEARCH EQUIPMENT

- Hlajene centrifuge Haereus in Eppendorf / *Refrigerated Centrifuges Haereus and Eppendorf*
- Hlajena mikrocentrifuga Eppendorf / *Refrigerated Microcentrifuge Eppendorf*
- Dva spektrofotometra UV/VIS Pharmacia Ultrospec 1000 z računalniško podporo / *Two Spectrophotometers UV / VIS Pharmacia Ultrospec 1000 with Computer Support*
- Spektrofotometer UV/VIS Cary 50 z računalniško podporo / *Spectrophotometer UV/VIS Cary 50 with Computer Support*
- Fluorimeter Perkin-Elmer LS 50 z računalniško podporo / *Fluorimeter Perkin-Elmer LS 50 with Computer Support*
- Fluorimeter Aminco / *Fluorimeter Aminco*
- Aparatura "stopped flow" za določanje encimske kinetike / *Stopped-Flow Enzyme Kinetics Apparatus*
- Inkubator za kristalizacijske plošče Molecular Dimensions / *Incubator for Crystallization Trays Molecular Dimensions*
- Kristalizacijski robot Crystal Gryphon (96-kanalni) / *Crystallization Robot (96 Channels) Crystal Gryphon*
- Čitalnik mikrotitrskih ploščic Tecan Sunrise / *Microtiter Plate Reader Tecan Sunrise*
- Aparaturi za PCR Applied Biosystems GeneAmp 2700 in Veriti / *PCR Applied Biosystems GeneAmp 2700 and Veriti Apparatuses*
- Aparatura za PCR v realnem času PikoReal 96 / *Real-time PCR system PikoReal96*
- Spektrofotometer za majhne volumne vzorcev (NanoDrop) / *Spectrophotometer for Small Sample Volumes (NanoDrop)*
- Rotacijski homogenizer / *Rotation homogenizer*
- Ultrazvočni homogenizer / *Ultrasound Homogenizer*
- Elektroporator / *Electroporator*
- Naprave za elektroforezno analizo proteinov in prenos Western / *Instruments for Electrophoretic Separations of Proteins and Western Blotting*
- Elektroforezni sistem Phast / *Phast Electrophoresis System*
- Naprave za agarozno gelsko elektroforezo DNA / *Instruments for DNA Agarose Gel Electrophoresis*
- Transiluminator / *Transilluminator*
- Sistem za dokumentacijo elektroforeznih gelov / *Electrophoresis Documentation System*
- Suhi inkubator in stresalnik za mikrobiologijo / *Incubator/Shaker*
- Hlajeni inkubator s stresalnikom / *Cooled Incubator/Shaker*
- CO₂ inkubator / *CO₂ Incubator*

- Stereo mikroskop M7.5 Leica / *Stereo Microscope M7.5 Leica*
- Invertni mikroskop CKX-41 Olympus / *Inverted Microscope CKX-41 Olympus*
- Mešalniki in vibracijski stresalniki / *Mixers and Shakers*
- Analitske tehtnice / *Analytical Balances*
- Čiste komore / *Clean Chambers*
- pH-metri / *pH Meters*
- Tekočinska kromatografija za hitro ločevanje proteinov FPLC / *Fast Protein Liquid Chromatography (FPLC) GE Healthcare*
- Tekočinska kromatografija za hitro ločevanje proteinov Acta Prime / *Acta Prime Protein Liquid Chromatography System*
- Tekočinska kromatografija visoke ločljivosti (HPLC) / *High Performance Liquid Chromatography (HPLC)*
- Frakcijski kolektor / *Fraction Collector*
- Vakuumski koncentrador / *Vac Concentrator*
- Ledomat za drobljeni led / *Flaked Ice Machine*
- Termostatirane vodne kopeli / *Thermostated Water Baths*
- Suhi sterilizator / *Dry steriliser*
- Dva avtoklava / *Two autoclaves*
- Dva zmrzovalnika -80 °C / *Two freezers -80 °C*
- Sistem za čisto vodo Milli-Q / *Ultrapure water system Milli-Q*

RAZISKOVALNI PROGRAMI IN PROJEKTI / RESEARCH PROGRAMMES AND PROJECTS

RAZISKOVALNI PROGRAMI / RESEARCH PROGRAMMES

- | | |
|---------|--|
| P1-0207 | Toksini in biomembrane / <i>Toxins and Biomembranes</i>
Vodja programa / <i>Principal Researcher</i> : I. Križaj (IJS) |
| P1-0140 | Proteoliza in njena regulacija / <i>Proteolysis and its Regulation</i>
Vodja programa / <i>Principal Researcher</i> : B. Turk (IJS) |
| P1-0048 | Strukturna biologija / <i>Structural Biology</i>
Vodja programa / <i>Principal Researcher</i> : D. Turk (IJS) |

TEMELJNI PROJEKTI / BASIC RESEARCH

- | | |
|---------|---|
| J3-4168 | Patogenomika in sistemska biologija novih virulenčnih faktorjev pri patogenih bakterijah / <i>Pathogenomics and Systems Biology of New Virulence Factors in Pathogenic Bacteria</i>
Nosilec / <i>Principal Researcher</i> : D. Kordiš (IJS) |
| J1-0841 | Dvojna narava matičnih celic v raku in njihova uporaba v zdravljenju / <i>Dual Nature of stem cells in cancer and their application in therapy</i>
Nosilka / <i>Principal Researcher</i> : T. Lah Turnšek (NIB) |
| J3-4026 | Transport in RNA vezava proteinov TDP-43 in FUS - implikacije za ALS/FTLD spekter nevrodegenerativnih bolezni / <i>Transport and RNA Binding of TDP-43 and FUS - Implications for ALS/FTLD Spectrum of Neurodegenerative Disease</i>
Nosilec / <i>Principal Researcher</i> : B. Rogelj (Zavod BRIS, IJS) |
| J3-5502 | Napake v regulaciji izražanja TDP-43 pri amiotrofični lateralni sklerozi in frontotemporalni lobarni degeneraciji / <i>Dysregulation of TDP-43 expression in amyotrophic lateral sclerosis and frontotemporal lobar degeneration</i>
Nosilec / <i>Principal Researcher</i> : B. Rogelj (Zavod BRIS, IJS) |

- J3-6789 Patogeni mehanizem podaljšanih heksanukleotidnih ponovitev v genu C9orf72 pri nevrodegeneraciji / *Pathogenic mechanism of the C9orf72 expanded hexanucleotide repeat mutation in neurodegeneration*
Nosilec / *Principal Researcher*: B. Rogelj (Zavod BRIS, IJS)

MEDNARODNO ZNANSTVENO SODELOVANJE / INTERNATIONAL RESEARCH COOPERATION

MEDNARODNI PROJEKT / INTERNATIONAL COLLABORATIVE PROJECT

- 308518 (FP7) Zasnova, konstruiranje in prikaz proizvodnje solarnega biogoriva z uporabo novih (foto)sinteznih celičnih tovarn / *Design, construction and demonstration of solar biofuel production using novel (photo)synthetic cell factories*
Koordinator / *Coordinator*: P. Lindblad (Uppsala)
Nosilec / *Principal Researcher*: M. Dolinar

DRUGE OBLIKE MEDNARODNEGA SODELOVANJA / OTHER FORMS OF INTERNATIONAL COOPERATION

VABLJENA PREDAVANJA TUJCEV NA FKKT / INVITED LECTURERS AT FKKT

Dr. Begoña Heras, Institut za molekularne znanosti La Trobe, Melbourne, Avstralija / *La Trobe Institute for Molecular Science, Melbourne, Australia*: Bojevanje z bakterijami: alternativna zdravila proti patogenim bakterijam / *Battling bacteria: Alternative therapeutics for pathogenic bacteria (December 2014)*

BIBLIOGRAFIJA 2014 / REFERENCES 2014

IZVIRNI ZNANSTVENI ČLANEK / ORIGINAL SCIENTIFIC ARTICLE

- BIO1.** SAJEVIC, Tamara, LEONARDI, Adrijana, KRŽAJ, Igor. An overview of hemostatically active components of *Vipera ammodytes* ammodytes venom. V: *5th International Conference on Exogenous Factors Affecting Thrombosis and Hemostasis, EFATH 2013, 5-6 July 2013, Amsterdam*, (Toxin review, ISSN 1556-9543, vol. 33, no. 1/2, 2014). Philadelphia: Taylor & Francis, 2014, vol. 33, no. 1/2, str. 33-36, doi: 10.3109/15569543.2013.835827. [COBISS.SI-ID 27046439]
- BIO2.** MLYNEK, Georg, LEHNER, Anita, NEUHOLD, Jana, LEEB, Sarah, KOSTAN, Julius, CHARNAGALOV, Alexej, STOLTBERGNER, Peggy, DJINOVIĆ CARUGO, Kristina, PINOTSIS, Nikos. The Center for Optimized Structural Studies (COSS) platform for automation in cloning, expression, and purification of single proteins and protein-protein complexes. *Amino acids*, ISSN 0939-4451, 2014, vol. 46, no. 6, str. 1565-1582, ilustr. http://download.springer.com/static/pdf/962/art%253A10.1007%252Fs00726-014-1699-x.pdf?auth66=1404471331_077499217e9e29ad58c02ad8bd1ed5d5&ext=.pdf, doi: 10.1007/s00726-014-1699-X. [COBISS.SI-ID 1730095]
- BIO3.** BRGLES, Marija, KURTOVIĆ, Tihana, KOVAČIČ, Lidija, KRŽAJ, Igor, BARUT, Miloš, LANG BALIJA, Maja, ALLMAIER, Günter, MARCHETTI DESCHMANN, Martina, HALASSY, Beata. Identification of proteins interacting with ammodytoxins in *Vipera ammodytes* ammodytes venom by immuno-affinity chromatography. *Analytical and bioanalytical chemistry*, ISSN 1618-2642, 2014, vol. 406, no. 1, str. 293-304, doi: 10.1007/s00216-013-7453-5. [COBISS.SI-ID 27233831]
- BIO4.** ČERU, Slavko, ŠKET, Primož, PRISLAN, Iztok, LAH, Jurij, PLAVEC, Janez. A new pathway of DNA G-quadruplex formation. *Angewandte Chemie*, ISSN 1433-7851. [Print ed.], 2014, vol. 53, issue 19, str. 4881-4884, ilustr. <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/anie.201400531/pdf>, doi: 10.1002/anie.201400531. [COBISS.SI-ID 1701423]
- BIO5.** HU, Hai-Yu, VATS, Divya, VIZOVIŠEK, Matej, KRAMER, Lovro, GERMANIER, Catherine, URLICH WENDT, K., RUDIN, Markus, TURK, Boris, PLETTENBURG, Oliver, SCHULTZ, Carsten. In vivo imaging of mouse tumors by a lipidated cathepsin S substrate. *Angewandte Chemie*, ISSN 1433-7851. [Print ed.], 2014, vol. 53, issue 29, str. 7669-7673, doi: 10.1002/anie.201310979. [COBISS.SI-ID 27739175]
- BIO6.** MIKHAYLOV, Georgy, KLIMPEL, D., SCHASCHKE, Norbert, MIKAC, Urška, VIZOVIŠEK, Matej, FONOVIĆ, Marko, TURK, Vito, TURK, Boris, VASILJEVA, Olga. Selective targeting of tumor and stromal cells by a nanocarrier system displaying lipidated cathepsin B inhibitor. *Angewandte Chemie*, ISSN 1433-7851. [Print ed.], 2014, vol. 53, no. 38, str. 10077-10081, doi: 10.1002/anie.201402305. [COBISS.SI-ID 27932455]
- BIO7.** HOFBAUER, Stefan, GYSEL, Kira, BELLEI, Marzia, HAGMÜLLER, Andreas, SCHAFFNER, Irene, MLYNEK, Georg, KOSTAN, Julius, PIRKER, Katharina F., DAIMS, Holger, FORTMÜLLER, Paul G., BATTISTUZZI, Gianantonio, DJINOVIĆ CARUGO, Kristina, OBINGER, Christian. Redox thermodynamics of high-spin and low-spin forms of chlorite dismutases with diverse subunit and oligomeric structures. *Biochemistry*, ISSN 0006-2960. [Print ed.], 2014, vol. 53, no. 1, str. 77-89. <http://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/bi401042z>, doi: 10.1021/bi401042z. [COBISS.SI-ID 1731119]

- BIO8.** ŠKRLJ, Nives, DOLINAR, Marko. New engineered antibodies against prions. *Bioengineered*, ISSN 2165-5979, 2014, vol. 5, no. 1, str. 1-5, ilustr. <https://www.landesbioscience.com/journals/bioe/article/26069/>, doi: 10.4161/bioe.26069. [COBISS.SI-ID 1610543]
- BIO9.** BUSSCHAERT, Nathalie, KARAGIANNIDIS, Louise E., WENZEL, Marco, HAYNES, Cally J.E., WELLS, Neil J., YOUNG, Philip G., MAKUC, Damjan, PLAVEC, Janez, JOLLIFFE, Katrina A., GALE, Philip A. Synthetic transporters for sulfate : a new method for the direct detection of lipid bilayer sulfate transport. *Chemical science*, ISSN 2041-6520, Mar. 2014, vol. 5, iss. 3, str. 1118-1127, ilustr. <http://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2014/sc/c3sc52006d>, doi: 10.1039/C3SC52006D. [COBISS.SI-ID 5420570]
- BIO10.** JURIBAŠIĆ, Marina, BREGOVIĆ, Nikola, STILINOVIĆ, Vladimir, TOMIŠIĆ, Vladislav, CINDRIĆ, Marina, ŠKET, Primož, PLAVEC, Janez, RUBČIĆ, Mirta, UŽAREVIĆ, Krunoslav. Supramolecular stabilization of metastable tautomers in solution and the solid state. *Chemistry*, ISSN 0947-6539. [Print ed.], Dec. 2014, vol. 20, iss. 52, str. 17333-17345. <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/chem.201403543/pdf>, doi: 10.1002/chem.201403543. [COBISS.SI-ID 5625370]
- BIO11.** MEDIC, Špela, PODBEVŠEK, Peter, PLAVEC, Janez. Solution structure of a prion protein aptamer analogue. *Croatica chemica acta*, ISSN 0011-1643, Dec. 2014, vol. 87, no. 4, str. 321-325. http://hrcak.srce.hr/index.php?show=clanak&id_clanak_jezik=194328. [COBISS.SI-ID 5634586]
- BIO12.** WEISS, Victor U., REITSCHMIDT, Sonja, FRIESZ, Victoria, KRIŽAJ, Igor, ALLMAIER, Günter, MARCHETTI DESCHMANN, Martina. Chip electrophoretic separation of highly homologous ammodytoxin isoforms : three neurotoxic phospholipases A₂ of *Vipera ammodytes ammodytes* venom. *Electrophoresis*, ISSN 0173-0835, 2014, vol. 35, issue 15, str. 2137-2145, doi: 10.1002/elps.201300575. [COBISS.SI-ID 27429415]
- BIO13.** KOSTAN, Julius, SALZER, Ulrich, ORLOVA, Albina, TÖRÖ, Imre, HODNIK, Vesna, SENJU, Yosuke, ZOU, Juan, SCHREINER, Claudia, STEINER, Julia, MERILÄINEN, Jari, NIKKI, Marko, VIRTANEN, Ismo, CARUGO, Olivero, RAPPILBER, Juri, LAPPALAINEN, Pekka, LEHTO, Veli-Pekka, ANDERLUH, Gregor, EGELMAN, Edward H., DJINOVIĆ CARUGO, Kristina. Direct interaction of actin filaments with F-BAR protein pascin2. *EMBO reports*, ISSN 1469-221X, Nov. 2014, vol. 15, no. 11, str. 1154-1162. <http://embor.embopress.org/content/15/11/1154>, doi: 10.15252/embr.201439267. [COBISS.SI-ID 5633050]
- BIO14.** MAHER, Katarina, ZAVRŠNIK, Janja, JERIĆ, Barbara, VASILJEVA, Olga, TURK, Boris, KOPITAR-JERALA, Nataša. Decreased IL-10 expression in stein B-deficient macrophages is regulated by the MAP kinase and STAT-3 signaling pathways. *FEBS letters*, ISSN 0014-5793. [Print ed.], 2014, vol. 588, no. 5, str. 720-726, doi: 10.1016/j.febslet.2014.01.015. [COBISS.SI-ID 27532071]
- BIO15.** TAVČAR BENKOVIĆ, Eva, ŽIGON, Dušan, FRIEDRICH, Miha, PLAVEC, Janez, KREFT, Samo. Isolation, analysis and structures of phototoxic fagopyrins from buckwheat. *Food chemistry*, ISSN 0308-8146. [Print ed.], vol. 143, jan. 2014, str. 432-439, ilustr. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0308814613010479#>, doi: 10.1016/j.foodchem.2013.07.118. [COBISS.SI-ID 3557745]
- BIO16.** CARUGO, Olivero, DJINOVIĆ CARUGO, Kristina. Packing bridges in protein crystal structures. *Journal of applied crystallography*, ISSN 1600-5767, 2014, vol. 47, no. 1, str. 458-461, ilustr. <http://journals.iucr.org/j/issues/2014/01/00/issconts.html>, doi: 10.1107/S160057671302880X. [COBISS.SI-ID 1730607]
- BIO17.** MAHER, Katarina, JERIĆ, Barbara, BUTINAR, Miha, MIKHAYLOV, Georgy, MANČEK KEBER, Mateja, STOKA, Veronika, VASILJEVA, Olga, TURK, Boris, GRIGORYEV, Sergei A., KOPITAR-JERALA, Nataša. A role for stein B (cystatin B) in inflammation and endotoxemia. *The Journal of biological chemistry*, ISSN 0021-9258, 2014, vol. 289, no. 46, str. 31736-31750, doi: 10.1074/jbc.M114.609396. [COBISS.SI-ID 28031271]
- BIO18.** SAXENA, Saurabh, STANEK, Jan, CEVEC, Mirko, PLAVEC, Janez, KOŽMIŃSKI, Wiktor. C4'/H4' selective, non-uniformly sampled 4D HC(P)CH experiment for sequential assignments of [sup]13C-labeled RNA. *Journal of biomolecular NMR*, ISSN 0925-2738, Nov. 2014, vol. 60, iss. 2/3, str. 91-98. http://download.springer.com/static/pdf/829/art%253A10.1007%252Fs10858-014-9861-z.pdf?auth66=1415786193_28f8240c0651ab44007559d9dbb7c96&ext=.pdf, doi: 10.1007/s10858-014-9861-z. [COBISS.SI-ID 5591066]
- BIO19.** ARTENJAK, Andrej, LEONARDI, Adrijana, KRIŽAJ, Igor, AMBROŽIČ, Aleš, SODIN-ŠEMRL, Snežna, BOŽIČ, Borut, ČUČNIK, Saša. Optimization of unnicked [beta]2-glycoprotein I and high avidity anti-[beta]2-glycoprotein I antibodies isolation. *Journal of Immunology Research (Online)*, ISSN 2314-7156, 2014, vol. 2014, str. 195687-1-195687-8. <http://www.hindawi.com/journals/jir/2014/195687/>, doi: 10.1155/2014/195687. [COBISS.SI-ID 3590513]
- BIO20.** ŠKET, Primož, KORBAR, Tjaša, PLAVEC, Janez. Influence of 3'-3' inversion of polarity site within d(TGGGGT) on inter quartet cation binding. *Journal of molecular structure*, ISSN 0022-2860. [Print ed.], Oct. 2014, vol. 1075, str. 49-52, ilustr. http://ac.els-cdn.com/S0022286014007042/1-s2.0-S0022286014007042-main.pdf?tid=22e866fc-1d66-11e4-8f86-00000aacb362&acdnat=1407328703_a45cd78be661281c10a9be3cb236e5_f5, doi: 10.1016/j.molstruc.2014.06.091. [COBISS.SI-ID 5525530]
- BIO21.** REPNIK, Urška, HAFNER ČESEN, Maruša, TURK, Boris. Lysosomal membrane permeabilization in cell death : concepts and challenges. *Mitochondrion*, ISSN 1567-7249, 2014, vol. 19, prt. A, str. 49-57, doi: 10.1016/j.mito.2014.06.006. [COBISS.SI-ID 27806759]
- BIO22.** NOVAK, Maruša, SEPČIĆ, Kristina, KRAŠEVEC, Nada, KRIŽAJ, Igor, MAČEK, Peter, ANDERLUH, Gregor, GUELLA, Graziano, MANCINI, Ines. Targeted lipid analysis of haemolytic mycelial extracts of *Aspergillus niger*. *Molecules*, ISSN 1420-3049, 2014, vol. 19, no. 7, str. 9051-9069. <http://www.mdpi.com/1420-3049/19/7/9051>, doi: 10.3390/molecules19079051. [COBISS.SI-ID 3158095]
- BIO23.** NOVINEC, Marko, KORENČ, Matevž, CAFLISCH, Amedeo, RANGANATHAN, Rama, LENARČIČ, Brigita, BAICI, Antonio. A novel allosteric mechanism in the cysteine peptidase cathepsin K discovered by computational methods. *Nature communications*, ISSN 2041-1723, feb. 2014, vol. 5, art. no. 3287 (str. 1-10), ilustr. <http://www.nature.com/ncomms/2014/140211/ncomms4287/full/ncomms4287.html>, doi: 10.1038/ncomms4287. [COBISS.SI-ID 1678895]
- BIO24.** KOCMAN, Vojč, PLAVEC, Janez. A tetrahelical DNA fold adopted by tandem repeats of alternating GGG and GCG tracts. *Nature communications*, ISSN 2041-1723, Dec. 2014, vol. 5, str. 1-11, 5831, ilustr. <http://www.nature.com/ncomms/2014/141215/ncomms6831/pdf/ncomms6831.pdf>, doi: 10.1038/ncomms6831. [COBISS.SI-ID 5625626]
- BIO25.** PAVŠIČ, Miha, GUNČAR, Gregor, DJINOVIĆ CARUGO, Kristina, LENARČIČ, Brigita. Crystal structure and its bearing towards an understanding of key biological functions of EpCAM. *Nature communications*, ISSN 2041-1723, 2014, vol. 5, no. 8, art. no. 4764 (str. 1-10), ilustr. <http://www.nature.com/ncomms/2014/140828/ncomms5764/full/ncomms5764.html>, doi: 10.1038/ncomms5764. [COBISS.SI-ID 1764911]

- BIO26.** ŠKET, Primož, POHLEVEN, Jure, KOVANDA, Anja, ŠTALEKAR, Maja, ŽUPUNSKI, Vera, ZALAR, Matja, PLAVEC, Janez, ROGELJ, Boris. Characterization of DNA G-quadruplex species forming from C 9ORF72 G_{sub}4 C_{sub}2 expanded repeats associated with amyotrophic lateral sclerosis and frontotemporal lobar degeneration. *Neurobiology of aging*, ISSN 0197-4580. [Print ed.], [in press] 2014, 21 str., doi: 10.1016/j.neurobiolaging.2014.09.012. [COBISS.SI-ID 27972647]
- BIO27.** NOVINEC, Marko, LENARČIČ, Brigita, BAICI, Antonio. Probing the activity modification space of the cysteine peptidase cathepsin K with novel allosteric modifiers. *PLoS one*, ISSN 1932-6203, 2014, vol. 9, no. 9, art. no. e106642 (str. 1-11), ilustr. <http://www.plosone.org/article/doi/10.1371/journal.pone.0106642> [COBISS.SI-ID 1767215]
- BIO28.** VERBOVŠEK, Urška, MOTALN, Helena, ROTTER, Ana, ATAI, Nadia A., GRUDEN, Kristina, NOORDEN, Cornelis J. F. van, LAH TURNŠEK, Tamara. Expression analysis of all protease genes reveals cathepsin K to be overexpressed in glioblastoma. *PLoS one*, ISSN 1932-6203, 2014, vol. 9, iss. 10, str. 1- 12. <http://dx.doi.org/10.1371/journal.pone.0111819>, doi: 10.1371/journal.pone.0111819. [COBISS.SI-ID 3237711]
- BIO29.** ZUPANČIČ, Klemen, BLEJEC, Andrej, HERMAN, Ana, VEBER, Matija, VERBOVŠEK, Urška, KORŠIČ, Marjan, KNEŽEVIČ, Miomir, ROŽMAN, Primož, LAH TURNŠEK, Tamara, GRUDEN, Kristina, MOTALN, Helena. Identification of plasma biomarker candidates in glioblastoma using an antibody-array-based proteomic approach. *Radiology and oncology*, ISSN 1318-2099, Sep. 2014, vol. 48, no. 3, str. 257-266, III, ilustr. <http://www.degruyter.com/view/j/raon.2014.48.issue-3/raon-2014-0014/raon-2014-0014.xml?format=INT>, doi: 10.2478/raon-2014-0014. [COBISS.SI-ID 31525081]
- BIO30.** KURTOVIČ, Tihana, BRGLES, Marija, LEONARDI, Adrijana, LANG BALIJA, Maja, SAJEVIC, Tamara, KRIŽAJ, Igor, ALL-MAIER, Günter, MARCHETTI DESCHMANN, Martina, HALASSY, Beata. VaSP1, catalytically active serine proteinase from *Vipera ammodytes ammodytes* venom with unconventional active site triad. *Toxicon*, ISSN 0041-0101. [Print ed.], 2014, vol. 77, str. 93-104, doi: 10.1016/j.toxicon.2013.11.007. [COBISS.SI-ID 27269159]
- BIO31.** LEONARDI, Adrijana, SAJEVIC, Tamara, KOVAČIČ, Lidija, PUNGERČAR, Jože, LANG BALIJA, Maja, HALASSY, Beata, TRAMPUŠ-BAKIJA, Alenka, KRIŽAJ, Igor. Hemorrhagin VaH4, a covalent heterodimeric P-III metalloproteinase from *Vipera ammodytes ammodytes* with a potential antitumour activity. *Toxicon*, ISSN 0041-0101. [Print ed.], 2014, vol. 77, str. 141-155, doi: 10.1016/j.toxicon.2013.11.009. [COBISS.SI-ID 27268903]
- BIO32.** STROJNIK, Tadej, ŠMIGOC, Tomaž, LAH TURNŠEK, Tamara. Prognostic value of erythrocyte sedimentation rate and C-reactive protein in the blood of patients with glioma. *Anticancer research*, ISSN 0250-7005, 2014, vol. 34, no. 1, str. 339-347, ilustr. [COBISS.SI-ID 4880703]

PREGLJEDNI ZNANSTVENI ČLANEK / REVIEW ARTICLE

- BIO33.** FONOVIC, Marko, TURK, Boris. Cysteine cathepsins and extracellular matrix degradation. *Biochimica et biophysica acta (G). General subjects*, ISSN 0304-4165. [Print ed.], 2014, vol. 1840, no. 8, str. 2560-2570, doi: 10.1016/j.bbagen.2014.03.017. [COBISS.SI-ID 27616039]
- BIO34.** NOVINEC, Marko, LENARČIČ, Brigita, TURK, Boris. Cysteine cathepsin activity regulation by glycosaminoglycans. *BioMed Research International (Print)*, ISSN 2314-6133, 2014, vol. 2014, str. 309718-1-309718-9, doi: 10.1155/2014/309718. [COBISS.SI-ID 28289831]
- BIO35.** MOLINA, Erika S., PILLAT, Micheli M., MOURA NETO, Vivaldo, LAH TURNŠEK, Tamara, ULRICH, Henning. Glioblastoma stem-like cells : approaches for isolation and characterization. *Journal of cancer stem cell research*, ISSN 2329-5872, 2014, [Vol.] 2, str. 1-19. http://cancerstemcellsresearch.com/index.php?option=com_content&view=article&id=43:glioblastoma-stem-like-cells-approaches-for-isolation-and-characterization&catid=8:articles&Itemid=103, doi: 10.14343/JCSCR.2014.2e1007. [COBISS.SI-ID 3275599]
- BIO36.** KRIŽAJ, Igor. Roles of secreted phospholipases A2 in the mammalian immune system. *Protein peptide letters*, ISSN 0929-8665, 2014, 10 str., doi: 10.2174/0929866521666140819122624. [COBISS.SI-ID 27893799]
- BIO37.** ŠRIBAR, Jernej, OBERČKAL, Jernej, KRIŽAJ, Igor. Understanding the molecular mechanism underlying the presynaptic toxicity of secreted phospholipases A_{sub}2 : an update. *Toxicon*, ISSN 0041-0101. [Print ed.], 2014, vol. 89, str. 9-16, doi: 10.1016/j.toxicon.2014.06.019. [COBISS.SI-ID 27817767]

OBJAVLJENI ZNANSTVENI PRISPEVEK NA KONFERENCI

- BIO38.** ŠKET, Primož, KORBAR, Tjaša, PLAVEC, Janez. Influence of 5'-5' inversion of polarity site within d(TG_{sub}4T) on cation binding. V: XVIth Symposium on Chemistry of Nucleic Acid Component, Český Krumlov, Czech Republic, June 8-13, 2014. HOCEK, Michal (ur.). *Chemistry of nucleic acid components*, (Collection symposium series, vol. 14). Prague: Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic, cop. 2014, str. 205-208, ilustr. [COBISS.SI-ID 5506074]
- BIO39.** PODERGAJS, Neža, MOTALN, Helena, VITTORI, Miloš, LAH TURNŠEK, Tamara. GLIOMA : identificazione di nuovi marcatori di cellule staminali tumorali a scopo diagnostico e terapeutico = GLIOMA : določanje novih biomarkerjev možganskih tumorjev - gliomov za diagnozo in kot nove tarče zdravljenja = GLIOMA : identification of new glioma biomarkers as potential diagnostic and therapeutic targets. V: PASSAMONTI, Sabina (ur.). *Cross-border Italy-Slovenia biomedical research : are we ready for horizon 2020? : conference proceedings with an analysis of innovation management and knowledge transfer potential for a smart specialization strategy = atti della conferenza = zbornik*. 1st printed ed. Trieste: Edizioni Università di Trieste, 2014, str. 56-70, ilustr. [COBISS.SI-ID 3263567]

OBJAVLJENI POVZETEK ZNANSTVENEGA PRISPEVKA NA KONFERENCI (VABLJENO PREDAVANJE) PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTION ABSTRACT (INVITED LECTURE)

- BIO40.** ILC, Gregor, GIACHIN, Gabriele, BILJAN, Ivana, LEGNAME, Giuseppe, PLAVEC, Janez. NMR insights into early stages of structural conversion of human prion proteins related to inherited diseases. V: *5th International Conference on the Development of Biomedical Engineering, June 16-18, 2014, Ho Chi Minh City, Vietnam*. Ho Chi Minh City: [s. n.], 2014, str. 42. [COBISS.SI-ID 5511194]

- BIO41.** KORENČ, Matevž, AMBROŽIČ, Matevž, GUNČAR, Gregor. A structural view of nanobodies : [plenary lecture]. V: Twenty-third Slovenian-Croatian Crystallographic Meeting, 19 - 22 June, 2014, Logar Valley, Hotel Plesnik, Slovenia. KASUNIČ, Marta (ur.), PEVEC, Andrej (ur.). *Book of abstracts [and] programme*. Ljubljana: Faculty of Chemistry and Chemical Technology, 2014, str. 19. [COBISS.SI-ID 1723951]
- BIO42.** STOKA, Veronika, JERIC, Barbara, TURK, Boris, TURK, Vito. Differential behavior of human cathepsin F variant. V: XIVth International Symposium on Proteinases, Inhibitors and Biological Control, Portorož, Slovenia, September 6-10, 2014. STOKA, Veronika (ur.), TURK, Boris (ur.). *Book of abstracts*. Ljubljana: Jožef Stefan Institute, 2014, str. 19. [COBISS.SI-ID 27926823]
- BIO43.** TURK, Boris. Cysteine cathepsins and their diagnostic and therapeutic potential in inflammation-associated diseases. V: XIVth International Symposium on Proteinases, Inhibitors and Biological Control, Portorož, Slovenia, September 6-10, 2014. STOKA, Veronika (ur.), TURK, Boris (ur.). *Book of abstracts*. Ljubljana: Jožef Stefan Institute, 2014, str. 23. [COBISS.SI-ID 27929639]
- BIO44.** ŠKET, Primož, PLAVEC, Janez. Guanine-rich DNA oligonucleotides in solution. V: 7th Central Europe Conference, Katowice, Poland, September 9-12th 2014. *Chemistry towards biology*. Katowice: [s. n.], 2014, str. [1]. [COBISS.SI-ID 5563930]
- BIO45.** KOTAR, Anita, LENARČIČ ŽIVKOVIĆ, Martina, ANDERLUH, Marko, PLAVEC, Janez. The saturation transfer difference NMR studies of mannose-based DC-SIGN antagonists. V: Joint Meeting of The Royal Society of Chemistry and Croatian Chemical Society, Zagreb, Croatia, 28th and 29th April 2014. *Macrocycles Synthesis, Medicinal Chemistry and Biological Activity, Zagreb, Croatia, 28th and 29th April 2014 : Joint Meeting of The Royal Society of Chemistry and Croatian Chemical Society : programme*. [S. l.]: [s. n.], 2014, 1 str. http://www.fidelta.eu/files/7813/9876/2597/Anita_Kotar_abstract.pdf <http://www.fidelta.eu/conferences/macrocycles/abstracts/>. [COBISS.SI-ID 3751025]
- BIO46.** ŠKET, Primož, PLAVEC, Janez. DNA G-quadruplexes : intermediates and cation interactions. V: 16th Central European NMR Symposium and 16th Central European Bruker NMR User Meeting, October 16-17, 2014, Zagreb, Croatia. SMREČKI, Vilko (ur.). *Program and book of abstracts*. Zagreb: Ruđer Bošković Institute, 2014, str. 8. [COBISS.SI-ID 5585434]
- BIO47.** PLAVEC, Janez. NMR structures and cation binding of G-quadruplexes with unique features. V: 32nd Cyprus-Noordwijkerhout-Camerino Symposium, Limassol, Cyprus, May 18-22, 2014. *Trends in drug research : [book of abstracts]*. Limassol: [s. n.], 2011, str. 66. [COBISS.SI-ID 5494554]
- BIO48.** PLAVEC, Janez. G-quadruplexes - NMR insights into structure and cation binding. V: *XXI Round Table on Nucleosides, Nucleotides and Nucleic Acids, 24-28 August 2014, Poznań, Poland*. Poznań: [s. n.], 2014, str. [1]. [COBISS.SI-ID 5552666]

PATENT / PATENT

- BIO49.** JONGSMA, Maarten Anthonie, ŠTRUKELJ, Borut, LENARČIČ, Brigita, GRUDEN, Kristina, TURK, Vito, BOSCH, Hendrik J., STIEKEMA, Willem J. Johannes. *Method for plant protection against insects or nematodes by transformations with a nucleic acid encoding equistatin : patent : EP 0991769 (B1), 2008-12-31*. München: European Patent Office, 2008. 40 str., ilustr. [COBISS.SI-ID 1746033]

PREDAVANJE NA TUJI UNIVERZI / INVITED LECTURE AT FOREIGN UNIVERSITY

- BIO50.** PLAVEC, Janez. *DNA G-quadruplexes : fascinating NMR structures and a pathway to their formation : lecture at the Nankai University, 17. 9. 2014, Tianjin, China*. [COBISS.SI-ID 5562650]
- BIO51.** PLAVEC, Janez. *DNA G-quadruplexes : fascinating NMR structures and a pathway to their formation : lecture at the Northwest University College of Chemistry & Materials Science, 12. 9. 2014, Xi'an, China*. [COBISS.SI-ID 5562394]
- BIO52.** PLAVEC, Janez. *DNA G-quadruplexes : fascinating NMR structures and a pathway to their formation : lecture at the Ruđer Bošković Institute, 18. 11. 2014, Zagreb*. [COBISS.SI-ID 5608218]
- BIO53.** PLAVEC, Janez. *DNA G-quadruplexes : fascinating NMR structures and a pathway to their formation : lecture at the SKLNBD (State Key Laboratory of Natural and Biomimetic Drugs), 10. 9. 2014, Beijing, China*. [COBISS.SI-ID 5562906]
- BIO54.** PLAVEC, Janez. *DNA G-quadruplexes : fascinating NMR structures and pathway to their formation : lecture at the Xiamen University, Xiamen, China, 6 October, 2014*. [COBISS.SI-ID 5599002]
- BIO55.** PLAVEC, Janez. *NMR and its use in understanding G-quadruplex structures : invited lecture at the PhD course in Biomedical Science and Biotechnology, Università degli studi di Udine, 7. 3. 2014, Udine, Italy*. Udine: Università degli studi di Udine, 2014. [COBISS.SI-ID 5448218]
- BIO56.** TURK, Boris. *Protease signaling : cathepsins and their regulation : invited talk*. Würzburg: University of Würzburg, Institute for Molecular Infection Biology, 7. jan. 2014. [COBISS.SI-ID 27410983]
- BIO57.** LAH TURNŠEK, Tamara. *Research perspectives at National Institute of Biology in Slovenia : Universidade Federal do Rio de Janeiro, Centro de Ciências da Saúde, Instituto de Biofísica Carlos Chagas Filho*. Rio de Janeiro, 4. Jun. 2014. [COBISS.SI-ID 3150671]

VABLJENO PREDAVANJE NA KONFERENCI BREZ NATISA / UNPUBLISHED INVITED CONFERENCE LECTURE

- BIO58.** PLAVEC, Janez. *Insights into fascinating structures of G-quadruplexes by NMR spectroscopy : invited lecture at the »Fiber, future, college«, 16. 4. 2014, Kobe Portisland, Japan*. [COBISS.SI-ID 5467930]
- BIO59.** PLAVEC, Janez. *NMR structures and folding of G-quadruplexes : invited lecture at the GDR G-QUADRUPLEX MEETING, University Campus Saint Martin d'Hères, University Grenoble Alpes, 20-21 March 2014*. Grenoble: University Grenoble Alpes, 2014. [COBISS.SI-ID 5453594]
- BIO60.** PLAVEC, Janez. *Research infrastructures : role and vision : invited lecture at the conference »Investments in innovation Techitaly 2014, 3. 12. 2014, Brussels*. [COBISS.SI-ID 5625114]
- BIO61.** PLAVEC, Janez. *Structures and folding of G-quadruplexes : NMR and spectroscopic studies : invited lecture at the A3RONA 2014 China (Asian 3 Roundtable of Nucleic Acids), Xiamen University, Xiamen, China, 17-19 October, 2014*. [COBISS.SI-ID 5598746]
- BIO62.** KOTAR, Anita, PLAVEC, Janez. *Študije antagonistov DC-SIGN na osnovi manoze z NMR spektroskopijo : predavanje na 1. Srečanju slovenskih farmacevtskih kemikov, 25. septembra 2014, v Ljubljani*. [COBISS.SI-ID 5579290]

UREDNIK / EDITORSHIP

- BIO63.** *Biological chemistry*. Turk, Boris (urednik 2008-). Berlin; New York: Walter de Gruyter. ISSN 1431-6730. [COBISS.SI-ID 1541908]
- BIO64.** *Cell death & disease*. Turk, Boris (član uredniškega odbora 2013-). London: Nature Publishing Group, 2010-. ISSN 2041-4889. <http://www.nature.com/cddis/index.html>. [COBISS.SI-ID 24434727]
- BIO65.** *Current pharmaceutical design*. Turk, Boris (gostujoči urednik 2007-). Schiphol: Bentham Science Publishers. ISSN 1381-6128. [COBISS.SI-ID 16094247]
- BIO66.** *Frontiers in oncology*. Turk, Boris (član uredniškega odbora 2013-). Lausanne: Frontiers Editorial Office, 2011-. ISSN 2234-943X. <http://www.frontiersin.org/oncology>. [COBISS.SI-ID 1601583]
- BIO67.** *Global toxin review*. Križaj, Igor (član uredniškega odbora 2005-). [S. l.]: globaltoxin.org, 2005-. <http://globaltoxin.com/portal/>. [COBISS.SI-ID 21976615]
- BIO68.** *Journal of biological engineering*. Dolinar, Marko (član uredniškega odbora 2008-). London: BioMed Central. ISSN 1754-1611. [COBISS.SI-ID 30190597]
- BIO69.** *Journal of venom research*. Križaj, Igor (član uredniškega odbora 2010-). Oxford: 2010-. <http://www.libpubmedia.co.uk/JVR/JVRHome.htm>. [COBISS.SI-ID 23582247]
- BIO70.** *The open toxinology journal*. Križaj, Igor (član uredniškega odbora 2008-). Saif Zone, Sharjah, U.A.E.: Bentham Open, 2008-. <http://www.bentham.org/open/totnj/index.htm>. [COBISS.SI-ID 21915431]
- BIO71.** *Pathology oncology research*. Lah, Tamara (član uredniškega odbora 1997-). Budapest: Tud. Kiadó. ISSN 1219-4956. [COBISS.SI-ID 21115]
- BIO72.** *Poročilo o delu - Nacionalni inštitut za biologijo*. Lah, Tamara (član uredniškega odbora 1995-). Ljubljana: Inštitut za biologijo, 199?-2004. ISSN 1408-3299. [COBISS.SI-ID 68115968]
- BIO73.** *Radiology and oncology*. Lah Turnšek, Tamara (član uredniškega odbora 2007-). Ljubljana: Slovenian Medical Society - Section of Radiology; [Zagreb]: Croatian Medical Association - Croatian Society of Radiology, 1992-. ISSN 1318-2099. <http://ojs.szd.si/index.php/ro/index>. [COBISS.SI-ID 32649472]
- BIO74.** *TheScientificWorldJournal*. Križaj, Igor (član uredniškega odbora 2013-). Boynton Beach (FL): Scientific World, 2001-. ISSN 1537-744X. <http://www.hindawi.com/journals/tswj/>. [COBISS.SI-ID 2607642]
- BIO75.** *Toxicon*. Križaj, Igor (član uredniškega odbora 2006-). [Print ed.]. Oxford: Pergamon press, ISSN 0041-0101. [COBISS.SI-ID 1835012]
- BIO76.** 31st International Specialised Symposium on Yeast, Nova Gorica, Vipava, Slovenia, October 9 -12, 2014, PIŠKUR, Jure, PETROVIČ, Uroš, DOLINAR, Marko, DASHKO, Sofia (člani ured. odbora). *Book of abstracts*. Farum: Jubi kinase, 2014. 227 str. [COBISS.SI-ID 275780352]
- BIO77.** XIVth International Symposium on Proteinases, Inhibitors and Biological Control, Portorož, Slovenia, September 6-10, 2014, STOKA, Veronika (urednik), TURK, Boris (urednik). *Book of abstracts*. Ljubljana: Jožef Stefan Institute, 2014. 136 str. ISBN 978-961-264-056-9. [COBISS.SI-ID 275236352]
- BIO78.** PASSAMONTI, Sabina (glavni in odgovorni urednik), PIŠOT, Rado (urednik), LAH TURNŠEK, Tamara (urednik), PETERLIN, Borut (urednik), GUSTINCICH, Stefano (urednik), STORICI, Paola (urednik). *Conference proceedings with an analysis of innovation management and knowledge transfer potential for a smart specialization strategy : biomedical research : are we ready for Horizon 2020?*. Trieste: Università, 2014. 425 str., ilustr. ISBN 978-88-8303-573-9. http://books.trans2care.eu/biomedicalresearch/biomedical_v.pdf. [COBISS.SI-ID 31501017]
- BIO79.** BIOMolekularec.si [tudi] Dan biomolekularnih znanosti, Ljubljana, 25. september 2014, BAVEC, Aljoša (urednik), BERLEC, Aleš (urednik), CIGIČ, Blaž (urednik), DOLINAR, Marko (urednik), POTOČNIK, Uroš (urednik). *Zbornik povzetkov*. Ljubljana: Slovensko biokemijsko društvo, 2014. ISBN 978-961-91651-9-5. <http://biomolekularec.si/zbornik14.pdf>. [COBISS.SI-ID 275596288]

KATEDRA ZA FIZIKALNO KEMIJO

CHAIR OF PHYSICAL CHEMISTRY

PREDSTOJNIK KATEDRE / HEAD

prof. dr. Andrej Jamnik

SODELAVCI KATEDRE / PERSONNEL

Visokošolski učitelji / Faculty

prof. dr. Marija Bešter Rogač

prof. dr. Barbara Hribar Lee

prof. dr. Andrej Jamnik

prof. dr. Ksenija Kogej

prof. dr. Jurij Lah

izr. prof. dr. Jurij Reščič

prof. dr. Vojeslav Vlachy

Upokojeni visokošolski učitelji / Retired Faculty

prof. dr. Jože Koller

(zaslužni profesor / *Professor Emeritus*)

prof. dr. Ciril Pohar

Visokošolski sodelavci / Assistants

doc. dr. Matjaž Bončina

doc. dr. Janez Cerar

dr. Andrej Godec

doc. dr. Miha Lukšič

doc. dr. Črtomir Podlipnik

doc. dr. Iztok Prislan

dr. Bojan Šarac

doc. dr. Matija Tomšič

izr. prof. dr. Tomaž Urbič

Raziskovalci / Researchers

Mojca Seručnik, univ. dipl. kem. (do 30. 6. 2014)

Tehniki / Technicians

Vesna Arrigler

Mirzet Čuskić (od 1. 3. 2014)

Anton Kelbl

Anton Kokalj (do 6. 1. 2014)

Mladi raziskovalci <i>Young Researchers</i>	Mentor <i>Mentor</i>	Čas usposabljanja <i>Programme Duration</i>	Oblika usposabljanja <i>Degree</i>
Simona Sitar	K. Kogej	2009–2014 (do 31. 3. 2014)	doktorski študij / PhD
Andrej Mernik	J. Lah	2010–2014 (do 30. 4. 2014)	doktorski študij / PhD
Elizabeta Benigar	A. Jamnik	2011–2015	doktorski študij / PhD
Jure Gujt	M. Bešter Rogač	2011–2015	doktorski študij / PhD
Gregor Hostnik	V. Vlachy	2011–2015	doktorski študij / PhD
Matej Huš	A. Jamnik	2011–2015	doktorski študij / PhD
Tomaž Mohorič	V. Vlachy	2012–2016	doktorski študij / PhD
Miha Kastelic	V. Vlachy	2013–2017	doktorski študij / PhD
Tadeja Janc	V. Vlachy	2014–2018	doktorski študij / PhD

Ostali podiplomski študenti, ki niso v rednem delovnem razmerju /

Other Postgraduate Students

San Hadži: doktorski študij (mentor J. Lah)

IZOBRAŽEVALNA IN RAZISKOVALNA DEJAVNOST KATEDRE **EDUCATIONAL AND RESEARCH ACTIVITIES**

IZOBRAŽEVALNA DEJAVNOST / LECTURED COURSES

FKKT / FACULTY OF CHEMISTRY AND CHEMICAL TECHNOLOGY

Bolonjski programi 1. stopnje / *Bologna 1st Cycle Study Programmes*

Kemija / *Chemistry* – UN:

Fizikalna kemija I, II / *Physical Chemistry I, II*

Praktikum iz fizikalne kemije / *Practicals in Physical Chemistry*

Struktura atomov in molekul / *Structure of Atoms and Molecules*

Fizikalna kemija tekočin in raztopin (izbirni predmet) / *Physical Chemistry of Liquids and Solutions (elective course)*

Površinska in koloidna kemija (izbirni predmet) / *Surface and Colloid Chemistry (elective course)*

Makromolekulska kemija (izbirni predmet) / *Macromolecular Chemistry (elective course)*

Biokemija / *Biochemistry* – UN:

Fizikalna kemija I, II / *Physical Chemistry I, II*

Struktura atomov in molekul / *Structure of Atoms and Molecules*

Kemijsko inženirstvo / *Chemical Engineering* – UN:

Kemijska termodinamika / *Chemical Thermodynamics*

Tehniška varnost / *Technical Safety* – UN:

Numerične metode v varnosti I / *Numerical Methods in Technical Safety I*

Delovno okolje: Prezračevanje, Aerosoli, Hrup, Osebna varovalna oprema (OVO) /

Working environment: Ventilation, Aerosols, Noise, Personal protective equipment (PPE)

Kemijska tehnologija / *Chemical Technology* – VS:

Praktikum iz kemije / *General Chemistry – Practical Course*

Fizikalna kemija I, II / *Physical Chemistry I, II*

Osnove regulacije tehnoloških procesov (izbirni predmet) / *Fundamentals of Technological Process Regulation (elective course)*

Predbolonjski dodiplomski programi / *Pre-Bologna Undergraduate Programmes*

Fizikalna kemija / *Physical Chemistry* – UN
Fizikalna kemija II / *Physical Chemistry II* – UN
Praktikum – uvod v prakso / *Introduction to Practical Work* – VS
Merjenje in regulacija / *Measurements and Regulations* – VS
Fizikalna kemija in meritve / *Physical Chemistry and Measurements* – VS
Površinska in koloidna kemija / *Surface and Colloid Chemistry* – UN
Struktura atomov in molekul / *Structure of Atoms and Molecules* – UN
Instrumentalne metode / *Instrumental Methods* – UN
Makromolekulska kemija / *Macromolecular Chemistry* – UN
Merjenje, regulacija, avtomatizacija / *Measurement, Regulations, Automation* – UN
Biofizikalna kemija / *Biophysical Chemistry* – UN
Metodika eksperimentov v fizikalni kemiji / *Methodology of Experiments in Physical Chemistry* – UN

Bolonjski programi 2. stopnje / *Bologna 2nd Cycle Master Study Programmes*

Tehniška varnost / *Technical Safety*:
Numerične metode v varnosti II / *Numerical Methods in Technical Safety II*

Kemija / *Chemistry*:
Numerične metode / *Numerical Methods*
Fizikalna kemija / *Physical Chemistry*
Molekularno modeliranje / *Molecular Modelling*
Eksperimentalna fizikalna kemija / *Experimental Physical Chemistry*
Statistična termodinamika tekočin in raztopin / *Theory of Liquids and Solutions*
Elektrokemija raztopin / *Electrochemistry of Solutions*
Metode sipanja za določanje strukture in dinamike v nanosistemih / *Scattering Methods for Determination of Structure and Dynamics in Nanosystems*
Biofizikalna kemija / *Biophysical Chemistry*
Modeliranje kemijskih sistemov / *Modelling of Chemical Systems*

Kemijsko izobraževanje / *Chemical Education*:
Eksperimenti iz fizikalne kemije v šoli / *School experiments in physical chemistry*

Biokemija / *Biochemistry*:
Biofizikalna kemija I / *Biophysical Chemistry I*
Biofizikalna kemija II / *Biophysical Chemistry II*
Molekularna razlaga bioloških sistemov / *Molecular Interpretation of Biological Systems*

Bolonjski programi 3. stopnje / *Bologna 3rd Cycle Doctoral Study Programmes*

Izbrana poglavja iz eksperimentalne fizikalne kemije / *Selected Topics in Experimental Physical Chemistry*
Teoretične metode v fizikalni kemiji / *Theoretical Methods in Physical Chemistry*

IZVEN FKKT / EXTRAMURAL COURSES

Bolonjski programi 1. stopnje / *Bologna 1st Cycle Study Programmes*

Fizikalna kemija, FFA – Farmacija UN in Laboratorijska biomedicina UN / *Physical Chemistry – Uniform Master Study Programme in Pharmacy and Undergraduate Study Programme in Laboratory Biomedicine*
Fizikalna kemija / *Physical Chemistry*, FMF – UN
Fizikalna kemija / *Physical Chemistry*, PEF – UN

Predbolonjski dodiplomski programi / *Pre-Bologna Undergraduate Programmes*

Fizikalna kemija / *Physical Chemistry*, NTF – UN
Fizikalna kemija / *Physical Chemistry*, PEF – UN
Fizikalna kemija II / *Physical Chemistry II*, PEF – UN
Vaje iz fizikalne kemije / *Physical Chemistry Laboratory*, FMF – UN

Bolonjski programi 2. stopnje / *Bologna 2nd Cycle Master Study Programmes*

Fizikalna kemija / *Physical Chemistry*, NTF
Fizikalna kemija polimerov / *Physical Chemistry of Polymers*, NTF
Fizikalna kemija / *Physical Chemistry*, BF

Bolonjski programi 3. stopnje / *Bologna 3rd Cycle Doctoral Study Programmes*

Koloidna kemija / *Colloid Chemistry* – UL Interdisciplinarni doktorski študijski program
Bioznanosti / *UL Interdisciplinary Doctoral Study Programme in Biosciences*
Nanotehnologije in nanobiologija / *Nanotechnology and Nanobiology* – UL
Interdisciplinarni doktorski študijski program Bioznanosti / *UL Interdisciplinary Doctoral Study Programme in Biosciences*
Biomolekularna termodinamika / *Biomolecular Thermodynamics* – UL Interdisciplinarni doktorski študijski program Biomedicina / *UL Interdisciplinary Doctoral Study Programme in Biomedicine*

RAZISKOVALNA DEJAVNOST / RESEARCH ACTIVITIES

1. Raziskave elektrolitov in polielektrolitov / *Research of Electrolytes and Polyelectrolytes*

Transportne in strukturne lastnosti vodnih raztopin fullerenskih elektrolitov / *Transport and Structural Properties of Aqueous Solutions of Fullerene Electrolytes*

Interakcije med večvalentnimi ioni in topilom / *Multivalent Ion Solvent Interactions*

Termodinamične in transportne lastnosti različnih stereoregularnih polielektrolitov / *Thermodynamic and Transport Properties of Different Stereoregular Polyelectrolytes*

Termodinamične in transportne lastnosti raztopin ionenov z različnimi protioni / *Transport Properties of Ionene Solutions with Different Counter Ions*

Raziskave soli polianetolsulfonske kisline / *Studies of Polyanetholesulfonic Acid and its Alkaline Salts*

Interakcije med površinsko aktivnimi snovmi in polielektroliti / *Interactions Between Surface Active Agents and Polyelectrolytes*

Termodinamske raziskave asociacijskih procesov v raztopinah elektrolitov / *Thermodynamic Investigations of Association Processes in Electrolyte Solutions*

Ionske tekočine/*Ionic Liquids*

2. Lastnosti raztopin biološko pomembnih molekul / *Solution Properties of Biologically Important Molecules*

Termodinamika molekulskega prepoznavanja biološko pomembnih molekul / *Thermodynamics of Molecular Recognition of Biologically Important Molecules*

Termodinamska stabilnost in interakcije biološko pomembnih molekul v povezavi z njihovimi strukturnimi značilnostmi / *Thermodynamic Stability and Interactions of Biologically Important Molecules and Correlation with their Structural Properties*

Termodinamične in strukturne lastnosti raztopin proteinov HSA in lizocima / *Thermodynamic and Structural Properties of Protein Solutions*

Strukturne lastnosti raztopin komponent bakterijskega izvenceličnega polimernega matriksa / *Structural Properties of Solutions of Bacterial Extracellular Polymeric Substances*

3. Raziskave strukturnih in dinamičnih lastnosti koloidnih sistemov in kompleksnih fluidov / *Structure and Dynamics of Colloidal Systems and Complex Fluids*

4. Teoretične raziskave vodnih raztopin / *Theoretical Research of Aqueous Solutions*

Adsorpcija vodnih raztopin elektrolitov v neurejeni snovi; Dinamika in struktura / *Electrolyte Adsorption in a Disordered Material; Dynamics and Structure*

Lastnosti vode v zaprtih in nehomogenih sistemih / *Properties of Water in Confined and Non-homogeneous Systems*

Modeli vode in raziskave hidratacije preprostih topljencev / *Modelling Water and Solvation of Simple Solutes*

Vpliv dielektrične nezveznosti na lastnosti vodnih raztopin micelov / *Potential of Mean Force Between Charged Colloids: Effect of Dielectric Discontinuities*

Mešanice modelnih tekočin z adhezivnim privlačnim medmolekulskim potencialom / *Mixtures of Model Liquids. Molecules with Adhesive Intermolecular Potential*

Stabilnost proteinov v vodnih raztopinah soli / *Stability of Proteins in Aqueous Solutions of Salts*

5. Vpliv temperature in dodane soli na termodinamiko micelizacije površinsko aktivnih snovi / *Thermodynamic Study of Salt And Temperature Induced Micelle Formation of Surfactants*

POMEMBNI DOSEŽKI SODELAVCEV KATEDRE / SIGNIFICANT ACHIEVEMENTS OF THE CHAIR STAFF

NAGRADE, PRIZNANJA / AWARDS, RECOGNITIONS

- Prof. dr. Jurij Lah, Preglova nagrada za izjemne raziskovalne dosežke na področju kemije in sorodnih ved / *Pregl Award for outstanding research achievements in chemistry and related sciences*
- Andrej Godec, Priznanje FKKT za najboljšega pedagoga 2013/2014 na študijski smeri Kemijska tehnologija

ČLANSTVO V MEDNARODNIH UREDNIŠKIH ODBORIH / MEMBERSHIP IN INTERNATIONAL EDITORIAL BOARDS

- M. Bešter Rogač, članica uredniškega odbora / *Editorial Board Member, Journal of Molecular Liquids, Elsevier, Amsterdam, 2008-*
- V. Vlachy, urednik / *Editor, Journal of Condensed Matter Physics, ICMP, Lviv, Ukraine, 2011-*
- M. Bešter Rogač, področna urednica / *Associate Editor, Acta Chimica Slovenica, 2003-*
- K. Kogej, članica uredniškega odbora / *Editorial Board Member, Acta Chimica Slovenica, 2013-*

DRUGO / OTHER

- M. Bešter-Rogač, predsednica komisije za ženske v znanosti pri Ministrstvu za izobraževanje, znanost in šport / *President of the commission for women in science at the Ministry of education, science and sport.*

RAZISKOVALNA OPREMA / RESEARCH EQUIPMENT

- Diferenčni dinamični kalorimeter N-DSC II (CSC, ZDA) / *Nano II Differential Scanning Calorimeter II (CSC, USA)*
- Diferenčni dinamični kalorimeter Nano DSC Instrument (TA Instruments, New Castle, DE, ZDA) / *Nano Differential Scanning Calorimeter (TA Instruments, New Castle, DE, USA)*
- Titracijski mikrokolorimeter VP-ITC (Microcal, ZDA) / *Isothermal Titration Microcalorimeter VP-ITC (Microcal, USA)*
- Titracijski mikrokolorimeter Nano DSC Instrument (TA Instruments, New Castle, DE, ZDA) / *Isothermal Titration Microcalorimeter (TA Instruments, New Castle, DE, USA)*
- Titracijski kalorimeter: 2277 Thermal Activity Monitor, ThermoMetric/ *Titration Calorimeter: 227 Thermal Activity Monitor, ThermoMetric*
- Kalorimeter / *LKB 10700 (Flow, Batch) Calorimeter*
- UV-VIS Spektrofotometer Cary BIO 100 (Varian, Australia)
- UV-VIS Spektrofotometer Cary BIO 1 (Varian, Australia)
- UV-VIS Spektrofotometer Cary BIO 50 (Varian, Australia)
- CD Spectrometer 62A DS (Aviv, ZDA)
- Fluorimeter: Luminiscenčni Spektrometer LS 50, Perkin Elmer / *Fluorimeter: Luminescence Spectrometer LS 50, Perkin Elmer*
- Fluorimeter: Luminiscenčni Spektrometer LS 55, Perkin Elmer / *Fluorimeter: Luminescence Spectrometer LS 55, Perkin Elmer*
- Sistem za merjenje ozkokotnega rentgenskega sipanja / *Small Angle X-Ray Scattering Instrument*
- Membranski osmometer Knauer / *Membrane Osmometer; Knauer*
- Osmometer na parni tlak: K-7000, Knauer / *Vapour Pressure Osmometer; K-7000 Knauer*
- Sistem za merjenje gostote tekočin DMA 5000 Paar z nihajočo kapilaro prostornine 1 ml / *Vibrating Tube Densimeter; DMA 5000 Paar (1 ml Cell)*
- Sistem za precizno merjenje električne prevodnosti raztopin (predtermostat Lauda WK 1400, termostat Lauda UB 40 (+/- 0,003 C), LCR Agilent 4284A, DMM Agilent 3458A z uporovnim termometrom Pt100, set različnih celic) / *System for High-Performance Electrical Conductivity Measurements of Solutions (Circular Cooler LAUDA WK 1400, Thermostat LAUDA UB40 (+/- 0.003C), LCR Agilent 4284A, DM Agilent 4284A, DM Agilent 3458A Attached to Pt100, Set of Conductivity Cells)*
- Sistem za merjenje dinamičnega in statičnega sipanja laserske svetlobe 3D DLS, LS Instruments / *3D DLS Spectrometer; LS Instruments*
- Diferenčni difraktometer DnDc 2010, Brookhaven Instruments / *Differential Diffractometer DnDc 2010, Brookhaven Instruments*
- TV100K termostatirana dvojna enota za gelsko elektroforezo ter Syngen G:BOX temnica s kame-ro / *TV100K Cooled Twin-Plate Mini-Gel Electrophoresis Unit & Syngen G:BOX Darkroom with a Camera*
- Računalniška gruča iz 20 štirijedrnih 64-bitnih Intel Core i5 2500 procesorjev / *Twenty -Node Computer Cluster Based on Quad-Core Intel Core i5 2500 CPU*
- Računalniška gruča iz 13 štirijedrnih 64-bitnih Intel Q9550 procesorjev / *Thirteen- Node Computer Cluster Based on Quad-Core Intel Q9550 CPUs*
- Sistem za merjenje viskoznosti (ViscoSystem AVS 370. SI Analytics GmbH, Nemčija, termostat Lauda ECO silver and DLK 10, Nemčija) / *Viscometer Systems (ViscoSystem AVS 370 (SI Analytics GmbH, Germany and Thermostat (Lauda ECO Silver and DLK 10, Germany)*
- Visokotlačna tekočinska kromatografija Knauer / *HPLC System Knauer*
- GPGPU Nvidia Tesla C2075

RAZISKOVALNI PROGRAMI IN PROJEKTI / RESEARCH PROGRAMMES AND PROJECTS

RAZISKOVALNI PROGRAMI / RESEARCH PROGRAMMES

P1-0201 Fizikalna kemija / *Physical Chemistry*
Vodja programa / *Principal Researcher*: V. Vlachy

TEMELJNI RAZISKOVALNI PROJEKTI / BASIC RESEARCH

J1-4148 Solvatacija in vpliv narave ionov v bioloških sistemih / *Solvation and Ion Specific Effects in Biological Systems* – do 30. 6. 2014
Vodja programa / *Principal Researcher*: V. Vlachy

J1-4236 Načrtovanje, izdelava in vrednotenje biomimetičnih nanokompozitnih sistemov za učinkovito obnovo tkiv / *Design, formulation and characterization of biomimetic nanocomposite systems for effective tissue regeneration* – do 30. 6. 2014
Vodja programa / *Principal Researcher*: J. Kristl, UL FFA, Marija Bešter Rogač, UL FKKT

RAZVOJNI PROJEKTI / INDUSTRIAL RESEARCH AND DEVELOPMENT

BIO 02/2011 Postavljanje platforme za fizikalno-kemijsko karakterizacijo proteinskih učinkovin / *Setting up the Platform for Physico-Chemical Characterization of Protein Substances*
Nosilec / *Principal Researcher*: J. Lah
Financer / *Sponsored by*: Lek d.d.

Pogodba št. I/8-106259/2008 Študij in analiza farmacevtskih materialov / *Studies and Analysis of Pharmaceutical Materials*
Nosilec / *Principal Researcher*: J. Koller
Financer / *Sponsored by*: Krka d.d.

Pogodba št. 11047-8/2014-6 Možnosti uporabe kromatografske in kalorimetrične analize proteome plazme v diagnostične namene / *Coupling chromatography and calorimetry to probe plasma proteome for diagnosis*
Nosilec / *Principal Researcher*: I. Prislán (FKKT), U. Černigoj (BIA Separations)
Financer / *Sponsored by*: Javni sklad RS za razvoj kadrov in štipendije, Evropski socialni sklad

MEDNARODNO SODELOVANJE NA PODROČJU IZOBRAŽEVANJA / INTERNATIONAL COOPERATION IN THE FIELD OF EDUCATION

- A. Godec, glavni mentor slovenske gimnazijske ekipe na mednarodni kemijski olimpijadi v Hanoi, Vietnam, 2014 / *Head Mentor of the Slovenian Team at the International Chemistry Olympiad, Hanoi, Vietnam, 2014*
- M. Huš, mentor za kemijo slovenske srednješolske ekipe na evropski naravoslovni olimpijadi v Atenah, Grčija, 2014 / *Chemistry Mentor of the Slovenian Team at European Science Olympiad (EUSO), Athens, Greece, 2014*
- I. Prislán, mentor znanstvene ekipe Fakultete za kemijo in kemijsko tehnologijo na Tehnologijadi, Crikvenica, Hrvaška, 2014 / *Mentor of the Scientific Team of Faculty of Chemistry and Chemical Technology at the Tehnologijada, Crikvenica, Croatia, 2014*
- Nebojša Zec, Basileus student from December 1st 2014, University of Novi Sad, Serbia
- Neus Ripoll Torres, Erasmus student from October 1st 2013 until June 30th 2014, University of Valencia, Spain.

MEDNARODNO ZNANSTVENO SODELOVANJE / INTERNATIONAL SCIENTIFIC COOPERATION

VEČSTRANSKO MEDNARODNO SODELOVANJE / MULTILATERAL COOPERATION

- COST MP-0802 *Self-Assembled Guanosine Structures for Molecular Electronic Devices*
Koordinator / Coordinator: J. Lah
- COST CM-1101 *Colloidal Aspects of Nanoscience for Innovative Processes and Materials*
Nosilka / Principal Researcher: M. Bešter Rogač
- COST CM-1206 *Exil – Exchange on Ionic Liquids*
Nosilka / Principal Researcher: M. Bešter Rogač

BILATERALNO MEDNARODNO SODELOVANJE / BILATERAL COOPERATION

- Slovenija – ZDA
(NIH)
Slovenija – USA
(NIH Grant)
Solvatacija v bioloških sistemih/ *Solvation in Biology*
Nosilca / Principal Researchers: V. Vlachy, K. A. Dill (Stony Brook University, and Laufer Center for Physical and Quantitative Biology, NY, USA) – do 1. 10. 2014
- Slovenija – ZDA
Slovenija – USA
Modeli vode ter hidratacija preprostih in sestavljenih topljencev / *Models of Water and Hydration of Simple and Complex Solutes*
Nosilec / Principal Researcher: V. Vlachy
- Slovenija – Flandrija
Slovenija – Flanders
Moduli toksin-antitoksin: Funkcija, struktura in termodinamika / *Toxin-Antitoxin Modules: Function, Structure and Thermodynamics*
Nosilec / Principal Researcher: J. Lah
- Slovenija – Hrvaška
Slovenija – Croatia
Interakcije majhnih organskih molekul z nukleinskimi kislinami: Sinteza, strukturne značilnosti in termodinamika / *Interactions of Small Organic Molecules with Nucleic Acids: Synthesis, Structural Features and Thermodynamics*
Nosilec / Principal Researcher: J. Lah
- Slovenija – Finska
Slovenija – Finland
Študij vodnih raztopin izotaktične polimetakrilne kisline z metodo sipanja svetlobe / *Light Scattering Study of Aqueous Isotactic Poly(Methacrylic Acid) Solutions*
Nosilec / Principal Researcher: K. Kogej
- Slovenija – Ukrajina
Slovenija – Ukraine
Vpliv elektrostatskih interakcij na hidratacijo makromolekul / *Influence of Hydrophobic and Coulomb Interactions on Macromolecule Hydration*
Nosilec / Principal Researcher: V. Vlachy
- Slovenija – Srbija
Slovenija – Serbia
Strukturni prehodi proteinov in njihovo prepoznavanje z majhnimi molekulami: Termodinamika v povezavi s funkcijo / *Structural Transitions of Proteins and Their Recognition by Small Molecules: Thermodynamics in Correlation with Function*
Nosilec / Principal Researcher: J. Lah
- Slovenija – Koreja
Slovenija – Korea
Raziskave hidratacije površine v povezavi s procesom vezanja liganda na protein. / *Understanding the role of the surface hydration in protein-ligand docking.*
Nosilec / Principal Researcher: B. Hribar Lee
- Slovenija – Rusija
Slovenija – Russia
Vpliva velikosti in strukture ionov na združevanje ionov v raztopinah: Ionske tekočine kot modelni sistem / *Influence of Ion Size and Structure on the Association Processes in Solutions: The Case of Ionic Liquids*
Nosilec / Principal Researcher: M. Bešter-Rogač

DRUGE OBLIKE MEDNARODNEGA SODELOVANJA / OTHER FORMS OF INTERNATIONAL COOPERATION

VABLJENA PREDAVANJA TUJCEV NA UL FKKT / INVITED LECTURERS AT UL FCCT

- Prof. dr. Chaok Seok, Seoul National University, Seoul, Korea: Napoved strukture proteina in interakcij s programi GALAXY / *Prediction of protein structure and interactions by GALAXY programs*, February 2014
- Prof. dr. Natalie Malikova, University Pierre and Marie Curie, Paris, France: Molekulska struktura in dinamika v tekočinah in raztopinah: prispevki metode sipanja nevtronov / *Molecular structure and dynamics in liquids and solutions: contributions of neutron scattering*, March 2014
- Prof. dr. Ken A. Dill, Stony Brook University, New York, USA: Biofizika zakonov celične rasti / *The biophysics of cellular growth laws*, April 2014
- Prof. dr. Alexander Apelblat, Ben Gurion University of the Negev, Beer Sheva, Israel, seminarji/ seminars: Nekateri vidiki električne prevodnosti simetričnih in asimetričnih močnih in šibkih elektrolitov v vodi in čistih organskih topilih / *Some aspects of electrical conductivity of symmetrical and unsymmetrical strong and weak electrolytes in water and pure organic solvents.*; Univerzalne krivulje limitnih prevodnosti v mešanih topilih in Waldnov produkt / *The universal curves of limiting conductance in mixed solvents and the Walden products*, June 2014
- Prof. dr. Artur J. Valente, University of Coimbra, Coimbra, Portugal: Surfaktant-ciklodekstrin gostitelj-gost supramolekularne strukture/Surfactant-cyclodextrins host-guest supramolecular structures, December 2014

BIBLIOGRAFIJA 2014 / REFERENCES 2014

IZVIRNI ZNANSTVENI ČLANEK / ORIGINAL SCIENTIFIC ARTICLE

- FK1.** BEŠTER-ROGAČ, Marija. Ageing of water or dissolution of glass : an electrical conductivity study. *Acta chimica slovenica*, ISSN 1318-0207. [Tiskana izd.], 2014, vol. 61, no. 4, str. 875-881, ilustr. <https://journals.matheo.si/index.php/ACSI/article/view/1150/315>. [COBISS.SI-ID 1536087747]
- FK2.** SHEIKH, Israr A., LUKŠIČ, Miha, FERSTENBERG, Richard, CULPEPPER-MORGAN, Joan A. SPICE/K2 synthetic marijuana-induced toxic hepatitis treated with N-acetylcysteine. *The American journal of case reports*, ISSN 1941-5923, 2014, vol. 15, str. 584-588. <http://www.amjcaserep.com/download/index/idArt/891399>, doi: 10.12659/AJCR.891399. [COBISS.SI-ID 1536140227]
- FK3.** ČERU, Slavko, ŠKET, Primož, PRISLAN, Iztok, LAH, Jurij, PLAVEC, Janez. A new pathway of DNA G-quadruplex formation. *Angewandte Chemie*, ISSN 1433-7851. [Print ed.], 2014, vol. 53, issue 19, str. 4881-4884, ilustr. <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/anie.201400531/pdf>, doi: 10.1002/anie.201400531. [COBISS.SI-ID 1701423]
- FK4.** POLAK, Andraž, TAREK, Mounir, TOMŠIČ, Matija, VALANT, Janez, POKLAR ULRIH, Nataša, JAMNIK, Andrej, KRAMAR, Peter, MIKLAVČIČ, Damijan. Electroporation of archaeal lipid membranes using MD simulations. V: MIKLAVČIČ, Damijan (ur.), TEISSIE, Justin (ur.), NEUMANN, Eberhard (ur.). *Bio-Electroporation*. (Bioelectrochemistry, ISSN 1567-5394, vol. 100 (Dec. 2014)). [Amsterdam]: Elsevier, 2014, vol. 100, str. 18-26, ilustr., doi: 10.1016/j.bioelechem.2013.12.006. [COBISS.SI-ID 4362104]
- FK5.** DOGŠA, Iztok, TOMŠIČ, Matija, OREHEK, Janez, BENIGAR, Elizabeta, JAMNIK, Andrej, STOPAR, David. Amorphous supramolecular structure of carboxymethyl cellulose in aqueous solution at different pH values as determined by rheology, small angle X-ray and light scattering. *Carbohydrate polymers*, ISSN 0144-8617. [Print ed.], 2014, vol. 111, str. 492-504, doi: 10.1016/j.carbpol.2014.04.020. [COBISS.SI-ID 4392568]
- FK6.** BRAČIČ, Matej, PÉREZ, Lourdes, MARTINEZ-PARDO, Rosa Infante, KOGEJ, Ksenija, HRIBERNIK, Silvo, ŠAUPERL, Olivera, FRAS ZEMLJIČ, Lidija. A novel synergistic formulation between a cationic surfactant from lysine and hyaluronic acid as an antimicrobial coating for advanced cellulose materials. *Cellulose*, ISSN 0969-0239, 2014, vol. 21, issue 4, str. 2647-2663. <http://link.springer.com/article/10.1007%2Fs10570-014-0338-8>, doi: 10.1007/s10570-014-0338-8. [COBISS.SI-ID 17938454]
- FK7.** URBIČ, Tomaž. Ions increase strength of hydrogen bond in water. *Chemical Physics Letters*, ISSN 0009-2614. [Print ed.], 2014, vol. 610/611, no. 1, str. 159-162, ilustr. http://ac.els-cdn.com/S0009261414005594/1-s2.0-S0009261414005594-main.pdf?tid=c74cf004-17f4-11e4-b483-00000a0b0f01&acdnat=1406730261_b2ec12a575a0342868a063da7176d6f, doi: 10.1016/j.cplett.2014.06.054. [COBISS.SI-ID 1748015]
- FK8.** ŠARAC, Bojan, BEŠTER-ROGAČ, Marija, LAH, Jurij. Thermodynamics of micellization from heat-capacity measurements. *ChemPhysChem*, ISSN 1439-4235. [Print ed.], 2014, vol. 15, no. 9, str. 1827-1833, ilustr. <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/cphc.201400096/supinfo>, doi: 10.1002/cphc.201400096. [COBISS.SI-ID 1703727]
- FK9.** KROFLIČ, Ana, ŠARAC, Bojan, CERKOVNIK, Janez, BEŠTER-ROGAČ, Marija. Hydrophobicity of counterions as a driving force in the self-assembly process : dodecyltrimethylammonium chloride and parabens. *Colloids and surfaces. A, Physico-chemical and Engineering Aspects*, ISSN 0927-7757. [Print ed.], 2014, vol. 460, no. 1, str. 108-117, ilustr. http://ac.els-cdn.com/S0927775714001307/1-s2.0-S0927775714001307-main.pdf?tid=f7c6d39e-9487-11e3-afba-00000aacb35d&acdnat=1392279925_3dfd41bcd545e0b24bcdcd53eb2_335e, doi: 10.1016/j.colsurfa.2014.02.002. [COBISS.SI-ID 1679407]

- FK10.** ANŽLOVAR, Alojz, KOGEJ, Ksenija, CRNJAK OREL, Zorica, ŽIGON, Majda. Impact of inorganic hydroxides on ZnO nanoparticle formation and morphology. *Crystal growth & design*, ISSN 1528-7483, Jul. 30, 2014, vol. 14, iss. 9, str. 4262-4269, ilustr. <http://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/cg401870e>, doi: 10.1021/cg401870e. [COBISS.SI-ID 37568005]
- FK11.** BEŠTER-ROGAČ, Marija. Kariere z ovirami - ženske v znanosti. *Dialogi*, ISSN 0012-2068, 2014, letn. 50, št. 10, str. 103-118, ilustr. [COBISS.SI-ID 1536190915]
- FK12.** BENEDIK, Evgen, SKRT, Mihaela, PODLIPNIK, Črtomir, POKLAR ULRIH, Nataša. Binding of flavonoids to Staphylococcal enterotoxin B. *Food and chemical toxicology*, ISSN 0278-6915, 2014, vol. 74, str. 1-8, doi: 10.1016/j.fct.2014.08.012. [COBISS.SI-ID 4417400]
- FK13.** MOHORIC, Tomaž, URBIČ, Tomaž, HRIBAR, Barbara. The application of the integral equation theory to study the hydrophobic interaction. *The Journal of chemical physics*, ISSN 0021-9606, 2014, vol. 140, no. 2, art. no. 024502 (6 str.), ilustr. <http://scitation.aip.org/docserver/fulltext/aip/journal/jcp/140/2/1.4858398.pdf?expires=1389601296&id=id&acname=guest&checksum=8A41A2B61D5D95840C5C7F172819B40F>, doi: 10.1063/1.4858398. [COBISS.SI-ID 1667119]
- FK14.** URBIČ, Tomaž, DIAS, Cristiano L. Properties of the Lennard-Jones dimeric fluid in two dimensions : an integral equation study. *The Journal of chemical physics*, ISSN 0021-9606, 2014, vol. 140, no. 9, art. no. 094703 (str. 1-7), ilustr. <http://scitation.aip.org/docserver/fulltext/aip/journal/jcp/140/9/1.4867289.pdf?expires=1394178219&id=id&acname=guest&checksum=C954684899B591430035162E469F860A>, doi: 10.1063/1.4867289. [COBISS.SI-ID 1685295]
- FK15.** HUŠ, Matej, URBIČ, Tomaž. The hydrophobic effect in a simple isotropic water-like model : Monte Carlo study. *The Journal of chemical physics*, ISSN 0021-9606, 2014, vol. 140, no. 14, art. no. 144904 (str. 1-8), ilustr. <http://scitation.aip.org/docserver/fulltext/aip/journal/jcp/140/14/1.4870514.pdf?expires=1397539547&id=id&acname=guest&checksum=4510A0B11AF69B62BFA8353010EE7D29>, doi: 10.1063/1.4870514. [COBISS.SI-ID 1701935]
- FK16.** URBIČ, Tomaž, DIAS, Cristiano L. Hydration of non-polar anti-parallel β -sheets. *The Journal of chemical physics*, ISSN 0021-9606, 2014, vol. 140, no. 16, art. no. 165101 (str. 1-6), ilustr. <http://scitation.aip.org/docserver/fulltext/aip/journal/jcp/140/16/1.4871663.pdf?expires=1398409213&id=id&acname=guest&checksum=032EEACACE862CEB5B4445CCE8F31A33>, doi: 10.1063/1.4871663. [COBISS.SI-ID 1704239]
- FK17.** AUPIČ, Jana, URBIČ, Tomaž. Thermodynamics and structure of a two-dimensional electrolyte by integral equation theory. *The Journal of chemical physics*, ISSN 0021-9606, 2014, vol. 140, no. 18, art. no. 184509 (str. 1-8), ilustr. <http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jcp/140/18/10.1063/1.4875346>, doi: 10.1063/1.4875346. [COBISS.SI-ID 1707567]
- FK18.** MOHORIC, Tomaž, HRIBAR, Barbara, VLACHY, Vojko. Effects of the translational and rotational degrees of freedom on the hydration of simple solutes. *The Journal of chemical physics*, ISSN 0021-9606, 2014, vol. 140, no. 18, art. no. 184510 (str. 1-7), ilustr. <http://scitation.aip.org/docserver/fulltext/aip/journal/jcp/140/18/1.4875280.pdf?expires=1400132190&id=id&acname=guest&checksum=F36ED599283FE83872AB149769FEC65D>, doi: 10.1063/1.4875280. [COBISS.SI-ID 1708079]
- FK19.** HUŠ, Matej, MUNAO, Gianmarco, URBIČ, Tomaž. Properties of a soft-core model of methanol : an integral equation theory and computer simulation study. *The Journal of chemical physics*, ISSN 0021-9606, 2014, vol. 141, no. 16, art. no. 164505 (str. 1-8), ilustr. <http://scitation.aip.org/docserver/fulltext/aip/journal/jcp/141/16/1.4899316.pdf?expires=1414566707&id=id&acname=guest&checksum=E95EB0B8C2EF4E0D791D71A084BEDDBC>, doi: 10.1063/1.4899316. [COBISS.SI-ID 1536004803]
- FK20.** MEDOŠ, Žiga, BEŠTER-ROGAČ, Marija. Thermodynamics of the micellization process of carboxylates : a conductivity study. *Journal of Chemical Thermodynamics*, ISSN 0021-9614, str. 1-26, ilustr. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021961414003826#>, doi: 10.1016/j.jct.2014.12.011. [COBISS.SI-ID 1536125379]
- FK21.** GUJT, Jure, BEŠTER-ROGAČ, Marija, HRIBAR, Barbara. An investigation of ion-pairing of alkali metal halides in aqueous solutions using the electrical conductivity and the Monte Carlo computer simulation methods. *Journal of molecular liquids*, ISSN 0167-7322. [Print ed.], 2014, vol. 190, no. 1, str. 34-41, ilustr. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S016773221300322X>, doi: 10.1016/j.molliq.2013.09.025. [COBISS.SI-ID 1643567]
- FK22.** HOSTNIK, Gregor, BONDAREV, Dmitrij, VOHLÍDAL, Jiri, ČEBAŠEK, Sašo, ŽAGAR, Ema, VLACHY, Vojko, CERAR, Janez. Transport properties and ion binding in aqueous solutions of alkali metal salts of poly(thiophen-3-ylacetic acid). *Journal of molecular liquids*, ISSN 0167-7322. [Print ed.], vol. 198, str. 173-180, ilustr. http://ac.els-cdn.com/S0167732214002852/1-s2.0-S0167732214002852-main.pdf?tid=23e64eb0-0845-11e4-b949-00000aacb35f&acdnat=1405005557_b931e811c34c27a10f550875f64f8e0a, doi: 10.1016/j.molliq.2014.04.042. [COBISS.SI-ID 1739311]
- FK23.** BEŠTER-ROGAČ, Marija, STOPPA, Alexander, BUCHNER, Richard. Ion association of imidazolium ionic liquids in acetonitrile. *The journal of physical chemistry. B, Condensed matter, materials, surfaces, interfaces & biophysical*, ISSN 1520-6106, 2014, vol. 118, no. 5, str. 1426-1435, ilustr. <http://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/jp412344a>, doi: 10.1021/jp412344a. [COBISS.SI-ID 1668143]
- FK24.** LUKŠIČ, Miha, FENNEL, Christopher J., DILL, Ken A. Using interpolation for fast and accurate calculation of ion-ion interactions. *The journal of physical chemistry. B, Condensed matter, materials, surfaces, interfaces & biophysical*, ISSN 1520-6106, 2014, vol. 118, no. 28, str. 8017-8025, ilustr. <http://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/jp501141j>, doi: 10.1021/jp501141j. [COBISS.SI-ID 1744431]
- FK25.** JANIČAK, J., TOMŠIČ, Matija, LUNDBERG, Dan, OLOFSSON, Gerd, PICULELL, L., SCHILLÉN, K. Soluble aggregates in aqueous solutions of polyion-surfactant ion complex salts and a nonionic surfactant. *The journal of physical chemistry. B, Condensed matter, materials, surfaces, interfaces & biophysical*, ISSN 1520-6106, 2014, vol. 118, no. 32, str. 9745-9756, ilustr. <http://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/jp411701g>, doi: 10.1021/jp411701g. [COBISS.SI-ID 1753135]
- FK26.** BENIGAR, Elizabeta, DOGŠA, Iztok, STOPAR, David, JAMNIK, Andrej, KRALJ CIGIČ, Irena, TOMŠIČ, Matija. Structure and dynamics of a polysaccharide matrix : aqueous solutions of bacterial levan. *Langmuir*, ISSN 0743-7463, 2014, vol. 30, issue 14, str. 4172-4182, doi: 10.1021/la500830j. [COBISS.SI-ID 4381304]
- FK27.** POLAK, Andraž, TAREK, Mounir, TOMŠIČ, Matija, VALANT, Janez, POKLAR ULRIH, Nataša, JAMNIK, Andrej, KRAMAR, Peter, MIKLAVČIČ, Damijan. Structural properties of archaeal lipid bilayers : small-angle x-ray scattering and molecular dynamics simulation study. *Langmuir*, ISSN 0743-7463, 2014, vol. 30, no. 28, str. 8308-8315, ilustr. <http://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/la5014208>, doi: 10.1021/la5014208. [COBISS.SI-ID 1752879]
- FK28.** REŠČIČ, Jurij, KOVAČEVIČ, Davor, TOMŠIČ, Matija, JAMNIK, Andrej, AHUALLI, Silvia, BOHINC, Klemen. Experimental and theoretical study of the silica particle interactions in the presence of multivalent rod-like ions. *Langmuir*, ISSN 0743-7463, 2014, vol. 30, iss. 32, str. 9717-9725, doi: 10.1021/la501683t. [COBISS.SI-ID 4739179]
- FK29.** TOMAŠIČ, Tihomir, RABBANI, Said Rahnamaye, GOBEC, Martina, MLINARIČ-RAŠČAN, Irena, PODLIPNIK, Črtomir, ERNST, Beat, ANDERLUH, Marko. Branched [alpha]-D-mannopyranosides; a new class of potent FimH antagonists. *Med-ChemComm*, ISSN 2040-2503, 2014, vol. 2014, iss. 5, str. 1247-1253, ilustr. <http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2014/md/c4md00093e#!divAbstract>, <http://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2014/md/c4md00093e>, doi: 10.1039/C4MD00093E. [COBISS.SI-ID 3666289]

- FK30.** KURTJAK, Mario, URBIČ, Tomaž. A simple water model in the presence of inert Lennard-Jones obstacles II : the hydrophobic effect. *Molecular Physics*, ISSN 0026-8976, str. 1-12, ilustr. [http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/00268976.2014.973919](http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/00268976.2014.973919#.VG2Cik10yUk). [COBISS.SI-ID 1536048835]
- FK31.** KURTJAK, Mario, URBIČ, Tomaž. Water in the presence of inert Lennard-Jones obstacles. *Molecular Physics*, ISSN 0026-8976, 2014, vol. 112, no. 8, str. 1132-1148, ilustr. [http://www.tandfonline.com/doi/pdf/10.1080/00268976.2013.836608](http://www.tandfonline.com/doi/pdf/10.1080/00268976.2013.836608#.UzU04U3jiUk). [COBISS.SI-ID 1620271]
- FK32.** BONČINA, Matjaž, LUKŠIČ, Miha, SERUČNIK, Mojca, VLACHY, Vojko. Thermodynamic analysis of the interaction of partially hydrophobic cationic polyelectrolytes with sodium halide salts in water. *Molecular Physics*, ISSN 0026-8976, 2014, vol. 112, no. 9/10, str. 1222-1229, ilustr. [http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/00268976.2013.871365](http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/00268976.2013.871365#.U3RJQ00U-Uk). [COBISS.SI-ID 1707823]
- FK33.** GUJT, Jure, PODLIPNIK, Črtomir, BEŠTER-ROGAČ, Marija, SPOHR, Eckhard. Ion mobility and clustering of sodium hydroxybenzoates in aqueous solutions : a molecular dynamics simulation study. *PCCP. Physical chemistry chemical physics*, ISSN 1463-9076, 2014, vol. 16, issue 36, str. 19314-19326. <http://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2014/cp/c4cp02425g>, doi: 10.1039/c4cp02425g. [COBISS.SI-ID 1751343]
- FK34.** HUŠ, Matej, URBIČ, Tomaž. Thermodynamics and the hydrophobic effect in a core-softened model and comparison with experiments. *Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics*, ISSN 1539-3755, 2014, vol. 90, no. 2, art. no. 022115 (str. 1-10), ilustr. <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.90.022115>, doi: 10.1103/PhysRevE.90.022115. [COBISS.SI-ID 1753391]
- FK35.** HUŠ, Matej, URBIČ, Tomaž. Existence of a liquid-liquid phase transition in methanol. *Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics*, ISSN 1539-3755, 2014, vol. 90, no. 6, art. no. 062306 (str. 1-12), ilustr. <http://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.90.062306>, doi: 10.1103/PhysRevE.90.062306. [COBISS.SI-ID 1536097475]
- FK36.** KALYUZHNYI, Yu. V., VLACHY, Vojko. Model for a mixture of macroions, counterions, and co-ions in a waterlike fluid. *Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics*, ISSN 1539-3755, 2014, vol. E90, no. 12, art. no. 012308 (str. 1-7), ilustr. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.90.012308>, doi: 10.1103/PhysRevE.90.012308. [COBISS.SI-ID 1748271]
- FK37.** PRELESNIK, Simona, ASEYEV, Vladimir, KOGEJ, Ksenija. Differences in association behavior of isotactic and atactic poly(methacrylic acid). *Polymer*, ISSN 0032-3861. [Print ed.], 2014, vol. 55, no. 3, str. 848-854, ilustr. <http://ac.els-cdn.com/S0032386114000081/1-s2.0-S0032386114000081-main.pdf?tid=8f60b564-8d92-11e3-8bcf-00000aacb35e&acdnat=1391514816ce938b8a1258d2523f55cacfb5546b26>, doi: 10.1016/j.polymer.2014.01.007. [COBISS.SI-ID 1675823]
- FK38.** PRELESNIK, Simona, ASEYEV, Vladimir, KOGEJ, Ksenija. Microgel-like aggregates of isotactic and atactic poly(methacrylic acid) chains in aqueous alkali chloride solutions as evidenced by light scattering. *Soft matter*, ISSN 1744-683X, 2014, vol. 10, no. 39, str. 7712-7722, ilustr. <http://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2014/sm/c4sm01448k>, doi: 10.1039/c4sm01448k. [COBISS.SI-ID 1754927]

OBJAVLJENI ZNANSTVENI PRISPEVEK NA KONFERENCI (VABLJENO PREDAVANJE) / PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTION (INVITED LECTURE)

- FK39.** BAUMGARTNER, Saša, KOCBEK, Petra, KRISTL, Julijana, POTRČ, Tanja, MIKAC, Urška, SEPE, Ana, ROŠIČ, Romana, PELIPENKO, Jan, BEŠTER-ROGAČ, Marija. Physicochemical characteristics of polymer based drug delivery systems: the influence on formulation process and on drug release. V: *17th International Pharmaceutical Technology Symposium, September 8-10, 2014, the Marmara Hotel, Antalya//Turkey : Pharmaceutical Nanotechnology: Innovations, Therapeutic Possibilities, Technological Challenges : Current Status, Future Direction and Regulatory Aspects of Biotechnology and Biosimilar Products, Dry Powder Inhalers, Medical Devices & CE Authorization : [abstract book]*. [S. l.: s. n.], 2014, str. 34-37, ilustr. [COBISS.SI-ID 3752561]

OBJAVLJENI ZNANSTVENI PRISPEVEK NA KONFERENCI / PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTION

- FK40.** CERAR, Janez. Neelektrostatski prispevki k razredčnim entalpijam polielektrolitov in entalpijam mešanja polielektrolitov s preprostimi solmi : [predavanje]. V: *Slovenski kemijski dnevi 2014, Maribor, 11.-12. september 2014*. KRAVANJA, Zdravko (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.), NOVAK-PINTARIČ, Zorka (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2014, Maribor, 11. - 12. september 2014*. Maribor: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2014, str. 1-8, ilustr. [COBISS.SI-ID 1786415]

OBJAVLJENI POVZETEK ZNANSTVENEGA PRISPEVKA NA KONFERENCI (VABLJENO PREDAVANJE) PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTION ABSTRACT (INVITED LECTURE)

- FK41.** BEŠTER-ROGAČ, Marija, MEDOŠ, Žiga, ŠARAC, Bojan. Specific ion effect and thermodynamics : the case of micellization : [invited lecture]. V: *20th International Symposium on Surfactants in Solution*. MARQUES, E. F. (ur.), VALENTE, Artur J. M. (ur.), GONÇALVES, J. M. (ur.). *Book of abstracts : SIS 2014*. [S. l.]: FCTUC: Organizing Committee of 20th SIS, [2014?], str. 26. [COBISS.SI-ID 1730863]
- FK42.** BONČINA, Matjaž, PRISLAN, Iztok, LAH, Jurij. What drives binding-coupled folding of G-quadruplex DNA? : [plenary lecture]. V: *7th Central Europe Conference, Katowice, Katowice, Poland, September 9-12th 2014*. *Chemistry towards biology*. Katowice: [s. n.], 2014, str. [1], ilustr. [COBISS.SI-ID 1536158403]

SAMOSTOJNI ZNANSTVENI SESTAVEK ALI POGlavJE V MONOGRAFSKI PUBLIKACIJI INDEPENDENT SCIENTIFIC COMPONENT PART OR A CHAPTER IN A MONOGRAPH

- FK43.** KHUTSISHVILI, Irine, JOHNSON, Sarah E., REILING, Calliste, PRISLAN, Iztok, LEE, Hui-Ting, MARKY, Luis A. Interaction of DNA intramolecular structures with their complementary strands : a thermodynamic approach for the control of gene expression. V: *ERDMANN, Volker A. (ur.), MARKIEWICZ, Wojciech T. (ur.), BARCISZEWSKI, Jan (ur.). Chemical biology of nucleic acids : fundamentals and clinical applications*, (RNA technologies). Heidelberg [etc.]: Springer, cop. 2014, str. 367-383, ilustr. http://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-642-54452-1_20. [COBISS.SI-ID 1719855]

- FK44.** KROFLIČ, Ana, ŠARAC, Bojan, BEŠTER-ROGAČ, Marija. Thermodynamics and specific ion effects in connection with micellization of ion surfactants. V: KRALCHEVSKY, Peter (ur.), MILLER, Reinhard (ur.), RAVERA, Francesca (ur.). *Colloid and interface chemistry for nanotechnology*, (Progress in colloid and interface science, 4). Boca Raton; London; New York: CRC Press, cop. 2014, str. 475-502. <http://books.google.si/books?id=9ZcAAAAAQBAAJ&pg=PA547&lpg=PA547&dq=colloid+and+interfa+ce+chemistry+for+nanotechnology&source=bl&ots=TIKplum4iA&sig=VITffA5ptCV4q3UzlGW1d2FBHPI&hl=sl&sa=X&ei=os4AUvnxJ8TStAaXt4HgCg&ved=0CH0Q6AEwCQ#v=onepage&q=colloid%20and%20interface%20chemistry%20for%20nanotechnology&f=false>. [COBISS.SI-ID 5292570]
- FK45.** HRIBAR, Barbara, VLACHY, Vojko. Polyelectrolytes : simulation. V: SAVINELL, Robert F. (ur.), KEN-ICHIRO, Ota (ur.), KREYSA, Gerhard (ur.). *Encyclopedia of applied electrochemistry*. New York: Springer, 2014, str. 1650-1655. http://link.springer.com/referenceworkentry/10.1007/978-1-4419-6996-5_24. [COBISS.SI-ID 1793071]

SREDNJEŠOLSKI, OSNOVNOŠOLSKI ALI DRUGI UČBENIK Z RECENZIJO / SECONDARY AND PRIMARY SCHOOL TEXTBOOK OR OTHER TEXTBOOK

- FK46.** SMRDU, Andrej, ZMAZEK, Boris, VRTAČNIK, Margareta, GLAŽAR, Saša A., GODEC, Andrej, FERK SAVEC, Vesna. *Kemija 1 : e-učbenik za kemijo v 1. letniku gimnazij*. Ljubljana: Zavod Republike Slovenije za šolstvo, 2014. ISBN 978-961-03-0136-3. <http://eucbeniki.sio.si/kemija1/>. [COBISS.SI-ID 273952000]
- FK47.** SAJOVIC, Irena, WISSIAK GRM, Katarina Senta, GODEC, Andrej, KRALJ, Benjamin, SMRDU, Andrej, VRTAČNIK, Margareta, GLAŽAR, Saša A.. *Kemija 8 : e-učbenik za kemijo v 8. razredu osnovne šole*. Ljubljana: Zavod Republike Slovenije za šolstvo, 2014. ISBN 978-961-03-0134-9. <http://eucbeniki.sio.si/kemija8/>. [COBISS.SI-ID 273953024]
- FK48.** GLAŽAR, Saša A., GODEC, Andrej, VRTAČNIK, Margareta (avtor, ilustrator), WISSIAK GRM, Katarina Senta. *Moja prva kemija 1 : kemija za 8. razred dvojezične osnovne šole = Első kémiam 1 : kémia az általános iskola 8. osztálya számára*. 2. izd. Ljubljana: Modrijan, 2014. 2 zv. (110, 110 str.), ilustr. ISBN 978-961-241-043-8. ISBN 978-961-241-044-5. [COBISS.SI-ID 273275904]
- FK49.** GLAŽAR, Saša A., GODEC, Andrej, VRTAČNIK, Margareta (avtor, ilustrator), WISSIAK GRM, Katarina Senta. *Moja prva kemija 2 : kemija za 9. razred dvojezične osnovne šole = Első kémiam 2 : kémia a kétnyelvű általános iskola 9. osztálya számára*. 3. izd. Ljubljana: Modrijan, 2014-. Zv. <1->, ilustr. ISBN 978-961-241-099-5. [COBISS.SI-ID 273276672]
- FK50.** VRTAČNIK, Margareta (avtor, ilustrator, fotograf), WISSIAK GRM, Katarina Senta (avtor, fotograf), GLAŽAR, Saša A., GODEC, Andrej (avtor, fotograf). *Moja prva kemija, Učbenik za 8. in 9. razred osnovne šole*. 1. izd. Ljubljana: Modrijan, 2014. 239 str., ilustr. ISBN 978-961-241-719-2. [COBISS.SI-ID 265611776]

DRUGO UČNO GRADIVO / OTHER EDUCATIONAL MATERIAL

- FK51.** GLAŽAR, Saša A., GODEC, Andrej, VRTAČNIK, Margareta (avtor, fotograf), WISSIAK GRM, Katarina Senta. *Il mio primo approccio alla chimica 1 : chimica per la classe VIII della scuola elementare, Quaderno attivo*. 8a ed. Ljubljana: Modrijan, 2014. 116 str., ilustr. ISBN 978-961-241-193-0. [COBISS.SI-ID 273325312]
- FK52.** GLAŽAR, Saša A., GODEC, Andrej, VRTAČNIK, Margareta (avtor, ilustrator), WISSIAK GRM, Katarina Senta. *Il mio primo approccio alla chimica 2 : chimica per la classe IX della scuola elementare, Quaderno attivo*. 7a ed. Ljubljana: Modrijan, 2014. 96 str., ilustr. ISBN 978-961-241-236-4. [COBISS.SI-ID 273325568]
- FK53.** GLAŽAR, Saša A., GODEC, Andrej, VRTAČNIK, Margareta (avtor, fotograf), WISSIAK GRM, Katarina Senta. *Moja prva kemija 1 : kemija za 8. razred osnovne šole, Delovni zvezek*. 11. izd. Ljubljana: Modrijan, 2014. 116 str., ilustr. ISBN 978-961-6465-82-3. [COBISS.SI-ID 273374208]
- FK54.** GLAŽAR, Saša A., GODEC, Andrej, VRTAČNIK, Margareta (avtor, ilustrator), WISSIAK GRM, Katarina Senta. *Moja prva kemija 2 : kemija za 9. razred osnovne šole, Delovni zvezek*. 8. izd. Ljubljana: Modrijan, 2014. 96 str., ilustr. ISBN 978-961-241-045-2. [COBISS.SI-ID 266673408]
- FK55.** VRTAČNIK, Margareta (avtor, ilustrator), WISSIAK GRM, Katarina Senta, GLAŽAR, Saša A., GODEC, Andrej. *Moja prva kemija, Delovni zvezek za 8. in 9. razred osnovne šole*. 1. izd. Ljubljana: Modrijan, 2014. 2 zv. (92, 61 str.), ilustr. ISBN 978-961-241-718-5. ISBN 978-961-241-787-1. [COBISS.SI-ID 265611264]

PREDAVANJE NA TUJI UNIVERZI / INVITED LECTURE AT FOREIGN UNIVERSITY

- FK56.** PRISLAN, Iztok. *Calorimetry in life sciences : University of Omaha, Department of Physics, Omaha, 3. 10. 2014*. 2014. [COBISS.SI-ID 1536138435]
- FK57.** TOMŠIČ, Matija. *Scattering methods in structural studies of various liquid systems : Laboratory of Colloid and Surface Chemistry, Department of Inorganic and Analytical Chemistry, University of Geneva, Tuesday 1st of April 2014*. [2014]. [COBISS.SI-ID 1699375]

UREDNIK / EDITORSHIP

- FK58.** *Acta chimica slovenica*. Bešter-Rogač, Marija (član uredniškega odbora 2003-). [Tiskana izd.]. Ljubljana: Slovensko kemijsko društvo = Slovenian Chemical Society, 1993-. ISSN 1318-0207. <http://acta.chem-soc.si/>. [COBISS.SI-ID 14086149]
- FK59.** *Condensed matter physics*. Vlachy, Vojislav (član uredniškega odbora 2011-). Kiev: Institute for Condensed Matter Physics. ISSN 1607-324X. [COBISS.SI-ID 33562117]
- FK60.** *Journal of molecular liquids*. Bešter-Rogač, Marija (član uredniškega odbora 2008-). [Print ed.]. Amsterdam: Elsevier. ISSN 0167-7322. [COBISS.SI-ID 15382277]
- FK61.** Poletna šola kemijskih znanosti 2014, CERKOVNIK, Janez, GODEC, Andrej (avtor, urednik), KORENČ, Matevž, KOZJEK-ŠKOFIC, Irena, KRALJ, Polonca, ZUPANČIČ-VALANT, Andreja. Poletna šola kemijskih znanosti 2014. Ljubljana: Založba FKKT, 2014. 1 optični disk (DVD-ROM), barve. ISBN 978-961-6756-53-2. [COBISS.SI-ID 274589952]

KATEDRA ZA ORGANSKO KEMIJO

CHAIR OF ORGANIC CHEMISTRY

PREDSTOJNIK KATEDRE / HEAD

prof. dr. Andrej Petrič

SODELAVCI KATEDRE / PERSONNEL

Visokošolski učitelji / Faculty

prof. dr. Marijan Kočevar

prof. dr. Janez Košmrlj

prof. dr. Andrej Petrič

doc. dr. Franc Požgan

akademik prof. dr. Branko Stanovnik, znanstveni svetnik
(upokojen 50% / *retired 50%*)

prof. dr. Jurij Svete

doc. dr. Bogdan Štefane

Upokojeni visokošolski učitelji / Retired Faculty

prof. dr. Božo Plesničar

(zaslužni profesor (upokojen) / *Professor Emeritus (retired)*)

prof. dr. Slovenko Polanc (upokojen / *retired*)

prof. dr. Boris Šket (upokojen / *retired*)

Visokošolski sodelavci / Assistants

izr. prof. dr. Janez Cerkovnik

prof. dr. Darko Dolenc

doc. dr. Uroš Grošelj

izr. prof. dr. Marjan Jereb

dr. Berta Košmrlj

izr. prof. dr. Franci Kovač

doc. dr. Krištof Kranjc

Raziskovalci / Researchers

Helena Brodnik

dr. Martin Gazvoda

dr. Marko Krivec

Dona Pavlovič

dr. Benjamin Prek

dr. Damijana Urankar

Tehniki / Technicians

Branka Miklavčič

Irena Povalej

Zdenka Sakelšek

Tatjana Toporiš Stipanović

Mladi raziskovalci <i>Young Researchers</i>	Mentor <i>Mentor</i>	Čas usposabljanja <i>Programme Duration</i>	Oblika usposabljanja <i>Degree</i>
Marko Krivec	M. Kočevar	2010–2014 (do 30. 4. 2014)	doktorski študij / <i>PhD</i>
Aljoša Bolje	J. Košmrlj	2011–2015	doktorski študij / <i>PhD</i>
Luka Rejc	A. Petrič	2011–2015	doktorski študij / <i>PhD</i>
Gregor Strle	J. Cerkovnik	2011–2015	doktorski študij / <i>PhD</i>
Luka Šenica	J. Svete	2011–2015	doktorski študij / <i>PhD</i>
Jure Vajs	J. Košmrlj	2011–2015	doktorski študij / <i>PhD</i>
Jona Mirnik	J. Svete	2012–2016	doktorski študij / <i>PhD</i>
Sebastijan Ričko	B. Stanovnik	2012–2016	doktorski študij / <i>PhD</i>
Eva Pušavec	J. Svete	2013–2017	doktorski študij / <i>PhD</i>
Urša Tomažin	J. Svete	2014–2018	doktorski študij / <i>PhD</i>

Ostali podiplomski študenti, ki niso v rednem delovnem razmerju /
Other Postgraduate Students

Benjamin Prek (zaposlen v CO EN-FIST): doktorski študij (mentor B. Stanovnik)

Helena Brodnik: doktorska študentka (mentor B. Štefane)

Miha Virant: magistrski študent (mentor J. Košmrlj)

Jasmin Suljagić: Erasmus Mundus Action 2 Basileus IV programme iz EU (10 mesecev, Univerza v Tuzli, BiH).

IZOBRAŽEVALNA IN RAZISKOVALNA DEJAVNOST KATEDRE **EDUCATIONAL AND RESEARCH ACTIVITIES**

IZOBRAŽEVALNA DEJAVNOST / LECTURED COURSES

FKKT / FACULTY OF CHEMISTRY AND CHEMICAL TECHNOLOGY

Bolonjski programi 1. stopnje / *Bologna 1st Cycle Study Programmes*

Kemija / *Chemistry* – UN:

Organska kemija I–III / *Organic Chemistry I–III*

Praktikum iz organske kemije / *Practical Course in Organic Chemistry*

Organska analiza / *Organic Analysis*

Spektroskopija / *Spectroscopy*

Sintezna organska kemija (izbirni predmet) / *Organic Chemistry Synthesis (elective course)*

Principi zelene kemije (izbirni predmet) / *Principles of Green Chemistry (elective course)*

Kemija heterocikličnih spojin (izbirni predmet) / *Chemistry of Heterocyclic Compounds (elective course)*

Biokemija / *Biochemistry* – UN:

Organska kemija I, II / *Organic Chemistry I, II*

Spektroskopske metode v biokemiji / *Spectroscopic Methods in Biochemistry*

Kemijsko inženirstvo / *Chemical Engineering* – UN:

Organska kemija / *Organic Chemistry*

Tehniška varnost / *Technical Safety* – UN:

Kemija / *Chemistry*

Kemijska tehnologija / *Chemical Technology* – VS:
Organska kemija I, II / *Organic Chemistry I, II*
Praktikum iz kemije I / *Practicals in Chemistry I*
Sintezne tehnike v organski kemiji (izbirni predmet) / *Synthetic Techniques in Organic Chemistry (elective course)*
Organska analitika in spektroskopija (izbirni predmet) / *Organic Analysis and Spectroscopy (elective course)*

Bolonjski programi 2. stopnje / *Bologna 2nd Cycle Study Programmes*

Kemija / *Chemistry* – UN:
Moderne NMR metode (izbirni predmet) / *Modern NMR Methods (elective course)*
Organska kemija / *Organic Chemistry*
Biološko pomembne spojine (izbirni predmet) / *Biologically Important Compounds (elective course)*
Moderne metode organske sinteze (izbirni predmet) / *Modern methods in organic synthesis*
Biokemija / *Biochemistry* – UN:
Usmerjena organska sinteza s kemijo zdravil / *Target Oriented Synthesis with Drug Chemistry*
Kemija biomolekul (izbirni predmet) / *Chemistry of Biomolecules (elective course)*
Bioorganska kemija (temeljni izbirni) / *Bioorganic Chemistry (core elective course)*
Izbrana poglavja iz organske kemije / *Selected Topics in Organic Chemistry*

Bolonjski programi 3. stopnje / *Bologna 3rd Cycle Doctoral Study Programmes*

Izbrana poglavja iz organske kemije / *Selected Topics in Organic Chemistry*
Izbrana poglavja iz heterociklične kemije / *Selected Topics in Heterocyclic Chemistry*
Študij mehanizmov transformacij organskih spojin / *Studies of Organic Transformation Mechanisms*

IZVEN FKKT / EXTRAMURAL COURSES

Bolonjski programi 1. stopnje / *Bologna 1st Cycle Study Programmes*

Organska kemija / *Organic Chemistry*, FFA – UN
Splošna in organska kemija / *General and Organic Chemistry*, FFA – UN
Organska kemija / *Organic Chemistry*, BF – UN
Teoretske osnove tiskarskih procesov / *Fundamental Theoretical Principles of Printing Processes*, NTF – UN
Kemija II / *Chemistry II*, NTF – VS
Kemija / *Chemistry*, PEF – UN

Bolonjski programi 2. stopnje / *Bologna 2nd Cycle Master Study Programmes*

Organska kemija / *Organic Chemistry*, NTF

RAZISKOVALNA DEJAVNOST / RESEARCH ACTIVITIES

- Sinteza novih reagentov na osnovi 3-dimetilaminopropenoatov in sorodnih enaminov ter aplikacija teh spojin za sintezo novih heterocikličnih sistemov / *Synthesis of New Reagents Based on 3-Dimethylaminopropenoates and Related Enamines and their Application in the Synthesis of New Heterocyclic Systems*
- Sinteza naravnih spojin in njihovih analogov z enaminsko metodologijo / *Synthesis of Natural Products and their Analogues Using the Enamine Methodology*
- Sinteza in transformacije kiralnih spojin / *Synthesis and Transformations of Chiral Compounds*
- 1,3-Dipolarne cikloadicije / *1,3-Dipolar Cycloadditions*

- Stereoselektivna sinteza / *Stereoselective Synthesis*
- Sinteza heterocikličnih analogov peptidov / *Synthesis of Heterocyclic Analogues of Peptides*
- Kombinatorna in paralelna sinteza / *Combinatorial and Parallel Synthesis*
- Organokataliza / *Organocatalysis*
- Katalizirane 1,3-dipolarne cikloadicije / *Catalyzed 1,3-Dipolar Cycloadditions*
- Novi pristopi k sintezi antibakterijsko aktivnih molekul / *New Approaches towards the Synthesis of Molecules with Antibacterial Activity*
- Sinteza in evalvacija novih potencialnih citostatikov diazenskega tipa / *Synthesis and Evaluation of Novel Potential Diazene-Type Cytostatic Agents*
- Inovativna kataliza: novi procesi in selektivnost / *Innovative Catalysis: New Processes and Selectivities*
- Reakcije pod mikrovalovi in visokimi pritiski / *Microwave-Assisted Reactions and Reactions under High-Pressure*
- Študij halogeniranja organskih molekul, novi reagenti, novi pristopi / *Studies on Halogenation of Organic Compounds, New Reagents, and New Approaches*
- Raziskave reakcijskih pogojev za organske transformacije / *Studies on the Reaction Conditions for Organic Transformations*
- Priprava in uporaba imobiliziranih (polimernih) reagentov / *Preparation and Application of Immobilized (Polymeric) Reagents*
- Študij mehanizmov oksidacij organskih spojin / *Studies on the Oxidation Mechanisms of Organic Compounds*
- Študij mehanizmov fototransformacij organskih halogenidov / *Studies on the Mechanisms of Phototransformation of Halogenated Organic Compounds*
- Sinteza in karakterizacija molekularnih sond za medicinske raziskave / *Synthesis and Characterization of Molecular Probes for Medical Research*
- Izomerni "Klik" ligandi za komplekse kovin prehoda / *Isomeric "Click" Ligands For Transition Metal Complexes*
- Študij transformacij izbranih organskih polutantov v okolju / *Studies on the transformation of selected organic pollutants in the environment.*
- Razvoj reagentov za kemijske pretvorbe epoksi funkcionaliziranih kromatografskih monolitov / *Development of reagents for chemical transformation of epoxy functionalized chromatographic monoliths.*
- Zelena kemija / *Green Chemistry*

POMEMBNI DOSEŽKI SODELAVCEV KATEDRE / SIGNIFICANT ACHIEVEMENTS OF THE CHAIR STAFF

NAGRADE, PRIZNANJA / AWARDS, RECOGNITIONS

Javna agencija za raziskovalno dejavnost RS (ARRS) je v avgustu 2014 objavila izbor izjemnih dosežkov s področja kemije v letu 2013, v katerega je uvrstila tudi prispevek programske skupine P1-0230 Organska kemija: Sinteza, struktura in aplikacija, objavljen v *Chemical Reviews* in katerega prvi avtor je Janez Cerkovnik (Javna predstavitev je bila na FKKT 11. decembra 2014).

Krkine nagrade 2014

Jože Mužerlin (mentor: akad. prof. dr. Branko Stanovnik): **Sinteza in reaktivnost pirazolo[1,5-*a*]-, imidazo[1,2-*a*]- in triazolo[1,5-*a*]pirimidinov iz substituiranih 3-(dimetilamino)prop-2-en-1-onov** / *Synthesis and reactivity of pyrazolo[1,5-*a*]-, imidazo[1,2-*a*]-, and triazolo[1,5-*a*]pyrimidines from substituted 3-(dimethylamino)prop-2-en-1-ones.*

Kaja Gosak (mentor M. Jereb): Elektrofилna uvedba trifluorometilne skupine v fenole / *Electrophilic introduction of trifluoromethylthio group into phenols*

Prešernova nagrada FKKT, UL 2014:

- Miha Drev (mentor J. Svete) Sinteza novih pirazolo[1,5-*a*]pirimidin-3-karboksamidov / *Synthesis of novel pyrazolo[1,5-*a*]pyrimidin-3-carboxamides.*

Članstvo v akademijah / Membership in Academies

- M. Tišler, redni član Slovenske akademije znanosti in umetnosti / *Full Member, Slovenian Academy of Sciences and Arts*
- B. Stanovnik, redni član Slovenske akademije znanosti in umetnosti / *Full Member, Slovenian Academy of Sciences and Arts*
- M. Tišler, član Evropske akademije znanosti in umetnosti / *Member, European Academy of Sciences and Arts*
- B. Stanovnik, član Evropske akademije znanosti in umetnosti / *Member, European Academy of Sciences and Arts*
- J. Svete, član Evropske akademije znanosti in umetnosti / *Member, European Academy of Sciences and Arts*

Drugo / Other

- J. Cerkovnik, član uredniškega sveta (*Associate Editor*), *Acta Chimica Slovenica*
- J. Košmrlj, član uredniškega odbora (*Member of the Editorial Board*), *Acta Chimica Slovenica*
- M. Kočevar, IUPAC Fellow od 2010.
- M. Kočevar, član uredniškega odbora (*Member of the Editorial Board*), *Periodica Polytechnica. Chemical Engineering.*
- M. Kočevar, član uredniškega odbora (*Member of the Editorial Board*), *American Journal of Chemistry.*
- M. Kočevar, član uredniškega odbora (*Member of the Editorial Board*), *Current Organic Chemistry.*
- M. Kočevar, član uredniškega odbora (*Member of the Editorial Board*), *E-Journal of Chemistry.*
- M. Kočevar, član uredniškega odbora (*Member of the Editorial Board*), *Pure and Applied Chemical Sciences.*
- M. Kočevar, član uredniškega odbora (*Member of the Editorial Board*), *Current Green Chemistry.*
- F. Kovač, član uredniškega odbora (*Member of the Editorial Board*), *Glasnik hemičara i tehnologa Bosne i Hercegovine.*
- K. Kranjc, član uredniškega sveta (*Associate Editor*), *Acta Chimica Slovenica*
- F. Požgan, član uredniškega odbora (*Member of the Editorial Board*), *Glasnik hemičara i tehnologa Bosne i Hercegovine.*
- F. Požgan, član uredniškega odbora (*Member of the Editorial Board*), *Recent patents on catalysis (od 2012 do 2014).*
- B. Stanovnik je član senata za akreditacijo pri Svetu Republike Slovenije za visoko šolstvo (od 2007) / *Member of the Senate for Accreditation, The Council for Higher Education of the Republic of Slovenia (since 2007)*
- B. Stanovnik je častni občan občine Vrhnika (2011-) / *Honorary Citizen of Vrhnika (since 2011).*
- B. Stanovnik je častni član Italijanskega kemijskega društva (2011-) / *Honorary Member of the Italian Chemical Society (since 2011)*
- B. Stanovnik, Član znanstvenega odbora (Member of the Scientific Committee), *European Colloquia of Heterocyclic Chemistry;*
- B. Stanovnik, Član znanstvenega odbora (Member of the Scientific Committee), *Blue Danube Symposia of Heterocyclic Chemistry;*
- B. Stanovnik, Član uredniškega odbora in znanstveni urednik (Member of the Board and Scientific Editor), *Electronic Journal ARKIVOC;*

- B. Stanovnik, Član uredniškega odbora (Member of the Advisory Board), *Advances in Heterocyclic Chemistry*
- B. Stanovnik, Član znanstvenega odbora (Member of the Scientific Committee), *TRAMECH Transmediterranean Symposia on Heterocyclic Chemistry*;
- B. Stanovnik, Član znanstvenega odbora (Member of the International Advisory Committee). *IBN SINA International Conferences on Pure and Applied Heterocyclic Chemistry*
- B. Stanovnik, Član znanstvenega odbora (Member of the Scientific Committee) *Eurasian Meetings on Heterocyclic Chemistry*
- B. Stanovnik, Član uredniškega odbora (Member of the Advisory Board), *Trends in Heterocyclic Chemistry*
- B. Stanovnik, Predstojnik Oddelka za mednarodno sodelovanje in znanstveno koordinacijo (Head of the Unit for International Cooperation and Scientific Coordination), Slovenian Academy of Sciences and Arts, Ljubljana, Slovenia
- B. Stanovnik, Dekan Razreda za naravoslovne znanosti Evropske akademije znanosti in umetnosti (Dean of the Class for Natural Sciences), European Academy of Sciences and Arts, Salzburg, Austria and legat EASA for Slovenia for the period 2010-2014
- B. Stanovnik, 1998-2004 Član svetovalnega odbora (Member of the Scientific Advisory Board), Organization for the Prohibition of Chemical Weapons, The Hague, The Netherlands
- B. Stanovnik, Član uredniškega odbora (Member of the Editorial Board), *International Journal of Organic Chemistry*, [Print ed.]. Irvine, CA: Scientific Research Pub.
- B. Stanovnik, Član uredniškega odbora (Member of the Editorial Board), *Journal of Heterocyclic Chemistry*, Provo, Utah, etc.: HeteroCorporation.
- B. Stanovnik, Član uredniškega odbora (Member of the Editorial Board), *Molecules*, Berlin: Springer; Basel: Molecular Diversity Preservation International
- B. Stanovnik, Član uredniškega odbora (Member of the Editorial Board), *Targets in Heterocyclic Systems Chemistry and Properties*. Roma: Società Chimica Italiana
- B. Stanovnik, Član uredniškega odbora (Member of the Editorial Board), *Trends in Heterocyclic Chemistry*. Trivandrum: Research Trends
- B. Stanovnik, Član uredniškega odbora (Member of the Editorial Board), *Croatica Chemica Acta*. Zagreb: Hrvatsko kemijsko društvo
- B. Stanovnik, Chairman of the Advisory Editorial Board, *Acta Chimica Slovenica*
- B. Stanovnik, Član uredniškega odbora (Member of the Editorial Board), *International Journal of Advanced Chemistry*
- B. Stanovnik, Član uredniškega odbora (Member of the Editorial Board), *Advances in Organic Chemistry*
- B. Stanovnik, Član uredniškega odbora (Member of the Editorial Board), *International Journal of Advanced Chemistry*
- B. Stanovnik, Član uredniškega odbora (Member of the Editorial Board), *Universal Organic Chemistry*
- B. Stanovnik, Član uredniškega odbora (Member of the Editorial Board), *International Journal of Pharmaceutical, Biological and Chemical Sciences*
- B. Stanovnik, Član uredniškega odbora (Member of the Editorial Board), *Medirranian Journal of Heterocyclic Chemistry*
- B. Stanovnik, Član uredniškega odbora (Member of the Editorial Board), *The Scientific World Journal: Organic Chemistry*
- B. Stanovnik, Voljeni član (Fellow), Royal Society of Chemistry, London, Great Britain
- B. Stanovnik, Častni član (Honorary Member), Hungarian Chemical Society
- B. Stanovnik, Ustanovitveni častni član (Inaugural Honorary Member), Florida Center for Heterocyclic Compounds, Gainesville, Florida, USA

- J. Svete, Član uredniškega odbora (Member of the Editorial Board), Monatshefte für Chemie / Chemical Monthly.
- J. Svete, Član uredniškega odbora (Member of the Editorial Board), Acta Chimica Slovenica.

RAZISKOVALNA OPREMA / RESEARCH EQUIPMENT

- NMR spektrometer – Bruker Avance DPX 300 / *NMR Spectrometer – Bruker Avance DPX 300* (v sklopu IC FKKT UL)
- NMR spektrometer – Bruker Avance Ultrashield 500 plus / *NMR Spectrometer – Bruker Avance Ultrashield 500 plus* (v sklopu IC FKKT UL)
- LC MS sistem Agilent 6224 Accurate Mass TOF LC/MS (v sklopu IC FKKT UL)
- IR spektrometer Bruker FTIR Alpha Platinum ATR/ *IR Spectrometer Bruker FTIR Alpha Platinum ATR* (v sklopu CO EN-FIST)
- UV – visible spektrofotometer Varian / *UV – Visible Spectrophotometer Varian*
- HPLC – Agilent Technologies 1260 Infinity / *HPLC – Agilent Technologies 1260 Infinity* (v sklopu CO EN-FIST)
- Polarimeter Perkin-Elmer / *Polarimeter Perkin-Elmer*
- GC – Hewlett Packard HPG 890 Series / *GC – Hewlett Packard HPG 890 Series*
- GC/MS Hewlett Packard 6890 / *GC/MS Hewlett Packard 6890*
- MPLC – preparativni kromatograf Büchi / *MPLC – Preparative Chromatograph Büchi*
- C, H, N – Analizator Perkin-Elmer 2400 II / *C, H, N – Analyzer Perkin Elmer 2400 II*
- OptiMelt EZ (Stanford Scientific) sistemi za avtomatsko določevanje tališča / *OptiMelt EZ (Stanford Scientific) Automated Melting Point System*
- Industrijski rotavapor Büchi R-220 (20 L) z recirkulatorjem / *Industrial rotavapor Büchi R-220 (20 L) with recirculator* (v sklopu CO EN-FIST)
- Aparatura za delo pod visokimi pritiski U 101 / *High-Pressure Reactor U 101*
- Avtoklavi Berghof / *Autoclaves Berghof*
- Büchi Syncore Polyvap+Reactor paralelni sintetizator in uparjevalnik – 24 pozicij / *Büchi Syncore Polyvap+Reactor Parallel Syntesizer and Evaporator – 24 Positions*
- Destilacijska aparatura Fisher-Jones / *Distillation Apparatus Fisher-Jones*
- Fotokemijski reaktor Buckinghamshire model MLU/8 / *Photochemical Reactor Buckinghamshire Model MLU/8*
- Hidrogenator Parr / *Parr Hydrogenator*
- Pretočni Hidrogenator H-Cube® / *Flow Hydrogenator H-Cube®* (v sklopu CO EN-FIST)
- Laboratorijski mikrovalovni reaktor CEM / *Laboratory Microwave Reactor CEM*
- Laboratorijski reaktor (1 L) Radleys Reactor-Ready Lab Reactor / *Laboratory Reactor (1 L) Radleys Reactor-Ready Lab Reactor*
- Hettlab IR-Dancer Infra-Red Vortex evaporator (paralelni uparjevalnik) – 48 pozicij / *Hettlab IR-Dancer Infra-Red Vortex Evaporator (Parallel Evaporator) – 48 Positions*
- Mettler-Toledo miniblock paralelni sintetizator – 12 pozicij / *Mettler-Toledo Miniblock Parallel Synthesizer – 12 Positions*
- Radleys Carousel reaction station paralelni sintetizator – 6 pozicij / *Radleys Carousel Reaction Station Paralel Synthesizer – 6 Positions*
- Starfish – multiexperiment work station / *Starfish – Multiexperiment Work Station*
- MS Micromass Platform II / *MS Micromass Platform II*
- Ozonator Welsbach model T-816 / *Ozonator Welsbach Model T-816*
- Anseros COM-25 generator ozona / *Anseros COM-25 ozone generator*
- Potopni hladilnik do -60 °C / *Cooler -60 °C*
- Pretočni reaktorski hladilnik (termostat) Lauda do -80 °C / *Circulation chiller Lauda -80 °C*

- Pretočni hladilniki (recirkulatorji) Lauda in Julabo do -20 °C / *Recirculators (chillers) Lauda and Julabo -20 °C*
- Rotavaporji Heidolph, IKA, Büchi / *Rotavapors Heidolph, IKA, Büchi*
- Vakuumske črpalke Vacuubrand / *Vacuum Pumps Vacuubrand*

SODELOVANJE V CENTRIH ODLIČNOSTI / CENTRES OF EXCELLENCE

Center odličnosti: CO EN-FIST – Raziskave na področju zdravja, znanosti o življenju in naprednih novih materialov / Centre of Excellence: EN-FIST - Multidisciplinary Research in Life Sciences and Advanced New Materials

Projekt RRP11: Spojine za diagnostiko in terapijo v medicini.

Direktor: prof. dr. Andrej Petrič

Raziskovalca: doc. dr. Bogdan Štefane in doc. dr. Franc Požgan

Projekt RRP18: Organska sinteza

Direktor: prof. dr. Jurij Svete

Raziskovalca: akad. prof. dr. Branko Stanovnik in Benjamin Prek

RAZISKOVALNI PROGRAMI IN PROJEKTI / RESEARCH PROGRAMMES AND PROJECTS

RAZISKOVALNI PROGRAMI / RESEARCH PROGRAMMES

- P1-0179 Sinteze in transformacije organskih spojin. Novi reagenti v stereoselektivni in regioselektivni sintezi aminokislin kot intermediatov v organski sintezi / *Syntheses and Transformations of Organic Compounds. New Reagents in Stereoselective and Regioselective Synthesis of Amino Acids as Intermediates in Organic Synthesis*
Nosilec / *Principal Researcher*: B. Stanovnik
- P1-0230 Organska kemija: Sinteza, struktura in aplikacija / *Organic Chemistry: Synthesis, Structure, and Application*
Nosilec / *Principal Researcher*: M. Kočever
- P1-0134 (C) Kemija za trajnostni razvoj / *Chemistry for sustainable development*
Nosilec / *Principal Researcher*: P. Bukovec

TEMELJNI PROJEKTI / BASIC RESEARCH

RAZVOJNI PROJEKTI / INDUSTRIAL RESEARCH AND DEVELOPMENT

Dve pogodbi o sodelovanju / *Cooperation Agreement*

Nosilec / *Principal Researcher*: J. Košmrlj

Financer / *Sponsored by*: Lek d.d.

Pogodba o sodelovanju / *Cooperation Agreement*

Nosilec / *Principal Researcher*: J. Košmrlj

Financer / *Sponsored by*: SANDOZ Austria

Pogodba o sodelovanju / *Cooperation Agreement*

Nosilec / *Principal Researcher*: B. Stanovnik

Financer / *Sponsored by*: Krka d.d.

Pogodba o sodelovanju / *Cooperation Agreement*

Nosilec / *Principal Researcher*: B. Stanovnik

Financer / *Sponsored by*: Lek d.d.

Pogodba o sodelovanju / *Cooperation Agreement*

Nosilec / *Principal Researcher*: J. Svete

Financer / *Sponsored by*: Boehringer-Ingelheim Pharma, Biberach, Nemčija

Pogodba o sodelovanju / *Cooperation Agreement*

Nosilec / *Principal Researcher*: B. Štefane

Financer / *Sponsored by*: Krka d.d.

Pogodba o sodelovanju / *Cooperation Agreement*

Nosilec / *Principal Researcher*: B. Štefane

Financer / *Sponsored by*: Lek d.d.

Pogodba o sodelovanju / *Cooperation Agreement*

Nosilec / *Principal Researcher*: D. Dolenc

Financer / *Sponsored by*: BIA separations d.o.o.

Pogodba o sodelovanju / *Cooperation Agreement*

Nosilec / *Principal Researcher*: M. Jereb

Financer / *Sponsored by*: Lek d.d.

MEDNARODNO ZNANSTVENO SODELOVANJE / INTERNATIONAL RESEARCH COOPERATION

VEČSTRANSKO MEDNARODNO SODELOVANJE / MULTILATERAL COOPERATION

COST CM0905 *Organocatalysis, ORCA (2011-2014)*

Član upravnega odbora / *Member of the Management Committee*: M. Kočever

Član delovne skupine / *Working group member*: WG4 Interdisciplinary aspects: M. Kočever

COST CM0905 *Organocatalysis, ORCA (2011-2014)*

Član upravnega odbora / *Member of the Management Committee*: J. Cerkovnik

BILATERALNO MEDNARODNO SODELOVANJE / BILATERAL COOPERATION

Slovenija – Hrvaška Novi rutenijevi kompleksi kot potencialne učinkovine proti raku/ *Novel Slovenia – Croatia ruthenium complexes with potential anticancer activity*

Nosilec / *Principal Researcher*: M. Kočever

DRUGE OBLIKE MEDNARODNEGA SODELOVANJA / OTHER FORMS OF INTERNATIONAL COOPERATION

Vabljeni predavanja tujcev na FKKT / *Invited Lecturers at FKKT*

- Dr. Vladimir Kepe, Department of Medical and Molecular Pharmacology, School of medicine UCLA, Los Angeles: Positron emission tomography, 23. april, 2014.
- Prof. Dr. Saverio Florio, CINMPIS Consorzium, Dept of Pharmacy, Università di Bari, Italy, *Regio- and Stereoselectivity of the Lithiation-Trapping of Small Ring Heterocycles*, 5. november 2014.
- Prof. György Hajós, Institute of Organic Chemistry, Research Centre for Natural Sciences, Hungarian Academy of Sciences, Budapest, Hungary: *New challenges to combat antibacterial resistance; novel approaches and synthetic pathways*, april 2014.
- Prof. Dr. Willi Kantlehner, Fakultät Chemie, Hochschule Aalen, Aalen, Germany: *N,N',N''-Perlakylated Guanidinium Salts: Preparation, Synthetic and Practical Significance*, May, 2013.

Pogodbno mednarodno sodelovanje / *International Contractual Cooperation*

- Pogodba o sodelovanju med FKKT in Inštitutom Ruđer Bošković iz Zagreba (2001 –) na skupnem projektu: ‚Diazeni kot potencialne antitumorne učinkovine; celični odgovor na genotoksične agense‘/*Diazenes as potentially antitumor agents: cell response to genotoxic agents*. Nosilca / *Principal Researchers*: Zagreb – dr. Maja Osmak, znanstvena svetnica; Ljubljana – S. Polanc.
- Jasmin Suljagić: Erasmus Mundus Action 2 Basileus IV programme iz EU (10 mesecev, Univerza v Tuzli, BiH) – M. Kočevar.

Ostala (neformalizirana) mednarodna sodelovanja / *Other Informal Ways of International Cooperation*

M. Kočevar

- *Department of Chemistry, University of Cologne, Germany*; prof. Albrecht Berkessel. *Organokataliza / Organocatalysis*.
- *Department of Organic Chemistry, Biochemistry and Catalysis University of Bucharest, Romania*; Prof. Vasile I. Pârvulescu. *Kataliza / Catalysis*.
- *Dipartimento di Scienze Molecolari e Nanosistemi, Università Ca' Foscari Venezia*; prof. Stefano Paganelli, prof. Oreste Piccolo. *Zelena kemija / Green Chemistry*.

A. Petrič

- Z University of California Los Angeles (UCLA) z raziskovalno skupino prof. Jorge R. Barria na področju razvoja molekularnih sond za uporabo v diagnostiki Alzheimerjeve bolezni/*Development of molecular sensors for the application in diagnosing Alzheimer disease* (1992-).

J. Cerkovnik

- Z Univerzo Strathclyde (Glasgow, Velika Britanija) z raziskovalno skupino dr. Tella Tuttle-a na področju kvantno-mehanskih izračunov/*Quantum mechanical calculations* (2004-).

S. Polanc

- S Karlovo univerzo v Pragi in sicer s Fakulteto za farmacijo Hradec Kralove; sodelovanje z raziskovalnima skupinama prof. Jarmile Vinšove in prof. Martina Doležala na novih pristopih k antibakterijsko aktivnim molekulam/*New approaches to antibacterial active molecules* (2005-).

B. Stanovnik, J. Svete

- Z Univerzo v Urbino z raziskovalno skupino prof. Orazia Antonia Attansija na adicijah enamino estrov/*Additions of enamine esters* (1998-).
- Z Univerzo v Bariju z raziskovalno skupino prof. Saveria Floria na sintezi oksaziridinov iz enamino estrov/*Syntheses of oxaziridine esters* (2000-).
- Z Univerzo v Ulmu z raziskovalno skupino prof. Gerharda Maasa na (2+2) cikloadicijah elektronsko revnih acetilenov na enamino ketone in enamino estre/*(2+2) cycloadditions of electrone-poor acetylenes on enamine ketones and anamino esters*.

(2006-).

- Z Univerzo v Aalenu z raziskovalno skupino prof. Willija Kantlehnerja na (2+2) cikloadicijah elektronsko revnih acetilenov na enamino ketone in enamino estre/*(2+2) cycloadditions of electrone-poor acetylenes on enamine ketones and anamino esters*.

(1999-).

- Z Univerzo v Pardubicah z raziskovalno skupino prof. dr. Petra Šimuneka na kemiji enamionov/*Enamine chemistry*.

B. Šket

- Z Univerzo v Baslu z raziskovalno skupino prof. Jakoba Wirza na področju organske fotokemije in bliskovne laserske fotolize /*Flash laser photolysis*, 2000-).

J. Košmrlj

- Z Department of Chemistry, Faculty of Technology, Tomas Bata University in Zlin: sodelovanje z raziskovalno skupino doc. Ing. Stanislava Kafke na pretvorbah kinolindionov/*Quinolindione transformations* (1998-).
- Z Institut für Chemie und Biochemie – Anorganische Chemie, Freie Universität Berlin: sodelovanje z raziskovalno skupino prof. Biprajita Sarkarja na sintezi novih ligandov na osnovi 1,2,3-triazola in njihovih kompleksov s kovinami prehoda/*Synthesis of new ligands based on 1,2,3-triazole and their complexes with transition metals* (2011-).

F. Požgan

- Z Laboratoire catalyse et organométalliques, Institut Sciences Chimiques de Rennes, Université de Rennes 1: sodelovanje s prof. P. H. Dixneufom na pretvorbah organskih molekul preko aktivacije C-H vezi katalizirane s kovinskimi kompleksi/*Transformations of organic molecules through C-H activation catalyzed by metal complexes*
- Z Ruđer Bošković Institute, Physical Chemistry Division, Zagreb: sodelovanje z dr. A. Višnjevacom na modeliranju aktivnih mest metaloencimov s triazolskimi ligandi/*Modelling of metallo-peptidases active site with the triazole based tridentate ligands*

U. Grošelj

- Z Laboratorium für Organische Chemie, Departement für Chemie und Angewandte Biowissenschaften, ETH-Zürich, Schweiz: sodelovanje s prof. dr. Dieter Seebachom; področje: kovalentna organokataliza z imidazolidinoni / *Covalent organocatalysis with imidazolidinones* (2009-).

M. Jereb

- Z Laboratory for Inorganic Chemistry, Department of Chemistry and Applied Biosciences, ETH Zurich, Switzerland: sodelovanje s prof. dr. A. Tognijem na področju selektivne uvedbe trifluorometilne skupine (2014-).

BIBLIOGRAFIJA 2014 / REFERENCES 2014

IZVIRNI ZNANSTVENI ČLANEK / ORIGINAL SCIENTIFIC ARTICLE

- OK1.** ŠENICA, Luka, PETEK, Nejc, GROŠELJ, Uroš, SVETE, Jurij. A four-step synthesis of novel (S)-1-(heteroaryl)-1-aminoethanes from (S)-boc-alanine. *Acta chimica slovenica*, ISSN 1318-0207. [Tiskana izd.], str. 1-12, ilustr. <https://journals.matheo.si/index.php/ACSi/article/view/712/185>, doi: 0000-0000. [COBISS.SI-ID 1781551], [JCR, SNIP]
- OK2.** JAVORŠEK, Dejana, KOVAČ, Franci, GORENŠEK, Marija. HPLC analysis of monofluoro-s-triazine dye during the dyeing process. *American journal of analytical chemistry*, ISSN 2156-8278, 2014, vol. 5, no. 4, str. 215-224, ilustr. http://www.scirp.org/journal/PaperInformation.aspx?PaperID=43487#UyLeF4X8e_I. [COBISS.SI-ID 2983024]
- OK3.** JAKŠA, Gregor, ŠTEFANE, Bogdan, KOVAČ, Janez. Influence of different solvents on the morphology of APTMS-modified silicon surfaces. *Applied Surface Science*, ISSN 0169-4332. [Print ed.], 2014, vol. 315, no. 1, str. 516-522, ilustr. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169433214011982>, doi: 10.1016/j.apsusc.2014.05.157. [COBISS.SI-ID 1715759]
- OK4.** BEZENŠEK, Jure, GROŠELJ, Uroš, STARE, Katarina, SVETE, Jurij, STANOVNIK, Branko. A simple synthesis of 4-aryloxy-5-methyl-1H-imidazol-2(3H)-onederivatives (Enoxymone analogues) from aryl methyl ketones via enamines. *ARKIVOC*, ISSN 1551-7004, 2014, no. II, str. 294-307, ilustr. <http://www.arkat-usa.org/get-file/49116/>. [COBISS.SI-ID 1649455]
- OK5.** TRAVEN, Katja, SINREIH, Maša, STOJAN, Jure, SERŠEN, Sara, KLJUN, Jakob, BEZENŠEK, Jure, STANOVNIK, Branko, TUREL, Iztok, LANIŠNIK-RIŽNER, Tea. Ruthenium complexes as inhibitors of the aldo-keto reductases AKR1C1-1C3. *Chemico-biological interactions*, ISSN 0009-2797. [Print ed.], 2014, vol. , iss. , str. , ilustr. doi: 10.1016/j.cbi.2014.11.005. [COBISS.SI-ID 31698649]
- OK6.** SOMMER, Michael G., KURELJAK, Petra, URANKAR, Damijana, SCHWEINFURTH, David, STOJANOVIĆ, Nikolina, BURBRIN, Martina, GAZVODA, Martin, OSMAK, Maja, SARKAR, Biprajit, KOŠMRLJ, Janez. Combining [arene-Ru] with azocarboxamide to generate a complex with cytotoxic properties. *Chemistry*, ISSN 0947-6539. [Print ed.], 2014, vol. 20, no. 52, str. 17296-17299, ilustr. <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/chem.201404448/pdf>, doi: 10.1002/chem.201404448. [COBISS.SI-ID 1536056771]
- OK7.** LAVTIŽAR, Vesna, GESTEL, Cornelis A. M. van, DOLENC, Darko, TREBŠE, Polonca. Chemical and photochemical degradation of chlorantraniliprole and characterization of its transformation products. *Chemosphere*, ISSN 0045-6535. [Print ed.], 2014, vol. 95, str. 408-414, doi: 10.1016/j.chemosphere.2013.09.057. [COBISS.SI-ID 2922491]
- OK8.** KROFLIČ, Ana, ŠARAC, Bojan, CERKOVNIK, Janez, BEŠTER-ROGAČ, Marija. Hydrophobicity of counterions as a driving force in the self-assembly process : dodecyltrimethylammonium chloride and parabens. *Colloids and surfaces. A, Physicochemical and Engineering Aspects*, ISSN 0927-7757. [Print ed.], 2014, vol. 460, no. 1, str. 108-117, ilustr. http://ac.els-cdn.com/S0927775714001307/1-s2.0-S0927775714001307-main.pdf?tid=f7c6d39e-9487-11e3-afba-00000aacb35d&acdnat=1392279925_3dfd41bcd545e0b24bcded53eb2335e, doi: 10.1016/j.colsurfa.2014.02.002. [COBISS.SI-ID 1679407]

- OK9.** KRIVEC, Marko, KRANJC, Krištof, POLANC, Slovenko, KOČEVAR, Marijan. Dehydrogenation/Diels-Alder cycloaddition domino reaction of 9,10-dihydroanthracene with N-substituted maleimides triggered by the application of activated carbon. *Current organic chemistry*, ISSN 1385-2728, 2014, vol. 18, no. 11, str. 1520-1527, ilustr. <http://benthamscience.com/journal/abstracts.php?journalID=coc&articleID=122498>. [COBISS.SI-ID 1790255]
- OK10.** CAPPOEN, Davie, MAJCE, Vita, UYTHETHOFKEN, Cynthia, URANKAR, Damijana, MATHYS, Vanessa, KOČEVAR, Marijan, VER-SCHAEVE, Luc, POLANC, Slovenko, HUYGEN, Kris, KOŠMRLJ, Janez. Biological evaluation of diazene derivatives as anti-tubercular compounds. *European Journal of Medicinal Chemistry*, ISSN 0223-5234. [Print ed.], 2014, vol. 74, no. 1, str. 85-94, ilustr. <http://ac.els-cdn.com/S0223523414000191/1-s2.0-S0223523414000191-main.pdf?tid=6a486486-9542-11e3-bdce-0000aacb361&acdnat=1392360003d465db9c81fe92e1f55c916e60e1f214>, doi: 10.1016/j.ejmech.2013.12.057. [COBISS.SI-ID 1679663]
- OK11.** CAPPOEN, Davie, VAJS, Jure, VIRAG, Andrej, KOČEVAR, Marijan, GAZVODA, Martin, POLANC, Slovenko, KOŠMRLJ, Janez, et al. Anti-mycobacterial activity of 1,3-diaryltriazenes. *European Journal of Medicinal Chemistry*, ISSN 0223-5234. [Print ed.], 2014, vol. 77, no. 1, str. 193-203, ilustr. <http://ac.els-cdn.com/S0223523414002037/1-s2.0-S0223523414002037-main.pdf?tid=6022f288-aac7-11e3-811e-00000aacb360&acdnat=13947260844dff582915173a654aa2f773e08faf8e>, doi: 10.1016/j.ejmech.2014.02.065. [COBISS.SI-ID 1695279]
- OK12.** ŠENICA, Luka, GROŠELJ, Uroš, KASUNIČ, Marta, KOČAR, Drago, STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. Synthesis of enamine-based vinylogous peptides. *European journal of organic chemistry*, ISSN 1434-193X, 2014, vol. 2014, no. 15, str. 3067-3071, ilustr. <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/ejoc.201402033/pdf>, doi: 10.1002/ejoc.201402033. [COBISS.SI-ID 1695535]
- OK13.** BOLJE, Aljoša, URANKAR, Damijana, KOŠMRLJ, Janez. Synthesis and NMR analysis of 1,4-disubstituted 1,2,3-triazoles tethered to pyridine, pyrimidine, and pyrazine rings. *European journal of organic chemistry*, ISSN 1434-193X, 2014, vol. 2014, issue 36, str. 8167-8181, ilustr. <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/ejoc.201403100/pdf>, doi: 10.1002/ejoc.201403100. [COBISS.SI-ID 1536057283]
- OK14.** NOVAK, Ana, ŠTEFANIČ, Matej, GROŠELJ, Uroš, HRAST, Martina, KASUNIČ, Marta, GOBEC, Stanislav, STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. A simple synthesis of polyfunctionalized 4-aminopyrazolidin-3-ones as aza-deoxa analogs of D-cycloserine. *Helvetica Chimica Acta*, ISSN 0018-019X, feb. 2014, vol. 97, no. 2, str. 245-267, ilustr. <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/hlca.201300169/pdf>, doi: 10.1002/hlca.201300169. [COBISS.SI-ID 1679919]
- OK15.** GROŠELJ, Uroš, BECK, Albert K., SCHWEIZER, W. Bernd, SEEBACH, Dieter. Preparation and structures of 2-substituted 5-benzyl-3-methylimidazolidin-4-one-derived iminium salts, reactive intermediates in organocatalytic transformations involving [alpha], [beta]-unsaturated aldehydes. *Helvetica Chimica Acta*, ISSN 0018-019X, jun. 2014, vol. 97, iss. 6, str. 751-796, ilustr. <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/hlca.201400110/abstract>, doi: 10.1002/hlca.201400110. [COBISS.SI-ID 1536179139]
- OK16.** MILOŠEVIČ, Mladena, ŠTERBAL, Ines, FEGUŠ, Urban, BAŠKOVČ, Jernej, PREK, Benjamin, GROŠELJ, Uroš, STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. Microwave-assisted direct amidation of ethyl 1-phenyl-5-hydroxy-1H-pyrazole-4-carboxylate. *Journal of heterocyclic chemistry*, ISSN 0022-152X, str. 1-6, ilustr. <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/jhet.2100/abstract>, doi: 10.1002/jhet.2100. [COBISS.SI-ID 1713967]
- OK17.** KLEMENČIČ, Danijela, TOMŠIČ, Brigita, KOVAČ, Franci, ŽERJAV, Metka, SIMONČIČ, Andrej, SIMONČIČ, Barbara. Preparation of novel fibre-silica-Ag composites: the influence of fibre structure on sorption capacity and antimicrobial activity. *Journal of Materials Science*, ISSN 0022-2461, 2014, vol. 49, iss. 10, str. 3785-3794, doi: 10.1007/s10853-014-8090-x. [COBISS.SI-ID 2977392]
- OK18.** RYCHTARČIKOVÁ, Zuzana, KRÁTKÝ, Martin, GAZVODA, Martin, KOMLŮOVÁ, Markéta, POLANC, Slovenko, KOČEVAR, Marijan, STOLAŘIKOVÁ, Jiřina, VINŠOVÁ, Jarmila. N-Substituted 2-isonicotinoylhydrazinecarboxamides - new antimycobacterial active molecules. *Molecules*, ISSN 1420-3049, 2014, vol. 19, no. 4, str. 3851-3868, ilustr. <http://www.mdpi.com/1420-3049/19/4/3851>, doi: 10.3390/molecules19043851. [COBISS.SI-ID 1698863]
- OK19.** MARAŠ, Nenad, KOČEVAR, Marijan. Effects of tertiary amine catalysis on the regioselectivity of anisole chlorination with trichloroisocyanuric acid. *Monatshefte für Chemie*, ISSN 0026-9247, str. 1-8, ilustr. <http://link.springer.com/article/10.1007/s00706-014-1383-6>, doi: 10.1007/s00706-014-1383-6. [COBISS.SI-ID 1536125123]; Online first article, 2014.
- OK20.** ŠTEFANE, Bogdan, POŽGAN, Franc. Oxydehydrogenative aromatization of fused 3-aminopyran-2-ones on carbon surfaces : a simple approach towards 3-amino-5-hydroxycoumarin derivatives. *Monatshefte für Chemie*, ISSN 0026-9247, 2014, vol. 145, no. 8, str. 1329-1335, ilustr. <http://download.springer.com/static/pdf/93/art%253A10.1007%252Fs00706-014-1227-4.pdf?auth66=14019678498197bd652d925a3dbbaf499c50e0444&ext=.pdf>, doi: 10.1007/s00706-014-1227-4. [COBISS.SI-ID 1716527]
- OK21.** PROISL, Karel, KAFKA, Stanislav, URANKAR, Damijana, GAZVODA, Martin, KIMMEL, Roman, KOŠMRLJ, Janez. Fischer indolisation of N-(alpha)-ketoacyl)anthranilic acids into 2-(indol-2-carboxamido)benzoic acids and 2-indolyl-3,1-benzoxazin-4-ones and their NMR study. *Organic and Biomolecular Chemistry*, ISSN 1477-0520. [Print ed.], 2014, vol. 12, no. 47, str. 9650-9664, ilustr. <http://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2014/ob/c4ob01714e>, doi: 10.1039/C4OB01714E. [COBISS.SI-ID 1536032451]
- OK22.** BOLJE, Aljoša, HOHLOCH, Stephan, URANKAR, Damijana, PEVEC, Andrej, GAZVODA, Martin, SARKAR, Biprajit, KOŠMRLJ, Janez. Exploring the scope of pyridyl- and picolyl-functionalized 1,2,3-triazol-5-ylidenes in bidentate coordination to ruthenium(II) cymene chloride complexes. *Organometallics*, ISSN 0276-7333, 2014, vol. 33, no. 10, str. 2588-2598, ilustr. <http://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/om500287t>, doi: 10.1021/om500287t. [COBISS.SI-ID 1708335]
- OK23.** STRLE, Drago, ŠTEFANE, Bogdan, ZUPANIČ, Erik, TRIFKOVIČ, Mario, MAČEK, Marijan, JAKŠA, Gregor, KVASIČ, Ivan, MUŠEVIČ, Igor. Sensitivity comparison of vapor trace detection of explosives based on chemo-mechanical sensing with optical detection and capacitive sensing with electronic detection. *Sensors*, ISSN 1424-8220, Jul. 2014, vol. 14, no. 7, str. 11467-11491, ilustr. <http://www.mdpi.com/1424-8220/14/7/11467/pdf>, doi: 10.3390/s140711467. [COBISS.SI-ID 10678868]
- OK24.** JURANOVIČ, Amadej, KRANJC, Krištof, POLANC, Slovenko, KOČEVAR, Marijan. Cycloaddition of styrenes as phenylacetylene substitutes on 2H-pyran-2-ones and the consequent metal-free dehydrogenation : case study of boscalid derivatives. *Synthesis*, ISSN 0039-7881, 2014, vol. 46, no. 7, str. 909-916, ilustr. <https://www.thieme-connect.com/ejournals/pdf/10.1055/s-0033-1338593.pdf>, doi: 10.1055/s-0033-1338593. [COBISS.SI-ID 1677103]
- OK25.** POŽGAN, Franc, ŠTEFANE, Bogdan, KIDEMET, Davor, SMODIŠ, Janez, ZUPET, Rok. A new synthetic route towards aliskiren intermediates. *Synthesis*, ISSN 0039-7881, 2014, vol. 46, issue 23, str. 3221-3228, ilustr. <https://www.thieme-connect.de/products/ejournals/html/10.1055/s-0034-1378616>, doi: 10.1055/s-0034-1378616. [COBISS.SI-ID 1763375]
- OK26.** REJC, Luka, FABRIS, Jan, ADROVIČ, Armin, KASUNIČ, Marta, PETRIČ, Andrej. Elongation of the molecular probe DDNP with phenylethynylidene orphenyldiazenylidene spacers. *Tetrahedron letters*, ISSN 0040-4039. [Print ed.], 2014, vol. 55, no. 6, str. 1218-1221, ilustr. <http://ac.els-cdn.com/S0040403914000070/1-s2.0-S0040403914000070-main.pdf?tid=1959c042-b653-11e3-8e35-00000aacb0f26&acdnat=1395995557c993c67e8e206b669ca63f36d2f7c60>, doi: 10.1016/j.tetlet.2014.01.002. [COBISS.SI-ID 1666863]

- OK27.** DREV, Miha, GROŠELJ, Uroš, MEVEC, Špela, PUŠAVEC, Eva, ŠTRELJ, Janja, GOLOBIČ, Amalija, DAHMANN, Georg, STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. Regioselective synthesis of 1- and 4-substituted 7-oxopyrazolo[1,5-a]pyrimidine-3-carboxamides. *Tetrahedron*, ISSN 0040-4020. [Print ed.], 2014, vol. 70, no. 44, str. 8267-8279, ilustr. http://ac.els-cdn.com/S004040201401309X/1-s2.0-S004040201401309X-main.pdf?tid=bfe41b68-64b5-11e4-9cf0-00000a0b0f6c&acdnat=1415169430_7438909113baa2fcbaa54220f65c0c68, doi: 10.1016/j.tet.2014.09.020. [COBISS.SI-ID 1781039]
- OK28.** GROŠELJ, Uroš, PUŠAVEC, Eva, GOLOBIČ, Amalija, DAHMANN, Georg, STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. Synthesis of 1,5-disubstituted-4-oxo-4,5-dihydro-1H-pyrazolo[4,3-c]pyridine-7- carboxamides. *Tetrahedron*, ISSN 0040-4020. [Print ed.], str. 1-42, ilustr. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0040402014016068#>, doi: 10.1016/j.tet.2014.11.034. [COBISS.SI-ID 1536061891]
- OK29.** PREK, Benjamin, BEZENŠEK, Jure, KASUNIČ, Marta, GROŠELJ, Uroš, SVETE, Jurij, STANOVNIK, Branko. Reactions of enamines and related compounds with N,N-dimethylacetamide dimethyl acetal. A simple one-pot metal-free synthesis of polysubstituted benzene derivatives. *Tetrahedron*, ISSN 0040-4020. [Print ed.], 2014, vol. 70, no. 14, str. 2359-2369, ilustr. <http://ac.els-cdn.com/S0040402014002099/1-s2.0-S0040402014002099-main.pdf?tid=606859b8-9eb0-11e3-8d4b-00000aacb35f&acdnat=1393396792c96484aad363a274c360ebe1d7d21082>, doi: 10.1016/j.tet.2014.02.039. [COBISS.SI-ID 1681711]
- OK30.** JAKŠA, Gregor, ŠTEFANE, Bogdan, KOVAČ, Janez. XPS- in AFM-preiskava silicijevih površin, modificiranih z različnimi aminosilani = XPS and AFM characterization of different aminosilanes bonded on silicon surface. *Vakuumist*, ISSN 0351-9716, 2014, letn. 34, št. 2, str. 4-8. [COBISS.SI-ID 28279335]
- OK31.** BEZENŠEK, Jure, PREK, Benjamin, GROŠELJ, Uroš, GOLOBIČ, Amalija, STARE, Katarina, SVETE, Jurij, KANTLEHNER, Willi, MAAS, Gerhard, STANOVNIK, Branko. A simple metal-free synthesis of 2,4,5-trisubstituted pyridines and pyridine N-oxides by [2+2] cycloaddition of enamines to propyne iminium salts. *Zeitschrift für Naturforschung. B, A journal of chemical sciences*, ISSN 0932-0776, 2014, vol. 69b, no. 5, str. 554-566, ilustr. <http://www.znaturforsch.com/ab/v69b/69b0554.htm>, doi: 10.5560/ZNB.2014-4021. [COBISS.SI-ID 1714479]
- OK32.** PUŠAVEC, Eva, MIRNIK, Jona, ŠENICA, Luka, GROŠELJ, Uroš, STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. Cu(I)-catalyzed [3+2] cycloadditions of tert-butyl (S)-(3-oxopent-4-yn-2-yl)carbamate to 1-benzylidenepyrazole-3-one-derived azomethine imines. *Zeitschrift für Naturforschung. B, A journal of chemical sciences*, ISSN 0932-0776, 2014, vol. 69b, no. 5, str. 615-626, ilustr. <http://www.znaturforsch.com/ab/v69b/69b0615.htm>, doi: 10.5560/ZNB.2014-4011. [COBISS.SI-ID 1714223]
- OK 33.** BROZOVIČ, A., STOJANOVIČ, Nikolina, AMBROVIČ RISTOV, Andreja, BROZOVIČ KRIJAN, Antonija, POLANC, Slovenko, OSMAK, Maja. 3-Acetyl-bis(2-chloro-4-nitrophenyl)triazene is a potent antitumor agent that induces oxidative stress and independently activates the stress-activated protein kinase/c-Jun NH₂-terminal kinase pathway. *Anti-cancer drugs*, ISSN 0959-4973, 2014, vol. 25, no. 3, str. 289-295, ilustr. http://journals.lww.com/anti-cancerdrugs/Abstract/2014/03000/3_Acetyl_bis_2_chloro_4_nitrophenyl_triazene_is_a.6.aspx, doi: 10.1097/CAD.000000000000060. [COBISS.SI-ID 1652783]

PREGLEDNI ZNANSTVENI ČLANEK / REVIEW ARTICLE

- OK34.** ŠTEFANE, Bogdan, POŽGAN, Franc. Advances in catalyst systems for the asymmetric hydrogenation and transfer hydrogenation of ketones. *Catalysis reviews: science and engineering*, ISSN 0161-4940, 2014, vol. 56, no. 1, str. 82-174, ilustr. <http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/01614940.2013.869461#>. UuuCI02x6UK, doi: 10.1080/01614940.2013.869461. [COBISS.SI-ID 1674543]
- OK35.** KRANJC, Krištof, KOČEVAR, Marijan. Green chemistry starting from 2H-pyran-2-one derivatives. *Current green chemistry*, 2014, vol. 1, no. 3, str. 202-215, ilustr. <http://benthamscience.com/journal/abstracts.php?journalID=cgc&articleID=120554>, doi: 10.2174/2213346101666131230234625. [COBISS.SI-ID 1699119]
- OK36.** STANOVNIK, Branko. [2+2] Cycloaddition of electron-poor acetylenes to enamines, enamino esters and related systems. Rearrangements and ring-expansion reactions. *Organic preparations and procedures international*, ISSN 0030-4948, 2014, vol. 46, no. 1, str. 24-65, ilustr. doi: 10.1080/00304948.2014.866468. [COBISS.SI-ID 1660719]

OBJAVLJENI ZNANSTVENI PRISPEVEK NA KONFERENCI (VABLJENO PREDAVANJE) / PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTION (INVITED LECTURE)

- OK37.** BELAVIČ, Darko, HROVAT, Marko, SANTO-ZARNIK, Marina, MAKAROVIČ, Kostja, BENČAN, Andreja, HOLC, Janez, DOLANC, Gregor, FAJDIGA, Primož, HOČEVAR, Stanko, POHAR, Andrej, KOVAČ, Franci, HODNIK, Marjan, KONDA, Anton, JORDAN, Boris, SEDLAKOVA, Vlasta, SIKULA, Josef, MALIČ, Barbara. An overview of LTCC based ceramic microsystems : from simple pressure sensors to complex chemical reactors. V: EDS' 14, Electronic Devices and Systems IMAPS CS International Conference 2014, June 25-26, 2014, Brno, Czech Republic. HEGR, Ondrej (ur.). *Proceedings*. Brno: Vysoké učení Technické v Brně, 2014, str. XVI-XXI. [COBISS.SI-ID 27805479]

OBJAVLJENI ZNANSTVENI PRISPEVEK NA KONFERENCI / PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTION

- OK38.** GORJANC, Marija, JOVANČIČ, P., KOVAČ, Franci, GORENŠEK, Marija. Achieving durable antimicrobial cotton by atmospheric plasma, dyeing and nanosilver. V: 7th International Textile, Clothing & Design Conference [also] ITC&DC, October 5th to October 8th, 2014, Zagreb, Croatia. DRAGČEVIČ, Zvonko (ur.), HURSA ŠAJATOVIČ, Anica (ur.), VUJASINOVIČ, Edita (ur.). *Magic world of textiles : book of proceedings*. Zagreb: University of Zagreb, Faculty of Textile Technology, 2014, str. 201-204, ilustr. [COBISS.SI-ID 3057776]
- OK39.** ŠTEFANE, Bogdan, POŽGAN, Franc. Sinteza (R)- in (S)-benzilidenciklopentanolov = Synthesis of (R)- and (S)-benzilidenciklopentanolov : [predavanje]. V: Slovenski kemijski dnevi 2014, Maribor, 11.-12. september 2014. KRAVANJA, Zdravko (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.), NOVAK-PINTARIČ, Zorka (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2014, Maribor, 11. - 12. september 2014*. Maribor: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2014, str. [1-4], ilustr. [COBISS.SI-ID 1785391]
- OK40.** POŽGAN, Franc, ŠTEFANE, Bogdan. Katalitska aromatizacija pripojenih 3-aminopiran-2-onov = Catalytic aromatization of fused 3-aminopyran-2-ones : [predavanje]. V: Slovenski kemijski dnevi 2014, Maribor, 11.-12. september 2014. KRAVANJA, Zdravko (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.), NOVAK-PINTARIČ, Zorka (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2014, Maribor, 11. - 12. september 2014*. Maribor: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2014, str. [1-6], ilustr. [COBISS.SI-ID 1785647]

- OK41. KRIVEC, Marko, KOČEVAR, Marijan. Študija dehidrogenacij -CH [spodaj] 2CH [spodaj] 2- fragmentov v različnih potencialno aromatskih sistemih : [predavanje]. V: Slovenski kemijski dnevi 2014, Maribor, 11.-12. september 2014. KRAVANJA, Zdravko (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.), NOVAK-PINTARIČ, Zorka (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2014, Maribor, 11. - 12. september 2014*. Maribor: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2014, str. 1-8, ilustr. [COBISS.SI-ID 1783855]

OBJAVLJENI POVZETEK ZNANSTVENEGA PRISPEVKA NA KONFERENCI (VABLJENO PREDAVANJE) PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTION ABSTRACT (INVITED LECTURE)

- OK42. SVETE, Jurij. Synthesis of 3-pyrazolidinone-based heterocycles and peptide mimetics : [invited lecture]. V: *FloHet-2014 Florida Heterocyclic and Synthetic Conference : March 2nd - March 5th, 2014*. [S. l.: s. n.], 2014, str. 45. [COBISS.SI-ID 1695023]
- OK43. STANOVNIK, Branko. Heterocyclic compounds - building blocks of life : [invited lecture]. V: 9th International Summer School/Conference at the University of Maribor, 22 June - 6 July 2014, Maribor, Slovenia. ROBNIK, Marko (ur.). *Let's face chaos through nonlinear dynamics : 9th International Summer School/Conference at the University of Maribor, 22 June - 6 July 2014, Maribor, Slovenia*. Maribor: CAMTP, Center for Applied Mathematics and Theoretical Physics, 2014, str. 58. [COBISS.SI-ID 1737007]
- OK44. STANOVNIK, Branko. Enamines in the synthesis of heterocyclic systems : [2+2] cycloadditions, ring expansion reactions and other transformations : [plenary lecture]. V: 8th Eurasian Meeting on Heterocyclic Chemistry, Tbilisi, Georgia, 20 - 24 September, 2014. *Program, abstract book, notebook*. Tbilisi: Universal, [2014], str. 17-18. [COBISS.SI-ID 1536018883]

SAMOSTOJNI ZNANSTVENI SESTAVEK ALI POGlavJE V MONOGRAFSKI PUBLIKACIJI INDEPENDENT SCIENTIFIC COMPONENT PART OR A CHAPTER IN A MONOGRAPH

- OK45. STANOVNIK, Branko. Application of highly functionalized buta-1,3-dienes to the synthesis of heterocyclic systems. V: KARTSEV, Viktor Georgievich (ur.). *Himija geterocikličeskikh soedinenij. Sovremennye aspekty*, (Serij monografij Interbioscreen, Tom 1). Moskva: ICSPF, 2014, str. 53-60. [COBISS.SI-ID 1536024515]
- OK46. STANOVNIK, Branko. Synthesis of highly functionalized buta-1,3-dienes - intermediates in the synthesis of heterocyclic systems. V: KARTSEV, Viktor Georgievich (ur.). *Himija geterocikličeskikh soedinenij. Sovremennye aspekty*, (Serij monografij Interbioscreen, Tom 1). Moskva: ICSPF, 2014, str. 61-70. [COBISS.SI-ID 1536024259]

UNIVERZITETNI, VISOKOŠOLSKI ALI VIŠJEŠOLSKI UČBENIK Z RECENZIJO / REVIEWED UNIVERSITY AND ACADEMIC TEXTBOOK

- OK47. POLANC, Slovenko, STANOVNIK, Branko. *Določevanje strukture organskih spojin s spektroskopskimi metodami*. [1. ponatis]. Ljubljana: Fakulteta za naravoslovje in tehnologijo, Oddelek za kemijo, 1986. 2 zv. [COBISS.SI-ID 17937664]

SREDNJEŠOLSKI, OSNOVNOŠOLSKI ALI DRUGI UČBENIK Z RECENZIJO / SECONDARY AND PRIMARY SCHOOL TEXTBOOK OR OTHER TEXTBOOK

- OK48. KOŠMRLJ, Berta, MOZER, Alenka, PETRIČEK, Saša, SMRDU, Andrej, ZMAZEK, Boris, WISSIAK GRM, Katarina Senta, KRAFOGEL, Bernarda (urednik), TRKOV, Joži (urednik). *Kemija, Zbirka maturitetnih nalog z rešitvami 2005-2010*, (Maturitetni izpiti). 3. ponatis. Ljubljana: Državni izpiti center, 2011 [i. e.] 2014. 297 str., ilustr. ISBN 978-961-6322-96-6. [COBISS.SI-ID 274367744]

DRUGO UČNO GRADIVO / OTHER EDUCATIONAL MATERIAL

- OK49. ŠTEFANE, Bogdan. *Organokovinska kemija : (smer Kemija, 5. letnik)*. Ljubljana: Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za organsko kemijo, 2014. 1 USB ključ, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 1740847]
- OK50. ŠTEFANE, Bogdan. *Organoskopska kemija : (smer Kemijsko inženirstvo, 2. letnik)*. Ljubljana: Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za organsko kemijo, 2014. 1 USB ključ, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 1740079]
- OK51. ŠTEFANE, Bogdan. *Organoskopska kemija I : (smer Kemijska tehnologija, 1. letnik)*. Ljubljana: Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za organsko kemijo, 2014. 1 USB ključ, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 1740335]
- OK52. ŠTEFANE, Bogdan. *Organoskopska kemija II : (smer Kemijska tehnologija, 2. letnik)*. Ljubljana: Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za organsko kemijo, 2014. 1 USB ključ, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 1740591]
- OK53. PETRIČ, Andrej. *Organoskopska kemija KE213 : magistrski program Kemija : obvezni predmet : interno študijsko gradivo*. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za organsko kemijo, 2014. 199 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 1681199]

KONČNO POROČILO O REZULTATIH RAZISKAV / FINAL RESEARCH REPORT

- OK54. ŠTEFANE, Bogdan, POŽGAN, Franc. *Sinteza standardov nečistoč : fazno poročilo projekta za Lek farmacevtska družba d.d. po pogodbi št. CROS-12287/2013, za obdobje 18.02.-31.03.2014*. Ljubljana: Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za organsko kemijo, 2014. 3 f., graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 1776943]
- OK55. ŠTEFANE, Bogdan, POŽGAN, Franc. *Sinteza standardov nečistoč : fazno poročilo projekta za Lek farmacevtska družba d.d. po pogodbi št. CROS-12287/2013, za obdobje 18.12.2013-17.02.2014*. Ljubljana: Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za organsko kemijo, 2014. 6 f., graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 1776687]
- OK56. ŠTEFANE, Bogdan, POŽGAN, Franc. *Sinteza standardov nečistoč : sumarno poročilo projekta za Lek farmacevtska družba d.d. po pogodbi št. CROS-12287/2013*. Ljubljana: Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za organsko kemijo, 2014. 20 f., graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 1777199]

ELABORAT, PREDŠTUDIJA, ŠTUDIJA / TREATISE, PRELIMINARY STUDY, STUDY

OK57. BELAVIČ, Darko, HROVAT, Marko, MAKAROVIC, Kostja, JERLAH, Mitja, CILENŠEK, Jena, DRNOVŠEK, Silvo, BENČAN, Andreja, KOVAČ, Franci, JORDAN, Boris, KONDA, Anton. *Tehnologije za izdelavo LTCC struktur za kemijske mikrosisteme : zaupno poročilo za leto 2013*. Ljubljana: Institut Jožef Stefan, 2014. 6 str., ilustr. [COBISS.SI-ID 27550503]

PATENT / PATENT

OK58. BAŠKOVČ, Jernej, MILOŠEVIČ, Mladena, GROŠELJ, Uroš, STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. *Amidiranje alkil 5-hidroksi-1H-pirazol-4-karboksilatov in sorodnih enolizabilnih alkil heteroarilkarboksilatov pod mikrovalovi : patent SI 24289(A), 2014-09-14*. Ljubljana: Urad Republike Slovenije za intelektualno lastnino, 16. 9. 2014. 14 str., ilustr. [COBISS.SI-ID 36572677]

OK59. ČASAR, Zdenko, KOŠMRLJ, Janez. *Key intermediates for the synthesis of rosvastatin or pharmaceutically acceptable salts thereof : JP 5558492 B2, 23 July 2014*. Tokyo: Japan Patent Office, 2014. 27 str., graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 34323205]

PREDAVANJE NA TUJI UNIVERZI / INVITED LECTURE AT FOREIGN UNIVERSITY

OK60. SVETE, Jurij. *Enaminones as versatile reagents in combinatorial synthesis : Hochschule Aalen, Fakultät Chemie, Aalen, 28th October 2014*. 2014. [COBISS.SI-ID 1536016067]

OK61. KRANJC, Krištof. *A multitude of reaction pathways starting from 2H-pyran-2-ones and their fused derivatives : J. J. Strossmayer University of Osijek, 19th November 2014, Osijek, Croatia*. 2014. [COBISS.SI-ID 1536077763]

OK62. SVETE, Jurij. *Some recent synthetic applications of enaminones and azomethine imines : Universität Ulm, Fakultät für Naturwissenschaften, Institut für Organische Chemie I, Ulm, 30th October 2014*. 2014. [COBISS.SI-ID 1536016579]

OK63. SVETE, Jurij. *Update on Cooperation between BI and Univ. Ljubljana; Synthesis of functionalized heterocycles as CPO library templates : Boehringer-Ingelheim Pharma, Biberach, 29th October 2014*. 2014. [COBISS.SI-ID 1536016323]

UREDNIK / EDITORSHIP

OK64. *Acta chimica slovenica*. Košmrlj, Janez (član uredniškega odbora 2013-), Cerkovnik, Janez (urednik 2006-), Kranjc, Krištof (član uredniškega sveta 2007-), Svete, Jurij (član uredniškega odbora 2014-). [Tiskana izd.]. Ljubljana: Slovensko kemijsko društvo: =Slovenian Chemical Society, 1993-. ISSN 1318-0207. <http://acta.chem-soc.si/>. [COBISS.SI-ID 14086149]

OK65. *Acta chimica slovenica*. Stanovnik, Branko (predsednik uredniškega sveta 1995-). [Tiskana izd.]. Ljubljana: Slovensko kemijsko društvo: =Slovenian Chemical Society, 1993-. ISSN 1318-0207. <http://acta.chem-soc.si/>. [COBISS.SI-ID 14086149]

OK66. *Advances in heterocyclic chemistry*. Stanovnik, Branko (član uredniškega odbora 2003-). New York [etc.]: Academic Press, 1963-. ISSN 0065-2725. [COBISS.SI-ID 486917]

OK67. *American journal of chemistry*. Kočevar, Marijan (član uredniškega odbora 2012-). [Print ed.]. Rosemead, CA: Scientific & Academic Publishing, 2011-. <http://journal.sapub.org/chemistry>. [COBISS.SI-ID 35774725]

OK68. *ARKIVOC*. Stanovnik, Branko (urednik 2010-, član uredniškega sveta 2010-). [Print ed.]. Gainesville: Arkat USA Inc., 2000-. ISSN 1424-6376. [COBISS.SI-ID 28057605]

OK69. *Croatica chemica acta*. Stanovnik, Branko (član uredniškega odbora 1985-). Zagreb: Hrvatsko kemijsko društvo, 1956-. ISSN 0011-1643. [COBISS.SI-ID 22807]

OK70. *Current green chemistry*. Kočevar, Marijan (član uredniškega odbora 2014-). [S. I.]: Bentham Science, 2014-. <http://bentham-science.com/cgc/EBM.htm>. [COBISS.SI-ID 26025767]

OK71. *Current organic chemistry*. Kočevar, Marijan (član uredniškega odbora 2012-). Schiphol: Bentham Science Publishers, 1997-. ISSN 1385-2728. [COBISS.SI-ID 825370]

OK72. *E-Journal of Chemistry*. Kočevar, Marijan (član uredniškega odbora 2012-). Adirampattinam: WWW Publications (P) India. ISSN 0973-4945. [COBISS.SI-ID 515803673]

OK73. *Glasnik hemičara i tehnologa Bosne i Hercegovine*. Požgan, Franc (član uredniškega odbora 2010-). Sarajevo: Hemijski institut Prirodno-matematičkog fakulteta. ISSN 0367-4444. [COBISS.SI-ID 16153346]

OK74. *International journal of organic chemistry*. Stanovnik, Branko (član uredniškega odbora 2011-). [Print ed.]. Irvine, CA: Scientific Research Pub., 2011-. ISSN 2161-4687. <http://www.scirp.org/journal/ijoc>. [COBISS.SI-ID 35113989]

OK75. *Journal of heterocyclic chemistry*. Stanovnik, Branko (član uredniškega odbora 1997-). Provo, Utah, etc.: HeteroCorporation. ISSN 0022-152X. [COBISS.SI-ID 25749248]

OK76. *Molecules*. Stanovnik, Branko (član uredniškega odbora 1998-). Berlin: Springer; Basel: Molecular Diversity Preservation International. ISSN 1420-3049. [COBISS.SI-ID 18462981]

OK77. *Monatshefte fuer Chemie*. Svete, Jurij (član uredniškega odbora 2014-). Wien; New York: Springer, 1968-. ISSN 0026-9247. [COBISS.SI-ID 1914628]

OK78. *Periodica polytechnica. Chemical engineering*. Kočevar, Marijan (član uredniškega odbora 2003-). Budapest: Technical University Budapest. ISSN 0324-5853. [COBISS.SI-ID 405018]

OK79. *Pure and Applied Chemical Sciences*. Kočevar, Marijan (član uredniškega odbora 2013-). [Online Ed.]. Ruse: Hikari Ltd, 2013-. ISSN 1314-7633. <http://www.m-hikari.com/pacs/index.html>. [COBISS.SI-ID 1648431]

OK80. *Recent patents on catalysis*. Požgan, Franc (član uredniškega odbora 2012-2014), Jereb, Marjan (član uredniškega odbora 2012-2014). [Print ed.]. Bussum: Bentham Science Publisher, 2012-. ISSN 2211-548X. <http://www.benthamscience.com/rpcat/>. [COBISS.SI-ID 35774981]

OK81. *TheScientificWorldjournal*. Stanovnik, Branko (član uredniškega odbora 2013-). Boynton Beach (FL): Scientific World, 2001-. ISSN 1537-744X. <http://www.hindawi.com/journals/tswj/>. [COBISS.SI-ID 2607642]

OK82. *Targets in heterocyclic systems chemistry and properties*. Stanovnik, Branko (član uredniškega odbora 2000-). Roma: Società Chimica Italiana. ISSN 1724-9449. [COBISS.SI-ID 1365807]

OK83. *Trends in Heterocyclic Chemistry*. Stanovnik, Branko (član uredniškega odbora 2006-). Trivandrum: Research Trends. ISSN 0972-432X. [COBISS.SI-ID 1365551]

OK84. Založba UL-FKKT, Darko Dolenc, urednik in predsednik uredniškega odbora (od 2003 dalje)

OK85. *Topics in heterocyclic chemistry*. Polanc, Slovenko (član uredniškega odbora 2008-2012, urednik 2013-). Heidelberg; Berlin: Springer. ISSN 1861-9282. <http://springerlink.metapress.com/content/120013/>. [COBISS.SI-ID 33679621]

KATEDRA ZA ANORGANSKO KEMIJSKO TEHNOLOGIJO IN MATERIALE

CHAIR OF INORGANIC CHEMICAL TECHNOLOGY AND MATERIALS

PREDSTOJNIK KATEDRE / HEAD

prof. dr. Radovan Stanislav Pejovnik

SODELAVCI KATEDRE / PERSONNEL

Visokošolski učitelji / *Faculty*

izr. prof. dr. Marjan Marinšek

doc. dr. Barbara Novosel

prof. dr. Stanislav Radovan Pejovnik

v dopolnilnem razmerju / *part time*

prof. dr. Miran Gaberšček

prof. dr. Danilo Suvorov

Visokošolski sodelavci / *Assistants*

dr. Tina Skalar

doc. dr. Klementina Zupan

Raziskovalni sodelavec / *Researcher*

doc. dr. Boštjan Genorio

Mlada raziskovalka <i>Young Researcher</i>	Mentor <i>Mentor</i>	Čas usposabljanja <i>Programme Duration</i>	Oblika usposabljanja <i>Degree</i>
Tina Skalar	J. Maček	2008–2014 (do 31. 3. 2014)	doktorski študij / PhD

IZOBRAŽEVALNA IN RAZISKOVALNA DEJAVNOST KATEDRE EDUCATIONAL AND RESEARCH ACTIVITIES

IZOBRAŽEVALNA DEJAVNOST / LECTURED COURSES

FKKT / FACULTY OF CHEMISTRY AND CHEMICAL TECHNOLOGY

Bolonjski programi 1. stopnje / Bologna 1st Cycle Study Programmes

Kemijsko inženirstvo / *Chemical Engineering* – UN:

Kemijska in procesna varnost / *Chemical and Process Safety*

Materiali za inženirje / *Engineering Materials*

Praktikum iz materialov (izbirni predmet) / *Practical Course in Materials Characterisation (elective course)*

Sodobne metode karakterizacije materialov (izbirni predmet) / *Advanced Methods of Materials Characterisation (elective course)*

Praktikum iz kemijskega inženirstva / *Chemical engineering laboratory*

Tehniška varnost / *Technical Safety* – UN:

Osnove materialov / *Fundamentals of Materials*

Nevarne snovi / *Hazardous Substances*

Kemijska tehnologija / *Chemical Technology* – VS:
Osnove industrijske kemije / *Fundamentals of Industrial Chemistry*
Procesi v industrijski kemiji / *Processes in Industrial Chemistry*
Mehanske operacije (izbirni predmet) / *Mechanical Operations (elective course)*
Praktikum iz materialov (izbirni predmet) / *Practical Course in Materials Characterisation (elective course)*

Bolonjski programi 2.stopnje / *Bologna 2st Cycle Study Programmes*

Nanomateriali in kompoziti / *Nanomaterials and Composites*
Propad gradiv / *Materials decomposition*
Inženorstvo anorganskih materialov / *Engineering of inorganic materials*
Kemija in tehnologija keramike in silikatov / *Chemistry and technology of ceramics and silicates*
Kemijska in procesna varnost / *Chemical process safety*
Uporaba in osnove propada gradiv / *Use of materials and materials decomposition*
Uporabna elektrokemija / *Applied electrochemistry*

Bolonjski programi 3. stopnje / *Bologna 3rd Cycle Doctoral Study Programmes*

Izbrana poglavja iz inženirstva materialov / *Selected Topics in Materials Engineering*
Izbrana poglavja iz materialov za energetiko in varovanje okolja / *Selected Topics in Materials for Energy Industry and Environmental Protection*

IZVEN FKKT / EXTRAMURAL COURSES

Bolonjski programi 1.stopnje / *Bologna 1st Cycle Study Programmes*

Tehnologija materialov I, II / *Technology of Materials I, II*, ALUO-UN
Industrijski materiali (izbirni predmet) / *Industrial Materials (elective course)*, FMF – VS

RAZISKOVALNA DEJAVNOST / RESEARCH ACTIVITIES

- Raziskave in razvoj anorganskih materialov in produktov ter procesov za njihovo pripravo, materiali in kompoziti za visokotemperaturne gorivne celice, karakterizacija materialov / *Research and Development of Inorganic Materials, Products and Processes for their Preparation; Materials and Composites for High Temperature Fuel Cells; Characterization of Materials*
- Nanomateriali in nanokompoziti / *Nanomaterials and Nanocomposites*
- Industrijske odpadne snovi / *Industrial Waste Materials*
- Vpliv defektne strukture na sintranje oksidov, pretežno rutila / *Defect Structure Influence on Sintering of Oxides (Mostly Rutile)*
- Eksperimentalna verifikacija in statistična analiza veljavnosti različnih modelov procesa sintranja / *Experimental Verification and Statistical Analysis of Different Sintering Models*
- Proučevanje procesa sintranja v prisotnosti tekoče faze ter sintranja v kemijsko heterogenih sistemih / *Study of Liquid Phase Sintering and Sintering in Heterogeneous Systems*
- Razvoj in uporaba impedančne spektroskopije za proučevanje ionskih prevodnikov in meje ionski prevodnik-kovina; znaten del aktivnosti poteka tudi na področju Li ionskih akumulatorjev / *Impedance Spectroscopy Method for the Development of Ionic Conductors and Ionic Conductor-Metal Boundary Characterisation*
- Sinteza in karakterizacija keramičnih in kompozitnih materialov za visokotemperaturne tehnologije npr. visokotemperaturne gorivne celice / *Synthesis and Characterisation of Ceramic and Composite Materials for High Temperature Technologies e.g. High Temperature Fuel Cells*
- Priprava kompleksnih keramičnih oksidov, mešanih oksidov in kompozitov z uporabo sol-gel tehnike in zgorevalne sinteze / *Sol-Gel and Combustion Synthesis Techniques for the Preparation of Complex Ceramic Oxides, Mixed Oxides and Composites*

- Sinteza, karakterizacija in raziskave lastnosti enodimenzionalnih nanostrukturiranih materialov / *Synthesis, Characterisation and Properties of One-Dimensional Nanostructured Materials*

POMEMBNI DOSEŽKI SODELAVCEV KATEDRE / SIGNIFICANT ACHIEVEMENTS OF THE CHAIR STAFF

NAGRADE, PRIZNANJA / AWARDS, RECOGNITIONS

- Ž. Rozman: Prešernova nagrada FKKT za leto 2014 (mentor B. Novosel) / *The Faculty Prešeren Award for 2014*

RAZISKOVALNA OPREMA / RESEARCH EQUIPMENT

- Netzsch STA 409 aparatura za simultano termično analizo / *Apparatus for Simultaneous Thermal Analysis*
- Mettler TA 4000:
- TG 50 modul / *TG 50 Module*
- DSC 20 modul / *DSC 20 Module*
- Masni spektrometer Pfeiffer / *Mass Spectrometer Pfeiffer*
- Agilent Micro GC 3000A, plinski kromatograf / *Gas Chromatograph*
- Vrstični elektronski mikroskop Jeol T300 / *Scanning Electron Microscope Jeol T300*
- Segrevalni mikroskop Leitz Wetzlar 301-200-301 / *Heating Microscope Leitz Wetzlar 301-200-301*
- Optični mikroskop za metalografske preiskave Leitz / *Optical Microscope Leitz*
- Analizator velikosti in porazdelitve velikosti delcev Fritzsche Analysette 22 / *Particle Sizer Fritzsche Analysette 22*
- Impedančni spektrometer / *Impedance Analyser*
- *1250 Frequency Response Analyser Solartron Schlumberg*
- *1286 Electrochemical Interface Solartron Schlumberg*
- Mikroskop na atomsko silo Nanoeducator NT-MTD / *Scanning Probe Microscope Nanoeducator NT-MTD*
- Vrstični elektronski mikroskop na poljsko emisijo Zeiss ULTRA plus / *Field Emission Scanning Electron Microscope Zeiss ULTRA Plus*
- Netzsch STA 449 F3 Jupiter aparatura za simultano termično analizo / *Netzsch STA 449 F3 Jupiter Apparatus for Simultaneous Thermal Analysis (CO-NOT)*
- Masni spektrometer Netzsch QMS 403C Aëolos / *Mass Spectrometer Netzsch QMS 403C Aëolos (CO-NOT)*
- Analizator specifične površine in poroznosti Micromeritics ASAP 2020 / *Surface Area and Porosity Analyzer Micromeritics ASAP 2020 (CO-NOT)*
- Mikroskop za korelacijsko, konfokalno in svetlobno mikroskopijo Zeiss / *Microscope for Correlation, Confocal and Light Microscopy Zeiss (CO-NAMASTE)*
- Analizator velikosti delcev Microtrac Bluwave S3500 SI / *Particle sizer Microtrac Bluwave S3500 SI*

RAZISKOVALNI PROGRAMI IN PROJEKTI / RESEARCH PROGRAMMES AND PROJECTS

RAZISKOVALNI PROGRAMI / RESEARCH PROGRAMMES

- P-0175 Sinteza, struktura, lastnosti snovi in materialov / *Synthesis, Structure and Properties of Compounds and Materials*
Vodja programa / *Principal Researcher*: A. Meden

BIBLIOGRAFIJA 2014 / REFERENCES 2014

IZVIRNI ZNANSTVENI ČLANEK / ORIGINAL SCIENTIFIC ARTICLE

- ATM1.** HODNIK, Nejc, JOZINOVIČ, Barbara, ZORKO, Milena, GABERŠČEK, Miran. Stability of commercial Pt/C low temperature fuel cell catalyst : electrochemical IL-SEM study. V: PAVKO, Aleksander (ur.), MILOŠEV, Ingrid (ur.), GABERŠČEK, Miran (ur.). *4th Regional symposium on electrochemistry - South East Europe (RSE-SEE), May 26-30, 2013 Ljubljana, Slovenia*, (Acta chimica slovenica (Print ed.)), ISSN 1318-0207, Vol. 61, no. 2). Ljubljana: Slovensko kemijsko društvo, 2014, vol. 61, no. 2, str. 280-283. <http://acta.chem-soc.si/61/61-2-280.pdf>. [COBISS.SI-ID 5506842]
- ATM2.** VOLMAN, Vladimir, ZHU, Yu, RAJI, Abdul-Rahman O., GENORIO, Boštjan, LU, Wei, XIANG, Changsheng, KITTRELL, Carter, TOUR, James M. Radio-frequency-transparent, electrically conductive graphene nanoribbon thin films as deicing heating layers. *ACS applied materials & interfaces*, ISSN 1944-8244. [Print ed.], 2014, vol. 6, no. 1, str. 298-304, ilustr. <http://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/am404203y>, doi: 10.1021/am404203y. [COBISS.SI-ID 1671215]
- ATM3.** MARINŠEK, Marjan, MEDEN, Anton, SKALAR, Tina, KASUNIC, Marta. The novel crystal structure with Zr₆(OH)₄ core and hydrazine carboxylate ligands, and its thermal properties. *Acta chimica slovenica*, ISSN 1318-0207, 2014, vol. 61, no. 3, str. 439-446, ilustr. <https://journals.matheo.si/index.php/ACSi/article/view/977>. [COBISS.SI-ID 1781807]
- ATM4.** GABERŠČEK, Miran. A method for fast estimation of the rate-limiting step in lithium-ion batteries. *Acta chimica slovenica*, ISSN 1318-0207. [Tiskana izd.], 2014, vol. 61, no. 3, str. 480-487. <https://journals.matheo.si/index.php/ACSi/article/view/981/200>. [COBISS.SI-ID 5593370]
- ATM5.** STOJKOVIČ, Gorazd, KRIVEC, Matic, VESEL, Alenka, MARINŠEK, Marjan, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. Surface cell immobilization within perfluoroalkoxy microchannels. *Applied Surface Science*, ISSN 0169-4332. [Print ed.], 2014, vol. 320, no. 1, str. 810-817, ilustr. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169433214020558>, doi: 10.1016/j.apusc.2014.09.064. [COBISS.SI-ID 1791791]
- ATM6.** JOVANOVIČ, Primož, PAVLIŠIČ, Andraž, ŠELIH, Vid Simon, ŠALA, Martin, HODNIK, Nejc, BELE, Marjan, HOČEVAR, Samo B., GABERŠČEK, Miran. New insight into platinum dissolution from nanoparticulate platinum-based electrocatalysts using highly sensitive in situ concentration measurements. *ChemCatChem*, ISSN 1867-3880, Feb. 2014, vol. 6, iss. 2, str. 449-453. <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/cctc.201300936/abstract>, doi: 10.1002/cctc.201300936. [COBISS.SI-ID 5403418]
- ATM7.** VIZINTIN, Alen, UBRANI M., Manu Patel, GENORIO, Boštjan, DOMINKO, Robert. Effective separation of lithium anode and sulfur cathode in lithium-sulfur batteries. *ChemElectroChem*, ISSN 2196-0216, Jun. 2014, vol. 1, iss. 6, str. 1040-1045. <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/celc.201402039/pdf>, doi: 10.1002/celc.201402039. [COBISS.SI-ID 5504794]
- ATM8.** PIRNAT, Klemen, BITENC, Jan, JERMAN, Ivan, DOMINKO, Robert, GENORIO, Boštjan. Redox-active functionalized graphene nanoribbons as electrode material for Li-ion batteries. *ChemElectroChem*, ISSN 2196-0216, Dec. 2014, vol. 1, iss. 12, str. 2131-2137. <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/celc.201402234/pdf>, doi: 10.1002/celc.201402234. [COBISS.SI-ID 5613082]
- ATM9.** GENORIO, Boštjan, ŽNIDARŠIČ, Andrej. Functionalization of graphene nanoribbons. *Journal of physics. D. Applied physics*, ISSN 0022-3727, mar. 2014, vol. 47, no. 9, art. no. 094012 (str. 1-13), ilustr. http://iopscience.iop.org/0022-3727/47/9/094012/pdf/0022-3727_47_9_094012.pdf, doi: 10.1088/0022-3727/47/9/094012. [COBISS.SI-ID 1679151]
- ATM10.** PECOVSKA-GJORGJEVIČ, Margareta, ALEKSOVSKA, Slobotka, MARINŠEK, Marjan, DIMITROVSKA-LAZOVA, Sandra. Impedance and AC conductivity of GdCr₃(1-x)Co_x perovskites. *Journal of the American Ceramic Society*, ISSN 0002-7820, no. 12, dec. 2014, str. 3864-3871, ilustr. <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1111/jace.13205/full>, doi: 10.1111/jace.13205. [COBISS.SI-ID 1536161219]
- ATM11.** SKALAR, Tina, ZUPAN, Klementina, MARINŠEK, Marjan, NOVOSEL, Barbara, MAČEK, Jadran. Microstructure evaluation of Ni-SDC synthesized with an innovative method and Ni-SDC/SDC bi-layer construction. *Journal of the European ceramic society*, ISSN 0955-2219. [Print ed.], 2014, vol. 34, no. 2, str. 347-354, ilustr. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0955221913003786>, doi: 10.1016/j.jeurceramsoc.2013.08.020. [COBISS.SI-ID 1615151]
- ATM12.** STAMBOLIČ, Aleš, MARINŠEK, Marjan. The preparation of magnetic nanoparticles based on cobalt ferrite or magnetite = Priprava magnetnih nanodelcev na osnovi kobaltovega ferita ali magnetita. *Materiali in tehnologije*, ISSN 1580-2949. [Tiskana izd.], mar.-apr. 2014, letn. 48, št. 2, str. 275-280, ilustr. <http://mit.imt.si/Revija/>. [COBISS.SI-ID 1045418]
- ATM13.** SKALAR, Tina, MARINŠEK, Marjan, LUBEJ, Martin, LUKEŽIČ, Marjan, SKALAR, Tomaž, MAČEK, Jadran. Modelling of operating parameters in an SOFC testing system = Modeliranje in parametri delovanja sistema za preizkušanje SOFC. *Materiali in tehnologije*, ISSN 1580-2949. [Tiskana izd.], no. 6, 2014, str. 861-867. [COBISS.SI-ID 1536129731]
- ATM14.** ZUPAN, Klementina, MARINŠEK, Marjan. Combustion-derived La₃(1-x)Sr_xMn_{0.5}Cr_{0.5}O₁₀ (3[plus minus][delta]) (x = (0.20, 0.25)) perovskite : preparation, properties, characterization = Zgorevalno sintezo pridobljen perovskit La₃[spodaj] (1-x)Sr_xMn_{0.5}Cr_{0.5}[spodaj] 0,5O₁₀ [spodaj] (3[plus minus][delta]) (x = (0,20, 0,25)) : priprava, lastnosti, karakterizacija. *Materiali in tehnologije*, ISSN 1580-2949. [Tiskana izd.], no. 6, 2014, str. 885-891, ilustr. [COBISS.SI-ID 1536154563]
- ATM15.** JAPIČ, Dajana, BITENC, Marko, MARINŠEK, Marjan, CRNJAK OREL, Zorica. The impact of nano-milling on porous ZnO prepared from layered zinc hydroxide nitrate and zinc hydroxide carbonate. *Materials research bulletin*, ISSN 0025-5408. [Print ed.], Dec. 2014, vol. 60, str. 738-745. http://ac.els-cdn.com/S0025540814005637/1-s2.0-S0025540814005637-main.pdf?_tid=baab291a-5462-11e4-bfd2-00000aab0f6c&acdnat=1413374554_b87ec548ce87c788b2cfac5efdb8d529, doi: 10.1016/j.materresbull.2014.09.061. [COBISS.SI-ID 5564442]
- ATM16.** MOŽIR, Alenka, KRALJ CIGIČ, Irena, MARINŠEK, Marjan, STRLIČ, Matija. Material properties of historic parchment : a reference collection survey. *Studies in conservation*, ISSN 0039-3630, May 2014, vol. 59, no. 3, str. 136-149. <http://www.maneyonline.com/doi/abs/10.1179/2047058413Y.000000100?journalCode=sic>, doi: 10.1179/2047058413Y.000000100. [COBISS.SI-ID 5314586]
- ATM17.** ZORKO, Milena, JOZINOVIČ, Barbara, BELE, Marjan, HODNIK, Nejc, GABERŠČEK, Miran. SEM method for direct visual tracking of nanoscale morphological changes of platinum based electrocatalysts on fixed locations upon electrochemical or thermal treatments. *Ultramicroscopy*, ISSN 0304-3991. [Print ed.], May 2014, vol. 140, str. 44-50, ilustr. http://ac.els-cdn.com/S0304399114000448/1-s2.0-S0304399114000448-main.pdf?_tid=ce275786-b4e7-11e3-9d86-00000aab0f27&acdnat=1395839524_5460388cd9b91d115c569c8f17588062, doi: 10.1016/j.ultramic.2014.02.006. [COBISS.SI-ID 5450266]

PREGLEDNI ZNANSTVENI ČLANEK / REVIEW ARTICLE

ATM18. NADRAH, Peter, PLANINŠEK, Odon, GABERŠČEK, Miran. Stimulus-responsive mesoporous silica particles. *Journal of Materials Science*, ISSN 0022-2461, Jan. 2014, vol. 49, iss. 2, str. 481-495, ilustr. http://download.springer.com/static/pdf/350/art%253A10.1007%252Fs10853-013-7726-6.pdf?auth66=1389787342_1600c1356d1881bf1059dca808bcf9d8&ext=.pdf, doi: 10.1007/s10853-013-7726-6. [COBISS.SI-ID 36961285]

OBJAVLJENI ZNANSTVENI PRISPEVEK NA KONFERENCI / PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTION

ATM19. MARINŠEK, Marjan, NOVOSEL, Barbara, LUKEŽIČ, Marjan. Primerjava termogravimetrične metode z numeričnim dinamičnim modeliranjem za proces odgorevanja. V: *Varstvo pri delu, varstvo pred požari in medicina dela : dvodnevni posvet z mednarodno udeležbo, Portorož, 13.-14. 5. 2014*. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Oddelek za tehniško varnost, 2014, str. 1-9. [COBISS.SI-ID 1710895]

OBJAVLJENI POVZETEK ZNANSTVENEGA PRISPEVKA NA KONFERENCI (VABLJENO PREDAVANJE) / PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTION ABSTRACT (INVITED LECTURE)

ATM20. KOKALJ, Anton, DOMINKO, Robert, MALI, Gregor, MEDEN, Anton, GABERŠČEK, Miran, JAMNIK, Janez. Designing $\text{Li}_{2\text{Mn}}\text{Mn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{SiO}_4$ as a potential Li-battery cathode material. V: 1st Workshop on Materials Science for Energy Related Applications, [and] 12th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry - Physical Chemistry 2014, September 26-27, 2014, Belgrade, Serbia970. *Book of abstracts*. Belgrade: Faculty of Physical Chemistry, 2014, str. 10. [COBISS.SI-ID 28026151]

ATM21. PIRNAT, Klemen, BITENC, Jan, GENORIO, Boštjan. Grafen - material prihodnosti. V: Mednarodna delavnica »NanoScience: Nanomateriali v okoljevarstvu in energetiki«, Maribor, 3.-12. junij 2014. LOBNIK, Aleksandra (ur.), NOVAK, Nina (ur.). *Zbornik prispevkov = Book of abstracts*. Maribor: Fakulteta za strojništvo, Laboratorij za kemijo in okoljevarstvo, 2014, str. [37-38]. [COBISS.SI-ID 5597978]

SAMOSTOJNI ZNANSTVENI SESTAVEK ALI POGlavJE V MONOGRAFSKI PUBLIKACIJI INDEPENDENT SCIENTIFIC COMPONENT PART OR A CHAPTER IN A MONOGRAPH

ATM22. GABERŠČEK, Miran, JAMNIK, Janko, WEICHERT, Katja, SAMUELIS, Dominik, MAIER, Joachim. LiFePO_4 : from an insulator to a robust cathode material. V: YAZAMI, Rachid (ur.). *Nanomaterials for lithium-ion batteries : fundamentals and applications*. Singapore: Pan Stanford, cop. 2014, str. 259-311. [COBISS.SI-ID 5363738]

ENCIKLOPEDIJA, SLOVAR, LEKSIKON, PRIROČNIK, ATLAS, ZEMLJEVID / ENCYCLOPEDIA, DICTIONARY, LEXICON, MANUAL, ATLAS, MAP

ATM23. BÖHM, Lučka (avtor, urednik), GORIŠEK, Katja, DODIČ-FIKFAK, Metoda, IVANETIČ, Igor, ŠPRAH, Lilijana, HORVAT, Jožef, NOVOSEL, Barbara, TOŠ ZAJŠEK, Andreja, LUKIČ, Goran. *Žepni priročnik za delavske zaupnike za varnost in zdravje pri delu : publikacija za delavske predstavnike*. Ljubljana: Zveza svobodnih sindikatov Slovenije, 2014. 263 str., ilustr. ISBN 978-961-6708-24-1. [COBISS.SI-ID 275998464]

KONČNO POROČILO O REZULTATIH RAZISKAV / FINAL RESEARCH REPORT

ATM24. MISLEJ, Vesna, NOVOSEL, Barbara. *Poročilo o načinu zgorevanja alternativnega trdnega goriva - peletiziranega pregnitega blata Centralne čistilne naprave Ljubljana, JP VODOVOD-KANALIZACIJA d.o.o. : št. poročila: 2014/004*. Ljubljana: Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2014. 23 f., graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 1744687]

ATM25. BITENC, Jan, PIRNAT, Klemen, GENORIO, Boštjan, DOMINKO, Robert. *Results from Honda initiation grant Europe : full report from the project Honda Initiation Grant Europe*. Ljubljana: Kemijski inštitut, Mar. 2014. 18 str., ilustr. [COBISS.SI-ID 5450010]

PATENTNA PRIJAVA / PATENT APPLICATION

ATM26. BELE, Marjan, GABERŠČEK, Miran, KAPUN, Gregor, HODNIK, Nejc, HOČEVAR, Stanko. *Electrocatalytic composite(s), associated composition(s) and associated process(es) : patentna prijava : JP 2014/525829 (A), 2014-10-02*. Tokio: Japan Patent Office, 2014. 68 str., ilustr. [COBISS.SI-ID 4902938]

ATM27. ZORKO, Milena, SIMONČIČ, Barbara, VASILJEVIČ, Jelena, TOMŠIČ, Brigita, JERMAN, Ivan, GABERŠČEK, Miran. *Postopek za pripravo samočistilnih pralno obstojnih bombažnih tekstilij : patentna prijava št. P-201400289, z dne 18.08.2014*. Ljubljana: Urad RS za intelektualno lastnino, 2014. 24 str., ilustr. [COBISS.SI-ID 3099504]

UREDNIK / EDITORSHIP

ATM28. *Acta chimica slovenica*. Pejovnik, Stane (član uredniškega odbora 1998-), Gaberšček, Miran (gostujoči urednik 2014). [Tiskana izd.]. Ljubljana: Slovensko kemijsko društvo = Slovenian Chemical Society, 1993-. ISSN 1318-0207. <http://acta.chem-soc.si/>. [COBISS.SI-ID 14086149]

ATM29. *International journal of applied glass science*. Suvorov, Danilo (član uredniškega odbora 2010-). Hoboken: Wiley Subscription Services on behalf of the American Ceramic Society and Wiley Periodicals. ISSN 2041-1286. [COBISS.SI-ID 24491047]

ATM30. *ISRN Ceramics (Print)*. Zupan, Klementina (član uredniškega odbora 2012-). Cairo: Hindawi Publishing Corporation. ISSN 2090-7494. [COBISS.SI-ID 1598255]

-
- ATM31.** *Journal of the European Ceramic Society*. Suvorov, Danilo (član uredniškega odbora 2002-). [Print ed.]. Barking: Elsevier, 1989-. ISSN 0955-2219. [COBISS.SI-ID 6342151]
- ATM32.** *Materiali in tehnologije*. Suvorov, Danilo (član uredniškega odbora 2002-), Pejovnik, Stane (član uredniškega odbora 2003-). [Tiskana izd.]. Ljubljana: Inštitut za kovinske materiale in tehnologije, 2000-. ISSN 1580-2949. <http://www.imt.si/revija-materiali-in-tehnologije/>. [COBISS.SI-ID 106193664]
- ATM33.** *TheScientificWorldjournal*. Marinšek, Marjan (član uredniškega odbora 2012-). Boynton Beach (FL): Scientific World, 2001-. ISSN 1537-744X. <http://www.hindawi.com/journals/tswj/>. [COBISS.SI-ID 2607642]

KATEDRA ZA KEMIJSKO, BIOKEMIJSKO IN EKOLOŠKO INŽENIRSTVO

CHAIR OF CHEMICAL, BIOCHEMICAL AND ENVIRONMENTAL
ENGINEERING

PREDSTOJNIK KATEDRE / HEAD

do / until 14. 9. 2014 prof. dr. Igor Plazl

PREDSTOJNICA KATEDRE / HEAD

od / since 15. 9. 2014 doc. dr. Andreja Žgajnar Gotvajn

SODELAVCI KATEDRE / PERSONNEL

Visokošolski učitelji / Faculty

prof. dr. Marin Berovič
doc. dr. Ana Lakota (do 1. 2. 2014)
prof. dr. Aleksander Pavko
prof. dr. Igor Plazl
doc. dr. Andreja Zupančič Valant
doc. dr. Andreja Žgajnar Gotvajn
izr. prof. dr. Polona Žnidaršič Plazl

v dopolnilnem razmerju / *part-time*
akademik prof. dr. Janez Levec

Visokošolski sodelavci / Assistants

dr. Gabriela Kalčíková
dr. Martin Lubej

Raziskovalci / Researchers

Michael kingston Michael Rayappan
Nataša Miložič
dr. Uroš Novak
Mojca Seručnik
Kamran Ali Syed
dr. Špela Peternel (4. 2. 2014 do 3.8.2014)
dr. Gorazd Stojkovič (16. 6.2014 do 15. 9. 2014)

Tehniki / Technicians

Klemen Birtič
Vesna Delalut

Mladi raziskovalci <i>Young Researchers</i>	Mentor <i>Mentor</i>	Čas usposabljanja <i>Programme Duration</i>	Oblika usposabljanja <i>Degree</i>
Uroš Novak	P. Žnidaršič Plazl	2010–2014 (do 30. 4. 2014)	doktorski študij / PhD
Martin Lubej	I. Plazl	2010–2014 (do 28. 2. 2014)	doktorski študij / PhD

IZOBRAŽEVALNA IN RAZISKOVALNA DEJAVNOST KATEDRE EDUCATIONAL AND RESEARCH ACTIVITIES

IZOBRAŽEVALNA DEJAVNOST / LECTURED COURSES

FKKT / FACULTY OF CHEMISTRY AND CHEMICAL TECHNOLOGY

Bolonjski programi 1. stopnje / *Bologna 1st Cycle Study Programmes*

Kemijsko inženirstvo / *Chemical Engineering* – UN:

Osnove inženirstva / *Engineering Fundamentals*

Praktikum iz kemijskega inženirstva / *Practical Course in Chemical Engineering*

Osnove okoljskega inženirstva (izbirni predmet) / *Introduction to Environmental Engineering (elective course)*

Fluidna mehanika / *Fluid Mechanics*

Biokemija / *Biochemistry* – UN:

Osnove biokemijskega inženirstva (izbirni predmet) / *Fundamentals of Biochemical Engineering (elective course)*

Tehniška varnost / *Technical Safety* – UN:

Varstvo okolja I / *Environmental Protection I*

Osnove procesne tehnike / *Fundamentals of Process Engineering*

Kemijska tehnologija / *Chemical Technology* - VS:

Osnove biokemije z biotehnologijo / *Fundamentals of Biochemistry with Biotechnology*

Osnove kemijskega inženirstva / *Fundamentals of Chemical Engineering*

Osnovne operacije v kemijskem inženirstvu / *Unit operations in Chemical Engineering*

Biotehnološki procesi in naprave (izbirni predmet) / *Processes and Equipment in Biotechnology (elective course)*

Industrijski procesi in trajnostni razvoj / *Industrial Processes and Sustainable Development*

Kemijsko inženirski praktikum / *Practicum in Chemical Engineering*

Praktično usposabljanje / *Practical Training*

Bolonjski programi 2. stopnje / *Bologna 2nd Cycle Master Study Programmes*

Kemijsko inženirstvo / *Chemical Engineering* – UN:

Kemijsko inženirska dinamika / *Chemical Engineering Dynamics*

Kemijsko mikroprocesno inženirstvo / *Chemical Microprocess Engineering*

Bioreaktorsko inženirstvo (izbirni predmet) / *Bioreactor Engineering (elective course)*

Bioremediacijske tehnologije (izbirni predmet) / *Bioremediation Technologies (elective course)*

Bioproceno inženirstvo / *Bioprocess engineering*

Biotransformacije (izbirni predmet) / *Biotransformations (elective course)*

Biotehnologija (izbirni predmet) / *Biotechnology (elective course)*

Procesi v tehnologijah varstva okolja/*Environmental protection technology processes*

Industrijska ekologija in čistejša proizvodnja (izbirni predmet) / *Industrial ecology and clean technology (elective course)*

Kataliza in heterogeni reakcijski sistemi / *Catalysis and Heterogenous Reaction Systems*

Kemijsko mikroprocesno inženirstvo / *Chemical Microprocess Engineering*

Bolonjski programi 3. stopnje / *Bologna 3rd Cycle Doctoral Study Programmes*

Izbrana poglavja iz biotehnoloških procesov / *Advanced Bioprocess Engineering*

Izbrana poglavja iz transportnih pojavov / *Applied Transport Phenomena*

Izbrana poglavja iz okoljskega inženirstva / *Selected Topics in Environmental Engineering*
Izbrana poglavja iz kemijskega reakcijskega inženirstva / *Selected Topics in Chemical Reaction Engineering*

Izven FKKT / Extramural Courses

Bolonjski programi 1. stopnje / *Bologna 1st Cycle Study Programmes*

Kemijske in fizikalne osnove / *Chemical and Physical Principles*, ALUO
Naravoslovje v restavraciji I, II, III / *Natural Sciences in Restoration I, II, III*, ALUO
Tehnološko procesništvo / *Unit Operations in Food Industry*, BF – UN

Bolonjski programi 2. stopnje / *Bologna 2nd Cycle Master Study Programmes*

Industrijsko biokemijsko inženirstvo / *Industrial Biochemical Engineering*, BF

Bolonjski programi 3. stopnje / *Bologna 3rd Cycle Doctoral Study Programmes*

Miniatrizacija naprav v bioprocseh / *Miniaturization in Bioprocessing* – UL
Interdisciplinarni doktorski študijski program Bioznanosti / *UL Interdisciplinary Doctoral Study Programme in Biosciences*
Procesništvo in tehnologije v živilstvu / *Processing and Technology in Food Industry* - UL
Interdisciplinarni doktorski študijski program Bioznanosti – živilstvo / *UL Interdisciplinary Doctoral Study Programme in Biosciences*
Modeliranje bioprocsov / *Bioprocess Modelling* - UL Interdisciplinarni doktorski študijski program Bioznanosti / *UL Interdisciplinary Doctoral Study Programme in Biosciences*
Kemija in tehnologija okolja / *Environmental Chemistry and Technology* – UL
Interdisciplinarni doktorski študijski program Varstvo okolja / *UL Interdisciplinary Doctoral Study Programme in Environmental Protection*
Industrijska ekologija / *Industrial Ecology* – UL Interdisciplinarni doktorski študijski program Varstvo okolja / *UL Interdisciplinary Doctoral Study Programme in Environmental Protection*
Gospodarjenje z odpadki / *Solid Waste Management* – UL Interdisciplinarni doktorski študijski program Varstvo okolja / *UL Interdisciplinary Doctoral Study Programme in Environmental Protection*

RAZISKOVALNA DEJAVNOST / RESEARCH ACTIVITIES

- Raziskave s področja procesnega inženirstva / *Process Engineering Research*
 - Mikrofluidika / *Microfluidics*
 - Transportni pojavi v mikro in nano tehnologiji / *Transport Phenomena in Micro- & Nano- technology*
 - Sinteze in aplikacije inženirskih nanomaterialov / *Synthesis and Application of Engineered Nanomaterials*
 - Raziskave in razvoj znanj za tehnološko in okoljsko optimizacijo procesov / *Optimization Research in the Field of Process and Environmental Technology*
 - Reologija in mešanje / *Rheology and Mixing*
 - Snovni prenos v koloni z mehurčki / *Mass Transfer in a Bubble Column*
- Raziskave s področja biokemijskega inženirstva / *Research in the Field of Biochemical Engineering and Biotechnology*
 - Raziskave in razvoj področja biosinteze medicinskih učinkovin višjih gliv s submerzno kultivacijo in kultivacijo na trdnih gojiščih / *Research on pharmaceutically active products of medicinal fungi by submerged and solid state cultivation*
 - Raziskave in razvoj procesnega inženirstva v vinarstvu / *Research in wine process engineering*

Raziskave in razvoj biotransformacij in izolacije bioproduktov v mikrofluidnih sistemih / *Research and Development of Biotransformations and Downstream Processes within Microfluidic Systems*
Pridobivanje encimov z nitastimi glivami / *Enzyme production with filamentous fungi*
Adsorpcija farmacevtskih učinkovin v koloni s polnilom / *Adsorption of Pharmaceutical Compounds in a Packed Bed Column*

- Raziskave s področja okoljskega inženirstva / *Research in the Field of Environmental Engineering*
Bioremediacija z glivami bele trohnobe / *Bioremediation with White Rot Fungi*
Čiščenje močno onesnaženih odpadnih vod z naprednimi oksidacijskimi postopki / *Advanced Oxidation Processes for Treatment of Heavily Polluted Wastewaters*
Spremljanje učinkovitosti čiščenja odpadnih vod z biotesti / *Evaluation of Wastewater Treatment Efficiency Using Biotests*
Vrednotenje vpliva kemikalij in odpadnih vod na okolje / *Assessment of environmental impact of compounds and wastewaters*

POMEMBNI DOSEŽKI SODELAVCEV KATEDRE / SIGNIFICANT ACHIEVEMENTS OF THE CHAIR STAFF

NAGRADE, PRIZNANJA / AWARDS, RECOGNITIONS

- Polona Žnidaršič Plazl, prejemnica Fulbrightove štipendije / *Fulbright Grant*
- Hočevar, Jožica. Postopki za določanje delovanja monooksigenaz in ketoreduktaz v procesih kemo-encimske sinteze. V: PLEVNIK, Miha (ur.). *44. Krkine nagrade : znanost povezuje : zbornik povzetkov : 24. simpozij, Novo mesto, 17. oktober 2014*. Novo mesto: Krka, (Marin Berovič mentor/A.Gasparič somentor) Procedures for determining the operation of monooxygenases and ketoreductases in the process of chemo-enzymatic synthesis. V: PLEVNIK, Miha (ur.). *44. Krka Awards 24. simpozij, Novo mesto, 17. oktober 2014*. (M.Berovic supervisor/ co-supervisor A. Gasparič)

ČLANSTVO V AKADEMIJAH / MEMBERSHIP IN ACADEMIES

- J. Levec, redni član Slovenske akademije znanosti in umetnosti / *Full Member, Slovenian Academy of Sciences and Arts*
- M. Berovič, član / *Member, New York Academy of Science*

ČLANSTVO V MEDNARODNIH UREDNIŠKIH ODBORIH / MEMBERSHIP IN INTERNATIONAL EDITORIAL BOARDS

- I. Plazl, *Chemical and Biochemical Engineering Quarterly*
- A. Pavko, glavni urednik / *Editor-in-Chief, Acta Chimica Slovenica*
- A. Pavko, *Food Technology and Biotechnology*
- M. Berovič, *Co-Editor, Encyclopaediae of Life Support Systems EOLSS – Vol. Biotechnology*
- M. Berovič, *Executive Editor, Journal of Biotechnology and Biomaterials*
- M. Berovič, *Editorial Board Member, Phytomedicine*
- M. Berovič, *Associate Editor, Biotechnology Annual Review*
- M. Berovič, *Editor, Biochemical Engineering, New Biotechnology*
- J. Levec, *Acta Chimica Slovenica*
- J. Levec, *Chinese Journal of Chemical Engineering*.
- J. Levec, *International Journal of Chemical Engineering*
- P. Žnidaršič Plazl, *Chemical and Biochemical Engineering Quarterly*

ČLANSTVO V MEDNARODNIH ZNANSTVENIH ODBORIH / MEMBERSHIP IN INTERNATIONAL SCIENTIFIC COMMITTEES

- P. Žnidaršič Plazl, članica znanstvenega odbora / *Member of the Scientific Committee ESAB: EFB Section on Applied Biocatalysis*
- I. Plazl, član znanstvenega odbora / *Member of the EFCE – CAPE Working Party*
- I. Plazl, član znanstvenega odbora / *Member of the EFCE – Working Party on Process Intensification*
- P. Žnidaršič Plazl, članica upravnega odbora / *member of the Management Committee CMST COST Action CM1303 Systems Biocatalysis*
- I. Plazl, član upravnega odbora / *member of the Management Committee MPNS COST Action MP1305 Flowing matter*

RAZISKOVALNA OPREMA / RESEARCH EQUIPMENT

- Plinski kromatograf HP / *Gas Chromatograph HP*
- Tekočinski kromatograf Knauer / *HPLC Knauer*
- Tekočinski kromatograf Varian / *HPLC Varian*
- Tekočinski kromatograf Shimadzu / *HPLC Shimadzu*
- Rotacijski reometer HAAKE RS 150 / *Rheometer HAAKE RS 150*
- Rotacijski reometer HAAKE CV 20 / *Rheometer HAAKE CV 20*
- UV-VIS spektrofotometer Perkin Elmer Lambda 25 / *UV-VIS Spectrophotometer Perkin Elmer Lambda 25*
- Mikrovalovni reaktor / *Microwave Reactor*
- Laboratorijski bioreaktor / *Benchtop Fermenter Type KLF 2000*
- TOC 5000A Shimadzu aparatura / *TOC 5000A Analyser Shimadzu*
- Vary 50 Varian spektrofotometer / *Vary 50 Varian Spectrophotometer*
- Aparatura za določanje toksičnosti LUMISTox Dr. Lange / *Luminometer for Toxicity Tests LUMISTox Dr. Lange*
- Aparatura aerobni digester W11-A / *Aerobic Digester W11-A*
- Rotacijski reometer- Physica MCR 301 / *Modular Compact Rheometer Physica MCR 301*
- Merilni sistem Protos 3400C za merjenje raztopljenega kisika / *Measuring System Protos 3400C with DO Measuring Module*
- Laboratorijski bioreaktorji Bioengineering AG, 2, 5,10, 15 l / *Laboratory Bioreactors Bioengineering AG, 2, 5,10, 15 l*
- Laboratorijski bioreaktorji INFORS 5,10 50 l / *Laboratory Bioreactors INFORS 5,10 50 l*
- Laboratorijski bioreaktorji Chemap AG, 3x10 l / *Laboratory Bioreactors Chemap AG, 3x10l*
- Stresalnik KS 40001 inkubatorski Control IKA / *Thermostated Shaker Control IKA*
- Invertni fluorescenčni mikroskop Leica DM IL LED Fluo / *Inverted Fluorescence Microscope Leica DM IL LED Fluo*

RAZISKOVALNI PROGRAMI IN PROJEKTI / RESEARCH PROGRAMMES AND PROJECTS

RAZISKOVALNI PROGRAMI / RESEARCH PROGRAMMES

- P2-0191 Kemijsko inženirstvo / *Chemical Engineering*
Vodja programa / *Principal Researcher*: M. Krajnc

APLIKATIVNI PROJEKTI / APPLIED RESEARCH

L4-2024 Vpliv tehnoloških postopkov na ohranjanje aromatskega potenciala v tehnologiji pridelave vin / *Influence of Process Technology on Aromatic Potential in Wine Fermentation*
Nosilec / *Principal Researcher*: M. Berovič
Sofinancer / *Co-sponsored by*: Perutnina Ptuj

RAZVOJNI PROJEKTI / INDUSTRIAL RESEARCH AND DEVELOPMENT

Pogodba št. BIO1/2014 Aplikativne raziskave na področju adsorpcije / *Applied Research in the Field of Adsorption*
Nosilec / *Principal Researcher*: A. Pavko
Financer / *Sponsored by*: Lek d.d., Ljubljana

Pogodba št. POGN-R12-414-417-01/14 Razvoj programskega orodja za napoved delovanja komunalne čistilne naprave / *Development of numerical tools for simulation of wastewater treatment plant operation*
Nosilec / *Principal Researcher*: I. Plazl
Financer / *Sponsored by*: Riko d.o.o., Ljubljana

Raziskave procesa depolimerizacije / *Research of depolymerization processes*
Nosilec / *Principal Researcher*: I. Plazl
Sofinancer / *Co-sponsored by*: JULON d.d.

MEDNARODNO SODELOVANJE NA PODROČJU IZOBRAŽEVANJA / INTERNATIONAL COOPERATION IN THE FIELD OF EDUCATION

- A. Žgajnar Gotvajn, *Erasmus Teaching Exchange, University of Lisbon, Faculty of Science, Department of Chemistry and Biochemistry, Lizbona, Portugalska.*
- A. Žgajnar Gotvajn, *Erasmus IP Spring School on Green Chemistry, University of Malta, Department of Chemistry, La Valetta, Malta.*
- A. Žgajnar Gotvajn, FKKT koordinatorka IP ERASMUS programa Zelena Kemija (2012-2015)/ Faculty coordinator of IP ERASMUS programme Green Chemistry (2012-2015).

MEDNARODNO ZNANSTVENO SODELOVANJE / INTERNATIONAL RESEARCH COOPERATION

VEČSTRANSKO MEDNARODNO SODELOVANJE / MULTILATERAL COOPERATION

FP7-312148 *BIOINTENSE-Mastering bioprocess integration and intensification across scales*
Nosilka na UL / *Principal Researcher at UL*: P. Žnidaršič Plazl

FP7-608104 EUROMBR - European network for innovative microbioreactor applications in bioprocess development
Nosilka na UL / *Principal Researcher at UL*: P. Žnidaršič Plazl

BILATERALNO MEDNARODNO SODELOVANJE / BILATERAL COOPERATION

Slovenija – Kitajska / *Slovenia – China* Sinteza nanodelcev v mikrokanalih pod vplivom mikrovalov / *Microwave-assisted nanoparticles synthesis in microchannels*;
Nosilec / *Principal Researcher*: I. Plazl

Slovenija – Rusija / *Slovenia – Russia* Modeliranje dinamičnih pojavov v ne-newtonskih viskozniških tekočinah / *Modelling of dynamic processes in nonnewtonian viscous fluids*
Nosilec / *Principal Researcher*: A. Zupančič Valant

BIBLIOGRAFIJA 2014 / REFERENCES 2014

IZVIRNI ZNANSTVENI ČLANEK / ORIGINAL SCIENTIFIC ARTICLE

- KIŽ1.** PERKO, David, POHAR, Andrej, LEVEC, Janez. Hydrogenation of CO [sub] 2 and CO in a high temperature gradient field between catalyst surface and opposite inert cool plate. *AIChE journal*, ISSN 0001-1541. [Print ed.], Feb. 2014, vol. 60, iss. 2, str. 613-622. <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/aic.14280/abstract>, doi: 10.1002/aic.14280. [COBISS.SI-ID 5408538]
- KIŽ2.** BEROVIČ, Marin, HABIJANIČ, Jožica, BOH, Bojana, GREGORI, Andrej, ŠVAGELJ, Mirjan, WRABER-HERZOG, Branka. Production of antitumor fungal polysaccharides of *Ganoderma lucidum* and *Grifola frondosa* by solid state cultivation of wood industry wastes. *Annals of Agrarian Science*, ISSN 1512-1887, 2014, vol. 12, no. 3, str. 8-14. [COBISS.SI-ID 1024554602]
- KIŽ3.** GRILC, Miha, LIKOZAR, Blaž, LEVEC, Janez. Hydrodeoxygenation and hydrocracking of solvolysed lignocellulosic biomass by oxide, reduced and sulphide form of NiMo, Ni, Mo and Pd catalysts. *Applied Catalysis. B, Environmental*, ISSN 0926-3373. [Print ed.], May 2014, vol. 150/151, str. 275-287, ilustr. http://ac.els-cdn.com/S0926337313007753/1-s2.0-S0926337313007753-main.pdf?_tid=7f6f00e4-7c57-11e3-b1b7-00000aabb0f6b&acdnat=1389620279_fe9e1fd7c58845ad2d24862b437e77a8, doi: 10.1016/j.apcatb.2013.12.030. [COBISS.SI-ID 5395994]
- KIŽ4.** LIKOZAR, Blaž, LEVEC, Janez. Transesterification of canola, palm, peanut, soybean and sunflower oil with methanol, ethanol, isopropanol, butanol and tert-butanol to biodiesel : modelling of chemical equilibrium, reaction kinetics and mass transfer based on fatty acid composition. *Applied Energy*, ISSN 0306-2619, Jun. 2014, vol. 123, str. 108-120. http://ac.els-cdn.com/S0306261914001901/1-s2.0-S0306261914001901-main.pdf?_tid=5bb1ac7a-b333-11e3-a5ad-00000aabb360&acdnat=1395652075_c71f8ac078c7c3190dfd01eb-197dea45, doi: 10.1016/j.apenergy.2014.02.046. [COBISS.SI-ID 5447450]
- KIŽ5.** STOJKOVIČ, Gorazd, KRIVEC, Matic, VESEL, Alenka, MARINŠEK, Marjan, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. Surface cell immobilization within perfluoroalkoxy microchannels. *Applied Surface Science*, ISSN 0169-4332. [Print ed.], 2014, vol. 320, no. 1, str. 810-817, ilustr. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169433214020558>, doi: 10.1016/j.apsusc.2014.09.064. [COBISS.SI-ID 1791791]
- KIŽ6.** BEROVIČ, Marin, BERLOT, Matjaž, KRALJ, Slavko, MAKOVEC, Darko. A new method for the rapid separation of magnetized yeast in sparkling wine. *Biochemical engineering journal*, ISSN 1369-703X. [Print ed.], 2014, vol. 88, str. 77-84, doi: 10.1016/j.bej.2014.03.014. [COBISS.SI-ID 27660839]
- KIŽ7.** GRILC, Miha, LIKOZAR, Blaž, LEVEC, Janez. Hydrotreatment of solvolytically liquefied lignocellulosic biomass over NiMo/Al [sub] 2O [sub] 3 catalyst : reaction mechanism, hydrodeoxygenation kinetics and mass transfer model based on FTIR. *Biomass & bioenergy*, ISSN 0961-9534. [Print ed.], Apr. 2014, vol. 63, str. 300-312. http://ac.els-cdn.com/S0961953414000774/1-s2.0-S0961953414000774-main.pdf?_tid=0ea2b9e2-a465-11e3-aada-00000aabb361&acdnat=1394024149_20710a788236720a78b44656ff173266, doi: 10.1016/j.biombioe.2014.02.014. [COBISS.SI-ID 5432346]
- KIŽ8.** MILOŽIČ, Nataša, LUBEJ, Martin, NOVAK, Uroš, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona, PLAZL, Igor. Evaluation of diffusion coefficient determination using a microfluidic device. *Chemical and biochemical engineering quarterly*, ISSN 0352-9568, 2014, vol. 28, no. 2, str. 215-223. http://hrack.srce.hr/index.php?show=clanak&id_clanak_jezik=178411, doi: 10.15255/CABEQ.2014.1938. [COBISS.SI-ID 1705263]
- KIŽ9.** LUBEJ, Martin, PLAZL, Igor. Theoretical and experimental study of iron catalyst preparation by chemical vapor deposition of ferrocene in air. *The chemical engineering journal*, ISSN 1385-8947. [Print ed.], 2014, vol. 242, no. 1, str. 306-312, ilustr. http://ac.els-cdn.com/S1385894713016197/1-s2.0-S1385894713016197-main.pdf?_tid=568a5608-838f-11e3-8ff4-00000aabb0f01&acdnat=1390413920_5760389be8b7015ba95acfae3491d187, doi: 10.1016/j.ccej.2013.12.038. [COBISS.SI-ID 1664303]
- KIŽ10.** ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. Enzymatic microreactors utilizing non-aqueous media. *Chimica oggi = Chemistry today*, ISSN 0392-839X, 2014, vol. 32, no. 1, str. 54-61, ilustr. <http://www.teknoscienze.com/Articles/Chimica-Oggi-Chemistry-Today-Enzymatic-microreactors-utilizing-non-aqueous-media.aspx#UxRET4UwwwU>. [COBISS.SI-ID 1681455]
- KIŽ11.** KALČIKOVÁ, Gabriela, ENGLERT, Dominic, ROSENFELDT, Ricki R., SEITZ, Frank, SCHULZ, Ralf, BUNDSCHUH, Mirco. Combined effect of UV-irradiation and TiO[sub]2-nanoparticles on the predator-prey interaction of gammarids and mayfly nymphs. *Environmental pollution*, ISSN 0269-7491. [Print ed.], 2014, vol. 186, no. 1, str. 136-140. http://ac.els-cdn.com/S0269749113006179/1-s2.0-S0269749113006179-main.pdf?_tid=4b5a57be-712f-11e3-98c5-00000aabb0f02&acdnat=1388393549_1099f897d8f9dc01760113dba1f8faf8, doi: 10.1016/j.envpol.2013.11.028. [COBISS.SI-ID 1665583]
- KIŽ12.** LIKOZAR, Blaž, LEVEC, Janez. Effect of process conditions on equilibrium, reaction kinetics and mass transfer for triglyceride transesterification to biodiesel : experimental and modeling based on fatty acid composition. *Fuel Processing Technology*, ISSN 0378-3820. [Print ed.], Jun. 2014, vol. 122, str. 30-41. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378382014000277>, doi: 10.1016/j.fuproc.2014.01.017. [COBISS.SI-ID 5420058]
- KIŽ13.** LIU, Mingqiang, NOVAK, Uroš, PLAZL, Igor, FRANKO, Mladen. Optimization of a thermal lens microscope for detection in a microfluidic chip. *International journal of thermophysics*, ISSN 0195-928X, 2014, vol. 35, no. 11, str. 2011-2022, doi: 10.1007/s10765-013-1515-y. [COBISS.SI-ID 2895867]
- KIŽ14.** ZUPAN, Nastja, BABIČ, Janja, PAVKO, Aleksander. Biodegradation kinetics of phenol, 2,4,6-trichlorophenol and pentachlorophenol with ligninolytic enzymes from *Dichomitus squalens*. *Journal of advances in chemistry*, ISSN 2321-807X, 9. apr. 2014, vol. 8, no. 3, str. 1736-1744, ilustr. <http://cirworld.com/index.php/jac/article/view/4067>. [COBISS.SI-ID 1702703]
- KIŽ15.** LINEC, Mitja, BERČIČ, Gorazd, LEVEC, Janez. Evaluating the operating parameters of membrane contactors using a recycle type continuous flow membrane reactor. *Journal of membrane science*, ISSN 0376-7388. [Print ed.], May 2014, vol. 458, str. 209-216, ilustr. http://ac.els-cdn.com/S0376738814001136/1-s2.0-S0376738814001136-main.pdf?_tid=efaed1f2-9a27-11e3-9411-00000aabb0f01&acdnat=1392898386_f336a1494d1290746aa182c64334eb28, doi: 10.1016/j.memsci.2014.02.008. [COBISS.SI-ID 5424154]
- KIŽ16.** SKALAR, Tina, MARINŠEK, Marjan, LUBEJ, Martin, LUKEŽIČ, Marjan, SKALAR, Tomaž, MAČEK, Jadran. Modelling of operating parameters in an SOFC testing system = Modeliranje in parametri delovanja sistema za preizkušanje SOFC. *Materiali in tehnologije*, ISSN 1580-2949. [Tiskana izd.], no. 6, 2014, str. 861-867. [COBISS.SI-ID 1536129731]
- KIŽ17.** ŠUŠTERŠIČ, Ema, TUŠAR, Marjan, ZUPANČIČ-VALANT, Andreja. Asphalt concrete modification with waste PMMA/ATH. *Materials and structures*, ISSN 1359-5997, Nov. 2014, vol. 47, iss. 11, str. 1817-1824, ilustr. http://download.springer.com/static/pdf/915/art%253A10.1617%252F11527-013-0152-z.pdf?auth66=1421668632_5cb361caaaa118728170c48ccefb23a6&ext=.pdf, doi: 10.1617/s11527-013-0152-z. [COBISS.SI-ID 5308442]

- KIŽ18.** TUŠAR, Marjan, ŠUŠTERŠIČ, Ema, ZUPANČIČ-VALANT, Andreja. Alternative PMB produced from recycling waste PMMA/ATH = Alternatywne PMB produkowane z odpadów recyklingowych PMMA/ATH. *Transport problems*, ISSN 1896-0596. [Printed ed.], 2014, vol. 9, iss. 2, str. 5-9. http://transportproblems.polsl.pl/pl/Archiwum/2014/zeszyt2/20149z2_01.pdf. [COBISS.SI-ID 5531418]
- KIŽ19.** KALČIKOVÁ, Gabriela, BABIČ, Janja, PAVKO, Aleksander, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Fungal and enzymatic treatment of mature municipal landfill leachate. *Waste management*, ISSN 0956-053X. [Print ed.], 2014, vol. 34, no. 4, str. 798-803, ilustr. http://ac.els-cdn.com/S0956053X13005849/1-s2.0-S0956053X13005849-main.pdf?_tid=d802160e-b651-11e3-bfb7-00000aab0f6c&acdnat=1395995018_44da13caa3a14e97c8a30d1f9b3453cd, doi: 10.1016/j.wasman.2013.12.017. [COBISS.SI-ID 1671983]
- KIŽ20.** ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, TRATAR-PIRC, Elizabeta, BUKOVEC, Peter, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. Evaluation of biotreatability of ionic liquids in aerobic and anaerobic conditions. *Water science and technology*, ISSN 0273-1223, 2014, vol. 70, no. 4, str. 698-704, ilustr., doi: 10.2166/wst.2014.283. [COBISS.SI-ID 1751855]
- KIŽ21.** BERLOT, Matjaž, REHAR, Tamara, FEFER, Dušan, BEROVIČ, Marin. The influence of treatment of *Saccharomyces cerevisiae* inoculum with a magnetic field on subsequent grape must fermentation. *Chemical and biochemical engineering quarterly*, ISSN 0352-9568, 2013, vol. 27, no. 4, str. 423-429, ilustr. [COBISS.SI-ID 1652527]
- KIŽ22.** BEROVIČ, Marin, HABIJANIČ, Jožica, BOH, Bojana, WRABER-HERZOG, Branka, PETRAVIČ-TOMINAC, Vlatka. Production of Lingzhi or Reishi medicinal mushroom, *Ganoderma lucidum* (W.Curt.: Fr.) P. Karst. (higher Basidiomycetes), biomass and polysaccharides by submerged cultivation. *International journal of medicinal mushrooms*, ISSN 1521-9437, 2013, vol. 15, no. 1, str. 81-89. [COBISS.SI-ID 36550149]
- KIŽ23.** BEROVIČ, Marin, HABIJANIČ, Jožica, BOH, Bojana, GREGORI, Andrej, ŠVAGELJ, Mirjan, WRABER-HERZOG, Branka. Production of antitumor fungal polysaccharides of *Ganoderma lucidum* and *Grifola frondosa* by solid state cultivation of wood industry wastes. *Annals of Agrarian Science*, ISSN 1512-1887, 2014, vol. 12, no. 3, str. 8-14. [COBISS.SI-ID 1024554602]

KRATKI ZNANSTVENI PRISPEVEK / SHORT SCIENTIFIC CONTRIBUTION

- KIŽ24.** SABOTIN, Izidor, VALENTINČIČ, Joško, JUNKAR, Mihael, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. Razvoj mikrostrukturnega sistema za sintezo ionskih tekočin z vidika elektroerozijske obdelave : doktorsko delo. *Svet strojništva*, ISSN 1855-6493, apr. 2014, letn. 3, št. 2, str. 33-39, ilustr. [COBISS.SI-ID 13506331]

OBJAVLJENI ZNANSTVENI PRISPEVEK NA KONFERENCI / PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTION

- KIŽ25.** NOVAK, Uroš, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona, PLAZL, Igor. Microfluidics application in biotechnology : [lecture]. V: 13th International Conference on Management of Innovative Technologies, Fiesca, Slovenia, 28th - 30th September 2014. JUNKAR, Mihael (ur.), et al. *MIT 2014 : proceedings of the 13th International Conference on Management of Innovative Technologies, Fiesca, Slovenia, 28th - 30th September 2014*. Ljubljana: LAT - Laboratory for Alternative Technologies, Faculty of Mechanical Engineering, 2014, str. 34-38, ilustr. [COBISS.SI-ID 1536195779]
- KIŽ26.** BEROVIČ, Marin, ŠVAGELJ, Mirjan, BOH, Bojana, PLANKL, Mojca, WRABER-HERZOG, Branka, KREFT, Samo. Advances in cultivation of medicinal fungi biomass and pharmaceutical compounds in bioreactors : [keynote presentation]. V: *Proceedings of 8th International Conference on Mushroom Biology and Mushroom Products, [19-22 November 2014, New Delhi, India]*. [S. l.: s. n., 2014], vol. 2, str. 379-384, ilustr. [COBISS.SI-ID 1536121027]
- KIŽ27.** GRILC, Miha, LIKOZAR, Blaž, LEVEC, Janez. Biofuel from LC biomass liquefaction in waste glycerol and its catalytic upgrade. V: *World Sustainable Energy Days, Wels, Austria, 26 - 28 February 2014. Proceedings = Tagungsband*. Wels: [s. n.], 2014, str. [1-7]. [COBISS.SI-ID 5442842]
- KIŽ28.** TRATAR-PIRC, Elizabeta, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Anaerobna razgradljivost škrobne plastike : [predavanje]. V: Slovenski kemijski dnevi 2014, Maribor, 11.-12. september 2014. KRAVANJA, Zdravko (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.), NOVAK-PINTARIČ, Zorka (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2014, Maribor, 11. - 12. september 2014*. Maribor: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2014, str. [1-6], ilustr. [COBISS.SI-ID 1784367]
- KIŽ29.** LAMPELJ, Ema, LEVSTEK, Meta, STRAŽAR, Marjeta, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Fizikalno-kemijska obdelava tekočih odpadkov. V: Slovenski kemijski dnevi 2014, Maribor, 11.-12. september 2014. KRAVANJA, Zdravko (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.), NOVAK-PINTARIČ, Zorka (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2014, Maribor, 11. - 12. september 2014*. Maribor: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2014, str. [1-17], ilustr. [COBISS.SI-ID 1789743]

UNIVERZITETNI, VISOKOŠOLSKI ALI VIŠJEŠOLSKI UČBENIK Z RECENZIJO / REVIEWED UNIVERSITY AND ACADEMIC TEXTBOOK

- KIŽ30.** ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, KALČIKOVÁ, Gabriela, ZAGORC-KONČAN, Jana. *Ekotoksikološki praktikum : (navodila za izvedbo ekotoksikoloških preiskav)*. 1. izd. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2014. 41 str., ilustr. ISBN 978-961-6756-50-1. [COBISS.SI-ID 271009792]
- KIŽ31.** Berovic, M., A.Luebbert, 2014. Principles of biochemical engineering. Ed.M. Berovic, A.Luebbert, Ljubljana, Slovenia: University of Ljubljana, UL Press, pp. 244-277.

DRUGO UČNO GRADIVO / OTHER EDUCATIONAL MATERIAL

- KIŽ32.** ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, KALČIKOVÁ, Gabriela, ZUPANČIČ, Marija. *Praktikum s področja okoljske kemije in tehnologije : (skripta za vaje za interno uporabo)*. 1. izd. Ljubljana: Univ. v Ljubljani, Fak. za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za kemijsko, biokemijsko in ekološko inženirstvo, 2014. [38] f., ilustr. [COBISS.SI-ID 1697839]

PREDAVANJE NA TUJI UNIVERZI / INVITED LECTURE AT FOREIGN UNIVERSITY

- KIŽ33.** ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. *[Advanced treatment of wastewaters : University of Lisbon, Faculty of Sciences, Department of Chemistry and Biochemistry, Lisbon, May 8th, 2014]*. [2014]. [COBISS.SI-ID 1707055]

- KIŽ34.** PAVKO, Aleksander. [*Biochemical engineering aspects of fungal bioremediation of organic pollutants in waste waters : University of Nova Gorica, Nova Gorica, the 24th April 2014*]. [2014]. [COBISS.SI-ID 1706287]
- KIŽ35.** BEROVIČ, Marin. [*Cultivation of active fungal biomass in bioreactors : Universidad de Santiago de Chile, LAMAP-USACH, Núcleo Milenio FISB, June 12th, 2014*]. [2014]. [COBISS.SI-ID 1747503]
- KIŽ36.** BEROVIČ, Marin. [*Engineering problems in cultivation of medicinal mushroom biomass in bioreactors : invited lecture at Indian Agricultural Research Institute, New Delhi, 19. 11. 2014*]. [2014]. [COBISS.SI-ID 1536113859]
- KIŽ37.** BEROVIČ, Marin. [*Magnetic yeast in sparkling wine production : Pontificia Universidad Católica de Santiago, Departamento de Ingeniería Química y Bioprocesos, Santiago de Chile, June 5th, 2014*]. [2014]. [COBISS.SI-ID 1747759]
- KIŽ38.** ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. [*Persistent organic pollutants in the environment : University of Lisbon, Faculty of Sciences, Department of Chemistry and Biochemistry, Lisbon, May 8th, 2014*]. [2014]. [COBISS.SI-ID 1707311]
- KIŽ39.** ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. [*Solid waste disposal: from conventional to sustainable landfills? : University of Malta, Department of Chemistry, on April 2nd, 2014*]. [2014]. [COBISS.SI-ID 1700655]

VABLJENO PREDAVANJE NA KONFERENCI BREZ NATISA / UNPUBLISHED INVITED CONFERENCE LECTURE

- KIŽ40.** ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. [*Biotransformations in two-liquid phase systems at the microreactor scale : invited lecture at 4th International Conference of the Flow Chemistry Society, 18 - 19 February 2014, Barcelona, Spain*]. [2014]. [COBISS.SI-ID 1682991]
- KIŽ41.** PLAZL, Igor. [*Transport phenomena of two-phase flows in a microreactor: on-line model validation : invited lecture at 4th International Conference of the Flow Chemistry Society, 18 - 19 February 2014, Barcelona, Spain*]. [2014]. [COBISS.SI-ID 1683247]
- KIŽ42.** BEROVIČ, Marin. [Nano particle magnetized wine yeast *Saccharomyces cerevisiae* : invited lecture at BIOPARTNERS networking session The latest developments in food science and technology in european and south caucasus countries, Prague, Czech Republic, November 7, 2013]. [2013]. <http://www.biopartners-dibb.ge/news-and-events/12-biopartners-networking-session/32-the-latest-developments-in-food-science-and-technology-in-european-and-south-caucasus-countries.html>. [COBISS.SI-ID 1664815]
- KIŽ43.** BEROVIČ, Marin. [Problems of fungal biomass cultivation in bioreactors : invited lecture at 7th International medicinal mushroom conference, August 26th-29th, 2013, Beijing, China]. [2013]. <http://www.immc7.com/>. [COBISS.SI-ID 1665327]
- KIŽ44.** BEROVIČ, Marin. [Production of pharmaceutical compounds of medicinal fungi in bioreactors : plenary lecture at 7th International medicinal mushroom conference, August 26th-29th, 2013, Beijing, China]. [2013]. <http://www.immc7.com/>. [COBISS.SI-ID 1665071]

UREDNIK / EDITORSHIP

- KIŽ45.** *Acta chimica slovenica*. Levec, Janez (član uredniškega odbora 1998-). [Tiskana izd.]. Ljubljana: Slovensko kemijsko društvo: =Slovenian Chemical Society, 1993-. ISSN 1318-0207. <http://acta.chem-soc.si/>. [COBISS.SI-ID 14086149]
- KIŽ46.** *Acta chimica slovenica*. Pavko, Aleksander (glavni urednik 2006-). [Tiskana izd.]. Ljubljana: Slovensko kemijsko društvo: =Slovenian Chemical Society, 1993-. ISSN 1318-0207. <http://acta.chem-soc.si/>. [COBISS.SI-ID 14086149]
- KIŽ47.** *Biotechnology annual review*. Berovič, Marin (član uredniškega odbora 2002-). Amsterdam; Lausanne; New York; Oxford; Shannon; Tokyo: Elsevier. ISSN 1387-2656. [COBISS.SI-ID 23725061]
- KIŽ48.** *Chemical and biochemical engineering quarterly*. Plazl, Igor (urednik 2009-), Žnidaršič Plazl, Polona (član uredniškega odbora 2009-, gostujoči urednik 2014). Zagreb: Croatian Society of Chemical Engineers, 1987-. ISSN 0352-9568. [COBISS.SI-ID 49186]
- KIŽ49.** *Chinese journal of chemical engineering*. Levec, Janez (član uredniškega sveta 2000-). Beijing: Chemical Industry Press; Heidelberg; New York; Tokyo: Springer-Verlag Berlin, 1982-. ISSN 1004-9541. [COBISS.SI-ID 2317850]
- KIŽ50.** *Food technology and biotechnology*. Pavko, Aleksander (član uredniškega odbora 2004-). Zagreb: Faculty of Food Technology and Biotechnology, 1996-. ISSN 1330-9862. <http://www.ftb.com.hr/>. [COBISS.SI-ID 40116737]
- KIŽ51.** *International journal of chemical engineering*. Levec, Janez (član uredniškega odbora 2008-). New York; Cairo: Hindawi Publishing Corporation. [COBISS.SI-ID 3883290]
- KIŽ52.** *International journal of medicinal mushrooms*. Berovič, Marin (član uredniškega odbora 2010-). New York, NY: Begell House. ISSN 1521-9437. [COBISS.SI-ID 1979418]
- KIŽ53.** *International review of chemical engineering*. Levec, Janez (član uredniškega odbora 2009-). Napoli: Praise Worthy Prize. ISSN 2035-1755. [COBISS.SI-ID 4095514]
- KIŽ54.** *Journal of biotechnology & biomaterials*. Berovič, Marin (član uredniškega odbora 2011-). Henderson: OMICS Publishing Group. <http://www.omicsonline.org/AimsandScopeJBtBm.php>. [COBISS.SI-ID 35604485]
- KIŽ55.** *Kemija u industriji*. Plazl, Igor (član uredniškega odbora 2009-). [Print ed.]. Zagreb: Hrvatsko društvo kemijskih inženjera i tehnologa, 1952-. ISSN 0022-9830. <http://nippur.irb.hr/hrv/ku>. [COBISS.SI-ID 747524]
- KIŽ56.** *Phytomedicine*. Berovič, Marin (član uredniškega odbora 2010-). Stuttgart; Jena; New York: Fischer, 1994-. ISSN 0944-7113. [COBISS.SI-ID 17566981]
- KIŽ57.** BEROVIČ, Marin (urednik), LÜBBERT, Andreas (urednik). *Principles of bioprocess engineering : doctoral/post-doctoral*. Ljubljana: University, 2014. V, 593 str., ilustr. ISBN 978-961-6410-45-8. [COBISS.SI-ID 275189760]
- KIŽ58.** *Chemical and Biochemical Engineering Quarterly*. Žnidaršič Plazl, Polona (član uredniškega odbora 2009-, gostujoči urednik 2014). Zagreb: Croatian Society of Chemical Engineers, 1987-. ISSN 0352-9568. [COBISS.SI-ID 49186]
- KIŽ59.** *Chemical and Biochemical Engineering Quarterly*. I. Plazl (so-urednik)

KATEDRA ZA POLIMERNO INŽENIRSTVO, ORGANSKO KEMIJSKO TEHNOLOGIJO IN MATERIALE

CHAIR OF POLYMER ENGINEERING, ORGANIC CHEMICAL TECHNOLOGY
AND MATERIALS

PREDSTOJNICA KATEDRE / HEAD

izr. prof. dr. Urška Šebenik

SODELAVCI KATEDRE / PERSONNEL

Visokošolski učitelji / *Faculty*

prof. dr. Matjaž Krajnc

izr. prof. dr. Aleš Podgornik

izr. prof. dr. Urška Šebenik

v dopolnilnem razmerju / *part time*

doc. dr. Jernej Kajtna

doc. dr. Blaž Likožar (do 30. 9. 2014)

Raziskovalec / *Researcher*

doc. dr. Dušan Klinar

prof. dr. Janvit Golob

(upokojen 50% / *retired 50%*)

Visokošolski sodelavec / *Assistant*

dr. Branko Alič

Tehnik / *Technician*

Janez Malovrh

Mladi raziskovalci *Young Researchers*

Mentor

Mentor

Čas usposabljanja

Programme Duration

Oblika usposabljanja

Degree

Aleš Ručigaj

M. Krajnc

2011–2014

doktorski študij / *PhD*

Rok Ambrožič

M. Krajnc

2012–2016

doktorski študij / *PhD*

Natalija Pokeržnik

M. Krajnc

2013–2017

doktorski študij / *PhD*

Žiga Štirn

M. Krajnc

2014–2018

doktorski študij / *PhD*

IZOBRAŽEVALNA IN RAZISKOVALNA DEJAVNOST KATEDRE EDUCATIONAL AND RESEARCH ACTIVITIES

IZOBRAŽEVALNA DEJAVNOST / LECTURED COURSES

FKKT / FACULTY OF CHEMISTRY AND CHEMICAL TECHNOLOGY

Bolonjski programi 1. stopnje / *Bologna 1st Cycle Study Programmes*

Kemijsko inženirstvo / *Chemical Engineering* – UN:

Kemijsko inženirstvo I, II / *Chemical Engineering I, II*

Produktno inženirstvo / *Product Engineering*

Prenos toplote in snovi / *Heat and Mass Transfer*

Kemijsko inženirska termodinamika / *Chemical Engineering Thermodynamics*
Separacijski procesi / *Separation Processes*
Polimerni materiali (izbirni predmet) / *Polymer Materials (elective course)*
Osnove polimernega inženirstva (izbirni predmet) / *Principles of Polymer Engineering (elective course)*

Kemijska tehnologija / *Chemical Technology – VS:*
Procesi v industrijski kemiji / *Processes in Industrial Chemistry*
Polimerni materiali (izbirni predmet) / *Polymer Materials (elective course)*
Osnove polimernega inženirstva (izbirni predmet) / *Principles of Polymer Engineering (elective course)*
Tehnologija premazov (izbirni predmet) / *Coatings Technology (elective course)*

Bolonjski programi 2. stopnje / *Bologna 2nd Cycle Study Programmes*

Kemijsko inženirstvo / *Chemical Engineering:*
Nanomateriali in kompoziti / *Nanomaterials and Composites*
Polimerno reakcijsko inženirstvo (izbirni predmet) / *Polymer Reaction Engineering (elective course)*
Polimerno procesno inženirstvo (izbirni predmet) / *Polymer Process Engineering (elective course)*
Organski premazi (izbirni predmet) / *Organic Coatings (elective course)*

Bolonjski programi 3. stopnje / *Bologna 3rd Cycle Doctoral Study Programmes*

Izbrana poglavja iz separacijskih procesov / *Selected Topics in Separation Processes*
Izbrana poglavja iz polimernega inženirstva / *Selected Topics in Polymer Engineering*
Mehanika polimernih materialov / *Mechanics of Polymer Materials*

IZVEN FKKT / EXTRAMURAL COURSES

Bolonjski programi 2. stopnje / *Bologna 2nd Cycle Study Programmes*

Polimerni materiali (izbirni predmet) / *Polymer Materials (elective course)*, BF
Analitska biotehnologija / *Analytical Biotechnology*, BF

RAZISKOVALNA DEJAVNOST / RESEARCH ACTIVITIES

- Sinteza, polimerizacija in zamreževanje benzoksazinov / *Synthesis, Polymerization and Crosslinking of benzoxazines*
- Kopolimeri benzoksazinov in epoksidnih smol / *Copolymers of Benzoxazines and Epoxy Resins*
- Polimeri iz obnovljivih virov / *Polymers from Renewable Resources*
- Inkapsulacija / *Encapsulation*
- Polisiloksanske emulzije na vodni osnovi / *Polysiloxane Water-Based Emulsions*
- Sinteza, karakterizacija in optimizacija procesa sinteze akrilatnih lepil / *Synthesis, Characterization and Synthesis Process Optimization of Acrylic Adhesives*
- Polimerizacijski procesi v mikroreaktorjih / *Polymerization Processes in Microreactors*
- Sinteza, priprava in karakterizacija nanokompozitnih materialov / *Synthesis, Preparation and Characterization of Nanocomposite Materials*
- Mehanske lastnosti polimernih materialov in kompozitov / *Mechanical Properties of Polymer Materials and Composites*
- Analiza procesa in matematično modeliranje kinetike encimsko katalizirane sinteze / *Process Analysis and Mathematical Modeling of Kinetics of Enzyme-catalyzed Synthesis*
- Sinteza biopolimerov z biološkimi sistemi / *Biopolymer Synthesis by Biological Systems*

- Priprava poroznih polimernih kromatografskih nosilcev / *Preparation of Porous Chromatographic Polymers*
- Separacijski procesi produktov bioloških sistemov (kromatografija, ATPS) / *Separation Processes of Biological System Products*
- Študij padca tlaka na poroznih slojih / *Pressure Drop Analysis in Porous Beads*

ČLANSTVO V MEDNARODNIH UREDNIŠKIH ODBORIH / MEMBERSHIP IN INTERNATIONAL EDITORIAL BOARDS

- M. Krajnc, *International Journal of Adhesion and Adhesives*

ORGANIZACIJA (ALI SODELOVANJE PRI ORGANIZACIJI) MEDNARODNIH SREČANJ (KONFERENCE, KONGRESI) / ORGANISER (OR CO-ORGANISER) OF INTERNATIONAL MEETINGS (CONFERENCES, CONGRESSES)

- Monolith Summer School & Symposium, MSS 2014, 30.5.–4.6.2014, Portorož, Slovenija / *Monolith Summer School & Symposium, MSS 2014, 30th May - 4th June, 2014, Portorož, Slovenia*
- 34th International Symposium on the Separation of Proteins, Peptides and Polynucleotides, ISPPP 2014, 5.-7.11.2014, Wurzburg, Nemčija / *34th International Symposium on the Separation of Proteins, Peptides and Polynucleotides, ISPPP 2014, 5th-7th November, 2014, Wurzburg, Germany*
- International Bio-Separation School&Symposium, BSSS2014, 28.-29.10.2014, Ube, Japonska / *International Bio-Separation School&Symposium, BSSS2014, 28th -29th October, 2014, Ube, Japan*

RAZISKOVALNA OPREMA / RESEARCH EQUIPMENT

- DMA instrument (dinamična mehanska analiza) / *DMA instrument (Dynamic Mechanical Analysis)* - Mettler Toledo DMA 861e
- DSC instrument (diferenčna dinamična kalorimetrija) instrument / *DSC instrument (Differential Scanning Calorimetry)* - Mettler Toledo DSC 1
- In Situ FTIR spektrometer / *In Situ FTIR Spectrometer* - Mettler Toledo ReactIR iC10
- FTIR spektrometer / *FTIR Spectrometer* - Perkin Elmer FTIR Spectrum 1000
- HPLC kromatograf / *HPLC Chromatograph* - LC Shimadzu LC-4A
- Laserski merilec velikosti delcev / *Laser Particle Size Analyzer* - Microtrac S 3500 Laser Particle Size Analyzer
- Ekstruder / *Extruder* - Brabender Plastograph EC "PLUS"
- Sistem za merjenje dinamičnega in statičnega sipanja laserske svetlobe / *DLS Spectrometer* - 3D DLS Spectrometer, LS Instruments
- Avtomatski laboratorijski reaktor / *Automatic Laboratory Reactor* - Mettler Toledo LabMax Automatic Lab Reactor
- GC kromatograf / *GC Chromatograph* - GC System 7890A Agilent Technologies
- NMR spektrometer / *NMR Spectrometer* – Bruker Avance DPX 300 (IC FKKT UL)
- NMR spektrometer / *NMR Spectrometer* – Bruker Avance Ultrashield 500 plus (IC FKKT UL)
- Vrščni elektronski mikroskop na poljsko emisijo / *Field Emission Scanning Electron Microscope* – Zeiss ULTRA plus (IC FKKT UL)

SODELOVANJE V CENTRIH ODLIČNOSTI / CENTRES OF EXCELLENCE

- Center odličnosti za biosenzoriko, instrumentacijo in procesno kontrolo – COBIK / *Centre of Excellence for Biosensors, Instrumentation and Process Control*

RAZISKOVALNI PROGRAMI IN PROJEKTI / RESEARCH PROGRAMMES AND PROJECTS

RAZISKOVALNI PROGRAMI / RESEARCH PROGRAMMES

- P2-0191 Kemijsko inženirstvo / *Chemical Engineering*
Vodja programa / *Principal Researcher*: M. Krajnc
- P2-0346 Separacijski procesi toplogrednih plinov za trajnostni razvoj / *Separation Processes of Greenhouse Gases for Sustainable Development*
Vodja programa / *Principal Researcher*: J. Golob

RAZVOJNI PROJEKTI / INDUSTRIAL RESEARCH AND DEVELOPMENT

Vrednotenje polimernih materialov / *Assesment of Polymer Materials*
Nosilec / *Principal Researcher*: M. Krajnc
Financer / *Sponsored by*: Krka d.d.

Raziskave za razvoj in pridobitev znanj za zmanjševanje CO₂
Nosilec / *Principal Researcher*: J. Golob
Financer / *Sponsored by*: Holding slovenske elektrarne d.o.o.

BIBLIOGRAFIJA 2014 / REFERENCES 2014

IZVIRNI ZNANSTVENI ČLANEK / ORIGINAL SCIENTIFIC ARTICLE

- POT1. GRILC, Miha, LIKOZAR, Blaž, LEVEC, Janez. Hydrodeoxygenation and hydrocracking of solvolysed lignocellulosic biomass by oxide, reduced and sulphide form of NiMo, Ni, Mo and Pd catalysts. *Applied catalysis. B, Environmental*, ISSN 0926-3373. [Print ed.], May 2014, vol. 150/151, str. 275-287, ilustr. http://ac.els-cdn.com/S0926337313007753/1-s2.0-S0926337313007753-main.pdf?tid=7f6f00e4-7c57-11e3-b1b7-0000aab0f6b&acdnat=1389620279_fe9e1fd7c58845ad2d24862b437e77a8, doi: 10.1016/j.apcatb.2013.12.030. [COBISS.SI-ID 5395994]
- POT2. FLISAR, Karel, HABERL MEGLIČ, Saša, MORELJ, Jernej, GOLOB, Janvit, MIKLAVČIČ, Damijan. Testing a prototype pulse generator for a continuous flow system and its use for E. coli inactivation and microalgae lipid extraction. V: MIKLAVČIČ, Damijan (ur.), TEISSIE, Justin (ur.), NEUMANN, Eberhard (ur.). *Bio-Electroporation*, (Bioelectrochemistry, ISSN 1567-5394, vol. 100 (Dec. 2014)). [Amsterdam]: Elsevier, 2014, str. 44-51, ilustr. <http://dx.doi.org/10.1016/j.bioelechem.2014.03.008>, doi: 10.1016/j.bioelechem.2014.03.008. [COBISS.SI-ID 10505556]
- POT3. GRILC, Miha, LIKOZAR, Blaž, LEVEC, Janez. Hydrotreatment of solvolytically liquefied lignocellulosic biomass over NiMo/Al [sub]2O [sub]3 catalyst : reaction mechanism, hydrodeoxygenation kinetics and mass transfer model based on FTIR. *Biomass & bioenergy*, ISSN 0961-9534. [Print ed.], Apr. 2014, vol. 63, str. 300-312. http://ac.els-cdn.com/S0961953414000774/1-s2.0-S0961953414000774-main.pdf?tid=0ea2b9e2-a465-11e3-aada-0000aach361&acdnat=1394024149_20710a788236720a78b44656ff173266, doi: 10.1016/j.biombioe.2014.02.014. [COBISS.SI-ID 5432346]
- POT4. NAROBÉ, Miha, GOLOB, Janvit, KLINAR, Dušan, FRANCETIČ, Vojmir, LIKOZAR, Blaž. Co-gasification of biomass and plastics : pyrolysis kinetics studies, experiments on 100 kW dual fluidized bed pilot plant and development of thermodynamic equilibrium model and balances. *Bioresource technology*, ISSN 0960-8524. [Print ed.], Jun. 2014, vol. 162, str. 21-29. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S096085241400426X>, doi: 10.1016/j.biortech.2014.03.121. [COBISS.SI-ID 5457690]
- POT5. RUČIGAJ, Aleš, ALIČ, Branko, KRAJNC, Matjaž, ŠEBENIK, Urška. Investigation of cure kinetics in a system with reactant evaporation : epoxidized soybean oil and maleic anhydride case study. *European Polymer Journal*, ISSN 0014-3057. [Print ed.], 2014, vol. 52, no. 1, str. 105-116, ilustr. <http://dx.doi.org/10.1016/j.eurpolymj.2014.01.009>, doi: 10.1016/j.eurpolymj.2014.01.009. [COBISS.SI-ID 1667887]
- POT6. AMBROŽIČ, Rok, ŠEBENIK, Urška, KRAJNC, Matjaž. Novel epoxy-benzoxazine water-based emulsions with reactive benzoxazine surfactants for coatings. *Express polymer letters*, ISSN 1788-618X, 2014, vol. 8, no. 8, str. 574-587, ilustr. <http://www.expresspolymlett.com/>, doi: 10.3144/expresspolymlett.2014.61. [COBISS.SI-ID 1715503]
- POT7. JANEŽ, Nikolaja, KOKOŠIN, Andreja, ZALETEL, Eva, VRANAC, Tanja, KOVAČ, Jasna, VUČKOVIČ, Darinka, SMOLE MOŽINA, Sonja, ČURIN-ŠERBEC, Vladka, ZHANG, Qijing, ACCETTO, Tomaž, PODGORNIK, Aleš, PETERKA, Matjaž. Identification and characterisation of new Campylobacter group III phages of animal origin. *FEMS microbiology letters*, ISSN 0378-1097. [Print ed.], 2014, vol. 359, str. 64-71, doi: 10.1111/1574-6968.12556. [COBISS.SI-ID 4421752]
- POT8. POHAR, Andrej, LIKOZAR, Blaž. Dissolution, nucleation, crystal growth, crystal aggregation and particle breakage of amlodipine salts : modeling crystallization kinetics and thermodynamic equilibrium, scale-up, and optimization. *Industrial & engineering chemistry research*, ISSN 0888-5885. [Print ed.], Jul. 2014, vol. 53, iss. 26, str. 10762-10774, ilustr. <http://pubs.acs.org/doi/ipdf/10.1021/ie501572h>, doi: 10.1021/ie501572h. [COBISS.SI-ID 5502746]
- POT9. KAJTNA, Jernej, ŠEBENIK, Urška, KRAJNC, Matjaž. Synthesis and dynamic mechanical analysis of nanocomposite UV cross-linkable 100% solid acrylic pressure sensitive adhesives. *International journal of adhesion and adhesives*, ISSN 0143-7496. [Print ed.], 2014, vol. 49, no. 1, str. 18-25, ilustr. <http://ac.els-cdn.com/S0143749613002212/1-s2.0-S0143749613002212-main>.

- pdf? tid=0be1f984-6c7a-11e3-b240-00000aab0f6c&acdnat=1387875899_0bee10364d8f1fce86b5ce0adea1f8d5, doi: 10.1016/j.ijadhadh.2013.12.010. [COBISS.SI-ID 1663791]
- POT10.** KAJTNA, Jernej, ALIČ, Branko, KRAJNC, Matjaž, ŠEBENIK, Urška. Influence of hydrogen bond on rheological properties of solventless UV crosslinkable pressure sensitive acrylic adhesive prepolymers. *International journal of adhesion and adhesives*, ISSN 0143-7496. [Print ed.], 2014, vol. 49, no. 1, str. 103-108, ilustr. http://ac.els-cdn.com/S0143749613002273/1-s2.0-S0143749613002273-main.pdf? tid=1f9b954e-7921-11e3-9740-00000aacb35e&acdnat=1389267072_2b2c514569d4f86a66d77b0b12a891ad, doi: 10.1016/j.ijadhadh.2013.12.016. [COBISS.SI-ID 1664047]
- POT11.** PODGORNİK, Aleš, SAVNIK, Aleš, JANČAR, Janez, LENDERO KRAJNC, Nika. Design of monoliths through their mechanical properties. *Journal of chromatography. A*, ISSN 0021-9673, 2014, vol. 1333, str. 9-17, doi: 10.1016/j.chroma.2014.01.038. [COBISS.SI-ID 4375416]
- POT12.** BEDNAR, Ingeborg, BERGER, Eva, LENDERO KRAJNC, Nika, VIDIČ, Jana, PODGORNİK, Aleš, JUNGBAUER, Alois, TSCHELIEBNIG, Rupert. Surfaces energies of monoliths by inverse liquid chromatography and contact angles. *Langmuir*, ISSN 0743-7463, 2014, vol. 30, no. 19, str. 5435-5440, doi: 10.1021/la5000809. [COBISS.SI-ID 3484923]
- POT13.** JERENEC, Simona, ŠIMIČ, Mario, SAVNIK, Aleš, PODGORNİK, Aleš, KOLAR, Mitja, TURNŠEK, Marko, KRAJNC, Peter. Glycidyl methacrylate and ethylhexyl acrylate based polyhipe monoliths : morphological, mechanical and chromatographic properties. *Reactive & functional polymers*, ISSN 1381-5148. [Print ed.], 2014, vol. 78, str. 32-37, doi: 10.1016/j.reactfunctpolym.2014.02.011. [COBISS.SI-ID 17661718]

KONČNO POROČILO O REZULTATIH RAZISKAV / FINAL RESEARCH REPORT

- POT14.** AMBROŽIČ, Rok, ŠEBENIK, Urška. *Dinamična mehanska analiza vulkaniziranih gumenih zmesi za Siliko d.o.o. : poročilo o opravljenih analizah*. Ljubljana: Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2014. 10 f., graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 1670447]
- POT15.** KRAJNC, Matjaž, ŠEBENIK, Urška, ALIČ, Branko. *Poročilo o DSC analizi vzorcev pen in voskov*. Ljubljana: Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za polimerno inženirstvo, organsko kemijsko tehnologijo in materiale, 2014. 4 f., graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 1793327]
- POT16.** KRAJNC, Matjaž, ŠEBENIK, Urška, ALIČ, Branko. *Poročilo o DSC analizi vzorcev voskov*. Ljubljana: Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za polimerno inženirstvo, organsko kemijsko tehnologijo in materiale, 2014. 9 f., graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 1536138691]
- POT17.** ŠEBENIK, Urška. *Poročilo o rezultatih preiskav za Akrapovič d.d.*. Ljubljana: Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za polimerno inženirstvo, organsko kemijsko tehnologijo in materiale, 2014. 20 f., graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 1536153539]

PATENT / PATENT

- POT18.** JERMAN, Borut, ŠTRAUS, Rok, PODGORNİK, Aleš. *Bioreaktorski sistem za enkratno uporabo z mešalom in mehanskim protipenilecem = Disposable bioreactor system with stirrer and mechanical antifoaming agent : SI24338 (A)*, 2014-10-30. Ljubljana: Urad RS za intelektualno lastnino, 2014. [23] str., ilustr. http://worldwide.espacenet.com/publicationDetails/biblio?DB=EPODOC&II=0&ND=3&adjacent=true&locale=si_si&FT=D&date=20141030&CC=SI&NR=24338A&KC=A. [COBISS.SI-ID 37721349]
- POT19.** RACMAN, Artur, PODGORNİK, Aleš, ŠTRAUS, Rok, SMREKAR, Franc, PETERKA, Matjaž, JERMAN, Borut. *Mešalni reaktor z [!] togim vpetjem bioreaktorske vrečke na okolico = Mixing reactor with a rigid clamping of the bio-reactor bag on the surroundings : SI 24363 (A)*, 2014-11-28. Ljubljana: Urad RS za intelektualno lastnino, 2014. [11] str., ilustr. http://worldwide.espacenet.com/publicationDetails/biblio?FT=D&date=20141128&DB=EPODOC&locale=si_si&CC=SI&NR=24363A&KC=A&ND=4. [COBISS.SI-ID 37721093]
- POT20.** OSMAK, Maja, POLANČ, Slovenko, ČIMBORA, Tamara, BROZOVIČ, A., KOČEVAR, Marijan, MAJCE, Vita, ALIČ, Branko. *Analogues of 1, 3-bis(4-nitrophenyl)triazenes, their pharmaceutically acceptable salts and N-acyl derivatives for tumor treatment : patent : US 8217022 (B2)*, 2012-07-20. [S. l.]: World Intellectual Property Organization, 2012. 7 str., ilustr. [COBISS.SI-ID 30639621]
- POT21.** PODGORNİK, Aleš, BARUT, Miloš, ŠTRANČAR, Aleš, JOSIČ, Djuro. *Novel chromatographic device : Japanese patent, JP4109418 (B2)*, 2008-07-02. [Tokyo]: Japan Patent Office, 2008. 1 zv. (loč. pag.), ilustr. [COBISS.SI-ID 4264056]

PREDAVANJE NA TUJI UNIVERZI / INVITED LECTURE AT FOREIGN UNIVERSITY

- POT22.** GOLOB, Janvit. *Contribution to low carbon society through sustainable development : Virginia Tech, College of Engineering, August 2014*. [2014]. [COBISS.SI-ID 1536015811]

UREDNIK / EDITORSHIP

- POT23.** *International journal of adhesion and adhesives*. Krajnc, Matjaž (član uredniškega odbora 2011-). [Print ed.]. Oxford: Elsevier Science, 1980-. ISSN 0143-7496. [COBISS.SI-ID 25636096]

KATEDRA ZA VARSTVO PRI DELU **CHAIR OF SAFETY AT WORK**

PREDSTOJNIK KATEDRE / HEAD

do / until 30. 9. 2014 doc. dr. Jože Šrekl

PREDSTOJNICA KATEDRE / HEAD

od / since 1. 10. 2014 doc. dr. Barbara Novosel

SODELAVCI KATEDRE / PERSONNEL

Visokošolski učitelji / Faculty

dr. Aleš Jug, pred. (do 30. 9. 2014)

doc. dr. Mitja Robert Kožuh

doc. dr. Jože Šrekl

Visokošolski sodelavec / Assistant

Marjan Lukežič, univ. dipl. inž.

Tehnika / Technicians

Miran Banfi

mag. Iztok Košir

IZOBRAŽEVALNA IN RAZISKOVALNA DEJAVNOST KATEDRE **EDUCATIONAL AND RESEARCH ACTIVITIES**

IZOBRAŽEVALNA DEJAVNOST / LECTURED COURSES

FKKT / FACULTY OF CHEMISTRY AND CHEMICAL TECHNOLOGY

Bolonjski program 1. stopnje / *Bologna 1st Cycle Study Programme*

Tehniška varnost / *Technical Safety – UN:*

Osnove zdravstvenega varstva / *Fundamentals of Health Care*

Osnove tehniške in požarne varnosti / *Fundamentals of Technical and Fire Safety*

Varnost v strojništvu / *Safety in Mechanical Engineering*

Strojni in gradbeni elementi / *Machine and Construction Elements*

Numerične metode v varnosti I / *Numerical Methods in Safety I*

Statistika varnosti / *Safety Statistics*

Analize tveganja / *Risk Analysis*

Delovno okolje / *Working Environment*

Psihologija dela / *Work Psychology*

Ergonomija in ergonomske meritve / *Ergonomics and Ergonomic Measurements*

Odkrivanje in gašenje požarov / *Fire Detection and Fire Fighting*

Požarna varnost v objektih (izbirni predmet) / *Fire Safety in Buildings (elective course)*

Delovne priprave in naprave (izbirni predmet) / *Work Appliances and Devices (elective course)*

Bolonjski program 2. stopnje / *Bologna 2nd Cycle Master Study Programme*

Tehniška varnost / *Technical Safety*:

Numerične metode v varnosti II / *Numerical Methods in Safety II*

Vodenje tveganja in procesna varnost / *Risk Management and Process Safety*

Varno projektiranje in ranljivost sistemov / *Safe Design and Vulnerability of Systems*

Intervencije in reševanje / *Interventions and Rescue*

Človeški in organizacijski dejavniki / *Human and Organizational Factors*

Tehniška varnost (izbirni predmet) / *Technical Safety (elective course)*

Požarna varnost (izbirni predmet) / *Fire Safety (elective course)*

Okoljska tveganja (izbirni predmet) / *Environmental Risks (elective course)*

Analiza vedenja in varnost (izbirni predmet) / *Analysis of the Behavior and Safety (elective course)*

Profesionalna patologija (izbirni predmet) / *Professional Pathology (elective course)*

Varstvo okolja II (izbirni predmet) / *Environmental Protection II (elective course)*

Požarnovarnostna analiza objektov (izbirni predmet) / *Fire Safety Analysis of Buildings (elective course)*

Delovne priprave in naprave II (izbirni predmet) / *Work Appliances and Devices II (elective course)*

RAZISKOVALNA DEJAVNOST / RESEARCH ACTIVITIES

- Nove metodologije ocenjevanja tveganja / *New Methods in Risk Assessment*
- Ocenjevanje kompleksnih tehnoloških sistemov / *Assessment of Complex Technological Systems*
- Človek – element tveganja / *Human as a Risk Factor*
- Metodologija statistike požarov / *Methodology of Fire Statistics*
- Inženirske metode pri vrednotenju požarne varnosti / *Engineering Methods in Fire Safety Assessment*
- Modeliranje s strukturnimi enačbami v oceni požarne ogroženosti / *Structural Equation Modeling in Fire Risk Assessment*
- Problemsko zasnovan študij na področju statistike / *Problem-Based Learning in Statistics*
- Razvoj simulatorja cestnega predora za usposabljanje operabilnega osebja v nadzornem centru / *Development of Road Tunnel Simulator for Staff Training in Operation Control Center*
- Analiza dejanskega požara v predoru Trojane / *Analysis of Actual Fire in the Trojane Tunnel*
- Varnostna analiza predora Karavanke / *Safety Analysis of the Karavanke Tunnel*
- Analize tveganj nekaterih slovenskih cestnih predorov / *Risk Analysis of Some Road Tunnels in Slovenia*
- Analize varnosti načrtovanih plinskih terminalov v Tržaškem zalivu / *Safety Analysis of LNG Terminals Planned in the Gulf of Trieste*

POMEMBNI DOSEŽKI SODELAVCEV KATEDRE / SIGNIFICANT ACHIEVEMENTS OF THE CHAIR STAFF

NAGRADE, PRIZNANJA / AWARDS, RECOGNITIONS

- T. Vošner, Nagrada Avgusta Kuharja za najboljšo diplomsko delo za leto 2014 (mentor M. Bilban) / *The August Kuhar Award for the Best Diploma Thesis in 2014*
- Ž. Rozman, Prešernova nagrada UL FKKT za leto 2014 (mentor B. Novosel) / *Prešeren Award UL FKKT in 2014*

ORGANIZACIJA MEDNARODNIH SREČANJ / ORGANISATION OF INTERNATIONAL MEETINGS

- Varstvo pri delu, varstvo pred požari in medicina dela : dvodnevni posvet z mednarodno udeležbo, Portorož, maj 2014 / *Safety at Work, Fire Safety and Occupational Medicine, Two-day Symposium with International Participation, Portorož, May 2014*

BIBLIOGRAFIJA 2014 / REFERENCES 2014

IZVIRNI ZNANSTVENI ČLANEK / ORIGINAL SCIENTIFIC ARTICLE

- TV1. KOŽUH, Mitja. Preventing hydrogen detonations in road tunnels hydrogen trap concept. *International journal of hydrogen energy*, ISSN 0360-3199. [Print ed.], 2014, vol. 39, no. 30, str. 17434-17439, ilustr. http://ac.els-cdn.com/S0360319914022678/1-s2.0-S0360319914022678-main.pdf?_tid=9d246496-459a-11e4-98a8-00000aabb0f01&acdnat=1411749289_353756d0ea8b0cb08c2bc02efa8c233c, doi: 10.1016/j.ijhydene.2014.08.009. [COBISS.SI-ID 1782063]
- TV2. SKALAR, Tina, MARINŠEK, Marjan, LUBEJ, Martin, LUKEŽIČ, Marjan, SKALAR, Tomaž, MAČEK, Jadran. Modelling of operating parameters in an SOFC testing system = Modeliranje in parametri delovanja sistema za preizkušanje SOFC. *Materials in tehnologije*, ISSN 1580-2949. [Tiskana izd.], no. 6, 2014, str. 861-867. [COBISS.SI-ID 1536129731]
- TV3. ŠREKL, Jože. Computational model of successful mobilization of voluntary firefighters. *Open journal of safety science and technology*, ISSN 2162-5999, 2014, vol. 4, no. 1, str. 42-48, ilustr. <http://www.scirp.org/journal/PaperInformation.aspx?PaperID=43635>, doi: 10.4236/ojsst.2014.41006. [COBISS.SI-ID 1697583]
- TV4. ŠREKL, Jože, PODBREGAR, Andrejka. Enhancing safety information systems with the use ISO/IEC 27000. *Safety Engineering*, ISSN 2217-7124, 2014, vol. 4, no. 1, str. 17-22, ilustr., doi: 10.7562/SE2014.4.01.03. [COBISS.SI-ID 1536203459]
- TV5. JUG, Aleš, PETELIN, Stojan, BUKOVEC, Peter. Probability of fire brigade suppression success in an underground car park fire. *Sigurnost*, ISSN 0350-6886, 2014, vol. 56, no. 1, str. 1-10, ilustr. [COBISS.SI-ID 1700399]

OBJAVLJENI ZNANSTVENI PRISPEVEK NA KONFERENCI / PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTION

- TV6. JUG, Aleš, KOŠIR, Iztok. Evaluation of public transport bus evacuation time with different evacuation models and real-time experiments : [lecture]. V: RIJAVEC, Robert (ur.), et al. *ITS for seamless and energy smart transport : proceedings*. Ljubljana: Electrotechnical Association of Slovenia: ITS Slovenia, 2014, str. [1-4]. [COBISS.SI-ID 1703983]
- TV7. ŠREKL, Jože, PODBREGAR, Andrejka. Varno upravljanje informacijskih sistemov. V: 9th International Scientific and Professional Conference, Moravske Toplice, Slovenija, June 13th and 14th, 2014. TARADI, Josip (ur.). *Management and safety : [proceedings] : M&S 2014 : conference theme: Controlling and safety : program cycle: Basic management functions and safety*. [Zagreb]: The European Society of Safety Engineers, 2014, str. 225-235. [COBISS.SI-ID 1723183]
- TV8. KOŽUH, Mitja. Visoko zanesljive delovne organizacije. V: *Varstvo pri delu, varstvo pred požari in medicina dela : dvodnevni posvet z mednarodno udeležbo, Portorož, 13.-14. 5. 2014*. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Oddelek za tehniško varnost, 2014, str. [1-7]. [COBISS.SI-ID 1710127]
- TV9. JUG, Aleš, KOŠIR, Iztok. Evaluation of public transport bus evacuation time with different evacuation models and real-time experiments. V: *Varstvo pri delu, varstvo pred požari in medicina dela : dvodnevni posvet z mednarodno udeležbo, Portorož, 13.-14. 5. 2014*. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Oddelek za tehniško varnost, 2014, str. [1-9]. [COBISS.SI-ID 1711151]
- TV10. ŠREKL, Jože. Poškodbe pri delu - element stanja varnosti (2003 - 2012). V: *Varstvo pri delu, varstvo pred požari in medicina dela : dvodnevni posvet z mednarodno udeležbo, Portorož, 13.-14. 5. 2014*. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Oddelek za tehniško varnost, 2014, str. 1-9. [COBISS.SI-ID 1710383]
- TV11. MARINŠEK, Marjan, NOVOSEL, Barbara, LUKEŽIČ, Marjan. Primerjava termogravimetrične metode z numeričnim dinamičnim modeliranjem za proces odgorevanja. V: *Varstvo pri delu, varstvo pred požari in medicina dela : dvodnevni posvet z mednarodno udeležbo, Portorož, 13.-14. 5. 2014*. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Oddelek za tehniško varnost, 2014, str. 1-9. [COBISS.SI-ID 1710895]

