



Univerza v Ljubljani
Fakulteta *za kemijo in kemijsko tehnologijo*

POROČILO O IZOBRAŽEVALNI IN RAZISKOVALNI DEJAVNOSTI V LETU 2011





Univerza v Ljubljani
Fakulteta *za kemijo in kemijsko tehnologijo*

POROČILO O IZOBRAŽEVALNI IN RAZISKOVALNI DEJAVNOSTI V LETU 2011

ANNUAL REPORT 2011



KAZALO

UVODNA BESEDA FOREWORD	5
POSLANSTVO FAKULTETE MISSION STATEMENT	9
IZOBRAŽEVALNA IN RAZISKOVALNA DEJAVNOST	11
VKLJUČENOST V OKOLJE	15
ORGANIZACIJSKA SHEMA	21
DIPLOME, MAGISTERIJI IN DOKTORATI V LETU 2011	23
RAZISKOVALNI PROGRAMI V LETU 2011 RESEARCH PROGRAMMES IN 2011	53
Bioanorganska in bioorganska kemija Bioinorganic and Bioorganic Chemistry	55
Raziskave in razvoj analiznih metod in postopkov Research and Development of Analytical Methods and Procedures	67
Sinteza, struktura, lastnosti snovi in materialov Synthesis, Structure, Properties of Compounds and Materials	79
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	87
Fizikalna kemija Physical Chemistry	97
Organska kemija: sinteza, struktura in aplikacija Organic Chemistry: Synthesis, Structure, and Application	105
Kemijsko inženirstvo Chemical Engineering	117
Separacijski procesi toplogrednih plinov za trajnostni razvoj Separation Processes of Greenhouse Gases for Sustainable Development	137

ENOTE SKUPNE DEJAVNOSTI	145
KATEDRE V LETU 2011	
CHAIRS IN 2011	147
Katedra za analizno kemijo	
Chair of Analytical Chemistry	149
Katedra za anorgansko kemijo	
Chair of Inorganic Chemistry	157
Katedra za biokemijo	
Chair of Biochemistry	171
Katedra za fizikalno kemijo	
Chair of Physical Chemistry	185
Katedra za organsko kemijo	
Chair of Organic Chemistry	199
Katedra za anorgansko kemijsko tehnologijo in materiale	
Chair of Inorganic Chemical Technology and Materials	217
Katedra za kemijsko, biokemijsko in ekološko inženirstvo	
Chair of Chemical, Biochemical and Environmental Engineering	225
Katedra za polimerno inženirstvo, organsko kemijsko tehnologijo in materiale	
Chair of Polymer Engineering, Organic Chemical Technology and Materials	239
Katedra za varstvo pri delu	
Chair of Safety at Work	245

UVODNA BESEDA

Poročilo o izobraževalni in raziskovalni dejavnosti Fakultete za kemijo in kemijsko tehnologijo Univerze v Ljubljani (FKKT UL) v letu 2011 ima že ustaljeno obliko in podaja dokaj podroben pregled dela zaposlenih. Delo, tako na pedagoškem kot na raziskovalnem področju ocenjujem kot uspešno, v uvodu pa bi rad povzel nekaj pomembnih dejstev z glavnih področij našega delovanja.

V letu 2011 smo v zaključni letnik vpisali kar tri različne generacije študentov: zadnjo generacijo študentov predbolonjskih univerzitetnih študijskih programov, prvo generacijo študentov prvostopenjskih bolonjskih študijskih programov in prvo generacijo drugostopenjskega magistrskega študijskega programa Tehniška varnost. Vse troje je povezano z izdelavo diplomskega, oziroma magistrskega dela, kar za predbolonjske študijske programe poteka tako kot doslej, diplomska dela na prvi stopnji novih programov in magistrska dela na drugi stopnji pa smo morali definirati na novo. Ker je diplomsko delo v novih programih umeščeno kot predmet v predmetniku, je organizacija dela zahtevnejša, saj cela generacija diplomantov dela na diplomah istočasno. Ker z eksperimentalnim delom zaključujejo ravno v dneh, ko izhaja to poročilo, lahko rečem, da smo organizacijski zalogaj po zaslugi predstojnikov kateder in mentorjev uspešno izpeljali.

Infrastrukturni center, ki združuje veliko raziskovalno opremo FKKT UL, smo tudi formalno ustanovili in vsi instrumenti, ki so vanj vključeni dobro delujejo in so časovno dobro izkoriščeni. V prostore fakultete je v tem letu prišlo tudi precej zelo dobre opreme, ki je last Centrov odličnosti, katerih soustanovitelj je FKKT UL. Čeprav niso naša last, zaposleni na fakulteti s temi instrumenti upravljamo in jih intenzivno uporabljamo za pridobivanje kakovostnih znanstvenih rezultatov. Med kazalci znanstvene uspešnosti omenjam le enega – število citatov za FKKT UL v letu 2011 je prvič preseglo število 3000 in je za več kot 400 citatov višje od števila citatov v letu prej.

Gradnja nove stavbe je bila v letu 2011 v znamenju zaključka gradnje mostu čez Glinščico in javnega razpisa za izvajalca ter priprave razpisa za tehnološko opremo. Z veseljem lahko napišem, da se je razpis za izvajalca gradbenih, obrtniški in inštalaterskih del po dveh pritožbah na Državno revizijsko komisijo iztekel v naš prid. Obe pritožbi sta zavrnjeni, kar dokazuje, da je bilo delo na strani UL, FKKT in FRI dobro opravljeno, sodelavci, ki so pri tem sodelovali pa si zaslužijo vse priznanje. Za podpis pogodbe in začetek gradnje tako ni več ovir in pričakujem, da se bo gradnja začela ravno v tednih okrog izida tega poročila.

Vsem sodelavcem Fakultete za kemijo in kemijsko tehnologijo se za opravljeno delo v preteklem letu iskreno zahvaljujem. Prepričan sem, da bomo tudi breme gospodarske krize, ki ga bomo močno občutili v letu 2012, znali uspešno prenesti in bomo kljub težkim razmeram ohranili ugled FKKT UL.



Prof. dr. Anton Meden
Dekan

INTRODUCTORY

For the 2011 report on educational and research activities of the Faculty of Chemistry and Chemical Technology, University of Ljubljana we have decided to retain its standard form. Here we present a detailed overview of the work of our staff. The results show that our work in education and research has been successful. In this introduction I would like to highlight just some outstanding advances in the main areas of our activities.

In 2011, three different categories of students enrolled in the final year of studies: the last generation of students taking studies according to the pre-Bologna programmes, the first generation of the first-cycle Bologna programme students, and the first generation of second-cycle master's programme in Technical Safety. All the three programmes are leading to the preparation of diploma or master's theses, which means that pre-Bologna students were working under previous regulations, while the diploma and master's works, running according to the new Bologna program had to be redefined. The Bologna system requires the diploma work to be organised as a separate subject within the syllabus, which means that from the organisational point of view, this was a more complex and demanding task for us due to the fact that the whole generation of students were working on their diplomas simultaneously. While I am writing this, our students are completing their experimental work and thanks to the efforts and good organisational skills of their mentors and heads of the Chairs we have successfully managed to execute this difficult task.

The Infrastructural centre, in which all major research equipment of the faculty is concentrated, was formally established and the results show that the instruments and apparatus have been utilised to their maximum. We have also managed to obtain some high quality research equipment which is actually in the possession of the Centres of Excellence where the Faculty acted as a co-founder. Even though this equipment is not the property of our Faculty, our researchers are able to take part in managing the equipment and have it permanently at disposal for their work.

The quality of our research has greatly improved: as one of the indexes of quality I should mention a significant increase in the number of citations in professional literature in 2011. For the first time the figure exceeded 3,000, meaning that compared to the year before there were 400 citations more.

As for the construction of our new premises, the bridge across the Glinščica river was completed last year. We also made a call for tenders for building contractors and prepared a tender for technological equipment. Some problems emerged in connection with the tender for the construction, crafts and installation works: two appeals were filed with the National Review Commission for Public Procurement Procedures but luckily the problem resolved to our benefit. Both appeals were rejected as unfounded which proves that the work on our part had been done professionally for which the credits go to our staff. Thus now there are no more obstacles for concluding the contract and commencing construction development. We are expecting that the works will start by the time this report is published.

I need to express my deep gratitude to all the Faculty staff for their continuous efforts and contributions to all the good results and achievements we have made. Like anyone else, the Faculty too was hit by the general economic crisis, however, in spite of negative general conditions I am convinced that we will manage to withstand the burden of the crisis and retain a high standing of the Faculty.



Prof. Dr. Anton Meden
The Dean

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.

POS LANSTVO FAKULTETE

Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo Univerze v Ljubljani:

- Goji temeljno, aplikativno in razvojno raziskovanje na področjih kemije, biokemije, kemijskega inženirstva, požarne varnosti ter varnosti pri delu.
- Pri tem si prizadeva, da bi dosegla 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 znanstvenoraziskovalnimi 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, s poudarkom na ustvarjalni svobodi.

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 safety at work, 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 an 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 2010/2011 izvajala štiri univerzitetne študijske programe prve bolonjske stopnje:

- Kemija
- Biokemija
- Kemijsko inženirstvo
- Tehniška varnost

visokošolski strokovni študijski program prve bolonjske stopnje:

- Kemijska tehnologija

magistrski študijski program druge bolonjske stopnje:

- Tehniška varnost

ter doktorski študijski program:

- Kemijske znanosti

V študijskem letu 2010/2011 je UL FKKT izvajala tudi pet predbolonjskih dodiplomskih študijskih programov:

- univerzitetni program Kemija s smerema:
 - Kemija in
 - Kemijsko izobraževanje,
- univerzitetni program Biokemija,

- univerzitetni program Kemijsko inženirstvo,
- visokošolski strokovni študijski program Kemijska tehnologija,
- visokošolski strokovni študijski program Varstvo pri delu in požarno varstvo

FKKT je izvajala tudi predbolonjske podiplomske študijske programe na smereh:

- Kemija
- Kemijsko inženirstvo
- Kemijska tehnologija

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

- Biomedicina
- Bioznanosti
- Materiali
- Varstvo okolja

Za izvedbo študijskih programov, skupaj z zunanjimi dopolnilno zaposlenimi sodelavci, skrbi 37 rednih profesorjev, 10 izrednih profesorjev, 8 docentov, 1 višji predavatelj, 1 predavatelj, 54 asistentov, 1 višji strokovni sodelavec, 2 učitelja veščin ter 26 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 2011

Infrastrukturni center na UL FKKT (IC UL FKKT) deluje v sklopu 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 sestavljajo tri enote: Enota za NMR spektroskopijo, Enota za masno spektrometrijo in Enota za elektronsko mikroskopijo.

Oprema vseh treh enot infrastrukturnega centra UL FKKT je bila uporabnikom na razpolago v skladu z načeli, objavljenimi na spletu (<http://nmr-slave.fkkt.uni-lj.si>). Na tej spletni strani uporabniki lahko rezervirajo inštrumentalni čas za uporabo NMR inštrumentov in elektronskega mikroskopa. Zaradi zahtevnosti izvajanja meritve z LC MS spektrometrom 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. Od skupno 8760 ur so meritve na Bruker 300 DPX NMR inštrumentu tekle 6834 ur oziroma 78,0 % in na Bruker Avance II 500 MHz NMR inštrumentu 6578 ur oziroma 75,1 % vsega razpoložljivega časa. Inštrumenta so pri raziskovalnem in pedagoškem delu uporabljali sodelavci UL Fakultete za kemijo in kemijsko tehnologijo in UL Fakultete za farmacijo. Bruker Avance II 400 MHz NMR inštrument je nameščen v laboratoriju Fakultete za farmacijo. V uporabi je bil 6137 ur oziroma 70 % vsega razpoložljivega časa v letu 2011.

Enota za masno spektrometrijo. Agilent 6224 Accurate Mass TOF LC/MS sistem je bil v letu 2011 v uporabi približno 95 % razpoložljivega časa. Od tega 10 % za izobraževanje operaterja in 25 % za vzdrževanje in umerjanje inštrumenta ter odpravljanje začetnih težav s programsko in strojno opremo. Potrebno je omeniti, da je velik del inštrumentalnega časa, namenjenega vzdrževanju in umerjanju upravičen zaradi izredne občutljivosti inštrumenta. Preostali čas inštrumenta je bil namenjen meritvam za raziskovalno in pedagoško delo sodelavcev UL Fakultete za kemijo in kemijsko tehnologijo in interpretaciji rezultatov.

Rezultati raziskav, pri katerih so raziskovalci in študenti uporabljali usluge Enote za NMR spektroskopijo in Enote za masno spektrometrijo IC UL FKKT, so bili v letu 2011 objavljeni v 83 izvirnih znanstvenih člankih, v petih preglednih znanstvenih člankih, 18 vabljenih predavanjih, 23 objavljenih znanstvenih prispevkih na konferencah, 84 prispevkih na konferencah z objavljenimi povzetki ter 3 patentnih prijavih. Oprema infrastrukturnega centra je bila uporabljena tudi pri raziskavah v sklopu 12 doktorskih disertacij ter 49 diplomskih del.

Enota za elektronsko mikroskopijo. V enoti za elektronsko mikroskopijo IC UL FKKT je bil elektronski mikroskop FE-SEM Zeiss Ultra na razpolago vsem uporabnikom 24 ur na dan, 7 dni v tednu, 52 tednov v letu. Od vseh razpoložljivih ur je bil elektronski mikroskop zaseden približno 61 %. Neizkoriščeni ostajajo predvsem nočni termini, saj delo z mikroskopom vseskozi zahteva prisotnost operaterja. Mikroskop je redno vzdrževan, kjer manjša vzdrževalna dela opravi skrbnik inštrumenta in v dosedanjem obratovanju ni bilo večje tehnične napake. Rezervacija inštrumentalnega časa za vse uporabnike poteka preko interneta (<http://mikroskop.fkkt.uni-lj.si/login.php>). Ponedeljkov termin med 7.00 in 16.00 je namenjen zunanjim uporabnikom. Inštrument uporabljajo 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. Nadalje je bil inštrument v preteklem letu uporabljen tudi za podporo

industriji (Keko d.o.o.) vendar ugotavljamo, da bi lahko glede na zmogljivosti inštrumenta tovrstno sodelovanje z industrijo še precej okrepili. V letu 2011 je bil inštrument uporabljen tudi za izvajanje pedagoškega dela na UL FKKT pri izvedbi vaj za študente kemijskega inženirstva, kemije in kemijske tehnologije. Za izvajanje raziskovalnega in pedagoškega dela na inštrumentu FE-SEM Zeiss Ultra je bilo v letu 2011 na FKKT izšolanih tudi 5 novih operaterjev. Rezultati raziskovalnega dela v letu 2011, ki vključujejo uporabo inštrumenta FE-SEM Zeiss Ultra so bili objavljeni v 33 izvornih znanstvenih člankih, v 1 preglednem znanstvenem članku, v 1 vabljenem predavanju na konferenci, 12 objavljenih prispevkih na konferencah, 42 objavljenih povzetkih prispevkov na konferencah, 1 končnem poročilu o rezultatih raziskav ter 1 patentu. Oprema infrastrukturnega centra je bila uporabljena tudi pri raziskavah v sklopu doktorskih disertacij ter magistrskih in diplomskih del.

MEDNARODNO SODELOVANJE

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

Na izobraževalnem področju, v okviru programa EU Vseživljenjsko učenje – Erasmus, potekajo izmenjave študentov na dodiplomskem in podiplomskem študiju. Program omogoča sofinanciranje izmenjav študentov za študij in prakso, učiteljev in administrativnega osebja.

V letu 2011 je bilo v okviru programa Erasmus na izmenjavi v tujini, za študij in prakso, 30 naših študentov, iz tujine pa smo imeli na izmenjavi 19 študentov. En naš učitelj se je udeležil izmenjave za predavanja v tujini.

V okviru Evropske Unije poteka tudi program izmenjave študentov Erasmus Mundus Basileus, ki omogoča izmenjavo študentov v in iz JV Evrope. V okviru tega programa je bil pri nas na izmenjavi en dodiplomski študent iz Srbije.

Na raziskovalnem področju poteka sodelovanje na številnih dvostranskih projektih. V letu 2011 je Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo sodelovala na 28 bilateralnih projektih. 14 se jih je v tem letu končalo, 14 pa jih teče naprej. Na področju raziskovalnega dela na projektih COST sodeluje fakulteta na štirih projektih.

V okviru projektov Evropske unije VŽU, se je raziskovalni projekt Leonardo da Vinci-Prenos inovacij, v letu 2011 končal. Projekt so zunanji ocenjevalci ocenili tako dobro, da je prejel nacionalno priznanje Jabolko kakovosti. Mednarodni projekt je koordinirala naša fakulteta pod vodstvom izr. prof. dr. Nataše Gros.

Na mednarodnem področju potekajo tudi pogodbeno sodelovanja s tujimi univerzami v ZDA, Braziliji, Avstriji, Srbiji, Bosni in Hercegovini in Makedoniji.

VKLJUČENOST V OKOLJE

MEDNARODNA KEMIJSKA OLIMPIADA 2011 V ANKARI

43. mednarodna kemijska olimpiada je potekala od 9.7. do 18.7.2011 v Ankari v Turčiji. Gostila nas je Univerza METU (Middle East Technological University). Predsedujoči olimpiade je bil prof. dr. O. Yavuz Ataman (<http://nernst.chem.metu.edu.tr/icho2011/>).

Na kemijski olimpiadi sodelujejo dijakinje in dijaki, ki so bili najboljši na nacionalnih tekmovanjih in pripravah. Vsako državo lahko zastopajo največ štiri tekmovalci. Slovenijo je na tem tekmovanju zastopala naslednja ekipa: Maja Petek (II. gimnazija Maribor), Katarina Čermelj (gimnazija Bežigrad), Nejc Petek (gimnazija Litija) in Tilen Potisk (gimnazija Škofja Loka). Mentorja slovenske ekipe sta bila dr. Andrej Godec in dr. Darko Dolenc s Fakultete za kemijo in kemijsko tehnologijo v Ljubljani, na kateri potekajo tudi celoletne priprave mladih kemikov na to izredno zahtevno tekmovanje. Pri organizaciji sodeluje še Zveza za tehnično kulturo Slovenije.



*Slovenska ekipa
na kemijski
olimpiadi
v Turčiji*

Na olimpiadi je en tekmovalni dan namenjen laboratoriju, drugi pa je teoretični test. V laboratoriju so morali izvesti tri naloge: določanje skupne količine kloridnih ionov iz $MgCl_2$ in $NaCl$ s Fajansovo metodo, ter magnezijevih ionov s kompleksometrično titracijo z EDTA. Pri drugi nalogi so naredili katalitsko hidrolizo amonijak-borana, pri čemer so začeli s kalijevim tetrakloropaladatom(II) v raztopini, ki vsebuje mešanico polikislin. Kalijev tetrakloropaladat(II) je služil kot predkatalizator, ki se reducira z amonijak-boranom, pri čemer nastanejo paladijevi(0) nanoklastri; ti potem katalizirajo hidrolizo amonijak-borana. Pri hidrolizi amonijak-borana se sprošča vodik; zaradi svoje visoke vsebnosti vodika in stabilnosti pri obratovalnih pogojih je amonijak-boran ($H_3N \cdot BH_3$) potencialno obetajoče gorivo v gorivni celici. Pri tej nalogi so morali dijaki podatke tudi kinetično obdelati, ter določiti hitrost nastajanja vodika v odvisnosti od koncentracije katalizatorja. Tretja naloga je bila sinteza, čiščenje in ločitev diastereomerne zmesi. Pri tej nalogi so dijaki sintetizirali dva kiralna liganda, napravili TLC analizo in s pomočjo merjenja absorbance pri 450 nm izračunali izkoristek.

Dva dni kasneje so dijaki pisali teoretični test. Rešiti so morali osem nalog; štiri so bile s področja fizikalne kemije (kinetika in mehanizem reakcije dušikovih oksidov z vodikom; energijski diagrami; termodinamika sežiga amonijaka; dovoljeni elektronski prehodi v atomih H in v HD, elektronska afiniteta; gorivna celica z vodikom iz natrijevega borohidrida, njen termodinamski izkoristek in povezava z drugim zakonom termodinamike; ekstrakcija zlata v rudarstvu s tiosulfatom), ostale pa s področja anorganske kemije (strukture in reaktivnost N_2 , N_3^- in N_5^+) in organske kemije (reakcijska shema sinteze karbasladkorjev, perspektivne stereokemijske formule; sinteza bicikličnih spojin in stereokemija spojin). Naloge so v celoti objavljene v spletni učilnici Kemljub: <http://skupnost.sio.si/course/view.php?id=150>.

Zadnji dan olimpiade je zaključna slovesnost, ko izvemo rezultate ekip. Naša se je izvrstno odrezala: vsi štirje tekmovalci so osvojili bronaste medalje. Vsem še enkrat iskrene čestitke!

Na tem mestu se zahvaljujem sodelavkam in sodelavcem FKKT: Heleni Prosen, Barbari Modec, Bredi Novak, Mojci Žitko, Zdenki Kadunc, Črtomirju Podlipniku, Borisu Šketu, Darku Dolencu in Andreju Godcu. Hvala tudi Zvezi za tehnično kulturo Slovenije, ki sodeluje pri organizaciji, in Slovenskemu kemijskemu društvu, kjer je sedež našega Odbora za pripravo olimpiad. Uspeh slovenske ekipe je rezultat našega skupnega dela.

POLETNA ŠOLA KEMIJSKIH ZNANOSTI 2011

V tednu od 27.6. do 1.7.2010 je na Fakulteti za kemijo in kemijsko tehnologijo v Ljubljani potekala Poletna šola kemijskih znanosti 2011. Poletno šolo kemije je organizirala naša Fakulteta v sodelovanju z Zvezo za tehniško kulturo Slovenije. Poletna šola je bila še posebej svečana, ker je bilo leto 2011 mednarodno leto kemije.

Poletna šola je zasnovana eksperimentalno. V prvi delavnici so udeleženci spoznali dve klasični analizi metodi, s katerima so v vzorcu vina določali nekatere snovi, ki vplivajo na njegovo kakovost. To sta skupna vsebnost kislin in prosti žveplov dioksid (redoks titracija).

Tema druge delavnice so bila belilna sredstva: udeleženci so raziskali, kako belilna sredstva na osnovi klora učinkujejo na različna barvila. Uporabili so jih za odstranitev madežev paradižnikovega soka in se spotoma naučili, kako pridobivati klor v majhnih količinah. Razen tega so določili tudi vsebnost kloratov(I) v komercialno dostopnih belilnih sredstvih.

V naslednji delavnici so dijaki spoznali aerobno pridobivanje kvasovk v bioreaktorju in njihovo uporabo za biotransformacijo. V okviru vaje so se udeleženci seznanili s pridobivanjem



*Udeleženci
poletne šole
2011 pri delu
v laboratoriju*

biomase kvasovke *Saccharomyces cerevisiae* ter njeno uporabo za biotransformacijo fumarne kisline v L-jabolčno kislino.

V zadnji delavnici so udeleženci delali z dezoksiribonukleinsko kislino (DNA), ki je nosilka genetskih informacij; v laboratoriju so jo izolirali iz jagod. Drugi poskus je bila encimska kinetika katalaze, ekstrahirane iz krompirja. Merili so njeno aktivnost pri različnih koncentracijah.

Razen tega so udeleženci poslušali tudi navodila o varnem delu v laboratoriju, in predavanje Red ali nered (dr. Andrej Godec), kjer so na zabaven način razširili in poglobili razumevanje smeri kemijskih in fizikalnih procesov s pomočjo intuicije, in vse to povezali z dogajanjem v naravi.

Poletna šola je bila zelo uspešna, kot so pokazale ankete, ki smo jih izvedli med udeleženkami in udeleženci.

Strokovno ekipo, ki je sodelovala pri izvedbi delavnic in predavanj, pa so sestavljali dr. Helena Prosen, dr. Nina Lah, dr. Polona Žnidaršič Plazl, dr. Andrej Godec in Matevž Korenč.

Vodja poletne šole je bil dr. Andrej Godec.

Zahvaljujemo se tudi podjetjem donatorjem, ki so omogočila izvedbo letošnje Poletne šole kemijskih znanosti 2011, in Zvezi organizacij za tehnično kulturo Slovenije za pomoč pri organizaciji poletne šole.

PREDAVANJA IN DELAVNICE NA FESTIVALU ZNANOSTI 2011

Naša Fakulteta je sodelovala tudi na 17. Festivalu znanosti, ki je potekal od 4.10. do 6.10.2011 v Cankarjevem domu v Ljubljani. Festival, ki ga organizira Slovenska znanstvena fundacija, je namenjen predvsem mladim, ki jih zanima znanost; zadnji je bil še posebej svečan, ker je bilo leto 2011 tudi leto kemije.

Na festivalu so s predavanji sodelovali dekan prof. Anton Meden, prof. Iztok Turel, dr. Elizabeta Tratar Pirc in dr. Miha Lukšič. V sredo in četrtek smo izvedli tudi izvrstno obiskane delavnice, ki so jih pripravili in v njih sodelovali dr. Andrej Godec, dr. Janez Cerkovnik, dr. Elizabeta Tratar Pirc in prof. Marija Bešter Rogač (»Igriva kemija«), ter v četrtek še prof. Ivan Leban (»Zanimivi poskusi v kemiji«). Vse dni pa je na festivalu delovala tudi naša stojnica, ki jo je organiziral dr. Franc Perdih.



Predavanja in delavnice na Festivalu znanosti 2011

Delavnica Igriva kemija je trajala eno uro, na sporedu pa je bila enkrat na dan, tri dni zaporedoma. Namen te delavnice je bil, da se obiskovalci na zabaven in sproščen način seznanijo z različnimi zanimivimi aspekti kemije. Vsebina delavnic so bili različni postopki, ki jih uporabljamo v kemiji: destilacija, ekstrakcija, titracija in podobno. Poleg tega so udeleženci delali kemijski vrt, pa kemijski vulkan, faraonove kače, bengalski ogenj, pa oscilirajoče reakcije ter kemijsko uro; dokazovali so glukozo in škrob v sladkorju in kruhu, ter prisotnost organskih kislin, beljakovin in maščob v raznih snoveh.

NOČ ZNANSTVENIC IN ZNANSTVENIKOV 2011

Vsako leto v septembru že nekaj let pred začetkom študijskega leta v večernih urah UL FKKT priredi »Noč znanstvenic in znanstvenikov«. Tehnični sodelavec Aleš Knez in profesor Ivan Leban s Katedre za anorgansko kemijo v veliki predavalnici organizirata večer kemijskih poskusov v živo. Letošnja prireditev je bila posvečena tudi Mednarodnemu letu kemije (IYC2011). Na srečanje smo povabili vse generacije – od mlajših do starejših znanstvenikov. V okviru Direktorata za raziskave Evropske komisije je po vsej Evropi potekal skupen dogodek »Researchers' Night, 2011«. Pokazali smo več kemijskih eksperimentov in s tem tudi



*S predsednikom
države gospodom
Danilom Türkom
na IYC 2011*

delno popularizirali kemijske študije na naši fakulteti. Hkrati smo želeli približati kemijsko znanost na poljuden način vsem ljudem. Precej drugače si je ogledati kemijske poskuse v živo in ne samo preko virtualnih strani računalnika.

Kemija je naš vsakdan, z njo se vsi srečujemo vsepovsod – če hočemo to priznati ali ne. Otroci se s kemijo, ne da bi zanjo vedeli, srečajo že zgodaj v osnovni šoli pri pouku naravoslovja, bolj podrobneje pa kasneje. Pri tem so naši predšolski otroci pravi znanstveniki, družboslovci in inženirji – kuhajo, skrbijo za svoje otroške lutke in jih vzgajajo in zdravijo, gradijo peščene gradove in kanale za vodo, zbirajo kamne, opazijo vsakega metulja in gosenico, nabirajo rože in na sploh zelo radi raziskujejo in eksperimentirajo – kasneje se to na žalost spremeni.

V mednarodnem letu kemije 2011 je še marsikdo rekel, da ga kemija ne zanima in da škoduje okolju. Seveda pa se moramo vsi zavedati, da moramo čim več uporabljati »zeleno kemijo« in podpreti trajnostni razvoj. Uporabljajmo le tako kemijo, da ne bomo z njo škodili bodočim rodovom!



*Občinstvo na
noči znanstvenic
in znanstvenikov
2011*

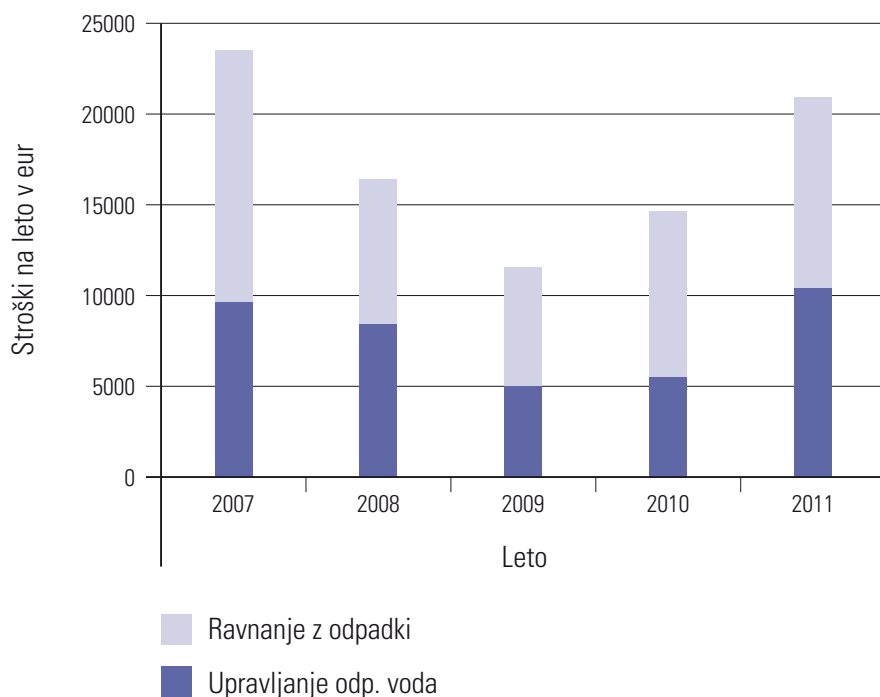
ZBIRANJE IN ODSTRANJEVANJE ODPADKOV NA UL FKKT V LETU 2011

V poročilu za leto 2010 so bili navedeni podatki o deležu in količinah nevarnih odpadkov, ki jih zbiramo na fakulteti. Podatki za leto 2011 so podobni in jih zato ponovno ne navajamo.

Na spodnjem grafikonu so prikazani letni stroški izdatkov za varstvo okolja, ki jih pošiljamo Statističnemu uradu RS. Prikazani so podatki za obdobje 2007–2011. Letni stroški so znašali od 11.605 EUR do 23.538 EUR. Stroški so razdeljeni na:

- Upravljanje odpadnih voda (zajemajo stroške odvajanja in čiščenja odpadnih voda),
- Ravnanje z odpadki (zajemajo stroške odvoza smeti, odvoza in uničenja odpadnih kemikalij in nakup različnih posod za odpadke).

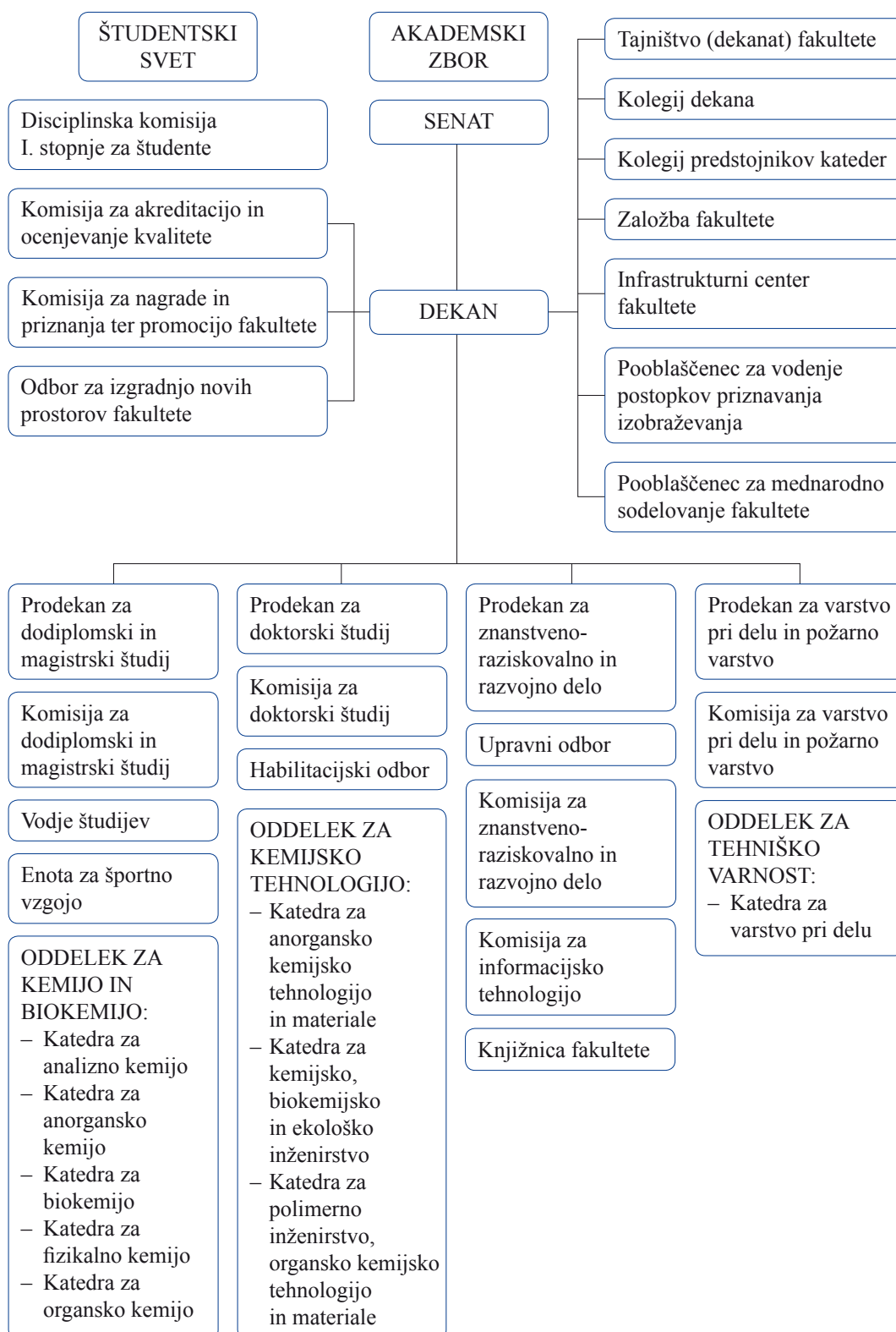
Izdatki za varstvo okolja



Novosti/spremembe v letu 2011:

- S selitvijo na novo lokacijo Katedra za biokemijo posebej ločeno zbira še odpadke pod klasifikacijsko številko 180103 – Odpadki, ki z vidika preventive pred infekcijo zahtevajo posebno ravnanje pri zbiranju in odstranitvi.
- V dogovoru s podjetjem Snaga in v skladu z Uredbo o ravnanju z odpadno embalažo (Ur. l. RS št. 84/2006, 106/2006 in 110/2007) v zabojnike za steklo na ekološkem otoku ne odlagamo več praznih steklenic kemikalij, ki imajo na etiketi oznako T, T⁺ ali E (strupeno, zelo strupeno ali eksplozivno). Te se odlagajo v kontejner za odpadne kemikalije ali pa se uporabijo za shranjevanje odpadnih kemikalij.

ORGANIZACIJSKA SHEMA



DIPLOME, MAGISTERIJI IN DOKTORATI V LETU 2011

DIPLOME

UNIVERZITETNI ŠTUDIJSKI PROGRAMI

KEMIJA

Tina Bakarič

Mentor: prof. dr. Marjan Veber
Določevanje molibdena v disperziji Mo-S-I nanožic
Datum zagovora: 8. 9. 2011

Aljoša Bolje

Mentor: prof. dr. Janez Košmrlj
Sinteza triazolov iz (heteroaril)metil azidov in fenilacetenov
Datum zagovora: 2. 9. 2011

Nuša Caf

Mentorica: prof. dr. Marija Bešter Rogač
Somentorica: prof. dr. Mirjana Gašperlin
Vrednotenje reoloških lastnosti liotropnih tekočih kristalov na osnovi lecitina
Datum zagovora: 3. 10. 2011

Mojca Časar

Mentorica: prof. dr. Nataša Bukovec
Tanke plasti aluminijevega oksida dopirane z grafitom
Datum zagovora: 19. 12. 2011

Maša Černič

Mentor: doc. dr. Bogdan Štefane
Sinteza aminskih derivatov nitrokinolina kot potencialnih inhibitorjev katepsina B
Datum zagovora: 20. 12. 2011

Lucija Čoga

Mentor: prof. dr. Iztok Turel
Študij vezave dvovalentnih kovinskih ionov, cinka, kadmija in živega srebra na DNA
Datum zagovora: 6. 9. 2011

Bojana Črček

Mentor: prof. dr. Jurij Svete

Kombinatorna sinteza 4-(1-fenil-5-oksopirolidin-3-il)pirimidin-5-karboksamidov

Datum zagovora: 5. 12. 2011

Špela Derstvenšek

Mentorica: prof. dr. Helena Prosen

Razvoj in validacija HPLC-CAD metode za določitev sorodnih substanc makrolidnega intermediata

Datum zagovora: 21. 12. 2011

Jure Gujt

Mentorica: prof. dr. Barbara Hribar Lee

Opis medionske interakcije alkalijskih halogenidov v enostavnem modelu vode

Datum zagovora: 5. 9. 2011

Gregor Hostnik

Mentor: doc. dr. Janez Cerar

Transportne lastnosti vodnih raztopin litijeve soli poli(tiofen-3-il-ocetne kisline)

Datum zagovora: 5. 9. 2011

Matej Huš

Mentor: doc. dr. Tomaž Urbič

Ovisnost potenciala med molekulama vode od lokalnega okolja

Datum zagovora: 9. 9. 2011

Gregor Jakša

Mentor: doc. dr. Bogdan Štefane

Sinteza in vrednotenje nizkomolekularnih spojin kot potencialnih inhibitorjev katepsina B

Datum zagovora: 8. 9. 2011

Maja Jančar

Mentor: prof. dr. Peter Bukovec

Fotokataliza TiO₂ tankih plasti pripravljenih po sol-gel postopku

Datum zagovora: 1. 3. 2011

Dejan Klement

Mentor: prof. dr. Anton Meden

Somentor: prof. dr. Danilo Suvorov

Vpliv pogojev sinteze na strukturne in električne lastnosti keramike

Ag(Ta_xNb_{1-x})O₃

Datum zagovora: 9. 9. 2011

Katja Klun

Mentor: prof. dr. Iztok Turel

Sinteza in karakterizacija rutenijevih (II) kompleksov z aril in alkil substituiranimi fenantrolini

Datum zagovora: 8. 9. 2011

Andreja Kunc

Mentor: prof. dr. Boris Pihlar
Cianidno srebrenje bakrenih polizdelkov
Datum zagovora: 3. 10. 2011

Lea Legan

Mentorica: doc. dr. Marija Zupančič
Raziskave kemijskega čiščenja slik na platnu
Datum zagovora: 5. 10. 2011

Alenka Lipič

Mentorica: prof. dr. Ksenija Kogej
Fazni diagram v mešanicah polistirensulfonatnega aniona,
cetiltrimetilamonijevega kationa in vode
Datum zagovora: 7. 11. 2011

Jernej Markelj

Mentor: prof. dr. Boris Pihlar
Raziskava in separacija purinskih in pirimidinskih baz s HPLC v realnih vzorcih
Datum zagovora: 1. 7. 2011

Gregor Marolt

Mentor: prof. dr. Boris Pihlar
Interakcije železovih(III) ionov s fitati
Datum zagovora: 20. 9. 2011

Marko Mermal

Mentor: doc. dr. Franci Kovač
Oksidacija vinilnih etrov z dimetildioksiranom in nekatere pretvorbe nastalih
epoksidov
Datum zagovora: 13. 12. 2011

Eva Mežnar

Mentor: akademik prof. dr. Branko Stanovnik
Sinteza (3-substituiranih-5-(hetero)aroil-2-okso-2,3-dihidro-1*H*-imidazol-1-il)
karbamatov
Datum zagovora: 19. 10. 2011

Mladena Milošević

Mentor: prof. dr. Jurij Svete
Amidiranje etil 1-fenil-5-hidroksi-1*H*-pirazol-4-karboksilata pod mikrovalovi
Datum zagovora: 5. 12. 2011

Petra Močnik

Mentor: prof. dr. Boris Pihlar
Somentor: prof. dr. Andraž Legat
Vpliv mikrostrukture na korozijo nikljevih zlitin pod mehansko obremenitvijo
Datum zagovora: 23. 12. 2011

Nina Ogrinc

Mentorica: doc. dr. Irena Kralj Cigić
Določanje hlapnih organskih spojin v kartonu
Datum zagovora: 27. 9. 2011

Andreja Plazar

Mentorica: prof. dr. Helena Prosen

Primerjava ekstrakcijskih metod za klorirana onesnaževala v živilih

Datum zagovora: 27. 9. 2011

Benjamin Prek

Mentor: akademik prof. dr. Branko Stanovnik

Sinteza dimetil 6-substituiranih piridin-3,4-dikarboksilatov in 2-substituiranih-4,5-bis(metoksikarbonil)piridin-*N*-oksidov

Datum zagovora: 23. 6. 2011

Maja Prijanovič

Mentor: doc. dr. Franc Požgan

Uporaba metateze v sintezi linearnih disubstituiranih alkenov

Datum zagovora: 29. 6. 2011

Luka Rejc

Mentor: prof. dr. Andrej Petrič

Sinteza analogov FDDNP z uvedbo etinilidenskega distančnika

Datum zagovora: 2. 9. 2011

Sara Seršen

Mentor: prof. dr. Iztok Turel

Sinteza in karakterizacija rutenijevih organokovinskih kompleksov s 4-substituiranimi-1,1,1-trifluoroacetilacetonati

Datum zagovora: 8. 9. 2011

Mateja Simonič

Mentor: doc. dr. Bogdan Štefane

Somentor: doc. dr. Aleš Podgornik

Vezava 2-aliloksietanola na CIM[®] epoksi monolite in njihova karakterizacija

Datum zagovora: 23. 6. 2011

Katarina Slanc

Mentor: doc. dr. Bogdan Štefane

Priprava 10- in 12-členskih cikličnih sistemov s pomočjo alkenske metateze

Datum zagovora: 26. 9. 2011

Smiljan Slukan

Mentor: prof. dr. Gorazd Vesnaver

Toplotno inducirane strukturne spremembe oligonukleotida z zaporedjem človeške telomere v raztopinah s kalijevimi ioni

Datum zagovora: 19. 4. 2011

Gregor Strle

Mentor: akademik prof. dr. Branko Stanovnik

Pretvorbe metil ketonov v etil (3,5-disubstituirane 2-okso-2,3-dihidro-1*H*-imidazol-1-il)karbamate

Datum zagovora: 31. 8. 2011

Luka Šenica

Mentor: prof. dr. Jurij Svete

Sinteza in atropizomerija nekaterih 1,4,5-trisubstituiranih pirazolov

Datum zagovora: 31. 8. 2011

Irena Šerer Rupar

Mentorica: prof. dr. Metka Renko

Somentorica: prof. dr. Bojana Boh

Vpliv sestave substrata na produkcijo bioaktivnih polisaharidov glive *Grifola frondosa*

Datum zagovora: 31. 5. 2011

Tanja Špec

Mentor: doc. dr. Andrej Pevec

Sinteza novih paladijevih (II) in paladijevih (III) spojin s pirazolnimi ligandi

Datum zagovora: 3. 10. 2011

Aleš Štefancič

Mentor: prof. dr. Alojz Demšar

Sinteza in karakterizacija aerogelov na osnovi aluminijevega(III) fluorida

Datum zagovora: 19. 9. 2011

Ana Testen

Mentor: prof. dr. Jurij Svete

Sinteza novih pirazolo[1,2-a]pirazolonskih peptidomimetikov

Datum zagovora: 19. 12. 2011

Miha Trdin

Mentor: prof. dr. Boris Pihlar

Raziskava elektrodepozicijskih nanosov americijevih izotopov

Datum zagovora: 8. 7. 2011

Tjaša Tušar

Mentor: prof. dr. Iztok Turel

Ternarni kompleksi bakra z 2,4,6-tri(piridil)-1,3,5-triazinom in nekaterimi dušik vsebujočimi ligandi

Datum zagovora: 22. 2. 2011

Žiga Ude

Mentor: prof. dr. Iztok Turel

Sinteza in karakterizacija rutenijevih koordinacijskih spojin z *N*-oksidi

Datum zagovora: 30. 11. 2011

Jure Vajs

Mentor: prof. dr. Slovenko Polanc

Priprava in pretvorbe izbranih heterocikličnih hidrazidov

Datum zagovora: 1. 9. 2011

Natalija Volmajer

Mentor: doc. dr. Marjan Jereb

Aerobne oksidacije alkoholov

Datum zagovora: 22. 6. 2011

Doris Nena Vrečko

Mentor: prof. dr. Iztok Turel

Sinteza novih paladijevih(II) spojin z (N,S) in (O,O) ligandi.

Datum zagovora: 6. 9. 2011

Tinkara Vrečko

Mentor: doc. dr. Drago Kočar
Določanje konzervansov v kalcijevev karbonatu
Datum zagovora: 19.10. 2011

Lea Zalar

Mentor: prof. ddr. Boris Turk
Somentorica: doc. dr. Tina Zavašnik Bergant
Spremljanje inhibitorne aktivnosti klopnega cistatina OmC₂ v celičnem modelu
imunskih celic
Datum zagovora: 22. 9. 2011

KEMIJSKO IZOBRAŽEVANJE

Matej Huš

Mentor: doc. dr. Tomaž Urbič
Ovisnost potenciala med molekulama vode od lokalnega okolja
Datum zagovora: 9. 9. 2011

Špela Smerdelj

Mentor: prof. dr. Boris Šket
Razumevanje vsebin povezanih z organskimi kisikovimi spojinami pri
gimnazijcih
Datum zagovora: 23. 8. 2011

Marta Kasunič

Mentorica: doc. dr. Barbara Modec
Koordinacijske spojine molibdena(V) in (VI) z nekaterimi
 α -hidroksikarboksilnimi kislinami
Datum zagovora: 23. 12. 2011

Adrijana Oblak

Mentorica: prof. dr. Vladka Čurin Šerbec
Opredelitev monoklonskih protiteles proti izbranemu peptidu iz zaporedja
bilitranslokaze
Datum zagovora: 23. 12. 2011

Mateja Simonič

Mentor: doc. dr. Bogdan Štefane
Somentor: doc. dr. Aleš Podgornik
Vezava 2-aliloksi etanola na CIM[®] epoksi monolite in njihova karakterizacija
Datum zagovora: 23. 12. 2011

BIOKEMIJA

Dejan Ajlec

Mentorica: prof. dr. Brigita Lenarčič
Somentor: dr. Janez Ščančar, viš. znan. sodel.
Določanje kemijskih zvrsti cinka v vzorcih humanega mleka
Datum zagovora: 27. 1. 2011

Urška Aljančič

Mentor: prof. dr. Aleksander Pavko

Optimizacija gojišča za submerzno gojenje bazidiomicete *Ceriporiopsis subvermispora*

Datum zagovora: 12. 9. 2011

Marjeta Arnolj

Mentor: akademik prof. dr. Janez Sketelj

Vpliv motoričnega živca na raven mRNA težkih verig miozina I v zrelih in nezrelih mišicah podgane

Datum zagovora: 28. 9. 2011

Tanja Bele

Mentorica: prof. dr. Damjana Rozman

Vpliv svetlobe in transkripcijskega faktorja CREM na izražanje genov v mišji nadledvični žlezi

Datum zagovora: 16. 9. 2011

Damjana Cvelbar

Mentorica: prof. dr. Marija Žakelj-Mavrič

Študij interakcije med steroidi in kvasovkama *Hortaea werneckii* in *Saccharomyces cerevisiae*

Datum zagovora: 28. 6. 2011

Mateja Črček

Mentor: prof. dr. Marko Dolinar

Somentorica: prof. dr. Katja Drobnič

Forenzična identifikacija nekaterih sesalskih vrst na osnovi razlik v dolžinah amplikonov mitohondrijskih genov za citokrom b

Datum zagovora: 28. 9. 2011

Klemen Dobnikar

Mentor: prof. dr. Peter Bukovec

Sinteza in karakterizacija kovinskih ksantureatov

Datum zagovora: 9. 11. 2011

Minca Ferlin

Mentor: prof. dr. Jože Pungerčar

Študij prehodnega izražanja sekretorne fosfolipaze A2 skupine X in njen vpliv na rast celic raka dojke

Datum zagovora: 8. 9. 2011

Alenka Guček

Mentor: prof. dr. Robert Zorec

Elektrofiziološke meritve diskretnih sprememb membranske kapacitivnosti v astrocitih

Datum zagovora: 11. 8. 2011

Marina Grgić

Mentor: prof. dr. Radovan Komel

Preiskava polimorfizmov v genu za relin pri žrtvah samomora

Datum zagovora: 16. 9. 2011

Aljaž Grlica

Mentor: prof. dr. Peter Bukovec

Fotokatalitska in protimikrobna aktivnost TiO₂ tankih plasti

Datum zagovora: 11. 11. 2011

San Hadži

Mentor: prof. dr. Roman Jerala

Vpliv točkovnih mutacij s spremembo naboja na pretvorbo prionskega proteina

Datum zagovora: 8. 12. 2011

Simon Istenič

Mentorica: doc. dr. Polona Žnidaršič Plazl

Priprava bakterij *Aminobacter sp.* MSH1 in *Variovorax sp.* SRS16 za nadaljnjo inkapsulacijo.

Datum zagovora: 27. 9. 2011

Špela Jakša

Mentor: prof. dr. Peter Bukovec

Fotokatalitska in anaerobna razgradnja Plazmokorinta B

Datum zagovora: 3. 2. 2011

Janja Kobe

Mentor: prof. dr. Marjan Veber

Določanje oksalata v krvni plazmi z ionsko kromatografijo

Datum zagovora: 22. 9. 2011

Katja Kolar

Mentor: prof. dr. Roman Jerala

Priprava in lastnosti modifikacij ureaze B kot potencialnega cepiva proti bakteriji *Helicobacter pylori*

Datum zagovora: 5. 10. 2011

Primož Karlovšek

Mentorica: doc. dr. Irena Kralj Cigić

Ovrednotenje metod za določitev temperature krčenja kolagena

Datum zagovora: 28. 9. 2011

Vid Kočar

Mentor: prof. dr. Roman Jerala

Hibridni DNA origami

Datum zagovora: 8. 9. 2011

Matevž Korenč

Mentor: doc. dr. Gregor Gunčar

Priprava rekombinantnih hipervariabilnih domen protiteles specifičnih za kofein in lizocim

Datum zagovora: 11. 3. 2011

Jaka Kragelj

Mentor: prof. dr. Igor Križaj

Identifikacija vezavnih proteinov za amoditoksin v krvnem serumu

Datum zagovora: 23. 6. 2011

Tadeja Kūzma

Mentor: prof. dr. Jože Pungerčar

Somentorica: prof. dr. Metka Filipič

Citotoksični in genotoksični učinki delcev TiO₂ podmikronske in nanovelikosti na celice HepG2 v prisotnosti in odsotnosti UVA-sevanja

Datum zagovora: 17. 2. 2011

Mira Kuzmič

Mentorica: doc. dr. Marjanca Starčič Erjavec

Somentorica: prof. dr. Darja Žgur-Bertok

Gen rmoA bakterija Escherichia coli

Datum zagovora: 11. 3. 2011

Ana Lun

Mentorica: prof. dr. Helena Prosen

Študij ekstrakcije fenolnih spojin iz zeliščnih čajev

Datum zagovora: 24. 10. 2011

Tinkara Mastnak

Mentor: prof. dr. Peter Bukovec

Določevanje antioksidativnih lastnosti ksanturinske kisline in njenih derivatov s tiobarbiturno kislino reagirajočimi snovmi

Datum zagovora: 22. 12. 2011

Lev Matoh

Mentorica: doc. dr. Romana Cerc Korošec

Priprava in protimikrobne lastnosti nano-bakrovega oksida

Datum zagovora: 24. 2. 2011

Timotej Majdič

Mentorica: prof. dr. Tamara Lah Turnšek

Vpliv endotelijskih celic in makrofagov na apoptozo glioblastomskih celic

Datum zagovora: 28. 6. 2011

Janja Markovič

Mentor: prof. dr. Darko Černe

Preučevanje izražanja gena *SREBF2* v nedrobnoceličnem pljučnem rakavem tkivu

Datum zagovora: 9. 11. 2011

Maja Marušič

Mentor: prof. dr. Janez Plavec

NMR struktura G-kvadrupleksa iz genoma človeškega papiloma virusa

Datum zagovora: 6. 9. 2011

Saša Nastran

Mentor: prof. dr. Radovan Komel

Somentorica: doc. dr. Klementina Fon Tacer

Postavitev celičnih modelov za spremljanje hematopoetskih in stranskih učinkov eritropoietina *in vitro*

Datum zagovora: 22. 12. 2011

Lucija Pančur

Mentor: prof. dr. Peter Bukovec

Določanje antioksidativnih lastnosti ksanturinske kisline in njenih derivatov z uporabo DPPH metode

Datum zagovora: 7. 10. 2011

Rok Pirh

Mentor: prof. dr. Janez Plavec

Študija vpliva anionov na strukturne značilnosti dimernega G-kvadrupleksa z NMR v raztopini

Datum zagovora: 24. 10. 2011

Boris Rugel

Mentorica: doc. dr. Polona Žnidaršič Plazl

Presejalni test kvasovk za proizvodnjo L-jabolčne kisline z uporabo mikroreaktorja

Datum zagovora: 12. 12. 2011

Valentina Slak

Mentor: prof. dr. Peter Bukovec

Določevanje antioksidativnih lastnosti ksanturinske kisline in njenih derivatov z uporabo ABTS metode.

Datum zagovora: 27. 1. 2011

Kristina Smiljić

Mentor: prof. dr. Peter Bukovec

Somentor: dr. Janez Ščančar

Nikelj v prehranskih izdelkih

Datum zagovora: 24. 2. 2011

Matuša Stražišar

Mentor: prof. dr. Marko Dolinar

Somentorica: doc. dr. Mojca Pavlin

Analiza interakcije DNA s celično membrano ter učinkovitost vnosa DNA v celice CHO z elektrotransfekcijo pri nizkih koncentracijah plazmida

Datum zagovora: 30. 8. 2011

Mateja Šimic

Mentor: prof. dr. Radovan Komel

Polimorfizmi v genih TTK in BUB1B pri slovenskih bolnikih z rakom želodca

Datum zagovora: 19. 4. 2011

Janja Vivod

Mentorica: prof. dr. Tamara Lah Turnšek

Vpliv resveratrola na diferenciacijo glioblastomskih matičnih in nevroepitelijskih matičnih celic

Datum zagovora: 6. 9. 2011

Metka Vivod

Mentor: prof. dr. Janez Plavec

Tvorba G-kvadrupleksov znotraj gena N-myc

Datum zagovora: 27. 9. 2011

Eva Vran

Mentor: prof. dr. Darko Černe
Preučevanje izražanja gena *CD163* v nedrobnoceličnem pljučnem rakavem tkivu
Datum zagovora: 11. 11. 2011

Jaka Zavašnik

Mentor: prof. dr. Janez Plavec
NMR študije vezave in izmenjave monovalentnih kationov znotraj dimernega $d(G3CT4G3C)_2$ G-kvadrupeksa
Datum zagovora: 31. 5. 2011

Vanja Žišt

Mentorica: prof. dr. Marija Žakelj Mavrič
Toksičnost steroidov in njihova detoksifikacija pri glivah
Datum zagovora: 24. 10. 2011

KEMIJSKO INŽENIRSTVO

Kristina Bašnec

Mentor: prof. dr. Marjan Marinšek
Kinetika sintranja keramičnih materialov
Datum zagovora: 26. 9. 2011

Jaro Bele

Mentor: prof. dr. Jadran Maček
Priprava keramične matrice na osnovi SiC z uporabo infiltracije in pirolize polimera
Datum zagovora: 22. 4. 2011

Peter Berce

Mentor: doc. dr. Blaž Likozar
Rast in produkcija lipidov mikroalge *Chlorella vulgaris* pri različnih izpostavitvah svetlobi
Datum zagovora: 20. 5. 2011

Ana Butara

Mentor: akademik prof. dr. Janez Levec
Somentor: doc. dr. Blaž Likozar
Vpliv temperature na prenos snovi in kinetiko pri produkciji biodizla
Datum zagovora: 23. 12. 2011

Peter Dušak

Mentor: prof. dr. Marin Berovič
Modeliranje kinetike fermentacije v tehnologiji vina
Datum zagovora: 9. 9. 2011

Erika Erjavec

Mentor: prof. dr. Marjan Marinšek
Elektrokatalitska oksidacija mravljinčne kisline na Pd-C katalizatorju
Datum zagovora: 15. 6. 2011

Miha Grilc

Mentor: prof. dr. Janvit Golob

Somentorica: doc. dr. Ljudmila Fele Žilnik

Dogradnja visokotlačne celice in meritve faznih ravnotežij za testni sistem n-dekan – CO₂ z različnimi metodami

Datum zagovora: 9. 9. 2011

Žiga Habjan

Mentor: doc. dr. Blaž Likozar

Somentorica: dr. Zorica Crnjak Orel

Vpliv morfologije cinkovega oksida na fotokatalizo

Datum zagovora: 3. 10. 2011

Maja Hromec

Mentor: prof. dr. Marin Berovič

Submerzna kultura biomase in polisaharidov glive *Trametes versicolor*

Datum zagovora: 13. 6. 2011

Sonja Intihar

Mentor: prof. dr. Matjaž Krajnc

Vpliv sestave emulzije na mikroinkapsulacijo butil stearata

Datum zagovora: 18. 11. 2011

Renata Kaplan

Mentor: akademik prof. dr. Janez Levec

Multifunkcijski sistem za čiščenje sanitarne odpadne vode

Datum zagovora: 8. 9. 2011

Urška Kržišnik

Mentorica: prof. dr. Urška Šebenik

Vpliv anhidrida maleinske kisline na viskoelastične lastnosti nanokompozita etilen-propilen-dienski kavčuk/glina

Datum zagovora: 2. 12. 2011

Lucija Majal

Mentor: prof. dr. Matjaž Krajnc

Študij reakcije dehidracije kovalentnega hidrata laktoneziranane statinske verige

Datum zagovora: 8. 6. 2011

Nina Markovič

Mentor: prof. dr. Marin Berovič

Proizvodnja polisaharidov, β-glukanov in biomase glive *Grifola frondosa* na trdnem gojišču

Datum zagovora: 24. 10. 2011

Damijana Mazej

Mentorica: doc. dr. Andreja Zupančič Valant

Vpliv hidriranega apna na lastnosti asfaltne zmesi

Datum zagovora: 14. 2. 2011

Tjaša Milenkovič

Mentorica: doc. dr. Andreja Žgajnar Gotvajn

Vpliv hidrofobnih ionskih tekočin na osnovi imidazola na okolje

Datum zagovora: 19. 10. 2011

Luka Oblak

Mentor: prof. dr. Janvit Golob
Somentor: dr. Didier Lootens
Test brizganja betona na laboratorijskem merilu
Datum zagovora: 25. 8. 2011

Martin Ocepek

Mentor: prof. dr. Janvit Golob
Povečevalna metoda pri sintezi vodnih poliuretanskih disperzij
Datum zagovora: 25. 8. 2011

Tina Orel

Mentorica: doc. dr. Andreja Žgajnar Gotvajn
Vpliv ionskih tekočin na anaerobne procese
Datum zagovora: 25. 5. 2011

Marjeta Ovsec

Mentor: prof. dr. Aleksander Pavko
Kinetika razbarvanja azo barvil z ligninolitničnimi encimi glive *Dichomitus squalens*
Datum zagovora: 29. 6. 2011

Andraž Pavlišič

Mentor: prof. dr. Marjan Marinšek
Mehanizem sintranja oksidnih prahov za visokotemperaturne gorivne celice
Datum zagovora: 30. 8. 2011

Aleksandra Petranović

Mentorica: doc. dr. Klementina Zupan
Somentor: prof. dr. Darko Makovec
Sinteza magnetnih nanodelcev CoFe_2O_4 in njihovih koloidnih suspenzij
Datum zagovora: 28. 2. 2011

Metka Primožič

Mentorica: doc. dr. Andreja Zupančič Valant
Vpliv pomanjkanja kisika na reološke lastnosti krvi
Datum zagovora: 10. 11. 2011

Nejc Rozman

Mentor: prof. dr. Marjan Marinšek
Vpliv izbranih parametrov hidrotermalne sinteze na lastnosti fotokatalizatorja TiO_2
Datum zagovora: 12. 9. 2011

Aleš Ručigaj

Mentor: prof. dr. Janvit Golob
Somentor: doc. dr. Blaž Likozar
Prenos procesa gojenja z lipidi bogatih mikroalg *Clorella vulgaris* z laboratorijskega na pilotni nivo
Datum zagovora: 9. 9. 2011

Nina Šepetavc

Mentor: prof. dr. Marin Berovič

Somentor: prof. dr. Željko Knez

Izolacija ergosterola iz biomase glive *Grifola frondosa*

Datum zagovora: 4. 11. 2011

Maruša Vek

Mentorica: prof. dr. Urška Šebenik

Kinetika reduktivnega alkiliranja proteina z metoksi polietilen glikol propionaldehidom

Datum zagovora: 20. 5. 2011

Ali Wala

Mentor: prof. dr. Janvit Golob

Sledenje razprševanju in sušenju v vrtničnoslojnim sušilniku s pomočjo bližnje infrardeče spektroskopije

Datum zagovora: 9. 9. 2011

Tina Žakelj

Mentor: prof. dr. Jadran Maček

Elektrodni materiali za alkalno gorivno celico

Datum zagovora: 22. 9. 2011

VISOKOŠOLSKA ŠTUDIJSKA PROGRAMA

KEMIJSKA TEHNOLOGIJA

Boško Banjac

Mentor: prof. dr. Aleksander Pavko

Validacija maksimalnega časa shranjevanja injekcijskih raztopin pred sterilno filtracijo

Datum zagovora: 28. 11. 2011

Nina Cigut

Mentorica: prof. dr. Helena Prosen

Validacija spektrofotometrične metode za določanje sulfametoksazola in trimetoprima v oralni suspenziji Primotren

Datum zagovora: 11. 10. 2011

Matej Čop

Mentor: prof. dr. Aleksander Pavko

Povečevalni kriteriji laboratorijskega mešalnega bioreaktorja

Datum zagovora: 7. 4. 2011

Nick Dragoš

Mentor: doc. dr. Franc Požgan

Priprava tridentatnih ligandov z 1, 2, 3-triazolsko enoto

Datum zagovora: 30. 5. 2011

Tina Drčar

Mentor: prof. dr. Janez Košmrlj

Optimizacija priprave izbranih (heteroaril)metil azidov

Datum zagovora: 30. 9. 2011

Mateja Dremelj

Mentorica: prof. dr. Helena Prosen

Vpliv različnih mikrokristalnih celuloz na stabilnost zdravilnih učinkovin

Datum zagovora: 21. 4. 2011

Saša Felbar

Mentorica: prof. dr. Urška Šebenik

Inkapsulacija z melaminsko-formaldehidno smolo s kontroliranim padanjem pH vrednosti

Datum zagovora: 25. 3. 2011

David Jure Jovan

Mentor: prof. dr. Jadran Maček

Somentorica: prof. dr. Marija Kosec

Oksidacija ogljika v »pokopanih plasteh« keramike z nizko temperaturo sintranja

Datum zagovora: 15. 3. 2011

Jelena Jurošević

Mentorica: doc. dr. Barbara Modec

Oksidativna cepitev α -hidroksikarboksilnih kislin. Reakcija molibdena(V) s fenilmlečno kislino

Datum zagovora: 28. 9. 2011

Majda Kašič

Mentorica: doc. dr. Ana Lakota

Vpliv viskoelastičnih lastnosti srednje koncentriranih ksantanovih raztopin na delovanje kolone z mehurčki

Datum zagovora: 31. 5. 2011

Darja Kastelic

Mentor: prof. dr. Marjan Veber

Validacija določevanja hlapnih organskih ogljikovodikov v trdnih vzorcih

Datum zagovora: 10. 3. 2011

Tina Kenda

Mentor: prof. dr. Matjaž Krajnc

Določitev vplivnih parametrov za kontrolo velikosti delcev in polimorfizma pri kristalizaciji farmacevtske učinkovine

Datum zagovora: 8. 6. 2011

Gregor Kokalović

Mentor: prof. dr. Matevž Pompe

Validacija analiznega postopka za procesno kontrolo sinteze diol laktona

Datum zagovora: 9. 8. 2011

Natalija Kovačič

Mentorica: doc. dr. Ana Lakota

Merjenje vsebnosti vlage z alternativno metodo bližnje infrardeče spektroskopije v procesu sušenja granulata

Datum zagovora: 12. 9. 2011

Katja Krenker

Mentorica: prof. dr. Urška Šebenik

Inkapsulacija butil stearata z dodajanjem melaminsko-formaldehidne smole

Datum zagovora: 25. 3. 2011

Grega Kmet

Mentor: prof. dr. Viktor Grilc

Razvoj integralnega sistema ravnanja z odpadki v kemijski tovarni

Datum zagovora: 8. 3. 2011

Darja Lamovšek

Mentorica: doc. dr. Andreja Žgajnar Gotvajn

Določevanje akutne strupenosti kemikalij z Atremia salina

Datum zagovora: 15. 7. 2011

Miroslava Legiša

Mentorica: doc. dr. Andreja Žgajnar Gotvajn

Določanje strupenosti farmacevtskih učinkovin na aktivno blato

Datum zagovora: 8. 3. 2011

Lucija Lončar

Mentor: prof. dr. Jadran Maček

Kalcijev karbonat kot pigmentni nosilec titanovega dioksida v disperznih barvah

Datum zagovora: 21. 12. 2011

Sanja Majerle

Mentorica: prof. dr. Metka Renko

Določitev koncentracije vzorca za validacijo gel-clot in kinetično turbidimetrične metode bakterijsko endotoksinskega testa

Datum zagovora: 9. 11. 2011

Teja Melinc

Mentorica: prof. dr. Urška Šebenik

Pripajanje anhidrida maleinske kisline na etilen-propilen-dienski terpolimer

Datum zagovora: 26. 9. 2011

Petra Močnik

Mentor: prof. dr. Jadran Maček

Izboljšanje lepljenja na nikelj z njegovo površinsko obdelavo

Datum zagovora: 3. 10. 2011

Vesna Milek

Mentor: prof. dr. Marjan Marinšek

Perovskitni mikrovalovni dielektriki v sistemu $Ba_5Nb_4O_{15}$ - $BaTiO_3$

Datum zagovora: 3. 10. 2011

Peter Povhe

Mentor: prof. dr. Igor Plazl

Uporaba oktadekana v tankoplastnem visokoizolativnem plinskem panelu

Datum zagovora: 21. 12. 2011

Jure Požar

Mentor: prof. dr. Marjan Marinšek
Sinteza cink oksidnih delcev po poliolni metodi iz bazičnega cinkovega karbonata katalizirana s p-toluen sulfonsko kislino
Datum zagovora: 30. 8. 2011

Darja Plesnik

Mentorica: prof. dr. Nataša Gros
Optimizacija priprave vzorca s statističnim načrtovanjem poskusov
Datum zagovora: 25. 1. 2011

Silvija Renko

Mentorica: doc. dr. Romana Cerc Korošec
Termična analiza kot orodje za določevanje stopnje toplotne obdelave bukovine
Datum zagovora: 20. 12. 2011

Lea Sajovic

Mentorica: prof. dr. Nataša Gros
Določanje vsebnosti metilnih estrov maščobnih kislin v srednjih destilatih z IR spektrometrijo
Datum zagovora: 9. 6. 2011

Igor Savić

Mentorica: prof. dr. Helena Prosen
Validacija HPLC metode za medfazno spremljavo sinteze
5-[2-[4-(1,2-benzoizotiazol-3-il)-1-piperazinil]etil]-6-kloro-1,3-dihidro-2H-indol-2-on hidrogensulfat dihidrata
Datum zagovora: 12. 9. 2011

Anton Stenšak

Mentor: doc. dr. Drago Kočar
Fluorescentne lastnosti nekaterih 4,6-disubstituiranih 2,2-difluoro-1,3,2-dioksaborininov
Datum zagovora: 25. 10. 2011

Izidor Šolar

Mentor: prof. dr. Aleksander Pavko
Uporaba ultrafiltracijske tehnike za odstranjevanje emulgiranih mineralnih olj iz odpadnih voda v kovinski industriji.
Datum zagovora: 23. 8. 2011

Milena Težak

Mentor: prof. dr. Aleksander Pavko
Priprava drobljenca za proizvodnjo kerrock plošč
Datum zagovora: 4. 11. 2011

Jernej Trojar

Mentorica: viš. pred. mag. Barbara Novosel
Oksidacija ogljikovih nanosov na anodnih materialih SOFC gorivnih celic z vodno paro
Datum zagovora: 1. 6. 2011

Špela Voh

Mentor: doc. dr. Franc Požgan

Sinteza dendritskih jeder na osnovi uretanov in alofanatov

Datum zagovora: 28. 9. 2011

Viktor Zalokar

Mentorica: viš. pred. mag. Barbara Novosel

Metaniranje nanosov ogljika na SOFC anodnem materialu

Datum zagovora: 12. 7. 2011

Nina Zatler

Mentorica: viš. pred. mag. Barbara Novosel

Skladiščenje nevarnih snovi

Datum zagovora: 5. 5. 2011

Ingrid Žvab

Mentor: prof. dr. Viktor Grile

Reševanje problemov odpadnega olja v podjetju Danfoss Compressors d.o.o.

Datum zagovora: 10. 2. 2011

David Žučko

Mentor: prof. dr. Boris Pihlar

Razvoj in validacija metode za določanje sladkorjev in njihovih derivatov v atmosferskih delcih z ionsko kromatografijo

Datum zagovora: 4. 11. 2011

VARSTVO PRI DELU IN POŽARNO VARSTVO

Bojana Bačar

Mentor: doc. dr. Mitja Kožuh

Ureditev kleparske delavnice z vidika varnosti in zdravja pri delu

Datum zagovora: 16. 9. 2011

Jernej Balantič

Mentor: pred. dr. Aleš Jug

Vrste in načini gašenja na papirnem stroju

Datum zagovora: 3. 6. 2011

Anton Bauer

Mentor: doc. dr. Grega Bizjak

Varnostna analiza električnih strojev in naprav v kovinskopredelovalnem podjetju

Datum zagovora: 21. 4. 2011

Alen Benedik

Mentorica: viš. pred. mag. Barbara Novosel

Varna uporaba nevarnih kemikalij v družbi Acroni

Datum zagovora: 21. 4. 2011

Kristina Bizilj

Mentor: doc. dr. Mitja Kožuh

Implementacija Seveso direktive v kemičnih obratih

Datum zagovora: 22. 9. 2011

Vesna Bobek

Mentor: doc. dr. Mitja Kožuh
Onesnaževanje okolja in ozaveščenost ljudi
Datum zagovora: 1. 4. 2011

Klavdija Božič

Mentorica: viš. pred. mag. Barbara Novosel
Življenski krog kemikalij in varno delo
Datum zagovora: 28. 1. 2011

Aleš Brankovič

Mentor: doc. dr. Mitja Kožuh
Vibracije
Datum zagovora: 7. 3. 2011

Luka Černič

Mentor: pred. dr. Aleš Jug
Požarna varnost v vrtcih
Datum zagovora: 7. 3. 2011

Monika Črne

Mentor: pred. dr. Aleš Jug
Somentor: doc. dr. Boris Jerman
Varnost pri delu in požarna varnost za področje elektromonterskih del
Datum zagovora: 16. 9. 2011

Iris Deankovič

Mentor: pred. dr. Aleš Jug
Enote reševalnih psov – varnost in taktika reševalnih akcij
Datum zagovora: 15. 9. 2011

Janez Dejak

Mentor: pred. dr. Aleš Jug
Ekspozija pri prečrpavanju metanola iz avtocisterne v podjetju Melamin
Datum zagovora: 15. 7. 2011

Špela Dešman

Mentorica: viš. pred. mag. Barbara Novosel
Varno delo s citostatiki
Datum Zagovora: 22. 12. 2011

Anja Deželak

Mentor: doc. dr. Mitja Kožuh
Možnosti za uporabo fotovoltaike v Sloveniji
Datum zagovora: 16. 9. 2011

Sanela Djukić

Mentor: doc. dr. Mitja Kožuh
Delovanje Centralne čistilne naprave Jesenice in izkoriščanje nastalega bioplina za proizvodnjo električne energije
Datum zagovora: 22. 12. 2011

Anton Dolinšek

Mentor: pred. dr. Aleš Jug

Vpliv požarno odpornostnih elementov na požarno odpornost lesa

Datum zagovora: 28. 1. 2011

Martin Domej

Mentor: prof. dr. Marjan Bilban

Problematika ročnega premeščanja bremen

Datum zagovora: 16. 9. 2011

Leopold Drobnič

Mentor: viš. pred. dr. Jože Šrekl

Primer revizije ocene tveganja z vključenimi predpisanimi evidencami

Datum zagovora: 1. 4. 2011

Matej Gazvoda

Mentor: pred. dr. Aleš Jug

Pravne in tehnične možnosti za prenos signalov iz požarnih central na gasilsko enoto

Datum zagovora: 30. 9. 2011

Urška Gogala

Mentor: doc. dr. Mitja Kožuh

Razvijanje regijskih centrov po Sloveniji

Datum zagovora: 14. 10. 2011

Mateja Golob

Mentor: viš. pred. dr. Jože Šrekl

Izboljšanje usposabljanja na podlagi evalvacijskega vprašalnika v podjetju

Datum zagovora: 23. 6. 2011

Sara Grabić

Mentor: doc. dr. Mitja Kožuh

Hrup v gostinskih obratih

Datum zagovora: 23. 6. 2011

Uroš Grdadolnik

Mentor: pred. dr. Aleš Jug

Evakuacija iz avtobusa v različnih situacijah

Datum zagovora: 22. 9. 2011

Matic Hribar

Mentor: doc. dr. Boris Jerman

Analiza prevrnitve dvizne ploščadi in bagra

Datum zagovora: 15. 9. 2011

Aleš Hvala

Mentor: prof. dr. Andrej Polajnar

Somentorica: prof. dr. Simona Jevšnik

Ergonomska ustreznost delovnih mest v kuhinji

Datum zagovora: 22. 12. 2011

Ana Ivanuša

Mentor: doc. dr. Mitja Kožuh
Zmanjševanje hrupa v prostoru za mletje plastike
Datum zagovora: 3. 6. 2011

Marjeta Jaušovec

Mentor: prof. dr. Andrej Polajnar
Ergonomsko oblikovanje delovnega mesta
Datum zagovora: 15. 9. 2011

Andrej Jurkovič

Mentor: pred. dr. Aleš Jug
Sistem varstva pred naravnimi in drugimi nesrečami na območju občine Tolmin
s predlogi izboljšav
Datum zagovora: 15. 7. 2011

Petra Kerk

Mentor: pred. dr. Aleš Jug
Vpliv spremembe lokacije gasilskega doma na požarno varnost občine Vojnik
Datum zagovora: 5. 5. 2011

Simona Kermc

Mentor: doc. dr. Boris Jerman
Analiza varnosti širokotračnega brusilnega stroja
Datum zagovora: 14. 10. 2011

Rok Klemenčič

Mentor: doc. dr. Mitja Kožuh
Okoljski vidiki nesreč naftnih ploščadi in tankerjev
Datum zagovora: 14. 2. 2011

Rok Knafelj

Mentor: pred. dr. Aleš Jug
Stroški načrtovanja požarne varnosti v garažni hiši
Datum zagovora: 15. 7. 2011

Martin Kodelja

Mentor: pred. dr. Aleš Jug
Požarna varnost sistema za skladiščenje, pripravo in doziranje celih gum v
rotirajočo peč v cementarni Salonit Anhovo
Datum zagovora: 22. 9. 2011

Tanja Kokelj

Mentor: doc. dr. Mitja Kožuh
Individualne male komunalne čistilne naprave
Datum zagovora: 3. 6. 2011

Miro Komat

Mentor: doc. dr. Alojz Muhič
Ocena sprememb tehničnih smernic za projektiranje požarne varnosti
Datum zagovora: 15. 7. 2011

Nina Kos

Mentor: prof. dr. Andrej Polajnar

Somentorica: prof. dr. Simona Jevšnik

Ergonomija geometrijskih nastavitev kolesa pri občasnih kolesarjih

Datum zagovora: 22. 12. 2011

Andrej Lap

Mentor: doc. dr. Mitja Kožuh

Vpliv odpadnih svinčenih akumulatorjev na okolje in postopek reciklaže

Datum zagovora: 22. 12. 2011

Sandra Majer

Mentor: pred. dr. Aleš Jug

Evakuacija oseb na prostem

Datum zagovora: 22. 12. 2011

Marko Majerle

Mentor: doc. dr. Mitja Kožuh

Vpliv vibracij na delovnem mestu

Datum zagovora: 23. 6. 2011

Nataša Marinko

Mentor: doc. dr. Mitja Kožuh

Priprava delovnih osnov za študijo ogroženosti

Datum zagovora: 15. 7. 2011

Zoran Marković

Mentor: prof. dr. Andro Alujevič

Varnost robotske celice za paletizacijo vreč

Datum zagovora: 16. 9. 2011

Tamara Matić

Mentor: doc. dr. Mitja Kožuh

Onesnaževanje okolja v Sloveniji

Datum zagovora: 14. 10. 2011

Mateja Mazi

Mentor: doc. dr. Mitja Kožuh

Obnovljivi viri energije v Sloveniji

Datum zagovora: 15. 9. 2011

Ervin Miklavec

Mentor: doc. dr. Mitja Kožuh

Vpliv vzdrževanja tovornih vozil na varnost v cestnih prodorih

Datum zagovora: 5. 5. 2011

Marjeta Novinšek

Mentor: pred. dr. Aleš Jug

Somentor: prof. dr. Marjan Bilban

Zagotavljanje zdravstvenih sposobnosti in zavarovanja v primeru nezgode pri delu prostovoljnih operativnih gasilcev

Datum zagovora: 21. 4. 2011

Tine Panjtar

Mentor: prof. dr. Andrej Polajnar

Ergonomska ureditev delovnih mest na liniji montaže statorja v okrov

Datum zagovora: 28. 1. 2011

Bojana Pavlič

Mentor: doc. dr. Mitja Kožuh

Večje poplave v Zasavju v obdobju 1990–2010

Datum zagovora: 14. 10. 2011

Jure Penko

Mentor: doc. dr. Grega Strban

Pravni vidiki varnega in zdravega dela špotnikov

Datum zagovora: 15. 9. 2011

Ambrož Perovšek

Mentor: doc. dr. Mitja Kožuh

Možnost uporabe obnovljivih virov energije v Sloveniji – sončna in vetrna energija

Datum zagovora: 7. 3. 2011

Jasmina Pitamic Vojska

Mentorica: viš. pred. mag. Barbara Novosel

Ukrepi za zagotavljanje varnega in zdravega dela z nevarnimi kemikalijami v proizvodnji poliuretanske pene

Datum zagovora: 28. 1. 2011

Andrejka Podbregar

Mentor: viš. pred. dr. Jože Šrekl

Učinkovitost programskega vodenja varnosti in zdravja pri delu

Datum zagovora: 22. 12. 2011

Valentina Polanc

Mentor: viš. pred. dr. Jožef Horvat

Somentor: prof. dr. Marjan Bilban

Uporaba rokavic v zdravstvu

Datum zagovora: 3. 6. 2011

Damjan Puhar

Mentor: pred. dr. Aleš Jug

Analiza hidrantnega omrežja za namen gasilskega posredovanja

Datum zagovora: 16. 9. 2011

Mateja Rataj

Mentor: doc. dr. Mitja Kožuh

Ravnanje s komunalnimi odpadki in pridobivanje bioplina

Datum zagovora: 30. 9. 2011

Sašo Ratnik

Mentor: prof. dr. Andrej Polajnar

Ergonomska ureditev dispečerske pisarne

Datum zagovora: 14. 2. 2011

Roki Ribič

Mentor: doc. dr. Mitja Kožuh

Vrste in uporaba embalaže s poudarkom na reciklaži papirja

Datum zagovora: 15. 9. 2011

Klemen Rotar

Mentor: doc. dr. Mitja Kožuh

Meritve in predlog sanacije hrupa v obratu za predelavo pigmentnih premazov

Datum zagovora: 7. 3. 2011

Žiga Rozman

Mentor: pred. dr. Aleš Jug

Somentor: doc. dr. Mitja Kožuh

Požarna varnost nadzorovanega območja reaktorskega centra v Podgorici

Datum zagovora: 22. 9. 2011

Božo Rušnov

Mentor: pred. dr. Aleš Jug

Zakonske in realne potrebe za opremljanje gasilskih enot v Gasilski zvezi Metlika

Datum zagovora: 5. 5. 2011

Pia Saračević

Mentor: viš. pred. dr. Jože Šrekl

Usposabljanje delavcev za varno delo v podjetjih za distribucijo električne energije

Datum zagovora: 5. 5. 2011

Miha Skočir

Mentor: viš. pred. dr. Jože Šrekl

Analiza in posodobitev VF metode za ocenjevanje tveganj za delavce na delovnih mestih in posameznih delovnih procesov

Datum zagovora: 22. 9. 2011

Denis Slavec

Mentor: pred. dr. Aleš Jug

Posredovanje gasilcev pri požarih na morju

Datum zagovora: 3. 6. 2011

Tina Smrke

Mentor: doc. dr. Boris Jerman

Varno delo s strojem za brizganje plastike

Datum zagovora: 21. 4. 2011

Laura Solatnik

Mentor: pred. dr. Aleš Jug

Somentor: viš. pred. dr. Jože Šrekl

Požarna varnost na kmetiji

Datum zagovora: 14. 2. 2011

Nika Spital

Mentor: pred. dr. Aleš Jug

Požarna varnost v jamah Premogovnika Velenje

Datum zagovora: 22. 12. 2011

Agata Stane

Mentorica: viš. pred. mag. Barbara Novosel
Ravnanje z nevarnimi kemikalijami v Termoelektrarni Brestanica
Datum zagovora: 15. 7. 2011

Julijan Stopar

Mentor: viš. pred. dr. Jožef Horvat
Delo na višini – varnostne zahteve
Datum zagovora: 15. 9. 2011

Miha Toporš

Mentor: pred. dr. Aleš Jug
Problematike večje nesreče na letališču Brnik
Datum zagovora: 23. 6. 2011

Matevž Urbas

Mentor: doc. dr. Mitja Kožuh
Varno delo z azbestno kritino
Datum zagovora: 1. 4. 2011

Marinka Valjavec

Mentor: doc. dr. Mitja Kožuh
Analiza dejavnosti v zvezi z deponijo Tenetiše
Datum zagovora: 14. 2. 2011

Tadej Vičič

Mentor: viš. pred. dr. Jožef Horvat
Uporaba ocene tveganja za izboljšanje ekoloških razmer in izbor osebne varovalne opreme
Datum zagovora: 23. 6. 2011

Simona Zadnik

Mentor: doc. dr. Mitja Kožuh
Varstvo pri delu
Datum zagovora: 1. 4. 2011

Matej Zamljen

Mentor: pred. dr. Aleš Jug
Ocena požarne varnosti s predlogi za izboljšanje
Datum zagovora: 21. 4. 2011

Vesna Zdešar

Mentor: doc. dr. Boris Jerman
Analiza varnosti namenske stiskalnice
Datum zagovora: 23. 6. 2011

MAGISTERIJI

KEMIJA

Mateja Gorjup

Mentorica: prof. dr. Lucija Zupančič-Kralj

Razvoj kromatografske metode za določanje nečistot enalaprilata

Datum zagovora: 7. 1. 2011

Irma Rajgelj

Mentorica: doc. dr. Barbara Modec

Razvoj sistema akrilnega premaza na osnovi organskih topil in odstranjevalca na vodni osnovi za začasno označevanje cestišč

Datum zagovora: 4. 7. 2011

Gordan Jančan

Mentorica: prof. dr. Lucija Zupančič-Kralj

Razvoj in validacija analiznih metod za spremljanje kvalitete donepezil hidroklorida

Datum zagovora: 25. 11. 2011

Petra Potočnik Izgoršek

Mentorica: doc. dr. Marta Klanjšek Gunde

Somentor: prof. dr. Matija Strlič

Optične lastnosti premazov s kompleksnimi neorganskimi pigmenti

Datum zagovora: 6. 12. 2011

KEMIJSKO INŽENIRSTVO

Jožef Gyurkač

Mentor: prof. dr. Matjaž Krajnc

Možnosti prestrukturiranja petrokemijske proizvodnje na osnovi formaldehida

Datum zagovora: 10. 1. 2011

KEMIJSKA TEHNOLOGIJA

Željko Kovačević

Mentor: prof. dr. Matjaž Krajnc

Optimizacija gumene zmesi za zračne vzmeti

Datum zagovora: 10. 1. 2011

Romana Turk

Mentor: prof. dr. Viktor Grile

Integrirano ravnanje s proizvodnimi odpadki in blati čistilnih naprav v izbrani tekstilni tovarni

Datum zagovora: 17. 5. 2011

Tina Razboršek

Mentor: prof. dr. Radovan Stanislav Pejovnik

Karakterizacija akrilatnega premaza na vodni osnovi

Datum zagovora: 5. 12. 2011

UNIVERZITETNI PODIPLOMSKI ŠTUDIJ VARSTVA OKOLJA

Rajko Bezjak

Mentor: prof. dr. Viktor Grilc

Razvoj termične reciklaže odpadne mineralne volne

Datum zagovora: 11. 7. 2011

Žiga Schäffer

Mentor: prof. dr. Viktor Grilc

Somentor: prof. dr. Stojan Petelin

Regeneracija goriva iz usedlin v rezervoarjih

Datum zagovora: 11. 7. 2011

Alan Ninčević

Mentor: prof. dr. Viktor Grilc

Razvoj sistema ravnanja z nevarnimi odpadki v veliki bolnišnici

Datum zagovora: 7. 12. 2011

DOKTORATI

KEMIJA

Črt Malavašič

Mentor: prof. dr. Jurij Svete

Kiralni *N*-alkilirani diketopiperazini: sinteza, interakcije in uporaba

Datum zagovora: 18. 3. 2011

Nejc Carl

Mentorica: znan. svet. dr. Dušanka Janežič

Somentor: prof. dr. Jurij Lah

Uporaba metod molekularnega modeliranja za študij interakcij bioloških makromolekul

Datum zagovora: 18. 4. 2011

Igor Drobnak

Mentor: prof. dr. Jurij Lah

Somentor: prof. dr. Andrej Jamnik

Termodinamske raziskave mehanizmov regulacije bakterijskih modulov toksin-antitoksin

Datum zagovora: 20. 4. 2011

Borut Zupančič

Mentor: prof. dr. Boris Šket

Somentorica: znan. sod. dr. Barbara Mohar

Novi *P*-stereogeni difosfinski ligandi za asimetrično hidrogeniranje

Datum zagovora: 3. 5. 2011

Katarina Stare

Mentor: prof. dr. Anton Meden

Strukturna karakterizacija keramičnih materialov s praškovno difrakcijo in računskimi metodami

Datum zagovora: 19. 5. 2011

Tina Virant Celestina

Mentor: prof. dr. Boris Šket

Somentorica: viš. znan. sod. dr. Nevenka Kožuh Eržen

Razgradnja avermektinskih zdravil v različnih vrstah tal

Datum zagovora: 30. 5. 2011

Lidija Urbas

Mentor: doc. dr. Aleš Štrancar

Somentor: prof. dr. Boris Pihlar

Razvoj monolitnih kolon in metod za odstranjevanje proteinov iz bioloških vzorcev in določevanje virusnih delcev

Datum zagovora: 8. 7. 2011

Damjan Makuc

Mentor: prof. dr. Janez Plavec

NMR študije konformacij in interakcij funkcionaliziranih indolov kot anionskih receptorjev

Datum zagovora: 25. 7. 2011

Saša Cecowski

Mentor: prof. dr. Venčeslav Kaučič

Funkcionalizacija zeolitnih in mezoporoznih materialov z manganom

Datum zagovora: 7. 10. 2011

Blaž Brulc

Mentorica: prof. dr. Majda Žigon

Sinteza blokkopolimerov različnih arhitektur na osnovi asparaginske kisline in laktida

Datum zagovora: 10. 10. 2011

Darja Kotnik

Mentor: prof. dr. Boris Pihlar

Somentor: dr. Milko Novič

Optimizacija pulzne amperometrične detekcije in določanje izbranih ogljikovih hidratov z ionsko kromatografijo

Datum zagovora: 25. 11. 2011

MATERIALI

Jana Prah

Mentor: prof. dr. Jadran Maček

Vpliv pogojev obarjanja na morfologijo kalcijevega karbonata

Datum zagovora: 9. 6. 2011

Boštjan Erjavec

Mentor: prof. dr. Radovan Stanislav Pejovnik

Somentor: prof. dr. Miran Gaberšček

Nanostrukturirani kompoziti za litijeve ionske akumulatorje visokih moči

Datum zagovora: 22. 4. 2011

Chutchamon Sirisopanaporn

Mentor: znan. sod. dr. Robert Dominko

Mentor: prof. dr. Christian Masquelier

Somentor: prof. dr. Radovan Stanislav Pejovnik

Strukturne in elektrokemijske lastnosti Li_2MSiO_4 (M=Fe, Mn, Co) katodnih materialov za litijeve akumulatorje

Datum zagovora: 27. 10. 2011

RAZISKOVALNI PROGRAMI V LETU 2011

RESEARCH PROGRAMMES IN 2011

NOSILEC / PRINCIPAL RESEARCHER	NASLOV / TITLE
Prof. dr. Peter Bukovec	Bioanorganska in bioorganska kemija <i>Bioinorganic and bioorganic chemistry</i>
Prof. dr. Boris Pihlar	Raziskave in razvoj analiznih metod in postopkov <i>Research and development of analytical methods and procedures</i>
Prof. dr. Ivan Leban	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 Kočevar	Organska kemija: sinteza, struktura in aplikacija <i>Organic chemistry: synthesis, structure, and application</i>
Prof. dr. Matjaž Krajnc	Kemijsko inženirstvo <i>Chemical engineering</i>
Prof. dr. Janvit Golob	Separacijski procesi toplogrednih plinov za trajnostni razvoj <i>Separation processes of greenhouse gases for 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>
Izr. prof. dr. Albin Pintar**	Integralni pristop k preprečevanju onesnaževanja voda <i>Integrated approach to water pollution prevention</i>

* Institut »Jožef Stefan« / *Jožef Stefan Institute*

** Kemijski inštitut / *National Institute of Chemistry*

BIOANORGANSKA IN BIOORGANSKA KEMIJA **BIOINORGANIC AND BIOORGANIC CHEMISTRY**

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. Nataša Bukovec

prof. dr. Peter Bukovec

dr. Sabina Grabner

prof. dr. Boris Šket

doc. dr. Barbara Modec

dr. Elizabeta Tratar Pirc

doc. dr. Romana Cerc Korošec

doc. dr. Marija Zupančič

doc. dr. Marjan Jereb

dr. Irena Kozjek Škofic

dr. Berta Košmrlj

Mladi raziskovalci / Young Researchers

Jerneja Šauta Ogorevc

Ksenija Cer Kerčmar

Petra Galer

Tehniki / Technicians

Damjan Erčulj

Urška Levec

Sodelujoče institucije / Participating Institutions

Institut Jožef Stefan

POROČILO O REALIZACIJI PROGRAMA

CILJI PROGRAMA

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

BIOANORGANSKI SKLOP

Razvili smo novo sintezno pot za pripravo koordinacijskih spojin volframa v oksidacijskem stanju +5. Osnovana je na oksidaciji dvojedrne spojine volframa(III), $K_3W_2Cl_9$, v koncentrirani klorovodikovi ali bromovodikovi kislini s šibkim oksidantom, hidrazinijevim ali hidroksilamonijevim kloridom. Produkt te oksidacije je koordinacijski anion s sestavo $[W^VOX_4(H_2O)]^-$ ($X =$ kloridni ali bromidni ion). Sestava izoliranih spojin, $\{(C_4H_9)_4N\}[WOCl_4(H_2O)]$, $(Py_2CH_2)_2[WOCl_4(H_2O)]_3Cl$, $(PicH)_2[WOCl_4(H_2O)]Cl$, $(Pic_2CH_2)_2[WOCl_4(H_2O)]_2[SnCl_6]$, $\{(C_4H_9)_4N\}[WOBBr_4(H_2O)]$ in $(Py_2CH_2)_2[WOBBr_4(H_2O)]_3Br$ (kjer $PicH^+$ označuje 4-metilpiridinijev kation, $Py_2CH_2^{2+}$ pa N,N' -metilendipiridinijev kation, in $Pic_2CH_2^{2+}$ N,N' -metilendipikolinijev kation), kot tudi prisotnost omenjenega koordinacijskega aniona v vseh spojinah je bila potrjena z rentgensko strukturno analizo monokristalov. Vse spojine so obstojne, izpleni sintez pa dokaj dobri. Pričakujemo, da bodo pripravljene spojine služile kot primerne izhodne spojine v sintezi do sedaj izjemno redkih večjedrnih spojin volframa(V) z $\{W_2O_2(\mu_2-O)\}^{4+}$ ali $\{W_2O_2(\mu_2-O)\}^{2+}$ strukturnimi enotami. Rezultati našega dela so objavljeni v: BRENČIČ, Jurij, MODEC, Barbara. The mononuclear tungsten(V) complexes: The preparation and the X-ray structures of a series of $[WOX_4(H_2O)]^-$ ($X = Cl, Br$) salts. *Inorg. Chem. Commun.*, 2011, vol. 14, str. 1369–1372. [COBISS.SI-ID 35650309].

V letu 2011 smo na področju raziskav o delovanju naravnega antioksidanta ksanturinske kisline (Xan) in njegovih kovinskih kompleksov predstavili rezultate nekaterih raziskav iz leta 2010. Na konferenci smo predstavili rezultate kadmijevega ksantureata: CER KERČMAR, Ksenija, TRATAR PIRC, Elizabeta, MODEC, Barbara, BUKOVEC, Peter. Rentgenska strukturna analiza dvojedrnega kadmijevega ksantureata = X-ray structural analysis of binuclear

cadmium xanthureate. V: *Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14–16 september 2011*. Maribor: FKKT, 2011, str. 1–9. [COBISS.SI-ID 35401733]. Rezultati raziskav o dveh bakrovih ksantureatih so bili sprejeti v revijo *Monatshefte für Chemie – Chemical Monthly* z naslovom Synthesis and characterization of two copper(II) compounds with xanthurenic acid: CER KERČMAR Ksenija, TRATAR PIRC Elizabeta, MODEC Barbara, BUKOVEC Peter, *Monatshefte für Chemie – Chemical Monthly*, 2011, 10.1007/s00706-011-0701-5. Vložili pa smo tudi patentno prijavo o polimorfizmu ksanturinske kisline z naslovom: *Kristalne oblike ksanturinske kisline in postopki za njihovo pripravo*. Na novo smo sintetizirali in okarakterizirali nikljev ksantureat $[\text{Ni}(\text{Xan}^-)_2(\text{H}_2\text{O})_4] \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ z oktaedrično koordinacijo, kjer sta na nikljev(II) kation preko kisika vezani dve karboksilatni skupini, ostala mesta pa zasedejo štiri molekule vode. Pripravili smo tudi bakrov mešan kovinski kompleks z nikotinamidom (NA) in ksanturinsko kislino (Xan) s sestavo $[\text{Cu}(\text{Xan})(\text{NA})(\text{H}_2\text{O})] \cdot \text{H}_2\text{O}$. V tej monomerni spojini je koordinacija ligandov okoli bakrovega kationa v obliki kvadratne piramide. Na kation sta ekvatorialno vezana dianion Xan in NA, apikalno pa ena molekula vode. Vsem sintetiziranim kovinskim kompleksom smo določili antioksidativne lastnosti z metodama DPPH in ABTS.

Na področju raziskav anaerobne razgradnje z OxiTop metodo smo v sodelovanju s Katedro za kemijsko, biokemijsko in ekološko inženirstvo, FKKT, določali produkcijo bioplina pri anaerobni razgradnji alg. Sodelovanje smo razširili tudi z Oddelkom za zootehniko na Biotehniški fakulteti, rezultate pa smo predstavili tudi na konferencah. Dosedanje delo na področju anaerobne razgradnje smo predstavili na vabljenem predavanju na University of Technology in Bratislava, Faculty of Chemical and Food Technology, z naslovom »*Determination of anaerobic biodegradability*«.

Hidrofobnost kurkumina ((1,7-bis(4-hidroksi-3-metoksifenil)hepta-1,6-dien-3,5-dion) je eden izmed glavnih vzrokov za bistveno manjšo aktivnost tega polifenola v testih *in vivo* v primerjavi z obetajočimi rezultati bioloških testov kurkumina *in vitro* (antitumorsko delovanje, protivnetno delovanje). Poleg poskusov sinteze vodotopnih derivatov kurkumina smo se posvetili tudi pripravi koordinacijskih spojin kurkumina in njegovih derivatov z različnimi kovinskimi ioni npr. Co(III), Zn(II) kot eni izmed možnosti za izboljšanje transporta izhodne organske substance.

Nadaljevali smo z raziskavami vpliva toplotne obdelave na elektrokromni odziv tankih plasti, tokrat na mešan oksid $\text{WO}_3\text{-Nb}_2\text{O}_5$, pripravljen s tehniko pršenja, ki mu sledi piroliza. Objavljeno v: MUJAWAR, S. H., INAMDAR, A. I., BETTY, C. A., CERC KOROŠEC, Romana, PATIL, P. S. Electrochromism in composite $\text{WO}_3\text{-Nb}_2\text{O}_5$ thin films synthesized by spray pyrolysis technique. *J. Appl. Electrochem.*, 2011, vol. 41, no. 4, str. 397–403, doi: 10.1007/s10800-010-0249-9. [COBISS.SI-ID 34675205]. Po sol-gel postopku smo po anorganski poti pripravili fotokatalitsko učinkovite tanke plasti in prahove TiO_2 . Dodatek hidroksipropil-celuloze poveča tako debelino kot poroznost tankih plasti, kar je ugodno za fotokatalitsko učinkovitost. Rezultati so bili predstavljeni na mednarodni konferenci (CERC KOROŠEC, Romana, BUKOVEC, Peter. Thermogravimetry and differential scanning calorimetry as a tool for optimisation of thermal treatment of self-cleaning titania thin films and powders. *1st Central and Eastern European Conference on Thermal Analysis and Calorimetry, 7-10 September 2011, Craiova, Romania*. [COBISS.SI-ID 35357957]). Po hidrotermalni poti smo sintetizirali nanopalčke $\alpha\text{-MnO}_2$ ter preučevali vpliv reakcijskih parametrov na premer in dolžino dobljenih palčk ter posledično na potek reakcij termičnega razpada v inertni atmosferi v Mn_2O_3 in naprej v Mn_3O_4 (UMEK, Polona, CERC KOROŠEC, Romana, GLOTER, Alexandre, PIRNAT, Urša. The control of the diameter and length of $[\alpha\text{-MnO}]_2$ nanorods by regulation of reaction parameters and their thermogravimetric properties. *Mater. Res. Bull.*, [Print ed.], 2011, vol. 46, no. 2, str. 278-284, doi: 10.1016/j.materresbull.2010.10.012. [CO-

BISS.SI-ID 24111399]). S komplementarnimi metodami termične analize smo določevali sestavo matrik emulzijskih eksploziv. Razvili smo metodo, ki omogoča določiti vsebnost amonijevega nitrata, natrijevega nitrata, vode in celotne organske faze. (CERC KOROŠEC, Romana, BUKOVEC, Peter. Thermal methods of analysis as a tool for quantitative composition determination of "water-in-oil" emulsions. V: JANSSEN, Thomas J. (ur.). *Explosive Materials: Classification, Composition, and Properties*. Hauppauge, N.Y.: Nova Science Publishers, cop. 2011, str. 125-144.[COBISS.SI-ID 34710533]).

Nadaljevali smo z raziskovanjem ionskih hranilnikov CeO₂, pripravljenih po sol-gel postopku. V cerijev sol smo dodajali baker v različnih razmerjih. Zasedovali smo stabilnost pripravljenih solov. S ciklovoltometrijo (CV), kronokulometrijo (CPC) in merjenjem različnih optičnih lastnosti smo preverjali ustreznost lastnosti pripravljenih tankih plasti mešanih oksidov cerija in bakra. V sodelovanju z Univerzo v Mariboru smo izvedli meritve podaljšane fine strukture rentgenskih robov (EXAFS). Delo je objavljeno v reviji *Solar Energy Materials & Solar Cells* (KOZJEK-ŠKOFIC, Irena, PADEŽNIK GOMILŠEK, Jana, PIHLAR, Boris, KODRE, Alojz, BUKOVEC, Nataša. Structural and electrochemical investigations of Ce/Cu mixed oxide thin films. *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*. [Print ed.], 2011, vol. 95, no. 2, str. 779–785, doi: 10.1016/j.solmat.2010.10.023. [COBISS.SI-ID 34710021]).

V letu 2011 smo nadaljevali z raziskavami na našem primarnem raziskovalnem področju, ki zajema kemijsko stabilizacijo kovin v onesnaženih tleh. Nadaljevali smo z obširno raziskavo (ki smo jo pričeli v letu 2010) z uporabo onesnaženih tal s področja stare Cinkarne v Celju. Končne rezultate raziskave smo predstavili na mednarodni konferenci (ZUPANČIČ, Marija, BUKOVEC, Peter. Evaluation of long-term stability of metal immobilization in soil treated with phosphate amendments and lime. *11th International Conference on the Biogeochemistry of Trace Elements, Florence, Italy, July 3–7, 2011. ICOBTE 2011*. [COBISS.SI-ID 35358469]).

Naše sodelovanje na področju kovin z Acroni-jem, Jesenice (na področju žlinder) in Katedro za kemijsko, biokemijsko in ekološko inženirstvo, FKKT (na področju odpadnih voda) smo v letu 2011 še poglobili. Rezultati uspešnih sodelovanj se kažejo v skupnih objavah (LONC-NAR, Mojca, MLADENOVIC, Ana, MIRTIC, Breda, ZUPANČIČ, Marija, BUKOVEC, Peter. Vpliv kislega dežja na mineraloško sestavo jeklarske žlindre = The effect of acid rain on the mineralogical characterisation of steel slag. *Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14–16 september 2011*. [COBISS.SI-ID 35395077]; LONC-NAR, Mojca, ZUPANČIČ, Marija, BUKOVEC, Peter. pH-dependence of leaching characteristics of water and air cooled slag, *Proceedings of the Second International Slag Valorisation Symposium: The Transition to Sustainable Materials Management: 18–20 April 2011, Leuven, Belgium*, str. 26–27. [COBISS.SI-ID 35542533]; KALČIKOVÁ, Gabriela, ZAGORC-KONČAN, Jana, ZUPANČIČ, Marija, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Assessment of phytotoxicity of landfill leachates, *5th European Bioremediation Conference: July 4–7, 2011, Chania, Crete, Greece*, str. 1–5. [COBISS.SI-ID 35206661]).

V letu 2011 smo pričeli sodelovati tudi z NTF, Oddelkom za geologijo. Naše skupne raziskave so potekale na proučevanju mineralogije in vsebnosti ter mobilnosti kovin v rudniških odpadnih materialih (jalovina). Svoje prve rezultate smo predstavili v zborniku mednarodnega srečanja UNESCO-IGCP projekta »*Anthropogenic effects on the human environment in the Neogene basins in the SE Europe*« (SINUR, Alenka, BUKOVEC, Peter, ROGAN ŠMUC, Nastja, DOLENEC, Tadej, SERAFIMOVSKI, Todor, ZUPANČIČ, Marija. Mobility of metals in Sasa mine tailing dam material. *Anthropogenic effects on the human environment in the Neogene basins in the SE Europe: Proceedings*. Ljubljana, 2011, str. 9–14. [COBISS.SI-ID 942430]).

BIOORGANSKI SKLOP

Nadaljevali smo s študijem pretvorb terciarnih benzilnih alkoholov s F-TEDA-BF₄ v micelnem mediju. Sintetizirali smo večje število metil, etil, fenil in benzil-substituiranih racemnih terciarnih alkoholov za študij stereokemijskega poteka uvedbe fluorovega atoma. Nastanejo zmesi fluorometil in fluoroetil substituiranih produktov, kot tudi 2-fluoro substituirani terciarni alkoholi. Razmerje je odvisno od strukture izhodnega alkohola. Del rezultatov je bil predstavljen na *Dnevu mladih raziskovalcev* na Institutu Jožef Stefan, februarja 2011.

Nadaljevali smo s študijem funkcionalizacije organskih spojin z obnovljivo ionsko tekočino 1-metil-3-(sulfobutil)imidazolijev triflat oz. [BMIM(SO₃H)][OTf], ki ima lastnosti Brønstedove kisline in je hkrati tudi kot topilo. Del rezultatov je bil predstavljen na mednarodni konferenci *Towards green haloorganic chemistry* na 17th *European Symposium on Organic Chemistry, ESOC 2011* na Kreti v Grčiji.

Začeli smo s trimetilsililiranjem fenolov, alkoholov in ogljikovih hidratov pod pogoji brez topila in brez in s katalizatorjem. Številne fenole in alkohole se da zaščititi brez topila in katalizatorja, ogljikovi hidrati pa potrebujejo katalizator. Reakcija je primerna tudi za delo v večjem merilu. Tudi to predstavlja pomemben prispevek na področju zelene kemije. Rezultati so v fazi priprave za objavo.

Začeli smo s funkcionalizacijo fenolov z biomimetskim parom H₂O₂/NaNO₂ v prisotnosti razredčene žveplove kisline, ki v metanolu vodi do ustreznih nitrofenolov. H₂O₂/NaNO₂ sta zelo pomemben par v okolju in bioorganski kemiji. Nitriranje poteče *para* glede na hidroksi skupino, znaten del pa nastane tudi *orto* nitriranih produktov. Sterično ovirani fenoli se pod temi pogoji oksidirajo, ne pa nitrirajo. Reakcijski sistem se razlikuje od klasičnega HNO₃/H₂SO₄ sistema, saj je selektivnost drugačna. Rezultati so v fazi priprave za objavo.

Halogeniranje na alfa-mesto spojin z aktiviranimi metilenskimi skupinami, med katere uvrščamo tudi beta-diketone, ali v aktiviranih aromatskih sistemih zlahka poteče. Težava se pojavi, kadar izhodna spojina vsebuje več reakcijskih mest, saj se v takem primeru halogen ne veže vedno samo na želeno mesto. Za naše študije smo izbrali 1-fenil-3-(3,5-dimetoksifenil)-propan-1,3-dion, ki ima 1,3-diketonski del, kot tudi aromatsko jedro, ki je z dvema metoksi skupinama močno aktivirano. V acetonitrilni raztopini se vzpostavi keto-enolno ravnotežje v katerem je manj kot 5 % diketonske oblike, kar smo ugotovili z ¹H NMR spektroskopijo. Za fluoriranje spojine smo izbrali 1-klorometil-4-fluoro-1,4-diazoniabiciklo[2,2,2]oktan bis tetrafluoroborat (F-TEDA) in 1-hidroksi-4-fluoro-1,4-diazoniabiciklo[2,2,2]oktan bis tetrafluoroborat (NFTh), medtem ko smo kloriranje, bromiranje in jodiranje izvedli z ustreznimi N-halo sukcinimidi ali N-halo saharini.

Pri fluoriranju 1-fenil-3-(3,5-dimetoksifenil)-propan-1,3-diona v acetonitrilu z F-TEDO je nastal tako alfa-fluoriran produkt, kjer je fluor vezan na mesto 2 v aktiviranem aromatskem jedru, medem ko je pri kloriranju, bromiranju in jodiranju z uporabo NXS/LiClO₄ v acetonitrilu reakcija potekla regioselektivno in je nastal izključno alfa-halo produkt. Podobne rezultate smo dobili tudi z uporabo N-halo saharina, ki je boljši vir elektrofilnega halogena. Reakcija na aktivirano aromatsko jedro ni potekla.

Sklepali smo, da če želimo uvesti halogen na aromatsko jedro, moramo deaktivirati diketonski del molekule. Ker je BF₂ močna elektron privlačna skupina, smo zato po znanih literaturnih postopkih pripravili BF₂ derivat 1-fenil-3-(3,5-dimetoksifenil)-propan-1,3-diona.

Fluoriranje BF₂ derivata 1-fenil-3-(3,5-dimetoksifenil)-propan-1,3-diona smo izvedli pri sobni temperature z 10 % prebitkom NFTh/Al₂O₃ v acetonitrilu. Na podlagi ¹H, ¹³C in ¹⁹F NMR

spektrov smo ugotovili da je fluoriranje poteklo samo na položaj 2 v elektronsko bogatem aromatskem jedru.

Kloriranje, bromiranje in iodiranje BF₂ derivata smo izvedli v acetonitrilu z 10 % prebitkom NXS in obsevanjem raztopine z ultravijolično svetlobo ($\lambda = 360$ nm). Izkazalo se je, da je sam kompleks fotokemično stabilen, kloriranje in bromiranje pa je poteklo regioselektivno samo na C2 mesto v elektronsko bogatem aromatskem mestu, medtem ko smo pri jodiranju dobili zmes izhodne spojine, 2-iodo in 2,6-diiodo derivata. Halogeniranje na alfa položaj ni poteklo.

Ker smo želeli ugotoviti kemoselektivnost halogeniranja, smo uporabili tudi NXSacc namesto NXS. Naši rezultati so bili skoraj enaki. Ko smo spremenili molsko razmerje med substratom in reagentom iz 1:1,1 na 1:2,1 v primeru kloriranja in jodiranja ter 1:2,8 pri kloriranju smo v vseh primerih dobili 2,6-dihaloderivat.

Vse halogenirane BF₂ derivate smo uspešno prekristalizirali iz zmesi aprotičnih topil kot so CH₂Cl₂, heksan itd. Pri kristalizaciji v protičnih topilih kot sta npr. metanol ali etanol pa je potekla hidroliza BF₂ skupine. Hitrost hidrolize izhodnega BF₂ derivata smo določili z uporabo ¹H NMR spektroskopije pri 338 K v NMR cevki.

Iz rezultatov smo ugotovili, da sta obratna vrednost koncentracije in čas v linearni povezavi kar kaže na to, da je hidroliza reakcija drugega reda. Rezultati so bili objavljeni v Tetrahedronu in predstavljeni na dveh mednarodnih konferencah.

GALER, Petra, KOŠMRLJ, Berta, ŠKET, Boris. Highly regioselective halogenation of 1-phenyl-3-(3,5-dimethoxyphenyl)-propane-1,3-dione. *Tetrahedron*. [Print ed.], 2011, vol. 67, no. 11, str. 2103–2109, doi: 10.1016/j.tet.2011.01.051. [COBISS.SI-ID 34845701].

GALER, Petra, KOŠMRLJ, Berta, ŠKET, Boris. Highly regioselective halogenation of 1-phenyl-3-(3,5-dimethoxy phenyl)-propane-1,3-dione. V: *11th Eurasia Conference on Chemical Sciences, 6–10 October 2010, The Dead Sea, Jordan. Abstract book : chemistrycares*. [S. l.: s. n.], 2010, str. 174. [COBISS.SI-ID 34502917].

GALER, Petra, KOLLER, Jože, KOŠMRLJ, Berta, MEDEN, Anton, ŠKET, Boris. How the halogen atoms bonded in phenyl ring of 1-phenyl-3-(3, 5-dimethoxy phenyl)-propane-1,3-dione change the conformation of molecules : experimental and theoretical investigations. V: GRAOVAC, Ante (ur.), POKRIĆ, Biserka (ur.), SMREČKI, Vilko. *Math/Chem/Comp 2010 : [program and book of abstracts]*. Zagreb: Ruđer Bošković Institute, 2010, str. [1]. [COBISS.SI-ID 34440197].

DRUGI RELEVANTNI DOSEŽKI

Nekateri člani programske skupine so vključeni v centre odličnosti:

CO NOT – Center odličnosti: Nizkoogljivične 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

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

BIOINORGANIC CHEMISTRY

A new synthetic entry into tungsten(V) chemistry was developed: oxidation of a dinuclear tungsten(III) compound, $K_3W_2Cl_9$, in conc. HX (X = Cl, Br) with a mild oxidizing agent, hydrazinium or hydroxylammonium chloride, produced $[W^VOX_4(H_2O)]^-$ species. To identify the products formed, all compounds were authenticated using X-ray crystallography. The solid state structures of $\{(C_4H_9)_4N\}[WOCl_4(H_2O)]$, $(Py_2CH_2)_2[WOCl_4(H_2O)]_3Cl$, $(PicH)_2[WOCl_4(H_2O)]Cl$, $(Pic_2CH_2)_2[WOCl_4(H_2O)]_2[SnCl_6]$, $\{(C_4H_9)_4N\}[WOBBr_4(H_2O)]$ and $(Py_2CH_2)_2[WOBBr_4(H_2O)]_3Br$ (where $PicH^+$ stands for protonated 4-methylpyridine, $Py_2CH_2^{2+}$ for *N,N'*-methylenedipyridinium cation, and $Pic_2CH_2^{2+}$ for *N,N'*-methylenedipicolinium cation) consist of the octahedrally-shaped $[WOX_4(H_2O)]^-$ complex ions. All compounds are relatively stable and were prepared in reasonable yields. Hopefully, with this set of new compounds in hand, the rare $\{W_2O_2(\mu_2-O)\}^{4+}$ and $\{W_2O_2(\mu_2-O)_2\}^{2+}$ complexes could be accessed in a more rational way. For details see: BRENČIČ, Jurij, MODEC, Barbara. The mononuclear tungsten(V) complexes: The preparation and the X-ray structures of a series of $[WOX_4(H_2O)]^-$ (X = Cl, Br) salts. *Inorg. Chem. Commun.*, 2011, vol. 14, p. 1369–1372. [COBISS.SI-ID 35650309].

In 2011, some of the research results of natural antioxidant xanthurenic acid (Xan) and its metal complexes were presented. Partial results of cadmium xanthurenate were presented at the conference: CER-KERČMAR, Ksenija, TRATAR-PIRC, Elizabeta, MODEC, Barbara, BUKOVEC, Peter. X-ray structural analysis of binuclear cadmium xanthureate. *Slovenian Chemical Days 2011, Portorož, 14 – 16 September 2011* [Maribor]: FKKT, [2011] p. 1–9. [COBISS.SI-ID 35401733]. Research results on two copper xanthurenate were accepted for publication in the journal *Monatshefte für Chemie – Chemical Monthly*, entitled Synthesis and Characterization of Two Copper (II) compounds with xanthurenic acid: CER-KERČMAR, Ksenija, TRATAR PIRC, Elizabeta, MODEC, Barbara, BUKOVEC, Peter. *Monatshefte für Chemie – Chemical Monthly*, 2011, 10.1007/s00706-011-0701-5. We have also filed a patent application on polymorphism of xanthurenic acid entitled *Crystal's forms of xanthurenic acid and procedures for their preparation*.

Nickel(II) xanthurenate $[Ni(Xan)_2(H_2O)_4] \cdot 6H_2O$ with octahedral coordination was synthesized and characterized, where nickel complex metal ion is bound to two xanthureate anions

via single carboxylate oxygen, while other coordination sites are occupied by four water molecules. The mixed ligand complex was prepared using nicotinamide (NA) and xanthurenic acid (Xan). In monomeric square-pyramidal complex, with the $[\text{Cu}(\text{Xan})(\text{NA})(\text{H}_2\text{O})]\cdot\text{H}_2\text{O}$ composition, dianion of xanthurenic acid and nicotinamide are in equatorial position, while the molecule of water is in apical position. All the synthesized compounds were tested for the antioxidant activity using DPPH and ABTS methods.

The research of anaerobic degradation using the OxiTop method has been continued. In collaboration with the Chair of Chemical, Biochemical and Environmental Engineering, FCCT the production of biogas with anaerobic digestion of algae was determined. The research of anaerobic degradation was extended also by collaboration with the Department of Animal Science, Biotechnical Faculty, Ljubljana. The results of our studies were presented at various international conferences. Research results of anaerobic digestion were presented in a lecture entitled “*Determination of anaerobic biodegradability*» at the University of Technology in Bratislava, Faculty of Chemical and Food Technology.

Hydrophobicity of curcumin ((1,7-bis (4-hydroxy-3-methoxyphenyl) hepta-1,6-diene-3,5-dione) is one of the main causes of significantly lower activity of this polyphenol in vivo tests in comparison to the promising results of biological testing of curcumin in vitro (antitumor, anti-inflammatory activity). In addition to the attempts to synthesize water-soluble derivatives of curcumin, we have also focused on the preparation of coordination compounds of curcumin and its derivatives with various metal ions such, as Co (III), Zn (II) as one of the options for improving transport of the starting organic substances.

In 2011, we continued to study the influence of thermal treatment on electrochromic response of thin films, this time on a mixed $\text{WO}_3\text{-Nb}_2\text{O}_5$ oxide, prepared by spray pyrolysis technique (MUJAWAR, S. H., INAMDAR, A. I., BETTY, C. A., CERC KOROŠEC, Romana, PATIL, P. S. Electrochromism in composite $\text{WO}_3\text{-Nb}_2\text{O}_5$ thin films synthesized by spray pyrolysis technique. *J. Appl. Electrochem.*, 2011, vol. 41, no. 4, p. 397–403. [COBISS.SI-ID 34675205]). Photocatalytically active titania thin films and powders were prepared by sol-gel inorganic route. The addition of hydroxypropyl-cellulose increased thickness of the films and their porosity as well, and therefore enhanced their photocatalytic efficiency. These results were presented at the international conference (CERC KOROŠEC, Romana, BUKOVEC, Peter. Thermogravimetry and differential scanning calorimetry as a tool for optimisation of thermal treatment of self-cleaning titania thin films and powders. *1st Central and Eastern European Conference on Thermal Analysis and Calorimetry, 7–10 September 2011, Craiova, Romania*. [COBISS.SI-ID 35357957]). $\alpha\text{-MnO}_2$ nanorods were hydrothermally synthesized and the influence of the reaction parameters on a diameter and length of the prepared nanorods was investigated. These parameters consequently influence the course of thermal decomposition reactions (to Mn_2O_3 and further to Mn_3O_4) under the inert atmosphere (UMEK, Polona, CERC KOROŠEC, Romana, GLOTER, Alexandre, PIRNAT, Urša. The control of the diameter and length of $\alpha\text{-MnO}_2$ nanorods by regulation of reaction parameters and their thermogravimetric properties. *Mater. Res. Bull.*, 2011, vol. 46, no. 2, p. 278–284. [COBISS.SI-ID 24111399]). Composition of “water-in-oil” emulsions, used for the preparation of emulsion explosives, was determined using complementary techniques of thermal analysis. A special method was developed to enable quantitative determination of ammonium nitrate, sodium nitrate, water and the content of total organic phase (CERC KOROŠEC, Romana, BUKOVEC, Peter. Thermal methods of analysis as a tool for quantitative composition determination of “water-in-oil” emulsions. V: JANSSEN, Thomas J. (Ed.). *Explosive Materials : Classification, Composition, and Properties*. Hauppauge, N.Y.: Nova Science Publishers, 2011, p. 125–144. [COBISS.SI-ID 34710533]).

We have continued studying CeO₂ ion-storage films prepared by sol-gel method. Mixed oxides of Ce and Cu were prepared in various ratios. The stability of prepared sols was evaluated. Cyclovoltametry (CV), chronocoulometry (CPC) and different optic methods were used to determine properties of thin films. In collaboration with the Faculty of Mechanical Engineering in Maribor, measurements of Extended X-ray Absorption Fine Structure (EXAFS) of the prepared thin films were performed. This work was published in *Solar Energy Materials & Solar Cells* (KOZJEK-ŠKOFIC, Irena, PADEŽNIK GOMILŠEK, Jana, PIHLAR, Boris, KODRE, Alojz, BUKOVEC, Nataša. Structural and electrochemical investigations of Ce/Cu mixed oxide thin films. *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*. [Print ed.], 2011, vol. 95, no. 2, p. 779–785). [COBISS.SI-ID 34710021]). In 2011 we continued our research work following our primary research in chemical stabilization of metals in contaminated soil. An extensive study (begun in 2010) dealing with combined stabilization agents (phosphate and lime) and heavily contaminated soil from the Celje region was completed. Final results were presented at the 11th International conference on the biogeochemistry of trace elements (ZUPANČIČ, Marija, BUKOVEC, Peter. Evaluation of long-term stability of metal immobilization in soil, treated with phosphate amendments and lime. *11th International Conference on the Biogeochemistry of Trace Elements, Florence, Italy, July 3–7, 2011. ICOBTE 2011*. [COBISS.SI-ID 35358469]).

Our collaborations with Acroni, Jesenice (on field of slags) and Chair of Chemical, Biochemical and Environmental Engineering, FCCT (in the field of waste waters) have continued. The results of these fruitful collaborations were documented in the following joint publications: (LONCENAR, Mojca, MLADENOVIC, Ana, MIRTIC, Breda, ZUPANČIČ, Marija, BUKOVEC, Peter. Vpliv kislega dežja na mineraloško sestavo jeklarske žindre = The effect of acid rain on the mineralogical characterisation of steel slag. *Slovenian Chemical Days 2011, Portorož, 14–16 September 2011*. [COBISS.SI-ID 35395077]; LONCENAR, Mojca, ZUPANČIČ, Marija, BUKOVEC, Peter. pH-dependence of leaching characteristics of water and air cooled slag, *Proceedings of the Second International Slag Valorisation Symposium : The Transition to Sustainable Materials Management : 18–20 April 2011, Leuven, Belgium*, pp. 26–27. [COBISS.SI-ID 35542533]; KALČIKOVÁ, Gabriela, ZAGORC-KONČAN, Jana, ZUPANČIČ, Marija, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Assessment of phytotoxicity of landfill leachates, *5th European Bioremediation Conference: July 4–7, 2011, Chania, Crete, Greece*, p.1–5. [COBISS.SI-ID 35206661]).

In 2011 we began to collaborate with the Faculty of Natural Sciences and Engineering, Department of Geology. Joint studies were carried out in the field of mineralogy and metal mobility in mine tailings. Our first results were presented at the 3rd *International Workshop on the UNESCO-IGCP Project »Anthropogenic effects on the human environment in the Neogene basins in the SE Europe«* (SINUR, Alenka, BUKOVEC, Peter, ROGAN ŠMUC, Nastja, DOLENEC, Tadej, SERAFIMOVSKI, Todor, ZUPANČIČ, Marija. Mobility of metals in the Sasa mine tailing dam material. *Anthropogenic effects on the human environment in the Neogene basins in SE Europe: Proceedings*. Ljubljana, 2011, p. 9–14. [COBISS.SI-ID 942430]).

BIOORGANIC CHEMISTRY

We have continued with the study of transformation of tertiary benzylic alcohols with F-TE-DA-BF₄ in a micellar medium. Several methyl-, ethyl-, phenyl- and benzyl-substituted racemic alcohols were synthesized in order to study the stereochemical course of introduction of fluorine atom. Mixtures of fluoromethyl and fluoroethyl substituted products and 2-fluoro substituted tertiary alcohols were obtained. The ratio depends on the structure of the starting

alcohol. Part of these results were presented on the *Day of Young Researchers* at the Jožef Stefan Institute, Ljubljana, in February 2011.

We have continued with the study of functionalization of organic compounds with the recyclable ionic liquid 1-methyl-3-(sulfoethyl)imidazolium triflate *i.e.* [BMIM(SO₃H)][OTf]. This ionic liquid possesses properties of Brønsted acid and it is concomitantly a reaction solvent. Part of these results were presented on the international conference *Towards Green Haloorganic Chemistry* at the 17th European Symposium on Organic Chemistry, ESOC 2011 in Crete, Greece.

We have started studying trimethylsilylation of phenols, alcohols and carbohydrates under solvent-free reaction conditions with or without a catalyst. Numerous phenols and alcohols could be protected under solvent-free reaction conditions and without a catalyst, while carbohydrates needed a catalyst. The reaction is amenable for scale-up. This is an important contribution to the field of green chemistry. The results are currently in preparation for publishing.

We have started with functionalization of phenols in methanol using a biomimetic couple of H₂O₂/NaNO₂ in the presence of diluted sulfuric acid giving the corresponding nitrophenols. H₂O₂/NaNO₂ are ubiquitous in the environment and in bioorganic chemistry. Nitration took place *para* with regard to hydroxy group, and a significant amount of *ortho* nitrated products was also obtained. Sterically hindered phenols underwent oxidation under these conditions and no nitration took place. The reaction system differs from the classical HNO₃/H₂SO₄ system because different selectivity was observed. The results are in preparation for publication.

Although it is not very difficult to introduce a halogen atom at the alpha-position in compounds with active methylenes, such as beta-diketones, or into activated aromatic rings, the problem appears when two such, or several reactive centers are present within the same molecule. In such cases it is not so easy to introduce a halogen atom at the desired position only. For this reason, 1-phenyl-3-(3,5-dimethoxyphenyl)-propane-1,3-dione was used as a model compound for our studies. It contains a 1,3-dicarbonyl moiety and a highly activated aromatic ring with two methoxy groups. In acetonitrile solution the keto-enol equilibrium is shifted towards the enol form predominately (we have determined by ¹H NMR spectroscopy that less than 5% of the diketone form is present). We used the following halogenation agents: 1-chloromethyl-4-fluoro-1,4-diazoniabicyclo[2,2,2]octane bis tetrafluoroborate (F-TEDA) and 1-hydroxy-4-fluoro-1,4-diazoniabicyclo[2,2,2]octane bis tetrafluoroborate (NFTh) for fluorination; N-halo succinimide and N-halo saccharin for chlorination, bromination and iodination.

Fluorination of compound 1-phenyl-3-(3,5-dimethoxyphenyl)-propane-1,3-dione was carried out in acetonitrile solution using F-TEDA as the most promising reagent for electrophilic fluorination leading to the mixture of alpha-fluoro product and product fluorinated at position 2 in the activated phenyl ring. On the other hand, chlorination, bromination and iodination using NXS/LiClO₄ systems in CH₃CN solution were completely regioselective, and alpha-halo compounds were formed as the sole products. Similar results were obtained using N-halo saccharin which is a better source of electrophilic halogen. No halogenation of the activated phenyl ring took place.

These results led us to believe that for aryl ring halogenation, the diketo functionality should be deactivated. Using a known literature procedure, the BF₂ derivative of the starting compound was prepared, in which BF₂ is a strong electron withdrawing group.

Fluorination of BF₂ derivative was carried out at room temperature with 10% excess of NFTh/Al₂O₃ in acetonitrile. On the basis of ¹H, ¹³C and ¹⁹F NMR spectra we concluded that fluorination occurred only at position 2 in the electron-rich aryl ring.

Chlorination, bromination and iodination were carried out with NXS (10% excess) in acetonitrile solution that was irradiated. We determined that the BF₂ derivative was stable to irradiation ($\lambda = 360$ nm) in acetonitrile, while chlorination and bromination led to regioselective halogenation at C2 of the electron-rich aromatic ring, iodination resulted in the mixture of starting compound, 2-iodo derivative and 2,6-diiodo derivative.

We also wanted to study the chemoselectivity of halogenation where NXSacc was used instead of NXS to observe that the regioselectivity of reactions was nearly the same. When we changed molar ratio of substrate to reagent from 1:1.1 to 1:2.1, or 1:2.8, in the case of chlorination, halogenation took place at positions C2 and C6 in the electron-rich phenyl ring. All halogenated BF₂ derivatives were crystallized from the mixture of aprotic solvents like CH₂Cl₂, hexane, etc. However, when crystallization was carried out with a protic solvent such as methanol or ethanol, hydrolysis of the BF₂ group took place.

The kinetics of hydrolysis of BF₂ derivative was determined by ¹H NMR spectroscopy at 338 K in a NMR tube.

From the results obtained we determined that the reciprocal of concentration per unit time intervals is in linear correlation. We can conclude that the hydrolysis is a second order reaction. The results were published in *Tetrahedron* and presented at two international conferences.

GALER, Petra, KOŠMRLJ, Berta, ŠKET, Boris. Highly regioselective halogenation of 1-phenyl-3-(3,5-dimethoxyphenyl)-propane-1,3-dione. *Tetrahedron*. [Print ed.], 2011, vol. 67, no. 11, str. 2103-2109, doi: 10.1016/j.tet.2011.01.051. [COBISS.SI-ID 34845701].

GALER, Petra, KOŠMRLJ, Berta, ŠKET, Boris. Highly regioselective halogenation of 1-phenyl-3-(3,5-dimethoxy phenyl)-propane-1,3-dione. V: *11th Eurasia Conference on Chemical Sciences, 6-10 October 2010, The Dead Sea, Jordan. Abstract book : chemistrycares*. [S. l.: s. n.], 2010, str. 174. [COBISS.SI-ID 34502917].

GALER, Petra, KOLLER, Jože, KOŠMRLJ, Berta, MEDEN, Anton, ŠKET, Boris. How the halogen atoms bonded in phenyl ring of 1-phenyl-3-(3, 5-dimethoxy phenyl)-propane-1,3-dione change the conformation of molecules : experimental and theoretical investigations. V: GRAOVAC, Ante (ur.), POKRIĆ, Biserka (ur.), SMREČKI, Vilko. *Math/Chem/Comp 2010 : [program and book of abstracts]*. Zagreb: Ruder Bošković Institute, 2010, str. [1]. [COBISS.SI-ID 34440197].

OTHER RELEVANT 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. Boris Pihlar

SODELAVCI PROGRAMSKE SKUPINE / PROGRAMME GROUP CO-WORKERS

Raziskovalci / Researchers

prof. dr. Boris Pihlar

prof. dr. Marjan Veber

izr. prof. dr. Lucija Zupančič-Kralj

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. Robert Susič

dr. Tatjana Zupančič

doc. dr. Irena Kralj Cigić

dr. Polonca Kralj

dr. Martin Šala

Mladi raziskovalci / Young Researchers

Gregor Arh

Tanja Trafela

Andrej Ščavničar

Alenka Možir

Tehniki / Technicians

Ivanka Keber

Zdenka Držaj

Jolanda Furlan

Mojca Žitko

POROČILO O REALIZACIJI PROGRAMA

CILJI IN OSREDNJE TEME PROGRAMA

V skladu s cilji programa so bile raziskave usmerjene na: **i)** temeljne raziskave analiznih metod in postopkov, **ii)** raziskave povezane z razvojem metod za analizo in karakterizacijo materialov ter **iii)** raziskave metod in postopkov za kontrolo kakovosti v industriji, varnosti živil in v okolju.

ZNANSTVENI IN DRUGI RELEVANTNI DOSEŽKI

V letu 2011 so sodelavci programske skupine objavili 18 izvirnih znanstvenih člankov (*AL1-AL18*), en pregledni znanstveni članek (*AL19*) in en znanstveni sestavek v monografiji (*AL25*), ter objavili štiri znanstve prispevke na znanstvenih konferencah in simpozijih. Na področju raziskav in razvoja analiznih metod smo objavili 9 znanstvenih člankov, z analitiko materialov smo se ukvarjali v raziskavah objavljenih v 4 znanstvenih člankih in enem preglednem članku, uporaba in razvoj metod za analizo živil in raziskave v okolju pa so obravnavane v 5 znanstvenih člankih in enem prispevku v monografiji. O rezultatih smo tudi poročali na več znanstvenih in strokovnih konferencah. Raziskovali smo naslednje:

i)

Članek *AL7* (COBISS.SI-ID 1448796) obravnava umerjanje masno selektivnega detektorja v ne-tarčni analizi hlapnih organskih spojin v zraku. Hlapne organske snovi igrajo pomembno vlogo v atmosferski kemiji ter biogeokemiji. Prispevajo k oksidativni kapaciteti atmosfere, tvorjenju prašnih delcev in drugih atmosferskih onesnaževal, kot so na primer plini tople grede (ozon). Za njihovo določevanje najpogosteje uporabljamo plinsko kromatografijo v povezavi z masnim spektrometrom. Pravilna kvantifikacija posameznih organskih spojin je običajno vezana na dolgotrajno umerjanje s posameznimi standardnimi mešanici. Za pospešitev postopka kalibracije instrumenta smo razvili teoretični model napovedovanja faktorjev občutljivosti masnega spektrometra na osnovi kemijske strukture. Uporabili smo večfaktorski linearni model s sedmimi parametri. Povprečno napako napovedi faktorjev občutljivosti smo izračunali z navzkrižnim validacijskim testom in je znašala okoli 20 %. Dobljena napaka modela je ustrezna za določevanje hlapnih organskih snovi v zraku pri neciljani analizi. Celoten postopek kalibracije masnega spektrometra je časovno zamuden in ga priporočamo v primerih, ko nimamo na voljo ustreznih kalibracijskih standardnih mešanic.

Članek *AL1* (COBISS.SI-ID 35488773), objavljen v ugledni reviji *Analytical Chemistry*, obravnava nov pristop kvantitativnega kemijskega oslikovanja predmetov kulturne dediščine z NIR spektroskopijo. Spektralno oslikovanje predmetov kulturne dediščine je bilo doslej usmerjeno le na kvalitativno karakterizacijo umetnin in predmetov kulturne dediščine. Z uvedbo naprednih spektrometrov, ki segajo v bližnje infrardeče področje (NIR) od 1000–2500 nm pa so se pojavile možnosti za pridobivanje kvantitativnih informacij za neporušno kemijsko analizo umetnin. V delu je obravnavan razvoj 2D NIR oslikave in kemijskega mapiranja predmetov kulturne dediščine. Metoda je bila razvita na osnovi NIR posnetkov 256 prostorsko različnih spektrov v celotnem NIR območju, podatki pa analizirani v tridimenzionalnem prostoru s pomočjo multivariatne analize. S kombinacijo kemometrične obdelave podatkov in kemijske analize referenčnih vzorcev, je bilo možno izdelati prostorske mape z opredelitvijo kemijske sestave predmetov. Takšno kvantitativno oslikovanje predmetov je neprecenljivega pomena za umetnine in zgodovinske predmete ali objekte, ki so poškodovani.

Članek *AL4* (COBISS.SI-ID 34839045) obravnava datiranje in analizo vsebnosti zaprtega in nedotaknjenega zgodovinskega vrča Jar-35. Vrč poimenovan Jar-35 so odkrili leta 2004 južno od Kumrana. V prejšnjih raziskavah so v usedlini na dnu vrča identificirali tartrat, kar bi nakazovalo da so v vrču hranili vino (*Buti s sod. 2006*). Naša raziskava tega ni potrdila. Z uporabo tekočinske in plinske kromatografije z masnospektrometrično detekcijo v vzorcih usedline nismo zaznali sledov vinske kisline ali njenih soli. Pokazali smo, da je glavna komponenta usedline sadra. Z uporabljenimi metodami nismo identificirali organskih spojin. Radiokarbonsko datiranje oglja iz usedline in termoluminiscenčno datiranje keramičnega vrča se ujema z obdobjem naselitve v Kumranu (od 100 let pred n.š. do 70 let po n.š.).

V članku *AL11* (COBISS.SI-ID 4824090) je opisana nova dvopulzna metoda za amperometrično detekcijo (PAD) ogljikovih hidratov. S pomočjo različnih elektrokemijskih tehnik smo ugotovili, da lahko zlato elektrodo učinkovito obnavljamo s sekvenco dveh pulzov in ne s tremi ali več, kot je bilo to doslej v uporabi pri analizi ogljikovih hidratov v kombinaciji z ionsko kromatografijo. Raziskali smo mehanizem pasivacije Au elektrode v alkalnem elektrolitu (mobilni fazi) in ugotovili, da oksidativne sekvence pospešujejo pasivacijo elektrode in s tem nižajo občutljivost detekcije. Problem smo rešili z uporabo močno negativnih impulzov v območju razvijanja H_2 (od $-1,4$ do $-2,0$ V), ki popolnoma odstrani nakopičene intermediate, nastale pri detekciji. Nov enostavnejši način detekcije je enako učinkovit, a mnogo hitrejši, kar omogoča uporabo PAD pri tehnikah, ki potrebujejo hitro zajemanje podatkov kot sta FIA in IC z monolitnimi kolonami.

Članek *AL5* (COBISS.SI-ID 34723589) obravnava potenciometrične in ^{31}P NMR študije inozitol fosfatov in njihovih interakcij z železom(III). Različne elektrometrične ^{31}P NMR titracije smo uporabili za raziskavo interakcij med mio-inositol heksakisfosfati, (\pm)-mio-inositol 1,2,3,5-tetrakisfosfati in (\pm)-mioinositol 1,2,3-trisfosfati z železovimi(III) ioni. Ugotovili smo, da se pri povečevanju $Fe(III)/InsP_6$ molskega razmerja (od 0,5 do 4) sprostijo 3 moli protonov na dodana 2 mola železovih(III) ionov. S pomočjo potenciometričnih in NMR titracij smo določili zaporedje vezave na fosfatne skupine inozitol fosfatov. Interakcije med železovimi(III) ioni in inozitol fosfati so močno odvisne od razmerja $Fe(III)/InsP_6$, pri razmerjih večjih kot 2 dobimo nestabilen heterogen sistem.

V članku *AL8* (COBISS.SI-ID 35012101) smo v sodelovanju z raziskovalci podjetja »BIA Separations« razvili metodo za določanje virusa gripe na osnovi HA1 podenote hemaglutinina. Za analizo različnih degradiranih virusov gripe smo uporabili butil (C4) in stiren divinil benzen analize monolitne kolone. Vezava HA1 podenote hemaglutinina na monolitno kolono je bila potrjena z gelsko elektroforezo (SDS-PAGE). Linearno delovno območje sega od

$1,6 \times 10^{10}$ do $1,64 \times 10^{11}$ virusnih delcev/mL, meja zaznave pa znaša $2,56 \times 10^9$ delcev/mL. Za H1N1 virus smo razvili HPLC metodo, ki je primerna tudi za analizo HA1 podenote H3N2 virusa gripe in virusa gripe B.

Članek *AL9* (COBISS.SI-ID 35012613) obravnava čiščenje rekombinantnega edenovirusa (AD3 VLP) s kratkimi monolitnimi kolonami (CIMac). Rezultate dobljene s CIMac smo primerjali z uveljavljeno dvostopenjsko proceduro osnovano na ultracentrifugiranju in ionski izmenjavi s Q-sep kolonami. Postopek je pokazal več prednosti, saj je bil izplen čiščenja več kot 50 %, vsebnost preostale DNA pa manjša od 1 %. Pomembna prednost CIMac čiščenja je tudi hitrost, saj se je postopek od petih dni skrajšal na en dan, kolona pa omogoča direktno procesno kontrolo različnih Ad3 VLP vzorcev.

V članku *AL10* (COBISS.SI-ID 4657946) je opisana karakterizacija karboksilnih kislin v atmosferskih aerosolih na osnovi hidrofilnih interakcij z LC-MS. V okviru raziskave, ki je bila izvedena v sodelovanju s KI, je bila razvita občutljiva kromatografska metoda z masno spektrometrično detekcijo (HILIC/ESI-MS/MS) za določevanje izbranih alifatskih, alicikličnih in aromatskih karboksilnih kislin v atmosferskih aerosolih. Ločba je bila izvedena z amidno kolono in gradientno elucijo z acetonitrilom in vodno raztopino acetanega pufra (pH 5,0) pri konstantni ionski moči (10 mM). Vzorci so bili pripravljene z ultrazvočno ekstrakcijo. Izkoristki ekstrakcije so bili za večino spojin boljši od 90 %, meje zaznave so bile med 0,03 in 16,0 $\mu\text{g/L}$, ponovljivost določitev pa 5 %. Metoda je primerna za določevanje karboksilnih kislin v atmosferskih aerosolih.

V članku *AL17* (COBISS.SI-ID 35545605) je opisana UV-LED spektrometrična naprava za določanje nizkih koncentracij etanola v sadnih sokovih na osnovi mikrodifuzije. Nov pripomoček združuje separacijo hlapnih substanc iz vzorca s kompleksnim matriksom na osnovi mikrodifuzije in kinetično zvezno spektrometrično spremljane reakcije v sprejemnem mediju pri 365 nm. Zmožnosti in uporabnost sistema za realne aplikacije smo potrdili na primeru sadnih sokov.

ii)

Pregledni članek *AL19* (COBISS.SI-ID 35497477) obravnava ključne parametre pomembne za degradacijo zgodovinskih papirjev. Delo povzema vpliv okoljskih parametrov in sestave materialov podlage z vidika dolgotrajnega hranjenja zgodovinskih zbirk na osnovi papirja. Obravnavan je predvsem vpliv temperature, relativne vlažnosti in nekaterih onesnaževal (NO_2 , očetna kislina, formaldehid) kot ključnih dejavnikov. Rezultati kažejo, da je potrebna temeljita prenova funkcij odziva na obremenitve za papir in za pripravo ter razvoj tovrstnih materialov.

Članek *AL3* (COBISS.SI-ID 34838533) obravnava oksidativno razgradnjo pergamenta, njegovo nedestruktivno karakterizacijo in datiranje. Preučevali smo temperaturo krčenja kolagena in vpliv lipidov v pergamentu na material. Vsebnost lipidov nima znatnega vpliva na meritve temperature krčenja, močno pa zniža temperaturo krčenja med razgradnjo. To potrjuje pomembnost oksidacije lipidov med razgradnjo pergamenta. Ker je določitev temperature krčenja mikrodestruktivna metoda, smo pokazali, da jo lahko določamo posredno z uporabo NIR spektroskopije, na osnovi tega pa lahko tudi datiramo zgodovinske pergamente.

V članku *AL14* (COBISS.SI-ID 34838277) smo raziskovali vpliv hlapnih organskih spojin in odsotnosti kisika na razgradnjo papirja. Preučevali smo vpliv hlapnih organskih spojin (HOS) na obstojnost modelnih in zgodovinskih papirjev ter vpliv aktivnega oglja, odstranitve kisika in vpliva različnih sorbentov na zmanjšanje razgradnje. Rezultati so pokazali, da imajo HOS s

kislimi ali oksidativnimi lastnostmi precejšen vpliv na razgradnjo celuloze. Odstranitev HOS iz bližnje okolice pa ima bistven pozitiven vpliv, predvsem pri papirjih z visokimi lastnimi emisijami HOS. Ti rezultati imajo neposreden pomen za način shranjevanja papirnatih zbirk v zaprtih prostorih.

V članku *AL15* (COBISS.SI-ID 34710021) je opisana raziskava strukturnih in elektrokemijskih lastnosti tankih Ce/Cu mešanih oksidnih plasti. Raziskava je bila izvedena v sodelovanju s sodelavci Katedre za anorgansko kemijo FKKT. S pomočjo sol-gel tehnike so bili pripravljene tanki Ce/Cu filmi v razmerju 1:1 in 1:2, ki smo jih nato okarakterizirali z različnimi spektroskopskimi in elektrokemijskimi tehnikami. Izkazalo se je, da so optične in redoks lastnosti močno odvisne od molskega razmerja kovin v filmu, pomembna pa je tudi vsebnost Li⁺ ionov v elektrolitu. S ciklično voltometrijo smo pokazali, da je elektrodni proces počasen in kinetično kontroliran, XAFS meritve pa nakazujejo, da molsko razmerje med kovinama ne vpliva na lokalno okolico obeh kovin.

Članek *AL16* (COBISS.SI-ID 35308549) obravnava paralelno sintezo 1-substituiranih 5-(5-okso-pirolidin-3-il)-1*H*-pirazol-4-karboksamidov. V delu, ki je bilo izvedeno v sodelovanju s Katedro za organsko kemijo FKKT, smo razvili paralelno sintezo konformacijsko oviranih pirazolnih analogov histamina iz itakonske kisline v raztopini. Sintezna pot vključuje petstopenjsko pripravo 1-substituiranih 5-(5-okso-1-fenilpirolidin-3-il)-1*H*-pirazol-4-karboksilne kisline s paralelnim aminiranjem z različnimi primarnimi in sekundarnimi amini in daje 24 različnih analogov histamina. Metodo odlikuje dober izkoristek sinteze in velika čistost dobljenih produktov, prav tako pa je metoda splošna in neodvisna od substrata. Aminiranje poteče gladko in ne opazimo bistvenih razlik v reaktivnosti glede na strukturo reaktantov.

iii)

Članek *AL2* (COBISS.SI-ID 3097900) obravnava vrednotenje kemiluminometrične metode za določevanje polifenolov v vinu. Za določevanje polifenolov v vinu smo primerjali kemiluminometrično metodo Pholasin z metodo tekočinske kromatografije, sklopljene z masno spektrometrijo. Rezultate smo primerjali tudi z rezultati, ki smo jih dobili s spektrofotometrično metodo za določevanje celokupnih polifenolov Singleton-Rossi. Z naštetimi metodami smo analizirali 141 vzorcev vin. Rezultati so pokazali dobro ujemanje med kemiluminometrično metodo in metodami Singleton-Rossi, medtem, ko je bilo ujemanje med kemiluminometrično metodo in kromatografsko določitvijo dobro samo za galno kislino. Precej slabše ujemanje se je pokazalo za ostale antioksidante: trans-resveratrol, (+)-katehin, (-)-epikatehin, kvercetin, vanilinsko, kavno, p-kumarno, 3,4-dihidroksi benzojsko, sinapično, ferulno in elaginsko kislino.

Usoda in določitev triazinskih herbicidov v tleh je opisana v monografiji z naslovom *Herbicides – properties, synthesis and control of weeds* (COBISS.SI-ID 35747589) (*AL25*). V tem pregledu obravnavamo usodo triazinskih herbicidov v okolju, ki se porazdeljujejo pretežno med vodno in trdno fazo. V tleh se vežejo na organske in mineralne komponente. Pretvorijo se v številne pretvorbene produkte (TP), od katerih so nekateri okoljsko pomembni. Številni mikroorganizmi v tleh razgrajujejo triazine, kakor tudi nekatere višje rastline. Abiotska razgradnja je manj pomembna. Podan je pregled ekstrakcijskih in analizijskih metod za določanje ostankov triazinov in TP v tleh, diskutiramo pa tudi, kako sedaj uporabljani analizijski pristopi vplivajo na naše znanje o usodi triazinov.

Članek *AL6* (COBISS.SI-ID 34749701) obravnava raziskavo določanja preostankov farmacevtskih sestavin z atomsko absorpcijsko spektrometrijo. V članku je opisan razvoj metode za določevanje sledov magnezija in litija z atomsko absorpcijsko spektrometrijo v vodnem

in etanolnem mediju, ki se pogosto uporablja za čiščenje opreme v farmacevtski proizvodnji. Za določanje magnezija v vodnem in etanolnem mediju je bila uporabljena elektrotermična atomizacija, za določevanje litija v vodnem mediju pa plamenska atomska absorpcijska spektrometrija. Temperaturni program za ETAAS je bil prilagojen tako, da so bili rezultati kljub uporabi etanola ponovljivi. Metoda je bila validirana in uporabljena za določevanje preostankov izbranih farmacevtskih učinkovin (Ezomeprazol magnezij in litijev karbonat) v izpiralnih raztopinah.

Članek *AL12* (COBISS.SI-ID 1930633) obravnava razgradnjo endosulfana z glivama *Hypoxyton fragiforme* in *Gloeophyllum trabeum*. V tekočem mediju smo preučevali vpliv kloriranega insekticida endosulfana na prirast gliv ter njegovo razgradnjo z obema glivama. Ugotovili smo, da dodatek endosulfana v koncentraciji 2,4 mg/L ni vplival na rast micelija. Po 21 dnevih izpostavitve glivi *H. fragiforme* se je endosulfan pretvoril v metabolit endosulfan sulfat, v ekstraktih kultur pa smo s plinsko kromatografijo določili tudi endosulfan eter. Bio-transformacije endosulfana z glivo rjave trohnobe *G. trabeum* nismo ugotovili.

Članek *AL13* (COBISS.SI-ID 3086449) obravnava razlike med rastlinskimi zvrstmi *Epilobium* in *Hypericum*, ki smo jih študirali s pomočjo različnih variant IR spektroskopije v kombinaciji s kemometričnimi pristopi (analiza variance, analiza glavnih komponent). Tehnika IR spektroskopije je bila uporabljena z namenom boljše kontrole kvalitete posušenih zdravilnih rastlin v medicinskih preparatih. Rezultati kažejo, da je IR spektroskopija v kombinaciji s kemometrično obravnavo meritev primerna tehnika za speciacijo rastlinskih materialov. Pokazalo pa se je, da je za speciacijo potrebno upoštevati tudi morfološke lastnosti rastlinskega materiala.

V članku *AL18* (COBISS.SI-ID 1951369) smo opisali raziskavo vpliva borovih spojin v lepilih na kakovost lepljenja in fungicidne lastnosti lesa. Z dodatkom borovih spojin k lepilom smo poskušali izboljšati fungicidne lastnosti lepljenega lesa. Rezultati testov kažejo, da dodatek borovih spojin pozitivno vpliva na nekatere mehanske lastnosti lepljenega lesa. Žal, pa ne izboljša odpornosti na glive rjave trohnobe.

RESEARCH PROGRAMME REPORT

RESEARCH TOPICS AND GOALS

- i) Basic research in analytical methods and approaches
- ii) Research and development of methods for the analysis and characterisation of materials
- iii) Development of methods and procedures for quality control in industrial production, food safety and environmental safety.

SCIENTIFIC AND OTHER RELEVANT ACHIEVEMENTS

In 2011, members of the programme group published 18 original scientific articles (*AL1-AL18*), one review article (*AL19*), there was one contribution in a scientific monograph (*AL25*), and four published contributions on scientific conferences (*AL21-AL24*). The following subjects were investigated:

i)

Calibration of mass selective detector in non-target analysis of volatile organic compounds in the air was studied and published in the article *AL7* (COBISS.SI-ID 1448796). Volatile organic compounds (VOCs) play an important role in the chemistry of the atmosphere and in biogeochemistry. They contribute to the oxidative capacity of the atmosphere, particle and air pollutants, as well as to the production of greenhouse gasses (e.g. instance ozone). Among analytical techniques for their determination in the atmosphere, gas chromatography coupled with mass spectrometry (GC–MS), has several advantages. However, for an accurate quantification, calibration with standard substances is necessary. A quantitative structure–property relationship (QSPR) model for the prediction of MS response factors was developed on the basis of our experimental measurements for the quantification of ozone precursors present in the atmosphere. Linear correlation between chemical structures and response factors was established by using a 7-parameter MLR model. The average error in the prediction of response factors was calculated by cross-validation procedure and was below 20%, which is sufficient for the determination of VOCs in the air. The proposed procedure is time consuming, therefore it is more suited for the quantification of tentatively identified organic compounds during the reprocessing of MS chromatograms in cases when the original sample is no longer available.

A new approach for quantitative NIR chemical imaging in heritage science was described in the article *ALI* (COBISS.SI-ID 35488773) published in a distinguished journal, *Analytical Chemistry*. Until recently, applications of spectral imaging in heritage science mostly focused on qualitative examination of artworks. This is partly due to the complexity of artworks and partly due to the lack of appropriate standard materials. With recent advances of NIR imaging spectrometers, the region 1000–2500 nm became available for exploration, enabling us to extract quantitative chemical information from artworks. In this contribution, the development of 2D NIR quantitative chemical maps of heritage objects is discussed along with a presentation of the first quantitative image. Further case studies include semiquantitative mapping of plasticiser distribution in a plastic object and identification of historic plastic materials. In NIR imaging studies discussed, sets of 256 spatially registered images were collected at different wavelengths in the NIR region of 1000–2500 nm. The data was analyzed as a spectral cube, both as a stack of wavelength-resolved images and as a series of spectra, one per each sample pixel, using multivariate analysis. This approach is only possible if well-characterized reference sample collections are used, as quantitative imaging applications need to be developed, thus enabling spatial maps of damaged and degraded areas to be visualized to a level of chemical detail which was previously impossible. Such quantitative chemical mapping of vulnerable areas of heritage objects is invaluable as it enables quantitative visualization of the damage of historic objects.

In the article, published in *Archaeometry* *AL4* (COBISS.SI-ID 34839045), we investigated the age and the content of Jar-35, a sealed and intact storage-jar, found on the southern plateau of Qumran. Jar-35 was found in 2004, south of the Qumran settlement. A previous study identified tartrate in the deposit of the jar, indicating possible presence of wine (*Buti et al. 2006*). However, we could not confirm this finding. Using liquid and gas chromatography with mass spectrometric detection, no trace of tartaric acid or salts thereof could be detected in our samples. We show that the major component of the deposit was gypsum. With the methods that we have applied no other organic compounds were identified. Both, radiocarbon dating of charcoal in the deposit and thermoluminescence dating of the ceramic jar show that it belongs to the main period of habitation at Qumran (i.e. 100 BC to AD 70).

A new two-step potential waveform for pulsed amperometric detection (PAD) of carbohydrates at polycrystalline gold working electrode is described in *AL11* (COBISS.SI-ID 4824090). In contrast with standard triple- and quadruple-potential waveforms, cathodic electrode conditioning/re-activation was applied exclusively in the two-step potential waveform. The waveform consists of cathodic re-activation potential in hydrogen evolution region (from -1.4 V to -2.0 V vs. Ag/AgCl) and detection potential at $+0.2$ V. The cathodic processes, responsible for the activation of Au electrode in alkaline medium, were characterized by fast scan cyclic voltammetry, chronoamperometry, and chronocoulometry. It was shown that the application of short negative re-activation potential maintains the electrode surface clean and active and completely substitutes oxidative cleaning/activation at potentials higher than $+0.3$ V which were previously used in PAD. Both, the desorptive reduction of the AuOHads and hydrogen evolution reaction, play a crucial role in effective cleaning/regeneration of the Au electrode in a pulsed sequence. The two-step waveform preserves all analytical properties of three- and four-step potential waveforms and does not result in fouling or dissolution of Au electrode surface in a prolonged use. Square wave sequence substantially simplifies pulsed amperometric detection and enables high frequency sampling required for FIA and capillary IC systems.

Investigation of interactions between iron(III) ions and inositol phosphates was described in the article *AL5* (COBISS.SI-ID 34723589). Potentiometric, conductometric and ^{31}P NMR titrations were applied to study interactions between myo-inositol hexakisphosphate (phytic acid), (\pm) -myo-inositol 1,2,3,5-tetrakisphosphate and (\pm) -myo-inositol 1,2,3-trisphosphate with iron(III) ions. Potentiometric and conductometric titrations of myo-inositol phosphates show that the addition of iron increases acidity and consumption of hydroxide titrant. By increasing the Fe(III)/InsP6 ratio (from 0.5 to 4), 3 mol of protons are released per 2 mol of iron(III). The interactions between iron(III) ions and inositolphosphates significantly depend on the metal to ligand ratio, while ratios 2 and above result in an unstable heterogeneous system.

Reversed phase monolithic analytical columns for the determination of HA1 subunit of influenza virus haemagglutinin were described in the article *AL8* (COBISS.SI-ID 35012101). Monoliths are chromatographic stationary phases, specially designed for efficient purification of large biomolecules, such as proteins, viruses and DNA. In this work, small-scale monolithic butyl (C4) and styrene-divinyl benzene (SDVB) columns were applied for reversed phase analyses of various degraded influenza viruses. The binding of the HA1 subunit of haemagglutinin to the monolithic columns was confirmed by sodium dodecyl sulphate-polyacrylamide gel electrophoresis (SDS-PAGE) and the Western blot. The working linear range was determined as 1.60×10^{10} viral particles/mL to at least 1.64×10^{11} viral particles/mL. The detection limit was found to be 2.56×10^9 virus particles/mL and the limit of quantification 5.12×10^9 virus particles/mL. The analytical HPLC method developed with the H1N1 virus was also applicable for the analytics of the HA1 subunit of H3N2 influenza virus and the influenza B virus.

The object of the research described in the article *AL9* (COBISS.SI-ID 35012613) was purification of recombinant adenovirus type 3 dodecahedral virus-like particles for biomedical applications with short monolithic columns. Adenovirus type 3 dodecahedral virus-like particles (Ad3 VLP) are an interesting delivery vector. They penetrate animal cells in culture very efficiently and up to 300,000 Ad3 VLP can be observed in one cell. The purification of such particles usually consists of several steps. In this work we describe the method development and optimization for the purification of Ad3 VLP using Convective Interaction Media analytical columns (CIMac). The results obtained with CIMac were compared to the already established two-step purification protocol for Ad3 VLP based on sucrose density gradient ultracentrifugation and the Q-Sepharose ion-exchange column. Pure, concentrated and bioactive

VLP were obtained and characterized by several analytical methods. The recovery of the Ad3 VLP was more than 50% and the purified fraction was almost completely depleted of DNA; less than 1% of DNA was present. The purification protocol was shortened from five days to one day and remarkably high penetration efficacy of the CIMac purified vector was retained. Additionally, CIMac QA analytical column has proven to be applicable for the final and in-process control of various Ad3 VLP samples.

In the article *AL10* (COBISS.SI-ID 4657946) characterization of carboxylic acids in atmospheric aerosols, using hydrophilic interaction liquid chromatography tandem mass spectrometry was presented. A sensitive hydrophilic interaction liquid chromatography/electrospray ionization mass spectrometry (HILIC/ESI-MS/MS) method was developed for determining selected aliphatic, alicyclic and some aromatic carboxylic acids. Analytes were separated on an amide column using a gradient elution with a 10 mM constant ionic strength mobile phase containing acetonitrile and aqueous ammonium acetate buffer (pH 5.0). The impacts of the buffer type, pH, polar modifier and temperature on analyte retention under HILIC were studied. Static sonication-assisted solvent extraction was optimized for sample preparation prior to the analysis. In most analytes the recoveries obtained were higher than 90%. The method was proven to be sensitive within limits of detection ranging from 0.03 to 16.0 µg/L in a selected reaction monitoring mode (SRM). The repeatability and intermediate precision of the method, expressed as RSD (%) of the peak area ratio between analytes and their internal standards were generally lower than 5%. The method was successfully applied for the determination of the acids studied in samples of ambient aerosol particles. A great advantage of this new method is also that it allows for detection and separation of isobaric compounds of the selected carboxylic acids. Our results demonstrate that the method is specific and sensitive for the determination of a wider range of polar carboxylic acids at low concentrations in complex samples.

Article *AL17* (COBISS.SI-ID 35545605) presents UV-LED spectrometric setup for determining low levels of ethanol in fruit juice. A novel setup is described in which we combined the separation of a volatile substance from a sample with a complex matrix on the basis of a micro-diffusion process with a kinetic on-line spectrometric monitoring of the reaction in the receptive medium at 365 nm. The fruit juice was selected as a model for testing the performance of the setup in real-life applications.

ii)

Dose-response functions for historic paper was reviewed in *AL19* (COBISS.SI-ID 35497477). Paper degradation has been studied extensively over the past few decades from both, the conservation and the material science perspectives. This review focuses on quantifiable impacts of the environment and material composition from the viewpoint of long-term storage of historic paper-based collections. Temperature, relative humidity and their variation, as well as pollution are of major interest, while photoinitiated processes are covered only briefly. New experiments, where the effects of the most abundant indoor pollutants (NO₂, acetic acid and formaldehyde) and the effects of fluctuating temperature and relative humidity have been compared, are also presented as part of the discussion. This work highlights the need for revising the existing dose-response (damage) functions for paper and their further development.

In the article *AL3* (COBISS.SI-ID 34838533) the oxidative degradation of parchment and its non-destructive characterisation and dating were described. We investigated the shrinkage temperature of collagen and the influence of lipids contained in parchment on the measurements. Lipid content does not significantly affect shrinkage temperature measurements, however, it strongly affects the decrease of shrinkage temperature of collagen during degradation. This confirms that lipid peroxidation during degradation of parchment is highly relevant.

While shrinkage temperature determination is a microdestructive method, we also demonstrated that it is possible to determine this property using NIR spectroscopy, and further on also non-destructive dating methods of historic parchment can be used.

Article *AL14* (COBISS.SI-ID 34838277) presents the study of the effect of volatile organic compounds and hypoxia on paper degradation. We evaluated possible effects of volatile organic compounds (VOCs) on the durability of model and real historic papers. Possible protective effects of the use of activated charcoal cloth, oxygen removal, and of various chemisorbents were also investigated. The results suggest that particularly the VOCs with acidic or oxidisable functions can have a strong effect on degradation of cellulose. The removal of VOCs from the immediate environment can have a pronounced beneficial effect on papers emitting VOCs more intensively. The results have implications for storage of paper-based heritage in enclosures.

Article *AL15* (COBISS.SI-ID 34710021) presents structural and electrochemical investigations of Ce/Cu mixed oxide thin films. Thin films of Ce/Cu mixed oxide with molar ratios of 1 and 2 were prepared from inorganic precursors using the sol-gel route. Various electrochemical and spectroscopic techniques were used for characterization of the films and investigation of their optical and electrochemical properties. It was found that the redox behaviour significantly depends on the Ce/Cu molar ratio and on the concentration of Li^+ ions in the electrolyte. Slow kinetics of the charge transfer reactions was evident from cyclic voltammetry measurements of both types of films only at low scan rates (< 20 mV/s). Measurement of X-ray absorption fine structure (XAFS) indicated that the local structure of Ce and Cu ions was not affected by the Ce/Cu molar ratio.

Article *AL16* (COBISS.SI-ID 35308549) presents investigation of parallel synthesis of 1-substituted 5-(5-oxopyrrolidin-3-yl)-1*H*-pyrazole-4-carboxamides. A parallel solution-phase synthesis of 5-(5-oxopyrrolidin-3-yl)-1*H*-pyrazole-4-carboxamide derivatives as conformationally constrained pyrazole analogues of histamine starting from itaconic acid was developed. The synthetic method comprises a five-step preparation of 1-substituted 5-(5-oxo-1-phenylpyrrolidin-3-yl)-1*H* pyrazole-4-carboxylic acid followed by parallel amination with various primary and secondary amines to give a library of 24 histamine analogues with good overall yields and very high purities. The method is general and substrate-independent. All the amination proceeds smoothly and no major difference in reactivity is observed with respect to the structure of the reactants.

iii)

Evaluation of the chemiluminometric method for determination of polyphenols in wine is described in the paper *AL2* (COBISS.SI-ID 3097900). The Pholasin chemiluminometric method for determination of polyphenols in wine was evaluated by comparison with liquid chromatography hyphenated with mass-spectrometric detection. The results were also compared with the conventional Singleton-Rossi spectrophotometric method for determination of total polyphenols. A total of 141 wine samples were examined using all three methods and the results indicated a good agreement between the chemiluminometric and the Singleton-Rossi methods; however, the chromatographic data correlated reasonably well with the chemiluminometric data only with gallic acid, but less well or not at all with other determined phenolic antioxidants: trans-resveratrol, (+)-catechin, (-)-epicatechin, quercetin, vanillic-, caffeic-, caftaric-, p-coumaric-, 3,4-dihydroxybenzoic-, sinapic-, ferullic-, and ellagic acid.

Fate and determination of triazine herbicides in soil was published in the monograph entitled *Herbicides – properties, synthesis and control of weeds* (COBISS.SI-ID 35747589) (*AL25*). In

this review, the environmental fate of triazine herbicides is discussed. Herbicides are distributed mainly between aqueous and solid compartments. In soil, they are sorbed on organic and mineral components, and degraded in transformation products (TPs); some of these are also environmentally important. Several soil microorganisms are capable of triazine degradation, as well as some higher plants. Abiotic degradation is a minor route. Extraction and analytical methods for the triazine residues and TPs in soil are reviewed, considering their impact on our knowledge about the fate of triazines.

Article *AL6* (COBISS.SI-ID 34749701) presents investigation of the application of atomic absorption spectrometry for the determination of residual active pharmaceutical ingredients in cleaning validation samples. The objective of this work was the development and validation of atomic absorption spectrometric (AAS) methods for the determination of residual active pharmaceutical ingredients (API) in rinse samples for cleaning validation. AAS as an indirect method for the determination of API in rinse samples can be applied when it exists in the form of salt with metal ions, or when the metal ion is a part of the API's structure. The electrothermal AAS methods (aqueous and ethanol medium) for the determination of magnesium in esomeprazole magnesium and the flame AAS method for the determination of lithium in lithium carbonate in rinse samples were developed. Various combinations of solvents were tested and a combination of 1% aqueous or ethanol solution of nitric acid for esomeprazole magnesium and 0.1% aqueous solution of nitric acid for lithium carbonate were found to be the most suitable. The atomization conditions in the graphite furnace and in the flame were carefully studied to avoid the loss of analyte and to achieve suitable sensitivity. The cleaning verification methods were validated with respect to accuracy, precision, linearity, limit of detection, and quantification. In all cases, the limits of detection were at the microgram level. The methods were successfully applied for the determination of esomeprazole magnesium and lithium carbonate in rinse samples from cleaning procedures.

Investigation of degradation of endosulfan with *Hypoxyton fragiforme* and *Gloeophyllum trabeum* was investigated and described in *AL12* (COBISS.SI-ID 1930633). We studied the effect of endosulfan, an organochlorine insecticide, on the growth yield of *Hypoxyton fragiforme* and *Gloeophyllum trabeum* in liquid media, as well as its degradation by both fungi. The addition of 2,4 mg/L of endosulfan did not have any effect on the growth in both fungal cultures. After 21 days in the liquid culture of *H. fragiforme*, endosulfan was transformed to endosulfan sulphate. Endosulfan ether was also detected by gas chromatography. We did not detect any biotransformation of endosulfan with *G. trabeum*.

Quality control of dried plant material in assessing the suitability of herbal medicinal products is of extreme importance. Paper *AL13* (COBISS.SI-ID 3086449) presents the investigation of differences among *Epilobium* and *Hypericum* species revealed by four IR spectroscopy modes: transmission, KBr tablet, diffuse reflectance and ATR. Commonly used procedures for identifying the species are time consuming and expensive. The development of multivariate statistical methods has enabled the application of vibrational spectroscopy for establishing plant species membership. It was found out that the morphological properties of plant material should be taken into consideration to achieve optimal results in using infrared spectroscopy for plant species identification.

The article *AL18* (COBISS.SI-ID 1951369) presents a study on the influence of boron compounds in adhesives on the bonding quality and fungicidal properties of wood. Through the addition of boric acid to adhesives, we tried to improve the fungicidal properties of glued wood. The results of testing showed that the addition of boric acid improved some mechanical properties of the glued wood. Unfortunately, the addition of boric acid to impregnated wood does not improve the resistance of the glued wood to brown rot fungi.

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. Ivan Leban

SODELAVCI PROGRAMSKE SKUPINE / RESEARCH PROGRAMME STAFF

Raziskovalci / Researchers

prof. dr. Jadran Maček

prof. dr. Stane Pejovnik

prof. dr. Ivan Leban

prof. dr. Boris Čeh

doc. dr. Mitja Robert Kožuh

prof. dr. Alojz Demšar

doc. dr. Klementina Zupan

doc. dr. Saša Petriček

prof. dr. Anton Meden

prof. dr. Iztok Turel

doc. dr. Amalija Golobič

izr. prof. dr. Marjan Marinšek

doc. dr. Bojan Kozlevčar

dr. Nives Kitanovski

doc. dr. Andrej Pevec

doc. dr. Nina Lah

doc. dr. Franc Perdih
doc. dr. Vojmir Francetič
prof. dr. Primož Šegedin, v pokoju / *retired*

Mladi raziskovalci / Young Researchers

Marta Kasunič
Simona Medvešček
Katarina Stare
Jakob Kljun
Rosana Hudej
Maja Vidmar
Tina Prinčič
Tanja Koleša
Miha Trdin
Sara Seršen

Tehniki / Technicians

Aleš Knez
Vinko Volk, v pokoju / *retired*

POROČILO O REALIZACIJI PROGRAMA

CILJI PROGRAMA

Vsebino raziskovalnega programa lahko razdelimo v dva sklopa: prvi zajema osnovne raziskave, drugi pa naj bi bil bolj usmerjen v uporabne raziskave.

V okviru programa smo raziskovali pogoje priprave različnih spojin, anorganskih koordinacijskih in organokovinskih spojin z različnimi ligandi. Kemijsko čiste produkte smo karakterizirali z različnimi fizikalno-kemijskimi metodami in poskusili določati njihovo biološko učinkovitost. Podoben postopek smo uporabili pri materialih. Raziskovalni program je močno povezan s pedagoško usmeritvijo Katedre za anorgansko kemijo in Katedre za anorgansko kemijsko tehnologijo in materiale FKKT UL. Močno je poudarjeno sodelovanje z drugimi programskimi skupinami.

Za tretje leto raziskovalnega programa (2011) smo predvidevali nadaljevanje sintez in fizikalno-kemijsko karakterizacijo izoliranih spojin in materialov.

Povzetek pregleda iz baze podatkov SICRIS za to obdobje je v kategoriji izvirnih znanstvenih člankov dalo 38 zadetkov.

OSREDNJE TEME PROGRAMA

Osrednje teme programa so večplastne. V okviru programske skupine smo se predvsem ukvarjali s koordinacijskimi spojinami, kinoloni, sintezo in karakterizacijo lantanoidnih kompleksov, različni strukturnimi raziskavami in novimi materiali.

V letu 2011 smo torej nadaljevali s sintezami in karakterizacijo novih spojin. Pripravili smo več novih spojin in jim določili kristalne strukture. Te spojine so: bakrovi kompleksi z nikotinamidom in isonikotinamidom, bakrovi halidni kompleksi ter kobaltova koordinacijska spojina. Posebno zanimive so naslednje spojine: Zn(II) kompleks z DNA, rutenijevi kompleksi, platinovi(II) kompleksi ter kompleksi niklja s kinoloni. V sodelovanju s Krko d.d. smo določili strukture kokristalov flukonazola z različnimi kislinami. Določene so bile strukture različnih organskih spojin. Študirali smo C-H interakcije, magnetne lastnosti fluorokobaltata(II), elektroporacijo rutenijevih(II) kompleksov in luminiscentne lastnosti Eu in Tb kompleksa.

V drugem delu smo bili uspešni pri rasti delcev določene velikosti ZnO in pri sintranju keramike NiO-YSZ. Pri slednjem je največja prednost te metode, da sta obe fazi NiO in YSZ v kompozitu naključno porazdeljeni na nanometrskem nivoju. Večina raziskav je bila objavljena v mednarodnih znanstvenih revijah. Vse podrobnosti so podane v besedilih prispevkov.

Iz bibliografskega pregleda se lahko razbere intenzivno sodelovanje z drugimi univerzami ter raziskovalnimi inštituti v Sloveniji in v tujini.

To raziskovalno delo je bilo možno le z uporabo vrhunske raziskovalne opreme, s katero pa so določene težave, ko gre za vzdrževanje. Če bi bila oprema vključena v infrastrukturni center, teh težav ne bi bilo.

ZNANSTVENI DOSEŽKI

Kot se je že dogajalo v preteklosti, so se sredi izvajanja raziskovalnega programa bistveno spremenila navodila ARRS za letno poročilo o rezultatih programa v letu 2011 (raziskovalno področje, šifre, angleški prevodi).

Raziskovalci smo nadaljevali z načrtovanimi raziskavami. Spodbudno je tudi dejstvo, da je ARRS na podlagi pozitivno ocenjenega letnega poročila za leto 2010 v decembru 2011 podaljšala financiranje tega programa še za eno leto – do 31.12.2014 v istem obsegu financiranja.

Programska skupina se ukvarja z dvema področjema raziskav. Prva skupina na Katedri za anorgansko kemijo se ukvarja pretežno z osnovnimi raziskavami na področju kemijske sinteze spojin. Gre za sintezo in karakterizacijo različnih spojin: anorganskih, organskih, koordinacijskih, organokovinskih v povezavi z različnimi ligandi. Ne gre samo za klasične kemijske spojine ampak tudi za spojine s potencialno uporabo v medicini. Drugi del raziskav na Katedri za anorgansko kemijsko tehnologijo in materiale je bolj aplikativno usmerjen. Gre za pripravo različnih novih materialov in njihovo možno uporabo.

Delovanje obeh skupin raziskovalcev je močno povezano s pedagoškim delom v smislu »raziskovalne univerze«. V okviru programske skupine deluje tudi vrsta odličnih mladih raziskovalcev. Odlično je sodelovanje z drugimi raziskovalci na fakulteti kakor tudi z raziskovalci na KI, IJS in inštitucijami v tujini. Zelo dobro je tudi sodelovanje z na novo ustanovljenimi Centri odličnosti in gospodarstvom. Vse podrobnosti so zbrane in razvidne iz bibliografije programske skupine za leto 2011 (sicris.izum.si).

Po metodolgiji ARRS smo leta 2011 objavili 38 znanstvenih prispevkov v kategorijah A1, A2, A3 in A4, od katerih je v kategorijah A1 in A2 objavljeno 15 oziroma 13 prispevkov. Dva prispevka sta ocenjena kot izjemna (A^{''}) in 15 prispevkov kot zelo kvalitetni (A[']). Objavljen je tudi en pregledni članek.

Ukvarjali smo se sintezami in karakterizacijami različnih Pt, Pd, Mo, Co, Ru in Cu koordinacijskih spojin. Študirali smo tudi interakcije kovinskih ionov z različnimi zdravilnimi učinkovinami (npr. s kinoloni, z naproksenom, z diklofenakom in difluzinalom). Ugotovljene so bile citotoksične in protirakave aktivnosti pri nekaterih spojinah. Določena je bila struktura adukta flukonazola z organsko molekulo. Narejeno je bilo precej struktur zanimivih organskih spojin. Pri materialih smo se ukvarjali z »itrij stabilizirano cirkonijevo« keramiko v povezavi z gorivnimi celicami SOFC (Solid Oxide Fuel Cell), sežigno sintezo in obarjanjem kalcijevega karbonata.

Raziskovalna skupina uspešno sama vzdržuje veliko raziskovalno opremo, ki jo je pridobila tudi s sredstvi MVZT in ARRS, letno je udeležena pri organiziranju slovensko-hrvaških kristalografskih sestankov (20. srečanje v letu 2011, Baška, Hrvaška) in skrbi za popularizacijo znanosti preko dnevnega časopisja in radiotelevizije. Vodja raziskovalne skupine je član komisije za naravoslovne vede Hrvatske zaklade.

Posebni dosežki:

- *Struktura $LaTi_2Al_9O_{19}$ in ponovna analiza kristalne strukture $La_3Ti_5Al_{15}O_{37}$* . S pomočjo strukturne analize z Rietveldovo metodo smo za spojino $LaTi_2Al_9O_{19}$ potrdili, da je izostrukturna z $SrTi_3Al_8O_{19}$. Izračuni vsot veznih valenc za posamezne ione so potrdili skladnost dobljene kristalne strukture s pravili kristalne kemije, kar pa ne velja za objavljeno kristalno strukturo $La_3Ti_5Al_{15}O_{37}$ z enakim praškovnim posnetkom in enako pripravo spojine. Na osnovi tega smo zaključili, da je bila struktura določitev $La_3Ti_5Al_{15}O_{37}$, ki velja za eno največjih, najkompleksnejših in najbolj citiranih kristalnih struktur oksidnih keramik, določenih ab initio iz praškovnih podatkov, napačna. Objavljeno v: *Acta Crystallographica*; 2011; Vol. B67, no. 6; str. 455–460; Impact Factor: 1.829; Srednja vrednost revije: 4.138; WoS: FI; Avtorji: Kasunič Marta, Meden Anton, Škapin Srečo D., Suvorov Danilo, Golobič Amalija.
- *Tvorba karboaluminatnih faz med hidratacijo portland cementa, ki vsebuje kalцит*. Poročamo o časovni odvisnosti nastanka hemikarboaluminata in monokarboaluminata pri hidrataciji cementa z dodatkom karbonata. Gre za prvo poročilo v literaturi, ki ugotavlja transformacijo hemikarboaluminata v monokarboaluminat. To smo ugotovili z rentgensko difrakcijo in kvantitativno fazno analizo z Rietveldovo metodo. Hemikarboaluminat se v hidratirajočem cementu pojavi po 1 dnevu in se po 28 dneh skoraj popolnoma pretvori v monokarboaluminat, ki po 100 dneh hidratacije postane edina tovrstna faza v hidratiranem cementu. Objavljeno v: *Journal of the American Ceramic Society*; 2011; Vol. 94, no. 3; str. 1238–1242; Impact Factor: 2.167; Srednja vrednost revije: 0.693; WoS: PK; Avtorji: Ipavec Andrej, Gabrovšek Roman, Vuk Tomaž, Kaučič Venčeslav, Maček Jadran, Meden Anton.
- *Interakcije kovinskih ionov z DNA, njenimi sestavnimi deli in derivati, ki so lahko pomembni za boj proti raku*. Pregledni članek je študija interakcij kovinskih ionov in kompleksov z DNA ter njenimi gradniki (nukleobaze, nukleozidi, nukleotidi, oligonukleotidi, ipd.) in (njihovimi) derivati. Te interakcije so pomembne tako za poznavanje mehanizmov naravnih bioloških procesov, kot za učinkovito rabo in nadaljnji razvoj kovine vsebujočih spojin v medicini (terapevtika in diagnostika). Članek vsebuje tudi kratek pregled toksičnosti kovinskih ionov in kovinskih zvrsti, ki interagirajo z DNA in jo poškodujejo. Objavljeno v: *Current Topics in Medicinal Chemistry*; 2011; Vol. 11, no. 21; str. 2661–2687; Impact Factor: 4.112; Srednja vrednost revije: 2.25; WoS: DX; Avtorja: Turel Iztok, Kljun Jakob.

- *Interakcije bakra(II) z nesteroidnima protivnetnima učinkovinama naproksen in diklofenak: sinteze, strukture in vezava na DNA in albumin.* Bakrovi(II) kompleksi z nesteroidnima protivnetnima učinkovinama naproksen in diklofenak v prisotnosti dušikovih heterocikličnih ligandov so bili sintetizirani in okarakterizirani. Strukture (2,2'-bipiridin) bis(naproksenato)baker(II), (1,10-fenantrolin)bis(naproksenato) baker(II) in bis(piridin) bis(diklofenako)baker(II) so bile določene z monokristalno rentgensko difrakcijo. Kompetitivne študije z etidijevim bromidom, ciklična voltamografija in UV spektroskopija so pokazale, da se spojine močno vežejo na CT DNA in serumske proteine. Objavljeno v: *Journal of Inorganic Biochemistry*; 2011; Vol. 105, no. 3; str. 476–489; Impact Factor: 3.317; Srednja vrednost revije: 2.276; WoS: CQ, EC; Avtorji: Dimiza Filitsa, Perdih Franc, Tangoulis Vassilis, Turel Iztok, Kessissoglou Dimitris P., Psomas George.

DRUGI RELEVANTNI DOSEŽKI

- *Kemija v družbi.* Sodelovanje na okrogli mizi v okviru Nacionalne konference o komuniciranju kemije »Kemija med percepcijo in realnostjo: vloga znanstvenikov, industrije, medijev in izobraževanja«, 24. maj 2011, Ljubljana. Avtorji: Turk Vito, Kaučič Venčeslav, Boštjančič Darja, Mateta Marjan, Meden Anton, Jamnik Janko, Krajnc Peter, Verčič Dejan, Tenze Goran, Pucelj Gregor.
- *Mednarodno leto kemije – IYC 2011.* V okviru vseslovenske konference učiteljev naravoslovnih predmetov je bilo organizirano zaključno predavanje s kemijskimi poskusi, Laško, 26. avg. 2011. Zavod Republike Slovenije za šolstvo; Zbornik povzetkov; 2011; str. 48; Avtor: Leban Ivan

DRUGI ČLANKI

- Skyrianou, Kalliopi C., Perdih, Franc, Papadopoulos, Athanasios N., Turel, Iztok, Kessissoglou, Dimitris P., Psomas, George. Interakcije nikelj-kinoloni. 5. del, Biološko ovrednotenje kompleksov nikelja(II) s prvo, drugo in tretjo generacijo kinolonov. *J. Inorg. Biochem.* 2011; Vol. 105, no. 10; str. 1273–1285; JCR IF (2010): 3.317. [COBISS.SI-ID 35309573]
- Pevec, Andrej, Tekavec, Martina, Demšar, Alojz. Interakcija kation-anion kot posledica vodikove vezi. *Polyhedron*. [Print ed.], 2011; Vol. 30, no. 4; str. 549–555; doi: 10.1016/j.poly.2010.11.018. [COBISS.SI-ID 34788101]
- Prah, J., Maček, Jadran, Dražić, Goran. Obarjanje kalcijevega karbonata iz raztopine kalcijevega acetata in amonijevega karbanata. *J. Cryst. Growth*. [Print ed.], 2011; Vol. 324, issue 1; str. 229–234; doi: 10.1016/j.jcrysgro.2011.03.020. [COBISS.SI-ID: 24708391]
- Perdih, Franc, Perdih, Anton. Barve, ki se vežejo na lignin: kvantno-mehanska študija ve-zave. *Cellulose (Lond.)*, 2011; Vol. 18, no. 5; str. 1139–1150; doi: 10.1007/s10570-011-9558-3. [COBISS.SI-ID 35113733]

RESEARCH PROGRAMME REPORT

PROGRAMME GOALS

Our programme is divided into fundamental and applied research and focuses on studies of various new compounds, i.e. inorganic, coordination and organometallic compounds. Chemically pure products were characterized by various physico-chemical methods and some biological activities were tested as well. Similar procedures were used with new materials. The entire research programme is closely linked with pedagogical work of the Chair of Inorganic Chemistry and the Chair of Inorganic Chemical Technology and Materials (University of Ljubljana, Faculty of Chemistry and Chemical Technology). There is an extensive collaboration with other research groups as well.

The plan for the third year (2011) was to continue the research on the synthesis and physico-chemical characterization of compounds and new materials. In 2011 the SICRIS database registered 38 contributions in the category of original scientific articles.

RESEARCH TOPICS

In the middle of the course of research programme the guidelines of the Slovenian Research Agency for writing annual reports substantially changed (research area, codes, English translations) which was rather annoying. Nevertheless, our group continued with research according to the plan. We were happy that the Slovenian Research Agency positively marked our annual report for the year 2010, and in December 2011 decided to prolong financing the programme until December 31, 2014.

Our research group deals with two types of the research. The first group, at the Chair of Inorganic Chemistry, performs basic research related mainly with chemical synthesis. Synthesis of new compounds provides new materials: inorganic, organic, coordination, organometallic with various ligands. Some of these compounds were tested for possible applications in medicine. The other part of research at the Chair of Inorganic Chemical Technology and Materials deals with applied research to produce and study new materials with possible applications.

Both types of research are strongly linked with pedagogical work at the Faculty, supporting the idea of "research university". There are several excellent "young researchers – junior scientists" in the group. We have excellent collaboration with the scientists from the National Institute of Chemistry, Jožef Stefan Institute and several institutions abroad. It should be mentioned that some of our scientists are working at the newly established Centers of Excellence. We also have collaboration with the industry. All details about our work with bibliography of the research group for the year 2011 are available from the database (sicris.izum.si).

In 2011 we published 38 contributions in the categories A1, A2, A3 and A4. 15 and 13 contributions are in A1 and A2 according to the methodology of the Slovenian Research Agency. Two contributions were marked as "outstanding" (A") and 15 as "high quality" (A'). One publication was a review article.

Various syntheses and characterizations of Pt, Pd, Mo, Co, Ru and Cu coordination compounds were performed. We studied the interactions of metallic ions with various medicinally important compounds, e.g.: quinolones, naproxen, diclofenac and difluzinal. Their physiological activity was tested as well. We found some cytotoxic and anticancer activity with some of the compounds. The structure of the adduct flukožanol-organic molecule was determined.

Several interesting organic structures have also been determined. In the field of materials research, “yttrium stabilised zirconia” ceramics in relation to SOFC (Solid Oxide Fuel Cell), combustion synthesis and precipitation of calcium carbonate were studied.

The research group has managed well to take care of some large research equipment, which was bought also with the financial support of the Ministry for Higher Education, Science and Technology and Slovenian Research Agency. We annually organize traditional Slovenian-Croatian crystallographic meetings (20th meeting was in Baška, Croatia). We have also been active in popularization of scientific achievements in daily newspapers and on TV. The head of the research group is a member of the Scientific Board for Natural Sciences of the Croatian Scientific Foundation (HZ).

SCIENTIFIC ACHIEVEMENTS

The following achievements need to be highlighted:

- *Structure of $\text{LaTi}_2\text{Al}_9\text{O}_{19}$ and reanalysis of the crystal structure of $\text{La}_3\text{Ti}_5\text{Al}_{15}\text{O}_{37}$.* By means of structural analysis with Rietveld method we confirmed that $\text{LaTi}_2\text{Al}_9\text{O}_{19}$ is isostructural with $\text{SrTi}_3\text{Al}_8\text{O}_{19}$. Calculations of bond valence sums for individual ions have confirmed that the obtained crystal structure aligns with the rules of crystal chemistry. However, this does not hold true for crystal structure of $\text{La}_3\text{Ti}_5\text{Al}_{15}\text{O}_{37}$ with the same powder diffraction pattern and the same synthesis and which was considered as one of the largest, most complex and cited crystal structures of oxide ceramics determined *ab initio*. Our conclusion is that crystal structure of $\text{La}_3\text{Ti}_5\text{Al}_{15}\text{O}_{37}$ was wrong. Published in: *Acta Crystallographica*; 2011; Vol. B67, no. 6; 455–460; Impact Factor: 1.829; Medium Category Impact Factor: 4.138; WoS: FI; Authors: Kasunič Marta, Meden Anton, Škapin Srečo D., Suvorov Danilo, Golobič Amalija.
- *Carboaluminate phase formation during the hydration of calcite-containing Portland cement.* This paper describes time-related formation of hemicarboaluminate and monocarboaluminate and for the first time reports the conversion of hemicarboaluminate into monocarboaluminate on the basis of X-ray diffraction by following the content of the latter by the Rietveld method in literature. Hemicarboaluminate appears in hydrating limestone-containing Portland cement after one day and almost completely converts into monocarboaluminate after 28 days of hydration. The only detectable AFm-type compound present in hydrated cement after 100 days of hydration is calcium monocarboaluminate. Published in: *Journal of the American Ceramic Society*; 2011; Vol. 94, no. 3; 1238–1242; Impact Factor: 2.167; Medium Category Impact Factor: 0.693; WoS: PK; Authors: Ipavec Andrej, Gabrovšek Roman, Vuk Tomaž, Kaučič Venčeslav, Maček Jadran, Meden Anton.
- *Interactions of metal ions with DNA, its constituents and derivatives, which may be relevant for anticancer research.* This review article discusses the interaction of metal ions and their complexes with DNA and its constituents (nucleobases, nucleosides, nucleotides, oligonucleotides, etc.) and (their) derivatives. The importance of these interactions in natural biological processes and the current use and future potential applications of metal-based compounds in medicine (therapeutics and diagnostics) is discussed. The toxicity of metal ions and various metal species, which interact and damage DNA, is also reviewed. Published in: *Current Topics in Medicinal Chemistry*; 2011; Vol. 11, no. 21; 2661–2687; Impact Factor: 4.112; Medium Category Impact Factor: 2.25; WoS: DX; Authors: Turel Iztok, Kljun Jakob.

- *Interaction of copper(II) with non-steroidal anti-inflammatory drugs naproxen and diclofenac.* Copper(II) complexes with non-steroidal anti-inflammatory drugs naproxen and diclofenac have been synthesized and characterized in the presence of nitrogen donor heterocyclic ligands. The crystal structures of (2,2'-bipyridine)bis(naproxenato)copper(II), (1,10-phenanthroline)bis(naproxenato)copper(II) and bis(pyridine)bis(diclofenac)copper(II) have been determined by X-ray crystallography. Competitive studies with ethidium bromide, cyclic voltammograms and UV study have shown that the complexes bind strongly to CT DNA and to serum albumin protein. Published in: *Journal of Inorganic Biochemistry*; 2011; Vol. 105, no. 3; str. 476–489; Impact Factor: 3.317; Medium Category Impact Factor: 2.276; WoS: CQ, EC; Authors: Dimiza Filitsa, Perdih Franc, Tangoulis Vassilis, Turel Iztok, Kessissoglou Dimitris P., Psomas George.

OTHER RELEVANT ACHIEVEMENTS

- *Chemistry and Society.* Round table discussion at the occasion of the National conference about communication in chemistry “Chemistry between perception and reality: role of scientists, industry, media and education”, 24 May 2011, Ljubljana. Authors: Turk Vito, Kaučič Venčeslav, Boštjančič Darja, Mateta Marjan, Meden Anton, Jamnik Janko, Krajnc Peter, Verčič Dejan, Tenze Goran, Pucelj Gregor.
- *International Year of Chemistry – IYC 2011.* Chemical experiments were performed as a final lecture at the Slovenian conference for teachers of natural sciences, Laško, 26 Aug 2011. Zavod Republike Slovenije za šolstvo; Zbornik povzetkov; 2011; str. 48; Author: Leban Ivan.

OTHER PUBLICATIONS

- Skyrianou, Kalliopi C., Perdih, Franc, Papadopoulos, Athanasios N., Turel, Iztok, Kessissoglou, Dimitris P., Psomas, George. Nickel-quinolones interaction. Part 5, Biological evaluation of nickel(II) complexes with first-, second- and third-generation quinolones. *J. Inorg. Biochem.* 2011; Vol. 105, no. 10; 1273–1285; JCR IF (2010): 3.317. [COBISS.SI-ID 35309573]
- Pevec, Andrej, Tekavec, Martina, Demšar, Alojz. Cation-anion interactions involving hydrogen bonds: syntheses and crystal structures study of hexafluorotitanate(IV) salts with pyridine and methyl substituted pyridines. *Polyhedron*. [Print ed.], 2011, Vol. 30, no. 4; 549–555; doi: 10.1016/j.poly.2010.11.018. [COBISS.SI-ID 34788101]
- Prah, J., Maček, Jadran, Dražić, Goran. Precipitation of calcium carbonate from a calcium acetate and ammonium carbamate batch system. *J. Cryst. Growth*. [Print ed.], 2011; Vol. 324, issue 1; 229–234; doi: 10.1016/j.jcrysgro.2011.03.020. [COBISS.SI-ID: 24708391]
- Perdih, Franc, Perdih, Anton. Lignin selective dyes: quantum-mechanical study of their characteristics. *Cellulose (Lond.)*, 2011; Vol. 18, no. 5; 1139–1150; doi: 10.1007/s10570-011-9558-3. [COBISS.SI-ID 35113733]

**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

dr. Jernej Wagger

Mladi raziskovalci / Young Researchers

Jernej Baškovč

Jure Bezenšek

Črt Malavašič

Ana Novak

Benjamin Prek

Luka Šenica

Tehniki / Technicians

Tončka Kozamernik

Tatjana Stipanovič

POROČILO O REALIZACIJI PROGRAMA

ZNANSTVENI IN DRUGI RELEVANTNI DOSEŽKI

V letu 2011 smo nadaljevali z raziskavami v skladu z zastavljenimi cilji na naslednjih področjih:

1. (2+2) Cikloadicije in Michaelove adicije elektronsko revnih acetenov in drugih elektronsko revnih spojin na enaminone in sorodne spojine.

a) (2+2) Cikloadicije elektronsko revnih acetenov na enaminone.

Iz (*E*)-3-(dimetilamino)prop-2-en-1-onov, pripravljenih in karbocikličnih in heterocikličnih metil ketonov in DMFDMA, nastanejo pri cikloadiciji na dimetil acetilendikarboksilat dimetil (*2E,3E*)-2-((dimetilamino)metilen)-3-(2-substituirani-2-oksoetiliden)sukcinati z zelo dobrim izkoristkom, ki so izvrstni intermedijati v sintezi polisubstituiranih heterocikličnih spojin, ki jih je po drugih poteh težko pripraviti. (J. Bezenšek, T. Koleša, U. Grošelj, A. Meden, K. Stare, J. Svete, B. Stanovnik, *Curr. Org. Chem.* 2011, 15, 2530-2539).

b) Raziskave smo razširili na Michaelovo adicijo dietil azadikarboksilata na (*E*)-3-(dimetilamino)-1-fenilprop-2-en-1-on. Pri sledeči substituciji dimetilaminske skupine s primarnimi amini nastanejo (*E*)- in (*Z*)- dietil 1-((1-substituirani)amino)-3-okso-3-fenilprop-1-en-2-il)hidrazin-1,2-dikarboksilati, ki ciklizirajo v etil (5-benzoil-2-okso-3-substituirane-2,3-dihidro-1*H*-imidazol-1-il)karbamate. (J. Bezenšek, U. Grošelj, K. Stare, J. Svete, B. Stanovnik, *Tetrahedron* 2012, 68, 516-522).

2. Sinteza in aplikacija kiralnih solvacijskih reagentov

V zvezi s sintezami naravnih spojin smo ugotovili, da nekateri intermedijati kažejo lastnosti kiralnih solvacijskih reagentov. V tej zvezi so posebej pomembni (*S*)-1,6-dialkilpiperazin-2,5-dioni. Zato smo sintetizirali vrsto 16 novih (*S*)-1,6-dialkilpiperazin-2,5-dionov in (*3S,6S*)-1,3,6-trialkilpiperazin-2,5-dionov v treh stopnjah iz komercialno dosegljivih izhodnih spojin. Spojine so izvrstni reagenti za določevanje sestave enantiomernih zmesi, pa tudi za določanje absolutne konfiguracije pri amino kislinah in njihovih derivatih. (a) Č. Malavašič, U. Grošelj, A. Golobič, J. Bezenšek, B. Stanovnik, K. Stare, J. Wagger, J. Svete, *Tetrahedron: Asymmetry* 2011, 22, 629-640. (b) Č. Malavašič, B. Stanovnik, J. Wagger, J. Svete, *Tetrahedron: Asymmetry* 2011, 22, 1364-1371.

3. Enostavna sinteza 5-(2-aminofenil)-1*H*-pirazolov

Izdelali smo novo štiristopenjsko sintezo 1-substituiranih 5-(2-aminofenil)-1*H*-pirazolov kot nov tip histaminskih analogov in novih sinteznih gradnikov. Pri sintezi izhajamo iz 2-nitroacetofenona. Pri nadaljni ciklizaciji z monosubstituiranimi hidrazini nastanejo

5-(2-nitrofenil)-1*H*-pirazoli, pri katalitskem hidrogeniranju pa se nitro skupina reducira v amino skupino. Predstavlja sintezno aplikacijo enaminonske metodologije za sintezo histaminskih analogov in drugih funkcionaliziranih heterociklov. (M. Janjić, R. Perdih, U. Grošelj, D. Kralj, Č. Malavašič, A. Golobič, K. Stare, G. Dahmann, B. Stanovnik, J. Svete, *Helv. Chim. Acta* 2011, 94, 1703-1717).

4. Paralelna sinteza 1-substituiranih 5-(5-oksopirolidin-3-il)-1*H*-pirazol-4-karboksamidov.

V šestih stopnjah smo sintetizirali 1-substituirane 5-(5-oksopirolidin-3-il)-1*H*-pirazol-4-karboksamide, nove konformacijsko rigidne analoge histamina, iz itakonske kisline. Pet stopenj vodi do ustreznih pirazol-4-karboksilnih kislin, medtem ko je šesta stopnja paralelno amidiranje s primarnimi in sekundarnimi amini v raztopini. Ta zadnja stopnja predstavlja osnovo za sintezo novih knjižnic, pomembnih predvsem v farmacevtski industriji. (P. Perdih, J. Baškovič, G. Dahmann, U. Grošelj, D. Kočar, A. Novak, B. Stanovnik, J. Svete, *Synthesis* 2011, 2822-2832).

5. Enamino estri v sintezi heterocikličnih sistemov

- Uspelo nam je izdelati enostavno tristopenjsko sintezo substituiranih 1,2,7,8-tetrahidro-2,7-naftiridin-4-karboksilatov iz etil (3-ciano-6-etoksi-2-okso-1,2-dihidropiridin-4-il)acetata, ki nastane pri kondenzaciji dietil aceton-1,3-dikarboksilata z malononitrilom z DMFDMA, in amoniaka ali primarnih hidrazinov. (K. Pirnat, P. Šimunek, U. Uršič, J. Bezenšek, U. Grošelj, A. Golobič, A. Meden, J. Svete, B. Stanovnik *ARKIVOC* 2011, (VI), 120-129).
- Transformacije dimetil (2*E*,3*E*)-2-((dimetilamino)metilen)-3-(1-metil-2,5-dioksoimidazolidin-4-iliden)sukcinata s C-nukleofili.

Iz dimetil (2*E*,3*E*)-2-((dimetilamino)metilen)-3-(1-metil-2,5-dioksoimidazolidin-4-iliden)sukcinata, ki nastane pri (2+2)cikloadiciji na dimetilaminometilidenski derivat substituiranega hidantoina, nastanejo pri reakciji s C-nukleofili substituirani dimetil (2*H*-imidazol-4-il)-2-butanedioati in (2,5-diokso-4-imidazolidiniliden)sukcinati, ki nato ciklizirajo v 2*H*-pyrano(2,3-*d*)pirimidine, to je sintezne analoge naravnih indolovih alkaloidov aplisinopsinov. (U. Uršič, J. Svete, B. Stanovnik, *Heterocycles* 2011, 82, 1435-1445).

6. Nepričakovana transformacija obroča pri 4-aminopirazolidin-3-onih v *N*-amino-hidantoinu

Pri katalitskem hidrogeniranju (4*R**,5*R**)-4-benzoiloksikarbonilamino-5-fenilpirazolidin-3-ona v prisotnosti Pd/C je nepričakovano prišlo do pretvorbe obroča, tako da je nastal 3-amino-5-benzilimidazolidin-2,4-dion. Podobno se pod termičnimi pogoji premestijo tudi azometin imini v (*Z*)-5-benziliden-3-((*E*)-benzilidenamino)imidazolidin-2,4-dione. Struktura produktov je bila potrjena tudi z rentgensko analizo. (A. Novak, J. Bezenšek, U. Grošelj, A. Golobič, B. Stanovnik, J. Svete, *ARKIVOC* 2011, (VI), 18-28).

7. Regio- in stereoselektivne cikloadicije (1*Z*,4*R**,5*R**)-1-aruilmetiliden-4-benzoilamino-3-okso-5-fenilpirazolidin-1-ium-2-idov na metil akrilat.

Pri cikloadiciji (1*Z*,4*R**,5*R**)-1-arilmtiliden-4-benzoilamino-3-okso-5-fenilpirazolidin-1-ium-2-idov na metil akrilat nastanejo cikloadukti, katerih strukturo smo določili z NMR metodami in rentgensko difrakcijo. Glede na to, da smo opazili, da je regiospecifičnost adicije različna od tiste, ki so jo opazili Shibata in sodelavci, smo sklepali, da na to vplivajo elektronski efekti alfa substituentov pri alkil metakrilatnem tipu dipolarofila. (A. Novak, J.

Bezenšek, L. Pezdirc, U. Grošelj, M. Kasunič, Č. Podlipnik, B. Stanovnik, P. Šimunek, J. Svete, *Tetrahedron* 2011, 67, 9727-9735).

PLENARNA IN VABLJENA PREDAVANJA NA KONGRESIH IN SIMPOZIJIH

1. Stanovnik B.: [2+2] Cycloaddition of electron-poor acetylenes to enamines, enamine esters and related systems. Ring expansion reactions and rearrangements. 10. Tagung Iminiumsalze, 2011 Bartholomä. (vabljeno predavanje). (COBISS.SI-ID: 35383557)
2. Stanovnik B.: Cycloadditions and Michael addition of acetylenes and azodicarboxylate to enamines and related compounds. The 12th Annual Florida heterocyclic and synthetic conference., Gainesville, Florida, USA, 2011. (vabljeno predavanje). (COBISS.SI-ID 34864389)
3. Stanovnik B. et al. Enamines and related compounds in [2+2] and [4+2] cycloaddition reactions. 2011. Irbid, Jordan. (vabljeno predavanje). (COBISS.SI-ID 35196933)
4. Stanovnik B.: New synthetic methodologies: from amino acid via heterocyclic systems to natural products : [plenarno predavanje]. V: Symposium International de Chimie Hétérocyclique, Fès, 26-29 Octobre 2011. *Chimie Hétérocyclique: enjeux, valorisation et développement durable : resumes des conférences et communications*. [S. l.: s. n.], 2011, str. 29. (COBISS.SI-ID 35487493)
5. Stanovnik B., Bezenšek J., Koleša T., Uršič U., Grošelj U., Svete J.: Enamines and related compounds in [2+2] and [4+2] cycloaddition reactions : [vabljeno Blue Danube predavanje], v: Babjak M. (ur.): 14th Blue Danube Symposium on Heterocyclic Chemistry, June 26-29, 2011, Podbanské, Slovakia. *Program. Abstracts of papers. List of participants*. Bratislava: Publishing House of Slovak University of Technology, 2011, str. 18. (COBISS.SI-ID 35196933)
6. Stanovnik B.: Recent developments in enamine chemistry. Cycloadditions of acetylenes and related compound to enamines. 3rd International Conference on Heterocyclic Chemistry. Jaipur, India 2011. (vabljeno predavanje). (COBISS.SI-ID 35617285)
7. Stanovnik B.: Nove sintezne metodologije: od aminokislin preko heterocikličnih sistemov do naravnih spojin. Slovenski kemijski dnevi, Portorož, 2011. (plenarno predavanje). (COBISS.SI-ID 35407365)
8. Svete J.: Synthesis of novel (S)-1,6-dialkylpiperazine-2,5-diones and their application as chiral solvating agents in NMR spectroscopy. 10. Tagung Iminiumsalze, 2011 in Bartholomä. (vabljeno predavanje). (COBISS.SI-ID 35383813)
9. Svete J.: (S)-1,6-Dialkylpiperazine-2,5-diones as chiral solvating agents for [alpha]-acylamino esters. The 12th Annual Florida heterocyclic and synthetic conference, 2011. (vabljeno predavanje). (COBISS.SI-ID 34864645)
10. Svete J.: Synthesis and applications of some heterocyclic analogues of peptides : [vabljeno Blue Danube predavanje]. 14th Blue Danube Symposium on Heterocyclic Chemistry, 2011, Podbanské, Slovakia. (COBISS.SI-ID 35197189)

SODELOVANJE S TUJIMI UNIVERZAMI IN DRUGIMI INSTITUCIJAMI

1. 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)

2. Sodelovanje s prof. dr. W. Kantelehnjem z univerze v Stuttgartu (Nemčija) na področju amid acetalov in sorodnih spojin kot reagentov v organski sintezni kemiji (vodja: B. Stanovnik)
3. 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)
4. Zelo aktivno sodelovanje na področju sinteze heterocikličnih spojin s farmacevtsko tovarno BOEHRINGER-Biberach, Ingelheim (Nemčija) (vodja: J. Svete)

MEDNARODNO PRIZNANJE

B. Stanovnik: Izvoljen za častnega člana Italijanskega kemijskega društva (Societa Chimica Italiana) (2011)

ČLANSTVO V MEDNARODNIH ZNANSTVENIH ODBORIH KONGRESOV IN SIMPOZIJEV IN DRUGE ADMINISTRATIVNE FUNKCIJE

- B. Stanovnik
- a) Member of the Scientific Committee, European Colloquia of Heterocyclic Chemistry
 - b) Member of the Scientific Committee, Blue Danube Symposia of Heterocyclic Chemistry
 - c) Member of the Board of Electronic Journal ARKIVOC, Scientific Editor of ARKIVOC
 - d) Member of the Advisory Board, Advances in Heterocyclic Chemistry
 - e) Member of the Scientific Committee, TRAMECH Transmediterranean Symposia on Heterocyclic Chemistry
 - f) Member of International Advisory Committee of the IBN SINA International Conferences on Pure and Applied Heterocyclic Chemistry
 - g) Member of the Advisory Board, Trends in Heterocyclic Chemistry.
 - h) Predstojnik Oddelka za mednarodno sodelovanje in znanstveno koordinacijo Slovenske akademije znanosti in umetnosti, Ljubljana, Slovenija
 - i) Dekan razreda za naravoslovne znanosti Evropske akademije znanosti in umetnosti, Salzburg, Austria in legat EASA za Slovenijo za obdobje 2010–2014.
 - j) Member of Advisory Board, Croatica Chemica Acta
 - k) Member of Advisory Editorial Board, Journal of Heterocyclic Chemistry
 - l) 1998–2004 Member of the Scientific Advisory Board of the Organization for the Prohibition of Chemical Weapons, Den Haag, The Netherlands

RESEARCH PROGRAMME REPORT

SCIENTIFIC AND OTHER RELEVANT ACHIEVEMENTS

1. (2+2) Cycloadditions and Michael's additions of electron-poor acetylenes and other electron-poor compounds to enaminones and related systems.

a) (2+2) Cycloadditions of electron-poor acetylenes to enaminones.

By cycloaddition of (*E*)-3-(dimethylamino)prop-2-en-1-ones, prepared from carbocyclic and heterocyclic methyl ketones and DMFDMA, and dimethyl acetylenedicarboxylate dimethyl (2*E*,3*E*)-2-((dimethylamino)methylene)-3-(2-substituted-2-oxoethylidene)succinates are formed in good yields as versatile intermediates in the synthesis of polysubstituted heterocyclic compounds, which could not be so easily prepared by other methods. (J. Bezenšek, T. Koleša, U. Grošelj, A. Meden, K. Stare, J. Svete, B. Stanovnik, *Curr. Org. Chem.* 2011, 15, 2530-2539).

b) These investigations have been extended to the Michael's addition of diethyl azadicarboxylate to (*E*)-3-(dimethylamino)-1-phenylprop-2-en-1-one. By subsequent substitution of the dimethylamino group with primary amines (*E*)- in (*Z*)- diethyl 1-(1-substituted)amino)-3-oxo-3-phenylprop-1-en-2-yl)hydrazine-1,2-dicarboxylates are formed, which cyclize into ethyl (5-benzoyl-2-oxo-3-substituted-2,3-dihydro-1*H*-imidazol-1-yl)carbamates. (J. Bezenšek, U. Grošelj, K. Stare, J. Svete, B. Stanovnik, *Tetrahedron* 2012, 68, 516-522).

2. Synthesis and applications of chiral solvating reagents.

In connection with the synthesis of natural products we found that some intermediates show the properties of chiral solvating agents. Especially significant are (*S*)-1,6-dialkylpiperazine-2,5-diones. Therefore, 16 novel (*S*)-1,6-dialkylpiperazine-2,5-diones and (3*S*,6*S*)-1,3,6-trialkylpiperazine-2,5-diones were prepared in three synthetic steps from commercially available starting materials. The new compounds are excellent reagents for the determination of the composition of enantiomeric mixtures and for the determination of absolute configuration of amino acids and their derivatives. (a) Č. Malavašič, U. Grošelj, A. Golobič, J. Bezenšek, B. Stanovnik, K. Stare, J. Waggener, J. Svete, *Tetrahedron: Asymmetry* 2011, 22, 629-640. (b) Č. Malavašič, B. Stanovnik, J. Waggener, J. Svete, *Tetrahedron: Asymmetry* 2011, 22, 1364-1371.

3. A simple synthesis of 5-(2-aminophenyl)-1*H*-pyrazoles.

A new four-step synthesis of 1-substituted 5-(2-aminophenyl)-1*H*-pyrazoles as a new type of histamine analogs and new synthetic blocks has been developed from 2-nitroacetophenone. By further cyclization with monosubstituted hydrazines 5-(2-nitrophenyl)-1*H*-pyrazoles are formed, while by catalytic hydrogenation the nitro group is reduced to amino group. The synthesis represents a synthetic application of enaminone methodology for the preparation of histamine analogs and other functionalized heterocycles. (M. Janjić, R. Perdih, U. Grošelj, D. Kralj, Č. Malavašič, A. Golobič, K. Stare, G. Dahmann, B. Stanovnik, J. Svete, *Helv. Chim. Acta* 2011, 94, 1703-1717).

4. Parallel synthesis of 1-substituted 5-(5-oxopyrrolidin-3-yl)-1*H*-pyrazole-4-carboxamides.

Within the framework of this research we synthesized 1-substituted 5-(5-oxopyrrolidin-3-yl)-1*H*-pyrazole-4-carboxamides, new conformationally restricted analogs of histamine,

in six steps from itaconic acid. Five steps led to pyrazol-4-carboxylic acid, while the sixth step represents a parallel amidation with primary and secondary amines in solution. This last step is fundamental for preparation of the corresponding libraries, relevant for pharmaceutical industry. (P. Perdih, J. Baškovč, G. Dahmann, U. Grošelj, D. Kočar, A. Novak, B. Stanovnik, J. Svete, *Synthesis* 2011, 2822-2832).

5. Enamino esters in the synthesis of heterocyclic systems.

- a) We developed a simple three-step synthesis of substituted 1,2,7,8-tetrahydro-2,7-naphthyridine-4-carboxylates from ethyl (3-cyano-6-ethoxy-2-oxo-1,2-dihydropyridin-4-yl)acetate, which is formed by condensation of diethyl acetone-1,3-dicarboxylate with malononitrile with DMFDMA, followed by treatment with ammonia or primary hydrazines. (K. Pirnat, P. Šimunek, U. Uršič, J. Bezenšek, U. Grošelj, A. Golobič, A. Meden, J. Svete, B. Stanovnik *ARKIVOC* 2011, (VI), 120-129).

- b) Transformations of dimethyl (2*E*,3*E*)-2-((dimethylamino)methylene)-3-(1-methyl-2,5-dioxoimidazolidin-4-ylidene)succinate with C-nucleophiles.

From dimethyl (2*E*,3*E*)-2-((dimethylamino)methylene)-3-(1-methyl-2,5-dioxoimidazolidin-4-ylidene)succinate, formed by (2+2)cycloaddition to dimethylaminomethylidene derivative of substituted hydantoin with C-nucleophiles, substituted dimethyl (2*H*-imidazol-4-yl)-2-butanedioates and (2,5-dioxo-4-imidazolidinylidene)succinates are formed, which cyclize into 2*H*-pyrano(2,3-*d*)pyrimidines, synthetic analogs of natural indole alkaloids aplisynopsins. (U. Uršič, J. Svete, B. Stanovnik, *Heterocycles* 2011, 82, 1435-1445).

6. Unexpected transformation of 4-aminopyrazolidin-3-ones into *N*-aminohidantoines.

By catalytic hydrogenation of (4*R**,5*R**)-4-benzoyloxycarbonylamino-5-phenylpyrazolidin-3-one in the presence of Pd/C, transformation of the ring occurred unexpectedly in which 3-amino-5-benzylimidazolidine-2,4-dione was formed. Similarly, under thermal conditions rearrangements of azomethyne imines into (*Z*)-5-benzylidene-3-((*E*)-benzylidenamino)-imidazolidine-2,4-dione was observed. The structures of the products were also confirmed by X-ray analysis. (A. Novak, J. Bezenšek, U. Grošelj, A. Golobič, B. Stanovnik, J. Svete, *ARKIVOC* 2011, (VI), 18-28).

7. Regio- and stereoselective cycloadditions of (1*Z*,4*R**,5*R**)-1-arylmethylidene-4-benzoylamino-3-oxo-5-phenylpirazolidin-1-ium-2-ides to methyl acrylate.

By cycloaddition of (1*Z*,4*R**,5*R**)-1-arylmethylidene-4-benzoylamino-3-oxo-5-phenylpirazolidin-1-ium-2-ides to methyl acrylate the cycloadducts are formed, the structure of which was determined by NMR methods and X-ray diffraction. Since the regioselectivity was different from that observed by Shibata et al., we concluded that the regioselectivity is influenced by the electronic effects of alpha substituents of alkyl methacrylate type of dipolarophiles. (A. Novak, J. Bezenšek, L. Pezdirc, U. Grošelj, M. Kasunič, Č. Podlipnik, B. Stanovnik, P. Šimunek, J. Svete, *Tetrahedron* 2011, 67, 9727-9735).

PLENARY AND INVITED LECTURES AT CONGRESSES AND SYMPOSIA

1. Stanovnik B.: [2+2] Cycloaddition of electron-poor acetylenes to enamionones, enamino esters and related systems. Ring expansion reactions and rearrangements. 10. Tagung Iminiumsalze, 2011 Bartholomä. (Invited lecture). (COBISS.SI-ID: 35383557)

2. Stanovnik B.: Cycloadditions and Michael addition of acetylenes and azodicarboxylate to enaminones and related compounds. The 12th Annual Florida heterocyclic and synthetic conference., Gainesville, Florida, USA, 2011. (Invited lecture). (COBISS.SI-ID 34864389)
3. Stanovnik B. et al. Enaminones and related compounds in [2+2] and [4+2] cycloaddition reactions. 2011. Irbid, Jordan. (Invited lecture). (COBISS.SI-ID 35196933)
4. Stanovnik B.: New synthetic methodologies: from amino acid via heterocyclic systems to natural products : [Plenary lecture]. V: Symposium International de Chimie Hétérocyclique, Fès, 26-29 Octobre 2011. *Chimie Hétérocyclique: enjeux, valorisation et développement durable : resumes des conférences et communications*. [S. l.: s. n.], 2011, str. 29. (COBISS.SI-ID 35487493)
5. Stanovnik B., Bezenšek J., Koleča T., Uršič U., Grošelj U., Svete J.: Enaminones and related compounds in [2+2] and [4+2] cycloaddition reactions : [Invited Blue Danube lecture], v: Babjak M. (ur.): 14th Blue Danube Symposium on Heterocyclic Chemistry, June 26-29, 2011, Podbanské, Slovakia. *Program. Abstracts of papers. List of participants*. Bratislava: Publishing House of Slovak University of Technology, 2011, str. 18. (COBISS.SI-ID 35196933)
6. Stanovnik B.: Recent developments in enaminone chemistry. Cycloadditions of acetylenes and related compound to enaminones. 3rd International Conference on Heterocyclic Chemistry. Jaipur, India 2011. (Invited lecture). (COBISS.SI-ID 35617285)
7. Stanovnik B.: Nove sintezne metodologije: od aminokislin preko heterocikličnih sistemov do naravnih spojin. Slovenski kemijski dnevi, Portorož, 2011. (Plenary lecture). (COBISS.SI-ID 35407365)
8. Svete J.: Synthesis of novel (S)-1,6-dialkylpiperazine-2,5-diones and their application as chiral solvating agents in NMR spectroscopy. 10. Tagung Iminiumsalze, 2011 in Bartholomä. (Invited lecture). [COBISS.SI-ID 35383813]
9. Svete J.: (S)-1,6-Dialkylpiperazine-2,5-diones as chiral solvating agents for [alpha]-acylamino esters. The 12th Annual Florida heterocyclic and synthetic conference, 2011. (Invited lecture). (COBISS.SI-ID 34864645)
10. Svete J.: Synthesis and applications of some heterocyclic analogues of peptides : [Invited Blue Danube lecture]. 14th Blue Danube Symposium on Heterocyclic Chemistry, 2011, Podbanské, Slovakia. (COBISS.SI-ID 35197189)

COOPERATION WITH OTHER UNIVERSITIES AND FOREIGN INSTITUTIONS

1. Cooperation with Prof. Dr. A. O. Attanasi, University of Urbino (Italia): Reactions of 3-dimethylaminopropenoates and related enaminones with 1,2-diaza-1,3-butadienes (Principal investigator: B. Stanovnik)
2. Cooperation with Prof. Dr. W. Kantlehner, University of Stuttgart (Germany) in the field of amide acetals and related compounds as reagents in organic synthesis (Principal investigator: B. Stanovnik)
3. Cooperation with Prof. Dr. G. Maas, University of Ulm (Germany) in the field of acetals and related compounds as reagents in organic synthesis (Principal investigator: B. Stanovnik)
4. Cooperation in the field of the synthesis of heterocyclic compounds with the Pharmaceutical Company BOEHRINGER-Biberach, Ingelheim (Germany) (Principal investigator: J. Svete)

INTERNATIONAL AWARD

B. Stanovnik: Elected Honorary Member of the Italian Chemical Society (Societa Chimica Italiana) (2011)

MEMBERSHIP IN INTERNATIONAL SCIENTIFIC COMMITTEES OF INTERNATIONAL CONGRESSES AND SYMPOSIA AND EDITORIAL AND/OR ADVISORY BOARDS OF SCIENTIFIC JOURNALS

B. Stanovnik:

- a) Member of the Scientific Committee, European Colloquia of Heterocyclic Chemistry
- b) Member of the Scientific Committee, Blue Danube Symposia of Heterocyclic Chemistry
- c) Member of the Board of Electronic Journal ARKIVOC, Scientific Editor of ARKIVOC
- d) Member of the Advisory Board, Advances in Heterocyclic Chemistry
- e) Member of the Scientific Committee, TRAMECH Transmediterranean Symposia on Heterocyclic Chemistry
- f) Member of the International Advisory Committee of the IBN SINA International Conferences on Pure and Applied Heterocyclic Chemistry
- g) Member of the Advisory Board, Trends in Heterocyclic Chemistry
- h) Head of the Department for international cooperation and coordination of the Slovenian Academy of Sciences and Arts
- i) Dean of the class for Natural Sciences at the European Academy of Sciences and Arts, Salzburg, Austria and legat EASA for Slovenia for the period 2010–2014.
- j) Member of the Advisory Board, Croatica Chemica Acta
- k) Member of the Advisory Editorial Board, Journal of Heterocyclic Chemistry
- l) 1998-2004 Member of the Scientific Advisory Board of the Organization for the Prohibition of Chemical Weapons, Den Haag, The Netherlands

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

dr. Matjaž Bončina

doc. dr. Janez Cerar

dr. Jožica Dolenc

dr. Andrej Godec

izr. prof. dr. Barbara Hribar-Lee

prof. dr. Andrej Jamnik

prof. dr. Ksenija Kogej

prof. dr. Jože Koller

izr. prof. dr. Jurij Lah

dr. Miha Lukšič

doc. dr. Črtomir Podlipnik

prof. dr. Ciril Pohar

dr. Iztok Prislán

izr. prof. dr. Jurij Rešič

doc. dr. Matija Tomšič

doc. dr. Tomaž Urbič

prof. dr. Gorazd Vesnaver

prof. dr. Vojeslav Vlachy

Mladi raziskovalci / Young Researchers

Elizabeta Benigar

Sašo Čebašek

Jure Gujt

Gregor Hostnik

Matej Huš

Ana Kroflič

Andrej Lajovic

Andrej Mernik

Simona Sitar

Tehniki / Technicians

Anton Kelbl

Anton Kokalj

Cirila Peklaj

POROČILO O REALIZACIJI PROGRAMA

CILJI IN OSREDNJE TEME PROGRAMA

Naše raziskave prispevajo k razumevanju fizikalnokemijskih procesov, ki se dogajajo v živih bitjih in/ali so pomembni v industriji. Zanimajo nas predvsem raztopine in suspenzije nanodelcev, površinsko aktivnih snovi in polielektrolitov. Nekateri od slednjih so biološko pomembni (proteini in DNK), drugi, to so površinsko aktivne snovi in sintetični polielektroliti, pa se na široko uporabljajo v industriji. Raziskave stabilnosti proteinov in DNK, vezave ligandov na to molekulo 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 študentom ter kolegom v industriji.

ZNANSTVENI DOSEŽKI

1. Raziskovali smo hierarhično strukturirane sisteme »ISAsomov« na osnovi monogliceridov. Pokazali smo, da je ISAsome možno nedestruktivno imobilizirati v trdem polisaharidnem filmu [COBISS.SI-ID 35498245] (FK18). Ukvarjali smo se tudi z izpopolnjevanjem moderne metode dinamičnega sipanja svetlobe »multispeckle DLS« [COBISS.SI-ID 35499269]. Z metodo ozkokotnega rentgenskega sipanja smo raziskovali nanostrukturirane sisteme [COBISS.SI-ID 15373846; COBISS.SI-ID 15142422; COBISS.SI-ID 35499781; COBISS.SI-ID 35499525].
2. Z merjenem električne prevodnosti raztopin [COBISS.SI-ID 34793221] (FK11) in v povezavi z dielektrično relaksacijsko spektroskopijo [COBISS.SI-ID 35344389] (FK22) smo pro-

- učevali asociacijo ionov v razredčenih raztopinah ionskih tekočin v različnih topilih. Ugotovili smo, da ionske tekočine kažejo podobne lastnosti kot »običajni« elektroliti: gibljivost ionov, njihova asociacija in solvatacija so odvisne od velikost ionov in lastnosti topila.
3. Vpliv strukture elektrolita na gibljivost in asociacijo ionov v vodnih raztopinah smo raziskovali na natrijevih soleh benzojeve ter *o*-, *m*- in *p*-izomer salicilne kisline [COBISS.SI-ID 35419397] (FK13). Izkazalo se je, da položaj hidroksilne skupine na benzenovem obroču odločilno vpliva na gibljivost aniona.
 4. Dipolni moment in njegov pomen za možnost asociacije (dimerizacije) smo proučevali na primeru molekul acesulfama in saharina v raztopinah 1,4-dioksana [COBISS.SI-ID 34659333] (FK20). Očitno je v teh sistemih večina molekul v monomerni obliki solvatiranih z dioksanom.
 5. Vpliv temperature in dodane soli na termodinamiko micelizacije modelnih površinsko aktivnih snovi smo raziskovali z izotermno titracijsko kalorimetrijo [COBISS.SI-ID 35108869] (FK16), z merjenem električne prevodnosti in NMR-spektroskopijo [COBISS.SI-ID 35268613] (FK3). Ugotovili smo, da dodatek soli znatno zniža kritično micelno koncentracijo (*cmc*), medtem ko na entalpijo micelizacije bolj vpliva temperatura. Ioni se lahko – odvisno do njihove narave – tudi vgradijo v micle (salicilat) in povzročijo strukturne spremembe agregatov.
 6. Temeljne raziskave koloidnih sistemov smo razširili tudi na farmacevtsko [COBISS.SI-ID 35267077] (FK4) in tehnološko pomembne [COBISS.SI-ID 4640538] (FK9) sisteme.
 7. Za predelavo kondenzatorske celice ter nadgradnjo obstoječega sistema za merjenje električne prevodnosti raztopin za potrebe meritev dielektrične konstante topil smo pridobili patent [COBISS.SI-ID 34485509] (FK43).
 8. Pri obravnavi strukture nekaterih tekočih alifatskih alkoholov smo presojali uspešnost različnih modelov in metod: reverzne simulacije Monte Carlo (RMC), molekulske dinamike (MD) in simulacije MC z združenimi atomi [COBISS.SI-ID 35714053] (FK26). V ta namen smo razvili računalniški program za strukturno analizo molekulskih konfiguracij, ki vključuje tudi ustrezno klasifikacijo molekulskih gruč. Ugotovili smo, da dobimo najzanesljivejše rezultate s kombinacijo eksperimentalnih podatkov rentgenskega in nevtronskega sipanja ter parskih porazdelitvenih funkcij iz MD.
 9. Proučevali smo molekularne lastnosti kompleksov med natrijevim polistirensulfonatom in cetilpiridinijevim kloridom v vodnih raztopinah z dodatkom NaCl z metodami sipanja svetlobe [COBISS.SI-ID 34948101] (FK17). Meritve so pokazale, da specifična hidrofobna interakcija med poliionom in surfaktantnim ionom vodi do nastanka močnega kompleksa, ki je v vodi topen, in do visokih stopenj vezanja, kadar je v prebitku polielektrolit, medtem ko je asociacija šibka, kadar je v prebitku surfaktant.
 10. Izdelali smo ionoselektivno elektrodo za amfifilno zdravilno učinkovino doksazosin mezilat (DM) in študirali interakcije med DM in raznimi karagenani v vodnih raztopinah [COBISS.SI-ID 3094897] (FK8). Na osnovi vezavnih izoterm smo predlagali mehanizem sproščanja DM iz formulacije.
 11. Metode sipanja svetlobe smo uporabili za študij interakcij molekul fullerena z lipidnimi membranami [COBISS.SI-ID 2451279] (FK2) in za določitev velikosti nanodelcev ZnO v raztopini [COBISS.SI-ID 35003909] (FK7).
 12. Nadaljevali smo teoretične [COBISS.SI-ID 35358725] (FK5) in eksperimentalne [COBISS.SI-ID 34960645, 4226155] (FK12; FK23) raziskave raztopin elektrolitov in polielektrolitov ter njihove interakcije z različnimi protiioni. Analizirali smo odvisnost kemijskega potenciala in toplotne kapacitete v odvisnosti od gostote in deleža nevtralne komponente v mešanicah elektrolita in togih kroglic [COBISS.SI-ID 34867205] (FK19). Z Monte Carlo

simulacijami in razširjeno PB-teorijo, ki lahko obravnava toge večcentrične ione, smo raziskovali izvor privlaka med enako nabitima ravnima površinama [COBISS.SI-ID 4134763] (FK14).

13. Predstavili smo pregled naših teoretičnih študij sistemov, v katerih so določene prostostne stopnje zamrznjene (model adsorpcije). Na povabilo urednikov revije *Ann. rep. prog. chem. Sect C. Phys. chem.* smo napisali pregledni članek, v katerem smo opisali glavne dosežke pri uporabi »replika« integralske enačbe (ROZ) za sisteme, ki vsebujejo naboje [COBISS.SI-ID 35086853] (FK27).
14. Asociativno obliko Henderson-Abraham-Barker teorije smo priredili za MB-model vode ob hidrofobni površini. Izračunali smo gostotne profile in adsorpcijske koeficiente ter jih primerjali z rezultati simulacij. [COBISS.SI-ID 35430405] (FK15).
15. Teorije in modeli narave v kemiji: članek obravnava načine, s katerimi kemija teoretično pristopa k razlaganju narave [COBISS.SI-ID 35739141].
16. Podrobno smo raziskali termodinamiko zvitja/razvitja in strukturne značilnosti izooblik proteina invertaze v raztopinah gvanidinijevega hidroklorida [COBISS.SI-ID 34739205] (FK10). S kalorimetrijo in spektroskopijo smo določili značilnosti zvitja/razvitja struktur DNA, imenovanih G-kvadrupleksi, in jih pojasnili z ustreznim kinetičnim modelom [COBISS.SI-ID 34876421] (FK21). Raziskali smo termodinamiko in mehanizem interakcij ligandov, ki se vežejo v ožji kanal dvoverižne DNA, z G-kvadrupleksi [COBISS.SI-ID 35464965] (FK1). Izsledki raziskav na področju termodinamskih lastnosti DNA lasnic z notranjimi zankami so objavljeni kot poglavje v monografski publikaciji [COBISS.SI-ID 35489285] (FK35).

DRUGI RELEVANTNI DOSEŽKI

1. Ksenija Kogej: Polyelectrolyte-surfactant complexes. Invited lecture at 14th IUPAC International Symposium on Macromolecular Complexes, MMC-14 v Helsinkih [COBISS.SI-ID 35332613] (FK28).
Marija Bešter Rogač: Conductivity of electrolyte solutions – an outdated story? Invited lecture at 32nd International Conference on Solution Chemistry, La Grande Motte, France, [COBISS.SI-ID 35356165] (FK33).
Vojko Vlachy: Thermodynamics of aqueous solutions of aliphatic ionenes with halide counterions. Invited lecture at 32nd International Conference on Solution Chemistry, La Grande Motte, France [COBISS.SI-ID 35356421] (FK34).
Janez Cerar: Electric conductivity of aqueous solutions of partially neutralized poly(thiophene-3-ylacetic acid) as predicted by different polyelectrolyte theories – comparison with experiment, *European Polymer Congress 2011, June 26–July 1, 2011, Granada, Spain* [COBISS.SI-ID 35203845].
Janez Cerar: Optical and transport properties of poly(thiophene-3-ylacetic acid) and its sodium salt. *European Polymer Congress 2011, June 26–July 1, 2011, Granada, Spain* [COBISS.SI-ID 35204101].
2. Barbara Hribar Lee: Ion-specific effects in electrolyte and polyelectrolyte aqueous solutions : [Universität Duisburg Essen, Fakultät für Chemie, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, 10. 11. 2011]. Duisburg, 2011. [COBISS.SI-ID 35535621] (FK45).
Tomaž Urbič: Water and modeling of solvation [Laufer Center, Stony Brook Univeristy, Stony Brook, NY, USA, 2. 8. 2011]. [COBISS.SI-ID 35272197] (FK49).

Iztok Prislan: Calorimetric and spectroscopic investigation of DNA-DNA oligonucleotide reactions : [University of Nebraska Medical Center, College of Pharmacy seminar series, 1. 4. 2011]. Omaha, 2011. [COBISS.SI-ID 35493381] (*FK44*).

Iztok Prislan: ITC unleashed: an insight into binding properties of drugs : [University of Nebraska Medical Center, INBRE/GAANN Structural Biology and Molecular Biophysics Club, 25. 1. 2011]. Omaha, 2011. [COBISS.SI-ID 35493125] (*FK46*).

Iztok Prislan: Modern calorimetry: measuring heat changes associated with intra- and intramolecular interactions : [Creighton University, College of Arts and Sciences, Department of Physics Student Colloquium, 7. 4. 2011]. Omaha, 2011. [COBISS.SI-ID 35493637] (*FK47*).

3. Sodelovali smo v bilateralnih projektih z Avstrijo, Češko republiko, Poljsko, Madžarsko, Hrvaško, Flandrijo, Portugalsko, ZDA, Finsko in Francijo (CEA in Proteus). Sodelovali smo pri dveh COST projektih (D-43 M. Bešter Rogač in MP-0802 J. Lah). Za obdobje 2010–2014 smo pri NIH (National Institute of Health U.S.A.) pridobili grant 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).
4. Na obisku smo imeli nekaj uglednih raziskovalcev iz tujine, med drugimi tudi člana Ukrajinske akademije znanosti in umetnosti, profesorja Myroslava Holovka (tri mesece).
5. Ksenija Kogej: Sodelovanje s Krko d.d.; št. pog. I78-106259/2008; naslov »Študij in analiza farmacevtskih materialov«.
6. Jurij Lah: Sodelovanje s farmacevtsko firmo Lek, d.d. (BIO 02/2011).
7. Miha Lukšič: Nagrada Maksa Samca za doktorsko disertacijo s področja kemije za leto 2011 za nalogo Raziskave hidratacije polielektrolitov: primer vodnih raztopin alifatskih ionenov; mentorica izr. prof. dr. B. Hribar Lee.
8. Vojeslav Vlachy, je postal urednik »Journal of Condensed Matter Physics«, ICMP Lviv, Ukraine.
9. Iztok Prislan je bil na enoletnem (od 15.7.2010 do 15.7.2011) podoktorskem izpopolnjevanju v ZDA.

RESEARCH PROGRAMME REPORT

PROGRAMME 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 are invaluable for pharmaceutical industry and bioengineering. Wherever possible, the experimental research is 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. Structural investigations of hierarchically organized systems of ISAsomes based on mono-glycerides were performed. The results showed that it is possible to arrest the ISAsomes in a solid polysaccharide film in a non-destructive manner [COBISS.SI-ID 35498245] (*FK18*). We also explored some experimental and instrumental effects accompanying linear temperature-ramp by a modern multispeckle DLS technique. [COBISS.SI-ID 35499269]. Using small-angle x-ray scattering, we investigated nanostructured systems [COBISS.SI-ID 15373846; COBISS.SI-ID 15142422; COBISS.SI-ID 35499781; COBISS.SI-ID 35499525].
2. The investigation of ion association of ionic liquids in diluted solutions with different solvents has been continued by conductivity measurements [COBISS.SI-ID 34793221] (*FK11*) combined with dielectric relaxation spectroscopy [COBISS.SI-ID 35344389] (*FK22*). It turned out that ionic liquids behave like “common” electrolytes: the ion mobility, ion pairing and solvation strongly depend on the ion size and solvent properties.
3. The influence of the structure of electrolyte on mobility and ion association in aqueous solution has been studied on sodium salts of benzoic, o-salicylic, m-salicylic and p-salicylic acids [COBISS.SI-ID 35419397] (*FK13*). It has been found out that the position of hydroxyl group on the aromatic ring crucially affects the mobility of anion, possibly due to different interaction capacity with water molecules.
4. The dipole moment and its influence on ion pairing has been investigated on acesulfame and saccharine molecules in solution of 1,4-dioxane [COBISS.SI-ID 34659333] (*FK20*). It was concluded that most of the molecules of acesulfame and saccharin in 1,4-dioxane solution are in monomeric form, solvated by 1,4-dioxane molecules.
5. Using isothermal titration calorimetry we studied the influence of temperature and added salt on thermodynamics of micellization of some model surfactants [COBISS.SI-ID 35108869] (*FK16*) together with conductivity measurements and NMR spectroscopy [COBISS.SI-ID 35268613] (*FK3*). It can be concluded that the added salt lowers the critical micelle concentration whereas the enthalpy of micellization is more affected by temperature. According to their structure, ions can be incorporated in the micelles (salicylate) causing also structural modification of aggregates.
6. The basic research on colloidal systems has been extended to pharmaceutically [COBISS.SI-ID 35267077] (*FK4*) and technologically [COBISS.SI-ID 4640538] (*FK9*) important systems.
7. We obtained SI patent for the modification of an existing coaxial cylindrical capacitor cell and upgrading the system recently built for precise measuring of temperature dependent data in electrolyte solutions for determining relative permittivity of diverse solvents [COBISS.SI-ID 34485509] (*FK43*).
8. The quality of several modelling approaches for structural studies of some aliphatic liquid alcohols were tested by using Reverse Monte Carlo (RMC), molecular dynamics (MD), and united-atom MC simulations [COBISS.SI-ID 35714053] (*FK26*). For this purpose, a computer program for structural analysis of molecular configurations, together with appropriate aggregate classification scheme has been developed. It was found that the most conclusive results were obtained by a modelling approach with combination of neutron and X-ray diffraction data with pair radial distribution functions from MD simulations.
9. We studied molecular characteristics of complexes formed between sodium polystyrene-sulfonate and cetylpyridinium chloride in aqueous NaCl solutions by light scattering methods [COBISS.SI-ID 34948101] (*FK17*). The measurements have shown that the specific hydrophobic interaction between the polyion and surfactant ions leads to the formation of

a strong complex that is soluble in water up to high degrees of binding when the polyelectrolyte is in some excess, whereas the association is considerably weaker in the case of surfactant excess.

10. We have constructed an ion-selective membrane electrode for an amphiphilic drug doxazosin mesylate and studied its interactions with various carrageenans in aqueous solutions [COBISS.SI-ID 3094897] (FK8). On the basis of binding isotherms we have proposed a mechanism for DM release from tablet formulations.
11. Light scattering methods were used to study interactions between fullerene and lipid bilayer membranes [COBISS.SI-ID 2451279] (FK2) and for determining the size of ZnO nanoparticles in a solution [COBISS.SI-ID 35003909] (FK7).
12. We continued with our theoretical [COBISS.SI-ID 35358725] (FK5) and experimental [COBISS.SI-ID 34960645, 4226155] (FK12; FK23) investigations of electrolyte and polyelectrolyte solutions, paying special attention to interactions with counterions. The chemical potential and heat capacity dependence on the solution density and on the fraction of the neutral component in the electrolyte solution was analysed [COBISS.SI-ID 34867205] (FK19). Using Monte Carlo computer simulation and extended PB theory describing rigid multi-central ions we studied the origin of the attraction between two equally charged surfaces [COBISS.SI-ID 4134763] (FK14).
13. We presented a review of our theoretical study of partly quenched systems (modelling adsorption). The review paper was written upon the invitation of the editors of *Ann. rep. prog. chem. Sect C. Phys. chem.* journal. In this review we described the main achievements applying the “replica” integral equation theory (ROZ) to study the systems containing charges [COBISS.SI-ID 35086853] (FK27).
14. Associative version of Henderson-Abraham-Barker theory has been applied for the study of Mercedes-Benz model of water near hydrophobic surface. We calculated density profiles and adsorption coefficients and compared the results with Monte Carlo simulation data. [COBISS.SI-ID 35430405] (FK15).
15. Theories and models of the nature in chemistry: the article deals with theoretical ways of explaining nature in chemistry [COBISS.SI-ID 35739141].
16. We have performed a detailed study of thermodynamics of folding/unfolding process and structural features of invertase isoforms in guanidine hydrochloride solutions [COBISS.SI-ID 34739205] (FK10). The data obtained from calorimetric and spectroscopic measurements allowed us to develop a novel kinetic model to characterize the folding/unfolding process of unusual DNA structures, called G-quadruplexes [COBISS.SI-ID 34876421] (FK21). We shed some light on thermodynamics and mechanism of interactions of DNA minor groove binding ligands with G-quadruplexes [COBISS.SI-ID 35464965] (FK1). We contributed a chapter in a book where thermodynamic properties of DNA hairpins with internal loops were explained [COBISS.SI-ID 35489285] (FK35).

OTHER RELEVANT ACHIEVEMENTS

1. Ksenija Kogej: Polyelectrolyte-surfactant complexes. Invited lecture at 14th IUPAC International Symposium on Macromolecular Complexes, MMC-14 v Helsinkih [COBISS.SI-ID 35332613] (FK28).

Marija Bešter Rogač: Conductivity of electrolyte solutions – an outdated story? Invited lecture at 32nd International Conference on Solution Chemistry, La Grande Motte, France, [COBISS.SI-ID 35356165] (FK33).

Vojko Vlachy: Thermodynamics of aqueous solutions of aliphatic ionenes with halide counterions. Invited lecture at 32nd International Conference on Solution Chemistry, La Grande Motte, France [COBISS.SI-ID 35356421] (FK34).

Janez Cerar: Electric conductivity of aqueous solutions of partially neutralized poly(thiophene-3-ylacetic acid) as predicted by different polyelectrolyte theories – comparison with experiment, *European Polymer Congress 2011, June 26–July 1, 2011, Granada, Spain* [COBISS.SI-ID 35203845].

Janez Cerar: Optical and transport properties of poly(thiophene-3-ylacetic acid) and its sodium salt. *European Polymer Congress 2011, June 26–July 1, 2011, Granada, Spain* [COBISS.SI-ID 35204101].

2. Barbara Hribar Lee: Ion-specific effects in electrolyte and polyelectrolyte aqueous solutions : [Universität Duisburg Essen, Fakultät für Chemie, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, 10. 11. 2011]. Duisburg, 2011. [COBISS.SI-ID 35535621] (FK45).

Tomaž Urbič: Water and modeling of solvation [Laufer Center, Stony Brook University, Stony Brook, NY, USA, 2. 8. 2011]. [COBISS.SI-ID 35272197] (FK49).

Iztok Prislan: Calorimetric and spectroscopic investigation of DNA-DNA oligonucleotide reactions : [University of Nebraska Medical Center, College of Pharmacy seminar series, 1. 4. 2011]. Omaha, 2011. [COBISS.SI-ID 35493381] (FK44).

Iztok Prislan: ITC unleashed: an insight into binding properties of drugs : [University of Nebraska Medical Center, INBRE/GAANN Structural Biology and Molecular Biophysics Club, 25. 1. 2011]. Omaha, 2011. [COBISS.SI-ID 35493125] (FK46).

Iztok Prislan: Modern calorimetry: measuring heat changes associated with intra- and intramolecular interactions : [Creighton University, College of Arts and Sciences, Department of Physics Student Colloquium, 7. 4. 2011]. Omaha, 2011. [COBISS.SI-ID 35493637] (FK47).

3. Participation in bilateral projects with Austria, Czech Republic, Poland, Hungary, Croatia, Flanders, Portugal, USA, Finland, and France (CEA and Proteus). Participation in two COST projects (D-43 M. Bešter-Rogač and MP-0802 J. Lah). 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.
4. Visit of several renowned foreign researchers, including a three-month visit of Professor Myroslav Holovko, member of the National Academy of Sciences of Ukraine.
5. Ksenija Kogej: Cooperation with pharmaceutical company Krka, d. d., contract No. I78-106259/2008, “Studies and analysis of pharmaceutical materials”.
6. Jurij Lah: Cooperation with pharmaceutical company Lek, d. d. (BIO 02/2011).
7. In 2011, Miha Lukšič was awarded the Maks Samec Award in Chemistry for his doctoral dissertation “Studies on polyelectrolyte hydration: a case of aqueous solutions of aliphatic ionenes”, mentor: Assoc. Prof. Barbara Hribar Lee.
8. Vojko Vlachy was appointed the editor of “Journal of Condensed Matter Physics”, ICMP Lviv, Ukraine.
9. Iztok Prislan conducted his postdoctoral research (15.7.2010 – 15.7.2011) in the USA.

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. Slovenko Polanc

prof. dr. Marijan Kočever

prof. dr. Andrej Petrič

izr. prof. dr. Bojan Verček

prof. dr. Janez Košmrlj

doc. dr. Bogdan Štefane

doc. dr. Franc Požgan

doc. dr. Janez Cerkovnik

dr. Krištof Kranjc, znan. sod.

dr. Damijana Urankar

Nenad Maraš, univ. dipl. kem.

Mladi raziskovalci / Young Researchers

Vita Majce

Amadej Juranovič

Martin Gazvoda

Marko Krivec

Gregor Strle

Luka Rejc
Jure Vajs
Aljoša Bolje

Tehniki / Technicians
Zdenka Kadunc
Irena Povalej

POROČILO O REALIZACIJI PROGRAMA

CILJI PROGRAMA

Naša raziskovalna skupina razvija sinteze spojin za znanstvene in aplikativne namene pod okolju čim bolj prijaznimi pogoji (zelena kemija) in z visoko atomsko ekonomičnostjo. Program se tesno povezuje z več mednarodnimi programi, ki vključujejo raziskovalne skupine iz ZDA, Belgije, Argentine, Češke republike, Romunije, Madžarske in Hrvaške, kot tudi z raziskovalnimi programi več domačih akademskih institucij (UL Medicinska fakulteta, UL Fakulteta za farmacijo, IJS, Kemijski inštitut) in industrije (Krka, Lek). Poleg tega smo sodelovali v programu COST D40, ki se je v letu 2011 zaključil, in začeli sodelovati v programu COST CM0905 (Organocatalysis, ORCA).

OSREDNJE TEME PROGRAMA IN ZNANSTVENI DOSEŽKI

Raziskovali smo direktno funkcionalizacijo C–H vezi dušikovih heterocikličnih sistemov katalizirano s kovinami prehoda. Ugotovili smo, da kompleks $[\text{RuCl}_2(p\text{-cimen})]_2$ v kombinaciji z 1-fenilciklopentankarboksilno kislino in ustrezno bazo tvori učinkovit katalitski sistem za *orto*-ariliranje fenilne skupine 2- in 4-fenilpirimidinov z različnimi (hetero)aril halidi. Metoda omogoča enostavno pripravo multiarilnih sistemov, ki jih lahko najdemo v biološko pomembnih spojinah, konjugiranih materialih, ali kot ligande za kompleksiranje kovin. (B. Štefane, J. Fabris, F. Požgan, *Eur. J. Org. Chem.* **2011**, 3474. [COBISS.SI-ID 35023109]).

Biciklo[2.2.2]okteni predstavljajo zelo raznoliko in atraktivno skupino spojin, ki variira od naravnih produktov do funkcionalnih materialov. Poleg tega so zelo uporabni v sintezi, zato so pritegnili pozornost številnih organskih kemikov. V članku smo opisali učinkovito esterifikacijo derivatov dianhidrida biciklo[2.2.2]okt-7-en-2,3,5,6-tetrakarbonsilne kisline v ustrezne tetraestre. Pretvorba je bila izvedena pod vplivom mikrovalov in katalizirana z ionskimi tekočinami. Nastale tetraestre smo izomerizirali pod bazičnimi pogoji tako, da so nastali produkti pri katerih se je ohranila simetrija. Dokazali smo, da je izomerizacijo mogoče kontrolirati s prisotnostjo mostne benzamidne skupine, saj izomerizacija ne poteka stereoselektivno, če je benzamidna skupina *N*-metilirana. (J. Hren, F. Perdih, S. Polanc, M. Kočever, *Eur. J. Org. Chem.* **2011**, 3368. [COBISS.SI-ID 34968581]).

Na področju cikloadicij 2*H*-piran-2-onov smo opisali primerjavo reakcijskih poti pod termičnimi pogoji obsevanja z mikrovalovi in pri visokotlačnih pogojih pri sobni temperaturi, ki vodijo do nastanka različnih cikloaduktov. Pri cikloadicijah substituiranih 3-acilamino-2*H*-piran-2-onov z različnimi dienofili, ki so vsebovali vinilni fragment, smo izolirali in popolnoma karakterizirali končne cikloadukte (t. j. močno substituirane derivate anilina), kot tudi obe vrsti

intermediatov (alkoksicikloheksadienske ter 2-oksabiciklo[2.2.2]okt-5-enske sisteme). Raziskali smo tudi vplive na *ekso/endo* selektivnost in organokatalitski učinek baze (DABCO), ki je ključna za potek reakcijske sekvence. (A. Juranovič, K. Kranjc, F. Perdih, S. Polanc, M. Kočevar, *Tetrahedron*, **2011**, *67*, 3490. [COBISS.SI-ID 34893061]).

Opisali smo dve novi kristalni strukturi cikloaduktov, ki nastanejo z Diels–Alderjevo reakcijo med dvema 2*H*-piran-2-onoma in acetilenskima derivatoma. Opazili smo nekatere zanimive intra- in intermolekularne interakcije. (K. Kranjc, M. Kočevar, F. Perdih, *Acta Crystallogr., C Cryst. Struct. Commun.*, **2011**, *C67*, o201. [COBISS.SI-ID 34990341]).

Na področju kemije zdravil smo v minulem letu sodelovali s Karlovo univerzo v Pragi (in sicer s Fakulteto za farmacijo v Hradec Kralove), z Univerzo v Buenos Airesu, z Institutom Ruđer Bošković iz Zagreba ter s Fakulteto za farmacijo in Medicinsko fakulteto Univerze v Ljubljani. Ugotovili smo, da so 4-nitro-substituirani 1,3-diariltriazeni z dvema dodatnima elektronprivlačnima skupinama zelo citotoksične spojine. Te smo acilirali, da smo jim povečali topnost. *N*-Acilirane triazene lahko obravnavamo kot 'pro-zdravila' neaciliranih analogov. Aktivnost novih spojin je odvisna od značaja substituentov na *orto* mestu v benzenovih obročih. Izkazalo se je, da ima največji vpliv trifluorometilna skupina. Za 3-acetil-1,3-bis(4-nitro-2-klorofenil)triazen smo ugotovili visoko citotoksičnost proti različnim tumorskim celicam, vključno s tistimi, ki so odporne na razna zdravila. Omenjena spojina je tudi veliko bolj citotoksična za tumorske kot za normalne celice. (T. Čimbora, A. Brozović, I. Piantida, G. Fritz, A. Virag, B. Alič, V. Majce, M. Kočevar, S. Polanc, M. Osmak, *Eur. J. Med. Chem.* **2011**, *46*, 2971. [COBISS.SI-ID 34964997]).

Raziskovali smo tudi sintezo in biološko aktivnost novih fluor-vsebujočih hidrazonov. Več novih hidrazonov je učinkovitejših proti MDR-TB (to je proti sevom tuberkuloze, ki so odporni na več zdravil) kot klasična zdravila: izoniazid, ciprofloksacin in norfloksacin, njihove najnižje inhibitorne koncentracije (MIC) pa so bile za MDR-TB nižje, kot za *Mycobacterium tuberculosis*. Te spojine so pri MIC tudi netoksične na humane hepatocite, PBMC celice in humane SH-SY5Y celice. (E. Vavříková, S. Polanc, M. Kočevar, K. Horváti, S. Bősze, J. Stolaříková, K. Vávrová, J. Vinšová, *Eur. J. Med. Chem.* **2011**, *46*, 4937. [COBISS.SI-ID 35309061]).

Naslednji članek obravnava nove hidrazone izoniazida, povezane s CH fragmentom s substituiranimi anilini, ki so imeli elektron privlačne substituent; tovrstne spojine smo sintetizirali na dva načina. Skoraj vse spojine imajo podobno aktivnost proti *Mycobacterium tuberculosis* kot standard (INH, MIC 1 $\mu\text{mol L}^{-1}$), so pa učinkovitejše od njega proti sevom *Mycobacterium kansasii* (MIC 62.5–125 $\mu\text{mol L}^{-1}$). Najaktivnejši je *N*-(4-bromo-3-fluorofenil)-*N'*-(piridin-4-ilkarbonil)hidrazonoformamid. Spojina je stabilna v nevtralnih medijih, počasi hidrolizira v kisljih raztopinah in ima zelo spodbuden selektivnostni indeks (*SI* = 162), zaradi česar je primerna za nadaljnje raziskave. (E. Vavříková, S. Polanc, M. Kočevar, J. Košmrlj, K. Horváti, S. Bősze, J. Stolaříková, A. Imramovský, J. Vinšová, *Eur. J. Med. Chem.* **2011**, *46*, 5902. [COBISS.SI-ID 35456773]).

Namen dela naših raziskav na področju klik kemije je bila študija preferenčnega načina vezave 1-(2-pikolil)-4-fenil-1*H*-1,2,3-triazola (**pft**) na oktaedrične rutenijeve komplekse in ugotavljanje vpliva te vezave na antitumorsko aktivnost (razmnoževanje celic) rutenijevih koordinacijskih spojin s »pol-sendvič« strukturo. 1,4-disubstituiran 1,2,3-triazolni ligand, **pft**, pripravljen po principih klik-kemije, smo študirali kot nov kelatni ligand za Ru(II) komplekse. V članku je opisana priprava in strukturna karakterizacija, v glavnem z NMR spektroskopijo v raztopini in z rentgensko difrakcijsko analizo v trdnem stanju, štirih Ru(II) kompleksov.

V vseh produktih se **pft** močno veže na rutenij, bidentatno s piridinskim dušikovim atomom in z dušikom N2 s triazola, pri čemer nastane nekoliko zvit šestčlenski obroč. Kemijske lastnosti vodnih raztopin kompleksov smo študirali z UV-Vis in NMR spektroskopijo in jih primerjali s kemijskimi lastnostmi predhodno opisanih podobnih kompleksov. Testirali smo citotoksičnost spojin *in vitro* na dve humani tumorski celični liniji, eni občutljivi in drugi rezistentni na cisplatin ter rezultate primerjali s tistimi za cisplatin. Ena od spojin je pokazala večjo citotoksičnost na humane tumorske celice pljuč (A-549) kot cisplatin. (I. Bratsos, D. Urankar, E. Zangrando, P. Genova-Kalou, J. Košmrlj, E. Alessio, I. Turel, *Dalton Trans.* **2011**, *40*, 5188. [COBISS.SI-ID 34899461]).

Vezava dveh fleksibilnih **pft** (1-(2-pikolil)-4-fenil-1*H*-1,2,3-triazol) ligandov na d⁸ paladij da dvojni šestčlenski metalaciklični sistem, ki lahko razvije dinamično ravnotežje med dvema konformeroma. Prehod med dvema izo-energetskima izomeroma poteka preko enostopenjskega mehanizma, kar smo študirali eksperimentalno z NMR spektroskopijo pri različnih temperaturah in teoretično z DFT metodami. Naši rezultati lahko prispevajo k poglobljenemu razumevanju kovinskih kompleksov v katerih potekajo podobne konformacijske spremembe. Vredno je omeniti, da lahko bidentatni ligandi s fleksibilno strukturo kažejo spremembe v reaktivnosti kompleksov, kar je pomembno pri razvoju novih reagentov in katalizatorjev. (B. Pinter, A. Demšar, D. Urankar, F. De Proft, J. Košmrlj, *Polyhedron* **2011**, *30*, 2368. [COBISS.SI-ID 35308805]).

V nadaljevanju naših raziskav na področju klik ligandov in Pt(II) koordinacijskih spojin smo iz modelnega 1-(2-pikolil)-4-fenil-1*H*-1,2,3-triazolskega liganda (**pft**) prešli na komplekse analoga z diazenkarboksamidno skupino. Pokazali smo, da **pft** enota omogoča bidentatno koordinacijo na platino z dušikovim atomom piridina in N2 atomom triazola. To kemijo je mogoče enostavno prilagoditi za sintezo drugih organsko-anorganskih spojin, kar je v širšem smislu pomembna inovacija tega dela. (D. Urankar, A. Pevec, J. Košmrlj, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2011**, 1921. [COBISS.SI-ID 34863877]).

Kot del naših raziskav na področju klik kemije in kinolindionov, v sodelovanju s partnerji iz Češke republike, smo študirali, če 3-azidokinolin-2,4-(1*H*,3*H*)-dioni lahko služijo kot reakcijski partnerji pri Cu-kataliziranih [3+2] cikloadicijah s terminalnimi alkini. Ta raziskava je bila motivirana z našimi predhodnimi odkritji, da se 3-azidokinolin-2,4-(1*H*,3*H*)-dioni obnašajo precej drugače, kot bi normalno pričakovali za organske azide. (S. Kafka, S. Hauke, A. Salčinović, O. Soidinsalo, D. Urankar, J. Košmrlj, *Molecules* **2011**, *16*, 4070. [COBISS.SI-ID 35032581]).

V nadaljevanju raziskav v sodelovanju s partnerji iz Češke republike smo na področju kinolindionov študirali strukturo 2-hidroksi-2-metil-1-fenilindolin-3-ona. (A. Pevec, S. Kafka, J. Košmrlj, *Acta Cryst. E, Structure Reports* **2011**, *E67*, o3228. [COBISS.SI-ID 35526661]).

Z izotermno titracijsko kalorimetrijo in električno prevodnostjo smo študirali proces agregacije dodeciltrimetilamonijevega klorida (DTAC) v razredčenih raztopinah natrijevega salicilata (NaSal) pri temperaturah med 278.15 in 318.15 K. Izkazalo se je, da micelizacija poteče pri precej nižjih koncentracijah kot je bilo do sedaj znano za DTAC v čisti vodi in raztopinah NaCl. Tudi NMR eksperimenti so potrdili našo domnevo, da je študirani proces agregacije v razredčenih raztopinah DTAC v prisotnosti NaSal dejansko proces micelizacije. Ta je izzvan s hidrofobnim učinkom in močnimi elektrostatičnimi silami, kar se odraža v močno eksotermnem procesu in dramatičnem premiku kritične micelne koncentracije (cmc) k nižjim vrednostim. Naše ugotovitve predstavljajo pomemben prispevek k razumevanju specifičnih ionskih učinkov. Vse eksperimentalne in teoretične raziskave namreč kažejo, da je specifično obnašanje ionov vzajemno odvisno od površine, študiranih makromolekul in protiionov. (B.

Šarac, J. Cerkovnik, B. Ancian, G. Mériquet, G. Roger, S. Durand-Vidal, M. Bešter-Rogač, *Colloid Polym. Sci.* **2011**, 289, 1597. [COBISS.SI-ID 35268613]).

Raziskovali smo tudi kondenzacijo benzen-1,2-diamina s karboksilnimi kislinami, ki je pri katalizi z borovo kislino vodila do derivatov benzimidazola. Predstavili smo tudi katalitski cikel omenjene pretvorbe. (N. Maraš, M. Kočevar, *Helv. Chim. Acta* **2011**, 94, 1860. [COBISS.SI-ID 35453445]).

Prav tako smo uspešno raziskali »one-pot« sintezo 1-aril-1-fenilpropenov z zaporedjem več reakcij: alkiliranje-premestitev-metiliranje-izomerizacija. (N. Maraš, F. Perdih, M. Kočevar, *Cent. Eur. J. Chem.* **2011**, 9, 904. [COBISS.SI-ID 35266821]).

Razvili smo enostaven in direkten pristop do disubstituiranih nesimetričnih maleinamidov in fumaramidov. Piperidin se je izkazal kot najboljši katalizator, ki omogoča pri obsevanju z mikrovalovi pripravo želenih produktov visoke čistote, z dobrimi do odličnimi izkoristki in to v kratkih reakcijskih časih. (V. Majce, M. Kočevar, S. Polanc, *Tetrahedron Lett.* **2011**, 52, 3287. [COBISS.SI-ID 34965253]).

Opisali smo tudi postopke priprave spiro-2-oksazolinov, ki vsebujejo 3,4-dihidrokinoksalin-2(1*H*)-on, 3,4-dihidrobenzokinoksalin-2(1*H*)-on, 1,2-dihidropirido[2,3-*b*]pirazin-3(4*H*)-on ali 5,6-dihidropteridin-7(8*H*)-on in njihovih *N*-metil, *N*-etil ali *N*-(2-hidroksietil) derivatov. (I. Mušič, B. Verček, *Heterocycles* **2011**, 83, 2353. [COBISS.SI-ID 35471365]).

Na področju kemije zdravil smo v okviru sodelovanja s Fakulteto za farmacijo Univerze v Ljubljani sintetizirali in ovrednotili serijo 6-substituiranih 4-benziltio-1,3,5-triazin-2(1*H*)-onov kot inhibitorjev katapsina B. (I. Sosic, B. Mirković, S. Turk, B. Štefane, J. Kos, S. Gobec, *Eur. J. Med. Chem.* **2011**, 46, 4648. [COBISS.SI-ID 3068017]).

Doc. dr. Franc Požgan je v okviru postdoktorskega izpopolnjevanja (Marie-Curie štipendija) raziskoval pripravo multidentatnega liganda in njegovega kompleksa z Ru(II). Heterociklične ročice liganda omogočajo hkratno kompleksiranje šestih rutenijevih centrov, kar lahko vodi do povečanja aktivnosti takšnih kompleksov za morebitno uporabo v katalizi. (F. Požgan, L. Toupet, P. H. Dixneuf, *Dalton Trans.* **2011**, 40, 6619. [COBISS.SI-ID 35035909]).

Doc. dr. Bogdan Štefane je kot rezultat postdoktorskega izobraževanja (Fulbrightova štipendija) objavil članek o raziskavah signalnih poti bakterijske virulence. (S. Nakayama, I. Kelsey, J. Wang, K. Roelofs, B. Štefane, Y. Luo, V. T. Lee, H. O. Sintim, *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, 133, 4856. [COBISS.SI-ID 34845957]).

Naše raziskave so prispevale nova znanja na področju sinteze kompleksnih spojin, predvsem sinteze novih tipov gradnikov, in na področju razvoja novih sinteznih metod. Nove reakcije organske sinteze smo temeljito raziskali in pojasnili njihove značilnosti. Po drugi strani pa smo sintetizirali tudi nekaj novih biološko aktivnih spojin, ki kažejo močne antitumorske ali antibakterijske lastnosti.

DRUGI RELEVANTNI DOSEŽKI

UČBENIK

TRŠEK, Špela, CERKOVNIK, Janez. *Verige in obroči; Učbenik za kemijo v gimnaziji*. 1. izd. Ljubljana: Modrijan, 2011. 199 str., ilustr. ISBN 978-961-241-539-6. [COBISS.SI-ID 255825664].

UREDNIŠKO IN DRUGO DELO

Kot član uredniškega odbora znanstvene serije »*Topics in Heterocyclic Chemistry*«, ki jo izdaja založba Springer (Berlin/Heidelberg), je prof. S. Polanc sodeloval pri nastajanju 27. volumna. Knjiga je v elektronski verziji izšla v novembru 2011, v tiskani obliki pa v februarju 2012 (Series: Topics in Heterocyclic Chemistry, Vol. 27; Halogenated Heterocycles: Synthesis, Application and Environment; Iskra Jernej (ur.); XI, 316 strani. 546 slik, 2 v barvah).

Doc. J. Cerkovnik in dr. K. Kranjc, znanst. sod., sta delovala kot člana uredniškega sveta *Acta Chimica Slovenica* (ACSi).

Prof. M. Kočevar je deloval kot član uredniških odborov *Periodica Polytechnica*, *Chemical Engineering* (2003–) in *American Journal of Chemistry*.

Doc. F. Požgan je deloval kot član uredniškega odbora *Glasnik hemičara i tehnologa Bosne i Hercegovine* (2010–).

Prof. M. Kočevar je bil član upravnega odbora COST D40 Innovative Catalysis: New Processes and Selectivities (2006–2011).

Prof. M. Kočevar je član upravnega odbora COST CM0905 (Organocatalysis, ORCA). (2010–2014).

Sodelavca PS (prof. A. Petrič, prof. J. Košmrlj) intenzivno sodelujeta pri organizaciji in delovanju Infrastrukturnega centra na UL FKKT. IC UL FKKT je v letu 2011 nastal s preoblikovanjem Centra za NMR spektroskopijo na UL FKKT, ki je pod vodstvom prof. A. Petriča deloval od leta 1995. V IC na FKKT združujemo nakup, vzdrževanje in uporabo velike raziskovalne opreme. V sklopu centra, ki ga vodi prof. A. Petrič, delujejo tri enote: Enota za NMR spektroskopijo (vodja prof. A. Petrič), Enota za masno spektrometrijo (vodja prof. J. Košmrlj) in Enota za elektronsko mikroskopijo (vodja izr. prof. M. Marinšek). S to organizacijsko obliko omogočamo dostop do meritev z dragoceno opremo vsem zainteresiranim raziskovalcem s fakultete, kot tudi iz ostalih raziskovalnih ustanov.

Trije člani PS (prof. A. Petrič, doc. B. Štefane, doc. F. Požgan) sodelujejo pri delovanju Centra odličnosti EN-FIST v okviru raziskovalno razvojnega programa RRP11-Spojine za diagnostiko in terapijo v medicini.

PLENARNA IN VABLJENA PREDAVANJA

Člani programske skupine so bili avtorji več plenarnih in vabljenih predavanj na mednarodnih konferencah in tujih univerzah.

DRUGE DEJAVNOSTI IN PRIZNANJA

Člani programske skupine smo sodelovali v bilateralnih projektih z ZDA, Belgijo, Argentino, Hrvaško, Češko republiko, Romunijo in Madžarsko ter vodili več industrijskih in drugih projektov.

RESEARCH PROGRAMME REPORT

PROGRAMME GOALS

The goal of our research programme group is focused on the development of the syntheses of target molecules for scientific purposes and their applications, with emphasis on eco-friendly conditions and high atom economy. We have been pursuing these goals by creative work, through cooperation in various international research programmes, e.g. with USA, Belgium, Argentina, Czech Republic, Romania, Hungary and Croatia, as well as with research groups from various academic and research institutions in Slovenia (UL Faculty of Medicine, UL Faculty of Pharmacy, Jožef Stefan Institute, National Institute of Chemistry) and industrial, mainly pharmaceutical companies (Krka, Lek). We also cooperated in programmes COST D40 which ended in 2011, and started cooperation in COST CM0905 (Organocatalysis, ORCA).

RESEARCH TOPICS AND SCIENTIFIC ACHIEVEMENTS

Transition-metal-catalyzed direct functionalization of C–H bonds in azaheterocycles has been investigated. It was found out that the combination of $[\text{RuCl}_2(p\text{-cimen})]_2$ complex and 1-phenylcyclopentanecarboxylic acid in the presence of a suitable base forms an efficient catalyst system for *ortho*-arylation of phenyl group in 2- and 4-phenylpyrimidines with different (hetero)aryl halides. The method is useful in obtaining multiaryl systems which can be found in biologically relevant compounds, conjugate materials and ligands for metal complexes. (B. Štefane, J. Fabris, F. Požgan, *Eur. J. Org. Chem.* **2011**, 3474. [COBISS.SI-ID 35023109]).

Bicyclo[2.2.2]octenes represent a very diverse and challenging group of compounds, ranging from natural products to functional materials. They also represent a very synthetically useful class of compounds which has attracted attention of numerous organic chemists. Here, we described an efficient, microwave-assisted and ionic-liquid-catalyzed esterification of bicyclo[2.2.2]oct-7-ene-2,3,5,6-tetracarboxylic acid dianhydride derivatives into corresponding tetraesters. The latter were subjected to a base-catalyzed isomerization reaction, which proceeded with the retention of symmetry. We have proven that the isomerization is controlled by the presence of the bridgehead amide group since isomerization does not take place in a stereoselective way if the benzamide group has been *N*-methylated. (J. Hren, F. Perdih, S. Polanc, M. Kočevar, *Eur. J. Org. Chem.* **2011**, 3368. [COBISS.SI-ID 34968581]).

In the field of cycloaddition reaction of 2*H*-pyran-2-ones we have compared reaction pathways under microwave-assisted thermal conditions and under ambient temperature, high-pressure conditions, yielding different cycloadducts. Starting from a set of substituted 3-acylamino-2*H*-pyran-2-ones and various vinyl-containing dienophiles we were able to isolate and thoroughly characterize final cycloadducts (i.e. highly substituted aniline derivatives) as well as both types of intermediates (alkoxycyclohexadiene and 2-oxabicyclo[2.2.2]oct-5-ene systems). Furthermore, we have investigated the effects on the *exo/endo* selectivity, as well as elucidated the organocatalytic role of the base (DABCO) that is of crucial importance for this reaction sequence. (A. Juranovič, K. Kranjc, F. Perdih, S. Polanc, M. Kočevar, *Tetrahedron*, **2011**, 67, 3490. [COBISS.SI-ID 34893061]).

Two novel crystal structures of Diels–Alder cycloadducts obtained by the reaction of two 2*H*-pyran-2-ones and two acetylene derivatives have been presented and some interesting intra- and intermolecular interactions have been observed. (K. Kranjc, M. Kočevar, F. Perdih, *Acta Crystallogr., C Cryst. Struct. Commun.*, **2011**, C67, o201. [COBISS.SI-ID 34990341]).

In the area of medicinal chemistry we collaborated with the Charles University of Prague (i.e. Faculty of Pharmacy at Hradec Kralove), the University of Buenos Aires, the Ruđer Bošković Institute, Zagreb, as well as with the Faculty of Pharmacy and the Faculty of Medicine, University of Ljubljana. We have shown that 4-nitro-substituted 1,3-diaryltriazenes containing two additional electron-withdrawing groups are highly cytotoxic compounds. They were acylated at the triazene nitrogen to increase the solubility. *N*-Acyltriazenes can be considered as prodrugs of non-acylated triazenes. The antiproliferative activity of new compounds depends on the type of the substituent introduced at the *ortho* position of the benzene rings (trifluoromethyl group having the strongest influence). It was found out that 3-acetyl-1,3-bis(4-nitro-2-chlorophenyl)triazene exhibited high cytotoxicity against different tumor cell lines including drug-resistant carcinoma cell lines and higher cytotoxicity against tumor cells as compared to normal cells. (T. Čimbora, A. Brozović, I. Piantida, G. Fritz, A. Virag, B. Alič, V. Majce, M. Kočevar, S. Polanc, M. Osmak, *Eur. J. Med. Chem.* **2011**, *46*, 2971. [COBISS.SI-ID 34964997]).

Furthermore, new fluorine-containing hydrazones with antimycobacterial properties were prepared and investigated. Several hydrazones have shown higher activity against MDR-TB than INH, CPX and NFX and their MIC values are lower on MDR-TB than on *Mycobacterium tuberculosis*. Thus prepared compounds are non-toxic in MIC concentrations for human hepatocytes, PBMC cells and human SH-SY5Y neuroblastoma cells. (E. Vavříková, S. Polanc, M. Kočevar, K. Horváti, S. Bősze, J. Stolaříková, K. Vávrová, J. Vinšová, *Eur. J. Med. Chem.* **2011**, *46*, 4937. [COBISS.SI-ID 35309061]).

A new series of isoniazid hydrazones linked by the CH fragment with substituted anilines possessing electron-withdrawing substituents were prepared by two synthetic approaches. Nearly all compounds exhibited the same inhibitory effect against *Mycobacterium tuberculosis* as a standard (INH, MIC 1 $\mu\text{mol L}^{-1}$), they were more active against *Mycobacterium kansasii* (MIC 62.5–125 $\mu\text{mol L}^{-1}$). The best activity was observed with *N*-(4-bromo-3-fluorophenyl)-*N'*-(pyridin-4-ylcarbonyl). This compound is stable under neutral pH, and slowly hydrolyses under acidic conditions and exhibits promising selectivity index ($SI = 162$) that predetermines it for further screening. (E. Vavříková, S. Polanc, M. Kočevar, J. Košmrlj, K. Horváti, S. Bősze, J. Stolaříková, A. Imramovský, J. Vinšová, *Eur. J. Med. Chem.* **2011**, *46*, 5902. [COBISS.SI-ID 35456773]).

The aim of our investigations in the field of Click chemistry was to evaluate a preferential binding mode of 1-(2-picolyl)-4-phenyl-1*H*-1,2,3-triazole (**ppt**) on octahedral Ru complexes and to assess how it influences the antiproliferative (antitumor) activity of half-sandwich Ru coordination compounds. The 1,4-disubstituted 1,2,3-triazole ligand **ppt** was prepared by Click chemistry and was investigated as a novel chelating ligand for Ru(II) complexes. The preparation and structural characterization, mainly by NMR spectroscopy in solution and by X-Ray crystallography in the solid state, of four new Ru(II) complexes is reported. In all compounds **ppt** firmly binds to ruthenium in a bidentate fashion through the pyridyl nitrogen atom and the triazole N2, thus forming a puckered six-membered ring. Chemical behavior in aqueous solution of the complexes was studied by UV-Vis and NMR spectroscopy and compared to the behaviour of previously described analogues in view of their potential antitumor activity. Compounds were tested *in vitro* for cytotoxic activity against two human cancer cell lines, one sensitive and one resistant to cisplatin, and compared them with those with cisplatin. One of the compounds was found to be more cytotoxic than cisplatin against human lung squamous carcinoma cell line (A-549). (I. Bratsos, D. Urankar, E. Zangrando, P. Genova-Kalou, J. Košmrlj, E. Alessio, I. Turel, *Dalton Trans.* **2011**, *40*, 5188. [COBISS.SI-ID 34899461]).

The binding of two flexible **ppt** (1-(2-picolyl)-4-phenyl-1*H*-1,2,3-triazole) ligands to d⁸ palladium results in a dual six-membered metallacycle framework, which allows the development of a dynamic equilibrium between two conformers. The transition between the two nearly isoenergetic isomers follows a one-step mechanism, which was studied experimentally by variable temperature NMR spectroscopy and computationally by DFT methods. Our results can contribute to the knowledge of metal complexes undergoing similar conformational changes in general. It is worth noting that bidentate ligands with flexible backbone framework may exert important changes in the reactivity of complexes, holding great promise for the development of new reagents and catalysts. (B. Pinter, A. Demšar, D. Urankar, F. De Proft, J. Košmrlj, *Polyhedron* **2011**, *30*, 2368. [COBISS.SI-ID 35308805]).

Continuing our research work on platinum(II) coordination with the model **ppt** ligand 1-(2-picolyl)-4-phenyl-1*H*-1,2,3-triazole, we have applied this chemistry to more complex analogues, **ppt**-appended diazenecarboxamides. We have demonstrated that the **ppt** unit allows facile bidentate coordination to platinum through the 1,2,3-triazole N2 and the pyridine nitrogen atom. This is an important feature for the reactive moieties such as diazenecarboxamides. The work presented in this article could easily be adapted to the synthesis of other organic-inorganic conjugates of widespread interest, which is an important innovation. (D. Urankar, A. Pevec, J. Košmrlj, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2011**, 1921. [COBISS.SI-ID 34863877]).

As part of our continuous interest in Click chemistry and quinolinediones, also in collaboration with the partners from Czech Republic, we investigated whether 3-azidoquinoline-2,4(1*H*,3*H*)-diones are able to serve as partners in copper(I)-catalyzed [3+2] cycloaddition reaction with terminal alkynes. This research was motivated by our previous findings, namely that 3-azidoquinoline-2,4(1*H*,3*H*)-diones behave quite differently as normally expected for the organic azides. (S. Kafka, S. Hauke, A. Salčinović, O. Soidinsalo, D. Urankar, J. Košmrlj, *Molecules* **2011**, *16*, 4070. [COBISS.SI-ID 35032581]).

As a continuation of our research work in the field of quinolinediones, in collaboration with the partners from Czech Republic, we studied the crystal structure of 2-hydroxy-2-methyl-1-phenylindolin-3-one. (A. Pevec, S. Kafka, J. Košmrlj, *Acta Cryst. E, Structure Reports* **2011**, *E67*, o3228. [COBISS.SI-ID 35526661]).

The complex aggregation processes of dodecyltrimethylammonium chloride (DTAC) have been studied in dilute solutions of sodium salicylate (NaSal) by isothermal titration calorimetry and electrical conductivity measurement at temperatures between 278.15 K and 318.15 K. It was shown that micellization occurs at considerably lower critical micelle concentrations as previously reported for DTAC in water and NaCl solutions. NMR experiments also confirm our assumption that the studied aggregation process in diluted DTAC solutions in the presence of NaSal is a micellization process, provoked by hydrophobic effect and accompanied by strong electrostatic forces, resulting in an exothermic process and in a drastic shift of critical micelle concentration towards lower values. Our findings significantly contribute to better understanding of widely studied specific ion effect. Namely, experimental and theoretical investigations have pointed out that specific behaviour of the ions depends on the interacting part of the interface, macromolecule, or counterions. (B. Šarac, J. Cerkovnik, B. Ancian, G. Mériguet, G. Roger, S. Durand-Vidal, M. Bešter-Rogač, *Colloid Polym. Sci.* **2011**, *289*, 1597. [COBISS.SI-ID 35268613]).

We also investigated boric-acid-catalyzed condensation of benzene-1,2-diamine with carboxylic acids yielding benzimidazole derivatives. The catalytic cycle of this transformation was also described. (N. Maraš, M. Kočevar, *Helv. Chim. Acta* **2011**, *94*, 1860. [COBISS.SI-ID 35453445]).

Furthermore, we described a “one-pot” synthesis of 1-aryl-1-phenylpropenes using an alkylation-rearrangement-methylation-isomerization one-pot reaction sequence. (N. Maraš, F. Perdih, M. Kočevar, *Cent. Eur. J. Chem.* **2011**, *9*, 904. [COBISS.SI-ID 35266821]).

We have developed a simple and straightforward approach to disubstituted nonsymmetrical maleamides and fumaramides. Piperidine has proven to be the best catalyst for achieving nearly quantitative isomerization under microwave-assisted conditions, giving desired products of high purity, in good-to-excellent yields, and in short reaction times. (V. Majce, M. Kočevar, S. Polanc, *Tetrahedron Lett.* **2011**, *52*, 3287. [COBISS.SI-ID 34965253]).

We also described procedures for the preparation of spiro-2-oxazolines containing 3,4-dihydroquinoxalin-2(1*H*)-one, 3,4-dihydrobenzoquinoxalin-2(1*H*)-one, 1,2-dihydropyrido[2,3-*b*]pyrazin-3(4*H*)-one or 5,6-dihydropteridin-7(8*H*)-one, and their *N*-methyl, *N*-ethyl or *N*-(2-hydroxyethyl) derivatives. (I. Mušič, B. Verček, *Heterocycles* **2011**, *83*, 2353. [COBISS.SI-ID 35471365]).

In collaboration with the Faculty of Pharmacy, University of Ljubljana, we have synthesized and evaluated series of 6-substituted 4-benzylthio-1,3,5-triazin-2(1*H*)-ones as inhibitors of cathepsin B. (I. Sosic, B. Mirković, S. Turk, B. Štefane, J. Kos, S. Gobec, *Eur. J. Med. Chem.* **2011**, *46*, 4648. [COBISS.SI-ID 3068017]).

Within postdoctoral activities (Marie-Curie fellowship), Assistant Prof. F. Požgan investigated the preparation of multidentate ligand and its Ru(II) complex. The heterocyclic branches of the ligand allowed for simultaneous complexation of six ruthenium centers which can lead to enhanced activity of such complexes for potential use in catalysis. (F. Požgan, L. Toupet, P. H. Dixneuf, *Dalton Trans.* **2011**, *40*, 6619. [COBISS.SI-ID 35035909]).

Assistant Prof. B. Štefane was postdoctoral Fellow at the University of Maryland, USA (Fulbright fellowship). B. Štefane and coworkers published an article on the research of signaling pathways involved in bacterial virulence. (S. Nakayama, I. Kelsey, J. Wang, K. Roelofs, B. Štefane, Y. Luo, V. T. Lee, H. O. Sintim, *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, *133*, 4856. [COBISS.SI-ID 34845957]).

OTHER RELEVANT ACHIEVEMENTS

TEXTBOOK

Tršek, Špela, Cerkovnik, Janez. *Verige in obroči; Učbenik za kemijo v gimnaziji*. 1. Ed. Ljubljana: Modrijan, 2011. 199 p., illus. ISBN 978-961-241-539-6. [COBISS.SI-ID 255825664].

EDITORIAL AND OTHER WORK

Prof. S. Polanc participated as an editorial board member of the scientific series “*Topics in Heterocyclic Chemistry*”, published by Springer (Berlin/Heidelberg), in the creation of the 27th volume in the series. An electronic version of this volume appeared in November 2011 and paper version in February 2012. (Series: *Topics in Heterocyclic Chemistry*, Vol. 27; Halogenated Heterocycles: Synthesis, Application and Environment; Iskra Jernej (Ed.); XI, 316 p. 546 illus., 2 in color.).

Assistant Prof. J. Cerkovnik and Dr. K. Kranjc served as members of the editorial board of the journal *Acta Chimica Slovenica* (ACSi).

Prof. M. Kočevar was editorial board member in two journals: *Periodica Polytechnica, Chemical Engineering* (2003–), and *American Journal of Chemistry*.

Assistant Prof. F. Požgan was a member of the editorial board of *Glasnik hemičara i tehnologa Bosne i Hercegovine* (2010–).

Prof. M. Kočevar was a member of the Management Committee COST D40 Innovative Catalysis: New Processes and Selectivities (2006–2011).

Prof. M. Kočevar was a member of the Management Committee COST CM0905 (Organocatalysis, ORCA). (2010–2014).

Members of the research group (Prof. A. Petrič and Prof. J. Košmrlj) have been involved in the organisation and operation of the Infrastructure Centre (IC) at the Faculty of Chemistry and Chemical Technology (FCCT). In 2011, IC FCCT was formed by reorganisation of the NMR Spectroscopy Centre at FCCT, which had operated since 1995 under the direction of Prof. A. Petrič. The mission of IC is the purchase, maintenance and operation of the most expensive research instruments at FCCT. IC is led by Prof. A. Petrič and is divided into the following three units: the unit for NMR spectroscopy (led by Prof. A. Petrič), the unit for mass spectrometry (led by Prof. J. Košmrlj) and the unit for electron microscopy (led by Associate Prof. M. Marinšek).

Three members of the programme group (Prof. A. Petrič and Assistant Professors B. Štefane and F. Požgan) are collaborating with the Centre of Excellence EN-FIST within the framework of the research and development programme RRP11- Compounds for Diagnosis and Therapy in Medicine.

PLENARY AND INVITED LECTURES

Several plenary and invited lectures were delivered at international conferences and foreign universities.

OTHER ACTIVITIES

Our group has also participated in bilateral research projects with USA, Belgium, Argentina, Croatia, Czech Republic, Romania and Hungary, as well as coordinated several industrial and other research projects.

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

prof. dr. Aleksander Pavko

prof. dr. Marin Berovič

prof. dr. Igor Plazl

izr. prof. dr. Jana Zagorc Končan

izr. prof. dr. Urška Šebenik

izr. prof. dr. Polona Žnidaršič Plazl

doc. dr. Ana Lakota

doc. dr. Andreja Zupančič Valant

doc. dr. Andreja Žgajnar Gotvajn

doc. dr. Mitja Lakner

Mladi raziskovalci / Young Researchers

Janja Babič

Mirjan Švagelj

Andrej Pohar

Matjaž Berlot

Ervin Šinkovec

Martin Lubej

Uroš Novak

Aleš Ručigaj

Strokovni sodelavec / Research Assistant

Branko Alič, univ. dipl. kem.

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 mehanizmov. Raziskovalni program je 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: *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 ekonomske 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-adsorbcijskih 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 s 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 manjparametrskih 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 večparametrskega 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 jih lahko izvajamo pri nizkih temperaturah. V zadnjem času se raziskave in aplikacije koncentriranja s pomočjo membranskih separacij 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 postavitev 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 (heterogeni 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 dolo-

čamo 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

Mikroinkapsulacija 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 mikroinkapsulacijo je mnogo. V nekaterih primerih jedro izoliramo od njegove okolice in tako preprečimo izhlapevanje lahkih 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 zelo 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 mikroinkapsulacije 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 zelenih 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. Procesna 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 »zeleni« topila v organskih sintezah, 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 tumorskim, protivnetnim in imunostimulacijskim učinkovim, 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 odpadkov 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 aktivnostmi, 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 odpadkov z bioremediacijo. Iz ekonomskega aspekta je razgra-

dnja 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 ekspaniranim slojem
- Izolacija aktivnih farmacevtskih učinkovin
- Reološko kompleksne tekočine

Polimerno inženirstvo

- Raziskave na področju mikroinkapsulacije
- 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
- Mehanske 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

ZNANSTVENI DOSEŽKI / SCIENTIFIC ACHIEVEMENTS

IZVIRNI ZNANSTVENI ČLANKI / ORIGINAL SCIENTIFIC ARTICLES

1. KALČÍKOVÁ, Gabriela, ZAGORC-KONČAN, Jana, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Evaluation of landfill leachate quality with battery of biotests. *Acta Environ. Univ. Comen.*, 2011, vol. 19, suppl. 1, str. 145–150. [COBISS.SI-ID 34893573]
2. TIŠMA, Marina, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona, VASIĆ-RAČKI, Đurđa, ZELIĆ, Bruno. Optimization of laccase production by *Trametes versicolor* cultivated on industrial waste. *Appl. biochem. biotechnol.*, str. 1–11, doi: 10.1007/s12010-011-9401-1. [COBISS.SI-ID 35452165]
3. BERLOT, Matjaž, BEROVIČ, Marin. *Saccharomyces cerevisiae* inoculum heat shock treatment : new method for enhanced glycerol production in wine. *Chem. biochem. eng. q.*, 2011, vol. 25, no. 2, str. 241–245. [COBISS.SI-ID 35328261]
4. ŠOŠTARIČ, Maja, KLINAR, Dušan, BRICELJ, Mihael, GOLOB, Janvit, BEROVIČ, Marin, LIKOZAR, Blaž. Growth, lipid extraction and thermal degradation of the microalga *Chlorella vulgaris*. *New biotechnology*, str. 1–16, doi: 10.1016/j.nbt.2011.12.002. [COBISS.SI-ID 35597317]
5. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, ZAGORC-KONČAN, Jana, COTMAN, Magda. Fenton's oxidative treatment of municipal landfill leachate as an alternative to biological process. *Desalination*. [Print ed.], 2011, vol. 275, no. 1/3, str. 269–275, doi: 10.1016/j.desal.2011.03.017. [COBISS.SI-ID 34925829]
6. KALČÍKOVÁ, Gabriela, VÁVROVÁ, Milada, ZAGORC-KONČAN, Jana, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Evaluation of the hazardous impact of landfill leachates by toxicity and biodegradability tests. *Environ. technol.*, 2011, vol. 32, no. 12, str. 1345–1353, doi: 10.1080/09593330.2010.536785. [COBISS.SI-ID 35186949]
7. ELTEREN, Johannes Teun van, ŠLEJKOVEC, Zdenka, ARČON, Iztok, BEESTON, Michael Philip, POHAR, Andrej. Multiple kinetic Langmuir modeling to predict the environmental behaviour of As(V) in soils. *J. environ. monit. (Print)*, 2011, vol. 13, no. 6, str. 1625–1633, doi: 10.1039/C1EM10104H. [COBISS.SI-ID 35001349]
8. BABIČ, Janja, PAVKO, Aleksander. Enhanced enzyme production with the pelleted form of *D. squalens* in laboratory bioreactors using added natural lignin inducer. *J. ind. microbiol. biotech.*, str. 1–9, doi: 10.1007/s10295-011-1036-2. [COBISS.SI-ID 35421957]
9. KALČÍKOVÁ, Gabriela, VÁVROVÁ, Milada, ZAGORC-KONČAN, Jana, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Seasonal variations in municipal landfill leachate quality. *Management of environmental quality*, 2011, vol. 22, no. 5, str. 612–619, doi: 10.1108/14777831111159734. [COBISS.SI-ID 35310853]
10. STOJKOVIČ, Gorazd, PLAZL, Igor, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. L-Malic acid production within a microreactor with surface immobilised fumarase. *Microfluid. nanofluid. (Print)*, 2011, vol. 10, no. 3, str. 627–635, doi: 10.1007/s10404-010-0696-y. [COBISS.SI-ID 34517509]
11. POHAR, Andrej, LAKNER, Mitja, PLAZL, Igor. Parallel flow of immiscible liquids in a microreactor : modeling and experimental study. *Microfluid. nanofluid. (Print)*, str. 1–10, doi: 10.1007/s10404-011-0873-7. [COBISS.SI-ID 35319813]

12. MARQUES, M. P. C., FERNANDES, P., CABRAL, Joaquim M. S., ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona, PLAZL, Igor. Continuous steroid biotransformations in microchannel reactors. *New biotechnology*, str. 1–8, doi: 10.1016/j.nbt.2011.10.001. [COBISS.SI-ID 35504645]
13. ZUPANČIČ-VALANT, Andreja, ŽIBERNA, Lovro, PAPA HARILAOU, Yannis, ANAYI-OTOS, Andreas, GEORGIIOU, Georgios C. The influence of temperature on rheological properties of blood mixtures with different volume expanders : implications in numerical arterial hemodynamics simulations. *Rheol. Acta*, 2011, vol. 50, no. 4, str. 389–402, doi: 10.1007/s00397-010-0518-x. [COBISS.SI-ID 34768133]
14. NAKRST, Jana, BISTAN, Mirjana, TIŠLER, Tatjana, ZAGORC-KONČAN, Jana, DERCO, Ján, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Comparison of Fenton's oxidation and ozonation for removal of estrogens. *Water sci. technol.*, 2011, vol. 63, no. 10, str. 2131–2137, doi: 10.2166/wst.2011.339. [COBISS.SI-ID 35108357]
15. KALČÍKOVÁ, Gabriela, VÁVROVÁ, Milada, ZAGORC-KONČAN, Jana, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Seasonal variations in municipal landfill leachate quality. *Management of environmental quality*, 2011, vol. 22, no. 5, str. 612–619, doi: 10.1108/14777831111159734. [COBISS.SI-ID 35310853]
16. LIKOZAR, Blaž, KRAJNC, Matjaž. Kinetic modeling of the peroxide cross-linking of polymers : from a theoretical model framework to its application for a complex polymer system. *Chem. eng. process.*, 2011, vol. 50, no. 2, str. 200–210, doi: 10.1016/j.cep.2010.12.007. [COBISS.SI-ID 35022597]
17. ČIMBORA, Tamara, BROZOVIĆ, A., PIANTANIDA, I., FRITZ, G., VIRAG, Andrej, ALIČ, Branko, MAJCE, Vita, KOČEVAR, Marijan, POLANC, Slovenko, OSMAK, Maja. Synthesis and biological evaluation of 4-nitro-substituted 1,3-diaryltriazenes as a novel class of potent antitumor agents. *Eur. j. med. chem.*, 2011, vol. 46, issue 7, str. 2971–2983, doi: 10.1016/j.ejmech.2011.04.024. [COBISS.SI-ID 34964997]
18. LIKOZAR, Blaž, KRAJNC, Matjaž. Cross-linking of polymers : kinetics and transport phenomena. *Ind. eng. chem. res.*, 2011, vol. 50, no. 3, str. 1558–1570, doi: 10.1021/ie1015415. [COBISS.SI-ID 35022341]
19. KAJTNA, Jernej, KRAJNC, Matjaž. UV crosslinkable microsphere pressure sensitive adhesives : influence on adhesive properties. *Int. j. adhes. adhes.*, 2011, vol. 31, no. 1, str. 29–35, doi: 10.1016/j.ijadhadh.2010.09.004. [COBISS.SI-ID 34530309]
20. KAJTNA, Jernej, KRAJNC, Matjaž. Solventless UV crosslinkable acrylic pressure sensitive adhesives. *Int. j. adhes. adhes.*, 2011, vol. 31, no. 8, str. 822–831, doi: 10.1016/j.ijadhadh.2011.08.002. [COBISS.SI-ID 35323397]
21. ALIČ, Branko, ŠEBENIK, Urška, KRAJNC, Matjaž. Differential scanning calorimetric examination of melamine-formaldehyde microcapsules containing decane. *J. appl. polym. sci.*, 2011, vol. 119, no. 6, str. 3687–3695, doi: 10.1002/app.33077. [COBISS.SI-ID 34469637]
22. ŠINKOVEC, Ervin, KRAJNC, Matjaž. Phase transfer catalyzed Wittig reaction in the microtube reactor under liquid-liquid slug-flow pattern. *Org. process res. dev.*, 2011, vol. 15, no. 4, str. 817–823, doi: 10.1021/op200061j. [COBISS.SI-ID 35054853]
23. MOHORIČ, Ines, ŠEBENIK, Urška. Anionic ring-opening polymerization of octamethylcyclotetrasiloxane in emulsion above critical micelle concentration. *Polymer (Guildf.)*, 2011, vol. 52, no. 5, str. 1234–1240, doi: 10.1016/j.polymer.2011.01.025. [COBISS.SI-ID 34739717]
24. MOHORIČ, Ines, ŠEBENIK, Urška. Semibatch anionic ring-opening polymerization of octamethylcyclotetrasiloxane in emulsion. *Polymer (Guildf.)*, 2011, vol. 52, no. 20, str. 4423–4428, doi: 10.1016/j.polymer.2011.07.045. [COBISS.SI-ID 35309317]

OBJAVLJENI ZNANSTVENI PRISPEVKI NA KONFERENCAH (VABLJENA PREDAVANJA)
PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTIONS (INVITED LECTURES)

25. BEROVIČ, Marin. Biosynthesis of antitumor extra and intracellular fungal polysaccharides of *Ganoderma lucidum* and *Grifola frondosa* by submerged and solid state cultivation : [plenary lecture]. V: *World Congress on Biotechnology : 21–23 March 2011 : Hyderabad International Convention Centre (HICC), Hyderabad, India*. [S. l.: s. n.], 2011, str. 173. [COBISS.SI-ID 35209733]
26. KALČÍKOVÁ, Gabriela, ZAGORC-KONČAN, Jana, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Changes in phytotoxicity of landfill leachate due to different treatment methods. V: ROŠ, Milenko (ur.). *Simpozij z mednarodno udeležbo Vodni dnevi 2011, Portorož, 19.–20. oktober 2011. Zbornik referatov : [simpozij z mednarodno udeležbo]*. Ljubljana: Slovensko društvo za zaščito voda, 2011, str. 122–135. [COBISS.SI-ID 35496197]
27. HABIJANIČ, Jožica, BEROVIČ, Marin, BOH, Bojana, WRABER-HERZOG, Branka. Immunostimulatory and immunomodulating effects of *Ganoderma lucidum* polysaccharides from submerged cultivation : [plenary lecture]. V: WASSER, Solomon Pavlovich (ur.), JAKOPOVICH, Ivan (ur.). *6th International Medicinal Mushroom Conference, September 25–29, 2011, Zagreb, Croatia*. Zagreb: [s. n.], 2011, str. 4–5. [COBISS.SI-ID 35519749]
28. ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. Miniaturizacija naprav v biotehnologiji = Miniaturization in biotechnology. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14–16 september 2011*. Maribor: FKKT, 2011, str. 1–6. [COBISS.SI-ID 35398405]

OBJAVLJENI ZNANSTVENI PRISPEVKI NA KONFERENCAH / PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTIONS

29. BABIČ, Janja, PAVKO, Aleksander. Kinetika razbarvanja izbranih azo barvil z ligninolitičnimi encimi glive *Dichomitus squalens* = Decolourization kinetics of selected azo dyes with ligninolytic enzymes produced by basidiomycete *Dichomitus squalens*. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14-16 september 2011*. Maribor: FKKT, 2011, str. 1-6. [COBISS.SI-ID 35398661]
30. BERLOT, Matjaž, BEROVIČ, Marin, FEFER, Dušan, LISJAK, Klemen. Influence of static homogeneous magnetic field treatment on *Saccharomyces cerevisiae* in wine fermentation. V: XXXIV World Congress of Vine and Wine, 20-27th June 2011, Porto, Portugal. *The wine construction*. [Lisboa: Ministry for Agriculture, Rural Development and Fishing], 2011, str. [1-4]. [COBISS.SI-ID 35209221]
31. BERLOT, Matjaž, BEROVIČ, Marin. Influence of magnetic nanoparticles on wine fermentation. V: XXXIV World Congress of Vine and Wine, 20-27th June 2011, Porto, Portugal. *The wine construction*. [Lisboa: Ministry for Agriculture, Rural Development and Fishing], 2011, str. [1-5]. [COBISS.SI-ID 35208709]
32. BEROVIČ, Marin, MAKOVEC, Darko, BOŠKOVIĆ, Suzana, BERLOT, Matjaž. New method for fast separation of magnetized yeast *Saccharomyces cerevisiae* from sparkling wine : [lecture]. V: XXXIV World Congress of Vine and Wine, 20-27th June 2011, Porto, Portugal. *The wine construction*. [Lisboa: Ministry for Agriculture, Rural Development and Fishing], 2011, str. [1-5]. [COBISS.SI-ID 35208197]

33. ČOP, Matej, TISU, Matjaž, PAVKO, Aleksander. Povečevalni kriteriji laboratorijskega mešalnega bioreaktorja = Scale-up criteria for laboratory stirred tank bioreactor. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14-16 september 2011*. Maribor: FKKT, 2011, str. 1-6. [COBISS.SI-ID 35395333]
34. KALČÍKOVÁ, Gabriela, ZAGORC-KONČAN, Jana, ZUPANČIČ, Marija, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Assessment of phytotoxicity of landfill leachates. V: KALOGERAKIS, Nicolas (ur.), FAVA, Fabio (ur.). *5th European Bioremediation Conference : July 4-7, 2011, Chania, Crete, Greece*. [S. l.: s. n.], 2011, str. [1-5]. [COBISS.SI-ID 35206661]
35. KALČÍKOVÁ, Gabriela, ZAGORC-KONČAN, Jana, ENGLANDE, A. J., ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Treatment of mature municipal landfill leachate by Fenton oxidation : [lecture]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14-16 september 2011*. Maribor: FKKT, 2011, str. 1-9. [COBISS.SI-ID 35398917]
36. LUBEJ, Martin, PLAZL, Igor. Sinteza ogljikovih nanocevk v mikrosistemu = Carbon nanotubes synthesis in microsystem. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14-16 september 2011*. Maribor: FKKT, 2011, str. 1-6. [COBISS.SI-ID 35396101]
37. LUKAČ, Bojana, ZUPANČIČ-VALANT, Andreja. The investigation of rubber modified bitumen as a binder for the production as asphalt mixture. V: NIKOLAIDES, A. F. (ur.). *5th International Conference Bituminous Mixtures and Pavements, Thessaloniki, 1 - 3 June 2011. Proceedings*. Thessaloniki: Aristotle University of Thessaloniki, 2011, str. 133-142. [COBISS.SI-ID 1771111]
38. NOVAK, Uroš, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. Uporaba mikrofluidnih naprav za ekstrakcijo proteinov v dvofaznih vodnih sistemih = Use of microfluidic devices for the protein extraction in aqueous two phase systems. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14-16 september 2011*. Maribor: FKKT, 2011, str. 1-8. [COBISS.SI-ID 35397637]
39. STOJKOVIČ, Gorazd, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. Mikroreaktorji z imobiliziranimi celicami = Microreactors with immobilised cells. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14-16 september 2011*. Maribor: FKKT, 2011, str. [1-4]. [COBISS.SI-ID 35398149]
40. ZAGORC-KONČAN, Jana, KALČÍKOVÁ, Gabriela, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Comprehensive evaluation of local municipal landfill leachate quality - a useful tool for appropriate treatment management : [lecture]. V: *13th International Waste Management and Landfill Symposium, 3-7 October 2011, S. Margherita di Pula (Cagliari), Sardinia, Italy. Proceedings : Sardinia 2011*. [S. l.: s. n.], 2011, str. [1-7]. [COBISS.SI-ID 35440645]
41. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, KALČÍKOVÁ, Gabriela, ZAGORC-KONČAN, Jana. Lab-scale simulation of biological treatment of mature landfill leachate : [lecture]. V: *13th International Waste Management and Landfill Symposium, 3-7 October 2011, S. Margherita di Pula (Cagliari), Sardinia, Italy. Proceedings : Sardinia 2011*. [S. l.: s. n.], 2011, str. [1-8]. [COBISS.SI-ID 35440389]
42. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, TRATAR-PIRC, Elizabeta, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona, ZAGORC-KONČAN, Jana. Impact of ionic liquid 1-butyl-3-methylpyridinium dicyanamide to anaerobic treatment. V: *Green Process Engineering 2011, 6 - 8 December, Seri Pacific Hotel, Kuala Lumpur, Malaysia. Proceedings*. [S. l.: s. n.], 2011, str. [1-10]. [COBISS.SI-ID 35623429]

OBJAVLJENI POVZETKI ZNANSTVENIH PRISPEVKOV NA KONFERENCAH (VABLJENA PREDAVANJA) / PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTION ABSTRACTS (INVITED LECTURES)

43. ŠVAGELJ, Mirjan, BEROVIČ, Marin, WRABER-HERZOG, Branka, SIMČIČ, Saša. Beta-glucan content and immunomodulating effects of culinary-medicinal maitake mushroom, *Grifola frondosa* polysaccharides from submerged and solid-state cultures : [invited lecture]. V: WASSER, Solomon Pavlovich (ur.), JAKOPOVICH, Ivan (ur.). *6th International Medicinal Mushroom Conference, September 25-29, 2011, Zagreb, Croatia*. Zagreb: [s. n.], 2011, str. 14-15. [COBISS.SI-ID 35520261]
44. HABIJANIČ, Jožica, BEROVIČ, Marin, BOH, Bojana, WRABER-HERZOG, Branka. Immunostimulatory and immunomodulating effects of lingzhi or reishi medicinal mushroom, *Ganoderma lucidum* polysaccharides from submerged cultivation : [invited lecture]. V: WASSER, Solomon Pavlovich (ur.), JAKOPOVICH, Ivan (ur.). *6th International Medicinal Mushroom Conference, September 25-29, 2011, Zagreb, Croatia*. Zagreb: [s. n.], 2011, str. 15-16. [COBISS.SI-ID 35520517]
45. ŠVAGELJ, Mirjan, BEROVIČ, Marin, WRABER-HERZOG, Branka, SIMČIČ, Saša. Influence of inoculum type and process parameters in a bubble column and stirred tank bioreactor on maitake medicinal mushroom, *Grifola frondosa* biomass and polysaccharide production and pellet formation : [invited lecture]. V: WASSER, Solomon Pavlovich (ur.), JAKOPOVICH, Ivan (ur.). *6th International Medicinal Mushroom Conference, September 25-29, 2011, Zagreb, Croatia*. Zagreb: [s. n.], 2011, str. 28-29. [COBISS.SI-ID 35520773]
46. BEROVIČ, Marin. Magnetic separation of wine yeast biomass from the sparkling wine : [invited lecture]. V: *World Congress on Biotechnology : 21-23 March 2011 : Hyderabad International Convention Centre (HICC), Hyderabad, India*. [S. l.: s. n.], 2011, str. 13. [COBISS.SI-ID 35209989]

**SAMOSTOJNI ZNANSTVENI SESTAVKI ALI POGlavJA V MONOGRAFSKIH PUBLIKACIJAH
INDEPENDENT SCIENTIFIC COMPONENT PARTS OR CHAPTERS IN MONOGRAPHS**

47. BEROVIČ, Marin. Redox potential and scale-Up. V: MOO-YOUNG, Murray (ur.). *Comprehensive biotechnology*. Amsterdam [etc.]: Elsevier, cop. 2011, str. 1-26. [COBISS.SI-ID 35683077]
48. BEROVIČ, Marin. Sterilization in biotechnology. V: MOO-YOUNG, Murray (ur.). *Comprehensive biotechnology*. Amsterdam [etc.]: Elsevier, cop. 2011, str. 136-150. [COBISS.SI-ID 35682565]
49. BOH, Bojana, BEROVIČ, Marin. *Ganoderma lucidum* production of pharmaceuticals. V: LIONG, Min-Tze (ur.). *Bioprocess sciences and technology*, (Biochemistry research trends). Hauppauge: Nova Science Publishers, 2011, str. 233-268. [COBISS.SI-ID 1439324]
50. CVJETKO, M., ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. Ionic liquids within microfluidic devices. V: KOKORIN, Alexander (ur.). *Ionic liquids: theory, properties, new approaches*. Rijeka: Intech, 2011, str. 681-700. [COBISS.SI-ID 34846469]
51. PAVKO, Aleksander. Fungal decolourization and degradation of synthetic dyes some chemical engineering aspects. V: EINSCHLAG, Fernando S. García (ur.). *Waste water - treatment and reutilization*. Rijeka: Intech, 2011, str. 65-88. <http://www.intechopen.com/articles/show/title/fungal-decolourization-and-degradation-of-synthetic-dyes-some-chemical-engineering-aspects>. [COBISS.SI-ID 34932741]

52. ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona, PLAZL, Igor. Microbioreactors. V: MOO-YOUNG, Murray (ur.). *Comprehensive biotechnology*. Amsterdam [etc.]: Elsevier, cop. 2011, str. 289-301. [COBISS.SI-ID 35324421]
53. ŠEBENIK, Urška, KRAJNC, Matjaž. Acrylic-clay nanocomposites by suspension and emulsion polymerization. V: MITTAL, Vikas (ur.). *Polymer nanocomposites by emulsion and suspension polymerization*, (RSC nanoscience & nanotechnology, no. 16). Cambridge: RSC Pub., cop. 2011, str. 111-123. [COBISS.SI-ID 34554629]

DRUGI RELEVANTNI DOSEŽKI / OTHER RELEVANT ACHIEVEMENTS

PATENT / PATENT

1. BEROVIČ, Marin, HERGA, Marko, PIVEC, Aleksandra, ČELAN, Štefan. Postopek uporabe temperaturnega šoka na vcepku vinskih kvasovk *Saccharomyces cerevisiae* za povišanje produkcije glicerola v alkoholni fermentaciji vinskega mošta : SI 23185 (A), 2011-04-29. Ljubljana: Urad Republike Slovenije za intelektualno lastnino, 2011. 9 str., ilustr. [COBISS.SI-ID 33557509]

RAZVOJNI PROJEKTI / INDUSTRIAL RESEARCH AND DEVELOPMENT

2. Aplikativne raziskave na področju adsorpcije / *Applied Research in the Field of Adsorption*
Nosilec / *Principal Researcher*: A. Pavko
Financer / *Sponsored by*: Lek d.d., Ljubljana.
3. Razvoj novega materiala za jedro panela iz ekspaniranega perlita – faza V / *Development of New Material for Panel Core from Expanded Perlite - V*
Nosilec / *Principal Researcher*: I. Plazl
Financer / *Sponsored by*: Trimo Trebnje d.d., Trebnje
4. Inkapsulacija / *Encapsulation*
Nosilec / *Principal Researcher*: M. Krajnc
Financer / *Sponsored by*: Melamin d.d.
5. Raziskave in razvoj na področju melaminskih pen / *Research and Development of Melamine Foams*
Nosilec / *Principal Researcher*: M. Krajnc
Financer / *Sponsored by*: Melamin d.d.

KONČNA POROČILA O REZULTATIH RAZISKAV / FINAL RESEARCH REPORTS

6. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, ZAGORC-KONČAN, Jana, KALČIKOVÁ, Gabriela. *Kronična strupenost odpadnih vod iz proizvodnje nitrooksina : delovno poročilo : strogo zaupno*. Ljubljana: Univ. v Ljubljani, Fak. za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za kemijsko, biokemijsko in ekološko inženirstvo, 2011. 15 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 35448069]
7. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, ZAGORC-KONČAN, Jana, KALČIKOVÁ, Gabriela. *Strupenost in biorazgradljivost gentamicin sulfata : delovno poročilo : strogo zaupno*. Ljubljana: Univ. v Ljubljani, Fak. za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za kemijsko, biokemijsko in ekološko inženirstvo, 2011. 17 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 34751493]

8. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, ZAGORC-KONČAN, Jana, KALČÍKOVÁ, Gabriela. *Strupenost in biorazgradljivost kalijevega klavulanata : delovno poročilo : strogo zaupno*. Ljubljana: Univ. v Ljubljani, Fak. za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za kemijsko, biokemijsko in ekološko inženirstvo, 2011. 12 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 34750725]
9. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, ZAGORC-KONČAN, Jana, KALČÍKOVÁ, Gabriela. *Strupenost in biorazgradljivost nitrooksina : delovno poročilo : strogo zaupno*. Ljubljana: Univ. v Ljubljani, Fak. za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za kemijsko, biokemijsko in ekološko inženirstvo, 2011. 14 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 34751237]
10. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, ZAGORC-KONČAN, Jana, KALČÍKOVÁ, Gabriela. *Strupenost in biorazgradljivost odpadnih vod iz proizvodnje nitrooksina : delovno poročilo : strogo zaupno*. Ljubljana: Univ. v Ljubljani, Fak. za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za kemijsko, biokemijsko in ekološko inženirstvo, 2011. 31 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 35121157]

UREDNIŠTVO / EDITORIAL WORK

11. *Acta chimica slovenica*. Pavko, Aleksander (glavni urednik 2006-, gostujoči urednik 2010). [Tiskana izd.]. Ljubljana: Slovensko kemijsko društvo: =Slovenian Chemical Society, 1993-. ISSN 1318-0207. <http://acta.chem-soc.si/>. [COBISS.SI-ID 14086149]
12. *Biotechnology annual review*. Berovič, Marin (član uredniškega odbora 2002-). Amsterdam; Lausanne; New York; Oxford; Shannon; Tokyo: Elsevier. ISSN 1387-2656. [COBISS.SI-ID 23725061]
13. *Chemical and biochemical engineering quarterly*. Plazl, Igor (urednik 2009-), Žnidaršič Plazl, Polona (član uredniškega odbora 2009-). Zagreb: Croatian Society of Chemical Engineers, 1987-. ISSN 0352-9568. [COBISS.SI-ID 49186]
14. *European water management*. Zagorc-Končan, Jana (član uredniškega odbora 1998-). Lavenham: Terence Dalton Publishers, 1998-. ISSN 1461-6971. [COBISS.SI-ID 1607450]
15. *International journal of medicinal mushrooms*. Berovič, Marin (član uredniškega odbora 2010-). New York, NY: Begell House. ISSN 1521-9437. [COBISS.SI-ID 1979418]
16. *Journal of biotechnology & biomaterials*. Berovič, Marin (član uredniškega odbora 2011-). Henderson: OMICS Publishing Group. [COBISS.SI-ID 35604485]
17. *Kemija u industriji*. Plazl, Igor (član uredniškega odbora 2009-). [Print ed.]. Zagreb: Hrvatsko društvo kemijskih inženjera i tehnologa, 1952-. ISSN 0022-9830. [COBISS.SI-ID 747524]
18. *Phytomedicine*. Berovič, Marin (član uredniškega odbora 2010-). Stuttgart; Jena; New York: Fischer, 1994-. ISSN 0944-7113. [COBISS.SI-ID 17566981]
19. *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]

PREDAVANJA NA TUJIH UNIVERZAH ALI RAZISKOVALNIH INSTITUCIJAH / LECTURES AT FOREIGN UNIVERSITIES OR RESEARCH INSTITUTIONS

20. BEROVIČ, Marin. *Application of magnetic nano particles for separation of wine yeast biomass from the sparkling wine : Institute for Wine Biotechnology, University of Stellenbosch, 12. August 2011*. Stellenbosch, 2011. [COBISS.SI-ID 35517957]

21. BEROVIČ, Marin. *Application of magnetic nano particles for separation of wine yeast biomass from the sparkling wine : Technical University of Lisbon, Instituto Superior Técnico, Department of Bioengineering, 17th June 2011*. Lisbon, 2011. [COBISS.SI-ID 35207429]
22. BEROVIČ, Marin. *Submerged and solid state biosynthesis of antitumor extra and intracellular fungal polysaccharides of Ganoderma lucidum and Grifola frondosa : Technical University of Lisbon, Instituto Superior Técnico, Department of Bioengineering, 17th June 2011*. Lisbon, 2011. [COBISS.SI-ID 35207173]
23. BEROVIČ, Marin. *New aspects in wine technology and process engineering : Institute for Wine Biotechnology, University of Stellenbosch, 11. August 2011*. Stellenbosch, 2011. [COBISS.SI-ID 35518213]
24. PAVKO, Aleksander. *Fungal bioremediation : biochemical engineering aspects of dye removal from waste waters : [Institute of Chemical Technology, Prague, Czech Republic, 15. 11. 2011]*. Prague, 2011. [COBISS.SI-ID 35648517]
25. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. *Green solvents in modern technologies : [Slovak University of Technology in Bratislava, Faculty of Chemical and Food Technology, Bratislava, December 20th, 2011]*. Bratislava, 2011. [COBISS.SI-ID 35629829]
26. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. *Persistent organic chemicals in waters and wastewaters : [Tulane University School of Public Health & Tropic Medicine, 15th September, 2011, New Orleans, Louisiana, USA]*. New Orleans, 2011. [COBISS.SI-ID 35406085]
27. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. *Resistant chemicals: their environmental impact and fate: Erasmus programme : [Vilnius Gediminas Technical University, Vilnius, Lithuania, 22. 2., 23. 2. 2011]*. Vilnius, 2011. [COBISS.SI-ID 34827781]
28. ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. *Implementation of microfluidic devices in biotechnology : [Bulgarian Academy of Sciences, The Stephan Angeloff Institute of Microbiology, Laboratory of Applied Biotechnology, 29th April 2011]*. Plovdiv, 2011. [COBISS.SI-ID 34975749]
29. ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. *Micro bioprocess engineering : [Faculty of Food Technology Osijek, Josip Juraj Strossmayer University of Osijek, 6th June 2011]*. Osijek, 2011. [COBISS.SI-ID 35101701]
30. ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. *The use of microfluidic devices for biocatalytic processes : [Bulgarian Academy of Sciences, The Stephan Angeloff Institute of Microbiology, Laboratory of Applied Biotechnology, 28th April 2011]*. Sofia, 2011. [COBISS.SI-ID 34976005]

BILATERALNI MEDNARODNI ZNANSTVENI PROJEKTI / BILATERAL INTERNATIONAL RESEARCH PROJECTS

Slovenija – Kitajska <i>Slovenia – China</i>	Produkcija farmacevtsko aktivnih spojin <i>Grifola frondosa</i> s postopkom gojenja na trdnem in tekočem gojišču / <i>Production of Pharmaceutically Active Compounds from Grifola Frondosa by Solid State and Submerged Cultivation</i> Nosilec / <i>Principal Researcher</i> : M. Berovič
Slovenija – Bolgarija <i>Slovenia – Bulgaria</i>	Mikrobiološke transformacije steroidov v sistemu mikrokanalov / <i>Microbial Transformations of Steroids within a Microchannel System</i> Nosilka / <i>Principal Researcher</i> : P. Žnidaršič Plazl

Slovenija – Portugalska <i>Slovenia – Portugal</i>	Implementacija mikrostrukturiranih naprav v procese biotransformacij in bioseparacij / <i>Implementation of Microstructured Devices in Biotransformation and Bioseparation Processes</i> Nosilec / <i>Principal Researcher</i> : I. Plazl
Slovenija – Avstrija <i>Slovenia – Austria</i>	Spremljanje bioprocsov v mikrofluidnih napravah / <i>Monitoring of Bioprocesses within Microfluidic Devices</i> Nosilec / <i>Principal Researcher</i> : I. Plazl
Slovenija – Slovaška <i>Slovenia – Slovakia</i>	Razgradnje izbranih škodljivih snovi z ozonacijo / <i>Degradation of Selected Harmful Compounds by Ozonation</i> Nosilka / <i>Principal Researcher</i> : A. Žgajnar Gotvajn
Slovenija – ZDA <i>Slovenia – USA</i>	Odstanjevanje hormonskih motilcev (EDC) iz odpadnih vod z naprednimi oksidacijskimi procesi (AOP) / <i>Advanced Oxidation Processes (AOPs) for Removal of Endocrine Disruptive Chemicals (EDCs) from Wastewaters</i> Nosilka / <i>Principal Researcher</i> : A. Žgajnar Gotvajn
Slovenija – Ciper <i>Slovenia – Cyprus</i>	Pretočnost krvi z različno vsebnostjo kisika / <i>The Fluidity of Blood at Different Levels of Oxygen Content</i> Nosilka / <i>Principal Researcher</i> : A. Zupančič Valant
Slovenija – Madžarska <i>Slovenia – Hungary</i>	Kompoziti guma/poliuretan/nanopolnilo: Struktura in lastnosti. / <i>Rubber/Polyurethane/Nanofiller Systems: Structure and Properties.</i> Nosilka / <i>Principal Researcher</i> : U. Šebenik

RESEARCH PROGRAMME REPORT

PROGRAMME GOALS

The content of the programme covers studies of transport phenomena in heterogeneous reaction-diffusion systems, which include 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 the 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 areas: electronic industry, medical technology, fuel production and processing, biotechnology, chemical industry, environmental protection and process safety. Microstruc-

tured 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 are integrated in 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 work 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 evaluating 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 can be 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 could be given. The research focuses on laminar film on the concentrate side of the membrane and interactions between the membrane, the solute and the solvent. The goal is to assess the membrane area and make economical comparison between nanofiltration and evaporation for a selected system.

Rheology and applications – knowledge about the 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 the key factors for 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 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 the 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 guide the improvement of certain physiological and cardioplegic solutions and their optimal use in practice. 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

Microencapsulation is a process in which tiny particles or droplets are surrounded by a coating to produce 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 microencapsulation of different core substances in a polymeric shell. Different polymers, such as melamine-formaldehyde resin, will be used as a shell material. The polymerization and curing processes, by which the shell is formed, are studied. The application properties of microcapsules are described also by studying 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 the 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 effects of composition and reaction parameters on end properties of emulsions. 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 the 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 has 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 offers 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 as its influence on production technology, 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 intracellular enzyme activities can be induced by proper selection of the liquid substrate composition and support material, as well as selection of growth conditions. On the basis of previous investigations the rotating disc 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 is currently being investigated. The main goal is to acquire new knowledge about the use of fungi and enzymes in solving problems of industrial organic waste effluents with 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. By experiments using 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 the removal of toxic organic pollutants from wastewaters
- New chronic test with *Artemia salina*
- Toxicity tests with higher plants on enzymatic level
- Environmental impact of ionic liquids as solvents^{J152}

SCIENTIFIC AND OTHER RELEVANT ACHIEVEMENTS

SEE THE SLOVENIAN TEXT ABOVE.

**SEPARACIJSKI PROCESI TOPLOGREDNIH PLINOV
ZA TRAJNOSTNI RAZVOJ**
SEPARATION PROCESSES OF GREENHOUSE GASES
FOR 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. Blaž Likozar

doc. dr. Dušan Klinar

dr. Sergej Knez

dr. Aleksandra Pivec

dr. Klavdija Rižnar

dr. Štefan Čelan

dr. Bojan Pahor

Mladi raziskovalci / Young Researchers

Maja Šoštarich

Franci Malin

Miha Narobe

Sodelujoče institucije / Participating Institutions

Znanstveno-raziskovalno središče Bistra Ptuj

POROČILO O REALIZACIJI PROGRAMA

CILJI IN OSREDNJE TEME PROGRAMA

V skladu z globalnimi razvojnimi prioritetami na področju gospodarjenja s CO₂ so raziskave potekale na naslednjih R&R področjih:

I. NIZKO OGLJIČNA DRUŽBA IN ZMANJŠEVANJE EMISIJ CO₂

1) Zajemanje in trajna vezava CO₂

Program je bil zastavljen v »slovenskem« kontekstu, kar pomeni, da smo želeli obravnavati le tista področja, ki so relevantna za slovenske razmere, zato potrebujemo dovolj informacij in znanj za pripravo odločitev:

1.1) Gojenje alg z absorbcijo CO₂ in nastajanjem lipidov–olj v algah

Gojenje alg z nastajanjem olj z visoko kalorično vrednostjo in različno vsebnostjo različnih nenasičenih maščobnih kislin predstavljajo surovinski vir za predelavo v kakovostna biogoriva. Rezultati eksperimentov so pokazali visoke vsebnosti olja, tudi do 38 %.

Na podlagi teh rezultatov je bila zgrajena pilotna naprava za gojenje alg volumna 50 L in 1 m² osvetljevalne površine. Pilotna naprava omogoča študij procesnih parametrov potrebnih za prenos na večje – industrijsko merilo.

1.2) Koncentriranje CO₂ in vezanje CO₂ na prosti Ca²⁺

1.2.1) Koncentriranje CO₂

Zaradi obstoja procesa v Sloveniji in ker imamo o procesu na razpolago dovolj informacij, smo pripravili študijo o možnostih uporabe tega procesa pri koncentriranju CO₂ iz izhodnih dimnih plinov termoelektrarn.

1.2.2) Vezanje CO₂ na alkalije s prostim Ca²⁺

Raziskovali smo potencialne procese, ki bi lahko uporabljali ali vezali CO₂. Ena od možnosti je proizvodnja oborjenega kalcijevega karbonata, druga pa razpoložljiv elektrofiltrski pepel iz termoelektrarn, ki bi potencialno lahko vezal znatne količine CO₂ v trajno obliko.

1.2.3) Dodatno pogozdovanje kot ponor CO₂

Raziskava je pokazala, da bi dodatno pogozdovanje lahko pomembno prispevalo k vezavi CO₂ in tako zmanjšanju emisij CO₂. Drugi del – dodatni prispevek k zmanjšanju emisij CO₂ je uporaba nastale biomase za zmanjševanje porabe fosilnih goriv. Pogozdovanje in raba biomase sta pomembna programa na poti trajnostnega razvoja, zmanjšanja porabe fosilnih goriv in uporabe lokalnih virov.

2) Priprava obnovljivih goriv tipa SRF in drugih ter njihovo uplinjanje

Usmeritev v trajnostni razvoj zahteva poleg zmanjševanja emisij CO₂ tudi uporabo lokalnih virov za pridobivanje energije. Med trajnostne lokalne vire alternativnih goriv sodijo odpadki. Raziskavo smo usmerili v dva dela: v pridobivanje goriv iz odpadkov in uporabo odpadkov za kogeneracijo elektrike in toplote za daljinsko ogrevanje.

Raziskave izvorov in tehnologij za pridobivanje goriv iz odpadkov kažejo na pomembne možnosti in količine, ki lahko zamenjajo več kot 50 % fosilnih goriv za daljinsko ogrevanje stanovanjskih in drugih zgradb. Pilotske poskuse delamo v povezavi s Tehnično Univerzo na Dunaju.

Poleg zanesljivih virov so pomembne tudi tehnologije za izkoriščanje teh virov, zato smo v naših raziskavah posvetili pozornost dveh možnostim in sicer uplinjanju in pirolizi.

3) Piroliza alternativnih goriv

Drug pomemben proces je piroliza, ki jo raziskujemo v sklopu sodelovanja s podjetjem, ki poseduje delujočo pilotno (2 m³) in laboratorijsko (2 L) napravo za testiranje in študij procesa. V raziskovalno delo se je z določenim delom vključil tudi mladi raziskovalec v podjetju. Raziskave preteklega obdobja so bile usmerjene v pripravo ustreznih vzorcev alternativnih goriv in raziskovanje obnašanja na laboratorijskem nivoju – reaktorju.

4) Anaerobna digestija

V tem sklopu smo raziskovali proces anaerobne digestije biomase v strnjenem sloju. Gre za kompatibilen proces, ki ga je potrebno uporabiti v primeru biološko aktivne odpadne biomase kot je: zelena in biomasa izločena iz komunalnih odpadkov. Takšno biomaso v procesu stabilne anaerobne digestije stabiliziramo, izločimo in uporabimo nevaren toplogredni plin CH₄, ostanek pa pripravimo kot alternativo gorivo za uplinjanje ali pirolizo. Tudi raziskave dela tega procesa potekajo v povezavi z mlado raziskovalko in podjetjem, ki bo v letu 2012 zgradilo večjo pilotno napravo (manjši industrijski obrat) in zato želi pridobiti dovolj znanj za njeno postavitev.

V raziskovalno delo navedenih R&R pod-programov so vključeni mladi raziskovalci, kjer njihovo raziskovalno delo pod mentorstvom in somentorstvom vodje programske skupine, prof. Janvita Goloba, lahko doprinese znanja za gospodarsko podlago nizko ogljične družbe:

- Maja Šoštarič: Gojenje mikroalg za proizvodnjo biomase in nadaljnjo predelavo v biogoriva,
- Miha Narobe: Tehnologija uplinjanja C-vsebujočih surovin,
- Franc Malin: Nanodelci v polimernih kompozitih za antikorozijsko zaščito,
- Branko Lah: Model prenosa toplote v piroliznem procesu.

II. PRODUKTNO INŽENIRSTVO

Produktno inženirstvo je tesno povezano z razvojem novih proizvodov, ki so povezani z novimi izdelki za trg. Tako se vzpostavlja povezava med potrebami trga in raziskovalnim delom, na osnovi katerega lahko začnemo proces raziskav in nato razvoja novih proizvodov. Metodologijo produktnega inženirstva v povezavi z razvojem novih proizvodov smo kot novi metodi pristopa k sodelovanju s podjetji in uporabniki raziskav pričeli izvajati kot predavanja in delavnice pri potencialnih uporabnikih in bodočih partnerjih. O tej temi smo tudi poročali na strokovnih srečanjih v različnih panogah.

ZNANSTVENI DOSEŽKI

IZVIRNA ZNANSTVENA ČLANKA

ŠREKL, Jože, GOLOB, Janvit. New approach to calculate the probability of ignition. *J. Loss Prev. Process Ind.*, 2011, vol. 24, no. 3, str. 288–291, doi: 10.1016/j.jlp.2010.09.006. [COBISS.SI-ID 34976773]

ŠOŠTARIČ, Maja, KLINAR, Dušan, BRICELJ, Mihael, GOLOB, Janvit, BEROVIČ, Marin, LIKOZAR, Blaž. Growth, lipid extraction and thermal degradation of the microalga *Chlorella vulgaris*. *New Biotechnology*, str. 1–16, doi: 10.1016/j.nbt.2011.12.002. [COBISS.SI-ID 35597317]

DRUGI RELEVANTNI DOSEŽKI

STROKOVNI ČLANEK

PETEK, Janez, KOSTEVŠEK, Anja, PIVEC, Aleksandra. Energetski pregled in standard EN 16001:2009. *Energetik (Maribor)*, 2011, let. 18, št. 90, str. 54-55, ilustr. [COBISS.SI-ID 68815873]

OBJAVLJENI ZNANSTVENI PRISPEVKI NA KONFERENCAH

GOLOB, Janvit. Vloga kemijskih inženirjev v kemijski in procesni industriji. V: OBLAK, Zdenka (ur.), KLOPČIČ, Luka (ur.). *Poti znanosti k edinosti Slovencev : zbornik*. Ljubljana: Svetovni slovenski kongres: = Slovenian World Congress, 2011, str. 128-129. [COBISS.SI-ID 35448837]

BELŠAK, Nataša, ČELAN, Štefan, HABULIN, Maja, PIVEC, Aleksandra. Thermophilic solid state anaerobic digestion of OFMSW in sequential batch reactors. V: *1st International Conference on Waste Management in Developing Countries and Transient Economies, Mauritius, Africa, 5-8 September 2011*. [S. l.]: Edulink, 2011, str. 1-8, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 23244600]

BELŠAK, Nataša, PIVEC, Aleksandra, ČORIČ, Miroslav, HABULIN, Maja, ŠVAGELJ, Mirjan, GREGORI, Andrej. Lignocellulose biomass pretreatment with white and brown rot fungi before the anaerobic digestion process. V: HABULIN, Maja (ur.), PRIMOŽIČ, Mateja (ur.). *2nd Conference on Applied Biocatalysis and 7th Meeting of Students and University Professors from Maribor and Zagreb, November 7th and 8th 2011, Maribor, Slovenia. 2nd Conference on Applied Biocatalysis and 7th Meeting of Students and University Professors from Maribor and Zagreb, November 7th and 8th 2011, Maribor, Slovenia*. Maribor: Faculty of Chemistry and Chemical Engineering; Zagreb: Faculty of Chemical Engineering and Technology, 2011, 6 str., ilustr. [COBISS.SI-ID 23245368]

OBJAVLJENI POVZETEK ZNANSTVENEGA PRISPEVKA NA KONFERENCI

BELŠAK, Nataša, PIVEC, Aleksandra, ČORIČ, Miroslav, HABULIN, Maja, ŠVAGELJ, Mirjan, GREGORI, Andrej. Predobdelava lignocelulozne biomase z glivami bele in rjave trohnobe pred procesom anaerobne digestije = Lignocellulose biomass pretreatment with white and brown rot fungi before the anaerobic digestion process. V: HABULIN, Maja (ur.), PRIMOŽIČ, Mateja (ur.). *2nd Conference on Applied Biocatalysis and 7th Meeting of Students and University Professors from Maribor and Zagreb, November 7th and 8th 2011, Maribor, Slovenia. Book of abstracts*. Maribor: Faculty of Chemistry and Chemical Engineering; Zagreb: Faculty of Chemical Engineering and Technology, 2011, str. 18-19. [COBISS.SI-ID 23245624]

PREDAVANJE NA TUJI UNIVERZI

GOLOB, Janvit. *Capturing CO₂ : [Department of Chemical and Environmental Engineering, The University of Arizona, Tucson, 28th April, 2011]*. Tucson, 2011. [COBISS.SI-ID 35829253]

DRUGO

V letu 2011 sta bili vloženi dve patentni prijavi skupaj s partnerskim podjetjem za zaščito inovativnih reaktorjev za pirolizo alternativnih goriv: 1) Metoda za hitro segrevanje trdne reakcijske zmesi v šaržnem reaktorju in 2) Metoda za ciklično vakumiranje v šaržnem reaktorju. V drugi polovici leta 2011 sta bila v recenzijo poslana dva izvorna znanstvena članka za objavo v znanstveni reviji s SCI faktorjem:

1. J. Golob, D. Klinar, M. Bricelj: Priprava preglednega članka o možnostih zajemanja CO₂ v slovenskih razmerah (Acta Chimica Slovenica).
2. P. Brglez, N. Belšak-Šel in drugi: Priprava članka o anaerobni digestiji biomase v strnjem sloju (Acta Chimica Slovenica).

Raziskava poteka v skladu s programom, podprta je s publikacijami in prispevki na mednarodnih srečanjih, v tekočem delu so vezani na program štirje doktorandi in številni diplomanti. V navezavi z industrijskimi obrati prenašamo znanja, ustvarjena v okviru programske skupine, v Unichem-Vrhnika, Petrochem-Lendava, Albin Promotion-Majšperk, IAK- Kresnice, HSE-Ljubljana in Lek-Ljubljana.

RESEARCH PROGRAMME REPORT

PROGRAMME GOALS AND RESEARCH TOPICS

Following the global development priorities in CO₂ management the research took place in the following R&D areas:

I. LOW CARBON SOCIETY AND LOWERING CO₂ EMISSIONS

1) Capture and permanent sequestration of CO₂

The program was put in "Slovenian" context, which means that we wanted to address the areas, relevant for Slovenian circumstances, thus acquiring enough information and knowledge for decision preparation:

1.1) Growing algae with CO₂ absorption and lipid-oil formation in algae

Growing of algae with lipid-oil formation with high caloric value and variable content of different unsaturated fatty acids presents the source of raw materials for processing into biofuel. Experimental results have shown very good oil content, even up to 38%. On the basis of these results a pilot device of 50 L volume and 1 m² of lightening surface was built for growing algae. The pilot device provides the means for studying the necessary process parameters for transferring to industrial scale.

1.2) CO₂ concentration and binding CO₂ on free Ca²⁺

1.2.1) CO₂ concentration

Since the process already exists in Slovenia and with sufficient information available regarding the process, we are preparing a study on the use of possibilities of the process of CO₂ concentration from exit flue gases in thermo-electric plants.

1.2.2) Binding CO₂ on alcalia with free Ca²⁺

We have investigated the potentials of the processes that could use and bind CO₂. One of the possibilities is the production of precipitated calcium carbonate, and the other is using the available electro filter dust from thermo-electric plants, which could potentially bind considerable amounts of CO₂ into permanent form.

1.2.3) Additional afforestation as a CO₂ sink

The research has shown that additional afforestation can significantly contribute to binding CO₂ and consequently to the reduction of CO₂ emissions. The second advantage, an additional contribution to the reduction of CO₂ emissions, is the use of thus formed biomass for reducing fossil fuels consumption. Afforestation and biomass usage are important programs towards permanent development, reduction of fossil fuels consumption and the use of local sources.

2) Preparation of renewable fuels of the type SRF and others and their gasification

Orientation towards permanent development demands both, lowering CO₂ emissions and the use of local sources for acquiring energy. Among permanent local alternative fuel sources is also waste. The research was focused in two directions: acquiring fuels and their usage for co-generation of electricity and heat for remote heating.

The research on the sources and technologies for acquiring fuels from waste shows some highly relevant possibilities and quantities that could replace more than 50% of fossil fuels for remote heating of residential and other buildings. The pilot experiments were carried out at the Technical University in Vienna.

In addition to reliable resources, the technologies for exploiting these resources are important. For this reason we concentrated on two options in our research, namely gasification and pyrolysis.

3) Pyrolysis of alternative fuels

Another important process is pyrolysis, which we are investigating as apart of our collaboration with the company which possesses an operational pilot (2 m³) and laboratory (2 L) device for testing and studying the process. A research assistant in the company has also joined the research work. Previous research was directed towards the preparation of suitable samples of alternative fuels and investigating behaviour on the laboratory level - reactor.

4) Anaerobic digestion

As a part of this programme we have investigated the process of anaerobic digestion of biomass in a tight layer. It is a compatible process which needs to be used in case of biologically active waste biomass, e.g.: green and eliminated biomass from household waste. This sort of biomass is stabilized in the process of stable anaerobic digestion, after which the greenhouse gas CH₄ is eliminated and used, while the remnant is transformed into alternative fuel for gasification and pyrolysis. The research of this process was partly carried out by a female research assistant and the company, where will built a bigger pilot device (smaller industrial plant). Hopefully enough knowledge for its implementation will be obtained.

Several research assistants are involved in the research of R&D sub-programs, where their research work, under the mentorship and co-mentorship of the programme group principal re-

searcher, Prof. Janvit Golob, may contribute to the research-development-technology-market concept for economically low-carbon society and sustainable development:

- Maja Šoštarič: Growing micro algae for biomass production and further processing into biofuels,
- Miha Narobe: Gasification technology of C-containing substances,
- Franc Malin: Nano particles in polymer composites for anti-corrosion protection,
- Branko Lah: Model for heat transfer in pyrolysis process.

II. PRODUCT ENGINEERING

Product engineering is closely related to the development of new products for market. In this way we wish to establish a connection between market's needs and research work, on the basis of which we can begin the process of research consequently leading to the development of new products. We have begun to implement a methodology of product engineering in connection with new products development as a new method of approach for cooperation with companies and other research users. This includes lectures and workshops at potential users and future partners. We have also presented some publications on this subject at professional meetings in different branches.

SCIENTIFIC ACHIEVEMENTS

ORIGINAL SCIENTIFIC ARTICLES

ŠREKL, Jože, GOLOB, Janvit. New approach to calculate the probability of ignition. *J. Loss Prev. Process Ind.*, 2011, vol. 24, no. 3, p. 288-291, doi: 10.1016/j.jlp.2010.09.006. [COBISS.SI-ID 34976773]

ŠOŠTARIČ, Maja, KLINAR, Dušan, BRICELJ, Mihael, GOLOB, Janvit, BEROVIČ, Marin, LIKOZAR, Blaž. Growth, lipid extraction and thermal degradation of the microalga *Chlorella vulgaris*. *New Biotechnology*, p. 1-16, doi: 10.1016/j.nbt.2011.12.002. [COBISS.SI-ID 35597317]

OTHER RELEVANT ACHIEVEMENTS

PROFESSIONAL ARTICLE

PETEK, Janez, KOSTEVŠEK, Anja, PIVEC, Aleksandra. Energy overview and standard EN 16001:2009. *Energetik (Maribor)*, 2011, y. 18, n. 90, p. 54-55, ilustr. [COBISS.SI-ID 68815873]

PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTIONS

GOLOB, Janvit. Role of chemical engineers in chemical and processing industry. V: OBLAK, Zdenka (ur.), KLOPČIČ, Luka (ur.). *Ways of science towards the unity of Slovenians : collection of scientific papers*. Ljubljana: Slovenian World Congress, 2011, p. 128-129. [COBISS.SI-ID 35448837]

BELŠAK, Nataša, ČELAN, Štefan, HABULIN, Maja, PIVEC, Aleksandra. Thermophilic solid state anaerobic digestion of OFMSW in sequential batch reactors. V: *1st International Conference on Waste Management in Developing Countries and Transient Economies, Mauritius, Africa, 5-8 September 2011*. [S. l.]: Edulink, 2011, p. 1-8, graph. display. [COBISS.SI-ID 23244600]

BELŠAK, Nataša, PIVEC, Aleksandra, ČORIĆ, Miroslav, HABULIN, Maja, ŠVAGELJ, Mirjan, GREGORI, Andrej. Lignocellulose biomass pretreatment with white and brown rot fungi before the anaerobic digestion process. V: HABULIN, Maja (ur.), PRIMOŽIČ, Mateja (ur.). *2nd Conference on Applied Biocatalysis and 7th Meeting of Students and University Professors from Maribor and Zagreb, November 7th and 8th 2011, Maribor, Slovenia. 2nd Conference on Applied Biocatalysis and 7th Meeting of Students and University Professors from Maribor and Zagreb, November 7th and 8th 2011, Maribor, Slovenia*. Maribor: Faculty of Chemistry and Chemical Engineering; Zagreb: Faculty of Chemical Engineering and Technology, 2011, 6 p., ilustr. [COBISS.SI-ID 23245368]

PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTION ABSTRACT

BELŠAK, Nataša, PIVEC, Aleksandra, ČORIĆ, Miroslav, HABULIN, Maja, ŠVAGELJ, Mirjan, GREGORI, Andrej. Lignocellulose biomass pretreatment with white and brown rot fungi before the anaerobic digestion process. V: HABULIN, Maja (ur.), PRIMOŽIČ, Mateja (ur.). *2nd Conference on Applied Biocatalysis and 7th Meeting of Students and University Professors from Maribor and Zagreb, November 7th and 8th 2011, Maribor, Slovenia. Book of abstracts*. Maribor: Faculty of Chemistry and Chemical Engineering; Zagreb: Faculty of Chemical Engineering and Technology, 2011, p. 18-19. [COBISS.SI-ID 23245624]

LECTURE AT THE FOREIGN UNIVERSITY

GOLOB, Janvit. *Capturing CO₂ : [Department of Chemical and Environmental Engineering, The University of Arizona, Tucson, 28th April, 2011]*. Tucson, 2011. [COBISS.SI-ID 35829253]

OTHER

In 2011 two patent applications were submitted, together with the partner company for the protection of innovative reactors for pyrolysis of alternative fuels: (1) Method of quick heating of solid reaction mixture in gill reactor, and (2) Method for cyclic vacuuming in gill reactor. In the second half of 2011 two original scientific articles were sent for review to a scientific journal with SCI factor:

1. J. Golob, D. Klinar, M. Bricelj: Preparation of an overview article on the possibilities of capturing CO₂ in Slovenian circumstances (Acta Chimica Slovenica).
2. P. Brglez, N. Belšak-Šel and others: Preparation of an article on anaerobic digestion of biomass in a tight layer (Acta Chimica Slovenica).

Research is running according to the programme, supported by publications and presentations at international meetings. Currently, four PhD students and several graduates are working within this program. In contacts with industrial partners we have transferred knowledge, which resulted from of the work of the programme group to Unichem-Vrhnika, Petrochem-Lendava, Albin Promotion-Majšperk, IAK- Kresnice, HSE-Ljubljana, and Lek-Ljubljana.

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 učbenikov in učnih pripomočkov, za vodenje habilitacijskih postopkov, področja varnosti in zdravja pri delu, podporo mednarodnemu sodelovanju, 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:

- splošno in strokovno področje,
- računovodsko finančna služba,
- študentski referat,
- kadrovska služba in
- tehnično vzdrževalna skupina

KATEDRE V LETU 2011
CHAIRS IN 2011

KATEDRA ZA ANALIZNO KEMIJO **CHAIR OF ANALYTICAL CHEMISTRY**

PREDSTOJNIK KATEDRE / HEAD

prof. dr. Marjan Veber

SODELAVCI KATEDRE / PERSONNEL

Učitelji / Faculty

prof. dr. Boris Pihlar

prof. dr. Marjan Veber

izr. prof. dr. Lucija Zupančič-Kralj

izr. prof. dr. Nataša Gros

izr. prof. dr. Matevž Pompe

Asistenti / Assistants

dr. Robert Susič

dr. Tatjana Zupančič

doc. dr. Helena Prosen

doc. dr. Drago Kočar

dr. Irena Kralj Cigić

dr. Polonca Kralj

mag. Ivanka Keber

Raziskovalci / Researchers

izr. prof. dr. Matija Strlič (v dopolnilnem razmerju / *part-time*)

dr. Martin Šala

Tehniki / Technicians

Zdenka Držaj

Jolanda Furlan

Mojca Žitko

Mladi raziskovalci Young Researchers	Mentor <i>Mentor</i>	Čas usposabljanja <i>Programme Duration</i>	Oblika usposabljanja <i>Degree</i>
Tanja Trafela	M. Strlič	2006–2012	doktorski študij / <i>PhD</i>
Andrej Ščavničar	M. Pompe	2007–2012	doktorski študij / <i>PhD</i>
Alenka Možir	M. Strlič	2008–2013	doktorski študij / <i>PhD</i>

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 / *Practicals in Analytical Chemistry*

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

Biokemija / *Biochemistry* – UN:

Instrumentalne metode analize / *Instrumental Analytical Methods*

Kemijsko inženirstvo / *Chemical Engineering* – UN:

Instrumentalne 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:

Praktikum iz kemije / *General Chemistry – Practical Course*

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

Kemija okolja (izbirni predmet) / *Environmental Chemistry (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

Instrumentalne metode analize / *Instrumental Methods in Chemical Analysis* – UN

Izbrana poglavja iz analizne kemije / *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 Master Study Programmes*

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*

RAZISKOVALNA DEJAVNOST / RESEARCH ACTIVITIES

Temeljna raziskovalna dejavnost je razvoj novih analiznih metod, postopkov in instrumentacije 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 procedures and instrumentation as well as 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.

POMEMBNI DOSEŽKI SODELAVCEV KATEDRE / SIGNIFICANT ACHIEVEMENTS OF THE CHAIR STAFF

ČLANSTVO V MEDNARODNIH UREDNIŠKIH ODBORIH / MEMBERSHIP IN INTERNATIONAL EDITORIAL BOARDS

- M. Veber, B. Pihlar, H. Prosen *Acta Chimica Slovenica*
- M. Veber, *Chemia Analytyczna*
- M. Strlič, J. Kolar, *e-Preservation Science*
- M. Strlič, *Papir*

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 / *AAS Varian AA 240*
- 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 Eclipse / *Spectrofluorimeter Varian Cary Eclipse*

Skupaj s KI / *Shared with the National Institute of Chemistry:*

- ICP-MS HP (Agilent) 4500
- 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)*

SODELOVANJE V CENTRIH ODLIČNOSTI / CENTRES OF EXCELLENCE

- Center odličnosti: CO NIN – Nanoznanosti in nanotehnologije / *Centre of Excellence: Nanosciences and Nanotechnology*
- Center odličnosti: CO PoliMaT – Polimerni materiali / *Centre of Excellence: Polymeric Materials*

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*: B. Pihlar

MEDNARODNO ZNANSTVENO SODELOVANJE / INTERNATIONAL RESEARCH COOPERATION

VEČSTRANSKO MEDNARODNO SODELOVANJE / MULTILATERAL COOPERATION

- LLP-LDV-TOI-2008- *Hands-on Approach to Analytical Chemistry for Vocational*
SUI-15 *Schools (II)*
Nosilka / *Principal Researcher*: N. Gros
- FOOD-CT 2006-06264 *Traditional Europe Food (TRUEFOOD)*
EU 6.OP Nosilec / *Principal Researcher*: M. Pompe

BILATERALNO MEDNARODNO SODELOVANJE / BILATERAL COOPERATION

- Slovenija – Hrvaška
Slovenia – Croatia Nastanek, transport in razgradnja fotooksidantov na področju Mediterana / *Formation, Transport and Degradation of Photooxidants in the Mediterranean Region*
Nosilec / *Principal Researcher*: M. Pompe
- Slovenija – Kitajska
Slovenia – China Onesnaževala povezana s prometom: ocena virov emisij in tvorbenih mehanizmov aerosolov / *Transportation-Related Pollutants: Estimation of Emission Sources and Formation Pathways of Aerosols*
Nosilec / *Principal Researcher*: M. Pompe
- Slovenija – ZDA
Slovenia – USA Kvantitativna ocena tveganja pri tradicionalnih izdelkih živil / *Quantitative Risk Assessment of Traditional Food Products*
Nosilec / *Principal Researcher*: M. Veber
- Slovenija – Turčija
Slovenia – Turkey Sistem nadzora in sledljivosti biogenih aminov in nitrozamina v tradicionalnih ribjih produktih / *Systems of Control and Traceability of Biogenetic Amines and Nitrosamines in Traditional Fish Products*
Nosilec / *Principal Researcher*: M. Pompe

BIBLIOGRAFIJA 2011 / REFERENCES 2011

IZVIRNI ZNANSTVENI ČLANEK / ORIGINAL SCIENTIFIC ARTICLE

- AL1. CSEFALVAYOVA, Linda, STRLIČ, Matija, KARJALAINEN, Harri. Quantitative NIR chemical imaging in heritage science. *Anal. chem. (Wash.)*. [Print ed.], 2011, vol. 83, no. 13, str. 5101-5106, doi: 10.1021/ac200986p. [COBISS.SI-ID 35488773]
- AL2. WEINGERL, Vesna, STRLIČ, Matija, KOČAR, Drago. Evaluation of chemiluminometric method for determination of polyphenols in wine. *Anal. lett.*, 2011, vol. 44, issue 7, str. 1310-1322, doi: 10.1080/00032719.2010.512674. [COBISS.SI-ID 3097900]
- AL3. MOŽIR, Alenka, STRLIČ, Matija, TRAFELA, Tanja, KRALJ CIGIČ, Irena, KOLAR, Jana, DESELNICU, Viorica, BRUIN, G. de. On oxidative degradation of parchment and its non-destructive characterisation and dating. *Appl. phys., A, Mater. sci. process. (Print)*, 2011, vol. 104, no. 1, str. 211-217, doi: 10.1007/s00339-010-6108-z. [COBISS.SI-ID 34838533]
- AL4. RASMUSSEN, K. L., GUNNEWEG, Jan, PLICHT, van der J., KRALJ CIGIČ, Irena, BOND, A. D., SVENSMARK, B., BALLA, Margit, STRLIČ, Matija, DOUDNA, Gregory L. On the age and content of Jar-35 : a sealed and intact storage jar found on the southern plateau of Qumran. *Archaeometry*, 2011, vol. 53, no. 4, str. 791-808, doi: 10.1111/j.1475-4754.2010.00559.x. [COBISS.SI-ID 34839045]
- AL5. ŠALA, Martin, MAKUC, Damjan, KOLAR, Jana, PLAVEC, Janez, PIHLAR, Boris. Potentiometric and [sup]31P NMR spectroscopic studies on inositol phosphates and their interaction with iron(III) ions. *Carbohydr. res.*. [Print ed.], 2011, vol. 346, no. 4, str. 488-494, doi: 10.1016/j.carres.2010.12.021. [COBISS.SI-ID 34723589]
- AL6. BUBNIČ, Zoran, URLEB, Uroš, KREFT, Katjuša, VEBER, Marjan. The application of atomic absorption spectrometry for the determination of residual active pharmaceutical ingredients in cleaning validation samples. *Drug dev. ind. pharm.*, 2011, vol. 37, no. 3, str. 281-289, doi: 10.3109/03639045.2010.509726. [COBISS.SI-ID 34749701]
- AL7. ARH, Gregor, KLASINC, Leo, VEBER, Marjan, POMPE, Matevž. Calibration of mass selective detector in non-target analysis of volatile organic compounds in the air. *J. chromatogr., A*, 2011, vol. 1218, issue 11, str. 1538-1543. [COBISS.SI-ID 1448796]
- AL8. URBAS, Lidija, KOŠIR, Boštjan, PETERKA, Matjaž, PIHLAR, Boris, ŠTRANCAR, Aleš, BARUT, Miloš. Reversed phase monolithic analytical columns for the determination of HA1 subunit of influenza virus haemagglutinin. *J. chromatogr., A*, 2011, vol. A1218, no. 17, str. 2432-2437, doi: 10.1016/j.chroma.2010.12.082. [COBISS.SI-ID 35012101]
- AL9. URBAS, Lidija, LAH, Barbara, BARUT, Miloš, ZOCHOWSKA, Monika, CHROBOCZEK, Jadwiga, PIHLAR, Boris, SZOLAJSKA, Ewa. Purification of recombinant adenovirus type 3 dodecahedral virus-like particles for

- biomedical applications using short monolithic columns. *J. chromatogr., A*, 2011, vol. A1218, no. 17, str. 2451-2459, doi: 10.1016/j.chroma.2011.01.032. [COBISS.SI-ID 35012613]
- AL10. KITANOVSKI, Zoran, GRGIČ, Irena, VEBER, Marjan. Characterization of carboxylic acids in atmospheric aerosols using hydrophilic interaction liquid chromatography tandem mass spectrometry. *J. chromatogr., A*, 2011, vol. 1218, issue 28, str. 4417-4425, doi: 10.1016/j.chroma.2011.05.020. [COBISS.SI-ID 4657946]
- AL11. KOTNIK, Darja, NOVIČ, Milko, LACOURSE, William R., PIHLAR, Boris. Cathodic re-activation of the gold electrode in pulsed electrochemical detection of carbohydrates. *Journal of electroanalytical chemistry*, 2011, vol. 663, iss. 1, str. 30-35, doi: 10.1016/j.jelechem.2011.09.026. [COBISS.SI-ID 4824090]
- AL12. ULČNIK, Ajda, KRALJ CIGIČ, Irena, ZUPANČIČ-KRALJ, Lucija, TAVZES, Črtomir, POHLEVEN, Franc. Razgradnja endosulfana z glivama Hypoxylon fragiforme in Gloeophyllum trabeum = Degradation of endosulfan with Hypoxylon fragiforme and Gloeophyllum trabeum. *Les (Ljublj.)*, 2011, let. 63, št. 5, str. 227-231. [COBISS.SI-ID 1930633]
- AL13. KOKALJ, Meta, KOLAR, Jana, TRAFELA, Tanja, KREFT, Samo. Differences among Epilobium and Hypericum species revealed by four IR spectroscopy modes: transmission, KBr tablet, diffuse reflectance and ATR. *Phytochem. anal.*, 2011, vol. 22, issue 6, str. 541-546, ilustr, doi: 10.1002/pca.1315. [COBISS.SI-ID 3086449]
- AL14. STRLIČ, Matija, KRALJ CIGIČ, Irena, MOŽIR, Alenka, BRUIN, G. de, KOLAR, Jana, CASSAR, May. The effect of volatile organic compounds and hypoxia on paper degradation. *Polym. degrad. stab.*. [Print ed.], 2011, vol. 96, no. 4, str. 608-615, doi: 10.1016/j.polyimdeggradstab.2010.12.017. [COBISS.SI-ID 34838277]
- AL15. KOZJEK-ŠKOFIC, Irena, PADEŽNIK GOMILŠEK, Jana, PIHLAR, Boris, KODRE, Alojz, BUKOVEC, Nataša. Structural and electrochemical investigations of Ce/Cu mixed oxide thin films. *Sol. energy mater. sol. cells.* [Print ed.], 2011, vol. 95, no. 2, str. 779-785, doi: 10.1016/j.solmat.2010.10.023. [COBISS.SI-ID 34710021]
- AL16. PERDIH, Peter, BAŠKOVČ, Jernej, DAHMANN, Georg, GROŠELJ, Uroš, KOČAR, Drago, NOVAK, Ana, STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. Parallel synthesis of 1-substituted 5-(5-oxopyrrolidin-3-yl)-1H-pyrazole-4-carboxamides. *Synthesis (Stuttg.)*, 2011, no. 17, str. 2822-2832, doi: 10.1055/s-0030-1261034. [COBISS.SI-ID 35308549]
- AL17. GROS, Nataša. Microdiffusion-based UV-LED spectrometric setup for determining low levels of ethanol in fruit juice. *Talanta (Oxford)*. [Print ed.], 2011, vol. 87, no. 1, str. 174-179, doi: 10.1016/j.talanta.2011.09.058. [COBISS.SI-ID 35545605]
- AL18. LESAR, Boštjan, UGOVŠEK, Aleš, KARIŽ, Mirko, ŠERNEK, Milan, HUMAR, Miha, KRALJ, Polonca. Influence of boron compounds in adhesives on the bonding quality and fungicidal properties of wood. *Wood research*, 2011, vol. 56, no. 3, str. 385-392. [COBISS.SI-ID 1951369]

PREGLEDNI ZNANSTVENI ČLANEK / REVIEW ARTICLE

- AL19. MENART, Eva, BRUIN, G. de, STRLIČ, Matija. Dose-response functions for historic paper. *Polym. degrad. stab.*. [Print ed.], 2011, vol. 96, no. 12, str. 2029-2039, doi: 10.1016/j.polyimdeggradstab.2011.09.002. [COBISS.SI-ID 35497477]

KRATKI ZNANSTVENI PRISPEVEK / SHORT SCIENTIFIC ARTICLE

- AL20. LESAR, Boštjan, BUDIJA, Franc, KRALJ, Polonca, PETRIČ, Marko, HUMAR, Miha. Leaching of boron from wood impregnated with preservative solutions based on boric acid and liquefied wood. *Holz Roh- Werkst.*. [Print ed.], 2011, vol. 69, no., str. 1-3, doi: 10.1007/s00107-011-0530-6. [COBISS.SI-ID 1881993]

OBJAVLJENI ZNANSTVENI PRISPEVEK NA KONFERENCI / PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTION

- AL21. KOŠMERL, Tatjana, PROSEN, Helena, FRANCETIČ, Vojmir, GAŠPERLIN, Lea, RUSJAN, Denis. The content of copper (Cu²⁺) ions in wine and their influence on wine aroma = Der Gehalt an Kupfer (Cu²⁺)-ionen im Wein und deren Einfluss auf Weinaroma. V: PLENK, Astrid (ur.). 66. ALVA - Jahrestagung 2011, 23.-24. Mai 2011, Graz. *Bericht ALVA - Jahrestagung 2011 : "Landwirtschaft, Lebensmittel und Veterinärmedizin - Zukunft der Forschung in Österreich"*, (Bericht (ALVA. Jahrestagung ...)). Wien: Arbeitsgemeinschaft für Lebensmittel-, Veterinär- und Agrarwesen, 2011, str. 148-150. [COBISS.SI-ID 3918456]
- AL22. CENCIČ-KODBA, Zdenka, BRODNJAK-VONČINA, Darinka, ZUPANČIČ-KRALJ, Lucija, NOVIČ, Marjana. Določevanje sestave maščobnih kislin in njihovih profilov v membranah rdečih krvnih celic = Determination of fatty acids profiles in erythrocyte membranes. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14-16 september 2011*. Maribor: FKKT, 2011, 9 str. [COBISS.SI-ID 15323926]
- AL23. PLAŽAR, Andreja, PROSEN, Helena. Primerjava ekstrakcijskih metod za klorirana onesnaževala v živilih = Comparison of extraction methods for chlorinated pollutants in food samples. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14-16 september 2011*. Maribor: FKKT, 2011, str. 1-5. [COBISS.SI-ID 35393797]
- AL24. KOŠMERL, Tatjana, FRANCETIČ, Vojmir, PROSEN, Helena, GAŠPERLIN, Lea. Vpliv temperature ekstrakcije v SPME postopku na določanje aromatičnih spojin zorenih vin na kvasovkah = Impact of extraction temperature

at SPME procedure on determination of aroma compounds of wines produced by aging on yeast. V: ČUŠ, Franc (ur.). *Vinarski dan 2011, Ljubljana, 30. november 2011*, (Prikazi in informacije, 275). Ljubljana: Kmetijski inštitut Slovenije, 2011, str. 71-82, tabele, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 3991928]

SAMOSTOJNI ZNANSTVENI SESTAVEK ALI POGAVJE V MONOGRAFSKI PUBLIKACIJI **INDEPENDENT SCIENTIFIC COMPONENT PART OR A CHAPTER IN A MONOGRAPH**

AL25. PROSEN, Helena. Fate and determination of triazine herbicides in soil. V: ABD EL-GHANY HASANEEN, Mohammed Naguib (ur.). *Herbicides - properties, synthesis and control of weeds*. Rijeka: Intech, 2011, str. 43-58. [COBISS.SI-ID 35747589]

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

AL26. PIHLAR, Boris. *Osnove analizne kemije : zapiski predavanj*. (Ponatis). Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2008-. Zv. <1>, ilustr. ISBN 978-961-6286-42-8. ISBN 978-961-6286-43-5. [COBISS.SI-ID 235267840]

KONČNO POROČILO O REZULTATIH RAZISKAV / FINAL RESEARCH REPORT

AL27. GROS, Nataša, HARRISON, Tim, KWIATKOWSKI, Marek, VRTAČNIK, Margareta. *Final report : Lifelong Learning Programme 2007-2013 Leonardo da Vinci : transfer of innovation*. Ljubljana: Univ. v Ljubljani, Fak. za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2011. 52 str. [COBISS.SI-ID 34983685]

ELABORAT, PREDŠTUDIJA, ŠTUDIJA / TREATISE, PRELIMINARY STUDY, STUDY

AL28. VRTAČNIK, Margareta, JURIŠEVIČ, Mojca, GROS, Nataša, HARRISON, Tim, KWIATKOWSKI, Marek. *Impact of the hands-on approach in teaching and learning visible spectrometry on students' achievements and its relation with students' motivational orientations and study programs : [Leonardo da Vinci project no. LLP-LDV-TOI-2008-SI-15: Hands-on Approach to Analytical Chemistry for Vocational Schools II : evaluation study]*. Ljubljana: Naravoslovnotehniška fakulteta, Oddelek za kemijsko izobraževanje in informatiko, 2011. [COBISS.SI-ID 1450844]

UREDNIK / EDITORSHIP

AL29. *Acta chimica slovenica*. Strlič, Matija (urednik 2003-, gostujoči urednik 2007), Pihlar, Boris (član uredniškega odbora 1998-), Veber, Marjan (član uredniškega odbora 1998-). [Tiskana izd.]. Ljubljana: Slovensko kemijsko društvo: =Slovenian Chemical Society, 1993-. ISSN 1318-0207. [COBISS.SI-ID 14086149]

AL30. *E-preservation science*. Strlič, Matija (urednik 2004-). Ivančna Gorica: Morana RTD, 2004-. ISSN 1581-9280. [COBISS.SI-ID 214150912]

AL31. *Studies in conservation*. Strlič, Matija (član uredniškega odbora 2011-). London: International Institute for Conservation of Historic and Artistic Works: = L'Institut International pour la Conservation des Objets d'Art et d'Histoire, 1952-. ISSN 0039-3630. [COBISS.SI-ID 8615943]

KATEDRA ZA ANORGANSKO KEMIJO **CHAIR OF INORGANIC CHEMISTRY**

PREDSTOJNIK KATEDRE / HEAD

prof. dr. Iztok Turel

SODELAVCI KATEDRE / PERSONNEL

Učitelji / Faculty

prof. dr. Nataša Bukovec

prof. dr. Peter Bukovec

izr. prof. dr. Boris Čeh

prof. dr. Alojz Demšar

prof. dr. Ivan Leban

prof. dr. Anton Meden

doc. dr. Barbara Modec

doc. dr. Saša Petriček

prof. dr. Iztok Turel

Asistenti / Assistants

doc. dr. Romana Cerc Korošec

Nataša Čelan Korošin, univ. dipl. kem.

doc. dr. Amalija Golobič

dr. Sabina Grabner

dr. Nives Kitanovski

dr. Irena Kozjek Škofic

doc. dr. Bojan Kozlevčar

doc. dr. Nina Lah

doc. dr. Andrej Pevec

dr. Elizabeta Tratar Pirc

doc. dr. Marija Zupančič

doc. dr. Franc Perdih

dr. Katarina Stare

Tehniki / Technicians

Damjan Erčulj

Karmen Klančar

Aleš Knez

Urška Levec

Petra Vuković

Igor Ponikvar

Mladi raziskovalci <i>Young Researchers</i>	Mentor <i>Mentor</i>	Čas usposabljanja <i>Programme Duration</i>	Oblika usposabljanja <i>Degree</i>
Simona Medvešček	A. Meden	2003–2012	doktorski študij / <i>PhD</i>
Jerneja Šauta Ogorevc	P. Bukovec	2007–2012	doktorski študij / <i>PhD</i>
Marta Kasunič	A. Golobič	2007–2012	doktorski študij / <i>PhD</i>
Rosana Hudej	I. Turel	2008–2013	doktorski študij / <i>PhD</i>
Jakob Kljun	I. Leban	2008–2013	doktorski študij / <i>PhD</i>
Ksenija Cer Kerčmar	P. Bukovec	2009–2013	doktorski študij / <i>PhD</i>
Maja Vidmar	A. Golobič	2010–2014	doktorski študij / <i>PhD</i>
Sara Seršen	I. Turel	2011–2015	doktorski študij / <i>PhD</i>
Tanja Koleša	A. Meden	2011–2015	doktorski študij / <i>PhD</i>
Miha Trdin	I. Leban	2011–2015	doktorski študij / <i>PhD</i>

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)*

Predbolonjski dodiplomski programi / *Pre-Bologna Undergraduate Programmes*

Anorganska kemija II / *Inorganic Chemistry II* – UN

Bioanorganska kemija / *Bioinorganic Chemistry* – UN

Kemija in biokemija živil / *Chemistry and Biochemistry of Food* – UN

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

Metodika anorganskih eksperimentov / *Methodology of Inorganic Experiments* – UN

Kemija kompleksov / *Coordination Chemistry* – UN

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

Tehniška varnost / *Technical Safety*:

Požarna varnost (izbirni predmet skupine A) / *Fire Safety (elective course)*

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

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
- Anorganska kemija / *Inorganic Chemistry*, FFA – 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 in fizikalna kemija / *General and Physical Chemistry*, BF – UN
- Splošna kemija / *General Chemistry*, PEF – UN
- Anorganska kemija / *Inorganic Chemistry*, PEF – UN
- Kemija I, II / *Chemistry I, II*, FMF – UN

Predbolonjski dodiplomski programi / *Pre-Bologna Undergraduate Programmes*

- Strukturna kemija / *Structural Chemistry*, PEF – UN

Predbolonjski podiplomski programi / *Pre-Bologna Postgraduate Programmes*

- Kemija trdnega stanja / *Solid State Chemistry*, NTF

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. Sinteza in uporaba novih škorpionatnih ligandov / *Syntheses of Metal Carboxylates and their Derivatives; Research into their Application as Protecting Layers for Wood and Type of Metal Ion Bonding in Wood. Synthesis and Application of New Scorpionate Ligands.*
- Kemija rutenijevih spojin. Sinteza, fizikalno-kemijska in biološka karakterizacija / *Chemistry of Ruthenium Compounds. Synthesis, Physico-Chemical and Biological Characterization.*
- 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*

- 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 platine, ki so potencialno uporabne kot citostatiki in virostatiki / *Coordination Compounds of Platinum, Potentially Applicable as Cytostatics and Virostatics*
- 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

NAGRADE, PRIZNANJA / AWARDS, RECOGNITIONS

- N. Bukovec, Nagrada Maksa Samca za popularizacijo študijev na Fakulteti za kemijo in kemijsko tehnologijo Univerze v Ljubljani za leto 2011 / *Maks Samec Award for the Popularization of Studies at the UL FKKT for 2011*
- E. Tratar Pirc, pohvala Študentskega sveta za pedagoško delo na smeri Biokemija / *Students Award for the Quality of Teaching in Biochemistry Study Programme*

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*
- P. Šegedin, sourednik / *Co-Editor, Acta Chimica Slovenica*
- I. Leban, član / *Member, Advisory Board, Macedonian Journal of Chemistry and Chemical Technology*

ORGANIZACIJA MEDNARODNIH SREČANJ / ORGANISATION OF INTERNATIONAL SCIENTIFIC CONFERENCES

- I. Leban, sopredsednik organizacijskega odbora, B. Kozlevčar, N. Lah, A. Meden, člani organizacijskega odbora 20. hrvaško-slovenskega srečanja kristalografov, Baška, Hrvaška, junij 2011 / *Co-Chairman and Members of the Organising Committee of the 20th Croatian-Slovenian Crystallographic Meeting, Baška, Croatia, June 2011*

DRUGO / OTHER

- I. Leban, strokovnjak v Institutional Evaluation Programme Evropskega združenja univerz (EUA) / *Expert in the Institutional Evaluation Programme, European Universities Association*
- I. Leban, »Noč raziskovalcev 2011«, eksperimentalno predavanje za popularizacijo kemije / *“Researchers’ Night 2011” – Demonstration Lecture for the Popularization of Chemistry*
- I. Leban, član nacionalne komisije (kot predstavnik UL FKKT) za organizacijo dogodkov v Mednarodnem letu kemije (IYC) 2011 / *Member of the National Committee for the Organisation of Events in the International Year of Chemistry (IYC 2011)*
- S. Petriček, predsednica Državne predmetne komisije za splošno maturo iz kemije / *Chairman of the Subject Testing Committee for the Matura in Chemistry*
- F. Perdih, mentor znanstvene ekipe študentov FKKT na XV. mednarodnem znanstveno-športnem srečanju – Tehnologijada 2011, Zaton pri Zadru, Hrvaška, maj 2011 / *Mentor of the FKKT Students Scientific Team at the XV. International Scientific and Sports Meeting – Tehnologijada 2011, Zaton, Croatia, May 2011*
- I. Leban, član Znanstvenega odbora za naravoslovne znanosti, Hrvatska zaklada za znanost / *Member of the Scientific Committee for Natural Sciences, Croatian Science Foundation*
- I. Leban, A. Knez, 13. srečanje UNESCOvih šol Slovenije, »Poskusi v kemiji«, eksperimentalni prikaz za popularizacijo kemije, Kolosej Ljubljana / *13th Meeting of Slovenian UNESCO Schools, Experimental Demonstration Lecture for the Popularization of Chemistry*
- I. Leban, »Competitiveness or Collaboration of Universities?«, vabljeno predavanje v okviru konference »The Paradox of the Bologna Process – Education, Mobility and Employment in the Danube Region«, Institute for the Danube Region and Central Europe (IDM), Dunaj / *Invited Lecture at the Conference “The Paradox of the Bologna Process – Education, Mobility and Employment in the Danube Region”, IDM, Vienna*

RAZISKOVALNA OPREMA / RESEARCH EQUIPMENT

- Modularni sistem za termično analizo – Mettler Toledo (TGA/SDTA 851, DSC 822, HP DSC 827 + modul za termoluminiscenco s kamero PRO. sensicam) / *Modular System for Thermal Analysis – Mettler Toledo (TGA/SDTA 851, DSC 822, HP DSC 827 + Module for Thermoluminescence with PRO. sensicam)*
- Modularni sistem za termično analizo – Mettler Toledo (TGA/DSC 1 + modul za TGA/FTIR) / *Modular System for Thermal Analysis Mettler Toledo (TGA/DSC 1 + Module for TGA/FTIR)*
- Modularni sistem za termično analizo – Perkin Elmer (TGA7, DTA7) / *Modular System for Thermal Analysis – Perkin Elmer*
- Modularni sistem za termično analizo Mettler (TG/DSC1) / *Modular System for Thermal Analysis (TG/DSC1)*
- HPLC kromatograf / *HPLC Chromatograph*
- Polarizacijski mikroskop / *Polarisation Microscope*
- Stereomikroskop / *Stereomicroscope*
- Difraktometer za monokristale Nonius Enraf CAD 4 / *Single-Crystal Diffractometer Nonius Enraf CAD 4*

- 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 (Dual) / *Single-Crystal Diffractometer Agilent SuperNova (Dual)*
- 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 Golden Gate / *ATR Specac Golden Gate*
- 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*

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 / *Centre of Excellence: Advanced Materials and Technologies for the Future*

RAZISKOVALNI PROGRAMI IN PROJEKTI / RESEARCH PROGRAMMES AND PROJECTS

RAZISKOVALNI PROGRAMI / RESEARCH PROGRAMMES

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

TEMELJNI PROJEKTI / BASIC RESEARCH

- J1-0200 Sinteza novih protitumorskih rutenijevih spojin / *Synthesis of Novel Antitumor Ruthenium Compounds*
Nosilec / *Principal Researcher*: I. Turel
- 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

- L2-1129 Razvoj fotokatalitskih prevlek in plinskih fotoreaktorjev / *Development of Photocatalytic Coatings and Gas Photoreactors*
Nosilec / *Principal Researcher*: P. Bukovec
Sofinancer / *Co-sponsored by*: Martex d.o.o.
- L4-2144 Premazi iz utekočinjenega lesa / *Liquified Wood Coatings*
Nosilec / *Principal Researcher*: P. Bukovec
Sofinancer / *Co-sponsored by*: Tanin Sevnica d.d.

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)*
- UNICHEM d.o.o.: Razvoj biocidnih sredstev in gnojil (pogodba KPIOT) / *Development of Biocidal Agents and Fertilizers*

RAZISKOVALNI PROJEKTI (DRUGI NAROČNIKI) / RESEARCH PROJECTS (OTHER CONTRACTORS)

- ESS (Evropski socialni sklad – projekti / *European Social Fund*) Razvoj naravoslovnih kompetenc / *Development of Competences in Natural Sciences*
Nosilec projekta / *Project Leader*: UM Fakulteta za naravoslovje in matematiko / *University of Maribor, Faculty of Natural Sciences and Mathematics*
FKKT partner v projektu / *FKKT Project Partner*
Koordinatorica partnerskih fakultet / *Coordinator of Partnership Faculties*: N. Bukovec

MEDNARODNO ZNANSTVENO SODELOVANJE / INTERNATIONAL RESEARCH COOPERATION

VEČSTRANSKO MEDNARODNO SODELOVANJE / MULTILATERAL COOPERATION

- COST D39 *Metallo-Drug Design and Action*
Nosilka / *Principal Researcher*: S. Grabner

COST D39 *Ruthenium Anticancer Compounds*
Nosilec / *Principal Researcher*: I. Turel

BILATERALNO MEDNARODNO SODELOVANJE / BILATERAL COOPERATION

Slovenija – Reakcije fosfatov in fosfonatov z organotitanovimi(IV) fluoridi
Češka republika in alkoksidi / *Reactions of Phosphates and Phosphonates with*
Slovenia – Organotitanium(IV) Fluorides and Alkoxides
Czech Republic Nosilec / *Principal Researcher*: A. Pevec

Slovenija – Struktura in lastnosti aktivnih organorutenijevih protirakavih
Češka republika kompleksov / *Structure and Properties of Organoruthenium*
Slovenia – Complexes Active in Anticancer Treatment
Czech Republic Nosilec / *Principal Researcher*: I. Turel

Slovenija – Kitajska Študij katalitskih in bioloških aktivnosti raznih rutenijevih
Slovenia – China kompleksov / *Study of Catalytic and Biological Activity of Various*
Ruthenium Complexes
Nosilec / *Principal Researcher*: I. Turel

BIBLIOGRAFIJA 2011 / REFERENCES 2011

IZVIRNI ZNANSTVENI ČLANEK / ORIGINAL SCIENTIFIC ARTICLE

- AK1. STARE, Katarina, ČERNÝ, Radovan, ŠKAPIN, Srečo D., SUVOROV, Danilo, MEDEN, Anton. Crystal structures of $\text{CaLa}_8\text{Ti}_9\text{O}_{31}$ and $\text{Ca}_2\text{La}_4\text{Ti}_6\text{O}_{20}$ determined from powder diffraction data. *Acta chim. slov.* [Tiskana izd.], 2011, vol. 58, no. 3, str. 465-470. [COBISS.SI-ID 25128231]
- AK2. KRANJC, Krištof, KOČEVAR, Marijan, PERDIH, Franc. Methyl 2-benzamido-4-(3,4-dimethoxyphenyl)-5-methylbenzoate and N-{5-benzoyl-2-[(Z)-2-methoxyethenyl]-4-methylphenyl}benzamide. *Acta crystallogr., C Cryst. struct. commun.*, 2011, vol. C67, no. 6, str. o201-o205, doi: 10.1107/S0108270111015794. [COBISS.SI-ID 34990341]
- AK3. KASTELIC, Jože, LAH, Nina, KIKELJ, Danijel, LEBAN, Ivan. A 1:1 cocrystal of fluconazole with salicylic acid. *Acta crystallogr., C Cryst. struct. commun.*, 2011, vol. 67, part 9, str. o370-o372, doi: 10.1107/S0108270111031155. [COBISS.SI-ID 3075953]
- AK4. KASUNIČ, Marta, MEDEN, Anton, ŠKAPIN, Srečo D., SUVOROV, Danilo, GOLOBIČ, Amalija. Structure of $\text{LaTi}_2\text{Al}_9\text{O}_{19}$ and reanalysis of the crystal structure of $\text{La}_3\text{Ti}_5\text{Al}_{15}\text{O}_{37}$. *Acta crystallogr., B Struct. sci.*, 2011, vol. B67, no. 6, str. 455-460, doi: 10.1107/S0108768111039759. [COBISS.SI-ID 35540741]
- AK5. NOVAK, Ana, BEZENŠEK, Jure, GROŠELJ, Uroš, GOLOBIČ, Amalija, STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. Serendipity at work: unexpected ring transformations of 4-aminopyrazolidin-3-ones into N-aminohydantoin. *ARKIVOC*. [Print ed.], 2011, no. VI, str. 18-28. [COBISS.SI-ID 34659589]
- AK6. PIRNAT, Klemen, ŠIMUNEK, P., URŠIČ, Uroš, BEZENŠEK, Jure, GROŠELJ, Uroš, GOLOBIČ, Amalija, MEDEN, Anton, SVETE, Jurij, STANOVNIK, Branko. Enamino esters in the synthesis of heterocyclic systems. Transformation of diethyl acetone-1,3-dicarboxylate into polysubstituted 1,2,7,8-tetrahydro-2,7-naphthyridine-4-carboxylates. *ARKIVOC*. [Print ed.], 2011, no. VI, str. 120-129. [COBISS.SI-ID 34664453]
- AK7. PERDIH, Franc, PERDIH, Anton. Lignin selective dyes : quantum-mechanical study of their characteristics. *Celulose (Lond.)*, 2011, vol. 18, no. 5, str. 1139-1150, doi: 10.1007/s10570-011-9558-3. [COBISS.SI-ID 35113733]
- AK8. MARAŠ, Nenad, PERDIH, Franc, KOČEVAR, Marijan. Synthesis of 1-aryl-1-phenylpropenes using an alkylation-rearrangement-methylation-isomerization one-pot reaction sequence. *Cent. Eur. J. Chem. (Print)*, 2011, vol. 9, no. 5, str. 904-909, doi: 10.2478/s11532-011-0074-y. [COBISS.SI-ID 35266821]
- AK9. BEZENŠEK, Jure, KOLEŠA, Tanja, GROŠELJ, Uroš, MEDEN, Anton, STARE, Katarina, SVETE, Jurij, STANOVNIK, Branko. [2+2] Cycloaddition of electron-poor acetylenes to enamines. *Curr. org. chem.*, 2011, vol. 15, no. 14, str. 2530-2539, doi: 10.2174/138527211796150633. [COBISS.SI-ID 35127045]

- AK10. BRATSOS, Ioannis, URANKAR, Damijana, ZANGRANDO, Ennio, GENOVA-KALOU, Petia, KOŠMRLJ, Janez, ALESSIO, Enzo, TUREL, Iztok. 1-(2-Picolyl)-substituted 1,2,3-triazole as novel chelating ligand for the preparation of ruthenium complexes with potential anticancer activity. *Dalton trans. (2003. Print)*, 2011, vol. 40, no. 19, str. 5188-5199, doi: 10.1039/c0dt01807d. [COBISS.SI-ID 34899461]
- AK11. TARUSHI, Alketa, POLATOGLU, Eleni, KLJUN, Jakob, TUREL, Iztok, PSOMAS, George, KESSISSOGLU, Dimitris P. Interaction of Zn(II) with quinolone drugs : structure and biological evaluation. *Dalton trans. (2003. Print)*, 2011, vol. 40, no. 37, str. 9461-9473, doi: 10.1039/C1DT10870K. [COBISS.SI-ID 35354885]
- AK12. URANKAR, Damijana, PEVEC, Andrej, KOŠMRLJ, Janez. Synthesis and characterization of platinum(II) complexes with a diazenecarboxamide-appended picolyl-triazole ligand. *European Journal of Inorganic Chemistry*, 2011, no. 12, str. 1921-1929, doi: 10.1002/ejic.2011001051. [COBISS.SI-ID 34863877]
- AK13. KOZLEVČAR, Bojan, GAMEZ, Patrick, GELDER, René de, JAGLIČIĆ, Zvonko, STRAUCH, Peter, KITANOVSKI, Nives, REEDIJK, Jan. Counterion and solvent effects on the primary coordination sphere of copper(II) bis(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)acetic acid coordination compounds. *European Journal of Inorganic Chemistry*, 2011, no. 24, str. 3650-3655, doi: 10.1002/ejic.201100410. [COBISS.SI-ID 35234309]
- AK14. HREN, Jure, PERDIH, Franc, POLANC, Slovenko, KOČEVAR, Marijan. Retention of symmetry versus desymmetrization for bicyclo[2.2.2]octenes in the presence of a bridgehead amide group. *European journal of organic chemistry*, 2011, no. 18, str. 3368-3374, doi: 10.1002/ejoc.201100104. [COBISS.SI-ID 34968581]
- AK15. JANJIC, Monika, PREBIL, Rok, GROŠELJ, Uroš, KRALJ, David, MALAVAŠIČ, Črt, GOLOBIČ, Amalija, STARE, Katarina, DAHMANN, Georg, STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. A simple synthesis of 5-(2-aminophenyl)-1H-pyrazoles. *Helv. Chim. Acta*, 2011, vol. 94, no. 9, str. 1703-1717, doi: 10.1002/hlca.201100055. [COBISS.SI-ID 35375621]
- AK16. NAJAFPOUR, Mohammad Mahdi, KOZLEVČAR, Bojan, MCKEE, Vickie, JAGLIČIĆ, Zvonko, JAGODIČ, Marko. The first pentanuclear heterobimetallic coordination cation with Ce[sup]III, Ce[sup]IV and Mn[sup]II. *Inorg. chem. commun.* [Print ed.], 2011, vol. 14, no. 1, str. 125-127, doi: 10.1016/j.inoche.2010.10.002. [COBISS.SI-ID 34709509]
- AK17. KITANOVSKI, Nives, GOLOBIČ, Amalija, ČEH, Boris. Synthesis and structural characterization of mono- and dinuclear Mo(V)-oxo-complexes containing bis(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)acetate anion as ligand. *Inorg. chem. commun.* [Print ed.], 2011, vol. 14, issue 1, str. 276-280, doi: 10.1016/j.inoche.2010.11.013. [COBISS.SI-ID 34680069]
- AK18. KITANOVSKI, Nives, GOLOBIČ, Amalija, ČEH, Boris. Synthesis and crystal structure of novel mononuclear Mo(IV) and Mo(III) complexes containing bis(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)acetate anion as ligand. *Inorg. chem. commun.* [Print ed.], 2011, vol. 14, no. 3, str. 470-473, doi: 10.1016/j.inoche.2011.01.002. [COBISS.SI-ID 34817797]
- AK19. DOJER, Brina, PEVEC, Andrej, JAGODIČ, Marko, KRISTL, Matjaž, DROFENIK, Mihael. Three new cobalt(II) carboxylates with 2-, 3- and 4-aminopyridine : syntheses, structures and magnetic properties. *Inorg. Chim. Acta*. [Print ed.], Available online 31 October 2011, doi: 10.1016/j.ica.2011.10.056. [COBISS.SI-ID 15502614]
- AK20. MUJAWAR, S. H., INAMDAR, A. I., BETTY, C. A., CERC KOROŠEC, Romana, PATIL, P. S. Electrochromism in composite WO₃-Nb₂O₅ thin films synthesized by spray pyrolysis technique. *J. Appl. Electrochem.*, 2011, vol. 41, no. 4, str. 397-403, doi: 10.1007/s10800-010-0249-9. [COBISS.SI-ID 34675205]
- AK21. MODEC, Barbara, STEPHAN, Michel. Synthesis and crystal structures of [αpfa]-phenyl- and [αpfa]-trifluoromethyl-[αpfa]-(2-pyridyl-N-oxide)ethanols and [αpfa]-phenyl-[αpfa]-(2-pyridyl-N-oxide)ethylene. *J. chem. crystallogr.*, 2011, vol. 41, issue 3, str. 386-390, doi: 10.1007/s10870-010-9894-4. [COBISS.SI-ID 4588826]
- AK22. DIMIZA, Filitsa, PERDIH, Franc, TANGOULIS, Vassilis, TUREL, Iztok, KESSISSOGLU, Dimitris P., PSOMAS, George. Interaction of copper(II) with the non-steroidal anti-inflammatory drugs naproxen and diclofenac : synthesis, structure, DNA- and albumin-binding. *J. inorg. biochem.* [Print ed.], 2011, vol. 105, no. 3, str. 476-489, doi: 10.1016/j.jinorgbio.2010.08.013. [COBISS.SI-ID 34869253]
- AK23. ESHKOURFU, R. O., ČOBELJIČ, B. R., VUJČIĆ, Miroslava, TUREL, Iztok, PEVEC, Andrej, SEPČIČ, Kristina, ZEC, Manja, RADULOVIĆ, Siniša, SRDIČ-RADIĆ, Tatjana, MITIĆ, D. M., ANDJELKOVIĆ, K. K., SLADIĆ, Dušan M. Synthesis, characterization, cytotoxic activity and DNA binding properties of the novel dinuclear cobalt(III) complex with the condensation product of 2-acetylpyridine and malonic acid dihydrazide. *J. inorg. biochem.* [Print ed.], 2011, vol. 105, no. 9, str. 1196-1203, doi: 10.1016/j.jinorgbio.2011.05.024. [COBISS.SI-ID 35187461]
- AK24. SKYRIANOU, Kalliopi C., PERDIH, Franc, PAPAPOULOS, Athanasios N., TUREL, Iztok, KESSISSOGLU, Dimitris P., PSOMAS, George. Nickel-quinolones interaction. Part 5, Biological evaluation of nickel(II) complexes with first-, second- and third-generation quinolones. *J. inorg. biochem.* [Print ed.], 2011, vol. 105, no. 10, str. 1273-1285, doi: 10.1016/j.jinorgbio.2011.06.005. [COBISS.SI-ID 35309573]
- AK25. FOUNTOLAKI, Stella, PERDIH, Franc, TUREL, Iztok, KESSISSOGLU, Dimitris P., PSOMAS, George. Non-steroidal anti-inflammatory drug diflunisal interacting with Cu(II). Structure and biological features. *J. inorg. biochem.* [Print ed.], 2011, vol. 105, no. 12, str. 1645-1655, doi: 10.1016/j.jinorgbio.2011.09.004. [COBISS.SI-ID 35501317]
- AK26. BEALE, Andrew M., O'BRIEN, Matthew G., KASUNIČ, Marta, GOLOBIČ, Amalija, SANCHEZ-SANCHEZ, Manuel, LOBO, Alan J. W., LEWIS, Dewi W., WRAGG, David S., NIKITENKO, Sergey, BRAS, Wim, WECK-HUYSEN, Bert M. Probing ZnAPO-34 self-assembly using simultaneous multiple in situ techniques. *The journal of physical chemistry. C, Nanomaterials and interfaces*, 2011, vol. 115, no. 14, str. 6331-6340, doi: 10.1021/jp200043b. [COBISS.SI-ID 34955013]

- AK27. IPAVEC, Andrej, GABROVŠEK, Roman, VUK, Tomaž, KAUČIČ, Venčeslav, MAČEK, Jadran, MEDEN, Anton. Carboaluminate phases formation during the hydration of calcite-containing Portland cement. *J. Am. Ceram. Soc.*, 2011, vol. 94, no. 3, str. 1238-1242, doi: 10.1111/j.1551-2916.2010.04201.x. [COBISS.SI-ID 34764037]
- AK28. UMEK, Polona, CERC KOROŠEC, Romana, GLOTER, Alexandre, PIRNAT, Urša. The control of the diameter and length of [alpha]-MnO₂ nanorods by regulation of reaction parameters and their thermogravimetric properties. *Mater. res. bull.* [Print ed.], 2011, vol. 46, no. 2, str. 278-284, doi: 10.1016/j.materresbull.2010.10.012. [COBISS.SI-ID 24111399]
- AK29. KRISTL, Matjaž, GOLOBIČ, Amalija, DOJER, Brina, DROFENIK, Mihael. Synthesis and structure of hydroxylammonium fluoroaluminate. *Monatsh. Chem.*, 2011, vol. 142, no. 8, str. 755-762, doi: 10.1007/s00706-011-0508-4. [COBISS.SI-ID 15004182]
- AK30. DOJER, Brina, GOLOBIČ, Amalija, JAGLIČIČ, Zvonko, KRISTL, Matjaž, DROFENIK, Mihael. Two new nickel(II) carboxylates with 3- and 4-aminopyridine : syntheses, structures, and magnetic properties. *Monatsh. Chem.*, Published online 16 August 2011, doi: 10.1007/s00706-011-0578-3. [COBISS.SI-ID 15248918]
- AK31. DOJER, Brina, GOLOBIČ, Amalija, JAGLIČIČ, Zvonko, KRISTL, Matjaž, DROFENIK, Mihael. Hydroxylammonium fluorometalate : synthesis and characterisation of a new fluorozincate. *Monatsh. Chem.*, Published online 22 October 2011, doi: 10.1007/s00706-011-0667-3. [COBISS.SI-ID 15508502]
- AK32. KLJUN, Jakob, BYTZEK, Anna K., KANDIOLLER, Wolfgang, BARTEL, Caroline, JAKUPEC, Michael, HARTINGER, Christian G., KEPPLER, Bernhard K., TUREL, Iztok. Physicochemical studies and anticancer potency of ruthenium [eta]^{sup}6-p-cymene complexes containing antibacterial quinolones. *Organometallics*, 2011, vol. 30, issue 9, str. 2506-2512, doi: 10.1021/om101180c. [COBISS.SI-ID 34924293]
- AK33. DOHČEVIČ-MITROVIČ, Zorana D., GOLUBOVIČ, A., RADOVIČ, M., FRUTH, V., KREMENOVIČ, Aleksandar, MEDEN, Anton, BABIČ, B., ŠČEPANOVIČ, M., POPOVIČ, Zoran V. Mesoporous CeO₂ nanopowders with different particle sizes. *Phys. status solidi, A Appl. mater. sci. (Print)*. [Tiskana izd.], 2011, vol. 208, no. 6, str. 1399-1402, doi: 10.1002/pssa.201000355. [COBISS.SI-ID 35103749]
- AK34. PEVEC, Andrej, TEKAVEC, Martina, DEMŠAR, Alojz. Cation-anion interactions involving hydrogen bonds : syntheses and crystal structures study of hexafluorotitanate(IV) salts with pyridine and methyl substituted pyridines. *Polyhedron*. [Print ed.], 2011, vol. 30, no. 4, str. 549-555, doi: 10.1016/j.poly.2010.11.018. [COBISS.SI-ID 34788101]
- AK35. PINTER, Balazs, DEMŠAR, Alojz, URANKAR, Damijana, DE PROFT, Frank, KOŠMRLJ, Janez. Conformational fluxionality in a palladium(II) complex of flexible click chelator 4-phenyl-1-(2-picolyl)-1,2,3-triazole : a dynamic NMR and DFT study. *Polyhedron*. [Print ed.], 2011, vol. 30, no. 14, str. 2368-2373, doi: 10.1016/j.poly.2011.05.015. [COBISS.SI-ID 35308805]
- AK36. KOZJEK-ŠKOFIC, Irena, PADEŽNIK GOMILŠEK, Jana, PIHLAR, Boris, KODRE, Alojz, BUKOVEC, Nataša. Structural and electrochemical investigations of Ce/Cu mixed oxide thin films. *Sol. energy mater. sol. cells*. [Print ed.], 2011, vol. 95, no. 2, str. 779-785, doi: 10.1016/j.solmat.2010.10.023. [COBISS.SI-ID 34710021]
- AK37. STEPHAN, Michel, MODEC, Barbara, MOHAR, Barbara. Asymmetric synthesis of SMS-Phos series' precursor and a naphthalene analogue. *Tetrahedron lett.* [Print ed.], 2011, vol. 52, issue 10, str. 1086-1089, doi: 10.1016/j.tetlet.2010.12.106. [COBISS.SI-ID 4599834]
- AK38. JURANOVIČ, Amadej, KRANJC, Krištof, PERDIH, Franc, POLANC, Slovenko, KOČEVAR, Marijan. Comparison of the reaction pathways and intermediate products of a microwave-assisted and high-pressure-promoted cycloaddition of vinyl-moiety-containing dienophiles on 2H-pyran-2-ones. *Tetrahedron*. [Print ed.], 2011, vol. 67, no. 19, str. 3490-3500, doi: 10.1016/j.tet.2011.03.034. [COBISS.SI-ID 34893061]
- AK39. NOVAK, Ana, BEZENŠEK, Jure, PEZDIRC, Lidija, GROŠELJ, Uroš, KASUNIČ, Marta, PODLIPNIK, Črtomir, STANOVNIK, Branko, ŠIMUNEK, P., SVETE, Jurij. Regio- and stereoselective cycloadditions of (1Z, 4R*, 5R*)-1-arylmethylidene-4-benzoylamino-3-oxo-5-phenylpyrazolidin-1-ium-2-ides to methyl methacrylate. *Tetrahedron*. [Print ed.], 2011, vol. 67, no. 50, str. 9729-9735, doi: 10.1016/j.tet.2011.09.140. [COBISS.SI-ID 35497221]
- AK40. MALAVAŠIČ, Črt, GROŠELJ, Uroš, GOLOBIČ, Amalija, BEZENŠEK, Jure, STANOVNIK, Branko, STARE, Katarina, WAGGER, Jernej, SVETE, Jurij. Synthesis and structure of novel (S)-1,6-dialkylpiperazine-2,5-diones and (3S,6S)-1,3,6-trialkylpiperazine-2,5-diones. *Tetrahedron: asymmetry*. [Print ed.], 2011, vol. 22, no. 6, str. 629-640, doi: 10.1016/j.tetasy.2011.03.014. [COBISS.SI-ID 35038725]
- AK41. PETRIČEK, Saša. Octahedral and tetrahedral cobalt(II) sites in cobalt chloride complexes with polyethers. *Croat. chem. acta*, 2011, vol. 84, no. 4, str. 515-520, doi: 10.5562/cca1747. [COBISS.SI-ID 35780869]

PREGLIEDNI ZNANSTVENI ČLANEK / REVIEW ARTICLE

- AK42. TUREL, Iztok, KLJUN, Jakob. Interactions of metal ions with DNA, its constituents and derivatives, which may be relevant for anticancer research. *Curr. topics med. chem.*, 2011, vol. 11, no. 21, str. 2661-2687. [COBISS.SI-ID 35455749]
- AK43. VERDEL, Nada, JERMAN, Igor, BUKOVEC, Peter. The "autothixotropic" phenomenon of water and its role in proton transfer. *Int. j. mol. sci. (Online)*, 2011, vol. 12, no. 11, str. 7481-7494, doi: 10.3390/ijms12117481. [COBISS.SI-ID 35490309]

KRATKI ZNANSTVENI PRISPEVEK / SHORT SCIENTIFIC ARTICLE

- AK44. PERDIH, Franc. [(Eta)[sup]5-1,3-bis(trimethylsilyl)cyclopentacyclopentadienyl][(eta)[sup]5 (trimethylsilyl)cyclopentadienyl]titanium(IV). *Acta crystallographica. E, Structure Reports*, 2011, vol. E67, no. 12, str. m1693 (13 str. suppl.), doi: 10.1107/S1600536811046228. [COBISS.SI-ID 35506181]
- AK45. PERDIH, Franc. Bis(pentane-2,4-dionato-(kappa)[sup]2O,O')(1,10-phenanthroline-(kappa)[sup] 2N,N')cobalt(II). *Acta crystallographica. E, Structure Reports*, 2011, vol. E67, no. 12, str. m1697 (6 str. suppl.), doi: 10.1107/S1600536811046216. [COBISS.SI-ID 35506693]
- AK46. PEVEC, Andrej, KAFKA, Stanislav, KOŠMRLJ, Janez. 2-Hydroxy-2-methyl-1-phenylindolin-3-one. *Acta crystallographica. E, Structure Reports*, 2011, vol. E67, no. 12, str. o3228-o3229 (7 str. suppl.), doi: 10.1107/S1600536811045302. [COBISS.SI-ID 35526661]

OBJAVLJENI ZNANSTVENI PRISPEVEK NA KONFERENCI (VABLJENO PREDAVANJE) PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTION (INVITED LECTURE)

- AK47. PEVEC, Andrej. Structural studies of some organotitanium(IV) complexes : [plenary lecture]. V: CETINA, Mario (ur.), MATKOVIĆ ČALOGOVIĆ, Dubravka (ur.), POPOVIĆ, Stanko (ur.), SKOKO, Željko (ur.), ŠTEFANIČ, Zoran (ur.), VIŠNJEVAC, Aleksander (ur.). The Twentieth Croatian-Slovenian Crystallographic Meeting - CSCM20, Baška, Island of Krk, Croatia, June, 15-19, 2011. *Book of abstracts, programme*. Zagreb: Croatian Academy of Sciences and Arts, Croatian Crystallographic Association, 2011, str. 4. [COBISS.SI-ID 35211781]
- AK48. STANOVNIK, Branko, BEZENŠEK, Jure, KOLEŠA, Tanja, URŠIČ, Uroš, GROŠELJ, Uroš, SVETE, Jurij. Enaminones and related compounds in [2+2] and [4+2] cycloaddition reactions : [vabljeno predavanje]. V: BABJAK, Matej (ur.). 14th Blue Danube Symposium on Heterocyclic Chemistry, June 26-29, 2011, Podbanské, Slovakia. *Program. Abstracts of papers. List of participants*. Bratislava: Publishing House of Slovak University of Technology, 2011, str. 18. [COBISS.SI-ID 35196933]
- AK49. BUKOVEC, Nataša, GLAŽAR, Saša A., GOLOB, Nika, SIKOŠEK, Darinka. Izobraževanje učiteljev kemije = Chemistry teacher education. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14-16 september 2011*. Maribor: FKKT, 2011, 7 str. [COBISS.SI-ID 35400709]
- AK50. LONCENAR, Mojca, MLADENOVIC, Ana, MIRTIC, Breda, ZUPANČIČ, Marija, BUKOVEC, Peter. Vpliv kislega dežja na mineraloško sestavo jeklarske žilindre = The effect of acid rain on the mineralogical characterisation of steel slag. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14-16 september 2011*. Maribor: FKKT, 2011, str. 1-9. [COBISS.SI-ID 35395077]

OBJAVLJENI ZNANSTVENI PRISPEVEK NA KONFERENCI / PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTION

- AK51. KALČIKOVÁ, Gabriela, ZAGORC-KONČAN, Jana, ZUPANČIČ, Marija, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Assessment of phytotoxicity of landfill leachates. V: KALOGERAKIS, Nicolas (ur.), FAVA, Fabio (ur.). *5th European Bioremediation Conference : July 4-7, 2011, Chania, Crete, Greece*. [S. l.: s. n.], 2011, str. [1-5]. [COBISS.SI-ID 35206661]
- AK52. SINUR, Alenka, BUKOVEC, Peter, ROGAN ŠMUC, Nastja, DOLENEC, Tadej, SERAFIMOVSKI, Todor, ZUPANČIČ, Marija. Mobility of metals in Sasa mine tailing dam material. V: SERAFIMOVSKI, Todor (ur.), BOEV, Blažo (ur.). *Anthropogenic effects on the human environment in the Neogene basins in the SE Europe : proceedings*. Ljubljana: Faculty of Natural Sciences and Engineering, Department of Geology; IGCP Committe, 2011, str. 9-14. [COBISS.SI-ID 942430]
- AK53. ZUPANČIČ, Marija, BUKOVEC, Peter. Evaluation of long-term stability of metal immobilization in soil treated with phosphate amendments and lime. V: RENELLA, Giancarlo (ur.), GABBRIELLI, Roberto (ur.). 11th International conference on the biogeochemistry of trace elements, Florence, Italy, July 3-7, 2011. *ICOBTE 2011*. [Florence, Italy: University of Florence, 2011], str. [1-2]. [COBISS.SI-ID 35358469]
- AK54. KRANJC, Matija, BUDIJA, Franc, CERC KOROŠEC, Romana, PETRIČ, Marko. Liquefaction optimization of the residue from tannin extraction and its thermal performance. V: *NWBC 2011 : The 3rd Nordic wood biorefinery conference : 22-24 March, 2011 Stockholm, Sweden*. Stockholm: Innventia, str. 360-361. [COBISS.SI-ID 1938569]
- AK55. TUREL, Iztok. Rutenijevi kompleksi z možnim protirakovim učinkom. V: OBLAK, Zdenka (ur.), KLOPČIČ, Luka (ur.). *Poti znanosti k edinosti Slovencev : zbornik*. Ljubljana: Svetovni slovenski kongres = Slovenian World Congress, 2011, str. 117-119. [COBISS.SI-ID 35448581]
- AK56. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, TRATAR-PIRC, Elizabeta, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona, ZAGORC-KONČAN, Jana. Impact of ionic liquid 1-butyl-3-methylpyridinium dicyanamide to anaerobic treatment. V: *Green Process Engineering 2011, 6 - 8 December, Seri Pacific Hotel, Kuala Lumpur, Malaysia. Proceedings*. [S. l.: s. n.], 2011, str. [1-10]. [COBISS.SI-ID 35623429]

- AK57. DOJER, Brina, PEVEC, Andrej, BELAJ, Ferdinand, JAGLIČIČ, Zvonko, KRISTL, Matjaž, DROFENIK, Mihael. Kobalt(II) kompleksi s piridinkarboksamidami = Cobalt(II) complexes with pyridinecarboxamides. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14-16 september 2011*. Maribor: FKKT, 2011, 7 str. [COBISS.SI-ID 15320854]
- AK58. PERDIH, Franc. Strukture $[Cp^*[\text{spodaj}]_2Ti[\text{spodaj}]_2F[\text{spodaj}]_4(SO[\text{spodaj}]_4)[\text{spodaj}]_2][na]_2-$ in $[Cp^*TiF[\text{spodaj}]_3(NO[\text{spodaj}]_3)][na]-$ anionov = Structures of $[Cp^*[\text{sub}]_2Ti[\text{sub}]_2F[\text{sub}]_4](SO[\text{sub}]_4)[\text{sub}]_2][\text{sup}]_2-$ and $[Cp^*TiF[\text{sub}]_3(NO[\text{sub}]_3)][\text{sup}]-$ anions. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14-16 september 2011*. Maribor: FKKT, 2011, str. 1-6. [COBISS.SI-ID 35403013]
- AK59. KLJUN, Jakob, TUREL, Iztok. Rutenijeve koordinacijske spojine z možnim protirakavim delovanjem = Ruthenium coordination compounds with potential anticancer activity : [predavanje]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14-16 september 2011*. Maribor: FKKT, 2011, str. 1-8. [COBISS.SI-ID 35402501]
- AK60. CER KERČMAR, Ksenija, TRATAR-PIRC, Elizabeta, MODEC, Barbara, BUKOVEC, Peter. Rentgenska strukturna analiza dvojedrnega kadmijevega ksantureata = X-ray structural analysis of binuclear cadmium xanthureate. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14-16 september 2011*. Maribor: FKKT, 2011, str. 1-9. [COBISS.SI-ID 35401733]
- AK61. KOZJEK-ŠKOFIC, Irena, BUKOVEC, Nataša. Priprava in karakterizacija tankih plasti aluminijevega oksida na aluminij = Preparation and characterization aluminium oxide thin films on aluminium : [predavanje]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14.-16. september 2011. Zbornik povzetkov referatov s posvetovanja*. Maribor: FKKT, 2011, str. 52. [COBISS.SI-ID 35415045]
- AK62. LONCENAR, Mojca, ZUPANČIČ, Marija, BUKOVEC, Peter, JAKLIČ, Anton. Investigation of the long-term leaching behaviour of EAF steel slag : [lecture]. V: *Ferrous slag - resource development for an environmentally sustainable world : proceedings : 6th European Slag Conference, 20th - 22nd October 2010, Madrid*, (Euroslag publication, no. 5). Duisburg: The European Slag Association, 2011, str. 223-234. [COBISS.SI-ID 35690245]
- AK63. ZUPANČIČ JUSTIN, Maja, ZUPANČIČ, Marija, ZUPANČ, Vesna. Irrigation of willow and poplar with landfill leachate and compost wastewater : influence on biomass and elemental composition of aboveground tissue. V: ORLOVIČ, Saša (ur.). *STREPOW : workshop proceedings*. [Novi Sad: Institute of Lowland Forestry and Environment, 2011], str. 135-141, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 29046489]
- AK64. MEDEN, Anton. Rentgenska praškovna difrakcija (XRD). V: KUŠČER, Danjela (ur.). *Zbornik predavanj : delavnica Karakterizacija materialov, 7. in 8. november 2011, Rogla, Slovenija*. Ljubljana: Center odličnosti Namaste, 2011, str. 13-16. [COBISS.SI-ID 35560965]

SAMOSTOJNI ZNANSTVENI SESTAVEK ALI POGlavJE V MONOGRAFski PUBLIKACIJI INDEPENDENT SCIENTIFIC COMPONENT PART OR A CHAPTER IN A MONOGRAPH

- AK65. CERC KOROŠEC, Romana, BUKOVEC, Peter. Thermal methods of analysis as a tool for quantitative composition determination of "water-in-oil" emulsions. V: JANSSEN, Thomas J. (ur.). *Explosive materials : classification, composition, and properties*. Hauppauge, N.Y.: Nova Science Publishers, cop. 2011, str. 125-144. [COBISS.SI-ID 34710533]

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

- AK66. BUKOVEC, Nataša. *Kemija za gimnazije 1, Zbirka nalog za 1. letnik gimnazij*. 1. izd. Ljubljana: DZS, 2011. 64 str., ilustr. ISBN 978-961-02-0254-7. [COBISS.SI-ID 256764416]
- AK67. KOŠMRLJ, Berta, MOZER, Alenka, PETRIČEK, Saša, SMRDU, Andrej, ZMAZEK, Boris, WISSIAK GRM, Katarina Senta, KRAFOGEL, Bernarda (ur.), TRKOV, Joži (ur.). *Kemija, Zbirka maturitetnih nalog z rešitvami 2005-2010*, (Maturitetni izpiti). Ljubljana: Državni izpitni center, 2011. 297 str., ilustr. ISBN 978-961-6322-96-6. [COBISS.SI-ID 258494720]
- AK68. ČEH, Boris, DOLENC, Darko. *Snovi, okolje, prehrana : učbenik za kemijo v srednjih strokovnih šolah*. 1. izd. Ljubljana: DZS, 2011. 168 str., ilustr. ISBN 978-961-02-0077-2. [COBISS.SI-ID 253820416]

DRUGO UČNO GRADIVO / OTHER EDUCATIONAL MATERIAL

- AK69. PERDIH, Franc. *Anorganska kemija II : študijsko gradivo za študente Kemijske tehnologije : (elektronsko gradivo)*. Ljubljana: Univ. v Ljubljani, Fak. za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za anorgansko kemijo, 2011. 1 optični disk (CD-ROM), ilustr. [COBISS.SI-ID 34771973]
- AK70. DOLENC, Darko, GRAUNAR, Mojca, MODEC, Barbara. *Kemija danes 2, Delovni zvezek za 9. razred devetletne osnovne šole*, (Raziskovalec 9). 1. izd. Ljubljana: DZS, 2011. 91 str., ilustr. ISBN 978-86-341-3061-4. [COBISS.SI-ID 253760512]

- AK71. BUKOVEC, Nataša, CERC KOROŠEC, Romana, GOLOBIČ, Amalija, LAH, Nina, TRATAR-PIRC, Elizabeta. *Osnove kemijskega računanja : zbirka nalog*. 1. izd. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2011. 192 str., ilustr. ISBN 978-961-6756-28-0. [COBISS.SI-ID 258079744]
- AK72. LAH, Nina. *Reakcije bakrovih(II) karboksilatov z 2-aminopiridinom : študijsko gradivo za študente predmeta Anorganska kemija II*. Ljubljana: Univ. v Ljubljani, Fak. za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2011. 10 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 35424773]
- AK73. ČEH, Boris, DOLENC, Darko. *Snovi, okolje, prehrana, Delovni zvezek za kemijo v srednjih strokovnih šolah*. 1. izd. Ljubljana: DZS, 2011. 84 str., ilustr. ISBN 978-961-02-0138-0. [COBISS.SI-ID 255959040]

PREDAVANJE NA TUJI UNIVERZI / INVITED LECTURE AT FOREIGN UNIVERSITY

- AK74. PEVEC, Andrej. *New organotitanium(IV) phosphates and phosphonates : [Masaryk University, Department of Chemistry, Brno, Czech Republic, 23. 9. 2011]*. Brno, 2011. [COBISS.SI-ID 35422213]
- AK75. PETRIČEK, Saša. *Structural variety of lanthanide and transition metals complexes with polyethers (DME, diglyme) : [Masaryk University, Department of Chemistry, Brno, Republika Češka, 26. 5. 2011]*. Brno, 2011. [COBISS.SI-ID 35286789]
- AK76. ZUPANČIČ, Marija. *Metals in soils : [Slovak University of Technology in Bratislava, Faculty of Chemical and Food Technology, Bratislava, December 19th, 2011]*. Bratislava, 2011. [COBISS.SI-ID 35656197]
- AK77. TRATAR-PIRC, Elizabeta. *Determination of anaerobic biodegradability : [Slovak University of Technology in Bratislava, Faculty of Chemical and Food Technology, Bratislava, December 19th, 2011]*. Bratislava, 2011. [COBISS.SI-ID 35656453]

VABLJENO PREDAVANJE NA KONFERENCI BREZ NATISA / UNPUBLISHED INVITED CONFERENCE LECTURE

- AK78. TUREL, Iztok. *Kemija za jutrišnji dan : 17. slovenski festival znanosti z mednarodno udeležbo, Planetarni izzivi časa, (4. - 6. oktober 2011)*. Ljubljana, 2011. [COBISS.SI-ID 35427589]
- AK79. MEDEN, Anton. *Maks Samec (1881-1964), prvi slovenski profesor na prvi slovenski univerzi : 17. slovenski festival znanosti z mednarodno udeležbo, Planetarni izzivi časa, (4. - 6. oktober 2011)*. Ljubljana, 2011. [COBISS.SI-ID 35427077]
- AK80. MEDEN, Anton. *XRD of thin coatings : presented at 1st BioTiNet Workshop "Advanced Methods for Materials Characterization", 23-27 October 2011, Ljubljana, Slovenia*. 2011; Ljubljana. [COBISS.SI-ID 35560709]
- AK81. LEBAN, Ivan. *Zanimivi poskusi v kemiji : 17. slovenski festival znanosti z mednarodno udeležbo, Planetarni izzivi časa, (4. - 6. oktober 2011)*. Ljubljana, 2011. [COBISS.SI-ID 35430149]
- AK82. TRATAR-PIRC, Elizabeta. *Zelena kemija : 17. slovenski festival znanosti z mednarodno udeležbo, Planetarni izzivi časa, (4. - 6. oktober 2011)*. Ljubljana, 2011. [COBISS.SI-ID 35427333]

UREDNIK / EDITORSHIP

- AK83. *Metal-based drugs*. Turel, Iztok (član uredniškega odbora 2001-2002, član uredniškega sveta 2006-). Tel Aviv: Freund Publishing House. ISSN 0793-0291. [COBISS.SI-ID 759343]

KATEDRA ZA BIOKEMIJO **CHAIR OF BIOCHEMISTRY**

PREDSTOJNICA KATEDRE / HEAD

prof. dr. Brigita Lenarčič

SODELAVCI KATEDRE / PERSONNEL

Učitelji / Faculty

prof. dr. Brigita Lenarčič

doc. dr. Marko Dolinar

doc. dr. Gregor Gunčar

v dopolnilnem razmerju / *part-time*

prof. dr. Tamara Lah Turnšek

prof. dr. Vladka Čurin Šerbec

izr. prof. dr. Kristina Djinović Carugo

prof. dr. Roman Jerala

prof. ddr. Boris Turk

izr. prof. dr. Janez Plavec

prof. dr. Igor Križaj

izr. prof. dr. Metka Renko (upokojena / *retired*)

Asistenti / Assistants

dr. Nejc Jelen

Marina Klemenčič, univ. dipl. biokem.

Matevž Korenč, univ. dipl. biokem.

dr. Marko Novinec

dr. Miha Pavšič

dr. Vera Župunski

Raziskovalki / Researchers

dr. Maruška Budič
(nadomeščanje za čas odsotnosti)

dr. Nika Lovšin

Strokovna sodelavka / Research Assistant

dr. Petra Prijatelj Žnidaršič

Tehnika / Technicians

Matjaž Malavašič

Mateja Presečnik

Mladi raziskovalci Young Researchers	Mentor <i>Mentor</i>	Čas usposabljanja <i>Programme Duration</i>	Oblika usposabljanja <i>Degree</i>
Sara Drmota	K. Djinović Carugo	2010–2014	doktorski študij / <i>PhD</i>
Katja Hrovat Arnež	G. Gunčar	2010–2014	doktorski študij / <i>PhD</i>
Nataša Lindič	N. Lovšin	2009–2013	doktorski študij / <i>PhD</i>
Nives Škrliž	M. Dolinar	2006–2011	doktorski študij / <i>PhD</i>
Tilen Vidmar	B. Lenarčič	2010-2014	doktorski študij / <i>PhD</i>

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:

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

Biolška kemija / *Biological Chemistry*

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*

Molekularna imunologija z imunobiokemijo / *Molecular Immunology and Immunobiochemistry*

Uporaba encimov / *Applied Enzymology*

Kemijsko inženirstvo / *Chemical Engineering* – UN:

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

Predbolonjski dodiplomski programi / *Pre-Bologna Undergraduate Programmes*

Tehnologija rekombinantne DNA / *Recombinant DNA Technology* – UN

Molekularna imunologija / *Molecular Immunology* – UN

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

Biološke membrane / *Biological Membranes* – UN

Kemija in biokemija živil / *Chemistry and Biochemistry of Food* – UN

Regulacija metabolizma / *Regulation of Metabolism* – UN

Biokemija raka / *Cancer Biochemistry* – UN

Encimi / *Enzymes* – UN

Biokemija II / *Biochemistry II* – UN

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

Izbrana poglavja iz biokemije / *Selected Topics in Biochemistry*

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

RAZISKOVALNA DEJAVNOST / RESEARCH ACTIVITIES

Raziskovalno delo članov katedre poteka na petih raziskovalnih projektih ter v okviru treh raziskovalnih programov: Toksini in biomembrane, Proteoliza in njena regulacija ter Strukturna biologija. Pri vseh treh večina raziskav poteka na odsekih Instituta »Jožef Stefan«.

Epitelijska celična adhezijska molekula EpCAM in sorodna molekula Trop-2 sta transmembranska glikoproteina, značilna za zarodne ter normalne epitelijske in karcinomske celice. Določili smo kristalno strukturo dimera zunajceličnega dela človeškega EpCAM, ki predstavlja polovico predpostavljene adhezijske enote, raziskave pa nadaljujemo v smer pojasnitve nastanka adhezijskih kontaktov. Strukturne študije Trop-2 smo razširili na podrobnejšo ka-

rakterizacijo vezave različnih molekul na citosolni del omenjenega proteina, kar je ključnega pomena pri prenosu signala iz zunajceličnega okolja v notranjost celice.

Preučujemo tudi delovanje človeških zunajceličnih proteinov SMOC-1 in SMOC-2. Cilj našega dela je pridobitev strukturnih in funkcijskih podatkov za določitev njune vloge pri fizioloških procesih v tkivih, predvsem pri procesih celične adhezije.

V tem letu smo začeli z raziskovanjem strukturnih in funkcionalnih lastnosti proteina α -aktinina 1. Določiti želimo tridimenzionalno zgradbo tega proteina in opisati konformacijske spremembe, ki so posledica vezave kalcijevih ionov.

Ugotoviti želimo, kakšna je struktura proteinaze katepsina K v kompleksu s trojno vijačnico kolagena, kar nam bo pomagalo razumeti mehanizem cepitve kolagenskih molekul in vlogo ključnih aminokislinskih ostankov, ki pri tem sodelujejo.

Preučujemo vpliv RNA na agregacijo proteinov TDP-43 in FUS, ki sta ena glavnih dejavnikov v razvoju nevrodegenerativnih bolezni amiotrofična lateralna skleroza in frontotemporalna demenca. Ugotovili smo, da toksično zaporedje RNA upočasni rast fibroblastov, dobljenih od pacientov z amiotrofno lateralno sklerozo, ki imajo agregate TDP-43 v citoplazmi.

Člani katedre, ki se ukvarjajo s toksinologijo, raziskujejo evolucijsko zgodovino, dinamiko in mehanizme delovanja transpozicijskih elementov ter odnose struktura – funkcija pri različnih toksinih.

Proteini APOBEC3 (A3) preprečujejo razmnoževanje številnim eksogenim in endogenim retrovirusom ter retrotranspozonom. V naši skupini raziskujemo, kako proteini preprečujejo razmnoževanje retrotranspozonom z uporabo celičnih kultur in s študijami na živalskih modelih. Ugotovili smo, da proteini A3 preprečujejo razmnoževanje retrotranspozonom tik pred njihovo vključitvijo v genom in, da zato encimska aktivnost ni potrebna.

Pripravili smo rekombinantne fragmente protiteles proti prionskemu proteinu, dodatno označene s peptidom, ki jih usmerja skozi krvno-možgansko pregrado. Na poskusnih miših smo preverili morebitno uporabnost takih konstruktov za zdravljenje možganskih bolezni.

Pojasniti želimo vlogo in delovanje nekaterih proteinov, ki se izražajo v makrofagih in modulirajo imunski odziv. Poskušamo pripraviti kristale enega od teh proteinov in določiti njegovo tridimenzionalno strukturo ter na osnovi le-te pojasniti njegovo funkcijo pri apoptozi makrofagov.

Razvijamo tudi nanosenzorje na osnovi hipervariabilnih domen kameljih protiteles. Te domene smo že izrazili v bakterijah in dokazali njihovo specifično vezavo na tarčni antigen. Raziskave nadaljujemo s pripravo elektrod s hipervariabilnimi domenami vezanimi na nanožice, ki so jih razvili raziskovalci na Institutu »Jožef Stefan«.

The Chair is engaged in five research projects running within three different research programmes at the Jožef Stefan Institute: Toxins and Biomembranes, Proteolysis and its Regulation, and Structural Biology.

Epithelial cell adhesion molecule EpCAM and related molecule Trop-2, transmembrane glycoproteins found on the surface of stem cells as well as on normal epithelial and carcinoma cells, play an important role in regulation of cell proliferation and differentiation. We have determined the crystal structure of dimerized extracellular part of human EpCAM which rep-

resents a half of the proposed adhesion unit, and we are continuing research to explain the formation of adhesion contacts. At the same time we have expanded structural studies of Trop-2 to detailed characterization of binding of various molecules to the cytosolic part of Trop-2 which is a key event during relay of signals from extracellular to intracellular space.

We are studying human extracellular proteins SMOC-1 and SMOC-2 (Secreted MOdular Calcium-binding proteins). Our goal is to obtain structural and functional data to determine their roles in physiological processes in tissues, particularly in the processes of cell adhesion.

We started with investigations of structural and functional properties of α -actinin 1. Our goal is to determine the three-dimensional structure of this protein and to elucidate structural changes that result from binding of calcium ions.

This year we started experiments on characterization of collagen fiber digestion by cathepsin K. By solving the three dimensional structure of cathepsin K in complex with a collagen fiber we expect to understand the mechanism and identify key amino acid residues involved in hydrolysis of collagen fibers.

The research on toxinology focuses on the evolution, dynamics and mechanisms of transposition elements and on structure – function investigations of toxin proteins.

APOBEC3 (A3) proteins are potent host restriction factors against various exogenous and endogenous retroviruses including retrotransposons. We have extensively studied the mechanism of protein inhibition in mammalian cell culture system as well as in vivo. Our studies revealed that human A3 proteins inhibit pre-integration independently of their enzymatic activity.

A new project has been started to understand the effect of RNA species on aggregation of proteins TDP-43 and FUS, two major proteins involved in amyotrophic lateral sclerosis and frontotemporal dementia. Our initial observations of fibroblasts from patients with amyotrophic lateral sclerosis with TDP-43 aggregates suggest that toxic RNA species can have negative influence on their growth.

We prepared recombinant single-chain antibody fragments directed against the pathogenic form of the prion protein. These recombinant proteins were additionally labeled with a peptide tag for the passage across blood-brain barrier and the constructs were tested on mouse brain.

Part of our research activities is focused on the proteins that are involved in immune response. In particular, we are trying to crystallize a protein that is induced in macrophages upon activation with lipopolysaccharide and causes macrophage apoptosis.

We are also developing nanobiosensors that are based on the hyper-variable domain of cameloid antibodies. Recombinant hyper-variable domains will be attached to the nanowires that were developed by a team of researchers at the Jožef Stefan Institute and used for novel nanobiosensors.

POMEMBNI DOSEŽKI SODELAVCEV KATEDRE / SIGNIFICANT ACHIEVEMENTS OF THE CHAIR STAFF

NAGRADE, PRIZNANJA / AWARDS, RECOGNITIONS

Zoisovo nagrado za leto 2011 je prejel B. Turk za vrhunske znanstvene dosežke na področju prenosa signalov s proteazami.

The 2011 National Zois Award for top achievements in science was awarded to B. Turk for his research on protease signalling.

R. Jerala je prejel Lapanjetovo nagrado Slovenskega biokemijskega društva za vrhunske dosežke na področju biokemije, predvsem molekularne imunologije. M. Dolinar pa je prejel Lapanjetovo plaketo Slovenskega biokemijskega društva za organizacijsko in strokovno delo v društvu.

R. Jerala was the recipient of the Lapanje Prize, awarded by the Slovenian Biochemical Society, for his major contribution in the field of biochemical sciences, especially for his research in molecular immunology. M. Dolinar received the Lapanje Plaque for his organisational and professional work for the Society.

B. Turk je bil izvoljen za predsednika Mednarodnega društva za proteolizo (IPS), vodilnega združenja raziskovalcev s področja razgradnje proteinov.

B. Turk was elected president of the International Proteolysis Society (IPS), the leading association of researchers in the field of protein degradation.

Drugo nagrado na razpisu Rektorjevih nagrad za inovacije UL je prejela podjetniška skupina Si.Zyne za razvoj celičnega tekočega traku za proizvodnjo različnih spojin. Raziskovalni vodja skupine je R. Jerala.

In the University of Ljubljana Rector's Innovation Award competition the second award went into hands of the entrepreneur's group Si.Zyne (research leader R. Jerala) for the development of a cellular 'conveyor belt' that could be used for the production of various compounds.

R. Jerala je bil vodja ekipe študentov, ki so novembra 2011 uspešno sodelovali na tekmovanju študentskih ekip BIOMOD na Harvardovi univerzi v ZDA. Gre za tekmovanje iz načrtovanja biomolekul. Uvrstili so se med prejemnike nagrad v dveh kategorijah in zlato priznanje za projekt kot celoto. Med tremi člani študentske ekipe je bil tudi študent biokemije Vid Kočar.

R. Jerala was mentor of the student team who participated at the BIOMOD biomolecular design competition at the Harvard University in Cambridge, USA. The team won two category awards and a golden prize for the project as a whole. One member of the student research team was Vid Kočar, our student of biochemistry.

R. Jerala je bil mentor Nina Pirher, ki je prejela Krkino nagrado za doktorsko delo.

R. Jerala was mentor of Nina Pirher, the recipient of the Krka Award for her PhD thesis.

Na kongresu »SiNAPSA Neuroscience Conference '11« je V. Župunski dobila nagrado za najboljši poster v sekciji Molekularne nevroznanosti.

V. Župunski was awarded a prize for the best poster in the Molecular Neurosciences section at the SiNAPSA Neuroscience Conference '11.

Univerzitetno Prešernovo nagrado za leto 2011 je dobil Jan Lonzarić, študent biokemije, za raziskovalno delo s področja imunobiotehnologije. Delo z naslovom »Priprava genskega cepiva za aktivacijo prirojene in pridobljene imunosti« je pripravil pod mentorstvom R. Jerala.

Jan Lonzarić, a Biochemistry programme student, received the University Prešeren Award in 2011 for his immunobiotecnology investigation entitled "Preparation of a gene vaccine for activation of innate in adaptive immunity" under the mentorship of R. Jerala.

Prešernovo nagrado FKKT za leto 2011 je prejel študent biokemije Jaka Kragelj za diplomsko delo, opravljeno pod mentorstvom I. Križaja.

Jaka Kragelj was the recipient of the Faculty Prešeren Award for 2011 for his BSc thesis in the Biochemistry programme, prepared under the mentorship of I. Križaj.

RAZISKOVALNA OPREMA / RESEARCH EQUIPMENT

- Hlajeni centrifugi 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*
- 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 meter / *pH Meter*
- 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*
- Termostatirana vodna kopel / *Thermostated Water Bath*
- Suhi sterilizator / *Dry Steriliser*
- Dva avtoklava / *Two Autoclaves*
- Dva zmrzovalnika $-80\text{ }^{\circ}\text{C}$ / *Two Freezers $-80\text{ }^{\circ}\text{C}$*
- 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 / *Toxins and Biomembranes*
Vodja programa / *Principal Researcher*: I. Križaj (IJS)
- P1-0140 Proteoliza in njena regulacija / *Proteolysis and its Regulation*
Vodja programa / *Principal Researcher*: B. Turk (IJS)
- P1-0048 Strukturna biologija / *Structural Biology*
Vodja programa / *Principal Researcher*: D. Turk (IJS)

TEMELJNI PROJEKTI / BASIC RESEARCH

- J1-2017 Epitelijska celična adhezijska molekula (EpCAM) – tarča tumorske terapije: struktura, proteolitično procesiranje in interakcija z drugimi proteini / *Epithelial Cell Adhesion Molecule (EpCAM), a Target for Tumor Therapy: Structure, Proteolytic Processing and Interaction with Other Proteins*
Nosilka / *Principal Researcher*: B. Lenarčič
- J7-2230 Protivirusni proteini APOBEC3 in njihova vloga pri obrambi proti retroelementom / *APOBEC3 Antiviral Proteins and Their Role in the Defence Against Retroelements*
Nosilka / *Principal Researcher*: N. Lovšin
- J1-2141 Regulatorna genomika: nastanek in evolucija kompleksnega transkripcijskega regulatornega omrežja pri vretenčarjih / *Regulatory Genomics: Emergence and Evolution of a Complex Regulatory Network in Vertebrates*
Nosilec / *Principal Researcher*: D. Kordiš (IJS)
- J1-0841 Antikancerogeno delovanje bioaktivnih spojin cianobakterijskega izvora v napredovanju možganskih tumorjev – glioblastomov / *Anticarcinogenic Activity*

of Bioactive Compounds from Cyanobacterial Source in the Progression of Brain Tumours – Glioblastoma

Nosilka / *Principal Researcher*: T. Lah Turnšek

- J3-4026 Transport in RNA vezava proteinov TDP-43 in FUS – implikacije za ALS/FTLD spekter nevrodegenerativnih bolezni / *Transport and RNA Binding of TDP-43 and FUS – Implications for ALS/FTLD Spectrum of Neurodegenerative Disease*
Nosilec / *Principal Researcher*: B. Rogelj (Zavod BRIS, IJS)
- Z1-4077 Načrtovanje in karakterizacija alosteričnih modifikatorjev cisteinskih katepsinov / *Design and Characterization of Allosteric Modifiers of Cysteine Cathepsins*
Nosilec / *Principal Researcher*: M. Novinec

APLIKATIVNI PROJEKTI / APPLIED RESEARCH

- L3-0206 Prioni v humani medicini: od strukturnih študij do aplikacij / *Prions in Human Medicine: From Structural Studies to Applications*
Nosilka / *Principal Researcher*: V. Čurin Šerbec
Sofinancer / *Co-sponsored by*: DiaMed, Benelux

BIBLIOGRAFIJA 2011 / REFERENCES 2011

IZVIRNI ZNANSTVENI ČLANEK / ORIGINAL SCIENTIFIC ARTICLE

- BIO1. JERALA, Miha, JERALA, Roman, HAFNER BRATKOVIČ, Iva. A DNA origami of Slovenia in nano dimensions. *Acta chim. slov.* [Tiskana izd.], 2011, no. 1, vol. 58, str. 181-184, ilustr. [COBISS.SI-ID 4630298]
- BIO2. BEICH-FRANSEN, Mads, VEČEREK, Branislav, SJÖBLÖM, Björn, BLÄSI, Udo, DJINOVIĆ CARUGO, Kristina. Structural analysis of full-length Hfq from *Escherichia coli*. *Acta crystallographica. Section F, Structural biology and crystallization communications*, 2011, vol. F67, no. 5, str. 536-540, doi: 10.1107/S174430911100786X. [COBISS.SI-ID 35024389]
- BIO3. PAVŠIČ, Miha, LENARČIČ, Brigita. Expression, crystallization and preliminary x-ray characterization of the human epithelial cell-adhesion molecule ectodomain. *Acta crystallographica. Section F, Structural biology and crystallization communications*, 2011, vol. F67, no. 11, str. 1363-1366, doi: 10.1107/S1744309111031897. [COBISS.SI-ID 35560453]
- BIO4. DUFF, Rachael M., TAY, Valerie, HACKMAN, Peter, RAVENSCROFT, Gianina, MCLEAN, Catriona, KENNEDY, Paul, STEINBACH, Alina, SCHÖFFLER, Wiebke, VAN DER VEN, Peter F. M., FÜRST, Dieter O., SONG, Jaeguen, DJINOVIĆ CARUGO, Kristina, PENTTILÄ, Sini, RAHEEM, Olayinka, REARDON, Katrina, MALANDRINI, Alessandro, GAMBELLI, Simona, VILLANOVA, Marcelo, NOWAK, Kristen J., WILLIAMS, David R., LANDERS, John E., BROWN, Robert H., UDD, Bjarne, LAING, Nigel G. Mutations in the N-terminal actin-binding domain of filamin C cause a distal myopathy. *Am J Hum Genet*, 2011, vol. 88, no. 6, str. 729-740, doi: 10.1016/j.ajhg.2011.04.021. [COBISS.SI-ID 35379973]
- BIO5. SANCHEZ-GOMEZ, Susana, JAPELJ, Boštjan, JERALA, Roman, MORIYON, Ignacio, FERNÁNDEZ ALONSO, Mirian, LEIVA, Jose, BLONDELLE, Sylvie E., ANDRÄ, Jörg, BRANDENBURG, Klaus, LOHNER, Karl, TEJADA DE GARAIZÁBAL, Guillermo Martinez de. Structural features governing the activity of lactoferricin-derived peptides that act in synergy with antibiotics against *Pseudomonas aeruginosa* In Vitro and In Vivo. *Antimicrob Agents Chemother*, 2011, vol. 55, no. 1, str. 218-228, doi: 10.1128/AAC.00904-10. [COBISS.SI-ID 4574746]
- BIO6. KENIG, Saša, FRANGEŽ, Robert, PUCER, Anja, LAH TURNŠEK, Tamara. Inhibition of cathepsin L lowers the apoptotic threshold of glioblastoma cells by up-regulating p53 and transcription of caspases 3 and 7. *Apoptosis*, 2011, vol. 16, no. 7, str. 671-682, doi: 10.1007/s10495-011-0600-6. [COBISS.SI-ID 3339642]
- BIO7. MAKUC, Damjan, HISCOCK, Jennifer R., LIGHT, Mark E., GALE, Philip A., PLAVEC, Janez. NMR studies of anion-induced conformational changes in diindolyureas and diindolylthioureas. *Beilstein journal of organic chemistry*, 2011, vol. 7, str. 1205-1214. doi: 10.3762/bjoc.7.140. [COBISS.SI-ID 4765978]

- BIO8. AVBELJ, Matevž, HAFNER BRATKOVIČ, Iva, JERALA, Roman. Introduction of glutamines into the B2-H2 loop promotes prion protein conversion. *Biochem. biophys. res. commun.*, 2011, vol. 413, issue 3, str. 521-526, doi: 10.1016/j.bbrc.2011.08.125. [COBISS.SI-ID 4766234]
- BIO9. ZAVASNIK, Jaka, PODBEVŠEK, Peter, PLAVEC, Janez. Observation of water molecules within the bimolecular d(G [sub] 3CT [sub] 4G [sub] 3C) [sub] 2 G-quadruplex. *Biochemistry (Easton)*. [Print ed.], 2011, vol. 50, no. 19, str. 4155-4161. [COBISS.SI-ID 4651802]
- BIO10. SVIDOVÁ, Soňa, SPONDER, Gerhard, SCHWEYEN, Rudolf J., DJINOVIĆ CARUGO, Kristina. Functional analysis of the conserved hydrophobic gate region of the magnesium transporter CorA. *Biochim. biophys. acta, Biomembr.* [Print ed.], 2011, vol. 1808, no. 6, str. 1587-1591, doi: 10.1016/j.bbame.2010.10.017. [COBISS.SI-ID 34712837]
- BIO11. ŠALA, Martin, MAKUC, Damjan, KOLAR, Jana, PLAVEC, Janez, PIHLAR, Boris. Potentiometric and [sup]31P NMR spectroscopic studies on inositol phosphates and their interaction with iron(III) ions. *Carbohydr. res.* [Print ed.], 2011, vol. 346, no. 4, str. 488-494, doi: 10.1016/j.carres.2010.12.021. [COBISS.SI-ID 34723589]
- BIO12. IVANOVA, Saška, GREGORC, Uroš, VIDERGAR, Nina, JAVIER, Ron, BREDET, David S., VANDENABEELE, Peter, PARDO, J., SIMON, Markus M., TURK, Vito, BANKS, Lawrence, TURK, Boris. MAGUKs, scaffolding proteins at cell junctions, are substrates of different proteases during apoptosis. *Cell death & disease*, 2011, vol. 2, str. e116-1-e116-11. [COBISS.SI-ID 24435239]
- BIO13. BALEVIČIUS, Vytautas, GDANIEC, Zofia, KLIMAVICIUS, Vytautas, MASALKA, Arunas, PLAVEC, Janez. NMR monitoring of nonequilibrium aggregation in ionic solutions. *Chem. Phys. Lett.* [Print ed.], 2011, vol. 503, issue 3-6, str. 235-238, doi: 10.1016/j.cplett.2011.01.035. [COBISS.SI-ID 4601370]
- BIO14. MLYNEK, Georg, SJÖBLOM, Björn, KOSTAN, Julius, FÜREDER, Stephanie, MAIXNER, Frank, GYSEL, Kira, FURTMÜLLER, Paul Georg, OBINGER, Christian, WAGNER, Michael, DAIMS, Holger, DJINOVIĆ CARUGO, Kristina. Unexpected diversity of chlorite dismutases : a catalytically efficient dimeric enzyme from *Nitrobacter winogradskyi*. *J Bacteriol*, 2011, vol. 193, no. 10, str. 2408-2417, doi: 10.1128/JB.01262-10. [COBISS.SI-ID 35025413]
- BIO15. RABELO MELO, Fabio, TURK, Boris, PEJLER, Gunnar. A role for serglycin proteoglycan in mast cell apoptosis induced by a secretory granule-mediated pathway. *J Biol Chem*, 2011, vol. 286, issue 7, str. 5423-5433, doi: 10.1074/jbc.M110.176461. [COBISS.SI-ID 24226855]
- BIO16. HAFNER BRATKOVIČ, Iva, BESTER, Romina, PRISTOVŠEK, Primož, GAEDTKE, Lars, VERANIČ, Peter, GAŠPERŠIČ, Jernej, MANČEK KEBER, Mateja, AVBELJ, Matevž, POLYMENIDOU, Magdalini, JULIUS, Christian, AGUZZI, Adriano, VORBERG, Ina, JERALA, Roman. Globular domain of the prion protein needs to be unlocked by domain swapping to support prion protein conversion. *J Biol Chem*, 2011, vol. 286, no. 14, str. 12149-12156, doi: 10.1074/jbc.M110.213926. [COBISS.SI-ID 4602394]
- BIO17. ZWEYTICK, Dagmar, DEUTSCH, Günter, ANDRÄ, Jörg, BLONDELLE, Sylvie E., VOLLMER, Ekkehard, JERALA, Roman, LOHNER, Karl. Studies on lactoferricin derived E. coli membrane active peptides reveal differences in the mechanism of N-acylated versus non-acylated peptides. *J Biol Chem*, 2011, vol. 286, no. 24, str. 21266-21276, doi: 10.1074/jbc.M110.195412. [COBISS.SI-ID 4652826]
- BIO18. PANTER, Gabriela, JERALA, Roman. Ectodomain of the toll-like receptor 4 prevents constitutive receptor activation. *J Biol Chem*, 2011, vol. 286, no. 26, str. 23334-23344, doi: 10.1074/jbc.M110.205419. [COBISS.SI-ID 4652570]
- BIO19. MAJERLE, Andreja, PRISTOVŠEK, Primož, MANČEK KEBER, Mateja, JERALA, Roman. Interaction of the HIV-1 GP120 V3 loop with bacterial lipopolysaccharide : a pattern recognition inhibition. *J Biol Chem*, 2011, vol. 286, issue 29, str. 26228-26237, doi: 10.1074/jbc.M111.220434. [COBISS.SI-ID 4677402]
- BIO20. KRIŠTAFOR, Svjetlana, MEŠČIČ, Andrijana, CETINA, Mario, KORUNDA, Silvija, MAKUC, Damjan, PLAVEC, Janez, RAIČ-MALIČ, Silvana. Synthesis, structural and conformational studies of Z- and E-isomers of fluorinated C-6 isobutenyl N-methyl thymine derivatives. *J. fluorine chem.* [Print ed.], sep. 2011, vol. 132, no. 9, str. 573-578, ilustr., doi: 10.1016/j.jfluchem.2011.06.002. [COBISS.SI-ID 4761626]
- BIO21. KUŽNIK, Alenka, BENČINA, Mojca, ŠVAJGER, Urban, JERAS, Matjaž, ROZMAN, Blaž, JERALA, Roman. Mechanism of endosomal TLR inhibition by antimalarial drugs and imidazoquinolines. *J Immunol (Baltim. Md., 1950)*, 2011, vol. 186, no. 8, str.4794-8408., doi: 10.4049/jimmunol.1000702. [COBISS.SI-ID 2971761]
- BIO22. AVBELJ, Monika, HORVAT, Simon, JERALA, Roman. The role of intermediary domain of MyD88 in cell activation and therapeutic inhibition of TLRs. *J Immunol (Baltim. Md., 1950)*, 2011, vol. 187, no. 5, str. 2394-2404., doi: 10.4049/jimmunol.1100515. [COBISS.SI-ID 2910088]
- BIO23. BILJAN, Ivana, ILC, Gregor, GIACHIN, Gabriele, RASPADORI, Andrea, ZHUKOV, Igor, PLAVEC, Janez, LEGNAME, Giuseppe. Toward the molecular basis of inherited prion diseases : NMR structure of the human prion protein with V210I mutation. *J. mol. biol.*, 30. sep. 2011, vol. 412, iss. 4, str. 660-673, ilustr., doi: 10.1016/j.jmb.2011.07.067. [COBISS.SI-ID 4776474]
- BIO24. GRADIŠAR, Helena, JERALA, Roman. De novo design of orthogonal peptide pairs forming parallel coiled-coil heterodimers. *J. pept. sci.*, 2011, vol. 17, no. 2, str. 100-106. [COBISS.SI-ID 4534810]
- BIO25. ŠTER, Branko, AVBELJ, Monika, JERALA, Roman, DOBNIKAR, Andrej. On the origin and features of an evolved Boolean model for subcellular signal transduction systems. *Lect. notes comput. sci.*, part 2, str. 383-392, ilustr. [COBISS.SI-ID 8388180]
- BIO26. KOSMAČ, Miha, KOREN, Simon, GIACHIN, Gabriele, ČURIN-ŠERBEC, Vladka. Epitope mapping of a PrP(Sc)-specific monoclonal antibody : identification of a novel C-terminally truncated prion fragment. *Mol. immunol.* [Print ed.], 2011, vol. 48, iss. 5, str. 746-750, ilustr. [COBISS.SI-ID 27952345]
- BIO27. GAZIVODA, Tatjana, PETROVIĆ, Martina, KRIŠTAFOR, Svjetlana, MAKUC, Damjan, PLAVEC, Janez, ROSS, Tobias L., AMETAMEY, Simon M., RAIČ-MALIČ, Silvana. Methoxymethyl (MOM) group nitrogen

- protection of pyrimidines bearing C-6 acyclic side-chains. *Molecules (Basel)*, 2011, vol. 16, iss. 6, str. 5113-5129., doi: 10.3390/molecules16065113. [COBISS.SI-ID 4698906]
- BIO28. ZAVRŠNIK, Davorka, MURATOVIĆ, Samija, MAKUC, Damjan, PLAVEC, Janez, CETINA, Mario, NAGL, Ante, DE CLERCQ, Erik, BALZARINI, Jan, MINTAS, Mladen. Benzylidene-bis-(4-hydroxycoumarin) and benzopyrano-coumarin derivatives : synthesis, [sup]1H/[sup]13C-NMR conformational and X-ray crystal structure studies and in vitro antiviral activity evaluations. *Molecules (Basel)*, 2011, vol. 16, no. 7, str. 6023-6040, ilustr., doi: 10.3390/molecules16076023. [COBISS.SI-ID 4725530]
- BIO29. MIKHAYLOV, Georgy, MIKAC, Urška, MAGAEVA, Anna A., ITIN, Volia Isaevich, NAIDEN, Evgeniy P., PSAKHYE, Ivan Sergeevich, BABES, Liane, REINHECKEL, Thomas, PETERS, Christoph, ZEISER, Robert, BOGYO, Matthew, TURK, Vito, PSAHKYE, Sergej G., TURK, Boris, VASILJEVA, Olga. Ferri-liposomes as an MRI-visible drug-delivery system for targeting tumours and their microenvironment. *Nature nanotechnology*, 2011, vol. 6, no. 9, str. 594-602, doi: 10.1038/nnano.2011.112. [COBISS.SI-ID 25057831]
- BIO30. TOLLERVEY, James R., CURK, Tomaž, ROGELJ, Boris, BRIESE, Michael, CEREDA, Matteo, KAYIKCI, Melis, KÖNIG, Julian, HORTOBÁGYI, Tibor, NISHIMURA, Agnes L., ŽUPUNSKI, Vera, PATANI, Rickie, CHANDRAN, Siddharthan, ROT, Gregor, ZUPAN, Blaž, SHAW, Christopher E., ULE, Jernej. Characterizing the RNA targets and position - dependent splicing regulation by TDP-43. *Nat Neurosci*, April 2011, vol. 14, no. 4, str. 452-459, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 8278100]
- BIO31. BEICH-FRANSEN, Mads, VEČEREK, Branislav, KONAREV, Peter, SJÖBLOM, Björn, KLOIBER, Karin, HÄMMERLE, Hermann, RAJKOWITSCH, Lukas, MILES, Andrew J., KONTAXIS, Georg, WALLACE, Bonnie Ann, SVERGUN, Dmitrii Ivanovich, KONRAT, Robert, BLÄSI, Udo, DJINOVIĆ CARUGO, Kristina. Structural insights into the dynamics and function of the C-terminus of the E. coli RNA chaperone Hfq. *Nucleic acids res.*, 2011, vol. 39, no. 11, str. 4900-4915, doi: 10.1093/nar/gkq1346. [COBISS.SI-ID 35013125]
- BIO32. CONRADO, Robert J., LEBAR, Tina, TURNŠEK, Jernej, TOMŠIČ, Nejc, AVBELJ, Monika, GABER, Rok, KOPRIVNJAK, Tomaž, MORI, Jerneja, GLAVNIK, Vesna, VOVK, Irena, BENČINA, Mojca, HODNIK, Vesna, ANDERLUH, Gregor, JERALA, Roman. DNA-guided assembly of biosynthetic pathways promotes improved catalytic efficiency. *Nucleic acids res.*, 2011, str. 1-11, ilustr., doi: 10.1093/nar/gkr888. [COBISS.SI-ID 4824602]
- BIO33. KOSMAČ, Miha, AVČIN, Tadej, TOPLAK, Nataša, SIMONINI, Gabriele, CIMAZ, Rolando, ČURIN-ŠERBEC, Vladka. Exploring the binding sites of anti-infliximab antibodies in pediatric patients with rheumatic diseases treated with infliximab. *Pediatr Res*, 2011, vol. 69, no. 3, str. 243-248, ilustr., doi: 10.1203/PDR.0b013e318208451d. [COBISS.SI-ID 28392409]
- BIO34. SELIGER, Janez, PLAVEC, Janez, ŠKET, Primož, ŽAGAR, Veselko, BLINC, Robert. [sup](17)O NQR and [sup](13)C NMR study of hydrogen-bonded organic ferroelectric croconic acid. *Phys. status solidi, b Basic res.*, 2011, vol. 248, no. 9, str. 2091-2096, doi: 10.1002/pssb.201046649. [COBISS.SI-ID 24706599]
- BIO35. ŠKRLJ, Nives, VRANAC, Tanja, POPOVIĆ, Mara, ČURIN-ŠERBEC, Vladka, DOLINAR, Marko. Specific binding of the pathogenic prion isoform: development and characterization of a humanized single-chain variable antibody fragment. *PLoS one*, 2011, vol. 6, no. 1, art. no. e15783 (9 str.), doi: 10.1371/journal.pone.0015783. [COBISS.SI-ID 34754053]
- BIO36. HAFNER BRATKOVIČ, Iva, GAEDTKE, Lars, ONDRAČKA, Andrej, VERANIČ, Peter, VORBERG, Ina, JERALA, Roman. Effect of hydrophobic mutations in the H2-H3 subdomain of prion protein on stability and conversion In Vitro and In Vivo. *PLoS one*, sep. 2011, vol. 6, iss. 9, str. e24238-1-e24238-9, ilustr., doi: 10.1371/journal.pone.0024238. [COBISS.SI-ID 4764442]
- BIO37. HAFNER BRATKOVIČ, Iva, JERALA, Roman. Disulfide mapping reveals the domain swapping as the crucial process of the structural conversion of prion protein. *Prion*. [Print ed.], 2011, vol. 5, no. 2, str. 1-4. [COBISS.SI-ID 4652058]
- BIO38. ARDEBILI, Seyed Yousef, ZAJC, Irena, GOLE, Boris, CAMPOS, Benito, HEROLD-MENDE, Christel, DR-MOTA, Sara, LAH TURNŠEK, Tamara. CD133/prominin1 is prognostic for GBM patient's survival, but inversely correlated with cysteine cathepsin expression in glioblastoma derived spheroids = [CD133/prominin1 je prognostičen za preživetje bolnikov z glioblastoma, vendar obratno korelira z izražanjem cisteinskih katapsinov]. *Radiol. oncol. (Ljubl.)*, 2011, vol. 45, no. 2, str. 102-115, doi: 10.2478/v10019-011-0015-6. [COBISS.SI-ID 28580825]

PREGLEDNI ZNANSTVENI ČLANEK / REVIEW ARTICLE

- BIO39. PUNGERČAR, Jože, PRIJATELJ, Petra, PETAN, Toni. Structure-function relationship studies of ammodytoxins and ammodytins by protein engineering. *Acta chim. slov.* [Tiskana izd.], 2011, vol. 58, no. 4, str. 660-670. [COBISS.SI-ID 25408039]
- BIO40. ŠRIBAR, Jernej, KRIŽAJ, Igor. Secreted phospholipases A[₂] - not just enzymes. *Acta chim. slov.* [Tiskana izd.], 2011, vol. 58, no. 4, str. 678-688. [COBISS.SI-ID 25407783]
- BIO41. OBLAK, Alja, JERALA, Roman. Toll-like receptor 4 activation in cancer progression and therapy. *Clin. dev. immunol. (Print)*, 2011, str. [1-12]., doi: 10.1155/2011/609579. [COBISS.SI-ID 4854810]
- BIO42. ŽEROVNIK, Eva, STOKA, Veronika, MIRTič, Andreja, GUNČAR, Gregor, GRDADOLNIK, Jože, STANFORTH, Rosemary A., TURK, Dušan, TURK, Vito. Mechanisms of amyloid fibril formation : focus on domain-swapping. *FEBS journal*, 2011, vol. 278, no. 13, str. 2263-2282, doi: 10.1111/j.1742-4658.2011.08149.x. [COBISS.SI-ID 24680231]

- BIO43. SAJEVIC, Tamara, LEONARDI, Adrijana, KRIŽAJ, Igor. Haemostatically active proteins in snake venoms. *Toxicon (Oxford)*. [Print ed.], 2011, vol. 57, no. 5, str. 627-645, doi: 10.1016/j.toxicon.2011.01.006. [COBISS.SI-ID 24433959]
- BIO44. KRIŽAJ, Igor. Ammodytoxin : a window into understanding presynaptic toxicity of secreted phospholipases A₂ and more. *Toxicon (Oxford)*. [Print ed.], 2011, vol. 58, issue 3, str. 219-229, doi: 10.1016/j.toxicon.2011.06.009. [COBISS.SI-ID 24858919]

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

- BIO45. GRADIŠAR, Helena, BOŽIČ, Sabina, DOLES, Tibor, VENGUST, Damjan, HAFNER BRATKOVIČ, Iva, MERTELJ, Alenka, JERALA, Roman. Self-assembly of polypeptides into nanoscale structures. V: JANEŽIČ, Sandra (ur.), BENČINA, Mojca (ur.), RUPNIK, Maja (ur.), GRADIŠAR, Helena (ur.). 9th Congress of the Slovenian Biochemical Society [also] 5th Congress of the Slovenian Microbiological Society with International Participation [also] 3rd CEFORM (Central European Forum for Microbiology), Maribor, 12th - 15th October 2011. *Abstract book*. Maribor: Zavod za zdravstveno varstvo, 2011, str. 75. [COBISS.SI-ID 4827162]
- BIO46. PLAVEC, Janez. NMR studies of cation interactions with G-quadruplexes : [invited lecture]. V: FIBER International Symposium, November 6 (Sun)-8(Tue), 2011, Port Island Campus of Konan University, Kobe, Japan. *FIBERforum 2011 : program & abstracts*. [S. l.: s. n.], 2011, str. 12-13. [COBISS.SI-ID 4846106]
- BIO47. PLAVEC, Janez. Cation interactions and mobility within G-quadruplexes : [invited lecture]. V: The 38th International Symposium on Nucleic Acid Chemistry, Clark Memorial Student Center, Hokkaido University, November 9(Wed)-11(Fri), 2011. *Program & abstracts*. [S. l.: s. n.], 2011, str. 30-31. [COBISS.SI-ID 4846874]
- BIO48. KRIŽAJ, Igor, MATTIAZZI, Mojca, ŠRIBAR, Jernej, KOVAČIČ, Lidija, PETROVIČ, Uroš. Ammodytoxin : a window into understanding presynaptic toxicity of secreted phospholipases A₂. V: JANEŽIČ, Sandra (ur.), BENČINA, Mojca (ur.), RUPNIK, Maja (ur.), GRADIŠAR, Helena (ur.). 9th Congress of the Slovenian Biochemical Society [also] 5th Congress of the Slovenian Microbiological Society with International Participation [also] 3rd CEFORM (Central European Forum for Microbiology), Maribor, 12th - 15th October 2011. *Abstract book*. Maribor: Zavod za zdravstveno varstvo, 2011, str. 51. [COBISS.SI-ID 25164583]
- BIO49. KRIŽAJ, Igor, ŠRIBAR, Jernej, KOVAČIČ, Lidija, MATTIAZZI, Mojca, PETROVIČ, Uroš. Ammodytoxin : a window into understanding presynaptic toxicity of secreted phospholipases A₂. V: 17th Congress of the European Section of the International Society on Toxinology, 11-15 September 2011, Valencia, Spain. *Program & abstracts book*. Valencia: International Society on Toxinology, 2011, str. 34. [COBISS.SI-ID 25085991]

PREDAVANJE NA TUJI UNIVERZI / INVITED LECTURE AT FOREIGN UNIVERSITY

- BIO50. PLAVEC, Janez. *Cation localization and movements within G-quadruplexes : [lecture at] Università degli Studi di Firenze, Centro Risonanze Magnetiche (CERM), June 20th 2011, Italy*. Ljubljana: Kemijski inštitut, 2011. [COBISS.SI-ID 4699674]
- BIO51. PLAVEC, Janez. *NMR studies of cation localization and movements within G-quadruplexes : [lecture at] Memorial Sloan-Kettering Cancer Center, November 1, 2011, New York (USA)*. New York, 2011. [COBISS.SI-ID 4851738]
- BIO52. JERALA, Roman. *Synthetic biology : from understanding to design of cellular machines : lecture at The Finnish scientific society for Biosciences, Societas biochemica, biophysica et microbiologica Fenniae, Science forum, ChemBio 2011, 23. 3. 2011, Helsinki*. Helsinki, 2011. [COBISS.SI-ID 4625690]
- BIO53. LENARČIČ, Brigita. *Thyropins - more than inhibitors : University of Zurich, Department of Biochemistry, April 15th, 2011*. Zürich, 2011. [COBISS.SI-ID 34956293]
- BIO54. TURK, Boris. Targeted delivery and proteases : challenges and opportunities : invited talk. San Francisco: University of California, Department of Bioengineering and Therapeutic Sciences, 21 okt. 2011. [COBISS.SI-ID 25524775]

VABLJENO PREDAVANJE NA KONFERENCI BREZ NATISA / UNPUBLISHED INVITED CONFERENCE LECTURE

- BIO55. PLAVEC, Janez. Insights into G-quadruplexes and their interactions with cations : invited lecture at the conference Pre-Euromar Users' Meeting, Frankfurt, 21st August 2011. Frankfurt: Agilent Technologies, 2011. [COBISS.SI-ID 4768794]
- BIO56. TURK, Boris. Biokemikovo razumevanje molekularnih mehanizmov bolezni : Nacionalna konferenca o komuniciranju kemije "Kemija med percepcijo in realnostjo: vloga znanstvenikov, industrije, medijev in izobraževanja", 24. maj 2011, Ljubljana, Slovenija. 2011. [COBISS.SI-ID 25514023]

UREDNIK / EDITORSHIP

- BIO57. *Letno poročilo 2009-2010 : Nacionalni inštitut za biologijo = Annual report 2009-2010 : National institute of biology*, (Letno poročilo, 2009-2010). Ljubljana: Nacionalni inštitut za biologijo, 2011. 219 str., ilustr. [COBISS.SI-ID 28945113]
- BIO58. *Acta chimica slovenica*. Križaj, Igor (gostujoči urednik 2011). [Tiskana izd.]. Ljubljana: Slovensko kemijsko društvo: =Slovenian Chemical Society, 1993-. ISSN 1318-0207. <http://acta.chem-soc.si/>. [COBISS.SI-ID 14086149]
- BIO59. *Biological chemistry*. Turk, Boris (urednik 2008-). Berlin; New York: Walter de Gruyter. ISSN 1431-6730. [COBISS.SI-ID 1541908]
- BIO60. *Current pharmaceutical design*. Turk, Boris (gostujoči urednik 2007-). Schiphol: Bentham Science Publishers. ISSN 1381-6128. [COBISS.SI-ID 16094247]
- BIO61. *Global toxin review*. Križaj, Igor (član uredniškega odbora 2005-). [S. l.]: globaltoxin.org, 2005-. <http://globaltoxin.com/portal/>. [COBISS.SI-ID 21976615]
- BIO62. *Journal of biological engineering*. Dolinar, Marko (član uredniškega odbora 2008-). London: BioMed Central. ISSN 1754-1611. [COBISS.SI-ID 30190597]
- BIO63. *Journal of venom research*. Križaj, Igor (član uredniškega odbora 2010-). Oxford: 2010-. <http://www.libpubmedia.co.uk/JVR/JVRHome.htm>. [COBISS.SI-ID 23582247]
- BIO64. *The open toxinology journal*. Križaj, Igor (član uredniškega odbora 2008-). Saif Zone, Sharjah, U.A.E.: Bentham Open, 2008-. [COBISS.SI-ID 21915431]
- BIO65. *Pathology oncology research*. Lah, Tamara (član uredniškega odbora 1997-). Budapest: Tud. Kiadó. ISSN 1219-4956. [COBISS.SI-ID 21115]
- BIO66. *Poročilo o delu - Nacionalni inštitut za biologijo*. Lah, Tamara (član uredniškega odbora 1995-). Ljubljana: Inštitut za biologijo. ISSN 1408-3299. [COBISS.SI-ID 68115968]
- BIO67. *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. [COBISS.SI-ID 32649472]
- BIO68. *Toxicon*. Križaj, Igor (član uredniškega odbora 2006-). [Print ed.]. Oxford: Pergamon press, 1962-. ISSN 0041-0101. [COBISS.SI-ID 1835012]

KATEDRA ZA FIZIKALNO KEMIJO **CHAIR OF PHYSICAL CHEMISTRY**

PREDSTOJNICA KATEDRE / HEAD

prof. dr. Ksenija Kogej

SODELAVCI KATEDRE / PERSONNEL

Učitelji / Faculty

prof. dr. Marija Bešter Rogač

prof. dr. Andrej Jamnik

prof. dr. Ksenija Kogej

prof. dr. Jože Koller

izr. prof. dr. Jurij Lah

prof. dr. Ciril Pohar

prof. dr. Jože Škerjanc, zaslužni profesor (upokojen) / *Professor Emeritus*

prof. dr. Gorazd Vesnaver

prof. dr. Vojeslav Vlachy

Asistenti / Assistants

dr. Matjaž Bončina

doc. dr. Janez Cerar

dr. Andrej Godec

izr. prof. dr. Barbara Hribar Lee

dr. Miha Lukšič

doc. dr. Črtomir Podlipnik

dr. Iztok Prislán

izr. prof. dr. Jurij Rešič

Bojan Šarac, univ. dipl. kem.

doc. dr. Matija Tomšič

doc. dr. Tomaž Urbič

Raziskovalci / Researchers

dr. Jožica Dolenc

Mojca Seručnik, univ. dipl. kem.

Tehniki / Technicians

Anton Kelbl

Anton Kokalj

Cirila Peklaj

Mladi raziskovalci <i>Young Researchers</i>	Mentor <i>Mentor</i>	Čas usposabljanja <i>Programme Duration</i>	Oblika usposabljanja <i>Degree</i>
Igor Drobnak	A. Jamnik	2006–2011	doktorski študij / <i>PhD</i>
Andrej Lajovic	V. Vlachy	2007–2012	doktorski študij / <i>PhD</i>
Sašo Čebašek	V. Vlachy	2009–2013	doktorski študij / <i>PhD</i>
Simona Sitar	K. Kogej	2009–2013	doktorski študij / <i>PhD</i>
Ana Kroflič	M. Bešter Rogač	2009–2013	doktorski študij / <i>PhD</i>
Andrej Mernik	J. Lah	2010–2014	doktorski študij / <i>PhD</i>
Elizabeta Benigar	A. Jamnik	2011–2015	doktorski študij / <i>PhD</i>
Jure Gujt	M. Bešter Rogač	2011–2015	doktorski študij / <i>PhD</i>
Gregor Hostnik	V. Vlachy	2011–2015	doktorski študij / <i>PhD</i>
Matej Huš	J. Koller	2011–2015	doktorski študij / <i>PhD</i>

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*

Kemijska tehnologija / *Chemical Technology* – VS:

Praktikum iz kemije / *General Chemistry – Practical Course*

Fizikalna kemija I, II / *Physical Chemistry I, II*

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 Process Control* – 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, Control and Automatization* – 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*

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*

Tehnološko procesništvo / *Food Processing Technology*, BF – 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 protiioni / *Transport Properties of Ionene Solutions with Different Counter Ions*
 - Raziskave soli polianetolesulfonske kisline / *Studies of Polyanetholesulfonic Acid and its Alkaline Salts*
 - Interakcije med površinsko aktivnimi snovmi in polielektroliti / *Interactions Between Surface Active Compounds and Polyelectrolytes*
 - Termodinamske raziskave asociacijskih procesov v raztopinah elektrolitov / *Thermodynamic Investigations of Association in Electrolyte Solutions*
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*

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*

Dvodielčne porazdelitvene funkcije ionov v okolici valjastega poliiiona / *Ion Correlations in the Inhomogeneous Atmosphere Surrounding Cylindrical Polyions*

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*

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

- M. Lukšič, Nagrada Maksa Samca za doktorsko disertacijo s področja kemije za leto 2011 (mentorica B. Hribar Lee) / *Maks Samec Award for the PhD Thesis in the Field of Chemistry for 2011*
- S. Slukan, Prešernova nagrada FKKT za leto 2011 (mentor G. Vesnaver) / *The Faculty Prešeren Award for 2011*
- G. Vesnaver, pohvala Študentskega sveta za pedagoško delo na smeri Kemija / *Students Award for the Quality of Teaching in Chemistry Study Programme*
- J. Lah, pohvala Študentskega sveta za pedagoško delo na smeri Kemijsko inženirstvo / *Students Award for the Quality of Teaching in Chemical Engineering Study Programme*

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–
- G. Vesnaver, član uredniškega sveta / *Advisory Editorial Board Member, Acta Chimica Slovenica*, 1998–

DRUGO / OTHER

- J. Dolenc, podoktorska štipendija na Zvezni tehniški visoki šoli (ETH), Zürich / *Post Doctoral Fellowship at the ETH, Zürich*
- V. Vlachy, predstavnik Slovenije v EuCheMS (Evropska zveza za kemijske in molekularne vede) za področje fizikalne kemije / *National Representative at the EuCheMS Physical Chemistry Division*

RAZISKOVALNA OPREMA / RESEARCH EQUIPMENT

- Diferenčni dinamični kalorimeter N-DSC II (CSC, ZDA) / *Nano II Differential Scanning Calorimeter II (CSC, USA)*
- UV-VIS Spektrophotometer Cary BIO 100 (Varian, Australia)
- CD Spectrometer 62A DS (Aviv, ZDA)
- Titracijski mikrokalorimeter VP-ITC (Microcal, ZDA) / *Isothermal Titration Microcalorimeter VP-ITC (Microcal, USA)*
- Računalniška gruča iz 13 štirijedrnih 64 bitnih Intel Q9550 procesorjev / *Thirteen- Node Computer Cluster Based on Quad-Core Intel Q9550 CPUs*
- Sistem za merjenje ozkokotnega rentgenskega sipanja / *Small Angle X-Ray Scattering Instrument*
- Fluorimeter: Luminescence Spectrometer LS 50, Perkin Elmer / *Fluorimeter: Luminescence Spectrometer LS 50, Perkin Elmer*
- 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)*
- Titracijski kalorimeter: 2277 Thermal Activity Monitor, ThermoMetric / *Titration Calorimeter: 227 Thermal Activity Monitor*
- LKB 10700 (Flow, Batch) Calorimeter
- 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, Ther-*

- mostat 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*
 - Gostotomer Paar, DMA 5000 / *Paar Densimeter, DMA 5000*
 - TV100K termostatirana dvojna enota za gelsko elektroforezo ter Syngen G:BOX temnica s kamero / *TV100K Cooled Twin-Plate Mini-Gel Electrophoresis Unit & Syngen G:BOX Darkroom with a Camera*
 - Fluorimeter: Fluorescence Spectrometer LS 55, Perkin Elmer / *Fluorimeter: Fluorescence Spectrometer LS 55, Perkin Elmer*
 - Računalniška gruča iz 10 štirijedrnih 64 bitnih Intel Core i5 2500 procesorjev / *Ten-Node Computer Cluster Based on Quad-Core Intel Core i5 2500 CPU*
 - 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)*

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
Vodja programa / *Principal Researcher*: V. Vlachy

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. Študij in analiza farmacevtskih materialov / *Studies and Analysis of*
I/8-106259/2008 *Pharmaceutical Materials*
Nosilec / *Principal Researcher*: J. Koller
Financer / *Sponsored by*: Krka d.d.

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

- J. Dolenc, asistentka na Zvezni tehniški visoki šoli (ETH), Zürich, pri prof. dr. W. F. van Gunsteru / *Teaching Assistant at the ETH, Zürich (Prof. W. F. van Gunsteren)*
- V. Vlachy, (do maja 2011) 'adjunct' profesor na University of California, San Francisco Campus, ZDA / (till May 2011) / *Adjunct Professor*
- A. Godec, glavni mentor slovenske srednješolske ekipe na mednarodni kemijski olimpiadi v Ankari, Turčija, 2011 / *Head Mentor of the Slovenian Team at the International Chemistry Olympiad, Ankara, Turkey, 2011*

MEDNARODNO ZNANSTVENO SODELOVANJE / INTERNATIONAL SCIENTIFIC COOPERATION

VEČSTRANSKO MEDNARODNO SODELOVANJE / MULTILATERAL COOPERATION

- COST D-43 *Colloid and Interface Chemistry for Nanotechnology*
Nosilka / *Principal Researcher*: M. Bešter Rogač
- COST MP-0802 *Self-Assembled Guanosine Structures for Molecular Electronic Devices*
Koordinator / *Coordinator*: J. Lah

BILATERALNO MEDNARODNO SODELOVANJE / BILATERAL COOPERATION

- Slovenija – ZDA (NIH) *Solvatacija v bioloških sistemih/ Solvation in Biology*
Slovenia – USA (NIH Grant) Nosilca / *Principal Researchers*: V. Vlachy, K. A. Dill
(Stony Brook University, and Laufer Center for Physical and
Quantitative Biology, NY, USA)
- Slovenija – ZDA *Modeli vode ter hidratacija preprostih in sestavljenih*
Slovenia – USA *topljenecv / Models of Water and Hydration of Simple and*
Complex Solutes
Nosilec / *Principal Researcher*: V. Vlachy
- Slovenija – Madžarska *Obravnava strukture kompleksnih tekočin z metodami sipanja*
Slovenia – Hungary *in reverzno simulacijo Monte Carlo / Understanding the*
Structure of Complex Liquids by Scattering Methods and
Reverse Monte Carlo Simulation
Nosilec / *Principal Researcher*: A. Jamnik
- Slovenija – Poljska *Struktura in dinamika v kompleksnih nanostrukturiranih*
Slovenia – Poland *raztopinah / Structure and Dynamics in Complex*
Nanostructured Solutions
Nosilec / *Principal Researcher*: A. Jamnik

Slovenija – Flandrija <i>Slovenia – Flanders</i>	Moduli toksin-antitoksin: Funkcija, struktura in termodinamika / <i>Toxin-Antitoxin Modules: Function, Structure and Thermodynamics</i> Nosilec / <i>Principal Researcher</i> : J. Lah
Slovenija – Hrvaška <i>Slovenia – Croatia</i>	Interakcije majhnih organskih molekul z nukleinskimi kislinami: Sinteza, strukturne značilnosti in termodinamika / <i>Interactions of Small Organic Molecules with Nucleic Acids: Synthesis, Structural Features and Thermodynamics</i> Nosilec / <i>Principal Researcher</i> : J. Lah
Slovenija – Finska <i>Slovenia – Finland</i>	Študij vodnih raztopin izotaktične polimetakrilne kisline z metodo sipanja svetlobe / <i>A Light Scattering Study of Aqueous Isotactic Poly(Methacrylic Acid) Solutions</i> Nosilka / <i>Principal Researcher</i> : K. Kogej
Slovenija – Francija (CEA) <i>Slovenia – France (CEA)</i>	Študij raztopin hidrofobnih polielektrolitov s pomočjo tehnik sipanja ter termodinamskih in transportnih merjenj / <i>Aqueous Solutions of Hydrophobic Polyelectrolytes Studied by a Combination of Scattering Techniques and Thermodynamic and Transport Measurements</i> Nosilec / <i>Principal Researcher</i> : V. Vlachy
Slovenija – Ukrajina <i>Slovenia – Ukraine</i>	Vpliv elektrostatskih interakcij na hidratacijo makromolekul / <i>Influence of Hydrophobic and Coulomb Interactions on Macromolecule Hydration</i> Nosilec / <i>Principal Researcher</i> : V. Vlachy
Slovenija – Francija <i>Slovenia – France</i>	Transportne in ravnotežne lastnosti ionov v nabiti nanoporozni snovi / <i>Transport and Equilibrium Properties of Ions in Charged Nanoporous Material</i> Nosilec / <i>Principal Researcher</i> : V. Vlachy
Slovenija – Češka republika <i>Slovenia – Czech Republic</i>	Voda in solvatacija nepolarnih ter ionskih topljencev / <i>Water and Aqueous Nonpolar and Ionic Solvation</i> Nosilec / <i>Principal Researcher</i> : V. Vlachy

DRUGE OBLIKE MEDNARODNEGA SODELOVANJA / OTHER FORMS OF INTERNATIONAL COOPERATION

Vabljeni predavatelji tujcev na FKKT / *Invited Lecturers at FKKT*

Akademik prof. dr. Myroslav Holovko, Institute for Condensed Matter Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, Lviv, Ukraine: Teorija integralnih enačb in uporaba za študij tekočin in raztopin, I / *Integral Equation Theory in Liquids and Solutions, I*, May 2011.

Akademik prof. dr. Myroslav Holovko: Teorija integralnih enačb in uporaba za študij tekočin in raztopin, II / *Integral Equation Theory in Liquids and Solutions, II*, June 2011.

BIBLIOGRAFIJA 2011 / REFERENCES 2011

IZVIRNI ZNANSTVENI ČLANEK / ORIGINAL SCIENTIFIC ARTICLE

- FK1. PRISLAN, Iztok, KHUTSISHVILI, Irine, MARKY, Luis A. Interaction of minor groove ligands with G-quadruplexes : thermodynamic contributions of the number of quartets, TeU substitutions, and conformation. *Biochimie (Paris)*, 2011, vol. 93, no. 8, str. 1341-1350, doi: 10.1016/j.biochi.2011.06.001. [COBISS.SI-ID 35464965]
- FK2. ZUPANC, Jernej, DROBNE, Damjana, DRAŠLER, Barbara, VALANT, Janez, IGLIČ, Aleš, KRALJ-IGLIČ, Veronika, MAKOVEC, Darko, RAPPOLT, Michael, SARTORI, Barbara, KOGEJ, Ksenija. Experimental evidence for the interaction of C-60 fullerene with lipid vesicle membranes. *Carbon (N. Y.)*. [Print ed.], 2011, 49 str., [in press], doi: 10.1016/j.carbon.2011.10.030. [COBISS.SI-ID 2451279]
- FK3. ŠARAC, Bojan, CERKOVNIK, Janez, ANCIAN, Bernard, MÉRIGUET, Guillaume, ROGER, G., DURAND-VIDAL, S., BEŠTER-ROGAČ, Marija. Thermodynamic and NMR study of aggregation of dodecyltrimethylammonium chloride in aqueous sodium salicylate solution. *Colloid polym. sci.*, 2011, vol. 289, no. 14, str. 1597-1607, doi: 10.1007/s00396-011-2480-2. [COBISS.SI-ID 35268613]
- FK4. KLJAJIČ, Alen, BEŠTER-ROGAČ, Marija, TROŠT, Sabina, ZUPET, Rok, PEJOVNIK, Stane. Characterization of water/sodium bis(2-ethylhexyl) sulfosuccinate/sodium bis(amy) sulfosuccinate/[eta]-heptane mixed reverse micelles and w/o microemulsion systems : the influence of water and sodium bis(amy) sulfosuccinate content. *Colloids surf., A Physicochem. eng. asp.*. [Print ed.], 2011, vol. 385, no. 1/3, str. 249-255, doi: 10.1016/j.colsurfa.2011.06.018. [COBISS.SI-ID 35267077]
- FK5. GUTIÉRREZ-VALLADARES, E., LUKŠIČ, Miha, MILLÁN-MALO, B., HRIBAR, Barbara, VLACHY, Vojko. Primitive model electrolytes. A comparison of the HNC approximation for the activity coefficient with Monte Carlo data. *Condens. matter phys.*, 2011, vol. 14, no. 3, art. no. 33003 (15 str.), doi: 10.5488/CMP.14.33003. [COBISS.SI-ID 35358725]
- FK6. SAJEVIC, Tamara, REŠČIČ, Jurij, VLACHY, Vojko. Correlation between flexibility of chain-like polyelectrolyte and thermodynamic properties of its solution. *Condens. matter phys.*, 2011, vol. 14, no. 3, art. no. 33603 (14 str.), doi: 10.5488/CMP.14.33603. [COBISS.SI-ID 35379205]
- FK7. ANŽLOVAR, Alojz, KOGEJ, Ksenija, CRNJAK OREL, Zorica, ŽIGON, Majda. Polyol mediated nano size zinc oxide and nanocomposites with poly(methyl methacrylate). *Express polymlett.*, 2011, vol. 5, no. 7, str. 604-619, doi: 10.3144/expresspolymlett.2011.59. [COBISS.SI-ID 35003909]
- FK8. PAVLI, Matej, BAUMGARTNER, Saša, KOS, Petra, KOGEJ, Ksenija. Doxazosin-carrageenan interactions: a novel approach for studying drug-polymer interactions and relation to controlled drug release. *Int. j. pharm.*. [Print ed.], 2011, vol. 421, issue 1, str. 110-119, ilustr., doi: 10.1016/j.ijpharm.2011.09.019. [COBISS.SI-ID 3094897]
- FK9. HAUPTMAN, Nina, KLANJŠEK GUNDE, Marta, KUNAVER, Matjaž, BEŠTER-ROGAČ, Marija. Influence of dispersing additives on the conductivity of carbon black pigment dispersion. *JCT research*, 2011, vol. 8, no. 5, str. 553-561, ilustr., doi: 10.1007/s11998-011-9330-5. [COBISS.SI-ID 4640538]
- FK10. ANDJELKOVIČ, Uroš, LAH, Jurij. Thermodynamics and structural features of the yeast *Saccharomyces cerevisiae* external invertase isoforms in guanidinium-chloride solutions. *J. agric. food chem.*, 2011, vol. 59, no. 2, str. 727-732, doi: 10.1021/jf103441p. [COBISS.SI-ID 34739205]
- FK11. BEŠTER-ROGAČ, Marija, HUNGER, Johannes, STOPPA, Alexander, BUCHNER, Richard. 1-Ethyl-3-methylimidazolium ethylsulfate in water, acetonitrile, and dichloromethane : molar conductivities and association constants. *J. chem. eng. data*, 2011, vol. 56, no. 4, str. 1261-1267, doi: 10.1021/je101130e. [COBISS.SI-ID 34793221]
- FK12. ČEBAŠEK, Sašo, LUKŠIČ, Miha, POHAR, Ciril, VLACHY, Vojko. Thermodynamics of dilution and the Hofmeister series in aqueous solutions of aliphatic ionenes with halide counterions. *J. chem. eng. data*, 2011, vol. 56, no. 4, str. 1282-1292, doi: 10.1021/je101136a. [COBISS.SI-ID 34960645]
- FK13. BEŠTER-ROGAČ, Marija. Sodium salts of benzoic, m-salicylic, and p-salicylic acid : a conductivity study of diluted aqueous solutions. *J. chem. eng. data*, 2011, vol. 56, no. 12, str. 4965-4971, doi: 10.1021/je200836x. [COBISS.SI-ID 35419397]
- FK14. BOHINC, Klemen, REŠČIČ, Jurij, MASET, Stefano, MAY, Sylvio. Debye-Hückel theory for mixtures of rigid rodlike ions and salt. *J. chem. phys.*, 2011, vol. 134, no. 7, str. 074111-1-074111-9, doi: 10.1063/1.3552226. [COBISS.SI-ID 4134763]
- FK15. URBIČ, Tomaž, HOLOVKO, Myroslav. Mercedes-Benz water molecules near hydrophobic wall : integral equation theories vs Monte Carlo simulations. *J. chem. phys.*, 2011, vol. 135, no. 13, art. no. 134706 (9 str.), doi: 10.1063/1.3644934. [COBISS.SI-ID 35430405]
- FK16. KROFLIČ, Ana, ŠARAC, Bojan, BEŠTER-ROGAČ, Marija. Influence of the alkyl chain length, temperature, and added salt on the thermodynamics of micellization : alkyltrimethylammonium chlorides in NaCl aqueous solutions. *J. Chem. Thermodyn.*, 2011, vol. 43, no. 10, str. 1557-1563, doi: 10.1016/j.jct.2011.05.015. [COBISS.SI-ID 35108869]
- FK17. PRELESNIK, Simona, LARIN, Sergey, ASEYEV, Vladimir, TENHU, Heikki, KOGEJ, Ksenija. Water-soluble nonstoichiometric complexes between sodium poly(styrenesulfonate) and cetylpyridinium chloride in aqueous NaCl solutions. A static and dynamic light scattering study. *J. phys. chem., B Condens. mater. surf. interfaces biophys.*, 2011, vol. 115, no. 14, str. 3793-3803, doi: 10.1021/jp2008336. [COBISS.SI-ID 34948101]

- FK18. KULKARNI, Chandrashekar, TOMŠIČ, Matija, GLATTER, Otto. Immobilization of nanostructured lipid particles in polysaccharide films. *Langmuir*, 2011, vol. 27, no. 15, str. 9541-9550, doi: 10.1021/la201315t. [COBISS.SI-ID 35498245]
- FK19. LUKŠIČ, Miha, HRIBAR, Barbara, PIZIO, Orest. Structural and thermodynamic properties of the restricted primitive model electrolyte in a mixture with uncharged hard spheres : a grand canonical Monte Carlo simulation and integral equation study. *Mol. Phys.*, 2011, vol. 109, no. 6, str. 893-904, doi: 10.1080/00268976.2011.558029. [COBISS.SI-ID 34867205]
- FK20. RUDAN TASIČ, Darja, KLOFUTAR, Cveto, BEŠTER-ROGAČ, Marija. Dipole moment and self-association of acesulfame and saccharin in 1, 4-dioxane solution at 298.15 K. *Monatsh. Chem.*, 2011, vol. 142, no. 1, str. 19-24, doi: 10.1007/s00706-010-0411-4. [COBISS.SI-ID 34659333]
- FK21. PRISLAN, Iztok, LAH, Jurij, MILANIČ, Matija, VESNAVER, Gorazd. Kinetically governed polymorphism of d[G₄T₄G₃] quadruplexes in K⁺ solutions. *Nucleic acids res.*, 2011, vol. 39, no. 5, str. 1933-1942, doi: 10.1093/nar/gkq867. [COBISS.SI-ID 34876421]
- FK22. BEŠTER-ROGAČ, Marija, STOPPA, Alexander, HUNGER, Johannes, HEFTER, Glenn, BUCHNER, Richard. Association of ionic liquids in solution : a combined dielectric and conductivity study of [bmim][Cl] in water and in acetonitrile. *PCCP. Phys. chem. chem. phys. (Print)*, 2011, vol. 13, issue 39, str. 17588-17598., doi: 10.1039/C1CP21371G. [COBISS.SI-ID 35344389]
- FK23. POŽAR, Josip, BOHINC, Klemen, VLACHY, Vojko, KOVAČEVIĆ, Davor. Ion-specific and charge effects in counterion binding to poly(styrenesulfonate) anions. *PCCP. Phys. chem. chem. phys. (Print)*, 2011, no. 34, vol. 13, str. 15610-15618, doi: 10.1039/c1co21291e. [COBISS.SI-ID 4226155]
- FK24. NOVAK, Ana, BEZENŠEK, Jure, PEZDIRC, Lidija, GROŠELJ, Uroš, KASUNIČ, Marta, PODLIPNIK, Črtomir, STANOVIK, Branko, ŠIMUNEK, P., SVETE, Jurij. Regio- and stereoselective cycloadditions of (1Z, 4R*, 5R*)-1-arylmethylidene-4-benzoylamino-3-oxo-5-phenylpyrazolidin-1-ium-2-ides to methyl methacrylate. *Tetrahedron*. [Print ed.], 2011, vol. 67, no. 50, str. 9729-9735, doi: 10.1016/j.tet.2011.09.140. [COBISS.SI-ID 35497221]
- FK25. XIANG, Yuantao, JAMNIK, Andrej. Stringent verification of third order + second order perturbation density function theory : based on short-range square well potential. *Int. j. mod. phys. b*, 2010, vol. 24, no. 32, str. 6291-6306, doi: 10.1142/S=21797921005764X. [COBISS.SI-ID 35488005]
- FK26. VRHOVŠEK, Aleksander, GEREBEN, Orsolya, JAMNIK, Andrej, PUSZTAI, László. Hydrogen bonding and molecular aggregates Liquid Methanol, Ethanol, and 1-Propanol. *J. phys. chem., B Condens. mater. surf. interfaces biophys.*, 2011, vol. 115, no. 46, str. 13473-13488, doi: 10.1021/jp206665w. [COBISS.SI-ID 35714053]

PREGLJEDNI ZNANSTVENI ČLANEK / REVIEW ARTICLE

- FK27. HRIBAR, Barbara, LUKŠIČ, Miha, VLACHY, Vojko. Partly-quenched systems containing charges. Structure and dynamics of ions in nanoporous materials. *Annu. rep. prog. chem. Sect C. Phys. chem*, 2011, vol. 107, no. 1, str. 14-46, doi: 10.1039/C1PC90001C. [COBISS.SI-ID 35086853]

OBJAVLJENI ZNANSTVENI PRISPEVEK NA KONFERENCI (VABLJENO PREDAVANJE) PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTION (INVITED LECTURE)

- FK28. KOGJEJ, Ksenija. Polyelectrolyte-surfactant complexes : [invited lecture]. V: 14th IUPAC International Symposium on Macromolecular Complexes, MMC-14, August 14-17, 2011, Department of Chemistry, University of Helsinki, Finland. *Book of abstracts*. [S. l.: s. n.], 2011, str. 36. [COBISS.SI-ID 35332613]
- FK29. BEŠTER-ROGAČ, Marija. Pouk naravoslovja - zamujena priložnost. V: ČEPIČ, Mojca (ur.). *Posvet o poučevanju fizike, kemije in matematike, SAZU, 22. septembra 2010*, (Zbirka Znanje kot vrednota, 2). Ljubljana: Slovenska akademija znanosti in umetnosti, 2011, str. 92-100. [COBISS.SI-ID 35510533]
- FK30. HUŠ, Matej, URBIČ, Tomaž. Vpliv lokalnega okolja na potencial med molekulama vode = Local environment effect on the water-water potential. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14-16 september 2011*. Maribor: FKKT, 2011, str. 1-7. [COBISS.SI-ID 35401477]
- FK31. MERNIK, Andrej, DROBNAK, Igor, LAH, Jurij. Termodinamika prepoznavanja toksina CcdB z antitoksinom CcdA iz bakterije *Vibrio fischeri* = Thermodynamics of toxin-antitoxin (CcdB-CcdA) recognition from bacteria *Vibrio fischeri*. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14-16 september 2011*. Maribor: FKKT, 2011, str. 1-11. [COBISS.SI-ID 35399429]
- FK32. PODLIPNIK, Črtomir. Molekulska modeliranje kinaze B-RAF in njenih inhibitorjev = Molecular modeling of B-RAF kinase and its inhibitors : [predavanje]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14-16 september 2011*. Maribor: FKKT, 2011, str. 1-14. [COBISS.SI-ID 35400453]

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

- FK33. BEŠTER-ROGAČ, Marija. Conductivity of electrolyte solutions - an outdated story? : [invited lecture]. V: 32nd International Conference on Solution Chemistry, La Grande Motte, France, August 28th - September 2nd 2011. *Book of abstracts : ICSC2011*. [S. l.: s. n.], 2011, str. 77-78. [COBISS.SI-ID 35356165]
- FK34. VLACHY, Vojko, ČEBAŠEK, Sašo, LUKŠIČ, Miha, POHAR, Ciril. Thermodynamics of aqueous solutions of aliphatic ionenes with halide counterions : [invited lecture]. V: 32nd International Conference on Solution Chemistry, La Grande Motte, France, August 28th - September 2nd 2011. *Book of abstracts : ICSC2011*. [S. l.: s. n.], 2011, str. 82- [COBISS.SI-ID 35356421]

SAMOSTOJNI ZNANSTVENI SESTAVEK ALI POGlavJE V MONOGRAFSKI PUBLIKACIJI INDEPENDENT SCIENTIFIC COMPONENT PART OR A CHAPTER IN A MONOGRAPH

- FK35. PRISLAN, Iztok, LEE, Hui-Ting, LEE, Cynthia, MARKY, Luis A. The size of internal loops influences the unfolding thermodynamics of DNA hairpins. V: SHEARDY, Richard Dean (ur.), WINKLE, Stephen A. (ur.). *Frontiers in nucleic acids*, (ACS symposium series, 1082). Washington, D.C.: American Chemical Society, cop. 2011, str. 93-110, doi: 10.1021/bk-2011-1082.ch006. [COBISS.SI-ID 35489285]

DRUGO UČNO GRADIVO / OTHER EDUCATIONAL MATERIAL

- FK36. REŠČIČ, Jurij. *Fizikalna kemija in meritve. 2. del, Meritve : zapiski predavanj za študente kemijske tehnologije - smer uporabna kemija*. Ljubljana: Univ. v Ljubljani, Fak. za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2011. [147] f., ilustr. [COBISS.SI-ID 34981381]
- FK37. GLAŽAR, Saša A., GODEC, Andrej, VRTAČNIK, Margareta, WISSIAK GRM, Katarina Senta. *Moja prva kemija 1 : kemija za 8. razred osnovne šole, Delovni zvezek*. 8. izd. Ljubljana: Modrijan, 2011. 116 str., ilustr. ISBN 978-961-6465-82-3. [COBISS.SI-ID 254758656]
- FK38. GLAŽAR, Saša A., GODEC, Andrej, VRTAČNIK, Margareta, WISSIAK GRM, Katarina Senta. *Moja prva kemija 2 : kemija za 9. razred osnovne šole, Delovni zvezek*. 6. izd. Ljubljana: Modrijan, 2011. 96 str., ilustr. ISBN 978-961-241-045-2. [COBISS.SI-ID 254758912]
- FK39. REŠČIČ, Jurij. *Numerične metode v varnosti I : zapiski predavanj*. Ljubljana: Univ. v Ljubljani, Fak. za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2011. 23 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 34980357]
- FK40. REŠČIČ, Jurij. *Numerične metode v varnosti II : zapiski predavanj*. Ljubljana: Univ. v Ljubljani, Fak. za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2011. 27 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 34980613]
- FK41. JAMNIK, Andrej. Ljubljana: Fak. za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2010. 84 str., ilustr. [COBISS.SI-ID 34726917]
- FK42. JAMNIK, Andrej. *Fizikalna kemija I : skripta*. Ljubljana: Fak. za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2010. 426 str., ilustr. [COBISS.SI-ID 34722565]

PATENT / PATENT

- FK43. BEŠTER-ROGAČ, Marija. *Sistem za določanje dielektrične konstante topil : SI 23379 (A), 2011-II-30*. Ljubljana: Urad Republike Slovenije za intelektualno lastnino, 2011. 11 str., ilustr. [COBISS.SI-ID 34485509]

PREDAVANJE NA TUJI UNIVERZI / INVITED LECTURE AT FOREIGN UNIVERSITY

- FK44. PRISLAN, Iztok. *Calorimetric and spectroscopic investigation of DNA-DNA oligonucleotide reactions : [University of Nebraska Medical Center, College of Pharmacy seminar series, 1. 4. 2011]*. Omaha, 2011. [COBISS.SI-ID 35493381]
- FK45. HRIBAR, Barbara. *Ion-specific effects in electrolyte and polyelectrolyte aqueous solutions : [Universität Duisburg Essen, Fakultät für Chemie, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, 10. 11. 2011]*. Duisburg, 2011. [COBISS.SI-ID 35535621]
- FK46. PRISLAN, Iztok. *ITC unleashed: an insight into binding properties of drugs : [University of Nebraska Medical Center, INBRE/GAANN Structural Biology and Molecular Biophysics Club, 25. 1. 2011]*. Omaha, 2011. [COBISS.SI-ID 35493125]
- FK47. PRISLAN, Iztok. *Modern calorimetry: measuring heat changes associated with intra- and intramolecular interactions : [Creighton University, College of Arts and Sciences, Department of Physics Student Colloquium, 7. 4. 2011]*. Omaha, 2011. [COBISS.SI-ID 35493637]
- FK48. LAH, Jurij, DROBNAK, Igor. *Thermodynamics of interactions driving the functionality of bacterial toxin-antitoxin modules : Univerzitet u Beogradu, Hemijski fakultet, 21. 1. 2011*. 2011; Beograd. [COBISS.SI-ID 34737413]

- FK49. URBIČ, Tomaž. *Water and modeling of solvation* : [Laufer Center, Stony Brook Univeristy, Stony Brook, NY, USA, 2. 8. 2011]. Stony Brook, 2011. [COBISS.SI-ID 35272197]

VABLJENO PREDAVANJE NA KONFERENCI BREZ NATISA / UNPUBLISHED INVITED CONFERENCE LECTURE

- FK50. LUKŠIČ, Miha. *Kemija in vreme : 17. slovenski festival znanosti z mednarodno udeležbo, Planetarni izzivi časa, (4. - 6. oktober 2011)*. Ljubljana, 2011. [COBISS.SI-ID 35429893]

UREDNIK / EDITORSHIP

- FK51. GODEC, Andrej, LAH, Nina, PROSEN, Helena, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona, PRIJATELJ, Petra, STOJKOVIČ, Gorazd, KORENČ, Matevž. *Zbornik prispevkov*. Ljubljana: Založba FKKT, 2011. 1 optični disk (CD-ROM). ISBN 978-961-6756-27-3. [COBISS.SI-ID 257800192]
- FK52. *Acta chimica slovenica*. Vesnaver, Gorazd (član uredniškega odbora 1998-), Bešter-Rogač, Marija (član uredniškega odbora 2003-). [Tiskana izd.]. Ljubljana: Slovensko kemijsko društvo: =Slovenian Chemical Society, 1993-. ISSN 1318-0207. [COBISS.SI-ID 14086149]
- FK53. *Journal of molecular liquids*. Bešter-Rogač, Marija (član uredniškega odbora 2008-). [Print ed.]. Amsterdam: Elsevier. ISSN 0167-7322. [COBISS.SI-ID 15382277]

KATEDRA ZA ORGANSKO KEMIJO **CHAIR OF ORGANIC CHEMISTRY**

PREDSTOJNIK KATEDRE / HEAD

prof. dr. Boris Šket

SODELAVCI KATEDRE / PERSONNEL

Učitelji / Faculty

prof. dr. Marijan Kočevar

prof. dr. Janez Košmrlj

prof. dr. Andrej Petrič

prof. dr. Božo Plesničar, zaslužni profesor (upokojen) / *Professor Emeritus*

prof. dr. Slovenko Polanc

akademik prof. dr. Branko Stanovnik

prof. dr. Jurij Svete

prof. dr. Boris Šket

akademik prof. dr. Miha Tišler, zaslužni profesor (upokojen) / *Professor Emeritus*

izr. prof. dr. Bojan Verček

prof. dr. Marko Zupan (upokojen / *retired*)

Asistenti / Assistants

doc. dr. Janez Cerkovnik

izr. prof. dr. Darko Dolenc

doc. dr. Marjan Jereb

dr. Berta Košmrlj

doc. dr. Franci Kovač

doc. dr. Franc Požgan

doc. dr. Bogdan Štefane

Raziskovalci / Researchers

dr. Uroš Grošelj
 dr. Krištof Kranjc
 Nenad Maraš, univ. dipl. kem.
 dr. Jernej Wagger
 Benjamin Prek, univ. dipl. kem.
 dr. Damijana Urankar

Tehniki / Technicians

Zdenka Kadunc
 Tončka Kozamernik
 Branka Miklavčič
 Irena Povalej
 Zdenka Sakelšek
 Tatjana Stipanović

Mladi raziskovalci Young researchers	Mentor <i>Mentor</i>	Čas usposabljanja <i>Programme Duration</i>	Oblika usposabljanja <i>Degree</i>
Jernej Baškovč	B. Stanovnik	2007–2012	doktorski študij / <i>PhD</i>
Jure Bezenšek	B. Stanovnik	2009–2013	doktorski študij / <i>PhD</i>
Aljoša Bolje	J. Košmrlj	2011–2015	doktorski študij / <i>PhD</i>
Petra Galer	B. Šket	2009–2013	doktorski študij / <i>PhD</i>
Martin Gazvoda	S. Polanc	2009–2013	doktorski študij / <i>PhD</i>
Amadej Juranovič	M. Kočever	2008–2012	doktorski študij / <i>PhD</i>
Marko Krivec	M. Kočever	2010–2014	doktorski študij / <i>PhD</i>
Vita Majce	S. Polanc	2007–2012	doktorski študij / <i>PhD</i>
Črt Malavašič	J. Svete	2007–2011	doktorski študij / <i>PhD</i>
Ana Novak	J. Svete	2009–2013	doktorski študij / <i>PhD</i>
Luka Reje	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	S. Polanc	2011–2015	doktorski študij / <i>PhD</i>

Ostali podiplomski študenti, ki niso v rednem delovnem razmerju / Other Postgraduate Students

Sanja Čavar
 Žiga Nose

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*

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)*

Predbolonjski dodiplomski programi / Pre-Bologna Undergraduate Programmes

Kemija heterocikličnih spojin / *Chemistry of Heterocyclic Compounds* – UN

Načrtovanje organskih sintez / *Planning of Organic Syntheses* – UN

Izbrana poglavja iz organske kemije / *Selected Topics in Organic Chemistry* – UN

Organska kemija biološko pomembnih spojin / *Organic Chemistry of Biologically Important Compounds* – UN

Usmerjena organska sinteza / *Directed Organic Synthesis* – UN

Bioaktivne spojine / *Bioactive Compounds* – UN

Pretvorbe bioaktivnih spojin / *Transformations of Bioactive Compounds* – UN

Nukleinske kisline in polinukleotidi / *Nucleic Acids and Polynucleotides* – UN
Kemija in biokemija živil / *Chemistry and Biochemistry of Food* – UN
Poskusi v organski kemiji / *Experiments in Organic Chemistry* – UN

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

Predbolonjski dodiplomski programi / *Pre-Bologna Undergraduate Programmes*

Organska kemija / *Organic Chemistry*, PEF – UN
Organska kemija / *Organic Chemistry*, BF – UN
Kemija organskih materialov / *Chemistry of Organic Materials*, NTF – 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*
- Načrtovanje in sinteza spojin z antimalarijsko aktivnostjo / *Design and Synthesis of Compounds with Antimalarial Activity*
- 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*

POMEMBNI DOSEŽKI SODELAVCEV KATEDRE / SIGNIFICANT ACHIEVEMENTS OF THE CHAIR STAFF

NAGRADE, PRIZNANJA / AWARDS, RECOGNITIONS

Krkinge nagrade 2011

Krkinga nagrada za posebne dosežke na področju raziskovalnega dela / *The Krka Award for Special Achievements in Research*

- Črt Malavašič, (mentor J. Svete): Kiralni N-alkilirani diketopiperazini : sinteza, interakcije in uporaba / *Chiral N-alkylated diketopiperazine : synthesis, interactions and application.*

Krkinga nagrada za podiplomske in dodiplomske raziskovalne naloge / *The Krka Award for Graduate and Postgraduate Research Work*

- Benjamin Prek, (mentor B. Stanovnik): Sinteza dimetil 6-substituiranih piridin-3,4-dikarbo-ksilatov in 2-substituiranih-4,5-bis(metoksikarbonil)piridin-N-oksidov / *Synthesis of dimethyl 6-substituted pyridine-3,4-dicarboxylates and 2-substituted-4,5-bis(methoxycarbonyl) pyridine-N-oxides.*
- Borut Zupančič, (mentor B. Šket): Novi P-stereogeni difosfinski ligandi za asimetrično hidrogeniranje / *Novel P-stereogenic diphosphine ligands for asymmetric hydrogenation.*

Prešernova nagrada FKKT za leto 2011 / *The Faculty Prešeren Award for 2011*

- Tatjana Filipič, (mentor B. Štefane)
- Jure Vajs, (mentor S. Polanc)

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, področni urednik / *Associate Editor, Acta Chimica Slovenica*
- M. Kočevar, član upravnega odbora / *Member of the Management Committee, COST D40 Innovative Catalysis: New Processes and Selectivities (2006–2011)*
- M. Kočevar, na povabilo predsednika IUPAC Professor Jun-Il Jina je M. Kočevar z letom 2010 postal IUPAC Fellow
- 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*
- K. Kranjc, področni urednik / *Associate Editor, Acta Chimica Slovenica*
- S. Polanc, član uredniškega odbora / *Member of the Editorial Board, Topics in Heterocyclic Chemistry*
- F. Požgan, član uredniškega odbora / *Member of the Editorial Board, Glasnik hemičara i tehnologa Bosne i Hercegovine.*
- 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, Mednarodno leto kemije 2011 (nagovor ob slovesnosti začetka mednarodnega leta kemije v Sloveniji v Ljubljani 9. 2. 2011) / *International Year of Chemistry 2011, Opening Address*
- B. Stanovnik:
 - a) Member of the Scientific Committee, European Colloquia of Heterocyclic Chemistry

- b) Member of the Scientific Committee, Blue Danube Symposia of Heterocyclic Chemistry
- c) Member of the Board of Electronic Journal ARKIVOC
- d) Member of the Advisory Board, Advances in Heterocyclic Chemistry
- e) Member of the Scientific Committee, TRAMECH Transmediterranean Symposia on Heterocyclic Chemistry
- f) Member of the International Advisory Committee of the IBN SINA International Conferences on Pure and Applied Heterocyclic Chemistry
- g) Member of the Scientific Committee of Eurasian Meetings on Heterocyclic Chemistry
- h) Member of the Advisory Board, Trends in Heterocyclic Chemistry
- i) Head of the Unit for International Cooperation and Scientific Coordination, Slovenian Academy of Sciences and Arts, Ljubljana, Slovenia
- j) 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
- k) 1998–2004 Member of the Scientific Advisory Board of the Organization for the Prohibition of Chemical Weapons, The Hague, The Netherlands
- l) Member of the Editorial Board, International Journal of Organic Chemistry, [Print ed.]. Irvine, CA: Scientific Research Pub.
- m) Member of the Editorial Board, Journal of Heterocyclic Chemistry. Provo, Utah: HeteroCorporation.
- n) Member of the Editorial Board, Molecules. Berlin: Springer; Basel: Molecular Diversity Preservation International
- o) Member of the Editorial Board, Targets in Heterocyclic Systems Chemistry and Properties. Roma: Società Chimica Italiana
- p) Member of the Editorial Board, Trends in Heterocyclic Chemistry. Trivandrum: Research Trends
- r) Member of the Editorial Board, Croatica Chemica Acta. Zagreb: Hrvatsko kemijsko društvo
- s) Chairman of the Advisory Editorial Board, Acta Chimica Slovenica
- š) Fellow, Royal Society of Chemistry, London, Great Britain
- t) Honorary Member, Hungarian Chemical Society
- u) Inaugural Honorary Member of Florida Center for Heterocyclic Compounds, Gainesville, Florida, USA

RAZISKOVALNA OPREMA / RESEARCH EQUIPMENT

- C, H, N – Analizator Perkin-Elmer 2400 II / *C, H, N – Analyzer Perkin Elmer 2400 II*
- UV – visible spektrofotometer Varian / *UV – Visible Spectrophotometer Varian*
- IR spektrometer BIO-RAD / *IR Spectrometer BIO-RAD*
- IR spektrometer Spectrum BX FTIR Perkin-Elmer / *IR Spectrometer Spectrum BX FTIR Perkin-Elmer*
- Polarimeter Perkin-Elmer / *Polarimeter Perkin-Elmer*
- Destilacijska aparatura Fisher-Jones / *Distillation Apparatus Fisher-Jones*
- 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 Parallel Synthesizer – 6 Positions*
- Radleys Reactor Ready laboratorijski reaktor / *Radleys Reactor Ready Lab Reactor*
- Büchi Syncore Polyvap+Reactor paralelni sintetizator in uparjevalnik – 24 pozicij / *Büchi Syncore Polyvap+Reactor Parallel Synthesizer and Evaporator – 24 Positions*
- Hettlab IR-Dancer Infra-Red Vortex evaporator (paralelni uparjevalnik) – 48 pozicij / *Hettlab IR-Dancer Infra-Red Vortex Evaporator (Parallel Evaporator) – 48 Positions*
- Starfish – multiexperiment work station / *Starfish – Multiexperiment Work Station*
- Laboratorijski mikrovalovni reaktor CEM / *Laboratory Microwave Reactor CEM*
- MPLC – preparativni kromatograf Büchi / *MPLC – Preparative Chromatograph Büchi*
- Aparatura za delo pod visokimi pritiski U 101 / *High-Pressure Reactor U 101*
- GC – Hewlett Packard HPG 890 Series / *GC – Hewlett Packard HPG 890 Series*
- HPLC – Agilent Technologies 1260 Infinity / *HPLC – Agilent Technologies 1260 Infinity*
- Fotokemijski reaktor Buckinghamshire model MLU/8 / *Photochemical Reactor Buckinghamshire Model MLU/8*
- NMR spektrometer – Bruker Avance DPX 300 / *NMR Spectrometer – Bruker Avance DPX 300*
- NMR spektrometer – Bruker Avance Ultrashield 500 plus / *NMR Spectrometer – Bruker Avance Ultrashield 500 plus*
- Ozonator Welsbach model T-816 / *Ozonator Welsbach Model T-816*
- GC/MS Hewlett Packard 6890 / *GC/MS Hewlett Packard 6890*
- MS Micromass Platform II / *MS Micromass Platform II*
- Potopni hladilnik do –60 °C / *Cooler –60 °C*
- Hidrogenator Parr / *Parr Hydrogenator*
- Avtoklavi Berghof / *Autoclaves Berghof*
- Rotavaporji Büchi / *Rotavapors Büchi*
- Rotavapor Heidolph / *Rotavapor Heidolph*
- Rotavaporja IKA / *Rotavapors IKA*
- Vakuumske črpalke Vacuubrand / *Vacuum Pumps Vacuubrand*
- OptiMelt EZ (Stanford Scientific) – sistemi za avtomatsko določevanje tališča / *OptiMelt EZ (Stanford Scientific) Automated Melting Point System*

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: Multidisciplinary Research in Life Sciences and Advanced New Materials*

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. Kočevar

TEMELJNI PROJEKTI / BASIC RESEARCH

- J1-6254 Reaktivni intermedii pri transformacijah organskih spojin / *Reactive Intermediates in the Transformation of Organic Compounds*
Nosilec / *Principal Researcher*: B. Šket
- J1-6689 Sinteza heterocikličnih analogov aminokislin in peptidov / *Synthesis of Heterocyclic Analogs of Amino Acids and Peptides*
Nosilec / *Principal Researcher*: B. Stanovnik

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*: B. Stanovnik

Financer / *Sponsored by*: Krka 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.

MEDNARODNO ZNANSTVENO SODELOVANJE / INTERNATIONAL RESEARCH COOPERATION**VEČSTRANSKO MEDNARODNO SODELOVANJE / MULTILATERAL COOPERATION**

- COST D40 *Innovative Catalysis: New Processes and Selectivities* (-2011)
Član upravnega odbora / *Member of the Management Committee*:
M. Kočevar

COST CM0905 *Organocatalysis, ORCA (2011-)*
Član upravnega odbora / *Member of the Management Committee:*
M. Kočevar

BILATERALNO MEDNARODNO SODELOVANJE / BILATERAL COOPERATION

Slovenija – Romunija *Sinteza in katalitsko hidrogeniranje prokiralnih nenasičenih*
Slovenia – Romania *aminokislin / Synthesis and Catalytic Hydrogenation of Prochiral*
Unsaturated Amino Acids
Nosilec / *Principal Researcher:* M. Kočevar

Slovenija – Madžarska *Uporaba mikrovalov v organski sintezi / Use of Microwaves in*
Slovenia – Hungary *Organic Synthesis*
Nosilec / *Principal Researcher:* M. Kočevar

Slovenija – Belgija *Eksperimentalne in teoretične študije kompleksov kovin prehoda*
Slovenia – Belgium *s »klik triazol« ligandi / Experimental and Theoretical Studies of*
Transition Metal Complexes with “Click triazole” Ligands
Nosilec / *Principal Researcher:* J. Košmrlj

Slovenija – Argentina *Funkcionalizacija izbranih organskih substratov in razvoj strategij za*
Slovenia – Argentina *trajnostno organsko sintezo / Functionalization of Selected Organic*
Substrates and Development of Strategies for a Sustainable Organic
Synthesis
Nosilec / *Principal Researcher:* S. Polanc

Slovenija – Češka *Nov pristop k antibakterijsko aktivnim molekulam / New Approach*
Slovenia – Czech *to Antibacterial Active Molecules*
Republic Nosilec / *Principal Researcher:* S. Polanc

DRUGE OBLIKE MEDNARODNEGA SODELOVANJA / OTHER FORMS OF INTERNATIONAL COOPERATION

Vabljeni predavanja tujcev na FKKT / *Invited Lecturers at FKKT*

- Dr. Harald Walter, Syngenta Crop Protection Münchwilen AG, Stein, Switzerland: *Disease Control with Fungicides: Past and Present*, April 2011.
- Prof. Leiv K. Sydnes, Department of Chemistry, University of Bergen, Bergen, Norway: *Šola fotokemije / School of Photochemistry*, June 2011.
- Prof. Leiv K. Sydnes, Department of Chemistry, University of Bergen, Bergen, Norway: *Some Chemical Transformations of Some Conjugated Acetylenic Ketones*, June 2011.
- Prof. Miguel Yus, Institute of Organic Synthesis, University of Alicante, Alicante, Spain: *Efficiency in Chemistry: From Hydrogen Transfer to Multicomponent Catalysis*, October 2011.
- Prof. Carmen Najera, Institute of Organic Synthesis, University of Alicante, Alicante, Spain: *Enantiocontrolled 1,3-Dipolar Cycloadditions of Azomethine Ylides*, October 2011.

POGODBENO 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«. Nosilca: Zagreb – dr. Maja Osmak, znanstvena svetnica; Ljubljana – S. Polanc.

OSTALA (NEFORMALIZIRANA) MEDNARODNA SODELOVANJA / OTHER INFORMAL WAYS OF INTERNATIONAL COOPERATION

M. Kočevar

- Z Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Paris Chimie ParisTech, Laboratoire Charles Friedel; prof. Veronique Michelet in prof. Virginie Ratovelomanana-Vidal.

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 (1992–).

B. Plesničar, J. Cerkovnik

- Z Univerzo Strathclyde (Glasgow, Velika Britanija) z raziskovalno skupino dr. Tella Tuttle-a na področju kvantno-mehanskih izračunov (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 (2005–).

B. Stanovnik, J. Svete

- Z Univerzo v Urbino z raziskovalno skupino prof. Orazia Antonia Attanasija na adicijah enamino estrov (1998–).
- Z Univerzo v Bariju z raziskovalno skupino prof. Saveria Floria na sintezi oksaziridinov iz enamino estrov (2000–).
- Z Univerzo v Ulmu z raziskovalno skupino prof. Gerharda Maasa na (2+2) cikloadicijah elektronsko revnih acetilenov na enamino ketone in enamino estre (2006–).
- Z Univerzo v Aalenu z raziskovalno skupino prof. Willija Kantlehnerja na (2+2) cikloadicijah elektronsko revnih acetilenov na enamino ketone in enamino estre (1999–).
- Z Univerzo v Pardubicah z raziskovalno skupino prof. dr. Petra Šimuneka na kemiji enamionov.

B. Šket

- Z Univerzo v Baslu z raziskovalno skupino prof. Jakoba Wirza na področju organske fotokemije in bliskovne laserske fotolize (2000–).

BIBLIOGRAFIJA 2011 / REFERENCES 2011

IZVIRNI ZNANSTVENI ČLANEK / ORIGINAL SCIENTIFIC ARTICLE

- OK1. BEZENŠEK, Jure, KOLEŠA, Tanja, GROŠELJ, Uroš, MEDEN, Anton, STARE, Katarina, SVETE, Jurij, STANOVNIK, Branko. [2+2] Cycloaddition of electron-poor acetylenes to enamines. *Curr. org. chem.*, 2011, vol. 15, no. 14, str. 2530-2539, doi: 10.2174/138527211796150633. [COBISS.SI-ID 35127045]
- OK2. BRATSOS, Ioannis, URANKAR, Damijana, ZANGRANDO, Ennio, GENOVA-KALOU, Petia, KOŠMRLJ, Janez, ALESSIO, Enzo, TUREL, Iztok. 1-(2-Picolyl)-substituted 1,2,3-triazole as novel chelating ligand for the preparation of ruthenium complexes with potential anticancer activity. *Dalton trans. (2003. Print)*, 2011, vol. 40, no. 19, str. 5188-5199, doi: 10.1039/c0dt01807d. [COBISS.SI-ID 34899461]
- OK3. ČIMBORA, Tamara, BROZOVIĆ, A., PIAN TANIDA, I., FRITZ, G., VIRAG, Andrej, ALIČ, Branko, MAJCE, Vita, KOČEVAR, Marijan, POLANC, Slovenko, OSMAK, Maja. Synthesis and biological evaluation of 4-nitro-substituted 1,3-diaryltriazenes as a novel class of potent antitumor agents. *Eur. j. med. chem.*. [Print ed.], 2011, vol. 46, issue 7, str. 2971-2983. http://www.sciencedirect.com/science?_ob=MIimg&_imagekey=B6VKY-52P6KVF-1-1&_cdi=6135&_user=4776866&_pii=S0223523411003096&_origin=search&_zone=rslt_list_item&_coverDate=04%2F23%2F2011&_sk=999999999&wchp=dGLbVlb-zSkzV&md5=bded4b4df4189b8ec023af04075c6b8b&ie=/sdarticle.pdf, doi: 10.1016/j.ejmech.2011.04.024. [COBISS.SI-ID 34964997]
- OK4. GALER, Petra, KOŠMRLJ, Berta, ŠKET, Boris. Highly regioselective halogenation of 1-phenyl-3-(3,5-dimethoxyphenyl)-propane-1,3-dione. *Tetrahedron*. [Print ed.], 2011, vol. 67, no. 11, str. 2103-2109, doi: 10.1016/j.tet.2011.01.051. [COBISS.SI-ID 34845701]
- OK5. HREN, Jure, PERDIH, Franc, POLANC, Slovenko, KOČEVAR, Marijan. Retention of symmetry versus desymmetrization for bicyclo[2.2.2]octenes in the presence of a bridgehead amide group. *European journal of organic chemistry*, 2011, no. 18, str. 3368-3374, doi: 10.1002/ejoc.201100104. [COBISS.SI-ID 34968581]
- OK6. JANJIČ, Monika, PREBIL, Rok, GROŠELJ, Uroš, KRALJ, David, MALAVAŠIČ, Črt, GOLOBIČ, Amalija, STARE, Katarina, DAHMANN, Georg, STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. A simple synthesis of 5-(2-aminophenyl)-1H-pyrazoles. *Helv. Chim. Acta*, 2011, vol. 94, no. 9, str. 1703-1717, doi: 10.1002/hlca.201100055. [COBISS.SI-ID 35375621]
- OK7. JURANOVIČ, Amadej, KRANJC, Krištof, PERDIH, Franc, POLANC, Slovenko, KOČEVAR, Marijan. Comparison of the reaction pathways and intermediate products of a microwave-assisted and high-pressure-promoted cycloaddition of vinyl-moiety-containing dienophiles on 2H-pyran-2-ones. *Tetrahedron*. [Print ed.], 2011, vol. 67, no. 19, str. 3490-3500, doi: 10.1016/j.tet.2011.03.034. [COBISS.SI-ID 34893061]
- OK8. KAFKA, Stanislav, HAUKE, Sylvia, SALČINOVIČ, Arjana, SOIDINSALO, Otto, URANKAR, Damijana, KOŠMRLJ, Janez. Copper(I)-catalyzed [3 + 2] cycloaddition of 3-azidoquinoline-2,4(1H,3H)-diones with terminal alkynes. *Molecules (Basel)*, 2011, vol. 16, no. 5, str. 4070-4081, doi: 10.3390/molecules16054070. [COBISS.SI-ID 35032581]
- OK9. KRANJC, Krištof, KOČEVAR, Marijan, PERDIH, Franc. Methyl 2-benzamido-4-(3,4-dimethoxyphenyl)-5-methylbenzoate and N-(5-benzoyl-2-[(Z)-2-methoxyethenyl]-4-methylphenyl)benzamide. *Acta crystallogr., C Cryst. struct. commun.*, 2011, vol. C67, no. 6, str. o201-o205, doi: 10.1107/S0108270111015794. [COBISS.SI-ID 34990341]
- OK10. MAJCE, Vita, KOČEVAR, Marijan, POLANC, Slovenko. A rapid and simple amine-catalyzed microwave-assisted isomerization of maleamides into fumaramides. *Tetrahedron lett.*. [Print ed.], 2011, vol. 52, issue 26, str. 3287-3290. http://www.sciencedirect.com/science?_ob=MIimg&_imagekey=B6THS-52P6KWT-C-1&_cdi=5290&_user=4776866&_pii=S0040403911006496&_origin=search&_zone=rslt_list_item&_coverDate=04%2F23%2F2011&_sk=999999999&wchp=dGLzVzb-zSkzV&md5=326507cfd31bd58ca49f5c1a4f025b23&ie=/sdarticle.pdf, doi: 10.1016/j.tetlet.2011.04.066. [COBISS.SI-ID 34965253]
- OK11. MALAVAŠIČ, Črt, GROŠELJ, Uroš, GOLOBIČ, Amalija, BEZENŠEK, Jure, STANOVNIK, Branko, STARE, Katarina, WAGGER, Jernej, SVETE, Jurij. Synthesis and structure of novel (S)-1,6-dialkylpiperazine-2,5-diones and (3S,6S)-1,3,6-trialkylpiperazine-2,5-diones. *Tetrahedron: asymmetry*. [Print ed.], 2011, vol. 22, no. 6, str. 629-640, doi: 10.1016/j.tetasy.2011.03.014. [COBISS.SI-ID 35038725]
- OK12. MALAVAŠIČ, Črt, STANOVNIK, Branko, WAGGER, Jernej, SVETE, Jurij. The effect of substituents on the chiral solvating properties of (S)-1, 6-dialkylpiperazine-2,5-diones. *Tetrahedron: asymmetry*. [Print ed.], 2011, vol. 22, no. 12, str. 1364-1371, doi: 10.1016/j.tetasy.2011.07.019. [COBISS.SI-ID 35348741]
- OK13. MARAŠ, Nenad, PERDIH, Franc, KOČEVAR, Marijan. Synthesis of 1-aryl-1-phenylpropenes using an alkylation-rearrangement-methylation-isomerization one-pot reaction sequence. *Cent. Eur. J. Chem. (Print)*, 2011, vol. 9, no. 5, str. 904-909, doi: 10.2478/s11532-011-0074-y. [COBISS.SI-ID 35266821]
- OK14. MARAŠ, Nenad, KOČEVAR, Marijan. Boric acid-catalyzed direct condensation of carboxylic acids with benzene-1,2-diamine into benzimidazoles. *Helv. Chim. Acta*, 2011, vol. 94, no. 10, str. 1860-1873, doi: 10.1002/hlca.201100064. [COBISS.SI-ID 35453445]
- OK15. MUŠIČ, Irena, VERČEK, Bojan. Synthesis and alkylation of spiro-2-oxazolines containing fused 3,4-dihydropyrazin-2(1H)-ones. *Heterocycles*, 2011, vol. 83, no. 10, str. 2353-2364, doi: 10.3987/COM-11-12299. [COBISS.SI-ID 35471365]
- OK16. NAKAYAMA, Shizuka, KELSEY, Ilana, WANG, Jingxin, ROELOFS, Kevin, ŠTEFANE, Bogdan, LUO, Yiling, LEE, Vincent T., SINTIM, Herman O. Thiazole orange-induced c-di-GMP quadruplex formation facilitates a sim-

- ple fluorescent detection of this ubiquitous biofilm regulating molecule. *J. Am. Chem. Soc.*, 2011, vol. 133, no. 13, str. 4856-4864, doi: 10.1021/ja1091062. [COBISS.SI-ID 34845957]
- OK17. NOVAK, Ana, BEZENŠEK, Jure, GROŠELJ, Uroš, GOLOBIČ, Amalija, STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. Serendipity at work: unexpected ring transformations of 4-aminopyrazolidin-3-ones into N-aminohydantoins. *ARKIVOC*. [Print ed.], 2011, no. VI, str. 18-28. [COBISS.SI-ID 34659589]
- OK18. NOVAK, Ana, BEZENŠEK, Jure, PEZDIRC, Lidija, GROŠELJ, Uroš, KASUNIČ, Marta, PODLIPNIK, Črtomir, STANOVNIK, Branko, ŠIMUNEK, P., SVETE, Jurij. Regio- and stereoselective cycloadditions of (1Z, 4R*, 5R*)-1-arylmethylidene-4-benzoylamino-3-oxo-5-phenylpyrazolidin-1-ium-2-ides to methyl methacrylate. *Tetrahedron*. [Print ed.], 2011, vol. 67, no. 50, str. 9729-9735, doi: 10.1016/j.tet.2011.09.140. [COBISS.SI-ID 35497221]
- OK19. PERDIH, Peter, BAŠKOVČ, Jernej, DAHMANN, Georg, GROŠELJ, Uroš, KOČAR, Drago, NOVAK, Ana, STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. Parallel synthesis of 1-substituted 5-(5-oxopyrrolidin-3-yl)-1H-pyrazole-4-carboxamides. *Synthesis (Stuttg.)*, 2011, no. 17, str. 2822-2832, doi: 10.1055/s-0030-1261034. [COBISS.SI-ID 35308549]
- OK20. PINTER, Balazs, DEMŠAR, Alojz, URANKAR, Damijana, DE PROFT, Frank, KOŠMRLJ, Janez. Conformational fluxionality in a palladium(II) complex of flexible click chelator 4-phenyl-1-(2-picolyl)-1,2,3-triazole : a dynamic NMR and DFT study. *Polyhedron*. [Print ed.], 2011, vol. 30, no. 14, str. 2368-2373, doi: 10.1016/j.poly.2011.05.015. [COBISS.SI-ID 35308805]
- OK21. PIRNAT, Klemen, ŠIMUNEK, P., URŠIČ, Uroš, BEZENŠEK, Jure, GROŠELJ, Uroš, GOLOBIČ, Amalija, MEDEN, Anton, SVETE, Jurij, STANOVNIK, Branko. Enamino esters in the synthesis of heterocyclic systems. Transformation of diethyl acetone-1,3-dicarboxylate into polysubstituted 1,2,7, 8-tetrahydro-2,7-naphthyridine-4-carboxylates. *ARKIVOC*. [Print ed.], 2011, no. VI, str. 120-129. [COBISS.SI-ID 34664453]
- OK22. POŽGAN, Franc, TOUPET, Loïc, DIXNEUF, Pierre H. Preparation of hexacoordinating benzimidazole containing ligand and hexakis(benzimidazole-ruthenium(II)) complex. Molecular structure of C[CH₂]{(N-benzimidazole-RuCl₂(p-cymene))₆}. *Dalton trans. (2003. Print)*, 2011, vol. 40, no. 25, str. 6619-6622, doi: 10.1039/C1DT10316D. [COBISS.SI-ID 35035909]
- OK23. SOSIČ, Izidor, MIRKOVIČ, Bojana, TURK, Samo, ŠTEFANE, Bogdan, KOS, Janko, GOBEC, Stanislav. Discovery and kinetic evaluation of 6-substituted 4-benzylthio-1,3,5-triazin-2(1H)-ones as inhibitors of cathepsin B. *Eur. j. med. chem.*. [Print ed.], 2011, vol. 46, iss. 9, str. 4648-4656. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0223523411005770>, doi: 10.1016/j.ejmech.2011.08.005. [COBISS.SI-ID 3068017]
- OK24. STRLE, Drago, ŠTEFANE, Bogdan, NAHTIGAL, Uroš, ZUPANIČ, Erik, POŽGAN, Franc, KVASIČ, Ivan, MAČEK, Marijan, TRONTELJ, Janez, MUŠEVIČ, Igor. Surface-functionalized MEMS capacitive sensors and CMOS electronics for vapor Trace detection of explosives. *IEEE sens. j.*. [Print ed.], [in press] 2011, 8 str., doi: 10.1109/JSEN.2011.2168203. [COBISS.SI-ID 25306919]
- OK25. ŠARAC, Bojan, CERKOVNIK, Janez, ANCIAN, Bernard, MÉRIGUET, Guillaume, ROGER, G., DURAND-VIDAL, S., BEŠTER-ROGAČ, Marija. Thermodynamic and NMR study of aggregation of dodecyltrimethylammonium chloride in aqueous sodium salicylate solution. *Colloid polym. sci.*, 2011, vol. 289, no. 14, str. 1597-1607, doi: 10.1007/s00396-011-2480-2. [COBISS.SI-ID 35268613]
- OK26. ŠTEFANE, Bogdan, FABRIS, Jan, POŽGAN, Franc. C-H bond functionalization of arylpyrimidines catalyzed by an in situ generated ruthenium(II) carboxylate system and the construction of tris(heteroaryl)-substituted benzenes. *European journal of organic chemistry*, 2011, no. 19, str. 3474-3481, doi: 10.1002/ejoc.201100238. [COBISS.SI-ID 35023109]
- OK27. URANKAR, Damijana, PEVEC, Andrej, KOŠMRLJ, Janez. Synthesis and characterization of platinum(II) complexes with a diazenecarboxamide-appended picolyl-triazole ligand. *European Journal of Inorganic Chemistry*, 2011, no. 12, str. 1921-1929, doi: 10.1002/ejic.201001051. [COBISS.SI-ID 34863877]
- OK28. URŠIČ, Uroš, SVETE, Jurij, STANOVNIK, Branko. Transformations of dimethyl (2E,3E)-2-[(dimethylamino)methylene]-3-(1-methyl-2, 5-dioxoimidazolidin-4-yl idene)succinate with C-nucleophiles. *Heterocycles*, 2011, vol. 82, no. 2, str. 1435-1445,
- OK29. VAVŘÍKOVÁ, Eva, POLANC, Slovenko, KOČEVAR, Marijan, HORVÁTI, Kata, BŐSZE, Szilvia, STOLARÍKOVÁ, Jiřina, VÁVROVÁ, Kateřina, VINŠOVÁ, Jarmila. New fluorine-containing hydrazones active against MDR-tuberculosis. *Eur. j. med. chem.*. [Print ed.], vol. 46, issue 10, str. 4937-4945. http://www.sciencedirect.com/science?_ob=MIimg&_imagekey=B6VKY-53GDRWP-1-1&_cdi=6135&_user=4776866&_pii=S0223523411005654&_origin=search&_coverDate=08%2F05%2F2011&_sk=999999999&view=c&wchp=dGLzVlb-zSkzS&md5=8e5de3e12d03bec973a2d0f5150cfb91&ie=/sdarticle.pdf, doi: 10.1016/j.ejmech.2011.07.052. [COBISS.SI-ID 35309061]
- OK30. VAVŘÍKOVÁ, Eva, POLANC, Slovenko, KOČEVAR, Marijan, KOŠMRLJ, Janez, HORVÁTI, Kata, BŐSZE, Szilvia, STOLARÍKOVÁ, Jiřina, IMRAMOVSKÝ, Aleš, VINŠOVÁ, Jarmila. New series of isoniazid hydrazones linked with electron-withdrawing substituents. *Eur. j. med. chem.*. [Print ed.], 2011, vol. 46, no. 12, str. 5902-5909, doi: 10.1016/j.ejmech.2011.09.054. [COBISS.SI-ID 35456773]
- OK31. ŽABAR, Romina, DOLENC, Darko, JERMAN, Tina, FRANKO, Mladen, TREBŠE, Polonca. Photolytic and photocatalytic degradation of 6-chloronicotinic acid. *Chemosphere (Oxford)*. [Print ed.], 2011, vol. 85, no. 5, str. 861-868, doi: 10.1016/j.chemosphere.2011.06.107. [COBISS.SI-ID 1964027]

KRATKI ZNANSTVENI PRISPEVEK / SHORT SCIENTIFIC ARTICLE

OK32. PEVEC, Andrej, KAFKA, Stanislav, KOŠMRLJ, Janez. 2-Hydroxy-2-methyl-1-phenylindolin-3-one. *Acta crystallographica. E, Structure Reports*, 2011, vol. E67, no. 12, str. o3228-o3229 (7 str. suppl.), doi: 10.1107/S1600536811045302. [COBISS.SI-ID 35526661]

PREGLEDNI ZNANSTVENI ČLANEK / REVIEW ARTICLE

OK33. JEREB, Marjan, VRAŽIČ, Dejan, ZUPAN, Marko. Iodine-catalyzed transformation of molecules containing oxygen functional groups. *Tetrahedron*. [Print ed.], 2011, vol. 67, no. 7, str. 1355-1387. [COBISS.SI-ID 24407335]

OBJAVLJENI ZNANSTVENI PRISPEVEK NA KONFERENCI (VABLJENO PREDAVANJE)

PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTION (INVITED LECTURE)

- OK34. POLANC, Slovenko. Chemistry and biological potential of diazenes and analogues : [plenary lecture]. V: *40th Conference drug synthesis and analysis : 12th - 13th September 2011, Brno, Hotel Myslivna, Czech Republic*. [S. l.: s. n.], 2011, str. L6. [COBISS.SI-ID 35361541]
- OK35. STANOVNIK Branko.: [2+2] Cycloaddition of electron-poor acetylenes to enamines, enamino esters and related systems. Ring expansion reactions and rearrangements : [invited lecture]. V: *10. Tagung Iminiumsalze, 12. - 15. September 2011 in Bartholomä/Ostalbkreis, "Sport- und Bildungszentrum Bartholomä"*. Frankfurt: Gesellschaft Deutscher Chemiker, 2011, str. 5–21. [COBISS.SI-ID 35383557]
- OK36. STANOVNIK Branko. Cycloadditions and Michael addition of acetylenes and azodicarboxylate to enamines and related compounds : [invited lecture]. V: *The 12th Annual Florida heterocyclic and synthetic conference : March 6th - March 9th, 2011*. [S. l.: s. n.], 2011, str. 63. [COBISS.SI-ID 34864389]
- OK37. STANOVNIK Branko. [2+2] Cycloadditions and Michael addition of acetylenes and azodicarboxylates to enamines : [invited lecture]. V: *The Sixth Jordanian International Conference of Chemistry and the 11th Jordanian Chemical Conference, 19 - 21 April, 2011, Irbid - Jordan. Abstracts book*. [S. l.: s. n.], 2011, str. 20. [COBISS.SI-ID 34965765]
- OK38. STANOVNIK Branko. New synthetic methodologies: from amino acid via heterocyclic systems to natural products : [plenary lecture]. V: *Symposium International de Chimie Hétérocyclique, Fès, 26-29 Octobre 2011. Chimie Hétérocyclique: enjeux, valorisation et développement durable : resumes des conférences et communications*. [S. l.: s. n.], 2011, str. 29. [COBISS.SI-ID 35487493]
- OK39. STANOVNIK Branko. Recent developments in enamino chemistry. Cycloadditions of acetylenes and related compound to enamines : [invited lecture]. V: *3rd International Conference on Heterocyclic Chemistry : December 10-13, 2011 : dedicated to Hon'ble Late Shri Rajiv Gandhi : former prime minister of India for his vision for science and technology in 21st century*. [S. l.: s. n.], 2011, str. IL-37. [COBISS.SI-ID 35617285]
- OK40. STANOVNIK Branko. Nove sintezne metodologije: od aminokisljin preko heterocikličnih sistemov do naravnih spojin : [plenarno predavanje]. V: *Kravanja Z. (ur.), Brodnjak-Vončina D. (ur.), Bogataj M. (ur.), Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14.–16. september 2011. Zbornik povzetkov referatov s posvetovanja*. Maribor: FKKT, 2011, str. 6. [COBISS.SI-ID 35407365]
- OK41. SVETE, Jurij. Synthesis of novel (S)-1,6-dialkylpiperazine-2,5-diones and their application as chiral solvating agents in NMR spectroscopy : [invited lecture]. V: *10. Tagung Iminiumsalze, 12. - 15. September 2011 in Bartholomä/Ostalbkreis, "Sport- und Bildungszentrum Bartholomä"*. Frankfurt: Gesellschaft Deutscher Chemiker, 2011, str. 28-30. [COBISS.SI-ID 35383813]
- OK42. SVETE, Jurij. (S)-1,6-Dialkylpiperazine-2,5-diones as chiral solvating agents for [alpha]-acylamino esters : [invited lecture]. V: *The 12th Annual Florida heterocyclic and synthetic conference : March 6th - March 9th, 2011*. [S. l.: s. n.], 2011, str. 72. [COBISS.SI-ID 34864645]
- OK43. STANOVNIK, Branko, BEZENSEK, Jure, KOLEŠA, Tanja, URŠIČ, Uroš, GROŠELJ, Uroš, SVETE, Jurij. Enamines and related compounds in [2+2] and [4+2] cycloaddition reactions : [vabljeno predavanje]. V: *BABJAK, Matej (ur.). 14th Blue Danube Symposium on Heterocyclic Chemistry, June 26-29, 2011, Podbanské, Slovakia. Program. Abstracts of papers. List of participants*. Bratislava: Publishing House of Slovak University of Technology, 2011, str. 18. [COBISS.SI-ID 35196933]
- OK44. SVETE, Jurij. Synthesis and applications of some heterocyclic analogues of peptides : [vabljeno predavanje]. V: *BABJAK, Matej (ur.). 14th Blue Danube Symposium on Heterocyclic Chemistry, June 26-29, 2011, Podbanské, Slovakia. Program. Abstracts of papers. List of participants*. Bratislava: Publishing House of Slovak University of Technology, 2011, str. 23. [COBISS.SI-ID 35197189]
- OK45. SVETE, Jurij. Synthesis and application of (S)-1,6-dialkylpiperazine-2,5-diones as chiral solvating agents in NMR spectroscopy : [invited lecture]. V: *3rd International Conference on Heterocyclic Chemistry : December 10-13, 2011 : dedicated to Hon'ble Late Shri Rajiv Gandhi : former prime minister of India for his vision for science and technology in 21st century*. [S. l.: s. n.], 2011, str. IL-68. [COBISS.SI-ID 35648773]
- OK46. CERKOVNIK, Janez. Nekateri uporabni aspekti kemije divodikovega trioksida (HOOOH): od njegove stabilnosti do reaktivnosti = Some applicable aspects of chemistry of dihydrogen trioxide (HOOOH): from stability towards reactivity : [vabljeno sekcijsko predavanje]. V: *KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA,*

Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14.-16. september 2011. *Zbornik povzetkov referatov s posvetovanja*. Maribor: FKKT, 2011, str. 11. [COBISS.SI-ID 35408133]

OBJAVLJENI ZNANSTVENI PRISPEVEK NA KONFERENCI / PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTION

- OK47. BAŠKOVČ, Jernej, PERDIH, Peter, DAHMANN, Georg, KOČAR, Drago, STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. Combinatorial solution-phase synthesis of pyrazole histamine analogues. V: BABJAK, Matej (ur.). 14th Blue Danube Symposium on Heterocyclic Chemistry, June 26-29, 2011, Podbanské, Slovakia. *Program. Abstracts of papers. List of participants*. Bratislava: Publishing House of Slovak University of Technology, 2011, str. 36. [COBISS.SI-ID 35197445]
- OK48. BEZENŠEK, Jure, SVETE, Jurij, STANOVNIK, Branko. Additions of electron poor [pi]-systems to enamines. V: BABJAK, Matej (ur.). 14th Blue Danube Symposium on Heterocyclic Chemistry, June 26-29, 2011, Podbanské, Slovakia. *Program. Abstracts of papers. List of participants*. Bratislava: Publishing House of Slovak University of Technology, 2011, str. 41. [COBISS.SI-ID 35197701]
- OK49. BEZENŠEK, Jure, SVETE, Jurij, STANOVNIK, Branko. Adicije elektronsko revnih [pi]-sistemov na enaminone = Addition of electron poor [pi]-systems to enamines. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14.-16. september 2011. *Zbornik povzetkov referatov s posvetovanja*. Maribor: FKKT, 2011, str. 15. [COBISS.SI-ID 35409413]
- OK50. GAZVODA, Martin, BURJA, Bojan, KOČEVAR, Marijan, POLANC, Slovenko. Sinteza pirazolonov in njihovih prekurzorjev = The synthesis of pyrazolones and their precursors. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14-16 september 2011. Maribor: FKKT, 2011, str. 1-6. [COBISS.SI-ID 35403781]
- OK51. GROŠELJ, Uroš, SVETE, Jurij, STANOVNIK, Branko. 2-Fluorometilni analogi MacMillanovega imidazolidinonskega katalizatorja prve generacije - majhna perturbacija, ki obrne smer stereo-indukcije = 2-Fluoromethyl analogues of MacMillan's 1st generation imidazolidinone catalyst - a small perturbation causing a reverse in the stereo induction : [predavanje]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14.-16. september 2011. *Zbornik povzetkov referatov s posvetovanja*. Maribor: FKKT, 2011, str. 17. [COBISS.SI-ID 35409925]
- OK52. GROŠELJ, Uroš, SVETE, Jurij, STANOVNIK, Branko. 2-Fluoromethyl analogues of MacMillan's 1st generation imidazolidinone catalyst : a small perturbation causing a reverse in the stereo induction. V: BABJAK, Matej (ur.). 14th Blue Danube Symposium on Heterocyclic Chemistry, June 26-29, 2011, Podbanské, Slovakia. *Program. Abstracts of papers. List of participants*. Bratislava: Publishing House of Slovak University of Technology, 2011, str. 61. [COBISS.SI-ID 35197957]
- OK53. JURANOVIČ, Amadej, KRANJC, Krištof, POLANC, Slovenko, KOČEVAR, Marijan. Uporaba elektronsko bogatih dienofilov kot sinteznih ekvivalentov acetilena pri [4+2] cikloadicijah = Application of electron rich dienophiles as synthetic equivalents of acetylene in [4+2] cycloaddition reactions. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14-16 september 2011. Maribor: FKKT, 2011, str. 1-10. [COBISS.SI-ID 35404037]
- OK54. KRIVEC, Marko, KRANJC, Krištof, POLANC, Slovenko, KOČEVAR, Marijan. Priprava izoindolov iz izbranih 2H-piran-2-onov z uporabo heterogene katalize = Preparation of isoindoles from selected 2H-pyran-2-ones with the application of heterogenous catalysis. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14-16 september 2011. Maribor: FKKT, 2011, str. 1-8. [COBISS.SI-ID 35404805]
- OK55. MAJCE, Vita, KOČEVAR, Marijan, POLANC, Slovenko. Z amini katalizirana izomerizacija maleinamidov pod pogoji obsevanja z mikrovalovi = Amine-catalyzed isomerization of maleamides under microwave conditions. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14-16 september 2011. Maribor: FKKT, 2011, str. 1-6. [COBISS.SI-ID 35405317]
- OK56. NOVAK, Ana, BEZENŠEK, Jure, PEZDIRC, Lidija, GROŠELJ, Uroš, ŠIMUNEK, P., STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. Regio- and stereoselective cycloadditions of (1Z, 4R*, 5R*)-arylmethylidene-4-benzoylamino-5-phenylpyrazolidin-3-on-1-azomethine imines to methyl methacrylate. V: BABJAK, Matej (ur.). 14th Blue Danube Symposium on Heterocyclic Chemistry, June 26-29, 2011, Podbanské, Slovakia. *Program. Abstracts of papers. List of participants*. Bratislava: Publishing House of Slovak University of Technology, 2011, str. 97. [COBISS.SI-ID 35199237]
- OK57. NOVAK, Ana, BEZENŠEK, Jure, PEZDIRC, Lidija, GROŠELJ, Uroš, ŠIMUNEK, P., STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. Stereoselektivne cikloadicije (1Z, 4R*, 5R*)-1-arylmetiliden-4-benzoylamino-5-fenilpirazolidin-3-on-1-azometiniminov z metil metakrilatom = Stereoselective cycloadditions of (1Z, 4R*, 5R*)-arylmethylidene-4-benzoylamino-5-phenylpyrazolidin-3-on-1-azomethine imines to methyl methacrylate. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14.-16. september 2011. *Zbornik povzetkov referatov s posvetovanja*. Maribor: FKKT, 2011, str. 27. [COBISS.SI-ID 35411717]
- OK58. POŽGAN, Franc, FABRIS, Jan, ŠTEFANE, Bogdan. Direktna funkcionalizacija C-H vezi arilpirimidinov katalizirana z rutenij(II)-karboksilatoma = Direct functionalisation of C-H bonds of arylpyrimidines catalyzed by ruthenium(II)-carboxylate : [predavanje]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka

- (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14-16 september 2011*. Maribor: FKKT, 2011, str. 1-7. [COBISS.SI-ID 35405061]
- OK59. SOSIČ, Izidor, MIRKOVIČ, Bojana, ŠTEFANE, Bogdan, KOVAČ, Andreja, KOS, Janko, GOBEC, Stanislav. Diversely substituted 1,3,5-triazines as hits in different drug discovery programs. V: *4th BBBB-Bosphorus International Conference on Pharmaceutical Sciences: New trends in drug discovery, delivery systems and laboratory diagnostics, Bled, Slovenia, 29 September-01 October 2011 : proceedings*, (European journal of Pharmaceutical Sciences, Vol. 44, suppl. 1). Amsterdam ... [etc.]: Elsevier, 2011, str. 184-185, ilustr. <http://www.sciencedirect.com/science/journal/09280987/44/supp/S1>. [COBISS.SI-ID 3121521]
- OK60. STANOVNIK, Branko, BEZENŠEK, Jure, KOLEŠA, Tanja, URŠIČ, Uroš, GROŠELJ, Uroš, SVETE, Jurij. [2+2] Cycloadditions of electron-poor acetylenes to enamines : [lecture]. V: *23rd International Congress on Heterocyclic Chemistry, 31st July - 4th August 2011, Scottish Exhibition and Conference Centre, Glasgow, UK. Programme & abstract book : ICHC 2011*. [S. l.: s. n.], 2011, str. 141. [COBISS.SI-ID 35311365]
- OK61. STRLE, Drago, ŠTEFANE, Bogdan, NAHTIGAL, Uroš, ZUPANIČ, Erik, POŽGAN, Franc, KVASIČ, Ivan, MAČEK, Marijan, MUŠEVIČ, Igor. Vapour trace detection of explosives using surface-functionalized MEMS capacitive sensors and miniature CMOS electronics. V: *RTO-MP-SET-169 - PRE-RELEASE*. [S. l.]: NATO RTO, 2011, str. 1-10, ilustr. <http://www.rta.nato.int/abstracts.aspx?RestrictRDP=RTO-MP->. [COBISS.SI-ID 8374612]
- OK62. LAVTIŽAR, Vesna, DOLENC, Darko, TREBŠE, Polonca. Določanje fotostabilnosti klorantraniliprola z uporabo suntest aparata = Study of chlorantraniliprole photostability with suntest instrument. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14-16 september 2011*. Maribor: FKKT, 2011, 6 str. [COBISS.SI-ID 1993979]
- OK63. TIŠLER, Tatjana, BISTAN, Mirjana, PINTAR, Albin, DOLENC, Darko, TREBŠE, Polonca. Strupenost in estrogenost organskih UV filtrov na vodne organizme = Toxicity and estrogenicity of organic UV filters to aquatic organisms. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14-16 september 2011*. Maribor: FKKT, 2011, 8 str. [COBISS.SI-ID 1994235]
- OK64. LAVTIŽAR, Vesna, DOLENC, Darko, TREBŠE, Polonca. Photochemical degradation of chlorantraniliprole. V: *The 12th European Meeting on Environmental Chemistry, 7-10th December 2011, Clermont-Ferrand France. EMEC12*. [S. l.: s. n.], 2011, str. 122. [COBISS.SI-ID 2098427]

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

- OK65. DOLENC, Darko. Divalentni halogenilni radikali. Da ali ne? : [vabljeno sekcijsko predavanje]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14.-16. september 2011. Zbornik povzetkov referatov s posvetovanja*. Maribor: FKKT, 2011, str. 12. [COBISS.SI-ID 35408389]
- OK66. DOLENC, Darko. Mednarodna kemijska olimpijada : [sekcijsko predavanje]. V: SKVARČ, Mariza (ur.), POBERŽNIK, Anita (ur.). *Konferenca učiteljev naravoslovnih predmetov, Laško, 25. in 26. avgust 2011. Zbornik povzetkov*. 1. izd. Ljubljana: Zavod Republike Slovenije za šolstvo, 2011, str. 49. [COBISS.SI-ID 35473157]

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

- OK67. 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]
- OK68. POŽGAN, Franc, ŠTEFANE, Bogdan. *Uvod v laboratorijsko organsko kemijo*. 2. dopolnjena izd. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2011. 211 str., ilustr. ISBN 978-961-6756-26-6. [COBISS.SI-ID 257593600]

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

- OK69. KOŠMRLJ, Berta, MOZER, Alenka, PETRIČEK, Saša, SMRDU, Andrej, ZMAZEK, Boris, WISSIAK GRM, Katarina Senta, KRAFOGEL, Bernarda (ur.), TRKOV, Joži (ur.). *Kemija, Zbirka maturitetnih nalog z rešitvami 2005-2010*, (Maturitetni izpiti). Ljubljana: Državni izpitni center, 2011. 297 str., ilustr. ISBN 978-961-6322-96-6. [COBISS.SI-ID 258494720]
- OK70. ČEH, Boris, DOLENC, Darko. *Snovi, okolje, prehrana : učbenik za kemijo v srednjih strokovnih šolah*. 1. izd. Ljubljana: DZS, 2011. 168 str., ilustr. ISBN 978-961-02-0077-2. [COBISS.SI-ID 253820416]
- OK71. TRŠEK, Špela, CERKOVNIK, Janez. *Verige in obroči, Učbenik za kemijo v gimnaziji*. 1. izd. Ljubljana: Modrijan, 2011. 199 str., ilustr. ISBN 978-961-241-539-6. [COBISS.SI-ID 255825664]

DRUGO UČNO GRADIVO / OTHER EDUCATIONAL MATERIAL

- OK72. DOLENC, Darko, GRAUNAR, Mojca, MODEC, Barbara. *Kemija danes 2, Delovni zvezek za 9. razred devetletne osnovne šole*, (Raziskovalec 9). 1. izd. Ljubljana: DZS, 2011. 91 str., ilustr. ISBN 978-86-341-3061-4. [COBISS.SI-ID 253760512]
- OK73. ČEH, Boris, DOLENC, Darko. *Snovi, okolje, prehrana, Delovni zvezek za kemijo v srednjih strokovnih šolah*. 1. izd. Ljubljana: DZS, 2011. 84 str., ilustr. ISBN 978-961-02-0138-0. [COBISS.SI-ID 255959040]
- OK74. PETRIČ, Andrej. *Spektroskopske metode v biokemiji : interno študijsko gradivo : za študente 3. letnika univerzitetnega programa 1. stopnje Biokemija*. Ljubljana: Univ. v Ljubljani, Fak. za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za organsko kemijo, 2011. 161 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 35439109]

ENCIKLOPEDIJA, SLOVAR, LEKSIKON, PRIROČNIK, ATLAS, ZEMLJEVID / ENCYCLOPEDIA, DICTIONARY, LEXICON, MANUAL, ATLAS, MAP

- OK75. KRBAVČIČ, Aleš, OBREZA, Aleš, SOLLNER DOLENC, Marija, STANOVNIK, Branko, ŠKRLJ, Milan. *Kemijski priročnik*. Ljubljana: Slovensko kemijsko društvo, 2011. 1 optični disk (CD-ROM). ISBN 978-961-90731-9-3. [COBISS.SI-ID 256351232]

PREDAVANJE NA TUJI UNIVERZI / INVITED LECTURE AT FOREIGN UNIVERSITY

- OK76. KOŠMRLJ, Janez. *Application of copper(I)-catalyzed 1,2,3-triazole formation in the synthesis of diazenecarboxamide-platinum conjugates : [Department of Chemistry, Katholieke Universiteit Leuven, Belgium, 24. 6. 2011]*. Leuven, 2011. [COBISS.SI-ID 35202821]
- OK77. KOŠMRLJ, Janez. *»Click« chemistry assisted preparation of diazenecarboxamide-platinum conjugates as potential anti-cancer agents : [Faculty of Sciences, Free University of Brussels, Belgium, 21. 6. 2011]*. Brussels, 2011. [COBISS.SI-ID 35202565]
- OK78. KOŠMRLJ, Janez. *Exploring copper-catalyzed azide alkyne cycloaddition in the synthesis of diazenecarboxamide-platinum conjugates : [Faculty of Sciences, Department of Chemistry, University of Antwerp, Belgium, 20. 6. 2011]*. Antwerp, 2011. [COBISS.SI-ID 35202309]
- OK79. PETRIČ, Andrej. *Syntheses of new molecular probes for protein aggregate deposition : [Charles University in Prague, Faculty of Pharmacy in Hradec Králové, August, 30th, 2011]*. Hradec Králové, 2011. [COBISS.SI-ID 35357445]

UREDNIK / EDITORSHIP

- OK80. *Acta chimica slovenica*. CERKOVNIK, Janez (urednik 2006-). [Tiskana izd.]. Ljubljana: Slovensko kemijsko društvo: =Slovenian Chemical Society, 1993-. ISSN 1318-0207. <http://acta.chem-soc.si/>. [COBISS.SI-ID 14086149]
- OK81. *Acta chimica slovenica*. KRANJC, Krištof (član uredniškega sveta 2007-). [Tiskana izd.]. Ljubljana: Slovensko kemijsko društvo: =Slovenian Chemical Society, 1993-. ISSN 1318-0207. <http://acta.chem-soc.si/>. [COBISS.SI-ID 14086149]
- OK82. *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]
- OK83. *Advances in heterocyclic chemistry*. STANOVNIK, Branko (član uredniškega odbora 2003-). New York [etc.]: Academic Press, 1963-. ISSN 0065-2725. [COBISS.SI-ID 486917]
- OK84. *ARKIVOC*. STANOVNIK, Branko (urednik 2010-, član uredniškega sveta 2010-). [Print ed.]. Gainesville: Arkat USA Inc., 2000-. ISSN 1424-6376. [COBISS.SI-ID 28057605]
- OK85. *Croatica chemica acta*. STANOVNIK, Branko (član uredniškega odbora 1985-). Zagreb: Hrvatsko kemijsko društvo, 1956-. ISSN 0011-1643. [COBISS.SI-ID 22807]
- OK86. *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]
- OK87. *Journal of heterocyclic chemistry*. STANOVNIK, Branko (član uredniškega odbora 1997-). Provo, Utah, etc.: HeteroCorporation. ISSN 0022-152X. [COBISS.SI-ID 25749248]
- OK88. *Molecules*. STANOVNIK, Branko (član uredniškega odbora 1998-). Berlin: Springer; Basel: Molecular Diversity Preservation International. ISSN 1420-3049. [COBISS.SI-ID 18462981]
- OK89. *Periodica polytechnica. Chemical engineering*. KOČEVAR, Marijan (član uredniškega odbora 2003-). Budapest: Technical University Budapest. ISSN 0324-5853. [COBISS.SI-ID 405018]
- OK90. *Targets in heterocyclic systems chemistry and properties*. STANOVNIK, Branko (član uredniškega odbora 2000-). Roma: Società Chimica Italiana. ISSN 1724-9449. [COBISS.SI-ID 1365807]
- OK91. *Topics in heterocyclic chemistry*. POLANC, Slovenko (član uredniškega odbora 2008-). Heidelberg; Berlin: Springer. ISSN 1861-9282. <http://springerlink.metapress.com/content/120013/>. [COBISS.SI-ID 33679621]
- OK92. *Trends in Heterocyclic Chemistry*. STANOVNIK, Branko (član uredniškega odbora 2006-). Trivandrum: Research Trends. ISSN 0972-432X. [COBISS.SI-ID 1365551]

KATEDRA ZA ANORGANSKO KEMIJSKO TEHNOLOGIJO IN MATERIALE

CHAIR OF INORGANIC CHEMICAL TECHNOLOGY AND MATERIALS

PREDSTOJNIK KATEDRE / HEAD

prof. dr. Jadran Maček

SODELAVCI KATEDRE / PERSONNEL

Učitelji / Faculty

prof. dr. Jadran Maček

prof. dr. Stane Pejovnik

v dopolnilnem razmerju / *part-time*

prof. dr. Danilo Suvorov

izr. prof. dr. Miran Gaberšček

prof. dr. Venčeslav Kaučič

Asistenti / Assistants

mag. Barbara Novosel, višja predavateljica

doc. dr. Klementina Zupan

izr. prof. dr. Marjan Marinšek

Raziskovalec / Researcher

asistent dr. Boštjan Genorio

Strokovni sodelavec / Research Assistant

doc. dr. Vojmir Francetič

Mladi raziskovalci Young Researchers	Mentor <i>Mentor</i>	Čas usposabljanja <i>Programme Duration</i>	Oblika usposabljanja <i>Degree</i>
Jana Kemperl	J. Maček	2006–2011	doktorski študij / <i>PhD</i>
Tina Skalar	J. Maček	2008–2013	doktorski študij / <i>PhD</i>
Tina Prinčič	S. Pejovnik	2009–2013	doktorski študij / <i>PhD</i>

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)*

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)*

Predbolonjski dodiplomski programi / *Pre-Bologna Undergraduate Programmes*

Gradiva / *Materials* – UN

Anorganski materiali in produkti, tehnična keramika in silikati / *Inorganic Materials and Products, Technical Ceramics and Silicates* – UN

Pregled tehnologij / *Principles of Technological Processes* – UN

Nevarne snovi / *Hazardous Substances* – VS

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

Predbolonjski dodiplomski programi / *Pre-Bologna Undergraduate Programmes*

Keramika I / *Ceramics I*, NTF – UN

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

- B. Erjavec, Preglova nagrada Kemijskega inštituta za izjemna doktorska dela na področju kemije in sorodnih disciplin za leto 2011 (mentor S. Pejovnik, somentor M. Gaberšček) / *Pregel Award of the National Institute of Chemistry for 2011*
- A. Pavlišič, Prešernova nagrada FKKT za leto 2011 (mentor M. Marinšek) / *The Faculty Prešeren Award for 2011*

RAZISKOVALNA OPREMA / RESEARCH EQUIPMENT

- Netzsch STA 409 aparaturna 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 Fritsch Analysette 22 / *Particle Sizer Fritsch 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 aparaturna 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)*

SODELOVANJE V CENTRIH ODLIČNOSTI / CENTRES OF EXCELLENCE

Center odličnosti: CO NOT – Nizkoogljjične tehnologije / *Centre of Excellence: Low-Carbon Technologies*

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*: I. Leban

APLIKATIVNI PROJEKTI / APPLIED RESEARCH

L2-1157 Kompoziti za litijeve baterije z veliko močjo / *Composites for High Power Lithium Batteries*
Nosilec / *Principal Researcher*: R. Dominko (KI)
Sofinancer / *Co-sponsored by*: Iskra TELA

BIBLIOGRAFIJA 2011 / REFERENCES 2011

IZVIRNI ZNANSTVENI ČLANEK / ORIGINAL SCIENTIFIC ARTICLE

- ATM1. UKMAR, Tina, KAUČIČ, Venčeslav, MALI, Gregor. Solid-state NMR spectroscopy and first-principles calculations : a powerful combination of tools for the investigation of polymorphism of indomethacin. *Acta chim. slov.* [Tiskana izd.], 2011, no. 3, vol. 58, str. 425-433, ilustr. [COBISS.SI-ID 4767770]
- ATM2. GENORIO, Boštjan, SUBBARAMAN, Ram, STRMČNIK, Dušan, TRIPKOVIC, Dusan, STAMENKOVIC, Vojislav, MARKOVIC, Nenad M. Tailoring the selectivity and stability of chemically modified platinum nano-catalysts to design highly durable anodes for PEM fuel cells. *Angew. Chem. (Int. ed., Print)*. [Print ed.], 2011, vol. 50, no. 24, str. 5468-5472, doi: 10.1002/anie.201100744. [COBISS.SI-ID 35081477]
- ATM3. MARINŠEK, Marjan. Ni-YSZ substrate degradation during carbon deposition. *Bol. Soc. Esp. Ceram. Vidr.*, 2011, vol. 50, no. 3, str. 117-124, doi: 10.3989/cyv.162011. [COBISS.SI-ID 35093765]
- ATM4. KLJAJIČ, Alen, BEŠTER-ROGAČ, Marija, TROŠT, Sabina, ZUPET, Rok, PEJOVNIK, Stane. Characterization of water/sodium bis(2-ethylhexyl) sulfosuccinate/sodium bis(amyl) sulfosuccinate/[eta]-heptane mixed reverse micelles and w/o microemulsion systems : the influence of water and sodium bis(amyl) sulfosuccinate content. *Colloids surf., A Physicochem. eng. asp.*. [Print ed.], 2011, vol. 385, no. 1/3, str. 249-255, doi: 10.1016/j.colsurfa.2011.06.018. [COBISS.SI-ID 35267077]
- ATM5. RISTIČ, Alenka, LAZAR, Karoly, SOLT, Hanna, KAUČIČ, Venčeslav. The influence of microwave-assisted synthesis on nanocrystalline iron silicalite-1 particles. *CrystEngComm (Camb., Online)*, 2011, vol. 13, no. 6, str. 1946-1952. [COBISS.SI-ID 4620314]
- ATM6. UKMAR, Tina, MAVER, Uroš, PLANINŠEK, Odon, KAUČIČ, Venčeslav, GABERŠČEK, Miran, GODEC, Aljaž. Understanding controlled drug release from mesoporous silicates : theory and experiment. *J. control. release*. [Print ed.], 2011, vol. 155, issue 3, str. 409-417, ilustr. [COBISS.SI-ID 4727578]
- ATM7. PRAH, J., MAČEK, Jadran, DRAŽIČ, Goran. Precipitation of calcium carbonate from a calcium acetate and ammonium carbamate batch system. *J. cryst. growth*. [Print ed.], 2011, vol. 324, issue 1, str. 229-234, doi: 10.1016/j.jcrysgro.2011.03.020. [COBISS.SI-ID 24708391]
- ATM8. DOMINKO, Robert, VIDAL-ABARCA GARRIDO, Candela, BELE, Marjan, KÜZMA, Mirjana, ARČON, Iztok, GABERŠČEK, Miran. Electrochemical characteristics of Li_{2-x}VTiO₄ rock salt phase in Li-ion batteries. *J. power sources*. [Print ed.], 2011, vol. 196, no. 16, str. 6856-6862, ilustr.,doi: 10.1016/j.jpowsour.2010.09.004. [COBISS.SI-ID 4519962]
- ATM9. IPAVEC, Andrej, GABROVŠEK, Roman, VUK, Tomaž, KAUČIČ, Venčeslav, MAČEK, Jadran, MEDEN, Anton. Carboaluminate phases formation during the hydration of calcite-containing Portland cement. *J. Am. Ceram. Soc.*, 2011, vol. 94, no. 3, str. 1238-1242, doi: 10.1111/j.1551-2916.2010.04201.x. [COBISS.SI-ID 34764037]

- ATM10. ZUPAN, Klementina, MARINŠEK, Marjan, NOVOSEL, Barbara. Combustible precursor behaviour in the lanthanum chromite formation process = Termične lastnosti reakcijskega gela za pripravo lantanovega kromita. *Mater. tehnol.*, 2011, vol. 45, no. 5, str. 439-445. [COBISS.SI-ID 35456261]
- ATM11. MARINŠEK, Marjan, ZUPAN, Klementina. Influence of the granulation and grain shape of quartz sands on the quality of foundry cores = Vpliv granulacije in oblike zrn kremenovega peska na kakovost livarskih jeder. *Mater. tehnol.*, 2011, letn. 45, št. 5, str. 451-455. [COBISS.SI-ID 35495685]
- ATM12. NOVAK TUŠAR, Nataša, LAHA, Subhash Chandra, CECOWSKI, Saša, ARČON, Iztok, KAUČIČ, Venčeslav, GLÄSER, Roger. Mn-containing porous silicates as catalysts for the solvent-free selective oxidation of alkyl aromatics to aromatic ketones with molecular oxygen. *Microporous and mesoporous materials*, dec. 2011, vol. 146, no. 1/3, str. 166-171, ilustr., doi: 10.1016/j.micromeso.2011.05.001. [COBISS.SI-ID 2001403]
- ATM13. UKMAR, Tina, GABERŠČEK, Miran, MERZEL, Franci, GODEC, Aljaž. Modus operandi of controlled release from mesoporous matrices : a theoretical perspective. *PCCP. Phys. chem. chem. phys. (Print)*, 2011, vol. 13, issue 33, 15311-15317, ilustr., doi: 10.1039/C1CP20636B. [COBISS.SI-ID 4727834]
- ATM14. UKMAR, Tina, GODEC, Aljaž, PLANINŠEK, Odon, KAUČIČ, Venčeslav, MALI, Gregor, GABERŠČEK, Miran. The phase (trans)formation and physical state of a model drug in mesoscopic confinement. *PCCP. Phys. chem. chem. phys. (Print)*, 2011, vol. 13, issue 35, str. 16046-16054, ilustr., doi: 10.1039/c1cp20874h. [COBISS.SI-ID 4727322]

OBJAVLJENI ZNANSTVENI PRISPEVEK NA KONFERENCI / PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTION

- ATM15. KOŠMERL, Tatjana, PROSEN, Helena, FRANCETIČ, Vojmir, GAŠPERLIN, Lea, RUSJAN, Denis. The content of copper (Cu²⁺) ions in wine and their influence on wine aroma = Der Gehalt an Kupfer (Cu²⁺)-ionen im Wein und deren Einfluss auf Weinaroma. V: PLENK, Astrid (ur.). 66. ALVA - Jahrestagung 2011, 23.-24. Mai 2011, Graz. *Bericht ALVA - Jahrestagung 2011 : "Landwirtschaft, Lebensmittel und Veterinärmedizin - Zukunft der Forschung in Österreich"*, (Bericht (ALVA. Jahrestagung ...)). Wien: Arbeitsgemeinschaft für Lebensmittel-, Veterinär- und Agrarwesen, 2011, str. 148-150. [COBISS.SI-ID 3918456]
- ATM16. RANGUS, Mojca, MAZAJ, Matjaž, MALI, Gregor, BIRSA ČELIČ, Tadeja, KAUČIČ, Venčeslav. The role of the solvent on the dimensionality of the Mg-MOF investigated by NMR spectroscopy. V: *Innovations in zeolites and ordered porous solids : 5th International FEZA Conference, Valencia, Spain, 3rd-7th July 2011*. Valencia: [s. n.], 2011, str. 101-102, ilustr. [COBISS.SI-ID 4750618]
- ATM17. ŽUNKOVIČ, Emanuela, RANGUS, Mojca, MAZAJ, Matjaž, GABROVŠEK, Roman, KAUČIČ, Venčeslav, ZABUKOVEC LOGAR, Nataša. Post-synthesis modification of MIL-101(Fe) with nickel and magnesium cations for hydrogen sorption applications. V: *Innovations in zeolites and ordered porous solids : 5th International FEZA Conference, Valencia, Spain, 3rd-7th July 2011*. Valencia: [s. n.], 2011, str. 327-328, ilustr. [COBISS.SI-ID 4750874]
- ATM18. BIRSA ČELIČ, Tadeja, ZABUKOVEC LOGAR, Nataša, RANGUS, Mojca, KAUČIČ, Venčeslav. An investigation of the role of acetone on the synthesis of two porous iron carboxylates. V: *Innovations in zeolites and ordered porous solids : 5th International FEZA Conference, Valencia, Spain, 3rd-7th July 2011*. Valencia: [s. n.], 2011, str. 329-330, ilustr. [COBISS.SI-ID 4751386]
- ATM19. NOVAK TUŠAR, Nataša, TASBIHI, Mino, KAUČIČ, Venčeslav, LAVRENČIČ ŠTANGAR, Urška. New insights on the immobilization of TiO₂ on porous silicate supports-an efficient photocatalytic system for decomposition of VOC. V: *Innovations in zeolites and ordered porous solids : 5th International FEZA Conference, Valencia, Spain, 3rd-7th July 2011*. Valencia: [s. n.], 2011, str. 427-428, ilustr. [COBISS.SI-ID 4749082]
- ATM20. MAUČEC, Darja, NOVAK TUŠAR, Nataša, COTMAN, Magda, PINTAR, Albin, KAUČIČ, Venčeslav. Framework Mn in mesostructured silicate as catalyst for the decomposition of organic dye. V: *Innovations in zeolites and ordered porous solids : 5th International FEZA Conference, Valencia, Spain, 3rd-7th July 2011*. Valencia: [s. n.], 2011, str. 722-723, ilustr. [COBISS.SI-ID 4750106]
- ATM21. MAUČEC, Darja, MAZAJ, Matjaž, RISTIČ, Alenka, KAUČIČ, Venčeslav, NOVAK TUŠAR, Nataša. Zinc oxide nanoparticles immobilized on ordered (SBA-15) and disordered (KIL-2) mesoporous silicate supports. V: ANTONIČ JELIČ, Tatjana (ur.). *Proceedings of the 4th Slovenian-Croatian Symposium on Zeolites, 4th Croatian-Slovenian Symposium on Zeolites : October 17-18, 2011, Ljubljana, Slovenia*. Zagreb: Croatian Zeolite Association, 2011, str. 45-48, ilustr. [COBISS.SI-ID 4819226]
- ATM22. ŽUNKOVIČ, Emanuela, RANGUS, Mojca, MAZAJ, Matjaž, GABROVŠEK, Roman, KAUČIČ, Venčeslav, ZABUKOVEC LOGAR, Nataša. Immobilization of metal salts in MIL-101(Fe). V: ANTONIČ JELIČ, Tatjana (ur.). *Proceedings of the 4th Slovenian-Croatian Symposium on Zeolites, 4th Croatian-Slovenian Symposium on Zeolites : October 17-18, 2011, Ljubljana, Slovenia*. Zagreb: Croatian Zeolite Association, 2011, str. 49-52, ilustr. [COBISS.SI-ID 4819482]
- ATM23. BIRSA ČELIČ, Tadeja, ZABUKOVEC LOGAR, Nataša, RANGUS, Mojca, KAUČIČ, Venčeslav. Study of the solvent effect on the synthesis of two porous iron carboxylates: MIL-100(Fe) and MIL-45(Fe). V: ANTONIČ JELIČ, Tatjana (ur.). *Proceedings of the 4th Slovenian-Croatian Symposium on Zeolites, 4th Croatian-Slovenian Symposium on Zeolites : October 17-18, 2011, Ljubljana, Slovenia*. Zagreb: Croatian Zeolite Association, 2011, str. 57-60, ilustr. [COBISS.SI-ID 4819738]
- ATM24. RANGUS, Mojca, MAZAJ, Matjaž, MALI, Gregor, ZABUKOVEC LOGAR, Nataša, BIRSA ČELIČ, Tadeja, KAUČIČ, Venčeslav. The effect of the solvent on the dimensionality of the Mg-MOF framework. V: ANTONIČ JELIČ, Tatjana (ur.). *Proceedings of the 4th Slovenian-Croatian Symposium on Zeolites, 4th Croatian-Slovenian*

- Symposium on Zeolites : October 17-18, 2011, Ljubljana, Slovenia.* Zagreb: Croatian Zeolite Association, 2011, str. 101-103, ilustr. [COBISS.SI-ID 4820506]
- ATM25. ČENDAČ, Tomaž, BIRSA ČELIČ, Tadeja, RANGUS, Mojca, ZABUKOVEC LOGAR, Nataša, MALI, Gregor, KAUCIČ, Venčeslav. Zn-BTC: the NMR study. V: ANTONIČ JELIČ, Tatjana (ur.). *Proceedings of the 4th Slovenian-Croatian Symposium on Zeolites, 4th Croatian-Slovenian Symposium on Zeolites : October 17-18, 2011, Ljubljana, Slovenia.* Zagreb: Croatian Zeolite Association, 2011, str. 109-112, ilustr. [COBISS.SI-ID 4821018]
- ATM26. UKMAR, Tina, GODEC, Aljaž, PLANINŠEK, Odon, MALI, Gregor, GABERŠČEK, Miran, KAUCIČ, Venčeslav. Phase (trans)formation of indomethacin in nano-confinement. V: ANTONIČ JELIČ, Tatjana (ur.). *Proceedings of the 4th Slovenian-Croatian Symposium on Zeolites, 4th Croatian-Slovenian Symposium on Zeolites : October 17-18, 2011, Ljubljana, Slovenia.* Zagreb: Croatian Zeolite Association, 2011, str. 113-116, ilustr. [COBISS.SI-ID 4821274]
- ATM27. HROVAT, Marko, JOVAN, David Jure, MALIČ, Barbara, CILENŠEK, Jena, MAKAROVIČ, Kostja, BELAVIČ, Darko, MAČEK, Jadran, KOSEC, Marija. Investigation of carbon based materials as possible sacrificial layers in 3D LTCC structures. V: BRATINA, Gvido (ur.), ŠORLI, Iztok (ur.). 47th International Conference on Microelectronics, Devices and Materials and the Workshop on Organic Semiconductors, Technologies and Devices, September 28 - September 30, 2011, Ajdovščina, Slovenia. *Proceedings.* Ljubljana: MIDEM - Society for Microelectronics, Electronic Components and Materials, 2011, str. 265-269. [COBISS.SI-ID 25133863]
- ATM28. MAUČEC, Darja, MILIČ, Neža, MAZAJ, Matjaž, PODLOGAR, Matejka, RISTIČ, Alenka, KAUCIČ, Venčeslav, NOVAK TUŠAR, Nataša. TiO₂ in ZnO nanodelci na poroznih silikatnih nosilcih za fotokatalitsko razgradnjo barvil = TiO₂ and ZnO nanoparticles on the porous silicate supports for the photocatalytic decomposition of dyes. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14-16 september 2011.* Maribor: FKKT, 2011, str. 1-8. [COBISS.SI-ID 35393285]
- ATM29. ERJAVEC, Boštjan, DOMINKO, Robert, PINTAR, Albin, GABERŠČEK, Miran. Ionsko in elektrokemijsko ožičenje TiO₂ elektrodnih kompozitov = Ionic and electronic wiring of the TiO₂ electrode composite : [predavanje]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14-16 september 2011.* Maribor: FKKT, 2011, str. 1-9. [COBISS.SI-ID 35393541]
- ATM30. NOVOSEL, Barbara, SLABAJNA, Dominika. Predstavitev smernice za zagotavljanje varnosti in zdravja v kemijskih laboratorijih = Presentation of guidelines to ensure the health and safety in chemical laboratories. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14-16 september 2011.* Maribor: FKKT, 2011, str. [1-9]. [COBISS.SI-ID 35399173]
- ATM31. KOKELJ, Simona, NOVOSEL, Barbara, MRAVLJA, Matjaž, TRTNIK, Živa. Predstavitev najpogostejših pigmentov v restavracijah : kadmijeva rumena in kobalt modra. V: *Varstvo pri delu, varstvo pred požari in medicina dela : dvodnevni posvet z mednarodno udeležbo, Portorož 2011, 10.-11. 5. 2011.* Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Oddelek za tehniško varnost, 2011, 8 str., ilustr. [COBISS.SI-ID 3264200]
- ATM32. KOŠMERL, Tatjana, FRANCETIČ, Vojmir, GAŠPERLIN, Lea, RUSJAN, Denis. Fermentacijske lastnosti kvasovk v prisotnosti večjih koncentracij bakrovih ionov v moštu = Fermentation properties of yeast in the presence of high concentration of copper ions in must. V: ČUŠ, Franc (ur.). *Vinarski dan 2011, Ljubljana, 30. november 2011, (Prikazi in informacije, 275).* Ljubljana: Kmetijski inštitut Slovenije, 2011, str. 59-70, tabele, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 3992184]
- ATM33. KOŠMERL, Tatjana, FRANCETIČ, Vojmir, PROSEN, Helena, GAŠPERLIN, Lea. Vpliv temperature ekstrakcije v SPME postopku na določanje aromatičnih spojin zorenih vin na kvasovkah = Impact of extraction temperature at SPME procedure on determination of aroma compounds of wines produced by aging on yeast. V: ČUŠ, Franc (ur.). *Vinarski dan 2011, Ljubljana, 30. november 2011, (Prikazi in informacije, 275).* Ljubljana: Kmetijski inštitut Slovenije, 2011, str. 71-82, tabele, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 3991928]
- ATM34. KOŠMERL, Tatjana, FRANCETIČ, Vojmir, RUSJAN, Denis. Biosorption of Cu(II) ions during the alcohol fermentation under different conditions = Biosorption of Cu(II) ions au cours de la fermentation de l'alcool dans des conditions différentes. V: XXXIV World Congress of Vine and Wine, 20-27th June 2011, Porto, Portugal. *The wine construction.* [Lisboa: Ministry for Agriculture, Rural Development and Fishing], 2011, str. [1-9]. [COBISS.SI-ID 3938680]

UREDNIK / EDITORSHIP

- ATM35. *Acta chimica slovenica.* Kaučič, Venčeslav (član uredniškega odbora 1998-), Pejovnik, Stane (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]
- ATM36. *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]
- ATM37. *International journal of molecular sciences.* Kaučič, Venčeslav (član uredniškega odbora 2001-). Basel: MDPI Center. ISSN 1422-0067. [COBISS.SI-ID 2779162]
- ATM38. *Journal of the European Ceramic Society.* Suvorov, Danilo (član uredniškega odbora 2002-). [Print ed.]. Barking: Elsevier, 1989-. ISSN 0955-2219. [COBISS.SI-ID 6342151]
- ATM39. *Materiali in tehnologije.* Suvorov, Danilo (član uredniškega odbora 2000-). Ljubljana: Inštitut za kovinske materiale in tehnologije, 2000-. ISSN 1580-2949. [COBISS.SI-ID 106193664]
- ATM40. *Microporous and mesoporous materials.* Kaučič, Venčeslav (član uredniškega odbora 2003-). Amsterdam (etc.): Elsevier, 1998-. ISSN 1387-1811. [COBISS.SI-ID 1595162]

KATEDRA ZA KEMIJSKO, BIOKEMIJSKO IN EKOLOŠKO INŽENIRSTVO

CHAIR OF CHEMICAL, BIOCHEMICAL AND ENVIRONMENTAL ENGINEERING

PREDSTOJNIK KATEDRE / HEAD

prof. dr. Aleksander Pavko (do 30.9.2011)

prof. dr. Igor Plazl (od 01.10.2011)

SODELAVCI KATEDRE // PERSONNEL

Učitelji / Faculty

akademik prof. dr. Janez Levec

prof. dr. Aleksander Pavko

prof. dr. Marin Berovič

prof. dr. Igor Plazl

izr. prof. dr. Jana Zagorc Končan

doc. dr. Ana Lakota

Asistenti / Assistants

doc. dr. Andreja Zupančič Valant

doc. dr. Andreja Žgajnar Gotvajn

doc. dr. Polona Žnidaršič Plazl

doc. dr. Blaž Likozar (do 01.06.2011)

Strokovna sodelavca / Research Assistants

Matija Matajdl, univ. dipl. inž. (do 30.09.2011)

mag. Nada Verdel (od 01.10.2011)

Tehniki / Technicians

Klemen Birtič

Vesna Delalut

Dušan Komel

Mladi raziskovalci <i>Young Researchers</i>	Mentor <i>Mentor</i>	Čas usposabljanja <i>Programme Duration</i>	Oblika usposabljanja <i>Degree</i>
Andrej Pohar	I. Plazl	2007–2012	doktorski študij / <i>PhD</i>
Janja Babič	A. Pavko	2005–2010	doktorski študij / <i>PhD</i>
Mirjan Švagelj	M. Berovič	2006–2011	doktorski študij / <i>PhD</i>
Gorazd Stojkovič	P. Žnidaršič Plazl	2008–2013	doktorski študij / <i>PhD</i>
Matjaž Berlot	M. Berovič	2009–2013	doktorski študij / <i>PhD</i>
Uroš Novak	P. Žnidaršič Plazl	2010–2014	doktorski študij / <i>PhD</i>
Martin Lubej	I. Plazl	2010–2014	doktorski študij / <i>PhD</i>

Ostali podiplomski študenti, ki niso v rednem delovnem razmerju / *Other Postgraduate Students*

Gabriela Kalčíková

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:

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

Osnove okoljskega inženirstva (izbirni predmet) / *Introduction to Environmental Engineering (elective course)*

Tehniška varnost / *Technical Safety* – UN:

Varstvo okolja I / *Environmental Protection I*

Kemijska tehnologija / *Chemical Technology* – VS:

Osnove biokemije z biotehnologijo / *Fundamentals of Biochemistry with Biotechnology*

Biotehnološki procesi in naprave (izbirni predmet) / *Processes and Equipment in Biotechnology (elective course)*

Industrijski procesi in trajnostni razvoj / *Industrial Processes and Sustainable Development*

Predbolonjski dodiplomski programi / Pre-Bologna Undergraduate Programmes

Prenos toplote in snovi / *Heat and Mass Transfer* – UN

Osnove kemijske tehnike / *Fundamentals of Chemical Engineering* – VS

Načrtovanje procesov in ekološko inženirstvo / *Process Design and Environmental Engineering* – UN

Kemijsko reakcijsko inženirstvo / *Chemical Reaction Engineering* – UN
 Osnove kemijske tehnike / *Fundamentals of Chemical Engineering* – UN
 Biotehnologija / *Biotechnology* – UN
 Pregled biokemijskih tehnologij / *Biotechnological Processes* – UN
 Biokemijsko inženirstvo in biotehnologija / *Biochemical Engineering and Biotechnology* – UN
 Biotehnologija z biokemijskim inženirstvom / *Biotechnology and Biochemical Engineering* – UN
 Kemijska inženirska kinetika / *Chemical Engineering Kinetics* – VS
 Kemija okolja / *Environmental Chemistry* – UN
 Ekološko inženirstvo / *Environmental Engineering* – UN
 Industrijska ekologija in ekološko inženirstvo / *Industrial Ecology and Environmental Engineering* – VS
 Kemijsko procesno računstvo / *Chemical Process Calculations* – UN
 Modeliranje procesov / *Process Modelling* – UN
 Načrtovanje procesov in naprav / *Process and Equipment Design* – VS
 Kemijsko inženirski praktikum / *Chemical Engineering Practicals* – UN
 Kemijsko inženirski praktikum / *Chemical Engineering Practicals* – VS

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

Izbrana poglavja iz biotehnoških 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 3. stopnje / *Bologna 3rd Cycle Doctoral Study Programmes*

Industrijska ekologija / *Industrial Ecology* – UL Interdisciplinarni doktorski študijski program Varstvo okolja / *UL Interdisciplinary Doctoral Study Programme in Environmental Protection*
 Miniaturizacija 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*

Mikrobna biotehnologija / *Microbial Biotechnology* – 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*

Predbolonjski podiplomski programi / *Pre-Bologna Postgraduate Programmes*

Izbrana poglavja iz kemijskih in fizikalnih metod v restavraciji / *Chemical and Physical Methods in Restoration – Selected Topics*, ALUO

RAZISKOVALNA DEJAVNOST / RESEARCH ACTIVITIES

a.) Raziskave s področja procesnega inženirstva / *Process Engineering Research*

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*

b.) Raziskave s področja biokemijskega inženirstva / *Research in the Field of Biochemical Engineering and Biotechnology*

Raziskave in razvoj biotransformacij in izolacije bioproduktov v mikrofluidnih sistemih / *Research and Development of Biotransformations and Downstream Processes within Microfluidic Systems*

Adsorpcija farmacevtskih učinkovin v koloni s polnilom / *Adsorption of Pharmaceutical Compounds in a Packed Bed Column*

c.) 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*

POMEMBNI DOSEŽKI SODELAVCEV KATEDRE / SIGNIFICANT ACHIEVEMENTS OF THE CHAIR STAFF

NAGRADE, PRIZNANJA / AWARDS, RECOGNITIONS

- M. Berovič, nagrada za inovativnost na 4. Mednarodni konferenci o prenosu tehnologij, Maribor, oktober 2011 (skupaj z D. Makovcem, IJS) / *Award for the Innovativity, 4th International Technology Transfer Conference, Maribor, October 2011*
- A. Lakota, pohvala Študentskega sveta za pedagoško delo na smeri Kemijska tehnologija / *Students Award for the Quality of Teaching in Chemical Technology Study Programme*

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*
- J. Zagorc Končan, *European Water Management*
- P. Žnidaršič Plazl, *Chemical and Biochemical Engineering Quarterly*

RAZISKOVALNA OPREMA / RESEARCH EQUIPMENT

- Plinski kromatograf HP / *Gas Chromatograph HP*
- Tekočinski kromatograf Knauer / *HPLC Knauer*
- Tekočinski kromatograf Varian / *HPLC Varian*
- 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 W/11-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, 3x10 l*
- Stresalnik KS 40001 inkubatorski Control IKA / *Thermostated Shaker Control IKA*

SODELOVANJE V KOMPETENČNIH CENTRIH / COMPETENCE CENTRES

Kompetenčni center: KC TIGR – Trajnostno in inovativno gradbeništvo / *Competence Centre: Sustainable and Innovative Construction*

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

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

2/MK/2008 Razvoj novega materiala za jedro panela iz ekspandiranega perlita – faza V /
Development of New Material for Panel Core from Expanded Perlite – V
 Nosilec / *Principal Researcher*: I. Plazl
 Financer / *Sponsored by*: Trimo Trebnje d.d., Trebnje

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

- A. Žgajnar Gotvajn, *Erasmus Teaching Exchange, Gediminas Technical University, Vilnius, Lithuania.*
- A. Žgajnar Gotvajn, somentorica slovenske srednješolske ekipe na mednarodnem srečanju mladih raziskovalcev s področja naravoslovnih znanosti YRoNS v Genechu, Francija / *Mentor of the Slovenian Team at the Symposium of Young Researchers of Natural Sciences: Planet of Fire and Water: Equilibriums and Alterations in Chemistry and in Everyday Life, Genech, France.*

MEDNARODNO ZNANSTVENO SODELOVANJE / INTERNATIONAL RESEARCH COOPERATION

BILATERALNO MEDNARODNO SODELOVANJE / BILATERAL COOPERATION

Slovenija – Kitajska <i>Slovenia – China</i>	Produkcija farmacevtsko aktivnih spojin <i>Grifola frondoza</i> s postopkom gojenja na trdnem in tekočem gojišču / <i>Production of Pharmaceutically Active Compounds from Grifola Frondosa by Solid State and Submerged Cultivation</i> Nosilec / <i>Principal Researcher</i> : M. Berovič
Slovenija – Bolgarija <i>Slovenia – Bulgaria</i>	Mikrobiološke transformacije steroidov v sistemu mikrokanalov / <i>Microbial Transformations of Steroids within a Microchannel System</i> Nosilka / <i>Principal Researcher</i> : P. Žnidaršič Plazl
Slovenija – Portugalska <i>Slovenia – Portugal</i>	Implementacija mikrostrukturiranih naprav v procese biotransformacij in bioseparacij / <i>Implementation of Microstructured Devices in Biotransformation and Bioseparation Processes</i> Nosilec / <i>Principal Researcher</i> : I. Plazl
Slovenija – Avstrija <i>Slovenia – Austria</i>	Spremljanje bioprocsov v mikrofluidnih napravah / <i>Monitoring of Bioprocesses within Microfluidic Devices</i> Nosilec / <i>Principal Researcher</i> : I. Plazl
Slovenija – Slovaška <i>Slovenia – Slovak Republic</i>	Razgradnja izbranih škodljivih snovi z ozonacijo / <i>Degradation of Selected Harmful Compounds by Ozonation</i> Nosilka / <i>Principal Researcher</i> : A. Žgajnar Gotvajn

Slovenija – ZDA <i>Slovenia – USA</i>	Odstanjanje hormonskih motilcev (EDC) iz odpadnih vod z naprednimi oksidacijskimi procesi (AOP) / <i>Advanced Oxidation Processes (AOPs) for the Removal of Endocrine Disruptive Chemicals (EDCs) from Wastewaters</i> Nosilka / <i>Principal Researcher</i> : A. Žgajnar Gotvajn
Slovenija – Ciper <i>Slovenia – Cyprus</i>	Pretočnost krvi z različno vsebnostjo kisika <i>The Fluidity of Blood at Different Levels of Oxygen Content</i> Nosilka / <i>Principal Researcher</i> : A. Zupančič Valant

DRUGE OBLIKE MEDNARODNEGA SODELOVANJA / OTHER FORMS OF INTERNATIONAL COOPERATION

Vabljeni predavatelji tujcev na FKKT / *Invited Lecturers at FKKT*

Prof. Andrew J. Engle, Tulane University New Orleans, School of Public Health and Tropical Medicine: *Microconstituents in Wastewaters – Characteristics, Treatment and Research Needs*, May 2011

BIBLIOGRAFIJA 2011 / REFERENCES 2011

IZVIRNI ZNANSTVENI ČLANEK / ORIGINAL SCIENTIFIC ARTICLE

- KIŽ1. KALČIKOVÁ, Gabriela, ZAGORC-KONČAN, Jana, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Evaluation of landfill leachate quality with battery of biotests. *Acta Environ. Univ. Comen.*, 2011, vol. 19, suppl. 1, str. 145-150. [COBISS.SI-ID 34893573]
- KIŽ2. TIŠMA, Marina, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona, VASIĆ-RAČKI, Đurda, ZELIĆ, Bruno. Optimization of lac-case production by *Trametes versicolor* cultivated on industrial waste. *Appl. biochem. biotechnol.*, str. 1-11, doi: 10.1007/s12010-011-9401-1. [COBISS.SI-ID 35452165]
- KIŽ3. GALLETI, Camilla, DJINOVIĆ, Petar, SPECCHIA, Stefania, BATISTA, Jurka, LEVEC, Janez, PINTAR, Albin, SPECCHIA, Vito. Influence of the preparation method on the performance of Rh catalysts on CeO [sub] 2 for WGS reaction. *Catal. today*. [Print ed.], 2011, vol. 176, no. 1, str. 336-339, doi: 10.1016/j.cattod.2010.11.069. [COBISS.SI-ID 4800538]
- KIŽ4. BERLOT, Matjaž, BEROVIČ, Marin. *Saccharomyces cerevisiae* inoculum heat shock treatment : new method for enhanced glycerol production in wine. *Chem. biochem. eng. q.*, 2011, vol. 25, no. 2, str. 241-245. [COBISS.SI-ID 35328261]
- KIŽ5. ŠOŠTARIČ, Maja, KLINAR, Dušan, BRICELJ, Mihael, GOLOB, Janvit, BEROVIČ, Marin, LIKOZAR, Blaž. Growth, lipid extraction and thermal degradation of the microalga *Chlorella vulgaris*. *New biotechnology*, str. 1-16, doi: 10.1016/j.nbt.2011.12.002. [COBISS.SI-ID 35597317]
- KIŽ6. LIKOZAR, Blaž, KRAJNC, Matjaž. Kinetic modeling of the peroxide cross-linking of polymers : from a theoretical model framework to its application for a complex polymer system. *Chem. eng. process.* [Print ed.], 2011, vol. 50, no. 2, str. 200-210, doi: 10.1016/j.cep.2010.12.007. [COBISS.SI-ID 35022597]
- KIŽ7. DJINOVIĆ, Petar, OSOJNIK ČRNIVEC, Ilja Gasan, BATISTA, Jurka, LEVEC, Janez, PINTAR, Albin. Catalytic syngas production from greenhouse gasses: Performance comparison of Ru-Al [sub] 2O [sub] 3 and Rh-CeO [sub] 2 catalysts. *Chem. eng. process.* [Print ed.], 2011, vol. 50, no. 10, str. 1054-1062. [COBISS.SI-ID 4844826]
- KIŽ8. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, ZAGORC-KONČAN, Jana, COTMAN, Magda. Fenton's oxidative treatment of municipal landfill leachate as an alternative to biological process. *Desalination*. [Print ed.], 2011, vol. 275, no. 1/3, str. 269-275, doi: 10.1016/j.desal.2011.03.017. [COBISS.SI-ID 34925829]
- KIŽ9. KALČIKOVÁ, Gabriela, VÁVROVÁ, Milada, ZAGORC-KONČAN, Jana, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Evaluation of the hazardous impact of landfill leachates by toxicity and biodegradability tests. *Environ. technol.*, 2011, vol. 32, no. 12, str. 1345-1353, doi: 10.1080/09593330.2010.536785. [COBISS.SI-ID 35186949]
- KIŽ10. LIKOZAR, Blaž, KRAJNC, Matjaž. Cross-linking of polymers : kinetics and transport phenomena. *Ind. eng. chem. res.* [Print ed.], 2011, vol. 50, no. 3, str. 1558-1570, doi: 10.1021/ie1015415. [COBISS.SI-ID 35022341]

- KIŽ11. ELTEREN, Johannes Teun van, ŠLEJKOVEC, Zdenka, ARČON, Iztok, BEESTON, Michael Philip, POHAR, Andrej. Multiple kinetic Langmuir modeling to predict the environmental behaviour of As(V) in soils. *J. environ. monit. (Print)*, 2011, vol. 13, no. 6, str. 1625-1633, doi: 10.1039/C1EM10104H. [COBISS.SI-ID 35001349]
- KIŽ12. BABIČ, Janja, PAVKO, Aleksander. Enhanced enzyme production with the pelleted form of *D. squalens* in laboratory bioreactors using added natural lignin inducer. *J. ind. microbiol. biotech.*, str. 1-9, doi: 10.1007/s10295-011-1036-2. [COBISS.SI-ID 35421957]
- KIŽ13. LIKOZAR, Blaž, CERC KOROŠEC, Romana, POLJANŠEK, Ida, OGORELEC, Primož, BUKOVEC, Peter. Curing kinetics study of melamine-urea-formaldehyde resin. *J. therm. anal. calorim.*, str. 1-10, doi: 10.1007/s10973-011-1883-0. [COBISS.SI-ID 35496965]
- KIŽ14. KALČIKOVÁ, Gabriela, VÁVROVÁ, Milada, ZAGORC-KONČAN, Jana, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Seasonal variations in municipal landfill leachate quality. *Management of environmental quality*, 2011, vol. 22, no. 5, str. 612-619, doi: 10.1108/14777831111159734. [COBISS.SI-ID 35310853]
- KIŽ15. STOJKOVIČ, Gorazd, PLAZL, Igor, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. L-Malic acid production within a microreactor with surface immobilised fumarase. *Microfluid. nanofluid. (Print)*, 2011, vol. 10, no. 3, str. 627-635, doi: 10.1007/s10404-010-0696-y. [COBISS.SI-ID 34517509]
- KIŽ16. POHAR, Andrej, LAKNER, Mitja, PLAZL, Igor. Parallel flow of immiscible liquids in a microreactor : modeling and experimental study. *Microfluid. nanofluid. (Print)*, str. 1-10, doi: 10.1007/s10404-011-0873-7. [COBISS.SI-ID 35319813]
- KIŽ17. MARQUES, M. P. C., FERNANDES, P., CABRAL, Joaquim M. S., ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona, PLAZL, Igor. Continuous steroid biotransformations in microchannel reactors. *New biotechnology*, str. 1-8, doi: 10.1016/j.nbt.2011.10.001. [COBISS.SI-ID 35504645]
- KIŽ18. LIKOZAR, Blaž. Modeling of chemical kinetics of elastomer/hydroxyl- and carboxyl-functionalized multiwalled carbon nanotubes nanocomposites' cross-linking. *Polym. eng. sci.*, 2011, vol. 51, no. 3, str. 542-549, ilustr. doi: 10.1002/pen.21853. [COBISS.SI-ID 4817690]
- KIŽ19. LIKOZAR, Blaž. Kinetic modeling of the peroxide cross-linking of polymer/monomer blends : from a theoretical model framework to its application for a complex polymer/monomer dispersion system. *React. funct. polym.*. [Print ed.], 2011, vol. 71, no. 1, str. 11-22, doi: 10.1016/j.reactfunctpolym.2010.11.104. [COBISS.SI-ID 34593029]
- KIŽ20. ZUPANČIČ-VALANT, Andreja, ŽIBERNA, Lovro, PAPA HARILAOU, Yannis, ANAYIOTOS, Andreas, GEORGIU, Georgios C. The influence of temperature on rheological properties of blood mixtures with different volume expanders : implications in numerical arterial hemodynamics simulations. *Rheol. Acta*, 2011, vol. 50, no. 4, str. 389-402, doi: 10.1007/s00397-010-0518-x. [COBISS.SI-ID 34768133]
- KIŽ21. LIKOZAR, Blaž. The effect of ionic liquid type on the properties of hydrogenated nitrile elastomer/hydroxy-functionalized multi-walled carbon nanotube/ionic liquid composites. *Soft matter*, 2011, vol. 7, no. 3, str. 970-977, doi: 10.1039/C0SM00759E. [COBISS.SI-ID 34660613]
- KIŽ22. NAKRST, Jana, BISTAN, Mirjana, TIŠLER, Tatjana, ZAGORC-KONČAN, Jana, DERCO, Ján, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Comparison of Fenton's oxidation and ozonation for removal of estrogens. *Water sci. technol.*, 2011, vol. 63, no. 10, str. 2131-2137, doi: 10.2166/wst.2011.339. [COBISS.SI-ID 35108357]
- KIŽ23. KALČIKOVÁ, Gabriela, VÁVROVÁ, Milada, ZAGORC-KONČAN, Jana, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Seasonal variations in municipal landfill leachate quality. *Management of environmental quality*, 2011, vol. 22, no. 5, str. 612-619, doi: 10.1108/14777831111159734. [COBISS.SI-ID 35310853]
- KIŽ24. PERKO, David, LEVEC, Janez. Kinetic study of methanol synthesis over CuO/ZnO/Al₂O₃/V₂O₅ catalyst deposited on a stainless steel surface. *Ind. eng. chem. res.*. [Print ed.], 2012, vol. 51, iss. 2, str. 710-718. <http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ie201882j>, doi: 10.1021/ie201882j. [COBISS.SI-ID 4899866]

OBJAVLJENI ZNANSTVENI PRISPEVEK NA KONFERENCI (VABLJENO PREDAVANJE) PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTION (INVITED LECTURE)

- KIŽ25. BEROVIČ, Marin. Biosynthesis of antitumor extra and intracellular fungal polysaccharides of *Ganoderma lucidum* and *Grifola frondosa* by submerged and solid state cultivation : [plenary lecture]. V: *World Congress on Biotechnology : 21-23 March 2011 : Hyderabad International Convention Centre (HICC), Hyderabad, India*. [S. l.: s. n.], 2011, str. 173. [COBISS.SI-ID 35209733]
- KIŽ26. KALČIKOVÁ, Gabriela, ZAGORC-KONČAN, Jana, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Changes in phytotoxicity of landfill leachate due to different treatment methods. V: ROŠ, Milenko (ur.). *Simpozij z mednarodno udeležbo Vodni dnevi 2011, Portorož, 19.-20. oktober 2011. Zbornik referatov : [simpozij z mednarodno udeležbo]*. Ljubljana: Slovensko društvo za zaščito voda, 2011, str. 122-135. [COBISS.SI-ID 35496197]
- KIŽ27. HABIJANIČ, Jožica, BEROVIČ, Marin, BOH, Bojana, WRABER-HERZOG, Branka. Immunostimulatory and immunomodulating effects of *Ganoderma lucidum* polysaccharides from submerged cultivation : [plenary lecture]. V: WASSER, Solomon Pavlovich (ur.), JAKOPOVICH, Ivan (ur.). *6th International Medicinal Mushroom Conference, September 25-29, 2011, Zagreb, Croatia*. Zagreb: [s. n.], 2011, str. 4-5. [COBISS.SI-ID 35519749]
- KIŽ28. ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. Miniaturizacija naprav v biotehnologiji = Miniaturization in biotechnology. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14-16 september 2011*. Maribor: FKKT, 2011, str. 1-6. [COBISS.SI-ID 35398405]

OBJAVLJEN ZNANSTVENI PRISPEVEK NA KONFERENCI / PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTION

- KIŽ29. BABIČ, Janja, PAVKO, Aleksander. Kinetika razbarvanja izbranih azo barvil z ligninolitičnimi encimi glive *Dichomitus squalens* = Decolourization kinetics of selected azo dyes with ligninolytic enzymes produced by basidiomycete *Dichomitus squalens*. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14-16 september 2011*. Maribor: FKKT, 2011, str. 1-6. [COBISS.SI-ID 35398661]
- KIŽ30. BERLOT, Matjaž, BEROVIČ, Marin, FEFER, Dušan, LISJAK, Klemen. Influence of static homogeneous magnetic field treatment on *Saccharomyces cerevisiae* in wine fermentation. V: XXXIV World Congress of Vine and Wine, 20-27th June 2011, Porto, Portugal. *The wine construction*. [Lisboa: Ministry for Agriculture, Rural Development and Fishing], 2011, str. [1-4]. [COBISS.SI-ID 35209221]
- KIŽ31. BERLOT, Matjaž, BEROVIČ, Marin. Influence of magnetic nanoparticles on wine fermentation. V: XXXIV World Congress of Vine and Wine, 20-27th June 2011, Porto, Portugal. *The wine construction*. [Lisboa: Ministry for Agriculture, Rural Development and Fishing], 2011, str. [1-5]. [COBISS.SI-ID 35208709]
- KIŽ32. BEROVIČ, Marin, MAKOVEC, Darko, BOŠKOVIČ, Suzana, BERLOT, Matjaž. New method for fast separation of magnetized yeast *Saccharomyces cerevisiae* from sparkling wine : [lecture]. V: XXXIV World Congress of Vine and Wine, 20-27th June 2011, Porto, Portugal. *The wine construction*. [Lisboa: Ministry for Agriculture, Rural Development and Fishing], 2011, str. [1-5]. [COBISS.SI-ID 35208197]
- KIŽ33. ČOP, Matej, TISU, Matjaž, PAVKO, Aleksander. Povečevalni kriteriji laboratorijskega mešalnega bioreaktorja = Scale-up criteria for laboratory stirred tank bioreactor. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14-16 september 2011*. Maribor: FKKT, 2011, str. 1-6. [COBISS.SI-ID 35395333]
- KIŽ34. DJINOVIČ, Petar, OSOJNIK ČRNIVEC, Ilja Gasan, LEVEC, Janez, PINTAR, Albin. CH [sub] 4-CO [sub] 2 reforming of model biogas streams using 2 % Rh-CeO [sub] 2 catalyst. V: VALANT, Matjaž (ur.), GARDONIO, Sandra (ur.), FABBRETTI, Elsa (ur.), PIRNAT, Urša (ur.). *Slovenian-Italian Conference on Materials and Technologies for Sustainable Growth, Ajdovščina, 4-6 May 2011*. *Book of abstracts. Proceedings book*. Nova Gorica: University, 2011, str. 14-18. [COBISS.SI-ID 4659994]
- KIŽ35. DJINOVIČ, Petar, OSOJNIK ČRNIVEC, Ilja Gasan, LEVEC, Janez, PINTAR, Albin. Vpliv reakcijskih pogojev na delovanje 3 % Ru/[gamma]-Al[spodaj]20[spodaj]3 katalizatorja pri suhem reformingu simuliranega bioplina = Influence of experimental conditions on the performance of 3% Ru/[gamma]-Al[sub]20[sub]3 catalyst during dry reforming of model biogas streams. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14-16 september 2011*. Maribor: FKKT, 2011, str. [1-7]. [COBISS.SI-ID 4811290]
- KIŽ36. KALČIKOVÁ, Gabriela, ZAGORC-KONČAN, Jana, ZUPANČIČ, Marija, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Assessment of phytotoxicity of landfill leachates. V: KALOGERAKIS, Nicolas (ur.), FAVA, Fabio (ur.). *5th European Bioremediation Conference : July 4-7, 2011, Chania, Crete, Greece*. [S. l.: s. n.], 2011, str. [1-5]. [COBISS.SI-ID 35206661]
- KIŽ37. KALČIKOVÁ, Gabriela, ZAGORC-KONČAN, Jana, ENGLANDE, A. J., ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Treatment of mature municipal landfill leachate by Fenton oxidation : [lecture]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14-16 september 2011*. Maribor: FKKT, 2011, str. 1-9. [COBISS.SI-ID 35398917]
- KIŽ38. LAH, Branko, KLINAR, Dušan, LIKOZAR, Blaž. Modeling, optimization and scale-up of waste tire pyrolysis. V: 6th Dubrovnik Conference on Sustainable Development of Energy, Water and Environment Systems, September 25 - October 29, 2011, Dubrovnik, Croatia. *Conference proceedings*. [S. l.: s. n.], 2011, str. [1-15], ilustr. [COBISS.SI-ID 4837146]
- KIŽ39. LIKOZAR, Blaž, LEVEC, Janez. Vpliv procesnih parametrov na prenos snovi pri sintezi biodizla = Influence on process parameters on mass transfer during biodiesel synthesis : [predavanje]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14-16 september 2011*. Maribor: FKKT, 2011, str. [1-6]. [COBISS.SI-ID 35395845]
- KIŽ40. LUBEJ, Martin, PLAZL, Igor. Sinteza ogljikovih nanocevk v mikrosistemu = Carbon nanotubes synthesis in microsystem. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14-16 september 2011*. Maribor: FKKT, 2011, str. 1-6. [COBISS.SI-ID 35396101]
- KIŽ41. LUKAČ, Bojana, ZUPANČIČ-VALANT, Andreja. The investigation of rubber modified bitumen as a binder for the production as asphalt mixture. V: NIKOLAIDES, A. F. (ur.). *5th International Conference Bituminous Mixtures and Pavements, Thessaloniki, 1 - 3 June 2011*. *Proceedings*. Thessaloniki: Aristotle University of Thessaloniki, 2011, str. 133-142. [COBISS.SI-ID 1771111]
- KIŽ42. NOVAK, Uroš, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. Uporaba mikrofluidnih naprav za ekstrakcijo proteinov v dvofaznih vodnih sistemih = Use of microfluidic devices for the protein extraction in aqueous two phase systems. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14-16 september 2011*. Maribor: FKKT, 2011, str. 1-8. [COBISS.SI-ID 35397637]
- KIŽ43. OSOJNIK ČRNIVEC, Ilja Gasan, DJINOVIČ, Petar, LEVEC, Janez, PINTAR, Albin. Upgrading biogas to syngas, heterogeneous noble metal catalysts for CH [sub] 4 /CO [sub] 2 reforming. V: VALANT, Matjaž (ur.), GARDONIO, Sandra (ur.), FABBRETTI, Elsa (ur.), PIRNAT, Urša (ur.). *Slovenian-Italian Conference on Materials*

- and Technologies for Sustainable Growth, Ajdovščina, 4-6 May 2011. *Book of abstracts. Proceedings book*. Nova Gorica: University, 2011, str. 51-55. [COBISS.SI-ID 4659482]
- KIŽ44. OSOJNIK ČRNIVEC, Ilja Gasan, DJINOVIČ, Petar, LEVEC, Janez, PINTAR, Albin. Sinteza temperaturno obstojnih CeO[spodaj]2/ZrO[spodaj]2 nosilcev z visoko specifično površino za uporabo v suhem reformingu metana = Synthesis of thermally stable high surface area CeO₂/ZrO₂ supports for methane dry reforming. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14-16 september 2011*. Maribor: FKKT, 2011, str. 1-6. [COBISS.SI-ID 4811546]
- KIŽ45. STOJKOVIČ, Gorazd, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. Mikroreaktorji z imobiliziranimi celicami = Microreactors with immobilised cells. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2011, Portorož, 14-16 september 2011*. Maribor: FKKT, 2011, str. [1-4]. [COBISS.SI-ID 35398149]
- KIŽ46. ZAGORC-KONČAN, Jana, KALČÍKOVÁ, Gabriela, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Comprehensive evaluation of local municipal landfill leachate quality - a useful tool for appropriate treatment management : [lecture]. V: 13th International Waste Management and Landfill Symposium, 3-7 October 2011, S. Margherita di Pula (Cagliari), Sardinia, Italy. *Proceedings : Sardinia 2011*. [S. l.: s. n.], 2011, str. [1-7]. [COBISS.SI-ID 35440645]
- KIŽ47. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, KALČÍKOVÁ, Gabriela, ZAGORC-KONČAN, Jana. Lab-scale simulation of biological treatment of mature landfill leachate : [lecture]. V: 13th International Waste Management and Landfill Symposium, 3-7 October 2011, S. Margherita di Pula (Cagliari), Sardinia, Italy. *Proceedings : Sardinia 2011*. [S. l.: s. n.], 2011, str. [1-8]. [COBISS.SI-ID 35440389]
- KIŽ48. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, TRATAR-PIRC, Elizabeta, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona, ZAGORC-KONČAN, Jana. Impact of ionic liquid 1-butyl-3-methylpyridinium dicyanamide to anaerobic treatment. V: Green Process Engineering 2011, 6 - 8 December, Seri Pacific Hotel, Kuala Lumpur, Malaysia. *Proceedings*. [S. l.: s. n.], 2011, str. [1-10]. [COBISS.SI-ID 35623429]
- KIŽ49. MELICHER, Michal, VALIČKOVÁ, Mária, KALČÍKOVÁ, Gabriela. Degradácia benzotiazolových derivátov pomocou ozonizácie a biologické čistenia. V: MAJERČÁKOVÁ, Oľga (ur.), MAJERČÁK, Ivan (ur.). 23. Konferencia mladých hydrologov [&] 10. Konferencia mladých vodohospodárov, Bratislava, 9. november 2011. *Zbornik súťažných prác mladých odborníkov*. Bratislava: Slovenský hydrometeorologický ústav, 2011, str. [1-7]. [COBISS.SI-ID 35622149]
- KIŽ50. VALIČKOVÁ, Mária, MELICHER, Michal, KALČÍKOVÁ, Gabriela. Využitie ozónu na odstraňovanie vybraných prioritných látok z vôd. V: MAJERČÁKOVÁ, Oľga (ur.), MAJERČÁK, Ivan (ur.). 23. Konferencia mladých hydrologov [&] 10. Konferencia mladých vodohospodárov, Bratislava, 9. november 2011. *Zbornik súťažných prác mladých odborníkov*. Bratislava: Slovenský hydrometeorologický ústav, 2011, str. [1-7]. [COBISS.SI-ID 35622405]

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

- KIŽ51. ŠVAGELJ, Mirjan, BEROVIČ, Marin, WRABER-HERZOG, Branka, SIMČIČ, Saša. Beta-glucan content and immunomodulating effects of culinary-medicinal maitake mushroom, *Grifola frondosa* polysaccharides from submerged and solid-state cultures : [invited lecture]. V: WASSER, Solomon Pavlovich (ur.), JAKOPOVICH, Ivan (ur.). *6th International Medicinal Mushroom Conference, September 25-29, 2011, Zagreb, Croatia*. Zagreb: [s. n.], 2011, str. 14-15. [COBISS.SI-ID 35520261]
- KIŽ52. HABIJANIČ, Jožica, BEROVIČ, Marin, BOH, Bojana, WRABER-HERZOG, Branka. Immunostimulatory and immunomodulating effects of lingzhi or reishi medicinal mushroom, *Ganoderma lucidum* polysaccharides from submerged cultivation : [invited lecture]. V: WASSER, Solomon Pavlovich (ur.), JAKOPOVICH, Ivan (ur.). *6th International Medicinal Mushroom Conference, September 25-29, 2011, Zagreb, Croatia*. Zagreb: [s. n.], 2011, str. 15-16. [COBISS.SI-ID 35520517]
- KIŽ53. ŠVAGELJ, Mirjan, BEROVIČ, Marin, WRABER-HERZOG, Branka, SIMČIČ, Saša. Influence of inoculum type and process parameters in a bubble column and stirred tank bioreactor on maitake medicinal mushroom, *Grifola frondosa* biomass and polysaccharide production and pellet formation : [invited lecture]. V: WASSER, Solomon Pavlovich (ur.), JAKOPOVICH, Ivan (ur.). *6th International Medicinal Mushroom Conference, September 25-29, 2011, Zagreb, Croatia*. Zagreb: [s. n.], 2011, str. 28-29. [COBISS.SI-ID 35520773]
- KIŽ54. BEROVIČ, Marin. Magnetic separation of wine yeast biomass from the sparkling wine : [invited lecture]. V: *World Congress on Biotechnology : 21-23 March 2011 : Hyderabad International Convention Centre (HICC), Hyderabad, India*. [S. l.: s. n.], 2011, str. 13. [COBISS.SI-ID 35209989]

SAMOSTOJNI ZNANSTVENI SESTAVEK ALI POGlavJE V MONOGRAFSKI PUBLIKACIJI INDEPENDENT SCIENTIFIC COMPONENT PART OR A CHAPTER IN A MONOGRAPH

- KIŽ55. BEROVIČ, Marin. Redox potential and scale-Up. V: MOO-YOUNG, Murray (ur.). *Comprehensive biotechnology*. Amsterdam [etc.]: Elsevier, cop. 2011, str. 1-26. [COBISS.SI-ID 35683077]
- KIŽ56. BEROVIČ, Marin. Sterilization in biotechnology. V: MOO-YOUNG, Murray (ur.). *Comprehensive biotechnology*. Amsterdam [etc.]: Elsevier, cop. 2011, str. 136-150. [COBISS.SI-ID 35682565]

- KIŽ57. BOH, Bojana, BEROVIČ, Marin. Ganoderma lucidum production of pharmaceuticals. V: LIONG, Min-Tze (ur.). *Bioprocess sciences and technology*, (Biochemistry research trends). Hauppauge: Nova Science Publishers, 2011, str. 233-268. [COBISS.SI-ID 1439324]
- KIŽ58. CVJETKO, M., ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. Ionic liquids within microfluidic devices. V: KOKORIN, Alexander (ur.). *Ionic liquids: theory, properties, new approaches*. Rijeka: Intech, 2011, str. 681-700. [COBISS.SI-ID 34846469]
- KIŽ59. PAVKO, Aleksander. Fungal decolourization and degradation of synthetic dyes some chemical engineering aspects. V: EINSCHLAG, Fernando S. García (ur.). *Waste water - treatment and reutilization*. Rijeka: Intech, 2011, str. 65-88. <http://www.intechopen.com/articles/show/title/fungal-decolourization-and-degradation-of-synthetic-dyes-some-chemical-engineering-aspects>. [COBISS.SI-ID 34932741]
- KIŽ60. POLJANŠEK, Ida, LIKOZAR, Blaž. Influence of mass transfer and kinetics on biodiesel production process. V: EL-AMIN, Mohamed (ur.). *Mass transfer in multiphase systems and its applications*. First published February, 2011. Rijeka: InTech Open Access, 2011, str. 433-458. [COBISS.SI-ID 1891465]
- KIŽ61. ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona, PLAZL, Igor. Microbioreactors. V: MOO-YOUNG, Murray (ur.). *Comprehensive biotechnology*. Amsterdam [etc.]: Elsevier, cop. 2011, str. 289-301. [COBISS.SI-ID 35324421]

DRUGO UČNO GRADIVO / OTHER EDUCATIONAL MATERIAL

- KIŽ62. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, ZAGORC-KONČAN, Jana. *Novodila za vaje Biotehnoški procesi in naprave : (okoljski sklop) : (skripta za vaje za interno uporabo)*. Ljubljana: Fak. za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za kemijsko, biokemijsko in ekološko inženirstvo, 2011. 23 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 34903045]
- KIŽ63. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, ZAGORC-KONČAN, Jana. *Vaje iz osnov okoljskega inženirstva : skripta za interno uporabo! : [izbirni predmet Osnove okoljskega inženirstva 2. letnik Kemijsko inženirstvo]*. Ljubljana: Univ. v Ljubljani, Fak. za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za kemijsko, biokemijsko in ekološko inženirstvo, 2011. 39 str., ilustr. [COBISS.SI-ID 34996485]
- KIŽ64. ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona, PODGORNİK, Helena. *Vaje iz biotehnologije*. 2. izd. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2011. 96 str., ilustr. ISBN 978-961-6756-23-5. [COBISS.SI-ID 254454016]

KONČNO POROČILO O REZULTATIH RAZISKAV / FINAL RESEARCH REPORT

- KIŽ65. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, ZAGORC-KONČAN, Jana, KALČÍKOVÁ, Gabriela. *Kronična strupenost odpadnih vod iz proizvodnje nitrooksina : delovno poročilo : strogo zaupno*. Ljubljana: Univ. v Ljubljani, Fak. za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za kemijsko, biokemijsko in ekološko inženirstvo, 2011. 15 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 35448069]
- KIŽ66. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, ZAGORC-KONČAN, Jana, KALČÍKOVÁ, Gabriela. *Strupenost in biorazgradljivost gentamicin sulfata : delovno poročilo : strogo zaupno*. Ljubljana: Univ. v Ljubljani, Fak. za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za kemijsko, biokemijsko in ekološko inženirstvo, 2011. 17 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 34751493]
- KIŽ67. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, ZAGORC-KONČAN, Jana, KALČÍKOVÁ, Gabriela. *Strupenost in biorazgradljivost kalijevega klavulanata : delovno poročilo : strogo zaupno*. Ljubljana: Univ. v Ljubljani, Fak. za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za kemijsko, biokemijsko in ekološko inženirstvo, 2011. 12 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 34750725]
- KIŽ68. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, ZAGORC-KONČAN, Jana, KALČÍKOVÁ, Gabriela. *Strupenost in biorazgradljivost nitrooksina : delovno poročilo : strogo zaupno*. Ljubljana: Univ. v Ljubljani, Fak. za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za kemijsko, biokemijsko in ekološko inženirstvo, 2011. 14 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 34751237]
- KIŽ69. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, ZAGORC-KONČAN, Jana, KALČÍKOVÁ, Gabriela. *Strupenost in biorazgradljivost odpadnih vod iz proizvodnje nitrooksina : delovno poročilo : strogo zaupno*. Ljubljana: Univ. v Ljubljani, Fak. za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za kemijsko, biokemijsko in ekološko inženirstvo, 2011. 31 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 35121157]

PATENT / PATENT

- KIŽ70. BEROVIČ, Marin, HERGA, Marko, PIVEC, Aleksandra, ČELAN, Štefan. Postopek uporabe temperaturnega šoka na vcepku vinskih kvasovk *Saccharomyces cerevisiae* za povišanje produkcije glicerola v alkoholni fermentaciji vinskega mošta : SI 23185 (A), 2011-04-29. Ljubljana: Urad Republike Slovenije za intelektualno lastnino, 2011. 9 str., ilustr. [COBISS.SI-ID 33557509]

PREDAVANJE NA TUJI UNIVERZI / INVITED LECTURE AT FOREIGN UNIVERSITY

- KIŽ71. BEROVIČ, Marin. *Application of magnetic nano particles for separation of wine yeast biomass from the sparkling wine : Institute for Wine Biotechnology, University of Stellenbosch, 12. August 2011*. Stellenbosch, 2011. [COBISS.SI-ID 35517957]

- KIŽ72. BEROVIČ, Marin. *Application of magnetic nano particles for separation of wine yeast biomass from the sparkling wine* : Technical University of Lisbon, Instituto Superior Técnico, Department of Bioengineering, 17th June 2011. Lisbon, 2011. [COBISS.SI-ID 35207429]
- KIŽ73. BEROVIČ, Marin. *Sumberged and solid state biosynthesis of antitumor extra and intracellular fungal polysaccharides of Ganoderma lucidum and Grifola frondosa* : Technical University of Lisbon, Instituto Superior Técnico, Department of Bioengineering, 17th June 2011. Lisbon, 2011. [COBISS.SI-ID 35207173]
- KIŽ74. BEROVIČ, Marin. *New aspects in wine technology and process engineering* : Institute for Wine Biotechnology, University of Stellenbosch, 11. August 2011. Stellenbosch, 2011. [COBISS.SI-ID 35518213]
- KIŽ75. PAVKO, Aleksander. *Fungal bioremediation : biochemical engineering aspects of dye removal from waste waters* : [Institute of Chemical Technology, Prague, Czech Republic, 15. 11. 2011]. Prague, 2011. [COBISS.SI-ID 35648517]
- KIŽ76. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. *Green solvents in modern technologies* : [Slovak University of Technology in Bratislava, Faculty of Chemical and Food Technology, Bratislava, December 20th, 2011]. Bratislava, 2011. [COBISS.SI-ID 35629829]
- KIŽ77. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. *Persistent organic chemicals in waters and wastewaters* : [Tulane University School of Public Health & Tropic Medicine, 15th September, 2011, New Orleans, Louisiana, USA]. New Orleans, 2011. [COBISS.SI-ID 35406085]
- KIŽ78. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. *Resistant chemicals: their environmental impact and fate: Erasmus programme* : [Vilnius Gediminas Technical University, Vilnius, Lithuania, 22. 2., 23. 2. 2011]. Vilnius, 2011. [COBISS.SI-ID 34827781]
- KIŽ79. ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. *Implementation of microfluidic devices in biotechnology* : [Bulgarian Academy of Sciences, The Stephan Angeloff Institute of Microbiology, Laboratory of Applied Biotechnology, 29th April 2011]. Plovdiv, 2011. [COBISS.SI-ID 34975749]
- KIŽ80. ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. *Micro bioprocess engineering* : [Faculty of Food Technology Osijek, Josip Juraj Strossmayer University of Osijek, 6th June 2011]. Osijek, 2011. [COBISS.SI-ID 35101701]
- KIŽ81. ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. *The use of microfluidic devices for biocatalytic processes* : [Bulgarian Academy of Sciences, The Stephan Angeloff Institute of Microbiology, Laboratory of Applied Biotechnology, 28th April 2011]. Sofia, 2011. [COBISS.SI-ID 34976005]
- KIŽ82. KALČIKOVÁ, Gabriela. *Ecotoxicology and its applications for evaluation of efficiency of different treatment methods* : on September 28rd, 2011 at Slovak University of Technology in Bratislava, Faculty of Chemical Engineering and Food technology, Institute of Chemical and Environmental Engineering. Bratislava, 2011. [COBISS.SI-ID 35439621]

VABLJENO PREDAVANJE NA KONFERENCI BREZ NATISA / UNPUBLISHED INVITED CONFERENCE LECTURE

- KIŽ83. BEROVIČ, Marin. *Application of magnetic nano particles for separation of wine yeast biomass from sparkling wine* : 15th Enology symposium, Geisenheim Research Center, 30. 8. 2011. Geisenheim, 2011. [COBISS.SI-ID 35517701]

UREDNIK / EDITORSHIP

- KIŽ84. *Acta chimica slovenica*. Levec, Janez (član uredniškega odbora 1998-). [Tiskana izd.]. Ljubljana: Slovensko kemijsko društvo: =Slovenian Chemical Society, 1993-. ISSN 1318-0207. [COBISS.SI-ID 14086149]
- KIŽ85. *Biotechnology annual review*. Berovič, Marin (član uredniškega odbora 2002-). Amsterdam; Lausanne; New York; Oxford; Shannon; Tokyo: Elsevier. ISSN 1387-2656. [COBISS.SI-ID 23725061]
- KIŽ86. *Chemical and biochemical engineering quarterly*. Plazl, Igor (urednik 2009-), Žnidaršič Plazl, Polona (član uredniškega odbora 2009-). Zagreb: Croatian Society of Chemical Engineers, 1987-. ISSN 0352-9568. [COBISS.SI-ID 49186]
- KIŽ87. *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]
- KIŽ88. *European water management*. Zagorc-Končan, Jana (član uredniškega odbora 1998-). Lavenham: Terence Dalton Publishers, 1998-. ISSN 1461-6971. [COBISS.SI-ID 1607450]
- KIŽ89. *International journal of chemical engineering*. Levec, Janez (član uredniškega odbora 2008-). New York; Cairo: Hindawi Publishing Corporation. [COBISS.SI-ID 3883290]
- KIŽ90. *International journal of medicinal mushrooms*. Berovič, Marin (član uredniškega odbora 2010-). New York, NY: Begell House. ISSN 1521-9437. [COBISS.SI-ID 1979418]
- KIŽ91. *International review of chemical engineering*. Levec, Janez (član uredniškega odbora 2009-). Napoli: Praise Worthy Prize. ISSN 2035-1755. [COBISS.SI-ID 4095514]
- KIŽ92. *Journal of biotechnology & biomaterials*. Berovič, Marin (član uredniškega odbora 2011-). Henderson: OMICS Publishing Group. [COBISS.SI-ID 35604485]
- KIŽ93. *Kemija u industriji*. Plazl, Igor (član uredniškega odbora 2009-). [Print ed.]. Zagreb: Hrvatsko društvo kemijskih inženjera i tehnologa, 1952-. ISSN 0022-9830. [COBISS.SI-ID 747524]
- KIŽ94. *Phytomedicine*. Berovič, Marin (član uredniškega odbora 2010-). Stuttgart; Jena; New York: Fischer, 1994-. ISSN 0944-7113. [COBISS.SI-ID 17566981]

**KATEDRA ZA POLIMERNO INŽENIRSTVO,
ORGANSKO KEMIJSKO TEHNOLOGIJO IN MATERIALE**
**CHAIR OF POLYMER ENGINEERING, ORGANIC CHEMICAL
TECHNOLOGY AND MATERIALS**

PREDSTOJNIK KATEDRE / HEAD

prof. dr. Matjaž Krajnc

SODELAVCI KATEDRE / PERSONNEL

Učitelji / Faculty

prof. dr. Janvit Golob
prof. dr. Matjaž Krajnc

Asistenti / Assistants

izr. prof. dr. Urška Šebenik
Branko Alič, univ.dipl. kem.

Raziskovalci / Researchers

doc. dr. Jernej Kajtna
dr. Sergej Knez
dr. Igor Mihelič
dr. Dušan Klinar

Tehnik / Technician

Janez Malovrh

Mladi raziskovalci <i>Young Researchers</i>	Mentor <i>Mentor</i>	Čas usposabljanja <i>Programme Duration</i>	Oblika usposabljanja <i>Degree</i>
Maja Šoštarič	J. Golob	2007–2012	doktorski študij / <i>PhD</i>
Ines Mohorič	U. Šebenik	2007–2012	doktorski študij / <i>PhD</i>
Ervin Šinkovec	M. Krajnc	2009–2013	doktorski študij / <i>PhD</i>
Miha Narobe	J. Golob	2010–2013	doktorski študij / <i>PhD</i>
Aleš Ručigaj	M. Krajnc	2011–2014	doktorski študij / <i>PhD</i>

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)*

Predbolonjski dodiplomski programi / *Pre-Bologna Undergraduate Programmes*

- Pregled tehnologij / *Principles of Technological Processes* – UN
- Organski procesi in produkti / *Organic Processes and Products* – VS
- Polimeri / *Polymers* – UN
- Separacijski procesi / *Separation Processes* – UN
- Organski materiali in produkti / *Organic Materials and Products* – UN

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 Master Study Programmes*

- Polimerni materiali (izbirni predmet) / *Polymer Materials (elective course)*, BF

Predbolonjski dodiplomski programi / *Pre-Bologna Undergraduate Programmes*

- Polimerna kemija II / *Polymer Chemistry II*, NTF – UN

RAZISKOVALNA DEJAVNOST / RESEARCH ACTIVITIES

- Sinteza, karakterizacija in optimizacija procesa sinteze fenol-formaldehidnih smol, sečninsko-formaldehidnih smol, melaminsko-formaldehidnih smol, fenol-sečninsko-formaldehidnih smol, melamin-sečninsko-formaldehidnih smol / *Synthesis, Characterization and Synthesis Process Optimization of Formaldehyde Resins*
- Tehnologija priprave melaminskih pen / *Technology for the Production of Melamine Foams*
- 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*
- Funkcionalizacija in vulkanizacija gumenih zmesi / *Functionalization and Vulcanization of Rubber Blends*
- Mehanske lastnosti polimernih materialov in kompozitov / *Mechanical Properties of Polymer Materials and Composites*
- Membransko oplaščenje umetnih gnojil s podaljšanim delovanjem / *Preparation of Polymer-Coated Fertilizers with Controlled Release*
- Sinteza kelatov za agrokemijske namene / *Chelate Synthesis for Agrochemical Purposes*
- Študij adsorpcije biocidov v praškastih formulacijah / *Biocide Adsorption in Powder Formulations for Agrochemical Purposes*

RAZISKOVALNA OPREMA / RESEARCH EQUIPMENT

- Mettler Toledo DMA 861e
- Mettler Toledo DSC 1
- Mettler Toledo ReactIR iC10
- Perkin Elmer FTIR Spectrum 1000
- HP 5980II Gas Chromatograph
- LC Shimadzu LC-4A
- Microtrac S 3500 Laser Particle Size Analyzer
- Brabender Plastograph EC "PLUS"
- 3D-DLS Research Lab
- Mettler Toledo LabMax Automatic Lab Reactor
- GC System 7890A Agilent Technologies

SODELOVANJE V TEHNOLOŠKIH MREŽAH IN PLATFORMAH / TECHNOLOGY NETWORKS & PLATFORMS

- Tehnološka mreža: Inteligentni polimerni materiali in pripadajoče tehnologije / *Technology Network: Intelligent Polymer Materials and Technologies*

- Tehnološka platforma: NaMaT – Napredni materiali in tehnologije / *Technology Platform: Advanced Materials and Technologies*

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

- Inkapsulacija / *Encapsulation*
Nosilec / *Principal Researcher*: M. Krajnc
Financer / *Sponsored by*: Melamin d.d.
- Raziskave in razvoj na področju melaminskih pen / *Research and Development of Melamine Foams*
Nosilec / *Principal Researcher*: M. Krajnc
Financer / *Sponsored by*: Melamin d.d.
- Oplaščanje umetnih gnojil s podaljšanim delovanjem, sinteza kelatov in adsorpcija biocidov v praškastih formulacijah za agrokemijske namene / *Preparation of Polymer-Coated Controlled-Release Fertilizers, Chelate Synthesis, and Study of Biocide Adsorption in Powder Formulations for Agrochemical Purposes*
Nosilec / *Principal Researcher*: J. Golob
Financer / *Sponsored by*: Unichem d.o.o.
- Raziskave na področju naftnih derivatov / *Oil Derivatives Research*
Nosilec / *Principal Researcher*: J. Golob
Financer / *Sponsored by*: Nafta Lendava d.o.o.

MEDNARODNO ZNANSTVENO SODELOVANJE / INTERNATIONAL RESEARCH COOPERATION

BILATERALNO MEDNARODNO SODELOVANJE / BILATERAL COOPERATION

- Slovenija – Madžarska Kompoziti guma / poliuretan / nanopolnilo: Struktura in lastnosti
Slovenia – Hungary / *Rubber / Polyurethane / Nanofiller Systems: Structure and Properties*
Nosilka / *Principal Researcher*: U. Šebenik

BIBLIOGRAFIJA 2011 / REFERENCES 2011

IZVIRNI ZNANSTVENI ČLANEK / ORIGINAL SCIENTIFIC ARTICLE

- POT1. LIKOZAR, Blaž, KRAJNC, Matjaž. Kinetic modeling of the peroxide cross-linking of polymers : from a theoretical model framework to its application for a complex polymer system. *Chem. eng. process.*, 2011, vol. 50, no. 2, str. 200-210, doi: 10.1016/j.cep.2010.12.007. [COBISS.SI-ID 35022597]
- POT2. ČIMBORA, Tamara, BROZOVIČ, A., PIANTANIDA, I., FRITZ, G., VIRAG, Andrej, ALIČ, Branko, MAJCE, Vita, KOČEVAR, Marijan, POLANC, Slovenko, OSMAK, Maja. Synthesis and biological evaluation of 4-nitro-substituted 1,3-diaryltriazenes as a novel class of potent antitumor agents. *Eur. j. med. chem.*, 2011, vol. 46, issue 7, str. 2971-2983, doi: 10.1016/j.ejmech.2011.04.024. [COBISS.SI-ID 34964997]
- POT3. LIKOZAR, Blaž, KRAJNC, Matjaž. Cross-linking of polymers : kinetics and transport phenomena. *Ind. eng. chem. res.*, 2011, vol. 50, no. 3, str. 1558-1570, doi: 10.1021/ie1015415. [COBISS.SI-ID 35022341]
- POT4. KAJTNA, Jernej, KRAJNC, Matjaž. UV crosslinkable microsphere pressure sensitive adhesives : influence on adhesive properties. *Int. j. adhes. adhes.*, 2011, vol. 31, no. 1, str. 29-35, doi: 10.1016/j.ijadhadh.2010.09.004. [COBISS.SI-ID 34530309]
- POT5. KAJTNA, Jernej, KRAJNC, Matjaž. Solventless UV crosslinkable acrylic pressure sensitive adhesives. *Int. j. adhes. adhes.*, 2011, vol. 31, no. 8, str. 822-831, doi: 10.1016/j.ijadhadh.2011.08.002. [COBISS.SI-ID 35323397]
- POT6. ALIČ, Branko, ŠEBENIK, Urška, KRAJNC, Matjaž. Differential scanning calorimetric examination of melamine-formaldehyde microcapsules containing decane. *J. appl. polym. sci.*, 2011, vol. 119, no. 6, str. 3687-3695, doi: 10.1002/app.33077. [COBISS.SI-ID 34469637]
- POT7. ŠREKL, Jože, GOLOB, Janvit. New approach to calculate the probability of ignition. *J. loss prev. process ind.*, 2011, vol. 24, no. 3, str. 288-291, doi: 10.1016/j.jlp.2010.09.006. [COBISS.SI-ID 34976773]
- POT8. ŠINKOVEC, Ervin, KRAJNC, Matjaž. Phase transfer catalyzed Wittig reaction in the microtube reactor under liquid-liquid slug-flow pattern. *Org. process res. dev.*, 2011, vol. 15, no. 4, str. 817-823, doi: 10.1021/op200061j. [COBISS.SI-ID 35054853]
- POT9. MOHORIC, Ines, ŠEBENIK, Urška. Anionic ring-opening polymerization of octamethylcyclotetrasiloxane in emulsion above critical micelle concentration. *Polymer (Guildf.)*, 2011, vol. 52, no. 5, str. 1234-1240, doi: 10.1016/j.polymer.2011.01.025. [COBISS.SI-ID 34739717]
- POT10. MOHORIC, Ines, ŠEBENIK, Urška. Semibatch anionic ring-opening polymerization of octamethylcyclotetrasiloxane in emulsion. *Polymer (Guildf.)*, 2011, vol. 52, no. 20, str. 4423-4428, doi: 10.1016/j.polymer.2011.07.045. [COBISS.SI-ID 35309317]

OBJAVLJENI ZNANSTVENI PRISPEVEK NA KONFERENCI / PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTION

- POT11. LAH, Branko, KLINAR, Dušan, LIKOZAR, Blaž. Modeling, optimization and scale-up of waste tire pyrolysis. V: 6th Dubrovnik Conference on Sustainable Development of Energy, Water and Environment Systems, September 25 - October 29, 2011, Dubrovnik, Croatia. *Conference proceedings*. [S. l.: s. n.], 2011, str. [1-15], ilustr. [COBISS.SI-ID 4837146]
- POT12. GOLOB, Janvit. Vloga kemijskih inženirjev v kemijski in procesni industriji. V: OBLAK, Zdenka (ur.), KLOPČIČ, Luka (ur.). *Poti znanosti k edinosti Slovencev : zbornik*. Ljubljana: Svetovni slovenski kongres = Slovenian World Congress, 2011, str. 128-129. [COBISS.SI-ID 35448837]

SAMOSTOJNI ZNANSTVENI SESTAVEK ALI POGLAVJE V MONOGRAFSKI PUBLIKACIJI INDEPENDENT SCIENTIFIC COMPONENT PART OR A CHAPTER IN A MONOGRAPH

- POT13. ŠEBENIK, Urška, KRAJNC, Matjaž. Acrylic-clay nanocomposites by suspension and emulsion polymerization. V: MITTAL, Vikas (ur.). *Polymer nanocomposites by emulsion and suspension polymerization*, (RSC nanoscience & nanotechnology, no. 16). Cambridge: RSC Pub., cop. 2011, str. 111-123. [COBISS.SI-ID 34554629]

UREDNIK / EDITORSHIP

- POT14. *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

dr. Jože Šrekl

SODELAVCI KATEDRE / PERSONNEL

Učitelji / Faculty

doc. dr. Mitja Robert Kožuh

dr. Jože Šrekl, viš. pred.

dr. Aleš Jug, pred.

v dopolnilnem razmerju / *part-time*

prof. dr. Stojan Petelin

doc. dr. Marija Molan

doc. dr. Peter Vidmar

Asistent / Assistant

Marjan Lukežič, univ. dipl. inž.

Tehnika / Technicians

Iztok Košir

Miran Banfi

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 Modelling 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

- K. Gorišek, Nagrada Avgusta Kuharja za najboljšo diplomsko delo za leto 2011 (mentor M. Kožuh) / *The Avgust Kuhar Award for the Best Diploma Thesis in 2011*
- A. Jug, pohvala Študentskega sveta za pedagoško delo na smeri Tehniška varnost / *Students Award for the Quality of Teaching in Technical Safety Study Programme*

ORGANIZACIJA MEDNARODNIH SREČANJ / ORGANISATION OF INTERNATIONAL MEETINGS

- Varstvo pri delu, varstvo pred požari in medicina dela : dvodnevni posvet z mednarodno udeležbo, Portorož, maj 2011 / *Safety at Work, Fire Safety and Occupational Medicine; Two-day Symposium with International Participation, Portorož, May 2011*

RAZISKOVALNI PROGRAMI IN PROJEKTI / RESEARCH PROGRAMMES AND PROJECTS

APLIKATIVNI PROJEKTI / APPLIED RESEARCH

- L2-2324 Optimizacija upravljanja cestnih predorov med normalnimi in izrednimi razmerami / *Optimizing the Management of Road Tunnels during Normal and Emergency Situations*
Nosilec / *Principal Researcher*: S. Petelin (UL FPP)
Sofinancer / *Co-sponsored by*: DARS d.d. – Družba za avtoceste RS

BIBLIOGRAFIJA 2011 / REFERENCES 2011

IZVIRNI ZNANSTVENI ČLANEK / ORIGINAL SCIENTIFIC ARTICLE

- VP1. ŠREKL, Jože, GOLOB, Janvit. New approach to calculate the probability of ignition. *J. loss prev. process ind.*, 2011, vol. 24, no. 3, str. 288-291, doi: 10.1016/j.jlp.2010.09.006. [COBISS.SI-ID 34976773]
VP2. MOLAN, Marija, MOLAN, Gregor. BFS human behaviour model for traffic safety. *Promet (Zagreb)*, 2011, vol. 23, no. 4, str. 205-213. [COBISS.SI-ID 35618821]
VP3. ŠREKL, Jože. Safe behavior and level of knowledge regarding safe work practices on farms. *Res. j. chem. sci.*, 2011, vol. 1, no. 6, str. 15-19. [COBISS.SI-ID 35368197]

KRATKI ZNANSTVENI PRISPEVEK / SHORT SCIENTIFIC ARTICLE

- VP4. ŠREKL, Jože. Vpliv življenjskega stila na obremenjenost, povezano z delom. *IBS poročevalec*, 2011, št. 2, str. [1-6]. [COBISS.SI-ID 35188741]

OBJAVLJENI ZNANSTVENI PRISPEVEK NA KONFERENCI / PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTION

- VP5. PERKOVIČ, Marko, LUIN, Blaž, VIDMAR, Peter, PETELIN, Stojan. Developing fire model task for engine room simulator. V: *Friendship, sharing and co-operation*. Saint petersburg: International maritime lecturer's association, 2011, 2011, str. 1-9. [COBISS.SI-ID 2210659]
VP6. LUIN, Blaž, PETELIN, Stojan, VIDMAR, Peter. Trojane road tunnel operation during emergency conditions. V: ANŽEK, Mario (ur.), HERNAVS, Boštjan (ur.), KAVRAN, Zoran (ur.), MEŠE, Pavel (ur.), ŠTERN, Andrej (ur.), MARKEŽIČ, Ivo (ur.). 19th International Symposium on Electronics in Traffic [being] ISEP 2011, March 28, 2011, Ljubljana, Slovenia. *ITS - connecting transport : proceedings*. Ljubljana: Electrotechnical Association of Slovenia, 2011, 2011, str. R5[1-4]. [COBISS.SI-ID 2183011]
VP7. LUIN, Blaž, PETELIN, Stojan. Virtualization of Šentvid tunnel during normal and emergency operation. V: ANŽEK, Mario (ur.), HERNAVS, Boštjan (ur.), KAVRAN, Zoran (ur.), MEŠE, Pavel (ur.), ŠTERN, Andrej (ur.), MARKEŽIČ, Ivo (ur.). 19th International Symposium on Electronics in Traffic [being] ISEP 2011, March 28, 2011, Ljubljana, Slovenia. *ITS - connecting transport : proceedings*. Ljubljana: Electrotechnical Association of Slovenia, 2011, 2011, str. P6[1-5]. [COBISS.SI-ID 2182499]
VP8. VATOVEC-KRMAC, Evelin, LUIN, Blaž, PETELIN, Stojan. Road tunnel evacuation modeling and visualization. V: ANŽEK, Mario (ur.), HERNAVS, Boštjan (ur.), KAVRAN, Zoran (ur.), MEŠE, Pavel (ur.), ŠTERN, Andrej (ur.), MARKEŽIČ, Ivo (ur.). 19th International Symposium on Electronics in Traffic [being] ISEP 2011, March 28, 2011, Ljubljana, Slovenia. *ITS - connecting transport : proceedings*. Ljubljana: Electrotechnical Association of Slovenia, 2011, 2011, str. P7[1-5]. [COBISS.SI-ID 2182755]
VP9. VIDMAR, Peter, PETELIN, Stojan, PERKOVIČ, Marko. Risk impact of LNG terminal on port neighbour area. V: ANŽEK, Mario (ur.), HERNAVS, Boštjan (ur.), KAVRAN, Zoran (ur.), MEŠE, Pavel (ur.), ŠTERN, Andrej (ur.), MARKEŽIČ, Ivo (ur.). 19th International Symposium on Electronics in Traffic [being] ISEP 2011, March 28, 2011, Ljubljana, Slovenia. *ITS - connecting transport : proceedings*. Ljubljana: Electrotechnical Association of Slovenia, 2011, 2011, str. M7[1-14]. [COBISS.SI-ID 2183779]
VP10. PERKOVIČ, Marko, VIDMAR, Peter, PETELIN, Stojan, MULLENHOFF, Oliver. Towards technology integration for enhanced sea protection against illicit oil pollution. V: *KOBE 2011 : proceedings*. Kobe: Japan institution on marine engineering, cop. 2011, 2011, 6 str. [COBISS.SI-ID 2217059]

- VP11. MOLAN, Marija. Humano delovno okolje : pravica, dobrina ali nadstandard. V: STARE, Janez (ur.). *Odgovornost javnega sektorja : znanstvena konferenca : referati*. V Ljubljani: Fakulteta za upravo, 2011, 9 str. [COBISS.SI-ID 35620101]
- VP12. LUIN, Blaž, PETELIN, Stojan, VIDMAR, Peter. Interactive model of a road tunnel during normal and emergency operation. V: ZANNE, Marina (ur.), BAJEC, Patricija (ur.). *Pomorstvo, promet in logistika : zbornik referatov : conference proceedings*. Portorož: Fakulteta za pomorstvo in promet, 2011, 2011, 10 str. [COBISS.SI-ID 2186851]
- VP13. VIDMAR, Peter, PETELIN, Stojan, LUIN, Blaž. Analysis of the ventilation system of Karavanke tunnel. V: ZANNE, Marina (ur.), BAJEC, Patricija (ur.). *Pomorstvo, promet in logistika : zbornik referatov : conference proceedings*. Portorož: Fakulteta za pomorstvo in promet, 2011, 2011, 14 str. [COBISS.SI-ID 2187875]
- VP14. MOLAN, Marija. Delavci starejši od 50 let : realnost prihodnjega desetletja. V: *Varstvo pri delu, varstvo pred požari in medicina dela : dvodnevni posvet z mednarodno udeležbo, Portorož 2011, 10.-11. 5. 2011*. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Oddelek za tehniško varnost, 2011, 7 str., ilustr. [COBISS.SI-ID 35617797]
- VP15. KOŽUH, Mitja. Fukušima kaj se lahko naučimo o varnosti in zanesljivosti. V: *Varstvo pri delu, varstvo pred požari in medicina dela : dvodnevni posvet z mednarodno udeležbo, Portorož 2011, 10.-11. 5. 2011*. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Oddelek za tehniško varnost, 2011, str. [1-5]. [COBISS.SI-ID 35441157]
- VP16. ŠREKL, Jože. Vpliv življenjskega stila na obremenjenost povezano z delom. V: *Varstvo pri delu, varstvo pred požari in medicina dela : dvodnevni posvet z mednarodno udeležbo, Portorož 2011, 10.-11. 5. 2011*. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Oddelek za tehniško varnost, 2011, str. [1-6]. [COBISS.SI-ID 35441413]
- VP17. LUKEŽIČ, Marjan. Požarna varnost pri prevozu litij-ionskih baterij in akumulatorjev v letalskem tovornem prometu. V: *Varstvo pri delu, varstvo pred požari in medicina dela : dvodnevni posvet z mednarodno udeležbo, Portorož 2011, 10.-11. 5. 2011*. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Oddelek za tehniško varnost, 2011, str. 1-15. [COBISS.SI-ID 35442949]
- VP18. VATOVEC-KRMAC, Evelin, PETELIN, Stojan, LUIN, Blaž, VIDMAR, Peter. Računalniško modeliranje in vizualizacija evakuacije iz cestnega predora = Computer based road tunnel evacuation modeling and visualization. V: LIKAR, Jakob (ur.). 10. mednarodni simpozij o gradnji predorov in podzemnih prostorov, 16-18 november 2011, Kongresni center Mons Ljubljana, Slovenija = 10th International Symposium on Tunnel Construction and Underground Structures, November 16-18 November, 2011 Congress center Mons Ljubljana, Slovenia. *Zbornik referatov*. Ljubljana: Naravoslovnotehniška fakulteta: = Faculty of Natural Sciences and Engineering, 2011, str. 187-192, ilustr. [COBISS.SI-ID 2223715]
- VP19. JUG, Aleš, PETELIN, Stojan, KOŽUH, Mitja, VIDMAR, Peter. Nastanek ogljikovega oksida (CO) med požarom v garažni hiši = The formation of carbon monoxide (CO) during a fire underground parking garage. V: LIKAR, Jakob (ur.). 10. mednarodni simpozij o gradnji predorov in podzemnih prostorov, 16-18 november 2011, Kongresni center Mons Ljubljana, Slovenija = 10th International Symposium on Tunnel Construction and Underground Structures, November 16-18 November, 2011 Congress center Mons Ljubljana, Slovenia. *Zbornik referatov*. Ljubljana: Naravoslovnotehniška fakulteta: = Faculty of Natural Sciences and Engineering, 2011, str. 212-217, ilustr. [COBISS.SI-ID 2223971]
- VP20. LUIN, Blaž, PETELIN, Stojan, VIDMAR, Peter, VATOVEC-KRMAC, Evelin, PERKOVIČ, Marko. Simulation of normal and emergency situations in Šentvid road tunnel. V: LIKAR, Jakob (ur.). 10. mednarodni simpozij o gradnji predorov in podzemnih prostorov, 16-18 november 2011, Kongresni center Mons Ljubljana, Slovenija = 10th International Symposium on Tunnel Construction and Underground Structures, November 16-18 November, 2011 Congress center Mons Ljubljana, Slovenia. *Zbornik referatov*. Ljubljana: Naravoslovnotehniška fakulteta: = Faculty of Natural Sciences and Engineering, 2011, str. 218-223, ilustr. [COBISS.SI-ID 2224227]
- VP21. PETELIN, Stojan, LUIN, Blaž, VIDMAR, Peter, VATOVEC-KRMAC, Evelin, PERKOVIČ, Marko. Management of longitudinally ventilated tunnel during emergency situations. V: LIKAR, Jakob (ur.). 10. mednarodni simpozij o gradnji predorov in podzemnih prostorov, 16-18 november 2011, Kongresni center Mons Ljubljana, Slovenija = 10th International Symposium on Tunnel Construction and Underground Structures, November 16-18 November, 2011 Congress center Mons Ljubljana, Slovenia. *Zbornik referatov*. Ljubljana: Naravoslovnotehniška fakulteta: = Faculty of Natural Sciences and Engineering, 2011, str. 233-237, ilustr. [COBISS.SI-ID 2224483]

ZNANSTVENA MONOGRAFIJA / SCIENTIFIC MONOGRAPH

- VP22. RHODES, Norman, ALLEMANN, Martin, BRANDT, Rune, CARLOTTI, Pierre, DEL REY, Ignacio, DRAKULIČ, Miodrag, DUPONT, François, FRESTA, Massimiliano, HUIJBEN, Hans, JACQUES, Eddy, PETELIN, Stojan, SANDMAN, Tomas, STURM, Peter, VIEGAS, João, YUMSTEG, Frany. *Tunnels routiers: Stratégies d'exploitation de la ventilation en situation d'urgence = Road tunnels: Operational Strategies for Emergency Ventilation*. 2011. 51 str. ISBN 2-84060-234-2. [COBISS.SI-ID 2175587]

DRUGO UČNO GRADIVO / OTHER EDUCATIONAL MATERIAL

- VP23. LUKEŽIČ, Marjan. *Poročilo praksa : [interna navodila za študente]*. Ljubljana: Univ. v Ljubljani, Fak. za kemijo in kemijsko tehnologijo, Oddelek za tehniško varnost, 2011. 6 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 35436549]

ELABORAT, PREDŠTUDIJA, ŠTUDIJA / TREATISE, PRELIMINARY STUDY, STUDY

- VP24. PETELIN, Stojan, VIDMAR, Peter, VATOVEC-KRMAC, Evelin, LUIN, Blaž. *Analiza tveganja za predor Ločica : recenzija poročila 14. april 2011 : št. naročila: 715025/01*. Portorož: Univ. Ljubljana, Fak. za pomorstvo in promet, 2011. 20 str. [COBISS.SI-ID 2201955]
- VP25. PETELIN, Stojan, VIDMAR, Peter, VATOVEC-KRMAC, Evelin, LUIN, Blaž. *Recenzija poročila Analiza tveganja za predor Jasovnik : različica 13. 5. 2011*. Portorož: Univ. Ljubljana, Fak. za pomorstvo in promet, 2011. 15 str. [COBISS.SI-ID 2203235]
- VP26. PETELIN, Stojan, VIDMAR, Peter, VATOVEC-KRMAC, Evelin, LUIN, Blaž. *Recenzija poročila Analiza tveganja za predor Jasovnik : različica 3, 14. 4. 2011*. Portorož: Univ. Ljubljana, Fak. za pomorstvo in promet, 2011. 21 str. [COBISS.SI-ID 2202979]
- VP27. PETELIN, Stojan, VIDMAR, Peter, VATOVEC-KRMAC, Evelin, LUIN, Blaž. *Recenzija poročila Analiza tveganja za predor Ločica : različica 13. maj 2011*. Portorož: Univ. Ljubljana, Fak. za pomorstvo in promet, 2011. 14 str. [COBISS.SI-ID 2202211]
- VP28. PETELIN, Stojan, VIDMAR, Peter, VATOVEC-KRMAC, Evelin, LUIN, Blaž. *Recenzija poročila Analize tveganja za predor Jasovnik : različica 9. 6. 2011*. Portorož: Univ. Ljubljana, Fak. za pomorstvo in promet, 2011. 15 str. [COBISS.SI-ID 2203491]

VABLJENO PREDAVANJE NA KONFERENCI BREZ NATISA / UNPUBLISHED INVITED CONFERENCE LECTURE

- VP29. MOLAN, Marija. *Dobro počutje, temelj zdravja in učinkovitosti v delovnem okolju : bolniški stalež DA ali NE*. Krško, 2011. [COBISS.SI-ID 35619077]
- VP30. MOLAN, Marija. *Vračanje v svet dela : izziv za delavca in delodajalca*. Ljubljana, 2011. [COBISS.SI-ID 35619333]

UREDNIK / EDITORSHIP

- VP31. *Sanitas et labor*. Molan, Marija (odgovorni urednik 2001-). Ljubljana: Klinični inštitut za medicino dela prometa in športa, Združenje za medicino dela, prometa in športa, 2001-. ISSN 1580-5972. [COBISS.SI-ID 111898368]

POROČILO O IZOBRAŽEVALNI IN RAZISKOVALNI DEJAVNOSTI V LETU 2011

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

Avtorji prispevkov: Anton Meden, Marija Bešter Rogač, Peter Bukovec, Marko Dolinar, Andrej Godec, Janvit Golob, Marijan Kočevar, Ksenija Kogej, Matjaž Krajnc, Polona Kužnar, Maja Lamovšek, Ivan Leban, Brigita Lenarčič, Jadran Maček, Zdenka Modic, Stojka Oman Vučkowska, Aleksander Pavko, Andrej Petrič, Boris Pihlar, Igor Plazl, Dominika Slabajna, Branko Stanovnik, Jurij Svete, Boris Šket, Jože Šrekl, Janez Topovšek, Iztok Turel, Marjan Veber, Vojeslav Vlachy, Klementina Zupan

Uredila: Miloš Komac, Stojka Oman Vučkowska
Lektorica (angl): Nada Vukadinovič
Fotografije: Aleš Gregorič, Iztok Turel, Andrej Godec, Jernej Stare
Oblikovanje: Studio Signum
Tisk: Birografika Bori
Naklada: 250 izvodov

ISSN 1855-0193