



Univerza v Ljubljani

Fakulteta *za kemijo in kemijsko tehnologijo*

## POROČILO O IZOBRAŽEVALNI IN RAZISKOVALNI DEJAVNOSTI V LETU 2012





Univerza v Ljubljani  
Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo

**POROČILO O IZOBRAŽEVALNI IN  
RAZISKOVALNI DEJAVNOSTI V LETU 2012**  
*ANNUAL REPORT 2012*



Ljubljana, 2013

## **POROČILO O IZOBRAŽEVALNI IN RAZISKOVALNI DEJAVNOSTI V LETU 2012**

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,  
Maja Lamovšek, Ivan Leban, Brigita Lenarčič,  
Jadran Maček, Marjan Marinšek, Zdenka Modic,  
Stojka Oman Vučkowska, 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

Urejanje in oblikovanje: Maja Belavič  
Lektoriranje (ang.): Nada Vukadinović  
Oblikovanje: Studio Signum  
Tisk: Birografika Bori  
Naklada: 200 izvodov

---

# KAZALO

<b>UVODNA BESEDA</b>	
INTRODUCTORY .....	5
<b>POS LANSTVO FAKULTETE</b>	
MISSION STATEMENT .....	8
<b>IZOBRAŽEVALNA IN RAZISKOVALNA DEJAVNOST</b> .....	10
<b>DELOVANJE INFRASTRUKTURNEGA CENTRA NA UL FKKT V LETU 2012</b> .....	12
<b>MEDNARODNO SODELOVANJE</b> .....	13
<b>VKLJUČENOST V OKOLJE</b> .....	14
<b>ORGANIZACIJSKA SHEMA</b> .....	19
<b>DIPLOME, MAGISTERIJI IN DOKTORATI V LETU 2012</b> .....	21
<b>RAZISKOVALNI PROGRAMI V LETU 2012</b>	
RESEARCH PROGRAMMES IN 2012 .....	55
<b>Bioanorganska in bioorganska kemija</b>	
Bioinorganic and Bioorganic Chemistry .....	57
<b>Raziskave in razvoj analiznih metod in postopkov</b>	
Research and Development of Analytical Methods and Procedures .....	64
<b>Sinteza, struktura, lastnosti snovi in materialov</b>	
Synthesis, Structure, Properties of Compounds and Materials .....	76
<b>Sinteze in transformacije organskih spojin. Novi reagenti v stereoselektivni in regioselektivni sintezi aminokislin kot intermediatov v organski sintezi</b>	
Syntheses and Transformations of Organic Compounds. New Reagents in Stereoselective and Regioselective Synthesis of Amino Acids as Intermediates in Organic Synthesis .....	84
<b>Fizikalna kemija</b>	
Physical Chemistry .....	94
<b>Organska kemija: sinteza, struktura in aplikacija</b>	
Organic Chemistry: Synthesis, Structure, and Application .....	102
<b>Kemijsko inženirstvo</b>	
Chemical Engineering .....	111
<b>Separacijski procesi toplogrednih plinov za trajnostni razvoj</b>	
Separation Processes of Greenhouse Gases for Sustainable Development .....	130
<b>ENOTE SKUPNE DEJAVNOSTI</b> .....	137
<b>KATEDRE V LETU 2012</b>	
CHAIRS IN 2012 .....	139
<b>Katedra za analizno kemijo</b>	
Chair of Analytical Chemistry .....	141
<b>Katedra za anorgansko kemijo</b>	
Chair of Inorganic Chemistry .....	148
<b>Katedra za biokemijo</b>	
Chair of Biochemistry .....	161
<b>Katedra za fizikalno kemijo</b>	
Chair of Physical Chemistry .....	172

<b>Katedra za organsko kemijo</b>	
Chair of Organic Chemistry .....	184
<b>Katedra za anorgansko kemijsko tehnologijo in materiale</b>	
Chair of Inorganic Chemical Technology and Materials .....	199
<b>Katedra za kemijsko, biokemijsko in ekološko inženirstvo</b>	
Chair of Chemical, Biochemical and Environmental Engineering .....	204
<b>Katedra za polimerno inženirstvo, organsko kemijsko tehnologijo in materiale</b>	
Chair of Polymer Engineering, Organic Chemical Technology and Materials .....	215
<b>Katedra za varstvo pri delu</b>	
Chair of Safety at Work .....	220

## UVODNA BESEDA

Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo Univerze v Ljubljani (UL FKKT) je v letu 2012 za svoje delovanje prejela približno desetino manj sredstev kot leto prej. Kljub ostremu varčevanju in dejstvu, da smo v letu 2012 na večini študijskih programov izvajali le prvi letnik druge stopnje, je to ob koncu leta pomenilo približno pol milijona evrov presežka odhodkov nad prihodki. Primanjkljaj smo pokrili iz rezerv, ki smo jih ustvarili v predhodnih letih in tako zagotovili doseganje zastavljenih ciljev, kar pa bo v prihodnje vse težje.

V letu 2012 je diplomirala prva generacija študentov prenovljenih prvostopenjskih univerzitetnih študijskih programov Biokemija, Kemija in Kemijsko inženirstvo ter visokošolskega strokovnega študijskega programa Kemijska tehnologija. Študij je zaključila tudi prva generacija drugostopenjskega študija Tehniška varnost. Večina diplomantov prvostopenjskih univerzitetnih programov se je vpisala na ustrezen drugostopenjski študij. V magistrski program Biokemija se je vpisalo tudi veliko študentov, ki so prvo stopnjo zaključili na drugih fakultetah. Študij smo, kljub težavam in tudi na račun porabe rezerv, uspeli zadržati na kakovostni ravni iz prejšnjih let. Dokaz za to je tudi pozitiven rezultat zunanje evalvacije naše fakultete, ki je bila kot ena izmed osmih članic izbrana za podrobnejši pregled v postopku reakreditacije Univerze v Ljubljani s strani NAKVIS.

Tudi na področju raziskovalne dejavnosti smo doživeli bistveno zmanjšanje finančnih sredstev, ki pa se zaradi vztrajnosti iz preteklih let v letu 2012 še ni bistveno poznalo na rezultatih. Razveseljivo je, da so sodelavci fakultete v letu 2012 kot partnerji v dveh projektih uspeli pridobiti evropska sredstva v 7. okvirnem programu EU, kar je gotovo prava pot za prihodnost in vredno priznanja. Žal pa to ne rešuje težav, ki se zaradi zmanjšanja finančnih sredstev pojavljajo pri vzdrževanju raziskovalne opreme. To in dejstvo, da je praktično onemogočeno nabavljanje novih večjih instrumentov, bo imelo dolgoročno zelo negativne učinke v prihodnosti.

V letu 2012 se je začela gradnja nove stavbe, ki doslej poteka po načrtih. Tik pred zaključkom zbiranja ponudb so še zadnji razpisi in verjamem, da z njimi ne bo nepredvidenih zapletov, ki bi gradnjo podaljševali.

Vsem sodelavcem fakultete se zahvaljujem za vse napore, s katerimi smo kljub težkim razmeram uspeli doseči zastavljene cilje. Čeprav kaže, da bo leto 2013 vsaj enako težko, verjamem, da bomo zaposleni na UL FKKT storili vse, kar je v naši moči, da bomo težke čase prebrodili in ob tem zadržali kakovost pedagoškega in raziskovalnega dela na čim višji ravni. To namreč predstavlja pogoj za uspešen nadaljnji razvoj potem, ko se bo recesija končala in se bo krivulja napredka ponovno obrnila navzgor.



Prof. dr. Anton Meden  
Dekan

## INTRODUCTORY

*Compared to the year before, the Faculty of Chemistry and Chemical Technology of the University of Ljubljana (UL FKKT) received approximately ten percent less funds in 2012. Despite various stringent saving measures and considering that most of the study programmes were carried out only in the first year of the 2nd cycle programmes, we ended the year with approximately half million Euros deficit. We covered the deficit by the reserves and savings from previous years, and in this way we somehow managed to achieve the set out goals. However, the situation will be more difficult in the future.*

*In 2012, the first generation of the new first-cycle programmes in Biochemistry, Chemistry and Chemical Engineering, and higher-level professional programme in Chemical completed the studies. Also, students from the first generation of the second-cycle programme of Technical Safety graduated. The majority of those who completed the first cycle progressed to second cycle programmes. Many students who have completed first-cycle programmes at other faculties enrolled in the master's programme in Biochemistry. In spite of the many difficulties and by drawing from the funds from our reserves, we managed to maintain the previous level of quality. A proof of the achievement of this standard is reflected in the results of external evaluation, where our Faculty was selected as one among eight faculties for scrutiny in the procedure of reaccreditation of the University of Ljubljana by the Slovenian Quality Assurance Agency for Higher Education (SQAA).*

*The area of our research activities was affected by a significant reduction of funds as well. Fortunately, due to our persistence from previous years, the results have not changed for worse. It is encouraging and worth acknowledging, that in 2012, our staff managed to obtain European funds from the 7th Framework Programme as partners in two projects, which will allow us to carry on some activities in the future. Unfortunately, this will not solve the problem of the lack of funds for the maintenance of our research equipment. The fact that it is practically impossible to purchase new larger equipment will have extremely negative effects in the future.*

*In 2012 we started with the construction of our new premises. So far everything has been going on according to plans. We are now in the phase of collecting tenders for contracts and I believe there will be no unexpected difficulties to continue with the construction.*

*Here, I would like to thank all my colleagues for all the efforts they have made in achieving the goals we had set out in spite of the extremely unfavourable conditions. Although it seems that the following year will be at least as difficult as 2012, I believe that all the employees of UL FKKT will do their best to overcome these hard times and maintain the quality of pedagogical and research work at the highest possible level. Maintaining quality is a precondition for a successful development after the recession is over and when the curve of progress assumes an upward trend again.*



*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.



## POSLANSTVO FAKULTETE

Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo Univerze v Ljubljani:

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

## IZOBRAŽEVALNA IN RAZISKOVALNA DEJAVNOST

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

### IZOBRAŽEVALNA DEJAVNOST

UL FKKT je v študijskem letu 2011/2012 izvajala štiri univerzitetne študijske programe prve stopnje:

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

visokošolski strokovni študijski program prve stopnje

- Kemijska tehnologija,

magistrski študijski program druge stopnje:

- Tehniška varnost

ter doktorski študijski program

- Kemijske znanosti.

V študijskem letu 2011/2012 je UL FKKT izvajala tudi pet predbolonjskih dodiplomskih študijskih programov:

- univerzitetni program Kemija s smerama:
  - 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 predbolonjski podiplomski študijski program:

- smer Kemija
- smer Kemijsko inženirstvo
- smer Kemijska tehnologija

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

- Biomedicina za področje Biokemije in molekularne biologije
- Biotehnologija
- 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 večšin 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 2012

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 meritev 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 (24/7) so meritve na Bruker 300 DPX NMR inštrumentu tekale 6909 ur oziroma 78,9 % in na Bruker Avance II 500 MHz NMR inštrumentu 6812 ur oziroma 77,81 % vsega razpoložljivega časa. Inštrumenta so pri raziskovalnem in pedagoškem delu uporabljali sodelavci UL Fakultete za kemijo in kemijsko tehnologijo

**Enota za masno spektrometrijo.** Agilent 6224 Accurate Mass TOF LC/MS sistem je bil v letu 2012 v uporabi 100 % razpoložljivega časa. Od tega 15 % za vzdrževanje in umerjanje inštrumenta, 75 % je bilo namenjenih meritvam za raziskovalno in pedagoško delo sodelavcev UL Fakultete za kemijo in kemijsko tehnologijo, 10 % časa pa je bilo uporabljeno za delo za trg.

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 41 izvirnih znanstvenih člankih, 4 vabljenih predavanjih, 59 prispevkih na konferencah, 2 patentih in 2 patentnih prijavih. Oprema infrastrukturnega centra je bila uporabljena tudi pri raziskavah v sklopu 4 zaključenih doktorskih disertacij ter 21 diplomskih del.

**Enota za elektronsko mikroskopijo.** V enoti za elektronsko mikroskopijo IC UL FKKT je bil elektronski mikroskop FE-SEM Zeiss Ultra Plus na razpolago vsem uporabnikom 24 ur na dan, 7 dni v tednu, 52 tednov v letu. Glede na metodologijo izračunavanja zasedenosti inštrumenta je bil od vseh razpoložljivih ur elektronski mikroskop zaseden 100 % (kot 100 % zasedenost inštrumenta se šteje zasedenost vsaj 8 h/dan). 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 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 Plus sta bila v letu 2012 na FKKT izšolana tudi 2 nova operaterja. Rezultati raziskovalnega dela v letu 2012, ki vključujejo uporabo inštrumenta FE-SEM Zeiss Ultra Plus so bili objavljeni v 22 izvirnih znanstvenih člankih, v 1 vabljenem predavanju na konferenci, 12 objavljenih prispevkih na konferencah, mnogih objavljenih povzetkih prispevkov na konferencah 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 ponuja sofinanciranje izmenjav študentov za študij in prakso, učiteljev in administrativnega osebja.

Za izmenjave študentov na FKKT obstajata dobra strokovna podpora in svetovanje. V tujino je v okviru študentske mobilnosti programa Erasmus šlo devet naših študentov, na praktično usposabljanje pa sedem študentov. Dva študenta sta odšla še na praktično usposabljanje izven uradnih programov. Za 2012 smo načrtovali 20 mobilnosti naših študentov, izvedli pa smo jih 16. Tujih študentov smo gostili preko programa Erasmus sedem, preko programa Erasmus Mundus.- LOTUS pa dva. Načrtovali smo 20 mobilnosti tujih študentov, izvedli pa smo jih sedem.

Od naših sodelavcev je šel en sodelavec na Erasmus izmenjavo učiteljskega osebja. Bolj razgibana je mobilnost osebja za raziskave, kjer je šlo v okviru bilateralnih raziskovalnih projektov v tujino 21 naših sodelavcev, iz tujine pa jih je prišlo 30.

V okviru doktorskega študija smo imeli predavanja 12 tujih predavateljev.

Izvedli smo eno mednarodno poletno šolo ter dve mednarodni konferenci za učitelje in raziskovalce. Po pripravi izbranih srednješolcev na naši fakulteti, so se štirje udeležili Kemijske olimpijade v Washingtonu in dosegli eno srebrno in eno bronasto priznanje. Sodelavec naše fakultete je bil tudi mentor študentske ekipe iz sintezne biologije. Ekipa se je uvrstila med najboljše na evropskem srečanju na Nizozemskem, v svetovni konkurenci pa je bila druga, hkrati pa najboljša na področju zdravja.

Na 1. stopnji bolonjskega študija imamo 13 tujih študentov, na magistrski pa nobenega (vendar imamo na večini programov vpisan šele 1. letnik). Na doktorski stopnji je tujih študentov devet. Število vpisanih študentov iz tujine je nekoliko manjše od načrtovanega, saj smo predvidevali, da bo na magistrski stopnji delež tujih študentov podoben kot na 1. stopnji, kar pa se ni uresničilo. Možen razlog je, da je šolnina na naši fakulteti tako visoka, da je kandidati iz morebitne štipendije praktično ne morejo kriti. Posebnih štipendij za študij na naši fakulteti sicer ni, prepoznavnost v tujini pa smo poskusili izboljšati s tem, da smo na spletu objavili učne načrte tudi vseh predmetov 2. stopnje v angleškem jeziku.

Strategija UL za obdobje 2012–2020 predvideva povečanje deleža tujih študentov in zaposlenih. Glede na predhodno leto (2011) se je število vpisanih tujih študentov na vseh treh stopnjah študija bistveno povečalo. Vpetost v mednarodne raziskovalne mreže se je povečala zaradi vključitve dveh raziskovalnih skupin v konzorcija za izvedbo raziskovalnih projektov znotraj 7. OP EU.

Na raziskovalnem področju poteka sodelovanje na številnih dvostranskih projektih. V letu 2012 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.

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

## VKLJUČENOST V OKOLJE

### MEDNARODNA KEMIJSKA OLIMPIJADA 2012 V WASHINGTONU

44. Mednarodna kemijska olimpijada je potekala od 21. 7. do 30. 7. 2012 v Washingtonu DC v ZDA. Olimpijado je organiziralo Ameriško kemijsko društvo ACS, gostila pa nas je Univerza Maryland (<http://www.icho2012.org/>).

Letošnje olimpijade se je udeležilo 72 držav. Na njej sodelujejo po štirje dijaki iz vsake države, ki so bili najboljši na nacionalnih pripravah. Slovensko ekipo so zastopali Omar Alhady (gimnazija Bežigrad), Nejc Čeplak (II. gimnazija Maribor), Rok Kaufman (gimnazija Vič) in Rok Narobe (gimnazija Ledina). Mentorja ekipe sva bila dr. Helena Prosen in dr. Andrej Godec, oba FKKT.

Rok Kaufman je na tekmovanju osvojil srebrno, Nejc Čeplak pa bronasto medaljo. V celoti se je ekipa odlično odrezala, zato vsem čestitke!



*Na fotografiji so z leve proti desni: Andrej Godec, Nejc Čeplak, Rok Narobe, Omar Alhady, Helena Prosen in Rok Kaufman.*

Tekmovanje je sestavljeno iz teoretičnega testa in praktičnega dela v laboratoriju, in po težavnosti močno presega srednješolski nivo. Dijake zato pripravljamo s sodelavci na naši Fakulteti, projekt pa poteka v sodelovanju z Zvezo za tehnično kulturo Slovenije.

Prva praktična naloga je bila raziskovanje kinetike oziroma mehanizma reakcije jodiranja acetona v kisli vodni raztopini. Hitrostni zakon za to reakcijo je:

$$\text{Hitrost} = k \cdot [\text{aceton}]^m \cdot [\text{I}_3^-]^n \cdot [\text{H}^+]^p$$

Pri tej nalogi je bilo treba določiti konstanto reakcijske hitrosti,  $k$ , in celoštevilčne delne rede reakcije  $m$ ,  $n$ , in  $p$ . Razen tega so dijaki primerjali reaktivnost acetona z reaktivnostjo acetona- $d_6$ , v katerem je šest atomov protija ( $^1\text{H}$ ) zamenjanih z devterijem ( $^2\text{H}$ , D), in sicer zato, da bo določil izotopski efekt reakcije ( $k_{\text{H}}/k_{\text{D}}$ ). Iz teh podatkov pa so nato skleпали na mehanizem reakcije.

Pri drugi praktični nalogi so morali pripraviti kompleks mangana s salenom z reakcijo med spojino (salen) $\text{H}_2$  in Mn(II) acetatom v etanolu na zraku, v prisotnosti litijevega klorida. Tekmovalci so morali določiti maso produkta, karakterizirati čistoto pripravljene snovi s tankoplastno kromatografijo



---

(TLC) in določiti oksidacijsko število kovine v kompleksu z jodometrično redoks titracijo. Za redoks titracijo so dobili raztopino predhodno pripravljene spojine, podobne vzorcu, (salen\*)MnCl<sub>x</sub>, kjer ima mangan isto oksidacijsko število kot v produktu, R-substituent na benzenovem obroču pa je lahko H, COOH ali SO<sub>3</sub>H.

Teoretični test je bil sestavljen iz osem nalog. Začelo se je s kemijo borohidridov: strukturo, reaktivnostjo in termokemijo teh spojin.

Druga naloga je bila kemija platinovih(II) spojin, izomerov in *trans* efekta. V tretji nalogi je bilo potrebno z upoštevanjem ravnotežij v vodnih raztopinah tiomolibdatnih ionov in spektroskopskih podatkov izračunati koncentracije posameznih ionov.

V naslednji nalogi so se ukvarjali s kristalno strukturo keramičnega materiala YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-δ</sub> ( $0 < \delta < 0.5$ ), ki ima superprevodniške lastnosti pri dokaj visoki temperaturi 90 K. Dijaki so morali računati dimenzije osnovne celice, predvideti reaktivnost, in na tej osnovi določiti natančno formulo spojine.

Peta naloga se je nanašala na načine, na katere se lahko spremeni struktura DNA, tako v naravi kot s posredovanjem človeka. Treba je bilo risati strukture pirimidinskih baz, predvideti intermediate in produkte pri metilaciji, in alkilaciji DNA z iperitom.

Šesta naloga je bila organska sinteza vareniklina, spojine, ki se uporablja oralno za preprečevanje odvisnosti od kajenja. Dijaki so morali prepoznati posamezne spojine v dokaj komplicirani reakcijski shemi, pri čemer so morali uporabiti še NMR – podatke.

Sedma naloga je bila sinteza encima, ki veže dve substratni molekuli (dien in dienofil) ter katalizira Diels-Alderjevo reakcijo med njima. Pri tej nalogi je bilo treba poznati stereokemijo spojin, in mehanizem ter kinetiko encimsko katalizirane reakcije med obema molekulama.

Pri zadnji nalogi pa so se morali spopasti s policikličnimi aromatskimi ogljikovodiki (PAH), ki so atmosferski polutanti, uporabljajo pa se na primer v organskih svetlečih diodah; najdemo jih tudi v medzvezdnem prostoru. Tema naloge so bili tako imenovani linearni PAH; primeri takšnih spojin so benzen, antracen in pentacen. Dijaki so morali izpeljati enačbo za odvisnost kvantizirane energije linearnih spojin PAH od kvantnih števil  $n_x$  in  $n_y$ , dolžine  $d$ , števila povezanih obročev  $w$ , in osnovnih konstant  $h$  in  $m_e$ ; dopolniti so morali energijske diagrame za te spojine, in izračunati  $\Delta E$  med najvišjim energijskim nivojem, zasedenim s  $\pi$  elektroni, in najnižjim nezasedenim energijskim nivojem.

Naloge so v celoti objavljene v spletni učilnici Kemljub:  
<http://skupnost.sio.si/course/view.php?id=150>.

Na tem mestu se zahvaljujemo delavcem FKKT, ki so izvedli priprave: Helena Prosen, Barbara Modec, Breda Novak, Mojca Žitko, Zdenka Kadunc, Črtomir Podlipnik, Boris Šket, Darko Dolenc in Andrej Godec. Hvala tudi Zvezi za tehnično kulturo Slovenije, ki sodeluje pri organizaciji, in Slovenskem kemijskem društvu, kjer je sedež našega Odbora za pripravo olimpijad. Uspeh slovenske ekipe je rezultat našega skupnega dela.



## POLETNA ŠOLA KEMIJSKIH ZNANOSTI 2012

Poletna šola kemijskih znanosti 2012 se je začela v torek, 26. 6. 2012 ob 10h. Do konca tedna smo na Fakulteti za kemijo in kemijsko tehnologijo v Ljubljani gostili skupino slovenskih dijakinj in dijakov, ki so skozi delo v laboratorijih spoznavali različna področja kemije, biokemije in kemijskega inženirstva. Pri izvedbi je sodelovalo več sodelavk in sodelavcev naše fakultete, vodja poletne šole pa je bil dr. Andrej Godec.



V delavnici iz analizne kemije so udeleženci spoznali organske kisline v sadju in zelenjavi, ter njihovo določanje s tekočinsko kromatografijo. Udeleženci so pripravili vzorce iz več vrst sadja in sokov, in s pomočjo HPLC metode določili masno koncentracijo (v g/L) jabolčne, citronske in askorbinske kisline. To delavnico je vodila dr. Helena Prosen.

V drugi delavnici, ki jo je vodila dr. Irena Kozjek Škofic, so se ukvarjali s kemijo bakra; ugotavljali so reaktivnost in druge lastnosti, kot je na primer položaj v elektrokemijski napetostni vrsti, ter sintetizirali bakrov(I) jodid.

Tema tretje delavnice je bilo ekološko inženirstvo, namen pa je bil klasifikacija herbicida atrazina glede na njegovo nevarnost na vodno okolje. Ta herbicid se uporablja za zatiranje široko listnatih plevelov in enoletnih trav na posevkih koroze, soje in prosa. V delavnici, ki jo je vodila dr. Andreja Žgajnar Gotvajn, so določali strupenost odpadne vode, in biorazgradljivost atrazina.

V delavnici biokemije so udeleženci proučevali učinek encimov v pralnih praških in razlike v učinkovitosti med encimskimi in ne-encimskimi čistili. Osredotočili so se na peptidaze in odstranjevanje proteinskih madežev. Delavnico biokemije je vodil Matevž Korenč.

Poletna šola se je zaključila v petek, 29. 6. 2012. Ob zaključku delavnice so dijaki predstavili delo v posamičnih delavnicah in komentirali poletno šolo.

Po anketah sodeč so bili udeleženci s poletno šolo zelo zadovoljni. Teme so bile zanimive, ter mentorice in mentorji zelo prizadevni. Med pripombami pa so omenili to, da je premalo stolov v laboratorijih, da je bila poletna šola prekratka in kosila tudi, in da bi radi spoznali še druga področja kemije. Večina bi se jih poletne šole znova udeležila v prihodnosti; bilo pa je tudi mnenje, da ne, »ker sedaj vidim, kakšno je delo kemikov«.

Mnenja bomo upoštevali pri organizaciji poletnih šol v prihodnosti.

Zahvaljujemo se sodelavcem, ki so pripravili delavnice poletne šole: dr. Heleni Prosen, dr. Ireni Kozjek Škofic, dr. Andreji Gotvajn Žgajnar in Matevžu Korenču. Zahvaljujemo se tudi drugim zaposlenim na fakulteti, ki so pomagali pri izvedbi, in dekanu prof. dr. Antonu Medenu za pomoč.

Zahvaljujemo se Zvezi za tehnično kulturo Slovenije za pomoč pri organizaciji.

Izvedbo poletne šole 2012 so nam omogočili Bia d.o.o., Bia Separations d.o.o., Chemass, Juteks d.d., Krka d.d., Melamin d.d., Mercator d.d., Plama-pur d.d., Sanolabor d.d. in Salonit Anhovo d.d.

Vsem se najlepše zahvaljujemo, in upamo na dobro sodelovanje tudi v prihodnje.

## **NOČ RAZISKOVALK IN RAZISKOVALCEV 2012**

Že skoraj tradicionalno vsako leto konec septembra pred začetkom študijskega leta v večernih urah UL FKKT priredi »Noč raziskovalk in raziskovalcev«. Tehnični sodelavec Aleš Knez in profesor Ivan Leban s Katedre za anorgansko kemijo v veliki predavalnici na dvorišču, Aškerčeva 5, organizirata večer nekaterih kemijskih in fizikalnih poskusov v živo. Na srečanje povabimo vse generacije – od mlajših do starejših znanstvenikov in znanstvenic. In udeležba je vsako leto med 80 in 130 obiskovalcev. In imamo že stalen izbor obiskovalcev te prireditve. Zelo smo veseli, da nas vsako leto obiščejo gojenci iz bližnjega Zavoda za slepo in slabovidno mladino.

V okviru Direktorata za raziskave Evropske komisije po vsej Evropi poteka skupen dogodek »Researchers' Night, 2012«, ki pa je povezan tudi z obsežnimi administrativnimi opravili tako pred dogodkom kot tudi po njem. Tudi zaradi tega smo se odločili, da izvedemo vse dejavnosti v lastni izvedbi z minimalnimi stroški.

Na prireditvi smo prikazali več kemijskih in fizikalnih eksperimentov in s tem tudi delno popularizirali kemijske študije in v splošnem naravoslovne študije na naši univerzi. Hkrati smo želeli približati naravoslovne znanosti na poljuden način ljudem vseh generacij. Precej drugače si je ogledati poskuse v živo in ne samo preko virtualnih strani računalnika, kar mnogi sedaj počnejo.

Kemija je prisotna v našem vsakdanjem življenju. Vsak se srečuje z njo, četudi mnogokrat trdi drugače. Kemija je vsepovsod – ko se zjutraj umijemo in si ščetkamo zobe, ko pripravimo čaj ali kavo, ko raztopimo sladkor v čaju, ko ocvremo jajce itn. Novi materiali, alternativni način pridobivanja energije, pridobivanje pitne vode ipd. brez kemijskih pristopov ne bi bili možni. Naš vsakdan (hrana, voda) in vremenski pojavi so tudi povezani s kemijo. S kemijo se ukvarjamo od otroških let do visoke starosti. Zato je le dobro, da se s kemijo spoznamo tudi preko zanimivih kemijskih poskusov.

Nekateri menijo, da je kemija edina povzročiteljica okoljskih težav. V nerazvitih državah verjetno to drži, vendar se moramo zavedati in podpreti vse dejavnosti, ki so v prid globalnemu trajnostnemu razvoju. Zato tudi uporabimo le take kemijske pristope, da z njimi ne bomo škodili našim bodočim rodovom!

## POROČILO O ODPADKIH NA FAKULTETI V LETU 2012

Poseben režim velja zbiranju nevarnih odpadkov, za katere se vodi evidenca na predpisanih obrazcih. Odpadki so ločeni po posameznih klasifikacijskih številkah, v tabeli št. 1 pa so prikazani podatki o zbranih odpadkih glede na izvor.

Vrsta odpadka	Količina v kg
Laboratorijski odpadki nevarnih snovi	2630
Odpadna električna oprema, monitorji, tonerji, kartuše	1361
Odpadna olja	86
Žarnice	32
Baterije	48
<b>Skupaj</b>	<b>4157</b>

Tabela št. 1: Količine odpadka po vrsti odpadka

Med laboratorijskimi odpadki nevarnih snovi se je v lanskem letu precej povečal delež odpadkov, ki z vidika preventive pred infekcijo zahtevajo posebno ravnanje (klasifikacijska številka odpadka 180103\*). Ti odpadki nastajajo na Katedri za biokemijo, ki je s selitvijo na novo lokacijo prevzela tudi zbiranje odpadkov, ki jih je prej opravljal IJS. Količina teh odpadkov je 20 % vseh laboratorijskih odpadkov nevarnih snovi, kot je razvidno iz spodnjega diagrama, strošek odvoza le-teh pa predstavlja kar 30 % vseh stroškov za odvoz laboratorijskih odpadkov.

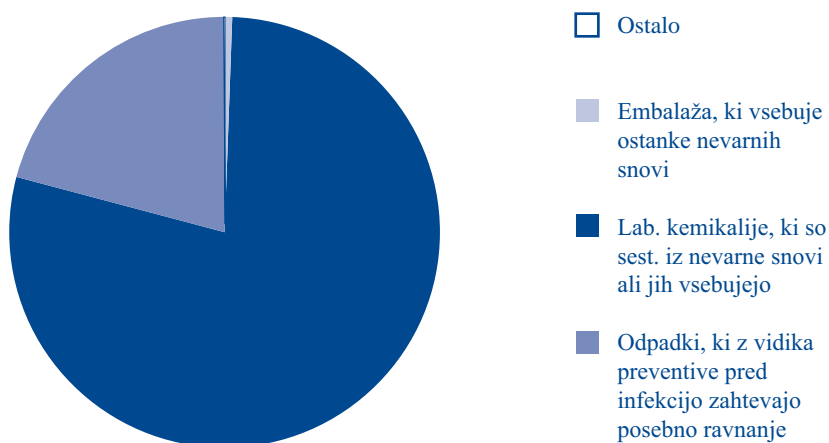
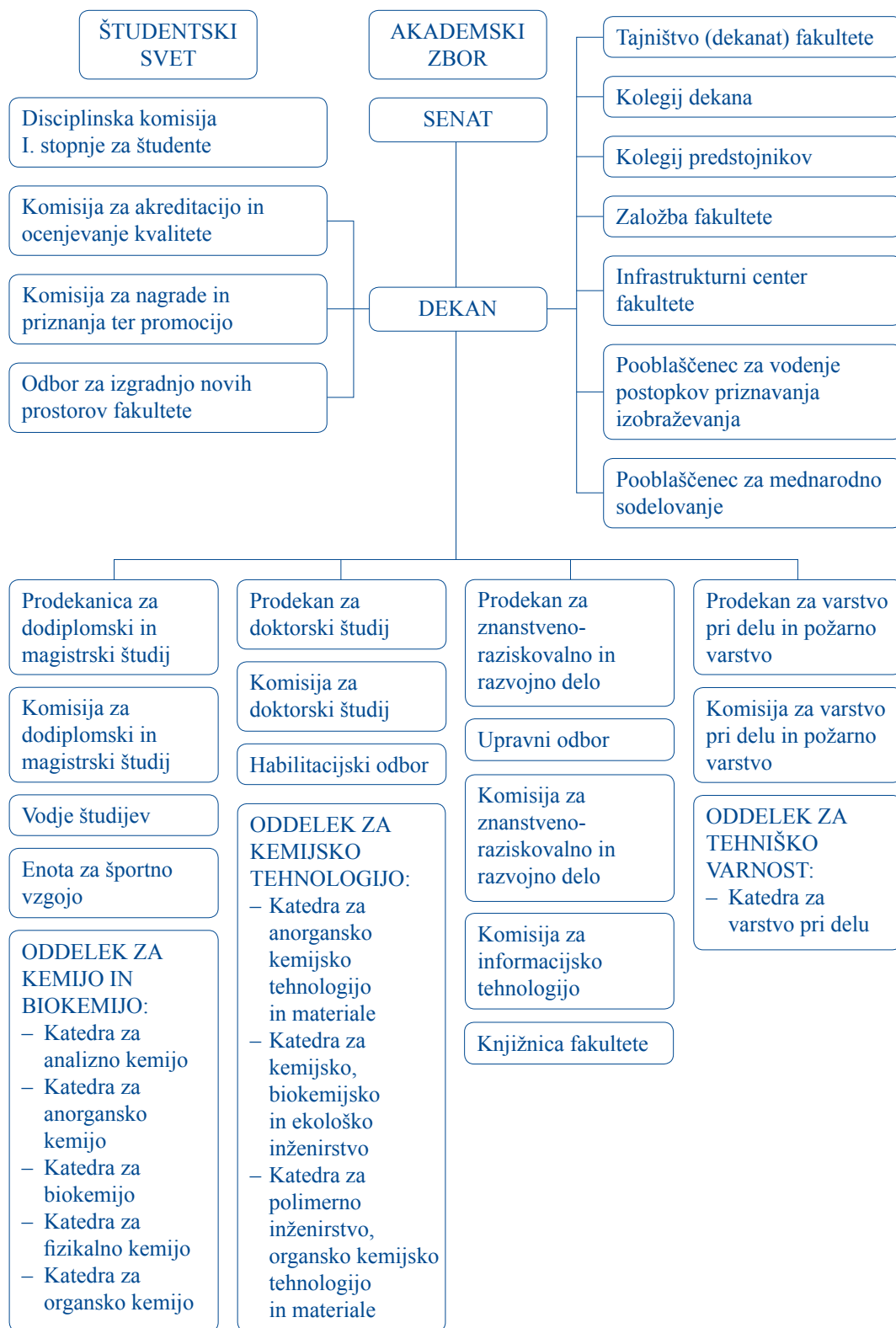


Diagram št. 1: Delež laboratorijskih odpadkov nevarnih snovi

## ORGANIZACIJSKA SHEMA





---

## DIPLOME, MAGISTERIJI IN DOKTORATI V LETU 2012

### DIPLOME – PREDBOLONJSKI PROGRAM

#### UNIVERZITETNI ŠTUDIJSKI PROGRAMI

##### KEMIJA

###### **Jan Bitenc**

Mentorica: prof. dr. Marija Bešter Rogač

Somentor: prof. dr. Miran Gaberšček

Merjenje in ocena prispevkov uporabnosti pri karakterizaciji elektrokatalizatorjev za nizkotemperaturne vodikove celice

Datum zagovora: 11. 9. 2012

###### **Aleš Drobnič**

Mentor: akademik prof. dr. Branko Stanovnik

Sinteza derivatov 1,2,6,8-tetraazaspiro[4.4]non-1-ena in 1-oksa-2,6,8-triazaspiro-[4.4]non-3-ena z 1,3-dipolarnimi cikloadicijami na 1-acil-5-[(Z)-cianometiliden]-3-metilimidazolidin-2,4-dion

Datum zagovora: 29. 2. 2012

###### **Zvone Duh**

Mentorica: doc. dr. Marija Zupančič

Preučevanje vpliva stabilizacijskih sredstev na mobilnost kovin v onesnaženih tleh

Datum zagovora: 22. 6. 2012

###### **Jaka Glavač**

Mentor: prof. dr. Jurij Svete

Sinteza in pretvorbe derivatov 5-aminometil-3-pirazolidinona

Datum zagovora: 20. 9. 2012

###### **Marta Jagodic**

Mentor: prof. dr. Jurij Reščič

Somentor: prof. dr. Jurij Lah

Vežanje ionov na nestrukturiran fragment antitoksina CcdA iz *Escherichie coli*

Datum zagovora: 11. 9. 2012

###### **Klemen Jakomin**

Mentor: doc. dr. Bojan Kozlevčar

Sinteza in karakterizacija koordinacijskih spojin bakra in kobalta z bis(3,5-di-tercbutilpirazol-1-il) očetno kislino

Datum zagovora: 9. 1. 2012

###### **Primož Jovanovič**

Mentor: prof. dr. Boris Pihlar

Somentor: prof. dr. Miran Gaberšček

Optimizacija metode za ocenjevanje elektrokatalitske aktivnosti nanodelcev platinskih zlitin s pomočjo rotirajoče disk elektrode

Datum zagovora: 11. 9. 2012

**Veronika Juriševič**

Mentor: prof. ddr. Boris Turk

Somentor: doc. dr. Tina Zavašnik-Bergant

Inhibicija človeških katepsinov S in L s klopnim inhibitorjem OmC2

Datum zagovora: 5. 12. 2012

**Ines Klakočar**

Mentorica: prof. dr. Helena Prosen

Somentor: doc. dr. Gregor Muri

Določanje nekaterih oksidiranih in nitriranih derivatov PAH na trdnih delcih

Datum zagovora: 7. 5. 2012

**Nina Kostevšek**

Mentor: prof. dr. Boris Pihlar

Elektrokemijska študija nanašanja nanožic na osnovi sistema  $Fe_{70}Pd_{30}$  za uporabo v medicinske namene

Datum zagovora: 11. 9. 2012

**Simon Kovačič**

Mentor: prof. dr. Jurij Lah

Spremljanje interakcij zdravnih učinkovin in pomožnih snovi z mikrokalorimetrijo

Datum zagovora: 11. 9. 2012

**Lovro Kramer**

Mentor: prof. ddr. Boris Turk

Lokalizacija katepsina E v izbranih mišjih tkivih in iskanje njegove alternativne spojivne oblike

Datum zagovora: 3. 9. 2012

**Katja Krančan**

Mentor: prof. dr. Iztok Turel

Somentor: akademik prof. dr. Branko Stanovnik

Sinteze rutenijevih kompleksov z 2-substituiranimi 4,5-bis(metoksikarbonil)piridini

Datum zagovora: 7. 9. 2012

**Mario Kurtjak**

Mentor: doc. dr. Tomaž Urbič

Lastnosti vode v poroznih materialih po modelu Mercedes-Benz

Datum zagovora: 11. 9. 2012

**Elma Ljutić**

Mentor: prof. dr. Ksenija Kogej

Študij vodnih raztopin ataktične polimetakrilne kisline z metodami sipanja svetlobe

Datum zagovora: 22. 8. 2012

**Jona Mirnik**

Mentor: akademik prof. dr. Branko Stanovnik

Sinteza pirimidinskih derivatov iz 3-aminopropenoatov

Datum zagovora: 7. 9. 2012

**Tomaž Mohorič**

Mentorica: prof. dr. Barbara Hribar Lee

Študij hidrofobnega efekta v enostavnem modelu vode z uporabo metode Monte Carlo

Datum zagovora: 28. 8. 2012

---

**Petra Novak**

Mentor: prof. dr. Peter Bukovec  
Določanje polibromiranih difenil etrov v okoljskih vzorcih  
Datum zagovora: 4. 9. 2012

**Nina Ovčjak**

Mentorica: doc. dr. Marija Zupančič  
Vpliv talnih parametrov na učinkovitost kemijske stabilizacije kovin z uporabo fosfatov in apna  
Datum zagovora: 12. 6. 2012

**Jerca Pahor**

Mentor: prof. dr. Janez Cerkovnik  
Somentor: prof. dr. Stojan Stavber, znan. svet.  
Aerobno oksidativno jodiranje organskih spojin, katalizirano z dušikovo(V) kislino  
Datum zagovora: 7. 9. 2012

**Anja Pajer**

Mentor: prof. dr. Janez Košmrlj  
Sinteza izbranih triazoljskih ligandov  
Datum zagovora: 19. 11. 2012

**Majda Pavlin**

Mentor: prof. dr. Jurij Lah  
Termodinamika vezanja kationskih ligandov na oligonukleotid DNA z zaporedjem človeške telomere  
Datum zagovora: 11. 9. 2012

**Matic Pavlin**

Mentor: prof. dr. Janez Mavri  
Ab initio študija reakcije med melaminom in formaldehidom  
Datum zagovora: 10. 9. 2012

**Anja Podlogar**

Mentor: prof. dr. Jurij Svete  
Sinteza tetrahidropirazolo[1,5-c]pirimidin-2,7-dionov  
Datum zagovora: 20. 6. 2012

**Andreja Potočnik**

Mentor: prof. dr. Matevž Pompe  
Vpliv načinov ionizacije na občutljivost določevanja nitrozaminov s plinsko kromatografijo/masno spektroskopijo  
Datum zagovora: 30. 11. 2012

**Barbara Remškar**

Mentorica: prof. dr. Helena Prosen  
Razvoj in validacija metode za topila v proizvodnem procesu  
Datum zagovora: 10. 10. 2012

**Klara Retko**

Mentorica: doc. dr. Romana Cerc Korošec  
Priprava in karakterizacija srebrovih nanodelcev za uporabo v površinsko ojačeni ramanski spektroskopiji vzorcev kulturne dediščine  
Datum zagovora: 30. 8. 2012



**Sebastijan Ričko**

Mentor: akademik prof. dr. Branko Stanovnik

Sinteza potencialnih organokatalizatorjev za asimetrično sintezo na osnovi kafe

Datum zagovora: 7. 9. 2012

**Melita Rutar**

Mentor: prof. dr. Marjan Veber

Somentor: viš. znan. sod. dr. Jernej Iskra

Selektivnost oksidativnega bromiranja alkenov v vodnem mediju

Datum zagovora: 22. 8. 2012

**Aleš Savnik**

Mentor: prof. dr. Marjan Veber

Somentor: doc. dr. Aleš Podgornik

Vpliv strukture monolita in modifikacije z dietilaminom na njegove mehanske in hidrodinamske lastnosti

Datum zagovora: 20. 9. 2012

**Alen Sevšek**

Mentor: prof. dr. Jurij Svete

Stereoselektivna sinteza in pretvorbe (1*S*,4*S*,3*E*)-3-benziliden-1,7,7-trimetilbicyklo[2.2.1]heptan-2-onov

Datum zagovora: 20. 9. 2012

**Alenka Sinur**

Mentorica: doc. dr. Marija Zupančič

Mobilnost kovin v jalovini rudnika cinka in svinca Sasa

Datum zagovora: 30. 1. 2012

**Špela Smukavec**

Mentor: doc. dr. Bojan Kozlevčar

Kobaltove spojine z bis(3,5-dimetilpirazol-1-il)ocetno kislino s sintezo v etanolu

Datum zagovora: 21. 12. 2012

**Matej Štefančič**

Mentor: prof. dr. Jurij Svete

Sinteza novih derivatov azacikloserina

Datum zagovora: 7. 2. 2012

**Neven Šverko**

Mentor: prof. ddr. Boris Turk

Primerjava izražanja in analiza aktivnosti rekombinantnega človeškega in mišjega katepsina L

Datum zagovora: 13. 4. 2012

**Andreja Umek**

Mentorica: prof. dr. Ksenija Kogej

Sipanje svetlobe v vodnih raztopinah ataktične polimetakrilne kisline v prisotnosti NaCl

Datum zagovora: 8. 6. 2012

**Alen Vižintin**

Mentor: doc. dr. Franc Požgan

Regioselektivno ariliranje benzojskih kislin in njihovih derivatov katalizirano z rutenijevimi(II) kompleksi

Datum zagovora: 4. 9. 2012

## KEMIJSKO IZOBRAŽEVANJE

### **Aleš Drobnič**

Mentor: akademik prof. dr. Branko Stanovnik

Sinteza derivatov 1,2,6,8-tetraazaspiro[4.4]non-1-ena in 1-oksa-2,6,8-triazaspiro-[4.4]non-3-ena z 1,3-dipolarnimi cikloadicijami na 1-acil-5-[(Z)-cianometiliden]-3-metilimidazolidin-2,4-dion

Datum zagovora: 29. 2. 2012

### **Ines Klakočar**

Mentorica: prof. dr. Helena Prosen

Določanje nekaterih oksidiranih in nitriranih derivatov PAH na trdnih delcih

Datum zagovora: 5. 7. 2012

### **Tina Osterman**

Mentorica: prof. dr. Nataša Bukovec

Kritična ocena uporabnosti sredstev za razbarvanje pri določanju Cr(VI) v vzorcih usnja z 1,5-difenilkarbazid spektrofotometrično metodo

Datum zagovora: 27. 7. 2012

## BIOKEMIJA

### **Špela Binter**

Mentorica: prof. dr. Tatjana Avšič-Županc

Določitev koncentracije hantavirusov Puumala, Dobrava in Saarema v tkivih naravnih gostiteljev v Sloveniji

Datum zagovora: 12. 6. 2012

### **Franja Božič**

Mentor: prof. dr. Jože Pungerčar

Vpliv človeške sekretorne fosfolipaze A2 skupine IIA na rast celic raka dojke

Datum zagovora: 7. 2. 2012

### **Diana Cviič**

Mentor: prof. dr. Darko Černe

Preučevanje izražanja gena *SREBF1* v nedrobnoceličnem pljučnem rakavem tkivu

Datum zagovora: 20. 6. 2012

### **Barbara Dovgan**

Mentorica: prof. dr. Jasna Štrus

Ugotavljanje citotoksičnega vpliva biomaterialov na primarne humane celične kulture in celično linijo L929

Datum zagovora: 17. 2. 2012

### **Teja Gregorc**

Mentorica: prof. dr. Vladka Čurin Šerbec

Določanje celokupnih proteinov, IgA in protiteles proti IgA v opranih eritrocitnih komponentah ter krvni plazmi

Datum zagovora: 3. 9. 2012

**Katarina Gros**

Mentor: prof. dr. Zoran Grubič

Molekularni mehanizmi signaliziranja IL-6 pri regeneraciji človeške skeletne mišice *in vitro*

Datum zagovora: 31. 5. 2012

**Valerija Hladnik**

Mentorica: doc. dr. Irena Kralj Cigić

Karakterizacija klorofilina

Datum zagovora: 10. 9. 2012

**Tina Ilc**

Mentor: prof. dr. Janez Plavec

Somentorica: doc. dr. Lea Spindler

Karakterizacija G-kvadrupleksov z GC-konci

Datum zagovora: 27. 9. 2012

**Barbara Jenko**

Mentorica: prof. dr. Ana Plemenitaš

Somentorica: prof. dr. Vita Dolžan

Vpliv genetske variabilnosti prenašalcev metotreksata na zdravljenje revmatoidnega artritisa

Datum zagovora: 3. 9. 2012

**Mojca Juretič**

Mentor: prof. dr. Darko Černe

Merjenje sproščanja ATP in agregacije trombocitov z lumiagregometrom

Datum zagovora: 20. 6. 2012

**Tjaša Kadiš**

Mentorica: prof. dr. Jana Lukač Bajalo

Odvisnost koncentracije anti-Müllerjevega hormona v vzorcih krvnega seruma od časa in temperature

Datum zagovora: 21. 8. 2012

**Saša Kajdič**

Mentorica: prof. dr. Polona Žnidaršič Plazl

Somentor: doc. dr. Aleš Gasparič

Študij nitrilaz in ketoreduktaz za izvedbo biotransformacij izbranih farmacevtskih intermediatov

Datum zagovora: 21. 9. 2012

**Elena Kavčič**

Mentor: prof. dr. Marjan Veber

Akumulacija svinca in kadmija v zelenjavi

Datum zagovora: 25. 5. 2012

**Vojč Kocman**

Mentor: prof. dr. Janez Plavec

Nenavadna topologija oligonukleotida iz promotorske regije gena *itsn1*

Datum zagovora: 21. 5. 2012

---

**Mojca Kokalj Imširović**

Mentorica: prof. dr. Vladka Čurin Šerbec

Somentorica: znan. sod. dr. Maša Kandušer

Vpliv sestave medija na elektrofuzijo v *in vitro* pogojih

Datum zagovora: 13. 12. 2012

**Tina Lenče**

Mentor: prof. dr. Marko Dolinar

Vpliv heterologno izraženih bakterijskih hemoglobinov na produkcijo FK506 v bakteriji *Streptomyces tsukubaensis*

Datum zagovora: 6. 7. 2012

**Mateja Malovrh**

Mentorica: prof. dr. Helena Prosen

Določitev aktivnih spojin zelišča *Chelidonium majus* in njihova stabilnost

Datum zagovora: 9. 7. 2012

**Marko Mihelič**

Mentor: prof. dr. Aleksander Pavko

Somentor: doc. dr. Aleš Gasparič

Izdelava laboratorijskega modela za testiranje aktivnosti ketoreduktaz pri njihovi večkratni uporabi v procesih biokatalize

Datum zagovora: 15. 6. 2012

**Goran Miličič**

Mentorica: prof. dr. Brigita Lenarčič

Identifikacija in karakterizacija evolucijsko ohranjenega omrežja aminokislinskih ostankov v stefinu B

Datum zagovora: 17. 5. 2012

**Maja Ogrin**

Mentorica: doc. dr. Irena Kralj Cigić

Vzpostavitev mukopermeabilnostnih testov za farmacevtsko zanimive proteine in njihove formulacije

Datum zagovora: 8. 11. 2012

**Nives Oprešnik**

Mentor: prof. dr. Peter Bukovec

Priprava in karakterizacija soli ksanturinske kisline

Datum zagovora: 17. 5. 2012

**Nina Pekolj**

Mentorica: doc. dr. Andreja Žgajnar Gotvajn

Določanje strupenosti in razgradljivosti hidrofobnih ionskih tekočin

Datum zagovora: 9. 7. 2012

**Vid Puž**

Mentorica: prof. dr. Brigita Lenarčič

Biokemijska in evolucijska analiza tiroglobulinskih domen tipa 1 iz spužve rodu *Reniera*

Datum zagovora: 12. 9. 2012

**Sandra Ropret**

Mentor: prof. dr. Jože Pungerčar

Vpliv amoditina L in njegove encimsko aktivne mutante na rast celic raka dojke

Datum zagovora: 9. 7. 2012

**Vesna Štorgel**

Mentor: prof. dr. Radovan Komel

Preiskava polimorfizmov v genih HTR2A in CACNA1C pri žrtvah samomora

Datum zagovora: 31. 5. 2012

**Erika Šuligoj**

Mentor: prof. dr. Radovan Komel

Preizkušanje možnih inhibitorjev benzoat 4-monooksigenaze kot novih protiglivnih učinkovin

Datum zagovora: 29. 2. 2012

**Vesna Švarc**

Mentorica: prof. dr. Vladka Čurin Šerbec

Razvoj metod za opredelitev izotopskih značilnosti protiteles proti infliksimabu

Datum zagovora: 13. 4. 2012

**Nataša Urankar**

Mentor: prof. dr. Marjan Veber

Razvoj in validacija HPLC analitskega postopka za določanje aktivne učinkovine in razkrojnih produktov v farmacevtskem izdelku

Datum zagovora: 11. 10. 2012

**Vojka Vajdič**

Mentorica: doc. dr. Barbara Ostanek

Uvedba fragmentne analize za genotipizacijo polimorfizma ponovitev (TA)<sub>n</sub> v genu za uridindifosfat-glukuroniltransferazo 1A1

Datum zagovora: 17. 2. 2012

**Živa Vučkovič**

Mentorica: prof. dr. Vladka Čurin Šerbec

Uvedba avtomatiziranega postopka za štetje celic v biotehnoških procesih ter sledenje specifične proizvodnje monoklonskih protiteles

Datum zagovora: 20. 8. 2012

**Polona Zbašnik**

Mentor: prof. dr. Peter Bukovec

Priprava in karakterizacija cinkovega(II) in platinovega(II) ksanturenata

Datum zagovora: 5. 12. 2012

## **KEMIJSKO INŽENIRSTVO**

**Rok Ambrožič**

Mentor: prof. dr. Marin Berovič

Somentor: prof. dr. Mojmir Wondra

Vpliv termovinifikacije in podaljšane maceracije na kakovost rdečih vin

Datum zagovora: 18. 9. 2012

---

**Branko Bogdan**

Mentor: prof. dr. Janvit Golob

Vpliv procesnih parametrov na raztapljanje učinkovine *fujimycin*

Datum zagovora: 11. 4. 2012

**Peter Brezavšek**

Mentor: prof. dr. Jadran Maček

Vpliv sestave veziva in kemijskih dodatkov na reološke lastnosti svežih cementnih past in malt

Datum zagovora: 11. 4. 2012

**Azra Dedić**

Mentorica: prof. dr. Polona Žnidaršič Plazl

Ekstrakcija proteinov v mikrofluidnih napravah z dvofaznimi vodnimi sistemi

Datum zagovora: 28. 5. 2012

**Luka Dolenc**

Mentor: prof. dr. Igor Plazl

Priprava naprednih substratov za sintezo ogljikovih nanocev

Datum zagovora: 13. 6. 2012

**Blaž Gerbec**

Mentor: prof. dr. Marin Berovič

Somentor: prof. dr. Samo Kreft

Kultivacija glive *Hericium erinaceus* na trdnem substratu in določitev vsebnosti erinacina A

Datum zagovora: 10. 12. 2012

**Katja Gorenc**

Mentor: prof. dr. Janvit Golob

Somentor: doc. dr. Blaž Likozar

Rast mikroalge *Chlorella vulgaris* pri različnih začetnih koncentracijah nutrientov

Datum zagovora: 22. 6. 2012

**Dimitrij Ješić**

Mentor: prof. dr. Igor Plazl

Vpliv katalitskega acetiliranja na akustične lastnosti lesa

Datum zagovora: 9. 11. 2012

**Janja Klezin**

Mentor: prof. dr. Janvit Golob

Separacija eteričnih olj hmeljnih kultivarjev

Datum zagovora: 26. 10. 2012

**Jasna Kocutar**

Mentor: prof. dr. Janvit Golob

Razvoj premazne mešanice za ink-jet papir

Datum zagovora: 28. 2. 2012

**Sara Kozenburger**

Mentor: prof. dr. Marin Berovič

Možnosti uporabe respiracije v tehnologiji vina

Datum zagovora: 12. 11. 2012

**Luka Kranjčec**

Mentor: prof. dr. Matjaž Krajnc

Vpliv komponent na izkoristek elektrokemijskih sončnih celic

Datum zagovora: 22. 10. 2012

**Tajda Krč**

Mentorica: doc. dr. Andreja Zupančič Valant

Vpliv staranja na reološke lastnosti gumiranega bitumna

Datum zagovora: 3. 7. 2012

**Đorđe Lovrić**

Mentor: prof. dr. Aleksander Pavko

Eksperimentalna verifikacija modela šaržne adsorpcije vankomicina

Datum zagovora: 11. 7. 2012

**Helena Lukač**

Mentor: prof. dr. Aleksander Pavko

Uporaba procesnega bližnje infrardečega spektrometra pri spremljanju sušenja v vrtinčno slojnim sušilniku

Datum zagovora: 11. 7. 2012

**Slađana Maksimović**

Mentor: prof. dr. Matjaž Krajnc

Vpliv nekaterih procesnih parametrov na kontinuirno polimerizacijo UV zamrežljivih akrilnih prepolimerov

Datum zagovora: 13. 1. 2012

**Polona Malović**

Mentor: prof. dr. Matjaž Krajnc

Somentor: doc. dr. Zdenko Časar

Študij kristalizacije za pripravo optično čistega intermedata v sintezni fesoterodina

Datum zagovora: 26. 10. 2012

**Blaž Mekuč**

Mentorica: prof. dr. Urška Šebenik

Pripajanje anhidrida maleinske kisline na etilen-propilen-dienski kavčuk v masi

Datum zagovora: 18. 5. 2012

**Nataša Miložič**

Mentor: prof. dr. Igor Plazl

Makroskopski opis transportnih pojavov v mikroreaktorju

Datum zagovora: 24. 8. 2012

**Jan Pavšič**

Mentorica: prof. dr. Polona Žnidaršič Plazl

Uporaba dvofaznega sistema ionska tekočina/heptan za encimsko katalizirano esterifikacijo v mikrofluidni napravi

Datum zagovora: 24. 8. 2012

**Saša Petkovšek**

Mentorica: doc. dr. Andreja Žgajnar Gotvajn

Produkcija bioplina iz alg *Chlorella vulgaris* bogatih z lipidi

Datum zagovora: 6. 7. 2012

---

**Nina Recek**

Mentorica: doc. dr. Polona Žnidaršič Plazl

Vpliv mikroniziranih delcev na proizvodnjo ekstracelularnih encimov glive *Trametes versicolor*

Datum zagovora: 19. 4. 2012

**Jan Rakuš**

Mentor: prof. dr. Marin Berovič

Kultivacija glive *Trametes versicolor* v horizontalnem mešalnem reaktorju in izolacija njenih farmacevtskih učinkovin

Datum zagovora: 21. 9. 2012

**Tjaša Slatinšek**

Mentor: prof. dr. Janvit Golob

Raziskave pogojev za rast oljetvorne alge *Chlorella vulgaris*

Datum zagovora: 24. 5. 2012

**Matej Srabotič**

Mentor: prof. dr. Matjaž Krajnc

Načrtovanje eksperimenta pri sintezi ultravijolično zamrežljivih lepil občutljivih na pritisk

Datum zagovora: 26. 1. 2012

**Aleš Stambolić**

Mentor: prof. dr. Marjan Marinšek

Priprava magnetnih nanodelcev na osnovi kobaltovega ferita ali magnetita

Datum zagovora: 22. 10. 2012

**Andreja Starc**

Mentor: prof. dr. Marin Berovič

Barvila kot indikatorji oksidacijske sposobnosti gliv

Datum zagovora: 21. 9. 2012

**Dominik Tafi**

Mentor: prof. dr. Urška Šebenik

Vpliv površinsko aktivnih sredstev na stabilnost suspenzije pri polšaržni in kontinuirni suspenzijski polimerizaciji mikrosfernih lepil

Datum zagovora: 18. 12. 2012

**Luka Uršič**

Mentor: prof. dr. Aleksander Pavko

Nanofiltracija echinocandina v organskem topilu

Datum zagovora: 21. 12. 2012

**Selma Žrt**

Mentor: prof. dr. Marjan Marinšek

Priprava in merjenje katalitske aktivnosti Pd-C in Pd/Cu-C disperzij

Datum zagovora: 14. 6. 2012



## VISOKOŠOLSKA ŠTUDIJSKA PROGRAMA

### KEMIJSKA TEHNOLOGIJA

#### **Bojan Bratuž**

Mentorica: doc. dr. Andreja Zupančič Valant

Vpliv polnil na reološke lastnosti polisulfidnih tesnilnih mas

Datum zagovora: 10. 1. 2012

#### **Valerija Brezovar**

Mentorica: prof. dr. Urška Šebenik

Kemijska kinetika aciliranja anilina v šaržnem reaktorju

Datum zagovora: 20. 9. 2012

#### **Dino Brus**

Mentor: prof. dr. Marjan Marinšek

Solvotermalna pretvorba cinkovega hidroksid karbonata in cinkovega hidroksid nitrata v cinkov oksid

Datum zagovora: 18. 9. 2012

#### **Štefan Bukovšek**

Mentorica: doc. dr. Ana Lakota

Delovne karakteristike sintrane plošče kot distributorja plina v koloni z mehurčki

Datum zagovora: 20. 9. 2012

#### **Anže Čavić**

Mentor: doc. dr. Franc Perdih

Interakcije  $\beta$ -diketonatov in organotitanovih fluoridov z elektrondonorji

Datum zagovora: 29. 6. 2012

#### **Darko Djokić**

Mentor: prof. dr. Aleksander Pavko

Vpliv gojitvenih pogojev na rast in metabolizem sesalskih celic v bioprocesu

Datum zagovora: 21. 6. 2012

#### **Anja Djukić**

Mentorica: prof. dr. Polona Žnidaršič Plazl

Proizvodnja L-jabolčne kisline v mikroreaktorjih z imobilizirano kvasovko

*Kluyveromyces marxianus*

Datum zagovora: 13. 7. 2012

#### **Marjana Doblekar**

Mentor: doc. dr. Franc Požgan

Somentor: prof. dr. David Stopar

Sinteza in reološke lastnosti karboksimetil celuloznih tozilatov

Datum zagovora: 2. 7. 2012

#### **Tajda Dusper**

Mentorica: doc. dr. Andreja Zupančič Valant

Reološke lastnosti vodnih raztopin HPMC ob prisotnosti različnih soli

Datum zagovora: 20. 9. 2012

---

**Simon Erjavec**

Mentorica: prof. dr. Helena Prosen

Kvalifikacija in validacija laboratorijskega kombiniranega instrumenta za meritve gostote in lomnega količnika

Datum zagovora: 10. 4. 2012

**Tea Florjančič**

Mentor: doc. dr. Bojan Kozlevčar

Vpliv nasprotnih ionov pri sintezi kobaltovih spojin z bis(3,5-dimetilpirazol-1-il) očetno kislino v metanolu

Datum zagovora: 5. 7. 2012

**Tanja Goršak**

Mentorica: doc. dr. Klementina Zupan

Somentor: prof. dr. Darko Makovec

Hidrotermalne kemijske reakcije v sistemu lantan – stroncij – mangan – kisik

Datum zagovora: 17. 1. 2012

**Franci Grčman**

Mentor: prof. dr. Anton Meden

Določevanje kristaliničnosti zdravilnih učinkovin z rentgensko difrakcijo

Datum zagovora: 15. 6. 2012

**Janja Jankovič**

Mentorica: doc. dr. Klementina Zupan

Karakterizacija mikrostrukture varistorske keramike na osnovi ZnO

Datum zagovora: 27. 9. 2012

**Mateja Jeršin**

Mentorica: doc. dr. Ana Lakota

Somentor: prof. dr. Albin Pintar

Študij učinkovitosti TiO<sub>2</sub> nanovlaken v procesu katalitske mokre oksidacije onesnažila bisfenola A

Datum zagovora: 29. 6. 2012

**Anja Kabur**

Mentorica: prof. dr. Helena Prosen

Določevanje skupnih fluoridov v zemlji z alkalnim razklopom in fluoridno ionoselektivno elektrodo

Datum zagovora: 13. 12. 2012

**Nastja Kolenc**

Mentorica: prof. dr. Urška Šebenik

Vpliv dodatka ogljikovih nanocevk na sintezo UV zamrežljivih akrilatnih lepil

Datum zagovora: 12. 4. 2012

**Katja Kralj**

Mentorica: prof. dr. Helena Prosen

Določanje benzo(a)pirena v različnih vzorcih

Datum zagovora: 29. 10. 2012

**Petra Lovše**

Mentor: doc. dr. Bojan Kozlevčar

Koordinacijske spojine bakra, kobalta in cinka s piridikal-oksimum, derivatom vitamina B6

Datum zagovora: 25. 10. 2012

**Miha Luzar**

Mentorica: doc. dr. Irena Kralj Cigić

Določanje in odstranjevanje formaldehida iz mikrokapsul

Datum zagovora: 5. 10. 2012

**Luka Mačkovič**

Mentor: doc. dr. Andrej Pevec

Sinteza in karakterizacija nekaterih pirimidinijevih heksafluorosilikatov

Datum zagovora: 3. 10. 2012

**Damir Mamić**

Mentor: prof. dr. Aleksander Pavko

Metode za določanje biomase med gojenjem CHO celic

Datum zagovora: 29. 6. 2012

**Dragan Marić**

Mentor: prof. dr. Marjan Marinšek

Izdelava tankih plasti titanovega dioksida iz suspenzij nanodelcev in določitev njihovih fotokatalitskih aktivnosti

Datum zagovora: 29. 10. 2012

**Martina Martić**

Mentorica: doc. dr. Andreja Žgajnar Gotvajn

Vrednotenje vpliva izcednih vod komunalne deponije na višje rastline

Datum zagovora: 14. 6. 2012

**Simona Menič**

Mentorica: doc. dr. Amalija Golobič

Somentorica: prof. dr. Nataša Zabukovec

Sinteza in karakterizacija novih kovinsko-organskih materialov za bioaplikacije

Datum zagovora: 5. 9. 2012

**Teja Mižigoj**

Mentor: doc. dr. Bogdan Štefane

Sinteza derivatov benzojske in *L*-piroglutaminske kisline

Datum zagovora: 18. 4. 2012

**Nastja Muhič**

Mentorica: prof. dr. Helena Prosen

Validacija metode za določanje kloriranih spojin v vodi s plinsko kromatografijo z detektorjem na zajetje elektronov

Datum zagovora: 13. 7. 2012

**Jasna Novak**

Mentor: doc. dr. Franc Perdih

Cis-trans izomerija pri koordinacijskih spojinah z 4,4,4-trifluoro-1-fenilbutan-1,3-dionatnim ligandom

Datum zagovora: 21. 11. 2012

---

**Teja Novak**

Mentorica: doc. dr. Andreja Zupančič Valant

Vpliv temperature na reološke lastnosti polisaharidnih raztopin

Datum zagovora: 12. 7. 2012

**Mensud Omerović**

Mentor: prof. dr. Aleksander Pavko

Optimizacija procesa čiščenja antibiotika z industrijsko kromatografijo

Datum zagovora: 13. 3. 2012

**Karmen Pate**

Mentorica: prof. dr. Nataša Gros

Validacija analiznega postopka za določevanje učinkovin in njihovih sorodnih substanc v farmacevtskih izdelkih

Datum zagovora: 28. 2. 2012

**Milena Pajić**

Mentorica: prof. dr. Urška Šebenik

Somentorica: prof. dr. Marija Kosec

Priprava kompozita piezoelektrik-akrilatni polimer z brizgalnim tiskanjem

Datum zagovora: 11. 5. 2012

**Ana Pavčič**

Mentorica: prof. dr. Urška Šebenik

Šaržna emulzijska polimerizacija vinilacetata

Datum zagovora: 13. 6. 2012

**Gregor Podržaj**

Mentorica: prof. dr. Nataša Gros

Validacija HPLC analizne metode za medprocesno kontrolo proizvodnje zdravilne učinkovine

toltrazuril

Datum zagovora: 29. 8. 2012

**Peter Požun**

Mentorica: prof. dr. Urška Šebenik

Vakuumsko sušenje izrabljenih ionsko izmenjevalnih smol

Datum zagovora: 21. 9. 2012

**Simona Primožič**

Mentorica: prof. dr. Helena Prosen

Delna validacija metode za določevanje spojin arome vina

Datum zagovora: 28. 3. 2012

**Tomaž Režun**

Mentor: doc. dr. Andreja Zupančič Valant

Določanje reoloških lastnosti vodnih raztopin za pripravo papirja

Datum zagovora: 19. 4. 2012

**Simona Rupnik**

Mentorica: prof. dr. Urška Šebenik

Somentor: prof. dr. Matjaž Kunaver

Sinteza poliestrov iz utekočinjenega lesa

Datum zagovora: 5. 9. 2012

**Jaša Rudolf**

Mentor: prof. dr. Marjan Marinšek  
Fotokatalitska cepitev vode  
Datum zagovora: 17. 2. 2012

**Matic Skornšek**

Mentor: akademik prof. dr. Janez Levec  
Priprava biodizla z različnimi heterogenimi katalizatorji  
Datum zagovora: 26. 9. 2012

**Anže Stadler**

Mentor: prof. dr. Marin Berovič  
Optimizacija centrifugiranja sesalske celične kulture v pilotnem merilu bioprocasa  
Datum zagovora: 18. 12. 2012

**Tadej Staudacher**

Mentorica: doc. dr. Barbara Novosel  
Katalitski razpad metana na nikljevih prahovih  
Datum zagovora: 4. 9. 2012

**Larisa Suhodolčan**

Mentor: prof. dr. Marjan Marinšek  
Elektrokemijska sinteza, karakterizacija in magnetne lastnosti nanocevk na osnovi železo-paladija  
Datum zagovora: 4. 9. 2012

**Andrej Šinkovec**

Mentorica: prof. dr. Polona Žnidaršič Plazl  
Vpliv lakaz na beljenje bombaža  
Datum zagovora: 4. 10. 2012

**Žiga Štirn**

Mentor: prof. dr. Marijan Kočever  
Cikoadicija derivatov maleimida na 2*H*-piran-2-one  
Datum zagovora: 27. 9. 2012

**Mateja Tišler**

Mentor: doc. dr. Franc Perdih  
Koordinacijske spojine z indol-3-ocetno in indol-3-propanojsko kislino  
Datum zagovora: 3. 10. 2012

**Mateja Tutin**

Mentorica: prof. dr. Urška Šebenik  
Stabilnost poliuretanskega prepolimera v aerosolnih razpršilcih  
Datum zagovora: 14. 12. 2012

**Tina Zabukovec**

Mentorica: prof. dr. Brigita Lenarčič  
Priprava mutiranih oblik zunajcelične kalcij-vezavne domene proteina SMOC-1  
Datum zagovora: 21. 9. 2012

---

**Jurij Zakotnik**

Mentorica: prof. dr. Urška Šebenik

Vpliv tiksotropnih sredstev in procesnih parametrov na reološke lastnosti nenasičenih poliesterskih smol

Datum zagovora: 13. 6. 2012

**Gašper Zgonc**

Mentor: doc. dr. Andrej Pevec

Sinteza in karakterizacija nekaterih hidroksipiridinijevih heksafluorotitanatov

Datum zagovora: 27. 9. 2012

**Katja Zorko**

Mentorica: doc. dr. Klementina Zupan

Uporaba konfokalne mikroskopije pri analizi mikrostrukture vzorcev

Datum zagovora: 5. 9. 2012

**Vesna Zorko**

Mentor: doc. dr. Drago Kočar

Razvoj kromatografske metode za ovrednotenje stanja polistirenskih in poliuretanskih materialov

Datum zagovora: 27. 3. 2012

**Ivan Žibert**

Mentor: prof. dr. Marjan Veber

Kvalitativno in kvantitativno določanje dimetikona v tabletah in oralnih kapljicah z infrardečo spektroskopijo

Datum zagovora: 25. 9. 2012

**VARSTVO PRI DELU IN POŽARNO VARSTVO****Admir Babić**

Mentorica: doc. dr. Barbara Novosel

Somentor: prof. dr. Marjan Bilban

Varnost nanotehnologije

Datum zagovora: 21. 9. 2012

**Klemen Bartol**

Mentor: doc. dr. Jože Horvat

Ocena tveganja gozdnega delavca in uporaba osebne varovalne opreme

Datum zagovora: 7. 9. 2012

**Ivo Bohte**

Mentor: doc. dr. Jože Šrekl

Zagotavljanje varnega dela med izvajanjem plana neprekinjenega poslovanja

Datum zagovora: 22. 5. 2012

**Vesna Brkljačič**

Mentor: doc. dr. Mitja Robert Kožuh

Analiza delovnih pogojev v proizvodnji komponent za avtomobilsko industrijo

Datum zagovora: 23. 3. 2012

**Petra Brovč**

Mentor: doc. dr. Mitja Robert Kožuh  
Problematika ravnanja z odpadki na deponiji Volče  
Datum zagovora: 28. 9. 2012

**Dejan Cigale**

Mentor: doc.dr. Mitja Robert Kožuh  
Geotermalna energija  
Datum zagovora: 28. 6. 2012

**David Curk**

Mentor: prof. dr. Alojz Muhič  
Varnostni načrt za gradbišče kompresorska postaja Ajdovščina  
Datum zagovora: 23. 3. 2012

**Nina Česnik**

Mentor: doc. dr. Mitja Robert Kožuh  
Uvajanje standarda OHSAS 18001 v avtomobilsko industrijo  
Datum zagovora: 21. 9. 2012

**Darja Dežman**

Mentor: doc. dr. Boris Jerman  
Analiza varnosti tabletirnega stroja  
Datum zagovora: 23. 3. 2012

**Klara Jerman**

Mentor: pred. dr. Aleš Jug  
Opredelitev požarno-varnostnih zahtev v domovih za starejše  
Datum zagovora: 28. 6. 2012

**Urška Knafeljc**

Mentorica: doc. dr. Marija Molan  
Odsotnost z dela v regiji Novo mesto - vzroki, posledice in predlogi ukrepov  
Datum zagovora: 21. 9. 2012

**Mateja Kladnik**

Mentor: doc. dr. Mitja Robert Kožuh  
Hrup na delovnem mestu orodjarja v podjetju Tajfun Planina d.o.o.  
Datum zagovora: 22. 5. 2012

**Božo Klanjčar**

Mentor: prof. dr. Marjan Bilban  
Vpliv kajenja na delovnem mestu  
Datum zagovora: 7. 9. 2012

**Tomaž Kramar**

Mentorica: doc. dr. Barbara Novosel  
Varno delo z nevarnimi kemikalijami v proizvodnem procesu  
Datum zagovora: 9. 11. 2012

**Sabina Kroneker**

Mentor: dr. Aleš Jug  
Analiza požarne varnosti z predlogom sprememb v Mlekarni Celeia d.o.o.  
Datum zagovora: 22. 5. 2012

---

**Nataša Kuhar**

Mentor: doc. dr. Mitja Robert Kožuh  
Hrup in po meri narejena zaščita sluha  
Datum zagovora: 22. 5. 2012

**Andrej Marolt**

Mentor: prof. dr. Marjan Bilban  
Nočno delo v promociji zdravja  
Datum zagovora: 7. 9. 2012

**Darko Merela**

Mentorica: doc. dr. Barbara Novosel  
Označevanje, pakiranje in razvrščanje nevarnih snovi v podjetju s trgovsko verigo  
Datum zagovora: 22. 5. 2012

**Tadej Mesojedec**

Mentor: doc. dr. Mitja Robert Kožuh  
Pasivna hiša  
Datum zagovora: 28. 6. 2012

**Grega Mihalić**

Mentor: doc. dr. Mitja Robert Kožuh  
Predhodno varstvo v slovenski zakonodaji  
Datum zagovora: 7. 9. 2012

**Mirjam Muren**

Mentor: doc. dr. Jože Šrekl  
Varnost otrok na zunanjih igralih in igriščih  
Datum zagovora: 22. 5. 2012

**Andraž Nadler**

Mentorica: doc. dr. Marija Molan  
Ohranjanje dobrega počutja prvih posredovalcev  
Datum zagovora: 12. 7. 2012

**Anja Naglič**

Mentor: doc. dr. Mitja Robert Kožuh  
Jedrske elektrarne; Černobil (1986) – Fukušima (2011)  
Datum zagovora: 22. 5. 2012

**Jernej Novak**

Mentor: doc. dr. Mitja Robert Kožuh  
Učinkovitost centralne čistilne naprave Trbovlje  
Datum zagovora: 9. 11. 2012

**Tina Ortar**

Mentor: doc. dr. Jožef Horvat  
(Ne)uporaba osebne varovalne opreme kot dejavnik odškodninske odgovornosti ali  
soodgovornosti delavca in delodajalca za nezgode pri delu  
Datum zagovora: 21. 12. 2012



**Snežana Pavlović**

Mentor: pred. dr. Aleš Jug

Usposabljanje za izvajanje ukrepov varstva pred požarom v luči nove zakonodaje

Datum zagovora: 21. 9. 2012

**Bogdan Pirc**

Mentor: prof. dr. Gregor Bizjak

Periodične kontrolne meritve osvetljenosti v prodajalni

Datum zagovora: 28. 6. 2012

**Simona Pšajd**

Mentor: pred. dr. Aleš Jug

Gasilnik na vodo

Datum zagovora: 23. 3. 2012

**Robert Rupnik**

Mentor: pred. dr. Aleš Jug

Požarna varnost v stavbah kulturne dediščine

Datum zagovora: 23. 3. 2012

**Franc Ružič**

Mentorica: doc. dr. Barbara Novosel

Zagotavljanje varnega in zdravega dela v enoti za zamrzovanje in shranjevanje

Datum zagovora: 21. 12. 2012

**Jaka Selan**

Mentor: doc. dr. Jože Šrekl

Usposabljanje delavcev za varno delo z viličarjem

Datum zagovora: 22. 5. 2012

**Jan Sikošek**

Mentorica: doc. dr. Barbara Novosel

Vpliv globalno harmoniziranega sistema klasifikacije kemikalij na varnostno kulturo

Datum zagovora: 28. 6. 2012

**Janja Smole**

Mentor: doc. dr. Mitja Robert Kožuh

Ločevanje in predelava odpadkov v Sloveniji

Datum zagovora: 7. 9. 2012

**Anej Škerl**

Mentor: doc. dr. Mitja Robert Kožuh

Motivacijski ukrepi in stališča delavcev v proizvodnih podjetjih

Datum zagovora: 12. 7. 2012

**Petra Šketelj**

Mentorica: doc. dr. Barbara Novosel

Varna uporaba rakotvornih, mutagenih in teratogenih snovi

Datum zagovora: 23. 3. 2012

**Gašper Šporar**

Mentorica: doc. dr. Barbara Novosel

Način varnega skladiščenja nevarnih kemikalij

Datum zagovora: 22. 5. 2012

---

**Rok Tomažič**

Mentor: pred. dr. Aleš Jug

Določanje števila oseb za izvajanje požarne straže glede na zahteve zakona o varstvu pred požarom

Datum zagovora: 12. 7. 2012

**Goran Turudić**

Mentor: pred. dr. Aleš Jug

Reševanje v gorah

Datum zagovora: 7. 9. 2012

**Matjaž Valenčič**

Mentor: doc. dr. Mitja Robert Kožuh

Vplivi na okolje pri izkoriščanju obnovljivih virov energije

Datum zagovora: 23. 3. 2012

**Robert Vrlinič**

Mentor: doc. dr. Boris Jerman

Zagotavljanje varnosti po sistemu »zakleni in označi«

Datum zagovora: 22. 5. 2012

**Franjo Vršič**

Mentor: doc. dr. Boris Jerman

Periodičen pregled strojev v papirni industriji

Datum zagovora: 22. 5. 2012

**Domen Zalar**

Mentor: pred. dr. Aleš Jug

Požarna zaščita strežniških prostorov

Datum zagovora: 9. 11. 2012

**Janja Zorc**

Mentorica: doc. dr. Barbara Novosel

Obvladovanje sprememb razvrstitev nevarnih kemikalij v farmacevtski industriji

Datuma zagovora: 21. 9. 2012

**Anita Zrimšek**

Mentor: doc. dr. Mitja Robert Kožuh

Uvajanje elektronskega usposabljanja za varstvo pri delu in požarno varstvo

Datum zagovora: 28. 6. 2012

**Klavdija Žunič**

Mentor: prof. dr. Marjan Bilban

Promocija zdravja za delavce, zaposlene pri Pošti Slovenije, d. o. o.

Datum zagovora: 21. 12. 2012

## MAGISTERIJI – PREDBOLONJSKI PROGRAM

### KEMIJA

#### **Jerica Ivanoš**

Mentor: prof. dr. Marjan Veber

Načrtovanje spremljanja ostankov fitofarmaceutskih sredstev v sadju in zelenjavi

Datum zagovora: 19. 4. 2012

#### **Janja Medved**

Mentorica: prof. dr. Helena Prosen

Razvoj avtomatizirane metode za določevanje olmesartana v humani plazmi

Datum zagovora: 23. 3. 2012

#### **Martina Rozman**

Mentorica: doc. dr. Irena Kralj Cigić

Validacija čiščenja proizvodne opreme v farmacevtski industriji

Datum zagovora: 3. 7. 2012

## DOKTORATI – PREDBOLONJSKI PROGRAM

### KEMIJA

#### **Nenad Maraš**

Mentor: prof. dr. Marijan Kočevar

Reakcije fenolov s tetraalkilamonijevimi solmi in sinteza 3-acetamido- $\beta$ -rezorcinskih kislin s prilagojeno Kolbe-Schmittovo reakcijo

Datum zagovora: 25. 1. 2012

#### **Sebastijan Peljhan**

Mentor: viš. znan. sod. dr. Anton Kokalj

Somentor: prof. dr. Jože Koller

Simulacije mehanizma inhibicije benzotriazola kot inhibitorja korozije bakra v kloridnem mediju

Datum zagovora: 6. 3. 2012

#### **Vita Majce**

Mentor: prof. dr. Slovenko Polanc

Somentor: prof. dr. Stanislav Gobec

Načrtovanje, sinteza in vrednotenje diazenov ter njihovih analogov kot možnih inhibitorjev nekaterih encimov

Datum zagovora: 12. 3. 2012

#### **Jernej Baškovč**

Mentor: akademik prof. dr. Branko Stanovnik

Uporaba kombinatorne sinteze v pripravi mono in bicikličnih heterocikličnih sistemov

Datum zagovora: 20. 3. 2012

---

**Gordana Pirc**

Mentor: znan. sod. dr. Jernej Stare

Somentor: prof. dr. Anton Meden

Študij strukture in dinamike kristaliničnih materialov s periodičnimi kvantnokemijskimi metodami

Datum zagovora: 20. 3. 2012

**Alen Albreht**

Mentorica: prof. dr. Lucija Zupančič-Kralj

Somentorica: viš. znan. sod. dr. Irena Vovk

Separacija in identifikacija izoheksenilnaftazarinov iz laškega gadovca (*Echium italicum* L.) in vezava šikonina na izbrane beljakovine

Datum zagovora: 23. 3. 2012

**Marta Kasunič**

Mentorica: doc. dr. Amalija Golobič

Strukturna karakterizacija enodimenzionalnih zeolitov z dvanajstčlenskimi kanali in titanatnih keramik s praškovno difrakcijo

Datum zagovora: 23. 3. 2012

**Metka Hajzeri**

Mentorica: znan. sod. dr. Angela Šurca Vuk

Somentor: prof. dr. Boris Pihlar

Priprava in karakterizacija tankih plasti in elektrolitov za elektrokromne sklope

Datum zagovora: 30. 3. 2012

**Andrej Lajovic**

Mentor: prof. dr. Andrej Jamnik

Teorijske in eksperimentalne raziskave strukture enostavnih organskih tekočin in njihovih zmesi

Datum zagovora: 5. 4. 2012

**David Pahovnik**

Mentorica: prof. dr. Majda Žigon

Vpliv ionskih tekočin na nastanek nanostruktur polianilina

Datum zagovora: 20. 4. 2012

**Jaka Marušič**

Mentor: prof. dr. Jurij Lah

Termodinamika vezanja fragmentov protiteles na dejavnik tumorske nekroze alfa

Datum zagovora: 22. 6. 2012

**Andrej Ščavničar**

Mentor: prof. dr. Matevž Pompe

Določevanje biogenih aminov in nitrozaminov v ribjem mesu ter sirih

Datum zagovora: 22. 6. 2012

**Bojan Šarac**

Mentorica: prof. dr. Marija Bešter-Rogač

Vpliv temperature in dodanega elektrolita na termodinamiko micelizacije dodeciltrimetilamonijevega klorida

Datum zagovora: 28. 6. 2012

**Marija Čolović**

Mentor: prof. dr. Boris Orel

Priprava in uporaba trdnih elektrolitov na osnovi ionskih tekočin za fotoelektrokemijske celice

Datum zagovora: 29. 6. 2012

**Nataša Čelan Korošin**

Mentorica: prof. dr. Nataša Bukovec

Priprava in karakterizacija luminiscentnih aluminatov

Datum zagovora: 17. 9. 2012

**Tina Šmigovec Ljubič**

Mentorica: znan. sod. dr. Ema Žagar

Opredelitev linearnih in razvejanih blok-kopolimerov z dvodimenzionalno tekočinsko kromatografijo

Datum zagovora: 15. 10. 2012

**Simona Medvešček**

Mentor: prof. dr. Anton Meden

Vpliv karbonatov na hidratacijo portland cementa

Datum zagovora: 30. 11. 2012

## **MATERIALI**

**Peter Podbršček**

Mentorica: znan. svet. dr. Zorica Crnjak Orel

Somentor: prof. dr. Jadran Maček

Vpliv sinteznih pogojev na morfološke lastnosti materialov iz cinkovega oksida

Datum zagovora: 29. 2. 2012

## **KEMIJSKO INŽENIRSTVO**

**Andrej Pohar**

Mentor: prof. dr. Igor Plazl

Intenzifikacija kemijskih procesov z miniaturizacijo naprav

Datum zagovora: 7. 6. 2012

**Ines Mohorič**

Mentorica: prof. dr. Urška Šebenik

Anionska emulzijska polimerizacija ciklosiloksanov z odpiranjem obroča

Datum zagovora: 3. 12. 2012

## **KEMIJSKA TEHNOLOGIJA**

**Barbara Novosel**

Mentor: prof. dr. Jadran Maček

Vpliv sinteznih pogojev na morfološke lastnosti materialov iz cinkovega oksida

Datum zagovora: 25. 4. 2012

---

## DIPLOME – BOLONJSKI PROGRAM

### BOLONJSKI PROGRAMI 1. STOPNJE

#### UNIVERZITETNI ŠTUDIJSKI PROGRAM KEMIJA

**Jernej Bobnar**

Mentor: doc. dr. Franc Požgan

Sinteza tidentatnega 1,2,3-triazolskega liganda

Datum zagovora: 25. 9. 2012

**Jernej Jerebic**

Mentor: doc. dr. Matija Tomšič

Avtomatizacija potenciometrične titracije

Datum zagovora: 5. 9. 2012

**Boštjan Žener**

Mentor: prof. dr. Andrej Jamnik

Teorijska obravnava principa korespondentnih stanj

Datum zagovora: 5. 9. 2012

**Bor Arah**

Mentorica: doc. dr. Saša Petriček

Kompleksi bakrovega bromida

Datum zagovora: 26. 9. 2012

**Urša Petek**

Mentorica: prof. dr. Nataša Bukovec

Priprava tankih plasti zlata

Datum zagovora: 27. 9. 2012

**Miha Zadnik**

Mentorica: prof. dr. Nataša Bukovec

Nanos tankih plasti cinkovega oksida z SILAR metodo

Datum zagovora: 27. 9. 2012

**Veronika Erjavec**

Mentor: doc. dr. Franc Perdih

Koordinacijske spojine z diatrizoatnim ligandom

Datum zagovora: 7. 9. 2012

**Elvisa Mejremić**

Mentor: prof. dr. Peter Bukovec

Priprava in lastnosti termoplastičnega škroba

Datum zagovora: 25. 7. 2012

**Katja Lapanje**

Mentorica: doc. dr. Nina Lah

Rentgenska strukturna analiza bakrovih koordinacijskih spojin s karboksilnimi kisljinami in enostavnimi piridinskimi alkoholi

Datum zagovora: 7. 9. 2012

**Matija Uršič**

Mentor: prof. dr. Iztok Turel

Sinteza in karakterizacija organokovinskih rutenijevih spojin s kletkastimi ligandi

Datum zagovora: 26. 9. 2012

**Špela Trafela**

Mentor: prof. dr. Janez Košmrlj

Hibridne molekule z dvojnim načinom delovanja v boju proti raku. Sinteza diazenskega liganda

Datum zagovora: 26. 9. 2012

**Klara Lombar**

Mentor: prof. dr. Jurij Svete

Sinteza novih analogov histamina

Datum zagovora: 26. 9. 2012

**Urša Tomažin**

Mentor: prof. dr. Darko Dolenc

Reakcije (diaciloksijodo) benzenov z alkeni

Datum zagovora: 5. 9. 2012

**Urša Osolnik**

Mentorica: doc. dr. Romana Cerc Korošec

Fotokatalistko učinkovite tanke plasti titanovega dioksida, pripravljene po sol-gel postopku

Datum zagovora: 28. 9. 2012

**Manca Mrvar**

Mentor: prof. dr. Jože Koller

Interakcijske energije grafena z vodo, vodikovim peroksidom in vodikovim trioksidom

Datum zagovora: 5. 9. 2012

**Simon Babnik**

Mentor: doc. dr. Bojan Kozlevčar

Bakrove spojine z vanilinsko in ferulno kislino

Datum zagovora: 28. 9. 2012

**Žiga Medoš**

Mentorica: prof. dr. Marija Bešter Rogač

Termodinamika micelizacije zwitterionskega surfaktanta v vodnih raztopinah

Datum zagovora: 25. 9. 2012

**Mojca Peterlin**

Mentorica: prof. dr. Helena Prosen

Določitev flavonoidov v živilskih vzorcih

Datum zagovora: 27. 9. 2012

**Maja Dragutinović**

Mentorica: prof. dr. Helena Prosen

Določitev potencialno aktivnih spojin v zeliščih z različnimi ekstrakcijskimi metodami

Datum zagovora: 27. 9. 2012

---

**Andrej Iskra**

Mentorica: doc. dr. Irena Kralj Cigić

Določanje težkih kovin v česnu

Datum zagovora: 27. 9. 2012

**Blaž Gartner**

Mentorica: doc. dr. Irena Kralj Cigić

Določanje dimetoata v olivnem olju

Datum zagovora: 27. 9. 2012

**Matej Kocen**

Mentor: prof. dr. Boris Šket

Sinteza in lastnosti nekaterih trimetoksi kurkuminoidov in njihovih BF<sub>2</sub>-kompleksov

Datum zagovora: 26. 9. 2012

**Urša Tiringar**

Mentorica: prof. dr. Nataša Gros

Vrednotenje merilne negotovosti pri volumetričnih operacijah

Datum zagovora: 17. 9. 2012

**Lara Kobal**

Mentorica: doc. dr. Marija Zupančič

Vpliv pH na izluževalne karakteristike kroma jeklarskih žlinder

Datum zagovora: 5. 9. 2012

**Janja Sotlar**

Mentor: prof. dr. Matevž Pompe

Karakterizacija lahko hlapnih organskih snovi v aerosolih

Datum zagovora: 27. 8. 2012

**Urša Hoenigsman**

Mentorica: prof. dr. Nataša Gros

Konduktometrično spremljanje mikrodifuzije amonijaka

Datum zagovora: 5. 9. 2012

**Taja Pöschl**

Mentor: prof. dr. Marjan Veber

Validacija analize metode za določevanje bakra v tehnoloških vodah

Datum zagovora: 17. 9. 2012

**Andraž Mavrič**

Mentor: prof. dr. Boris Pihlar

Kulometrično določanje in separacija klorida

Datum zagovora: 5. 9. 2012

**Martin Gladović**

Mentor: prof. dr. Ciril Pohar

Načrtovanje in izdelava avtomatskega viskozimetra

Datum zagovora: 5. 9. 2012

**Daša Puh**

Mentor: doc. dr. Drago Kočar

Določanje celuloze in hidroksipropilmetil celuloze v tabletah

Datum zagovora: 27. 9. 2012



**Špela Planinc**

Mentorica: doc. dr. Marija Zupančič

Vpliv razmerja trdno/tekoče na izluževalne karakteristike kovin

Datum zagovora: 28. 9. 2012

**UNIVERZITETNI ŠTUDIJSKI PROGRAM BIOKEMIJA**

**Dino Ščuk**

Mentor: prof. dr. Marjan Veber

Somentor: dr. Janez Vodičar

Določevanje železa v krvnih frakcijah

Datum zagovora: 28. 9. 2012

**Tjaša Berčič**

Mentor: prof. dr. Peter Veranič

Učinek lovilcev prostih radikalov v fluorescenčni mikroskopiji celic transfeciranih z zelenim fluorescenčnim proteinom

Datum zagovora: 28. 9. 2012

**Maja Kogoj**

Mentor: prof. dr. Peter Veranič

Regeneracija urotelija po poškodbi

Datum zagovora: 29. 8. 2012

**Tjaša Bigec**

Mentor: prof. dr. Peter Veranič

Pomen holesterola za stabilizacijo pritrdišč citoskeleta na plazmalemo urotelijskih rakastih celic

Datum zagovora: 20. 9. 2012

**Elmina Handanović**

Mentor: doc. dr. Gregor Gunčar

Kloniranje človeškega nevdezina in njegovo izražanje v manjšem merilu v bakteriji *E. Coli*

Datum zagovora: 28. 9. 2012

**Špela Podjed**

Mentor: doc. dr. Gregor Gunčar

Kloniranje človeškega proteina GILT in njegovo izražanje v manjšem merilu v bakteriji *E. Coli*

Datum zagovora: 29. 8. 2012

**Žan Železnik**

Mentor: prof. dr. Marko Dolinar

Transformacijski in elektroporacijski poskusi s cianobakterijami

Datum zagovora: 20. 9. 2012

**Sabina Kolar**

Mentor: prof. dr. Marko Dolinar

Poskus uvedbe delecij v cianobakterijski klonirni vektor, pripravljen na osnovi naravnega plazmida pCA2.4

Datum zagovora: 20. 9. 2012

---

### **Margareta Žlajpah**

Mentor: prof. dr. Igor Križaj

Analiza komponente modrasovega strupa, ki vpliva na strjevanje krvi

Datum zagovora: 29. 8. 2012

### **Luka Bevc**

Mentor: doc. dr. Dušan Kordiš

Priprava zapisov za proteine APOBEC označene z zelenim fluorescenčnim proteinom GFP in njihovo izražanje v sesalskih celicah

Datum zagovora: 28. 9. 2012

### **Maruša Bratuš**

Mentorica: prof. dr. Jasna Štrus

Priprava plazmidov za izražanje genov v kvasovki *Saccharomyces cerevisiae*

Datum zagovora: 24. 7. 2012

### **Aleksander Krajnc**

Mentorica: prof. dr. Brigita Lenarčič

Priprava rekombinantnega katepsina O

Datum zagovora: 28. 9. 2012

### **Brigita Razboršek**

Mentor: prof. dr. Roman Jerala

Priprava in karakterizacija rekombinantnega fluorescenčnega proteina z dvema peptidnima oznakama

Datum zagovora: 26. 6. 2012

### **Vito Francič**

Mentorica: dr. Helena Haque Chowdhury

Vpliv inzulina in hipoksije na izražanje proteina dipeptidil peptidaze 4 (DPP4) na humanih preadipocitih

Datum zagovora: 28. 9. 2012

### **Nives Naraglav**

Mentor: prof. dr. Robert Zorec

Mobilnost in sekrecijska aktivnost mešičkov, ki skladiščijo možganski nevrotrofični dejavnik v podganih astrocitih v kulturi

Datum zagovora: 28. 9. 2012

### **Zala Rot**

Mentor: prof. dr. Simon Horvat

Mehanizem aktivacije receptorja TLR13

Datum zagovora: 20. 9. 2012

### **Laura Ogrin**

Mentor: prof. dr. Simon Horvat

Vpliv proteina UNC93B1 na aktivacijo mutantov TLR3 z dvoverižno RNA

Datum zagovora: 28. 9. 2012

## UNIVERZITETNI ŠTUDIJSKI PROGRAM KEMIJSKO INŽENIRSTVO

### **Neja Strah**

Mentorica: prof. dr. Jana Zagorc Končan

Anaerobni procesi čiščenja farmacevtskih odpadnih vod

Datum zagovora: 9. 7. 2012

### **Nina Peterlin**

Mentor: prof. dr. Aleksander Pavko

Uporaba ligninolitčnih encimov glive *Dichomitus squalens* za razgradnjo organskih barvil

Datum zagovora: 10. 9. 2012

### **Rok Brišar**

Mentor: prof. dr. Danilo Suvorov

Sinteza  $\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3\text{-SrTiO}_3$  keramike

Datum zagovora: 18. 9. 2012

### **Jan Bolha**

Mentorica: doc. dr. Klementina Zupan

Karakterizacija materiala za oksidne anode za visokotemperaturne gorivne celice

Datum zagovora: 26. 9. 2012

### **Anže Rozman**

Mentor: prof. dr. Miran Gaberšček

Vpliv dodatkov rodija na elektrokemijske lastnosti titan oksidnih nanocevk

Datum zagovora: 10. 9. 2012

### **Anja Lovrenčič**

Mentorica: prof. dr. Urška Šebenik

Vpliv sestave kopolimera metil metakrilata in 2-etilheksil akrilata na temperaturo steklastega prehoda

Datum zagovora: 7. 9. 2012

### **Brigita Hočevnar**

Mentorica: prof. dr. Urška Šebenik

Vpliv koncentracije emulgatorja in iniciatorja na šaržno emulzijsko polimerizacijo stirena

Datum zagovora: 21. 9. 2012

### **Petra Gale**

Mentor: prof. dr. Matjaž Krajnc

Radikalna polimerizacija metil metakrilata, katalizirana s faznimi prenašalcem

Datum zagovora: 7. 9. 2012

### **Špela Gradišar**

Mentor: prof. dr. Matjaž Krajnc

Vpliv zavojev v mikroreaktorju na sekundarno pomešanje znotraj mikrokanala

Datum zagovora: 7. 9. 2012

### **Saša Balažič**

Mentor: prof. dr. Igor Plazl

Kemijsko inženirstvo in nanotehnologija

Datum zagovora: 26. 9. 2012

---

## UNIVERZITETNI ŠTUDIJSKI PROGRAM TEHNIŠKA VARNOST

### **Jure Gašparut**

Mentor: prof. dr. Jadran Maček  
Tveganje kloralkalne elektrolize za ožjo in širšo okolico  
Datum zagovora: 6. 9. 2012

### **Katja Tomec**

Mentor: doc. dr. Jože Šrekl  
Statistika požarne zaščite v trgovinah  
Datum zagovora: 13. 9. 2012

### **Jožica Bratec**

Mentor: prof. dr. Marjan Bilban  
Mišično-kostna obolenja med poklicnimi vozniki avtobusov  
Datum zagovora: 20. 9. 2012

### **Lea Pišek**

Mentor: prof. dr. Marjan Bilban  
Zastrupitve z ogljikovim monoksidom v bivalnem okolju  
Datum zagovora: 20. 9. 2012

### **Tina Jenko**

Mentor: doc. dr. Mitja Robert Kožuh  
Analiza hrupa na športnih prireditvah  
Datum zagovora: 6. 9. 2012

### **Andreja Barbo**

Mentor: doc. dr. Mitja Robert Kožuh  
Varnostna kultura  
Datum zagovora: 27. 9. 2012

## VISOKOŠOLSKI ŠTUDIJSKI PROGRAM KEMIJSKA TEHNOLOGIJA

### **Tone Klobučar**

Mentor: doc. dr. Marjan Jereb  
Sinteza acilfosfonatov  
Datum zagovora: 25. 9. 2012

### **Polona Pušnik**

Mentor: doc. dr. Janez Cerar  
Osmozni koeficienti vodnih raztopin 3,3- in 6,9-ionen fluoridov  
Datum zagovora: 25. 9. 2012

### **Blaž Grilc**

Mentorica: doc. dr. Klementina Zupan  
Analiza mikrostrukture materiala za oksidne anode v visokotemperaturnih gorivnih celicah  
Datum zagovora: 25. 9. 2012

**Gašper Rozman**

Mentorica: doc. dr. Klementina Zupan

Sintranje materiala za SOFC oksidno anodo na osnovi  $\text{La}_{0,75}\text{Sr}_{0,25}\text{Cr}_{0,5}\text{Mn}_{0,5}\text{O}_3$

Datum zagovora: 26. 9. 2012

**Gregor Kete**

Mentor: prof. dr. Danilo Suvorov

Sinteza in karakterizacija kompozitov  $\text{SiC}/\text{Al}_2\text{O}_3$

Datum zagovora: 10. 9. 2012

**Breda Poglajen**

Mentorica: doc. dr. Andreja Žgajnar Gotvajn

Vpliv Odlagališča nenevarnih odpadkov Barje na podzemne vode

Datum zagovora: 21. 12. 2012

## **BOLONJSKI PROGRAMI 2. STOPNJE**

### **MAGISTRSKI ŠTUDIJSKI PROGRAM TEHNIŠKA VARNOST**

**Marko Ban**

Mentorica: doc. dr. Romana Cerc Korošec

Preučevanje intumescenčnih premazov na lesu z metodami termične analize

Datum zagovora: 28. 6. 2012

**Marko Kajfež**

Mentor: prof. dr. Jadran Maček

Avtomobili na vodik in prometne nezgode v predorih

Datum zagovora: 12. 7. 2012

**Dejan Kuzmički**

Mentorica: doc. dr. Marija Molan

Stališča do varnostne kulture

Datum zagovora: 28. 6. 2012

**David Levovnik**

Mentor: doc. dr. Mitja Robert Kožuh

Problemi pri prostorskem načrtovanju v bližini potencialno nevarnih objektov

Datum zagovora: 20. 9. 2012

**Peter Medle**

Mentor: prof. dr. Stojan Petelin

Prevoz nevarnega blaga v cestnem prometu

Datum zagovora: 12. 7. 2012

**Mitja Peljhan**

Mentor: doc. dr. Boris Jerman

Zagotavljanje varnosti proizvodov na skupnem trgu držav članic Evropske unije

Datum zagovora: 12. 7. 2012

---

**Franjo Podgoršek**

Mentor: doc. dr. Mitja Robert Kožuh

Somentor: prof. dr. Igor Plazl

Nevarnost pobegle reakcije v kemijski industriji

Datum zagovora: 11. 9. 2012

**JureŠuštaršič**

Mentorica: doc. dr. Andreja Žgajnar Gotvajn

Ocena vpliva centralne čistilne naprave na območju Krajinskega parka Ljubljansko barje na okolje

Datum zagovora: 28. 6. 2012

**Marko Vaupotič**

Mentor: doc. dr. Domen Kušar

Poškodbe pri delu v gradbeništvu

Datum zagovora: 6. 9. 2012

**Stojan Vene**

Mentorica: prof. dr. Marija Bešter Rogač

Cankarjev dom - zdrava ali bolna stavba

Datum zagovora: 28. 6. 2012



## RAZISKOVALNI PROGRAMI V LETU 2012

### RESEARCH PROGRAMMES IN 2012

<b>NOSILEC / PRINCIPAL RESEARCHER</b>	<b>NASLOV / TITLE</b>
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, aplikacija <i>Organic chemistry: synthesis, structure and application</i>
Izr. 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>
Izr. 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**

red. prof. dr. Peter Bukovec

**SODELAVCI PROGRAMSKE SKUPINE / RESEARCH PROGRAMME STAFF**

**Raziskovalci / Researchers**

red. prof. dr. Nataša Bukovec

red. prof. dr. Peter Bukovec

red. prof. dr. Boris Šket

doc. dr. Barbara Modec

doc. dr. Elizabeta Tratar Pirc

doc. dr. Romana Cerc Korošec

doc. dr. Marija Zupančič

doc. dr. Irena Kozjek Škofic

doc. dr. Marjan Jereb

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

Zaključili smo z raziskavami vloge koordinacijskih spojin molibdena pri oksidativni cepitvi 3-fenilmlečne kisline. Reakcija izhodne molibdenove(V) koordinacijske spojine je v prisotnosti organskega substrata vodila do kompleksa molibdena(VI) s koordiniranim oksalatnim ionom in več organskih produktov: fenilacetne kisline, benzaldehida, fenilacetaldehida in 3,4-difenil-2,5-dihidrofuran-2-ona.

Zaključene so bile tudi raziskave struktur produktov reakcij piridina z dvema dikarboksilnima kislinama. Pri reakciji z 1,2-fenilendiocetno kislino (1,2-dphaH<sub>2</sub>) je nastal produkt, ki se zaradi svoje sestave uvršča med kokristale, [PyH<sup>+</sup>][1,2-dphaH<sup>-</sup>]·1,2-dphaH<sub>2</sub>. Produkta reakcije 1,3-fenilendiocetne kisline (1,3-dphaH<sub>2</sub>), tj. [PyH<sup>+</sup>][1,3-dphaH<sup>-</sup>] s protonom na sredini med piridinskim dušikom in kisikom iz ene od karboksilnih skupin, pa ne moremo uvrstiti niti med prave soli in tudi ne med kokristale.

V objavljeni študiji smo proučevali sestavo in fitotoksičnost dveh vrst izcednih voda. Izcedne vode, ki so nastajale v aktivnem delu odlagališča, so bile precej bolj onesnažene in bolj toksične kot izcedne vode iz zaprtega dela odlagališča, ki niso pokazale zaviralnih učinkov na rast korenin testnih rastlin. V primeru obeh vrst izcednih voda smo opazili najvišjo toksičnost v prvih dneh kalitve. Rezultati raziskave so pokazali, da verjetno pride v zaprtem delu odlagališča do razgradnje toksičnih onesnažil v rastlinam manj toksične oblike in da je fitoremediacija ustrezna metoda čiščenja izcednih voda iz zaprtega dela odlagališča.

Z modificirano sol-gel metodo v vodnem mediju in termično obdelavo kserogelov v reduktivni atmosferi pri različnih temperaturah zemeljskoalkalijskih aluminatov z nominalnimi sestavami: Ca<sub>0,5</sub>Sr<sub>0,5</sub>Al<sub>2</sub>O<sub>4</sub> (CSA), Ca<sub>0,5</sub>Mg<sub>0,5</sub>Al<sub>2</sub>O<sub>4</sub> (CMA), Mg<sub>0,5</sub>Sr<sub>0,5</sub>Al<sub>2</sub>O<sub>4</sub> (MSA) dopirane z 0,5 ali 1 mol% Eu<sup>2+</sup> ionov ter dopirane z 0,5 mol% Eu<sup>2+</sup> in 0,25 mol% Nd<sup>3+</sup> ionov in zemeljskoalkalijske aluminate CaAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>: 0,5Eu<sup>2+</sup>, 0,25Nd<sup>3+</sup> (CA:Eu<sup>2+</sup>, Nd<sup>3+</sup>), MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>: 0,5Eu<sup>2+</sup>, 0,25Nd<sup>3+</sup> (MA:Eu<sup>2+</sup>, Nd<sup>3+</sup>) in SrAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>: 0,5Eu<sup>2+</sup>, 0,25Nd<sup>3+</sup> (SA:Eu<sup>2+</sup>, Nd<sup>3+</sup>) so bili pripravljene luminiscentni aluminati. Luminescenčne lastnosti teh materialov so odvisne od strukturne sestave in dopantov. Tako dodatek neodima poveča globino pasti in podaljša obstojno luminiscen.

Na področju raziskav anaerobne razgradnje z OxiTop metodo smo nadaljevali z raziskavami na inhibiranih sistemih s cianidi. Produkcijo bioplina smo določali kvalitativno in kvantitativno s sklopitvijo OxiTop sistema z GC/MS napravo. Rezultate smo objavili v članku: *TRATAR-PIRC, Elizabeta, NOVOSEL, Barbara, BUKOVEC, Peter. Comparison of GC and OxiTop analysis of biogas composition produced by anaerobic digestion of glucose in cyanide inhibited systems. Acta chim. slov. [Tiskana izd.], 2012, vol. 59, no. 2, str. 398-404. <http://acta.chem-soc.si/59/59-2-398.pdf>. [COBISS.SI-ID 36027653].* co.

S tehniko pršenja sola na segreto podlago smo pripravili ZnO in Ni-ZnO, v katerih smo variirali množinski delež niklja ter preučevali vpliv nikljevih ionov na morfologije, fotoelektrokemijske in fotoluminescenčne lastnosti pripravljenih plasti [TARWAL, N. L., SHINDE, P. S., OH, Y. W., CERC KOROŠEC, Romana, PATIL, P. S. Nickel-induced microwheel-like surface morphological evolution of ZnO thin films by spray pyrolysis. *Appl. phys., A, Mater. sci. process. (Print)*, 2012, vol. 109, no. 3, str. 591-599, [COBISS.SI-ID 36306693].

Da bi izboljšali stabilnost in kinetiko organskih materialov za uporabo v litij-ionskih baterijah, smo pripravili kompozite kinonskih derivatov kaliks[4]arena in saj. Njihove lastnosti smo preučevali z XRD, FTIR, TGA in NMR, njihovo elektrokemijsko stabilnost pa smo določevali z galvanostatskim ciklanjem [PIRNAT, Klemen, DOMINKO, Robert, CERC KOROŠEC, Romana, MALI, Gregor, GENORIO, Boštjan, GABERŠČEK, Miran. Electrochemically stabilised quinone based electrode composites for Li-ion batteries. *J. power sources. [Print ed.]*, 2012, vol. 199, str. 308-314, ilustr. [COBISS.SI-ID 4847898].

Z diferenčno dinamično kalorimetrijo in termogravimetrijo smo preučevali vpliv utrjevanja pri različnih temperaturah na kinetiko zamreževanja melaminsko-sečninsko-formaldehidne smole, nanese ne na kameno volno. Parametre kinetičnega modela (navidezen red reakcije in aktivacijska energija) so bili določeni po dveh poteh [LIKOZAR, Blaž, CERC KOROŠEC, Romana, POLJANŠEK, Ida, OGORELEC, Primož, BUKOVEC, Peter. Curing kinetics study of melamine-urea-formaldehyde resin. *J. therm. anal. calorim.*, 2012, vol. 109, no. 3, str. 1413-1422,. [COBISS.SI-ID 35496965].

Preučevali smo vpliv toplotne obdelave na strukturo in morfologijo nanopalčk  $\alpha$ -MnO<sub>2</sub> različno vsebnostjo kalijevih ionov. Omenjene nanopalčke, pripravljene z ionsko izmenjavo, smo termično obdelali pri temperaturah med 500 in 1100 °C, nato pa jih karakterizirali z XRD, SEM in TEM [UMEK, Polona, CERC KOROŠEC, Romana. The impact of K<sup>+</sup> content on the structural transformations and morphological changes during the thermal treatment of  $\alpha$ -MnO<sub>2</sub> nanorods. *Mater. res. bull.* [Print ed.], 2012, vol. 47, issue 6, 1523-1528.

Razvili smo metodo priprave katalitsko aktivne platine pri nizkih temperaturah. Potrebno je bilo pripraviti tudi elektrolit, ki bi bil čim bolj podoben elektrolitu, ki se uporablja v Greatzelovih celicah. Za enostavno testiranje pripravljenih katalizatorjev smo uporabili ciklično voltometrijo (CV). Določili smo najmanjšo maso platine na cm<sup>2</sup>, ki še zagotavlja ustrezno regeneracijo elektrolita. Oddali smo vlogo za patent (št. P-201200188, 2012).

## BIOORGANSKI SKLOP

Študirali smo nekatalizirano oksidacijo sulfidov v sulfone s 30% vodno raztopino vodikovega peroksida pri 75 °C pod reakcijskimi pogoji brez topila. Ugotovili smo, da pretvorba v mnogih primerih poteče z visoko stopnjo atomske ekonomije, saj smo uporabili samo 10% presežek H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, topilo pa ni potrebno niti v primeru trdnih reaktantov. Strukturno različni fenil alkil-, fenil benzil-, benzil alkil-, dialkil-, heteroaril alkil- in ciklični sulfidi se pod omenjenimi pogoji pretvorijo v sulfone. Pretvorbe dobro potekajo tudi z nenasičenimi sulfidi, ki vsebujejo dvojno ali trojno vez. Večina sulfidov je bila nepolarnih in hidrofobnih, tako da se niso mešali z raztopino H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> in so bili reakcijski pogoji heterogeni, a kljub temu so reakcije dobro potekale. Pretvorba je primerna za sintezo sulfonov v večjem merilu ( $\approx$  g), reakcijski časi pa so na večji skali daljši. Znatno število sulfonov je trdnih, tako da jih lahko izoliramo s filtracijo in kristaliziramo. To je zelo pomembna prednost te metode, saj se tako v številnih primerih izognemo ekstrakciji, kromatografiji in uporabi organskih topil.

Študirali smo uvedbo trimetilsililne skupine v fenole, alkohole in ogljikove hidrate s heksametil-disilazanom (HMDS) pod reakcijskimi pogoji brez topila. V številnih primerih pretvorbe potečejo z visoko stopnjo atomske ekonomije, saj zadostuje že 0,55 ekvivalenta HMDS. Številni fenoli reagirajo brez katalizatorja, sterično ovirani pa v prisotnosti katalitske količine joda. Primarni, sekundarni, terciarni in nenasičeni alkoholi praviloma reagirajo v prisotnosti joda, reakcijski časi so kratki. Zaščita monosaharidov poteče v prisotnosti joda kot katalizatorja, zaetrijo se vse hidroksi skupine. V nekaterih primerih produkti obstajajo pretežno v eni, v drugih pa v več stereoizomernih oblikah. Reakcija uspešno poteče tudi s saharozo, zaščiteni disaharid nastane z visokim izkoristkom. Metoda je presenetljivo uspešna tudi za zaščito  $\beta$ -ciklodekstrina, kjer se na vsakem obroču zaetrija po dve hidroksi skupini. Ta pretvorba uspešno poteče z vsemi tremi tipi substratov tudi v večjem merilu, produkte pa v številnih primerih lahko izoliramo z destilacijo. Tako se izognemo uporabi organskih topil, kar pomembno prispeva k zeleni kemiji.

Sintetizirali smo vse izomere dimetoksi kurkuminoidov. Konformacije v trdnem stanju smo določili na osnovi X-žarkovne kristalografije monokristalov ter <sup>1</sup>H in <sup>13</sup>C NMR meritev v trdnem stanju in ugotovili smo, da so le-te odvisne od pozicije metoksi skupin. NMR meritve so pokazale neujemanje z X-žarkovno določenimi strukturami v primeru 3,4-dimetoksi in 3,5-dimetoksi derivati, kar kaže, da omenjeni spojini v trdnem stanju nastopata v večih polimorfnih oblikah. V raztopini so dimetoksikurkuminoidi v obliki, ki jo lahko opišemo kot hitro ravnotežje med dvema ekvivalentnima tautomernima oblikama. Pozicija metoksi skupin ima relativno majhen vpliv na jakost in naravo enolne

vodikove vezi. Teoretski izračuni kažejo, da je energetska razlika med HOMO in LUMO nivojem odvisna od pozicije metoksi skupin, kar je v skladu z eksperimentalnimi opažanji. Študirali smo tudi kloriranje in bromiranje dimetoksi derivatov kurkumina. Ugotovili smo, da obe reakciji potekata regioselektivno na mestu v 1,3-diketonskem delu molekule, pri čemer se molekule v raztopini nahajajo v cis keto-enolni obliki. Rezultati so podani v članku: *Structures in solid state, solution and the gas phase of dimethoxy curcuminoids: Regioselective bromination and chlorination*, poslano v objavo.

## **DRUGI POMEMBNI ZNANSTVENI DOSEŽKI**

Nekateri člani programske skupine so vključeni v centre odličnosti:

- CO NOT – Center odličnosti: Nizkoogljicne 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

Studies of the role of molybdenum coordination compounds in the oxidative cleavage of 3-phenyllactic acid were finalized. The reaction of the starting molybdenum(V) compound in the presence of the organic substrate resulted in an oxidized molybdenum complex with oxalate. Several other organic compounds were identified in the reaction mixture by NMR spectroscopy: phenylacetic acid, benzaldehyde, phenylacetaldehyde and 3,4-diphenyl-2,5-dihydrofuran-2-one.

Products of the reaction of pyridine with 1,2-phenylenediacetic (1,2-dphaH<sub>2</sub>) or 1,3-phenylenediacetic acid (1,3-dphaH<sub>2</sub>) were subjected to the X-ray structural analysis. The former acid produced a co-crystal with the [PyH<sup>+</sup>][1,2-dphaH<sup>-</sup>]·1,2-dphaH<sub>2</sub> composition, whereas the latter acid produced a compound which can not be classified either as a salt nor as a co-crystal. In [PyH<sup>+</sup>][1,3-dphaH<sup>-</sup>], as established by X-ray crystallography, the proton is shared between the pyridine nitrogen and oxygen of one carboxylic function.

Phytotoxicity and composition of two landfill leachates were studied. Phytotoxicity testing and physico-chemical parameters showed that the leachate generated in the active part of the landfill was significantly polluted and more toxic to plants than the leachate generated in the closed part of the landfill, which did not cause any significant adverse effects on root growth of the tested plants in soil. However, the highest toxic effect of both leachates was observed in the first days of plant germination. Phytotoxic pollutants have probably been degraded in the closed part of the landfill and leachates from such landfills are not significantly toxic to plants. Therefore, phytoremediation appeared to be an appropriate restoration and treatment method.

Alkaline earth aluminates with the overall nominal compositions Mg<sub>0.5</sub>Sr<sub>0.5</sub>Al<sub>2</sub>O<sub>4</sub> (MSA), Ca<sub>0.5</sub>Sr<sub>0.5</sub>Al<sub>2</sub>O<sub>4</sub> (CSA), Ca<sub>0.5</sub>Mg<sub>0.5</sub>Al<sub>2</sub>O<sub>4</sub> (CMA), doped with 0.5 or 1 mol% of Eu<sup>2+</sup> ions or 0,5% Eu and 0,25 % Nd and CaAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>: 0,5 Eu<sup>2+</sup>, 0,25Nd<sup>3+</sup> (CA:Eu<sup>2+</sup>,Nd<sup>3+</sup>), MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>: 0,5Eu<sup>2+</sup>, 0,25Nd<sup>3+</sup> (MA:Eu<sup>2+</sup>,Nd<sup>3+</sup>) in SrAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>: 0,5Eu<sup>2+</sup>, 0,25Nd<sup>3+</sup> (SA:Eu<sup>2+</sup>,Nd<sup>3+</sup>) were obtained by a modified aqueous sol-gel method and annealed in a reductive atmosphere at various temperatures. The luminescence abilities of these materials depend on the structure and co-doping with Nd<sup>3+</sup> ions which increase the depth of traps.

The research of anaerobic degradation using the OxiTop method on cyanide inhibited systems has been continued. Biogas produced was qualitatively and quantitatively measured using the OxiTop system coupled with GC/MS apparatus. The results were published in: *TRATAR-PIRC, Elizabeta, NOVOSEL, Barbara, BUKOVEC, Peter. Comparison of GC and OxiTop analysis of biogas composition produced by anaerobic digestion of glucose in cyanide inhibited systems. Acta chim. slov.*

[Tiskana izd.], 2012, vol. 59, no. 2, str. 398-404. <http://acta.chem-soc.si/59/59-2-398.pdf>. [COBISS.SI-ID 36027653]

By spraying sol on a heated surface we prepared ZnO and Ni-ZnO and varied the amount share of nickel and analysed the impact of nickel ions on the morphology, and photoelectrochemical and photoluminescent properties of the layers [TARWAL, N. L., SHINDE, P. S., OH, Y. W., CERC KOROŠEC, Romana, PATIL, P. S. Nickel-induced microwheel-like surface morphological evolution of ZnO thin films by spray pyrolysis. *Appl. phys., A, Mater. sci. process. (Print)*, 2012, vol. 109, no. 3, str. 591-599, [COBISS.SI-ID 36306693].

Thin films of ZnO and Ni-ZnO thin films, where the molar ratio of nickel ions was varied, were prepared by spray-pyrolysis technique. The influence of nickel content on the morphology, photoelectrochemical and photoluminescence properties of the prepared films was investigated [TARWAL, N. L., SHINDE, P. S., OH, Y. W., CERC KOROŠEC, Romana, PATIL, P. S. Nickel-induced microwheel-like surface morphological evolution of ZnO thin films by spray pyrolysis. *Appl. phys., A, Mater. sci. process. (Print)*, 2012, vol. 109, no. 3, str. 591-599, COBISS.SI-ID 36306693].

In order to improve the stability and kinetics of organic materials for lithium batteries, composites between a quinone derivative of calyx[4]arene and carbon black were prepared. Their properties were investigated using XRD, FTIR, TGA and NMR, while their electrochemical stability was studied by galvanostatical cycling [PIRNAT, Klemen, DOMINKO, Robert, CERC KOROŠEC, Romana, MALI, Gregor, GENORIO, Boštjan, GABERŠČEK, Miran. Electrochemically stabilised quinone based electrode composites for Li-ion batteries. *J. power sources.* [Print ed.], 2012, vol. 199, str. 308-314, ilustr. [COBISS.SI-ID 4847898].

The influence of preconditioning at different temperatures on the cure kinetics of melamine-urea-formaldehyde resins coated on stone wool was investigated using differential scanning calorimetry and thermogravimetry. Kinetic model parameters (apparent order of reaction and activation energy) were determined in two different manners [LIKOZAR, Blaž, CERC KOROŠEC, Romana, POLJANŠEK, Ida, OGORELEC, Primož, BUKOVEC, Peter. Curing kinetics study of melamine-urea-formaldehyde resin. *J. therm. anal. calorim.*, 2012, vol. 109, no. 3, str. 1413-1422, [COBISS.SI-ID 35496965].

The effect of heat treatment on the structure and morphology of  $\alpha$ -MnO<sub>2</sub> nanorods with different potassium contents was investigated. These nanorods, prepared by ion exchange, were thermally treated at temperatures ranging from 500 to 1100 °C, and characterized by XRD, SEM and TEM [UMEK, Polona, CERC KOROŠEC, Romana. The impact of K<sup>+</sup> content on the structural transformations and morphological changes during the thermal treatment of  $\alpha$ -MnO<sub>2</sub> nanorods. *Mater. res. bull.* [Print ed.], 2012, vol. 47, issue 6, 1523-1528,].

We developed a method of deposition of electro-catalytic Pt particles at low temperatures. Cyclic voltammetry (CV) was used to simplify and expedite the testing procedure of the prepared samples. For this purpose an iodide electrolyte similar to the one used in Grätzel cells was used. The lowest loading ( $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ ) of the catalyst which would still sufficiently regenerate the iodide electrolyte was determined. Application for a patent was submitted (nr. P-201200188, 2012).

## BIOORGANIC CHEMISTRY

We studied uncatalyzed oxidation of sulfides into sulfones by using 30% aqueous solution of hydrogen peroxide at 75 °C under solvent-free reaction conditions. It was established that the reaction in several cases took place with high level of atom economy since 10% excess of H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> was used only. Structurally different phenyl alkyl-, phenyl benzyl-, benzyl alkyl-, dialkyl-, heteroaryl alkyl- and cyclic sulfides were converted into sulfones under the mentioned conditions. The unsaturated sulfides, containing double and triple bonds also reacted well. Most of the sulfides were nonpolar and hydrophobic, thus unable to mix with the solution of H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> and in spite of the heterogeneous reaction conditions, the reactions took place well. The transformation is suitable for the synthesis of sulfones



---

on larger scale ( $\approx$  g), while the reaction times were longer on larger scale. A substantial number of sulfides exist in the solid aggregate state and could be isolated by filtration and crystallized. This is an important advantage of this method, because extraction, chromatography and the use of organic solvents could be greatly avoided.

We have studied the introduction of trimethylsilyl group into phenols, alcohols and carbohydrates with hexamethyldisilazane (HMDS) under solvent-free reaction conditions. The transformation exhibited high atom economy because 0.55 equivalents of HMDS was a sufficient amount in numerous cases. Numerous phenols reacted without a catalyst, while the sterically hindered phenols required catalytic amount of iodine. Primary, secondary, tertiary and unsaturated alcohols usually reacted in the presence of iodine, and the reaction times were short. The protection of monosaccharides took place in the presence of  $I_2$  as catalyst, and all hydroxy groups were etherified. In some cases products existed mainly in one, while in some other, in several stereoisomeric forms. The reaction successfully took place with saccharose, and the protected disaccharide was obtained in a high yield. The method is surprisingly successful for protection of  $\beta$ -cyclodextrine, where the two hydroxy groups were protected in each ring. The scale-up successfully took place with all three types of substrates, and the products were frequently isolated by distillation. The use of organic solvents could be avoided, thus significantly contributing to the green chemistry.

All six isomers of dimethoxy curcuminoids were prepared. Conformations in solid state, which were determined by X-ray single crystallography and  $^1H$  and  $^{13}C$  solid-state NMR measurements, depend on the position of methoxy groups in curcuminoid molecules. The NMR data of solid samples was not in accordance with the X-ray structures in the case of 3,4-dimethoxy and 3,5-dimethoxy derivatives, which leads us to the conclusion that polymorphism exists in crystalline solid. In solution, dimethoxy curcuminoids are present in the forms that can be described as the coexistence of two equivalent tautomers being in fast equilibrium. The position of methoxy groups has small influence on the enolic hydrogen bond. Theoretical calculations show that the energy gap between HOMO and LUMO depends on the position of methoxy groups and is in accordance with experimental observations. Chlorination and bromination on  $\alpha$ -position of 1,3-diketone moiety do not change the preferential form being cis keto-enol as in parent compounds. The results have been explained and sent to an international journal with the title: *Structures in solid state, solution and the gas phase of dimethoxy curcuminoids: Regioselective bromination and chlorination*.

## OTHER IMPORTANT SCIENTIFIC ACHIEVEMENTS

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

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



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

**PROGRAMSKA SKUPINA / RESEARCH PROGRAMME GROUP**

**P1-0153**

**VODJA PROGRAMSKE SKUPINE / PRINCIPAL RESEARCHER**

**red. prof. dr. Boris Pihlar**

**SODELAVCI PROGRAMSKE SKUPINE / RESEARCH PROGRAMME STAFF**

**Raziskovalci / *Researchers***

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

**Mladi raziskovalci / *Young Researchers***

Tanja Trafela  
Andrej Ščavničar  
Alenka Možir  
Gregor Marolt  
Jernej Markelj

**Tehniki / *Technicians***

Ivanka Keber  
Zdenka Držaj  
Jolanda Furlan  
Mojca Žitko

## **POROČILO O REALIZACIJI PROGRAMA**

### **CILJI IN OSREDNJE TEME PROGRAMA**

Raziskave so bile tudi v letu 2012 osredotočene na uvajanje novih analiznih metod in pristopov (i), njihovo uporabo pri karakterizaciji materialov (ii), v analitiki okolja in varnosti hrane (iii). Sodelavci programske skupine so objavili 23 izvirnih znanstvenih člankov, en kratki znanstveni članek in en samostojni znanstveni sestavek v monografiji. Na konferencah in simpozijih so objavili pet znanstvenih prispevkov in en povzetek vabljene predavanja, na 27 konferencah pa poročali z referati ali posterji. Raziskovali smo naslednje:

i) Na področju temeljnih raziskav in razvoja analiznih metod smo objavili 9 znanstvenih člankov in en prispevek v monografiji. Članek objavljen v reviji *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, AL4 [COBISS.SI-ID 35750405], obravnava oksidativno razgradnjo pergamenta in njegovo nedestruktivno karakterizacijo. Za študij razgradnje vzorcev zgodovinskih pergamentov smo uporabili metodi sipanja rentgenskih žarkov pod malim kotom (SAXS) in IR spektroskopijo s sinhrotronskim izvorom svetlobe (SR-IR) v kombinaciji z multivariantno analizo. V analizo podatkov so bili vključeni temperatura krčenja, vsebnost lipidov, starost vzorcev, prisotnost črnih in pospešena razgradnja. Analiza grafov uteži pri metodi delnih najmanjših kvadratov in pri metodi glavnih osi za SAXS, SR-IR in druge analitske ter opisne podatke je pokazala, da odstranitev lipidov vpliva na difrakcijski vzorec in da lipidi povzročajo razgradne procese pri pospešenem staranju pergamenta. Prav tako je očiten vpliv železozgalega črnila, čeprav je mehanizem staranja različen kot pri naravnem staranju teh materialov brez črnih.

Raziskava karakterizacije zgodovinskih plastik s teraherčno spektroskopijo in pulznim oslikovanjem je opisana v članku AL5 [COBISS.SI-ID 35930373]. Teraherčna spektroskopija in 3D pulzno oslikovanje sta bila uporabljena za preučevanje polimernih materialov, tako danajšnjih kot zgodovinskih polimerov. Sistematična spektroskopska študija cele vrste različnih polimernih materialov je pokazala velike razlike v spektrih. Preučevali smo tudi vpliv plastifikatorjev v polivinilkloridu, prisotnosti polnil v polipropilenu in stopnjo zamreženosti v polietilenu in polistirenu na spekter. Anorganska polnila v polipropilenu so imela največji vpliv. Teraherčna tehnologija ima na tej osnovi velik potencial za kemijsko in strukturno karakterizacijo polimerov, kar je zanimivo tako za študij kulturne dediščine, kot za polimerno industrijo in razvoj analitskih tehnik na splošno.

Članek AL3 [COBISS.SI-ID 35749381] obravnava nedestruktivno datiranje fotografij na osnovi želatinske emulzije s srebrom z uporabo bližnje infrardeče spektroskopije (NIR) in multivariantne analize. V okviru raziskave so bili posneti NIR spektri 152 fotografij natisnjenih v ZDA med 1914 in 1986, z metodo delnih najmanjših kvadratov pa je bila narejena korelacija spektrov in letnice tiska fotografije. Z metodo glavnih osi in interpretacijo spektrov smo pojasnili korelacijo med datumom tiska, sestavo in starostjo fotografskega papirja. Metoda je bila uspešno validirana s 66 neodvisnimi fotografijami prav tako tiskanimi v ZDA, negotovost napovedi letnice pa je bila  $\pm 6$  let. Metoda je bila preverjena na fotografijah iz Nemčije in Rusije, kot tudi na amaterskih fotografijah iz zbirke Muzeja moderne umetnosti. Napaka napovedi je bila v tem primeru bistveno večja, saj je bila sestava papirja različna glede na geografsko poreklo, kar je bilo potrjeno z diskriminantno analizo.

Karakterizacija papirja z železozgalnim črnim z velikostno izključitveno kromatografijo je opisana v članku AL22 objavljenem v reviji *Polymer Degradation and Stability* [COBISS.SI-ID 36309253]. Da bi dosegli boljšo trajnost dokumentov, ki so napisani z železozgalnim črnim, že skoraj dve desetletji razvijamo ustrezne postopke stabilizacije. Njihovo učinkovitost ponavadi testiramo s testi s pospešenim staranjem, kar pa je pri histričnih materialih zelo omejeno zaradi količine vzorca in analitne metodologije. Tukaj opisujemo velikostno izključitveno kromatografijo celuloze z železozgalnim črnim z derivatizacijo s fenil izocianatom. Pokazali smo, da obstaja linearna korelacija med povprečno molsko maso določeno s kromatografijo in stopnjo polimerizacije, določeno viskozimetrično. Metodo smo uspešno uporabili na primeru študije razgradnje dokumentov z železozgalnim črnim.

Raziskava parametrov, ki vplivajo na kakovost elektrodepozicije americija je opisana v članku AL7 [COBISS.SI-ID 26037031]. Pravilnost določanja nizkih koncentracij v naravi prisotnih alfa sevalcev, je odvisna predvsem od vrste in kvalitete nanosa tanke plasti radionuklida, ki ga ponavadi izvedemo z obarjanjem, naprševanjem ali elektrolizo. V delu smo s pomočjo  $^{243}\text{Am}$  sledilca študirali vpliv sestave elektrolita in elektrodnega materiala (jeklo, Ag, Cu) na elektrolitsko nanašanje tankih plasti  $^{241}\text{Am}$  za njegovo detekcijo z  $\alpha$ -spektrometrijo. Ugotovili smo, da je spektralna ločljivost pri detekciji zelo odvisna od homogenosti in kvalitete nanosa tanke plasti, vplivata pa tudi medij in elektrodni material. S pomočjo autoradiografije smo pokazali, da so alfa spektri najboljši, če za elektrolizo uporabimo elektrode iz nerjavnega jekla ali srebra.

Članek AL12 [COBISS.SI-ID 4863770] opisuje razvoj voltametrične metode za določanje silde-nafil citrata (SC) z adsorpcijsko stripping voltametrijo na bizmutovi tankoslojni indikatorski elekt-rodu (BiFE). Optimalne pogoje za določanje smo dobili z *ex situ* pripravljeno BiFE na substratu iz steklastega grafita v 0,1 M acetatnem pufru pri pH 4,5, kjer po dvominutni akumulaciji raztopine sledov SC, dosežemo mejo zaznave  $1,8 \times 10^{-8}$  mol/L. Elektrokemijski odziv SC na BiFE je osnovan na redukciji adsorbiranega analita, najboljšo občutljivost detekcije pa smo dosegli z voltametrijo s pravokotnimi valovi (SWV). Pokazalo se je, da bi merjenje po akumulaciji analita lahko izvedli tudi kronopotenciometrično, kar bi bila lahko prednost pri analizi SC v realnih vzorcih.

Članek AL13 [COBISS.SI-ID 26051111], objavljen v reviji *Electrochimica Acta*, obravnava razi-skavo vpliva stabilnosti senzorja za vodikov peroksid osnovanem na katalizi z berlinsko modrim. Z elektrokemijsko vgraditvijo niklja(II) v strukturo Fe(II)-Fe(III) heksacianoferata (HCF) (berlinsko modro, PB) smo pripravili spojino, ki kaže dobre katalitske lastnosti za redukcijo  $H_2O_2$  tudi v šibko alkalnem mediju vse do pH 9,3. Ugotovili smo, da vgraditev Ni v molskem deležu do 0,13 glede na Fe, znatno izboljša obstojnost Fe(II)-Fe(III) HCF in prepreči hidrolizo, ki je v bazičnih medijih vzrok strukturnim spremembam in znižanju katalitske aktivnosti PB katalizatorja. S pomočjo elekt-rokemijskih ter spektroskopskih tehnik (XPS, SEM) smo pokazali, da vgradnja Ni povzroči nastanek tanke kompaktne plasti Ni-HCF na površini Ni-Fe HCF, ki spodnje plasti zaščiti pred hidrolizo in nadaljnjo razgradnjo. Elektrokemijska depozicija Ni-PB plasti povzroči torej strukturne spremembe, ki izboljšajo elektrokatalitske lastnosti in obstojnost PB katalizatorja za redukcijo peroksida, s čemer se meja zaznave zniža vse do  $5 \times 10^{-8}$  mol/L.

Članek AL1 [COBISS.SI-ID 36122373], obravnava divergentno petstopenjsko sintezo 1-substitui-ranih 4-aril-6-okso-1,6-dihidropiridin-3-karboksamidov. Reakcija dvajsetih primarnih aminov z di-metil 2-((dimetilamino)metiliden)-3-oksopentanedioatom je vodila do 1-substituiranih metil 4-hi-droksi-6-okso-1,6-dihidropiridin-3-karboksilatov. Pretvorba v odgovarjajoče 4-toziloksi in 4- kloro derivate, ki ji je sledilo Suzuki–Miyaura ariliranje je vodila do serije enajstih N-substituiranih metil 4-aril-6-okso-1,6-dihidropiridin-3-karboksilatov. Za določitev optimalnih reakcijskih pogojev za Su-zuki–Miyaura ariliranje N-alkilpiridonov smo uporabili kombinatorno sintezo. Po estrski hidrolizi in paralelnem amidiranju smo dobili serijo sedemnajstih končnih produktov, ki smo jih identificirali in določili njihovo kromatografsko čistost.

Podobno tematiko obravnava članek AL19 [COBISS.SI-ID 35944709], v katerem je opisana paralelna sinteza 2-substituiranih 6-(5-okso-1-fenilpirolidin-3-il)pirimidin-5-karboksamidov. S paralelno sintezo smo pripravili knjižnico 24 6-(5-okso-1-fenilpirolidin-3-il)pirimidin-5-karboksamidov. Sinteza je sestavljena iz petstopenjske pretvorbe itakonske kisline v 1-metil in 1-fenil substituirane 6-(5-okso-1-fenilpirolidin-3-il)pirimidin-5-karboksilne kisline, ki ji sledi paralelno amidiranje s se-rijo aminov v odgovarjajoče karboksamide z zelo dobrim izkoristkom in 80-100% čistostjo, kar smo preverili s kromatografijo.

Samostojni znanstveni sestavek v monografiji »*Applications of ion chromatography for pharmaceu-tical and biological products*« AL25 [COBISS.SI-ID 36290053], obravnava nove poglede in teorijo retencijskih procesov v ionski izključitveni kromatografiji. Kromatografijo ionske izključitve (KII), ki je podvrsta tekočinske kromatografije, sta prva uporabila in opisala Wheaton in Bauman v letu 1953. V nasprotju z originalno teorijo KII, ki je potrebovala bistvene modifikacije za opis posameznega fenomena, nova teorija učinkovito razloži vse pojave brez potrebnih modifikacij in predpo-stavk. V tem poglavju monografije smo prvič učinkovito razložili oblike signalov v KII, simultano separacijo in detekcijo anionov in kationov (kisli dež) ter indirektno UV/Vis detekcijo izbranih ana-litov po separaciji.

ii) Z analitiko materialov smo se ukvarjali v raziskavah objavljenih v 6 znanstvenih člankih in enem kratkem znanstvenem prispevku. Članek AL6 [COBISS.SI-ID 35749893], obravnava modeliranje življenske dobe kromogenih barvnih fotografij z uporabo bližnje infrardeče spektroskopije (NIR). Kromogene barvne fotografije so med najbolj nestabilnimi materiali, ki jih najdemo v zgodovinskih

zbirkah, saj so informacije ogrožene zaradi bledenja barv, ki poteka tudi v temi. Pokazali smo, da iz teh sprememb lahko sklepamo na datum, ko so bile tiskane, kot tudi na stabilnost barv. Uporabili smo nedestruktivno analitsko tehniko (NIR) v kombinaciji z multivariantno analizo. Preučili smo tudi možnost podaljšanja življenjske dobe dragocenih kosov med hranjenjem v okolju brez prisotnosti kisika. Dobljeni rezultati kažejo, da se pogoji brez kisika ne smejo uporabljati kot standardna procedura pri vseh kromogenih fotografijah, saj pride v nekaterih primerih v pogojih brez kisika do hitrejšega razpada kot v zraku. Kljub temu je večina vzorcev bolje shranjena pri pogojih brez kisika.

Članek objavljen v reviji *Polymer Degradation and Stability*, AL21 [COBISS.SI-ID 35799813], obravnava uporabo eksperimentalnega načrta za razvoj dozno odzivne funkcije za barvne fotografije. Barvne fotografije so zelo občutljive na pogoje v katerih so shranjene. Čeprav so določeni idealni pogoji shranjevanja, so ti pogoji pogosto neprimerni za arhivske zbirke. Zato je nujno razumevanje vpliva pogojev na razgradnjo, da je možna optimizacija življenjske dobe materialov. Ustrezne informacije lahko dobimo pri eksperimentih pospešenega staranja, kjer spreminjamo en parameter. Kljub temu je z uporabo eksperimentalnega načrta potrebno narediti manj eksperimentov, pridobimo pa zadosti informacij, tudi o medsebojnem vplivu posameznih parametrov. V tej študiji je bil uporabljen eksperimentalni načrt za razvoj dozno odzivne funkcije odvisnosti razgradnje barv na barvnih fotografijah od temperature, relativne vlažnosti in koncentracije očetne kisline, ki so bili določeni kot parametri, ki najbolj vplivajo na barve fotografij v arhivskih zbirkah. Dobljena funkcija omogoča upravljalcem določiti optimalne pogoje v zbirkah.

Članek AL20 [COBISS.SI-ID 259804928], obravnava stabilizacijo papirja, ki vsebuje baker in železo. Velik del zbirk zapisov, risb in drugih zgodovinskih dokumentov je precej poškodovan zaradi delovanja korozivnih črnih na osnovi železa in bakra. Cilj te raziskave je bil ugotoviti, ali lahko zmanjšamo hitrost razgradnje takih dokumentov. Poskus smo izvedli tako, da smo vzorce vložili v inertne papirne srajčke, prepojene z antioksidanti in z alkalno zalogo. Pokazali smo, da lahko na ta način, z uporabo srajčk z rahlo alkalnim okoljem in prepojenih z antioksidantom tetrabutylamonijevim bromidom, do določene mere povečamo trajnost dokumentov.

V članku AL2 [COBISS.SI-ID 25686567], je opisana raziskava vpliva pH simulirane fiziološke raztopine na korozijo ortopedskih zlitin. Znano je da pH bistveno vpliva na korozijske lastnosti kovinskih materialov posebej pa je pomembno poznavanje tega vpliva pri biomaterialih, ki se uporabljajo *in vivo* v medicinske namene (vsadki). V delu je opisana raziskava korozijskih lastnosti nerjavnega jekla 316L (Fe/Cr18/Ni10/Mo3) in titanove zlitine Ti-6Al-4V v simulirani fiziološki raztopini v področju pH od 4,6 do 8,0. S pomočjo različnih elektrokemijskih tehnik smo raziskali korozijske lastnosti obeh zlitin, z ICP-MS pa smo izmerili hitrost sproščanja in koncentracije korozijskih produktov. Ugotovili smo da je hitrost korozije jekla 316L močno odvisna od pH, medtem ko je korozija titanove zlitine praktično neodvisna od pH fiziološke raztopine.

Karakterizacija in analiza sledov elementov v izlužkih zobnih cementov je opisana v članku AL16 [COBISS.SI-ID 36005893]. V različnih zobnih materialih smo določili glavne elemente ter delež izluženega arzena, kroma in svinca v razredčeni klorovodikovi kislini in Hankovi raztopini. Uporabili smo rentgensko fluorescenco in masno spektrometrijo z induktivno sklopljeno plazmo. Vsi preiskovani cementi so imeli podobno sestavo oksidov, prevladovala sta silicijev in kalcijev oksid. Pri zobnih materialih, ki vsebujejo te cemente, smo opazili minimalno izluževanje arzena, kroma in svinca v fiziološko raztopino.

Članek AL24 [COBISS.SI-ID 1881993], obravnava spiranje bora iz lesa impregniranega z zaščitnimi sredstvi na osnovi borove kisline in utekočinjenega lesa. Eden največjih izzivov na področju zaščite lesa je zmanjšati izpiranje bora iz lesa, impregniranega z borovimi pripravki. Vodni raztopini borove kisline smo dodali utekočinjeno smrekovino. Rezultati kažejo, da se je spiranje bora iz smrekovine, impregnirane s tako pripravljenimi zaščitnimi sredstvi, bistveno zmanjšalo.

iii) Uporaba in razvoj metod za analizo živil in raziskave v okolju so obravnavane v 9 znanstvenih člankih. V članku AL8 [COBISS.SI-ID 35749125], objavljenem v reviji *Atmospheric Environment*,

poročamo o strategiji za ublažitev klimatskih sprememb v mehansko kontroliranih skladiščih. Razvit je bil računalniški model za preučevanje energetske obremenitve in optimizacije okolja v Nacionalnem arhivu v Kewu, z namenom optimizacije in preučevanja vplivov klimatskih sprememb. S simulacijo smo optimizirali higrotermalne pogoje znotraj arhivske stavbe, v kateri so shranjeni predvsem zapisi na papirju. Študija predstavlja pet različnih okoljskih strategij, ki zajemajo potencialen prihranek energije v višini 43 % brez bistvenega vpliva na kvaliteto okolja. Za klimatske spremembe lahko napovemo, da bodo imele majhen vpliv na okolje v arhivu zaradi filtriranja zraka. Zvišanje energetske obremenitve za 15 % in 24% je predvideno za najslabše klimatske spremembe v letih 2050 in 2080. Predvidena strategija energetskih prihrankov lahko predstavlja možno rešitev za ublažitev klimatskih sprememb.

Članek AL23 [COBISS.SI-ID 36369157] objavljen v reviji *Talanta*, obravnava ovrednotenje matričnih vplivov pri določanju nekaterih bioflavonoidov v vzorcih hrane. Za določitev rutina, kvercetina, hesperidina, hesperetina in kampferola v vzorcih hrane smo razvili LC-MS/MS metodo v kombinaciji s SPE. Ovrednotili smo matrične vplive z metodo dodatka po ekstrakciji in dobili od 40 do 0,5% prenizke rezultate, kar kaže na zmanjšanje ionizacije, razložimo pa jo lahko s sočasno elucijo fenolnih kislin. Izkoristki za flavonoide so bili 88–96%. Ekstrakte vzorcev smo analizirali z LC-MS/MS v SRM načinu in uporabili metodo standardnega dodatka. Rezultati so bili za rutin 0,16; kvercetin 0,65–56; hesperidin 0,016–24; hesperetin 0,0068–36,4 in kampferol 0,14–1,63 (vse v mg/100 g sveže mase) in so skladni z drugimi objavljenimi podatki. Dosegli smo nizke LOD 0,014–0,063 µg/mL.

Članek AL11 [COBISS.SI-ID 2080137], obravnava bioremediacijo lindana z lesnimi glivami. Možnost razgradnje kloriranega insekticida lindana z lesnimi glivami bele in rjave trohnobe v tekočem mediju, smo preučevali s plinsko kromatografijo v povezavi z ekstrakcijo tekoče-tekoče. Glive bele trohnobe so razgradile lindan, glive rjave trohnobe pa ne. Ekstrakcijski postopek je vplival na določeno vsebnost lindana. Naša raziskava dokazuje, da je potrebno pri študijah mikoremediacije upoštevati tudi adsorbcijo na micelarno biomaso kot možen vzrok za odstranitev insekticida iz tekočega medija, še posebej v primeru krajše časovne izpostavljenosti in pri glivah, ki imajo slabšo zmožnost razgradnje.

Vsebnost biogenih aminov v komercialnih ribjih produktih iz držav EU in Turčije, obravnava raziskava opisana v članku AL14 [COBISS.SI-ID 36261637]. V študiji smo določili koncentracijo biogenih aminov in nekatere druge parametre v 60 tradicionalnih ribjih produktih. V 11 vzorcih smo ugotovili vsebnost histamina med 70 in 1544 mg/kg, kar je nad dovoljeno vrednostjo, predpisano s strani FDA, v štirih vzorcih je bila presežena tudi maksimalna dovoljena vrednost s strani EU in Turčije, namreč 100 oz. 200 mg/kg. Pri nekaterih vzorcih smo ugotovili povišane vrednosti tudi nekaterih drugih biogenih aminov, kot na primer putrescina, feniletilamina, tiramina in triptamina.

Članek AL15 [COBISS.SI-ID 36259077], obravnava raziskavo antioksidativne aktivnosti in skupne vsebnost fenolov in flavonoidov v ekstraktih murve (*Morus SPP. L.*, *Moraceae*). Različni deli murve se v tradicionalni medicini pogosto uporabljajo kot diuretiki, hipoglikemiki in za zniževanje visokega krvnega tlaka. Cilj tega dela je bil določevanje antioksidantov v dveh vrstah murve, ki jih najdemo v Srbiji, bele murve (*Morus alba L.*) in črne murve (*Morus nigra L.*). S tekočinsko kromatografijo smo določili vsebnost posamičnih fenolnih spojin v ekstraktih, spektrofotometrično pa smo določili celokupno antioksidativno učinkovitost. Izkazalo se je, da ima največjo antioksidativno učinkovitost in tudi najvišjo vsebnost posamičnih antioksidantov ekstrakt lista *M. nigra*.

Članek AL17 [COBISS.SI-ID 7174777], obravnava vpliv encimskih pripravkov k vsebnosti linaloola v vinih iz nearomatične sorte vinske trte 'Šipon' (*Vitis vinifera L.*). V moštu in vinih iz nearomatične grozdne sorte 'Šipon' smo določali terpene po obdelavi s sedmimi komercialnimi encimskimi pripravki. Identificirali in kvantificirali smo jih s HS-SPME in GC-MS. Vsebnost v moštu je bila pod LOD. Po obdelavi z encimi smo v polfermentiranem moštu zaznali le linalool, najvišja vsebnost je bila v moštu, tretiranem z β-glukozidazo (2,25 µg/L). Najbolj aromatično od te vinske sorte glede na senzorično analizo, je bilo vino iz mošta, obdelanega z Lallzyme Beta, ki je tudi imelo najvišjo



---

vsebnost linaloola (2,14 µg/L). To potrjuje, da vsi encimski pripravki niso primerni za vsak tip monosortnega grozdnega mošta.

Identifikacija in kvantifikacija spojin arome tatarske ajde (*Fagopyrum tataricum* Gaertn.), je opisana v članku AL18 [COBISS.SI-ID 3287153], objavljenem v Journal of Food Sciences. Aroma tatarske ajde se značilno razlikuje od arome navadne ajde (*F. esculentum*). V študiji smo identificirali in kvantificirali spojine njene arome: iz semena, moke in luščin smo jih ekstrahirali s simultano ekstrakcijo z destilacijo in analizirali z GC-MS. Skupno smo kvantificirali 48 spojin ter izračunali aktivnost vonja (OAV), ki je bila za 26 spojin >10, torej te značilno prispevajo k aromi. Spojine z OAV>500 so: (E,E)-2,4-dekadienal, (E)-2-nonenal, 2-feniletanol, (E,E)-2,4-nonadienal, heksanal, dekanal, nonanal. Pomembna razlika glede na aromo navadne ajde je odsotnost salicilaldehida, ki ga predlagamo kot označevalca za odkrivanje dodatka navadne ajde tatarski.

Članek AL10 [COBISS.SI-ID 36397061], sega na področje klinične kemije in obravnava vrednotenje kakovosti vakuumiranih epruвет za hematološke določitve pred odvzemom vzorcev. Neustrezna koncentracija antikoagulantov v krvnih vzorcih lahko povzroči krčenje celic in vpliva na hematokrit in MCV. Predlagana metodologija združuje test vsesanega volumna, ki ga naredimo z deionizirano vodo in z napravo izdelano v laboratoriju, ter merjenje prevodnosti. Popravki, ki upoštevajo zračni tlak in temperaturo v prostoru, omogočajo vpogled v antikoagulantno raven, kot jo lahko pričakujemo za krvne vzorce. Naša 338-dnevna študija je pri epruветah različnih proizvajalcev med njihovim rokom trajanja prepoznala različne primere neskladnosti s predpisi.

Raziskava povezave med motivacijsko naravnostjo dijakov, njihovimi kemijskimi dosežki in dojetjem učenja spektrometrije opisana v članku AL9 [COBISS.SI-ID 9165897], je prispevek na področju kemijskega izobraževanja. Namen študije je bil določiti povezanost med motivacijsko usmerjenostjo dijakov in njihovimi kemijskimi dosežki in dojetjem učenja z originalnim primerom izkustvenega pristopa k spektrometriji. V študiji je sodelovalo 295 dijakov poljskih in slovenskih strokovnih in tehničnih šol. Z uporabo »*k*-mean clustering« postopka, smo prepoznali dva različna klastra motivacijske naravnosti na osnovi SDT teorije o avtonomni in kontrolirani motivaciji.

## **DRUGI POMEMBNI ZNANSTVENI DOSEŽKI**

Sodelavci PS so bili v letu 2012 mentorji 25 diplomantom na univerzitetnem študiju ter 12 diplomantom na 1. stopnji bolonjskega programa, na podiplomskem študiju pa 2 magistrandoma in trem doktorandom, pri enem doktorandu pa so bili somentorji.

V letu 2012 smo zvedli tudi dvodnevno delavnico: »Mednarodna šola ionske kromatografije ISIC (COBISS.SI-ID 36296965). Udeležence smo seznanili z najnovejšimi trendi na področju teorije in praktičnih pristopov k reševanju analiznih problemov s področja ionske kromatografije in novitetami na področju instrumentacije. Poseben povdarek je bil na (pred)pripravi vzorcev ter na programski obdelavi podatkov, ki so jih udeleženci pridobili pri praktičnem delu tečaja.

## 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 analysis.

### SCIENTIFIC AND OTHER IMPORTANT ACHIEVEMENTS

Last year, members of the programme group published 23 original scientific articles (AL1–AL23), one short communication article (AL24), one contribution in the scientific monograph (AL31), and five published contributions on scientific conferences (AL25–AL29). The following subjects were investigated:

i) The article published in *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, AL4 [COBISS.SI-ID 35750405], is a study of degradation of historic parchment using small-angle x-ray scattering, synchrotron-IR and multivariate data analysis. The use of small-angle X-ray scattering (SAXS) and synchrotron-IR (SR-IR) was examined in conjunction with multivariate data analysis to study degradation of an extended set of historic parchment samples. In the data analysis, shrinkage temperature, lipid content, sample age, presence of ink and accelerated degradation were included. The analysis of loading factors in partial least-squares regression and principal component analyses based on SAXS, SR-IR and other analytical and descriptive data reveals the effect of lipid removal on diffraction patterns, and lipids are found to cause the degradation process in parchment to accelerate. The effect of iron gall ink is also evident, although the mechanism of ageing is different from natural ageing in the absence of ink.

Characterisation of historic plastics using terahertz time-domain spectroscopy and pulsed imaging was described in the article AL5 [COBISS.SI-ID 35930373]. Terahertz (THz) time-domain spectroscopy and 3D THz pulsed imaging have been explored with regard to polymer materials, both commodity and historic polymers. A systematic spectroscopic study of a wide range of different polymer materials showed significant differences in their spectra. We also examined how the presence of plasticisers in poly(vinyl chloride), the presence of fillers in polypropylene, and the degree of branching in polyethylene and polystyrene affect the spectra; inorganic fillers in polypropylene affected the absorption most. Terahertz spectroscopy is thus shown to have significant potential for both, chemical and structural characterisation of polymers, which will be of interest to heritage science, but also to the polymer industry and development of analytical technologies in general.

Non-destructive dating of fiber-based gelatin silver prints using near-infrared spectroscopy (NIR) and multivariate analysis was described in article AL3 [COBISS.SI-ID 35749381]. NIR spectra were acquired for 152 film stills printed in the USA between 1914 and 1986, and partial least square (PLS) analysis was used to correlate the spectra with the year the photographs were printed. Principal component analysis and spectral interpretation helped to clarify the underlying correlation between the print date and the composition and ageing of the photographic papers. The method was successfully validated with an independent set of 66 film stills printed in the USA, and a prediction error (root mean square error of prediction) of  $\pm 6$  years was achieved. The method was also tested on film stills printed in Germany and Russia, as well as amateur prints and photographs in the collection of the Museum of Modern Art. The prediction error was significantly larger due to the differences in the composition and/or properties of the papers depending on their geographical origin as confirmed by discriminant analysis.

---

Characterisation of paper containing iron gall ink using size exclusion chromatography was published in *Polymer Degradation and Stability* journal [[COBISS.SI-ID 36309253]. In order to increase the longevity of the documents, written by iron gall inks, stabilisation treatment methods have been developed during the last two decades. Their effectiveness has often been determined by comparing the rates of degradation during accelerated tests. However, such evaluation using historical materials is limited by the amount of material required by various analytical methodologies. The paper describes the use of size exclusion chromatography (SEC) of cellulose containing iron gall ink, derivatised by using phenyl isocyanate. A linear correlation was observed between the weight average degree of polymerisation obtained by SEC and the one obtained by using viscometry. The method was used to evaluate the extent of stabilisation of historic documents containing iron gall inks during accelerated degradation.

Investigation of factors affecting the quality of americium electroplating was described in the article AL7 [COBISS.SI-ID 26037031]. Four different electrolyte solutions were used in the electrodeposition of americium and we investigated their influences on the quality of the thin layer of deposited americium isotopes in combination with three different cathode disc materials. The relations between alpha spectral resolution and disc surface properties were established. With autoradiographic imaging we confirmed that the best resolution in  $\alpha$ -spectra was achieved by electrodeposition on stainless steel or silver cathodes.

A simple and fast procedure for measuring low concentration of sildenafil citrate (SC), also known as Viagra®, at the ex situ prepared bismuth film electrode (BiFE) is described in the article AL12 [COBISS.SI-ID 4863770]. The BiFE was prepared ex situ on the surface of a glassy carbon substrate electrode and employed in adsorptive cathodic stripping voltammetric mode in 0.1 M acetate buffer solution (pH 4.5) in the presence of dissolved oxygen. Electroanalytical properties of the BiFE were studied and compared with the ex situ prepared mercury film electrode, lead film electrode and with bare glassy carbon electrode. The BiFE revealed a LoD ( $3\sigma$ ) of  $1.8 \times 10^{-8}$  mol L<sup>-1</sup> using 120 s accumulation time and good linear response in the examined concentration range of  $1.0 \times 10^{-7}$  to  $1.0 \times 10^{-6}$  mol L<sup>-1</sup>. The repeatability of 1.5% corroborated potential applicability of the BiFE for the determination of SC is relevant, for example, in pharmaceutical formulations. A successful preliminary study using constant current chronopotentiometric stripping mode has been also carried out.

The article published in *Electrochimica Acta* AL13 [COBISS.SI-ID 26051111], reports on the enhancement of stability of Prussian blue based sensor for H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> by electrochemical insertion of Ni<sup>2+</sup> ions. Electrocatalytic films of mixed (substitutional) nickel–iron hexacyanoferrate with the Ni/Fe molar ratio up to 0.13 were prepared by incorporating the Ni<sup>2+</sup> into the structure of electrochemically deposited thin Prussian blue thin films. Thus obtained films retained high electrocatalytic activity inherent to Prussian blue and were stable towards degradation in alkaline media up to pH 9.3, enabling the sensing of  $5 \times 10^{-8}$  to  $2 \times 10^{-4}$  mol/dm<sup>3</sup> of H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> at pH 9.0, with the sensitivity of 1.14 AM<sup>-1</sup> cm<sup>-2</sup> and the detection limit of  $2 \times 10^{-8}$  mol/dm<sup>3</sup>. Based on the results of electrochemical, XPS, and SEM investigations, the stability of mixed nickel–iron hexacyanoferrate films at pH 9.0 was attributed to the hydrolysis-induced lattice transformation occurring at the film/solution interface which resulted in the formation of a thin and compact layer of an alkaline-stable nickel hexacyanoferrate,

The article AL1 [COBISS.SI-ID 36122373] reports on diversity-oriented synthesis of 1-substituted 4-aryl-6-oxo-1,6-dihydropyridine-3-carboxamides. Treatment of dimethyl 2-((dimethylamino)methylidene)-3-oxopentanedioate with twenty primary amines gave 1-substituted methyl 4-hydroxy-6-oxo-1,6-dihydropyridine-3-carboxylates. Transformation into the corresponding 4-tosyloxy and 4-chloro derivatives, followed by Suzuki–Miyaura arylations gave a series of eleven N-substituted methyl 4-aryl-6-oxo-1,6-dihydropyridine-3-carboxylates. Combinatorial screening was employed to establish suitable reaction conditions for Suzuki–Miyaura arylation of N-alkylpyridones. Hydrolysis of the esters followed by parallel solution-phase amidation of the corresponding carboxylic acids



with primary and secondary amines furnished a library of seventeen final products. The products were identified and their chromatographic purity evaluated.

Parallel synthesis of 2-substituted 6-(5-oxo-1-phenylpyrrolidin-3-yl)pyrimidine-5-carboxamides was described in the article AL19 [COBISS.SI-ID 35944709]. A library of 24 6-(5-oxo-1-phenylpyrrolidin-3-yl)pyrimidine-5-carboxamides was prepared by a parallel solution-phase approach. The synthesis comprises a five-step transformation of itaconic acid into 1-methyl and 1-phenyl substituted 6-(5-oxo-1-phenylpyrrolidin-3-yl)pyrimidine-5-carboxylic acids followed by parallel amidation with a series of 12 aliphatic amines to afford the corresponding carboxamides in good overall yields and of 80–100% purity, evaluated by chromatographic methods.

In the monograph entitled »*Applications of ion chromatography for pharmaceutical and biological products*« a chapter on the retention processes in ion-exclusion chromatography was published AL25 [COBISS.SI-ID 36290053]. Ion-exclusion chromatography (IEC) is a type of liquid chromatography that was first introduced by Wheaton and Bauman in 1953. The original theory supporting the basic observations has not been changed until recently, when it was radically renewed. Opposite to the original theory, the new theory was successfully used also for the explanation of some phenomena, for which the original theory was not successful. Some of these phenomena described in this book chapter are explanation of peak shapes in IEC, simultaneous separation of anions and cations in IEC (acid rain), and indirect UV-Vis detection in IEC.

**ii)** On the analysis and characterization of materials were reported in six scientific articles and in one short communication paper. Lifetime modelling of chromogenic colour photographs using near-infrared spectroscopy was described in the article AL6 [COBISS.SI-ID 35749893]. Chromogenic colour prints are amongst the most unstable materials found in heritage collections as the information-carrying dyes fade appreciably even in the dark. It is shown that these continuous changes can be exploited to infer the date of the print as well as dye stability. As a non-destructive analytical technique, near-infrared spectroscopy in conjunction with multivariate data analysis was used. To examine the possibility to extend the lifetime of the valuable objects during storage, the use of oxygen-depleted environments (hypoxia) was also investigated. The results obtained show that hypoxia should not be used as a blanket approach for all chromogenic prints, as some degrade faster in hypoxic conditions than the control samples degrade in the air. However, for most samples hypoxic storage turned out to be beneficial.

Scientific article published in *Polymer Degradation and Stability*, AL21 [COBISS.SI-ID 35799813], reports on the use of design-of-experiment principles to develop a dose-response function for colour photographs. Colour photographs are very vulnerable to the environmental conditions they are stored in. Although ideal conditions of storage have been identified, these conditions are often not appropriate in archival collections. Therefore, it is essential to understand how these environmental conditions affect degradation in order to optimise material lifetime. Such information is typically obtained by using accelerated degradation experiments following 'one-factor-at-a-time' methodologies. However, when using 'Design-of-Experiment' principles, such experiments provide more information with fewer experimental runs, while the information is provided not only on factor effects but also on interactions between these factors. This study employed a central composite experimental design plan to develop a dose-response function relating the rate of degradation of dyes in colour photographs to temperature, relative humidity and acetic acid concentrations which had been identified as the environmental parameters of greatest concern for colour photographs in archival collections. This function now allows the managers to appraise various options of environmental management within their collections.

Stabilization of copper and iron containing papers in mildly alkaline environment was described in the article AL20 [COBISS.SI-ID 259804928]. Considerable parts of collections of manuscripts, drawings, maps and archival materials throughout the world are seriously damaged as the result of the use of iron gall inks and copper based pigments. The aim of this study was to evaluate the pos-

---

sibility of slowing down oxidative degradation of papers containing transition metals when in contact with paper folders containing an antioxidant. The research demonstrates that effective stabilization of paper samples with higher amounts of iron and copper ions in mildly alkaline environment by interleaving with papers, impregnated with antioxidant tetrabutylammonium bromide can be achieved under given conditions.

Article AL2 [COBISS.SI-ID 25686567] reports on the effect of pH on the corrosion of orthopaedic alloys. Metals and alloys used in orthopaedics and dentistry are exposed *in vivo* to various agents and environmental conditions. One of the important factors that determine the corrosion behaviour of metallic biomaterials is the pH of the environment. The corrosion resistance of stainless steel 316L (Fe/Cr18/Ni10/Mo3), titanium and titanium alloy Ti-6Al-4V (Ti90/Al6/V4) was studied in terms of their electrochemical properties and biodegradation in simulated physiological solutions of different pH values between 4.5 and 8. The electrochemical characteristics of individual metal components were also investigated using cyclic voltammetry, linear polarization and potentiodynamic polarization methods, and the concentration of dissolved metal ions released during a 32-days immersion under simulated physiological conditions which was determined by ICP-MS. It was found that the corrosion behaviour of stainless steel 316L is strongly affected by the pH and the corrosion resistance was enhanced at higher pH. However, the behaviour of titanium and its alloy is almost independent from the pH.

Characterization and analyses of acid-extractable and leached trace elements in dental cements was investigated and described in the article AL16 [COBISS.SI-ID 36005893]. Elemental constitution and investigation of the total and leachable arsenic, chromium and lead in Portland cement, pure tricalcium silicate, Biodentine, Bioaggregate and mineral trioxide aggregate (MTA) Angelus were determined by using X-ray fluorescence and inductively coupled plasma mass spectrometry following acid digestion on the hydrated material and on leachates of cements soaked in Hank's balanced salt solution. All the cements investigated had a similar oxide composition, the main oxide being calcium and silicon oxide. Dental materials based on tricalcium silicate cement and MTA Angelus released minimal quantities of trace elements when in contact with simulated body fluids.

Leaching of boron from wood impregnated with preservative solutions based on boric acid and liquefied wood was reported in short communication article AL24 [COBISS.SI-ID 1881993]. Boron-based compounds are one of the most important classical biocides. Reducing boron leaching from impregnated wood has been one of the most challenging tasks for at least 50 years. In order to slow down the leaching of boron, aqueous solutions of boric acid were combined with liquefied spruce wood. The results clearly showed a significant reduction in leaching of boron from spruce wood impregnated with preservative solutions based on boric acid and liquefied wood.

iii) Application of analytical methods in the environment, industrial products and food safety was the focus of nine scientific articles. The article published in the journal *Atmospheric Environment*, AL8 [COBISS.SI-ID 35749125], reports on climate change mitigation strategies for mechanically controlled repositories. A computer based building simulation model was developed to examine the energy load and environmental management in The National Archive, Kew. To optimise environmental management and to examine the impacts of climate changes, the hygrothermal environment inside the archive building which houses mainly paper-based records was accurately simulated. The study presents the simulation results of five environmental strategies which predict energy saving potential as high as 43 % without significantly affecting the quality of the preservation environment. The effect of climate change is predicted to have little impact on the archive environment due to the filtering effect of the air conditioning system. On the other hand, an increase in total energy load by 15% and 24% is predicted under the worst case climate change scenario in 2050 and 2080. However, the identified energy saving strategies could represent possible mitigative solutions in reducing future energy load against the impact of climate change.

Article AL23 [COBISS.SI-ID 36369157], published in *Talanta*, reports on the evaluation of matrix effect in determining some bioflavonoids in food samples. The LC-MS/MS method with SPE for

rutin, quercetin, hesperidin, hesperetin and kaempferol determination in food samples was developed and matrix effect evaluated, using a postextraction addition method. Negative error between 44 to 0.5% indicate ionization suppression and can be explained by co-elution of phenolic acids. Recoveries of flavonoids were 88–96%. Sample extracts were analyzed by LC–MS/MS in SRM mode using the standard addition method. The results (mg/100 g fresh weight) were for rutin 0.16; quercetin 0.65–56; hesperidin 0.016–24; hesperetin 0.0068–36.4 and kaempferol 0.14–1.63, and show good agreement with the data published. Low LODs (0.014–0.063 µg/mL) were obtained.

Study of bioremediation of lindane by wood-decaying fungi was described in the article AL11 [COBISS.SI-ID 2080137]. The ability of white-rot fungi and brown-rot fungus to degrade the organochlorine insecticide lindane in liquid cultures was studied by liquid-liquid extraction in combination with gas chromatography. White-rot fungi were able to degrade lindane, while degradation of lindane by the brown-rot fungus did not occur. The extraction procedure had noticeable effects on the determined amount of lindane. Our study indicates that mycoremediation studies of lindane should also consider adsorption onto mycelial biomass as a possible reason for the removal of the insecticide from the liquid medium, especially with shorter exposure periods or in the case of fungi with poorer degradation potentials.

Biogenic amine contents of commercially processed traditional fish products originating from European countries and Turkey was reported in the article AL14 [COBISS.SI-ID 36261637].

In this study, 65 traditional fish samples were analysed for biogenic amines, and some other parameters in terms of food safety. In total, eleven samples contained histamine values between 70 and 1,544 mg/kg, which are above the FDA permitted level of 50 mg/kg, four of which also exceeded EU and Turkish permitted limits of either 100 or 200 mg/kg. The highest histamine value was attributed to fish paste at 1,544 mg/kg and among other biogenic amines, the highest value was observed in cadaverine at 1,862 mg/kg represented by smoked bonito. Some other biogenic amines, such as putrescine, phenylethylamine, tyramine and tryptamine, were detected in higher levels in some samples.

Free radical scavenging activity and total phenolic and flavonoid contents of mulberry (*Morus* spp. L., Moraceae) extracts was described in article AL15 [COBISS.SI-ID 36259077]. Mulberry fruit, leaves, bark and branches have been used in traditional medicine as diuretic, hypoglycemic and hypotensive medicaments. The objective of his work was to evaluate and compare antioxidant properties of different extracts of two *Morus* species growing in Serbia: *Morus alba* L. (white mulberry) and *Morus nigra* L. (black mulberry). Potential antioxidant activity, content of antioxidant compounds (phenolics and flavonoids) and radical scavenging capacity, tested by the DPPH method, were evaluated. The phenolic and flavonoid composition of different *Morus* extracts was determined by the HPLC method. The dominant phenolic components in the samples were rutin and chlorogenic acid. All the investigated mulberry dry extracts showed high content of phenolic compounds and significant antioxidant activity.

The article AL17 [COBISS.SI-ID 7174777], reports on the contribution of enzyme preparations to linalool content of wines made from the non-aromatic grapevine variety 'Furmint' (*Vitis vinifera* L.). Terpene compounds were determined in musts and wines from the non-aromatic grape variety 'Furmint' after the treatment with seven commercial enzyme preparations. Their identification and quantification was performed by HS-SPME and GC-MS. The content in the grape pomace was below LOD. After enzyme treatments, only linalool was detected in semi-fermented musts, the must treated with  $\beta$ -glucosidase having the highest content (2.25 µg/L). 'Furmint' wine produced from must treated with Lallzyme Beta was the most aromatic, based on the sensory analysis, and had the highest linalool content (2.14 µg/L). This confirms that all enzyme preparations are not appropriate for every type of monovarietal grape pomace.

Identification and quantification of aroma compounds of Tartary Buckwheat (*Fagopyrum tataricum* Gaertn.) was described in the article AL18 [COBISS.SI-ID 3287153], published in Journal of Food

---

Sciences. Aroma of tartary buckwheat differs from that of the common buckwheat (*F. esculentum*). In the study, aroma compounds were identified and quantified: they were extracted from seed, flour and husks with SDE and analyzed by GC-MS. A total of 48 were quantified and their OAV calculated. OAV of 26 compounds was >10; so they significantly contribute to the aroma. The compounds with OAV>500 were: (E,E)-2,4-decadienal, (E)-2-nonenal, 2-phenylethanol, (E,E)-2,4-nonadienal, hexanal, decanal, and nonanal. Important difference from the common buckwheat aroma is the absence of salicylaldehyde, which is proposed as a marker to detect adulteration of tartary with common buckwheat.

Article AL10 [COBISS.SI-ID 36397061] reports on the quality evaluation of evacuated blood-collection tubes for haematological tests prior to their intended use. Inappropriate anticoagulant concentration in a blood sample can cause cell shrinkage and affects the haematocrit and mean corpuscular volume (MCV). The methodology suggested here combines the draw-volume test performed with deionised water using a laboratory made measuring device, and a conductivity measurement. The corrections taking into account the air pressure and ambient temperature provide an insight into the anticoagulant concentration that can be expected for blood samples. Our 338-day study identified different examples of non-compliance with the norms during the shelf life of the tubes of different producers.

The interplay of students' motivational orientations, their chemistry achievements and student perception of learning within the hands-on approach to visible spectrometry, described in the article AL9 [COBISS.SI-ID 9165897], is a contribution to chemical education. The purpose of the study was to determine the relationship between students' motivational orientations and their chemistry achievements and perception of learning within the original case of the hands-on approach to visible spectrometry. A total of 295 students from Polish and Slovenian vocational and technical high schools participated in the study. By applying the *k*-mean clustering procedure, two distinct clusters of students' motivational orientations were identified based on the SDT theory about autonomous and controlled motivation.

## **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**

**red. prof. dr. Ivan Leban**

**SODELAVCI PROGRAMSKE SKUPINE / RESEARCH PROGRAMME STAFF**

**Raziskovalci / *Researchers***

red. prof. dr. Jadran Maček  
red. prof. dr. Stane Pejovnik  
red. prof. dr. Ivan Leban, v pokoju / retired  
izr. prof. dr. Boris Čeh  
doc. dr. Mitja Robert Kožuh  
red. prof. dr. Alojz Demšar  
doc. dr. Klementina Zupan  
doc. dr. Saša Petriček  
red. prof. dr. Anton Meden  
red. prof. dr. Iztok Turel  
doc. dr. Amalija Golobič  
doc. dr. Marjan Marinšek  
doc. dr. Bojan Kozlevčar  
dr. Nives Kitanovski  
doc. dr. Andrej Pevec  
doc. dr. Nina Lah  
doc. dr. Franc Perdih  
doc. dr. Vojmir Francetič  
red. prof. dr. Primož Šegedin, v pokoju / retired

**Mladi raziskovalci / *Young Researchers***

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

**Tehniki / *Technicians***

Aleš Knez  
Vinko Volk, v pokoju / retired



## POROČILO O REALIZACIJI PROGRAMA

### CILJI IN OSREDNJE TEME PROGRAMA

Realizacija predloženega programa dela na raziskovalnem programu »Sinteza, struktura, lastnosti snovi in materialov« se je v letu 2012 prilagodila spremenjenim pogojem dela in se delno spremenila. Program P1-0175 je bil na podlagi do sedaj uspešnega dela podaljšan za eno leto (s 5 na 6 let) in sicer do decembra 2014. Hkrati pa se je zaradi državnih varčevalnih ukrepov cenovna kategorija programske skupine iz red B spremenila v red C. Dodatno pa je nekaj raziskovalcev programske skupine udeležena tudi v raziskovalnem delu ustanovljenih 8 Centrov odličnosti z ne popolnoma definirano delitvijo pristojnosti.

V skladu s časovnim potekom dela programske skupine naj bi bilo peto leto poteka raziskav namenjeno predvsem pregledu možnih aplikacij dobljenih spojin in materialov. Vendar je v tem času delo potekalo tudi na pripravi in karakterizaciji novih spojin in materialov.

Raziskovalno delo programa se lahko razdeli v dva sklopa. Prvi sklop se ukvarja z bazičnimi raziskavami, drugi pa je bolj aplikativno usmerjen.

V skladu s programom dela smo v letu 2012 nadaljevali delo na področju kovinskih kompleksov s kinoloni. Pripravili smo vrsto novih spojin in jih okarakterizirali s pomočjo fizikalno-kemijskih metod in bioloških testov. Pri tem smo aktivno sodelovali predvsem z našim grškim sodelavcem G. Psomasom z Aristotle University of Thessaloniki na področju delovanja koordinacijskih spojin z zdravilnimi učinkovinami (antibakterijska in protivnetna sredstva) na biološke makromolekule, kot so serumski proteini in CT DNA. Vezava na serumske proteine odraža sposobnost transporta kovinskih ionov po organizmu, medtem ko vezava na CT DNA nakazuje možne citostatične lastnosti koordinacijskih spojin.

V letu 2012 je z zagovorom disertacije zaključila raziskovalno delo MR Simona Medvešček. Opravila je obsežno študijo vpliva dodatka različno topnih karbonatov na hidratacijo Portland cementa. Rezultati v obliki znanstvenega članka so pripravljeni za objavo.

Z delom uspešno napreduje nova MR Tanja Koleča Dobravec. Sintetizirala je številne koordinacijske spojine cinka, mangana, niklja, kobalta, bakra in vanadija z različnimi ligandi, ki bi lahko ojačili njihov biološko aktivnost (mimetiki inzulina) ter analizirala njihove kristalne in molekularne strukture.

V sodelovanju z drugimi raziskovalnimi skupinami smo prispevali ekspertizo na področju strukturne karakterizacije materialov.

Nadaljevali smo raziskave na področju koordinacijskih spojin z  $\beta$ -diketonatnimi ligandi, indol-3-acetatnim in indol-3-propanoatnim ligandom ter pikolinatnimi ligandi. Vanadijeve in cinkove koordinacijske spojine so znane kot ojačevalci inzulina, saj zmanjšujejo nivo glukoze v krvi. Uspeli smo sintetizirati in določiti rentgenske kristalne strukture šest različnih  $VO^{2+}$ ,  $VO_2^+$  in  $Zn^{2+}$  koordinacijskih spojin z analogi pikolinske kisline (3,5-difluoropikolinska kislina, 5-cianopikolinska kislina) in različnimi N-donorskimi ligandi (4-aminopiridin, 4-dimetilaminopiridin, imidazol) ali topili (voda, metanol). V letu 2012 smo nadaljevali z znanstvenim sodelovanjem s skupino prof. Liuja z East China Normal University, Šanghaj (Kitajska) v okviru katerega smo razvili učinkovito metodo za vezavo heterocikličnih sistemov na različne organske molekule. S paladijem katalizirane reakcije pripajanja, ki potekajo preko organokovinskega substrata, omogočajo učinkovitejšo ariliranje heteroaromatskih sistemov.

Nadaljevali smo tudi z raziskavami različnih koordinacijskih spojin. Tri sorodne enojedrne bakrove koordinacijske spojine z vanilinom (naravno modelno spojino za lignin) in vodo se v svojih strukturah med seboj povezujejo na tri različne načine preko vodikovi vezi. To vodi v tri različne magnetne interakcije, katere smo opazili z eksperimenti ter analizirali s teoretsko analizo. Delo smo nadaljevali tudi na drugih spojinah.

V drugem sklopu so se nadaljevale raziskave v smeri iskanja takih materialov, ki omogočajo njihovo uporabo v gorivnih celicah. Pri tem naj bi izpolnjevali dva kriterija: izboljšano energijsko pretvorbo vodika (AFC, DFAFC) ali drugih lažjih ogljikovodikov (SOFC) in daljšo dobo uporabnosti teh materialov. Zelo zahteven je izbor anodnih materialov in njihove karakteristike za visokotemperaturne SOFC. Poleg samega materiala, ki je običajno kermet, imajo prevladujočo vlogo še njegove mikrostrukturalne lastnosti. Disperzija kovinske faze v keramični matrici ob zadostni odprti poroznosti celotnega materiala je največji problem pri zagotavljanju ustreznega kvalitnega nivoja. Pri gorivnih celicah tega tipa na dobo uporabnosti zelo vplivajo drugi dejavniki kot je zastrupljanje anodnega materiala z različnimi spojinami ali odlaganje inertne snovi na površini elektrokatalizatorja. Podrobno smo študirali slednji vpliv kot izločanje različnih oblik ogljika na in v porah anodnega materiala.

Četudi na videz izgleda, da je programska skupina zelo heterogena, menimo, da so tako velike programske skupine izredno uspešne. Predvsem tudi zato, ker dosejajo kritično maso in z asigniranimi finančnimi sredstvi omogočajo tudi nabavo in vzdrževanje raziskovalne infrastrukture. Dodatno pa programska skupina, ki je alocirana na univerzi, dopolnjuje svoje pedagoško delo z raziskovalnim, kar je bistvo raziskovalne univerze. Menimo, da smo zastavljene cilje v letu 2012 i s tem realizacijo programa dosegli. Skupno je bilo objavljenih 44 del z oznako 1.01, od tega 3 dela z oznako A« in 14 del z oznako A'.

## ZNANSTVENI DOSEŽKI

- Vpliv procesnih pogojev na lastnosti LTCC materiala

American Ceramic Society; Journal of the American Ceramic Society; 2012; Vol. 95, issue 2; str. 760-767; Impact Factor: 2.272; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 0.774; A": 1; A': 1; WoS: PK; Avtorji / Authors: Makarovič Kostja, Meden Anton, Hrovat Marko, Holc Janez, Benčan Andreja, Dakskobler Aleš, Kosec Marija

V tem delu poročamo o vplivu temperature in časa žganja na fazno sestavo, mikrostrukturo, biaksialno upogibno trdnost in temperaturni ekspanzijski koeficient sočasno žgane keramike pri nizki temperaturi (LTCC - low-temperature cofired ceramic). Pri temperaturah okrog 700 °C se začne Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> raztapljati v nizko viskozni steklasti fazi in to se dogaja do 800 °C, ko se v steklasti fazi raztopi 10 ut% keramičnega polnila Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> in nastane z aluminijevim oksidom bogato področje. To področje je primerno za kristalizacijo anortita, ki nukleira na delcih Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Kristalizacija se začne pri 875 °C in delež anortita se povečuje s temperaturo, dokler ne doseže platoja pri približno 22 ut% pri visokih temperaturah oziroma dolgih časih žganja. Biaksialna upogibna trdnost LTCC narašča s temperaturo žganja od 135 MPa (pri 800°C) do okrog 300 MPa (pri 900 °C). Najbolj na biaksialno upogibno trdnost vpliva poroznost. Vpliv količine anortita na biaksialno upogibno trdnost LTCC je majhen. Temperaturni ekspanzijski koeficient LTCC se zniža od  $5.6 \times 10^{-6}$  na  $5.0 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$  z naraščajočo temperaturo in je povezan z masnim deležem anortita, ki kristalizira na račun zmanjšanja količine steklaste faze v LTCC.

- Enostavna sinteza indolo-karbazolov preko intramolekularne ciklizacije s katalizatorjem paladijem Pergamon Press; Tetrahedron letters; 2012; Vol. 53, no. 39; str. 5248-5252; Impact Factor: 2.683; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.667; WoS: EE; Avtorji / Authors: Lv Jun, Liu Qiancai, Tang Jie, Perdih Franc, Kranjc Krištof

Ob uporabi katalizirane transformacije s paladijem so bili sintetizirani novi indolo[3,2,1-jk]karbazoli, ki vsebujejo različne funkcionalne skupine. Različni N-(2-bromoaril)karbazoli bo bili ciklizirali, da so nastale zelene spojine preko C-X/C-H sklopitve. Paladij omogoča tvorbo aril paladijevega bromida z oksidacijo in adicijo, medtem ko dodatek baze omogoča nastanek vezi ogljik-ogljik in s tem tvorbo indolo[3,2,1-jk]karbazolov tako v polarnih kot tudi v nepolarnih topilih. Razložen je tudi mehanizem te reakcije katalizirane s paladijem.

- Vpliv cis-trans izomernih in polimorfnih efektov na magnetne lastnosti bakrovih koordinacijskih verigi

American Chemical Society.; Inorganic chemistry; 2012; Vol. 51, no. 5; str. 3094-3102; Impact Factor: 4.601; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.341; A': 1; WoS: EC; Avtorji / Authors: Kozlevčar Bojan, Kitanovski Nives, Jagličić Zvonko, Bandeira Nuno A. G., Robert Vincent, Le Guennic Boris, Gamez Patrick

Tri sorodne enojedrne bakrove koordinacijske spojine z vanilinom (naravno modelno spojino za lignin) in vodo se v svojih strukturah med seboj povezujejo na tri različne načine preko vodikovi vezi. To vodi v tri različne magnetne interakcije, katere smo opazili z eksperimenti ter analizirali s teoretsko analizo.

- Deaktivacija Ni-YSZ materiala v suhi metanovi atmosferi in oksidacija različnih oblik nanašene- ga ogljika.

ASME; Journal of fuel cell science and technology; 2012; Vol. 9, no. 6; art. no. 061003 (7 str.); Impact Factor: 1.136; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.428; WoS: HQ, ID; Avtorji / Authors: Novosel Barbara, Marinšek Marjan, Maček Jadran

Ogljikovi nanosi so najverjetnejši način deaktivacije za visokotemperaturne gorivne celice (SOFC), ki uporabljajo kot gorivo metan ali višje ogljikovodike. Nanašanje različnih alotropskih modifikacij ogljika na anodni material smo zasledovali pod dinamičnimi in izoternimi pogoji. Rezultati kažejo na disociacijo metana na Ni-YSZ (kompozit niklja in z itrijem stabiliziranega cirkonijevega dioksida) v temperaturno programiranem načinu v treh stopnjah. Pod izoternimi pogoji nastanejo v odvisnosti od temperature različne ogljikove oblike. Prisotnost amorfne, filamentne, pirolizne in grafitne ogljikove alotropije je bila določena s kvadropolno masno spektroskopijo (QMS), rentgensko praškovo difrakcijo, elektronsko mikroskopijo na poljsko jakost (FE-SEM) in infrardečo spektroskopijo (IR). Ogljikove specije smo nadaje oksidirali v atmosferi z 20,0 vol% in 0,5 vol% kisika v argonu in vzorci kažejo zelo različne reaktivnosti na oksidacijo.

- Nova enostavna sinteza in karakterizacija s samarijem dopiranega cerijevega oksida in njegovega homogenega prekursorja  $[Ce_{0.80}Sm_{0.20}(Ac)_3Gly]_n$

Nova enostavna sinteza in karakterizacija s samarijem dopiranega cerijevega oksida in njegovega homogenega prekursorja  $[Ce_{0.80}Sm_{0.20}(Ac)_3Gly]_n$ . Objavljena je nova metoda za sintezo  $Ce_{0.80}Sm_{0.20}O_{1.90}$ . Sušenje raztopine etilen glikola in stehiometričnih množin acetatov  $Ce(C_2H_3O_2)_3 \cdot xH_2O$  in  $Sm(C_2H_3O_2)_3 \cdot xH_2O$  je dalo za rezultat visokokristalinični produkt  $Ce_{0.80}Sm_{0.20}(C_2H_3O_2)_3(C_2H_6O_2)_n$ , novo polimerno koordinacijsko spojino. S kalcinacijo tega prekursorja pri 900 °C in sintranjem pri 1150 °C smo dobili čist  $Ce_{0.80}Sm_{0.20}O_{1.90}$  z želeno homogenostjo in gostoto. Podajamo tudi elementno sestavo (CHN in ICP-MS) in rentgensko kristalografsko analizo prekursorja  $[Ce_{0.80}Sm_{0.20}(C_2H_3O_2)_3(C_2H_6O_2)_n]$ . Termične razkroje do  $Ce_{0.80}Sm_{0.20}O_{1.90}$  smo zasledovali z HT-XRD in TG-DTA analizo. Strukturo in sestavo  $Ce_{0.80}Sm_{0.20}O_{1.90}$  smo potrdili tudi z rentgensko praškovo difrakcijo (Rietveld).

## DRUGI POMEMBNI ZNANSTVENI DOSEŽKI

- Vpliv karbonatov na hidratacijo Portland cementa [S. Medvešček]; 2012; IX, 107 f.; Avtorji / Authors: Medvešček Simona  
V doktorski disertaciji so predstavljeni rezultati kvantitativnega spremljanja hidratacije v smislu nastajanja hidratiranih faz. Ovrednoteni so vplivi različno topnih karbonatov na te procese pri dveh različnih temperaturah.
- Tehnološki (mega)trendi in top inovacije za aplikacijo v kemijski industriji 2012; Avtorji / Authors: Leban Ivan, Bratkovič Tomaž



Vabljen predavanje v okviru srečanja: Prvi vrh kemijske industrije – dan kemije, farmacije, plastike in gume. Brdo pri Kranju, 15. maj, 2012.

21. slovensko-hrvaško kristalografsko srečanje, Pokljuka, 2012.

Faculty of Chemistry and Chem. Techn.; 2012; 73 str., 12 str. pril.; Avtorji / Authors: Lah Nina, Trdin Miha, Leban Ivan

Izvedba 21. slovensko-hrvaškega kristalografskega srečanja, Pokljuka, 2012 z mednarodno udeležbo.

- Postopek za pripravo racemnega nikotina  
Urad Republike Slovenije za intelektualno lastnino; 2012; 7 str.; Avtorji / Authors: Turel Iztok, Kljun Jakob, Štefane Bogdan  
Prijava patenta za pripravo racemnega nikotina.
- Organokovinski fluoridi  
2012; Avtorji / Authors: Perdih Franc  
Vabljen predavanje na East China Normal University, Šanghaj, Kitajska, maj 2012.

## RESEARCH PROGRAMME REPORT

### RESEARCH TOPICS AND GOALS

Realization of the research program »Synthesis, structure and properties of matter and materials« was in 2012 adapted to changing conditions and the actual work was partially changed. The program P1-0175, based on the successful work so far was extended by one year (from 5 to 6 years) up to December 2014. At the same time, due to government austerity measures price category of program was changed from class B into class C. In addition, some researchers of the program group are participating in the research of the newly established eight centers of excellence with not completely defined division of powers.

In accordance with the timing of the program group the fifth year was dedicated to research aimed primarily at assessing possible applications of the derived compounds and materials. However, also the work was carried out on the preparation and characterization of new compounds and materials.

Research program as a whole can be divided into two parts. The first set deals with basic research, the other is more application-oriented.

Also, in 2012, we continued our scientific collaboration with the group of Prof. Psomas from Aristotle University of Thessaloniki in the field of activity of coordination compounds with drug molecules, such as antibacterial and anti-inflammatory agents toward biological macromolecules, such as serum proteins and CT DNA. Bonding on serum proteins shows the capabilities for metal-ion transport in the organism, while bonding on CT DNA shows potential cytostatic abilities of coordination compounds.

In 2012, young researcher Simona Medvešček defended her thesis. She had accomplished an extensive study of the influence of additions of variously soluble carbonates on the hydration of Portland cement. The results are prepared for publication in the form of a scientific paper.

New young researcher Tanja Koleša Dobravec progresses well with her research. She synthesized numerous coordination compounds of zinc, manganese, nickel, cobalt, copper and vanadium with

---

various ligands that could potentially enhance biological activity (mimetics of insulin). She also analyzed crystal and molecular structures of new compounds.

In cooperation with other research groups, our expertise in structural characterization was contributed.

The research on coordination compounds with  $\beta$ -diketonato ligands, indol-3-acetato and indol-3-propionato ligands and on picolinato ligands has been conducted. Vanadium and zinc coordination compounds are known as insulin enhancers, since they lower the glucose level in blood. We have synthesized and structurally characterized six novel  $\text{VO}^{2+}$ ,  $\text{VO}_2^+$  in  $\text{Zn}^{2+}$  coordination compounds with the derivatives of picolinic acid (such as 3,5-difluoropicolinic acid, 5-cianopicolinic acid) and different N-donor ligands (4-aminopyridine, 4-dimethylaminopyridine, imidazole) or solvents (water, methanol). In 2012 we continued our scientific collaboration with the group of Prof. Liu from East China Normal University, Shanghai (China) and developed an efficient method for incorporation of heterocycles into organic molecules. The palladium-catalyzed crosscouplings based on organometallic substrates enables efficient arylation reactions of heteroaromatics.

We continued with the research on other coordination compounds. Three related mononuclear copper coordination compounds with vanillin (natural model compound for lignin) and water are connected by three different hydrogen bond patterns within their molecular structures. For these, three different types of magnetic interactions were experimentally detected and further theoretically analyzed. Other new coordination compounds were also prepared.

The research of new materials was directed towards new ones that enable their use in fuel cells. They must meet two criteria: enhanced energy conversion of hydrogen (AFC, DFAFC) or other lighter hydrocarbons (SOFC) and prolonged time of use of such materials. The selection of anode materials for high temperature SOFC with proper characteristics is a very difficult task. Besides the material itself, which is usually cermet, its microstructural properties has a dominant role in its characteristics. Dispersion of the metal phase in the ceramic matrix with sufficient open porosity at the same time is the main problem in maintaining appropriate quality level. With the fuel cells of this type the usability is strongly affected by other factors such as poisoning of the anode material with different compounds, or the deposition of an inert material on the surface of the electrocatalyst. This effect was studied in detail, namely the formation of different forms of carbon on the surface and in the pores of the anode material.

Although it seems that the research group is very heterogeneous, we believe that such a group can be very successful, mainly because a critical mass is achieved and financial resources suffice for the purchase and maintenance of the established research infrastructure. Moreover, the research program group combines teaching with research, which is the essence of research universities. We believe we have achieved the set out goals for 2012. A total of 44 published works were tagged with 1.01, three of them with an A« 'and 14 labelled with A'.

## SCIENTIFIC ACHIEVEMENTS

The following achievements need to be highlighted:

The effect of processing conditions on the properties of LTCC material

American Ceramic Society; Journal of the American Ceramic Society; 2012; Vol. 95, issue 2; str. 760-767; Impact Factor: 2.272; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 0.774; A'': 1; A': 1; WoS: PK; Avtorji / Authors: Makarovič Kostja, Meden Anton, Hrovat Marko, Holc Janez, Benčan Andreja, Dakskobler Aleš, Kosec Marija

In this work the effect of firing temperature and firing time on the phase composition, microstructure, biaxial flexural strength, and temperature coefficient of expansion (TCE) of low-temperature co-fired

ceramic (LTCC) material is presented. At temperatures around 700 °C the Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> starts to dissolve in a low viscosity glass phase and this occurs up to 800 °C, when 10 wt% of Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> ceramic filler is dissolved in the glass phase forming the alumina-enriched area. This area is suitable for the crystallization of anorthite, which nucleates on the Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> particles. The crystallization starts at 875 °C and the mass fraction of anorthite increases with increasing the temperature until it reaches a plateau value of around 22 wt% at higher temperatures or longer firing times. The biaxial flexural strength of the LTCC increases with increasing firing temperature from 135 MPa (at 800 °C) to around 300 MPa (at 900 °C). The major effect on the biaxial flexural strength of LTCC is that of porosity. The effect of the amount of anorthite on the LTCC biaxial flexural strength is minor. The TCE of the LTCC decreases from  $5.6 \times 10^{-6}$  to  $5.0 \times 10^{-6}$  K<sup>-1</sup> with increasing firing temperatures or times and it is correlated with the anorthite mass fraction, which crystallizes at the expense of a decreasing amount of glass phase in the LTCC.

A facile synthesis of indolo[3,2,1-j][kappa]carbazoles via palladium-catalyzed intramolecular cyclization

Pergamon Press; Tetrahedron letters; 2012; Vol. 53, no. 39; str. 5248-5252; Impact Factor: 2.683; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.667; WoS: EE; Avtorji / Authors: Lv Jun, Liu Qiancai, Tang Jie, Perdih Franc, Kranjc Krištof

A novel approach leading to indolo[3,2,1-jk]carbazoles with various functional groups by palladium-catalyzed transformation, where N-(2-bromoaryl)carbazoles are cyclized to give the target molecules via C–X/C–H cross-coupling are reported. Palladium facilitates the formation of an aromatic palladium bromide by oxidation addition, while the base provides the driving force for carbon–carbon bond formation of the expected indolo[3,2,1-jk]carbazoles in either polar or non-polar solvents. A mechanism for this palladium-catalyzed reaction has been proposed.

Cis-trans isomeric and polymorphic effects on the magnetic properties of water-bridged copper coordination chains

American Chemical Society.; Inorganic chemistry; 2012; Vol. 51, no. 5; str. 3094-3102; Impact Factor: 4.601; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.341; A': 1; WoS: EC; Avtorji / Authors: Kozlevčar Bojan, Kitanovski Nives, Jagličič Zvonko, Bandeira Nuno A. G., Robert Vincent, Le Guennic Boris, Gamez Patrick

Three related mononuclear copper coordination compounds with vanillin (natural model compound for lignin) and water are connected by three different hydrogen bond patterns within their molecular structures. For them, three different types of magnetic interactions were experimentally detected and further theoretically analyzed.

Deactivation of Ni-YSZ material in dry methane and oxidation of various forms of deposited carbon ASME; Journal of fuel cell science and technology; 2012; Vol. 9, no. 6; art. no. 061003 (7 str.); Impact Factor: 1.136; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.428; WoS: HQ, ID; Avtorji / Authors: Novosel Barbara, Marinšek Marjan, Maček Jadran

Carbon deposits are the most probable mode of deactivation for Solid Oxide Fuel Cell (SOFCs) using methane or higher hydrocarbons as fuel. The deposition of various carbon allotropes on the anode material was studied under dynamic and isothermal conditions. The results show methane dissociation on Ni-YSZ (nickel-yttrium stabilized zirconia) under the temperature-programmed mode in three general steps. Under isothermal conditions various carbon species were formed, depending on the temperature. The presence of amorphous, filamentous, pyrolytic and graphitic carbon allotropes was determined by Quadrupole Mass Spectroscopy (QMS), X-ray crystallography, Field Emission Scanning Electron Microscopy (FE-SEM), Infrared Spectroscopy (IR). Carbon allotropes were subsequently oxidized in the atmosphere with 20.0 vol% and 0.5 vol% of oxygen in argon and show markedly different reactivity towards oxidation.

---

A new simple synthesis and characterization of Sm-doped ceria and its homogeneous precursor  $[\text{Ce}_{0.80}\text{Sm}_{0.20}(\text{Ac})_3(\text{Gly})]_n$

Elsevier; Journal of the European Ceramic Society; 2012; Vol. 32, no. 10; str. 2333-2339; Impact Factor: 2.353; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 0.774; A": 1; A': 1; WoS: PK; Avtorji / Authors: Skalar Tina, Maček Jadran, Golobič Amalija

A new method for the synthesis of  $\text{Ce}_{0.80}\text{Sm}_{0.20}\text{O}_{1.90}$  was presented. Drying of the solution of ethylene glycol and stoichiometric amounts of the acetates  $\text{Ce}(\text{C}_2\text{H}_3\text{O}_2)_3 \cdot x\text{H}_2\text{O}$  and  $\text{Sm}(\text{C}_2\text{H}_3\text{O}_2)_3 \cdot x\text{H}_2\text{O}$  resulted in a highly crystalline product of  $[\text{Ce}_{0.80}\text{Sm}_{0.20}(\text{C}_2\text{H}_3\text{O}_2)_3(\text{C}_2\text{H}_6\text{O}_2)]_n$ , a new chained polymeric coordination compound. With the calcination of this precursor at 900 °C and sintering at 1150 °C, pure  $\text{Ce}_{0.80}\text{Sm}_{0.20}\text{O}_{1.90}$ , was obtained with desired homogeneity and density. This paper reports elemental (CHN and ICP-MS) and single crystal X-ray structure analyses of the precursor  $[\text{Ce}_{0.80}\text{Sm}_{0.20}(\text{C}_2\text{H}_3\text{O}_2)_3(\text{C}_2\text{H}_6\text{O}_2)]_n$ . Its thermal decomposition to  $\text{Ce}_{0.80}\text{Sm}_{0.20}\text{O}_{1.90}$  has been studied via HT-XRD and TG-DTA analysis. The structure and composition of  $\text{Ce}_{0.80}\text{Sm}_{0.20}\text{O}_{1.90}$  was also confirmed by powder XRD (Rietveld refinement).

## OTHER IMPORTANT SCIENTIFIC ACHIEVEMENTS

- An influence of carbonates on the hydration of Portland cement  
[S. Medvešček]; 2012; IX, 107 f.; Avtorji / Authors: Medvešček Simona  
The doctoral thesis presents the results of quantitative analysis, in terms of hydration and formation of hydrated phases. The influence of variously soluble carbonates on these processes was evaluated at two different temperatures.
- Tehnological megatrends and top innovations for application in chemical industry  
2012; Avtorji / Authors: Leban Ivan, Bratkovič Tomaž  
Lecture at the: »Prvi vrh kemijske industrije - dan kemije, farmacije, plastike in gume« at Brdo pri Kranju, 2012.
- 21st Slovenian-Croatian Crystallographic Meeting, Pokljuka, 2012 with the international participation.  
Faculty of Chemistry and Chem. Techn.; 2012; 73 pp., 12 str. pril; Avtorji / Authors: Lah Nina, Trdin Miha, Leban Ivan  
Organisation of the 21st Slovenian-Croatian Crystallographic Meeting, Pokljuka, 2012 with the international participation.
- Preparation of racemic nicotine  
Urad Republike Slovenije za intelektualno lastnino-Office RS for IP; 2012; 7 str.; Avtorji / Authors: Turel Iztok, Kljun Jakob, Štefane Bogdan  
Patent for the preparation of racemic nicotine.
- Organometallic fluorides  
2012; Avtorji / Authors: Perdih Franc  
Invited lecture at East China Normal University, Shanghai, China, May 2012.

## **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**

**PROGRAMSKA SKUPINA / RESEARCH PROGRAMME GROUP**

**P1-0179**

**VODJA PROGRAMSKE SKUPINE / PRINCIPAL RESEARCHER**

**akademik red. prof. dr. Branko Stanovnik**

**SODELAVCI PROGRAMSKE SKUPINE / RESEARCH PROGRAMME STAFF**

**Raziskovalci / *Researchers***

akad. red. prof. dr. Branko Stanovnik

red. prof. dr. Jurij Svete

dr. Uroš Grošelj

**Mladi raziskovalci / *Young Researchers***

Jernej Baškovč

Jure Bezenšek

Jona Mirnik

Ana Novak

Benjamin Prek

Sebastijan Ričko

Luka Šenica

**Tehniki / *Technicians***

Tončka Kozamernik Hudeček

Tatjana Toporiš Stipanovič

## **POROČILO O REALIZACIJI PROGRAMA**

### **ZNANSTVENI IN DRUGI RELEVANTNI DOSEŽKI**

V letu 2012 smo nadaljevali z raziskavami v skladu z zastavljenimi cilji na naslednjih področjih:

**1. [2+2] Cikloadicije in alternativne Michaelove adicije elektronsko revnih acetenov in drugih elektronsko revnih spojin na enamione in sorodne spojine.**

**a) Enostavna sinteza 2-substituiranih piridin-4,5-dikarboksilatov in njihovih N-oksidov.**

Polisubstituirane aminobutadiene, to je dimetil 2-[(dimetilamino)metilen]-3-(2-substituirane) sukcinat, smo pripravili iz alkil, aril in heteroaril metil ketonov z N,N-dimetilformamid dimetila-

cetalom (DMDDMA) ali tert-butyl-bis(dimetilamino)metanom (Bredereckovim reagentom), nato pajih naprej pretvorili z [2+2] cikloadicijo na dimetil acetilendikarboksilat v ustrezne aminobutadiene. Ti butadieni predstavljajo izomerne spojine glede na produkte dobljene z Michaelovo adicijo, zato predstavljajo tudi alternativno skupino intermediatov za sintezo polisubstituiranih piridinov, ki jih po Bohlmann-Rahtzovi metodi me moremo pripraviti. Pri reakciji z amonijevim acetatom nastanejo 2-alik, 2-aril in 2-heteroaril substituirani piridin-4,5-dikarboksilati, priprekaciji s hidroksilaminom pa 2-alkil, 2-aril in 2-heteroaril 4.5-bis(metoksikarbonil)-piridin-N-oksi-di. Reakcijo smo razširili še na diacil- in triacetilbenzene in tako pripravili 1,2, 1,4 in 1,3,5-trisubstituirane benzene s piridinskimi ali piridin n-oksidnimi skupina vezanimi na benzenovem obroču.

(J. Bezenšek, B. Prek, U. Grošelj, M. Kasunič, J. Svete, B. Stanovnik, *Tetrahedron* 2012, 68, 4719-4731).

**b) Transformacija enaminonov. Enostavna »one-pot« sinteza imidazolonovih derivatov.**

Izdelali smo enostavno enolončno (»one-pot«) sintezo etil (5-benzoil-2-okso—3-substituiranih-2,3-dihidro-1H-imidazol-1-il-karbamatov z Michaelovo adicijo dietil azodikarboksilatov na (*E*)—3-(dimetilamino)-1-fenilprop-2-en-1-one s sledečo substitucijo dimetilaminske skupine s primarnimi amini in ciklizacijo v imidazolonske derivate z 68-96 % izkoristki.

(J. Bezenšek, U. Grošelj, K. Stare, J. Svete, B. Stanovnik, *Tetrahedron* 2012, 68, 516-522).

**c) Enamino estri v sintezi heterocikličnih sistemov. Transformacija dimetil acetona 1,3-dikarboksilata v polisubstituirane derivate 1,6-naftiridin-8-karboksilata.**

Uspelo nam je izdelati dvostopenjsko sintezo 1,6-naftiridinov. Metil 2-(2-metoksi-2-oksoetil)-6-okso-1,6-dihidropiridin-3-karboksilat, ki smo ga pripravili in dimetil acetona-1,3-dikarboksilata in amida propiolne kisline, smo z DMFDMA pretvorili najprej v 2-[1-(dimetilamino)-3-metoksi-3-oksoprop-1-en-2-il]-6-okso-1,6-dihidropiridin-3-dikarboksilat. Pri nadaljni reakciji z monosubstituiranimi hidrazini pa nastanejo substituirani 1,6-naftiridin-8-karboksilati.

(J. Šporar, J. Bezenšek, U. Uršič, A. Golobič, J. Svete, B. Stanovnik, *Heterocycles* 2012, 84, 449-459).

## 2. Paralelna sinteza

**a) Paralelna sinteza 2-substituiranih 6-(5-okso-1-fenilpirolidin-3-il)pirimidin-5-karboksamidov.**

Sintetizirali smo knjižnico 24 derivatov 6-(5-okso-1-fenilpirolidin-3-il)pirimidin-5-karboksamidov s paralelno sintezo v raztopini (solution-phase). Sinteza predstavlja petstopenjsko pretvorbo itakonske kisline v 1-metil in 1-fenil substituirane 6-(5-okso-1-fenilpirolidin-3-il)pirimidin-5-karboksilno kislino, ki smo jo s paralelnim amidiranjem s serijo 12 alifatskih aminov pretvorili v ustrezne karboksamide z zelo dobrim izkoristkom (80–100 %).

(B. Črček, J. Baškovč, U. Grošelj, D. Kočar, G. Dahmann, B. Stanovnik, J. Svete, *Molecules*, 2012, 17, 5363-5384).

**b) »Diversity-oriented« sinteza 1-substituiranih 4-aril-6-okso-1,6-dihidropiridin-3-karboksamidov.**

Izdelali smo razmeroma enostavno pet-stopenjsko sintezo 1-substituiranih-4-aril-6-okso-1,6-dihidropiridin-3-karboksamidov iz metil 3-okso-pentandioata, preko metil 4-hidroksi-6-okso-1,6-dihidropiridin-3-karboksilatov and 4-aril-6-okso—1,6-dihidropiridin-3-karboksilatov kot ključnih intermediatov. Kombinatorni »screening« je bila bistvena stopnja pri določanju optimalnih reakcijskih pogojev pri sintezi 1-alkil-4-arilpiridonov. S hidrolizo estrov in paralelnim amidiranjem v raztopini nastanejo končne spojine v dobrem izkoristku.



(J. Baškovč, G. Dahmann, A. Golobič, U. Grošelj, D. Kočar, B. Stanovnik, J. Svete, *ACS Combinatorial Science* 2012, 14, 513–519).

### 3. Sinteza 3-(2-aminoetil)-5-hidroksi-1H-pirazolovih derivatov.

Pri reakciji  $\beta$ -keto estrov s hidrazini nastanejo 1-substituirani tert-butil 2-(5-hidroksi-1H-pirazol-3-il)etilkarbamati in 2-(5-okso-2,5-dihidro-1H-pirazol-3-il)etilkarbamati. Z deprotekcijo v kislem nastanejo ustrezni 3-(2-aminoetil)-5-hidroksi-1H-pirazoli z dobrimi izkoristki. Z aciliranjem nastanejo ustrezni N-acil in N,O-diacil derivati

(U. Grošelj, D. Kralj, J. Waggar, G. Dahmann, B. Stanovnik, J. Svete, *ARKIVOC* 2012 (iii), 49–65).

### 4. Sinteza organokatalizatorjev

#### a) Sinteza in strukturne karakterizacije novih amino pripravljenih iz kafe.

Iz (+)-kafre smo v petih sinteznih korakih pripravili nove 4-substituirane derivate kamfidina, pri čemer je bila *Beckmannova* premestitev sintezna stopnja z najnižjim izkoristkom. Pod pogoji *Beckmannove* premestitve smo iz izoborneola, ki je nastal kot stranski produkt pri hidrogeniranju ariliden ketona, dobili dva nova neznana produkta premestitve. (1S)-(+)-kafrakinon smo pretvorili v *cis*- in *trans*-diamina v dveh korakih, in prvega ciklizirali v imidazolinsko sol, ki je prekurzor *N*-heterocikličnih karbenov. Strukture vseh novih spojin so bile temeljito okarakterizirane z uporabo NMR tehnik in/ali rentgenske strukturne analize monokristalov.

(U. Grošelj, A. Sevšek, S. Ričko, A. Golobič, J. Svete, B. Stanovnik, *Synthesis and Structural Characterization of Novel Camphor-derived Amines*, *Chirality* 2012, 24, 778–788).

#### b) Sinteza organokatalizatorjev na osnovi 2-(3-(3,5-bis(trifluorometil)fenil)tioureido)-3-((dimetilamino)metil)kafre

V stereo-divergentni sintezi smo v petih korakih iz (+)-kafre pripravili tri nove bifunkcionalne tiosečninske derivate kafre kot potencialne organokatalizatorje. Poleg tega smo v treh korakih iz (1S)-(+)-kafrakinona pripravili bifunkcionalna tiosečninska derivata izoborneola kot potencialna organokatalizatorja. Nove organokatalizatorje smo testirali na modelni reakciji *Michaelove* adicije dimetil malonata na *trans*- $\beta$ -nitrostiren z nizkimi do zmernimi enantioselektivnostmi (20%–60% ee). Konfiguracije vseh novih spojin so bile temeljito okarakterizirane z uporabo različnih NMR tehnik.

(U. Grošelj, S. Ričko, J. Svete, B. Stanovnik, *Chirality* 2012, 24, 412–419).

#### c) Sinteza in strukturne elucidacije novih tiosečnih pripravljenih iz kafre

Iz 3-((dimetilamino)metilen)kafre kot skupnim prekurzorjem smo pripravili devet novih tiosečninskih derivatov kafre. Tiosečninski fragment je pripet bodisi na mestu 2 ali na mestu 3 skeleta kafre. 2-Funkcionalizirane produkte smo pripravili v dveh ali treh sinteznih korakih, 3-funkcionalizirane spojine pa v petih sinteznih korakih iz skupnega prekurzorja. Konfiguracije vseh novih spojin so bile temeljito okarakterizirane z uporabo različnih NMR tehnik in/ali rentgenske strukturne analize monokristalov.

(U. Grošelj, A. Golobič, K. Stare, J. Svete, B. Stanovnik, *Chirality* 2012, 24, 307–317).

## PATENTNI PRIJAVI

1. BEZENŠEK, Jure, MEŽNAR, Eva, STRLE, Gregor, GROŠELJ, Uroš, SVETE, Jurij, STANOVNIK, Branko. *Postopek priprave imidazolonskih derivatov : patentna prijava št. P-201200183*. Ljubljana: Urad Republike Slovenije za intelektualno lastnino, 5. 6. 2012. [COBISS.SI-ID 36113413]

- 
2. NOVAK, Ana, TESTEN, Ana, BEZENŠEK, Jure, GROŠELJ, Uroš, STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. *Sinteza mimetikov beta razvoja : patentna prijava št. P-201200183*. Ljubljana: Urad Republike Slovenije za intelektualno lastnino, 24. 5. 2012. [COBISS.SI-ID 36113669]

## PLENARNA IN VABLJENA PREDAVANJA

1. Stanovnik B., Bezenšek J., Prek B., Grošelj U., Svete J.. Thermal [2+2]cycloadditions. Metal-free synthesis of polysubstituted heterocycles : [invited lecture]. V: *25<sup>th</sup> European colloquium on heterocyclic chemistry : August 13<sup>th</sup> - 17<sup>th</sup>, 2012*. Reading, Great Britain: Book-of-Abstracts.com, cop. 2012, str. 11–12.
2. Stanovnik B.: Enaminones in organic synthesis from amino acids via heterocyclic compounds to natural products : [plenary lecture]. V: *1<sup>st</sup> International Conference on Science Diplomacy and Developments in Chemistry, 24-26 November 2012, Alexandria-Egypt. Book of abstracts*. [S. l.: s. n.], 2012, str. 62.
3. Stanovnik B.: Thermal [2+2] cycloadditions of electron-poor acetylenes to enaminones and further transformations of polysubstituted butadienes : [plenary lecture]. V: *XXXIV Convegno Nazionale Divisione di Chimica Organica : Università degli Studi di Pavia, 10-14 settembre 2012*. [S. l.: s. n.], 2012, str. 26.
4. Stanovnik B.: *Toplogredni plini: naravni viri metana in njegov vpliv na podnebne spremembe = Greenhouse gases: the natural sources of methane and its impact on climate changes* : vabljeno predavanje na simpoziju Vidmarjev dan, Ljubljana, 21. junij, 2012.

## PREDAVANJA NA TUJIH UNIVERZAH IN DRUGIH INSTITUCIJAH

1. Stanovnik B.: *Enaminones in organic synthesis: from [β]-dimethylamino-[α],[β]-didehydro-[α]-amino acids via heterocyclic compounds to natural products and their analogs* : [Hochschule Aalen, Technik und Wirtschaft, Fakultät Chemie, 24. April 2012]. Aalen, 2012.
2. Stanovnik B.: *New synthetic methodologies: from amino acids via heterocyclic systems to natural products* : Consejo Superior de Investigaciones Científicas, Instituto de Química Médica, Madrid, June 5<sup>th</sup>, 2012.
3. Stanovnik B.: *New synthetic methodologies: from amino acids via heterocyclic systems to natural products* : Real Sociedad Española de Química in Universidad de Sevilla, Sevilla, June 6<sup>th</sup>, 2012.
4. Stanovnik B.: *New synthetic methodologies: from amino acids via heterocyclic systems to natural products* : Universidad de Alicante, Alicante, June 13<sup>th</sup>, 2012.
5. Stanovnik B.: *New synthetic methodologies: from amino acids via heterocyclic systems to natural products* : Universidad de Granada, Granada, June 11<sup>th</sup>, 2012.

## 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) (en članek v tisku).
2. Sodelovanje s prof. dr. W. Kanteleherjem z univerze v Stuttgartu (Nemčija) na področju amid acetalov in sorodnih spojin kot reagentov v organski sintezni kemiji (vodja: B. Stanovnik) (en članek v pripravi za tisk).
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) (en članek v pripravi za tisk).
4. Sodelovanje s prof. Saverijem Florijem, z univerze v Bariju (Italija) na področju reakcij enaminonov in sorodnih spojin s kiralnimi aziridini in epoksidi (vodja B. Stanovnik) (en članek v pripravi za tisk).



5. Zelo aktivno sodelovanje na področju sinteze heterocikličnih spojin s farmacevtsko tovarno BOEHRINGER-Biberach, Ingelheim (Nemčija) (vodja: J. Svete)

## MEDNARODNO PRIZNANJE

STANOVNIK, Branko. [*Honorary membership and medal : Società Chimica Italiana, Pavia, September 10th, 2012*]. [2012]. [COBISS.SI-ID 36221701]

## UREDNIŠTVO IN ČLANSTVO V UREDNIŠKIH ODBORIH

1. *Acta chimica slovenica*. Stanovnik, Branko (predsednik uredniškega sveta 1995-). [Tiskana izd.]. Ljubljana: Slovensko kemijsko društvo: =Slovenian Chemical Society, 1993-. ISSN 1318-0207. <http://acta.chem-soc.si/>. [COBISS.SI-ID 14086149]
2. *Advances in heterocyclic chemistry*. Stanovnik, Branko (član uredniškega odbora 2003-). New York [etc.]: Academic Press, 1963-. ISSN 0065-2725. [COBISS.SI-ID 486917]
3. *ARKIVOC*. Stanovnik, Branko (Scientific Editor 2010-, član uredniškega sveta 2010-, gostujoči urednik 2013). [Print ed.]. Gainesville: Arkat USA Inc., 2000-. ISSN 1424-6376. [COBISS.SI-ID 28057605]
4. *Croatica chemica acta*. Stanovnik, Branko (član uredniškega odbora 1985-). Zagreb: Hrvatsko kemijsko društvo, 1956-. ISSN 0011-1643. [COBISS.SI-ID 22807]
5. *International journal of organic chemistry*. Stanovnik, Branko (član uredniškega odbora 2011-). [Print ed.]. Irvine, CA: Scientific Research Pub., 2011-. ISSN 2161-4687. <http://www.scirp.org/journal/ijoc>. [COBISS.SI-ID 35113989]
6. *Journal of heterocyclic chemistry*. Stanovnik, Branko (član uredniškega odbora 1997-). Provo, Utah, etc.: HeteroCorporation. ISSN 0022-152X. [COBISS.SI-ID 25749248]
7. *Molecules*. Stanovnik, Branko (član uredniškega odbora 1998-). Berlin: Springer; Basel: Molecular Diversity Preservation International. ISSN 1420-3049. [COBISS.SI-ID 18462981]
8. *Targets in heterocyclic systems chemistry and properties*. Stanovnik, Branko (član uredniškega odbora 2000-). Roma: Società Chimica Italiana. ISSN 1724-9449. [COBISS.SI-ID 1365807]
9. *Trends in Heterocyclic Chemistry*. Stanovnik, Branko (član uredniškega odbora 2006-). Trivandrum: Research Trends. ISSN 0972-432X. [COBISS.SI-ID 1365551]

## NAGRADE

1. BAŠKOVČ, Jernej. Uporaba kombinatorne sinteze v pripravi mono- in bicikličnih heterocikličnih sistemov = Use of combinatorial synthesis in preparation of mono and bicyclic heterocyclic systems. V: PLEVNIK, Miha (ur.). 42. *Krkine nagrade : znanost povezuje : zbornik povzetkov : 22. simpozij, Novo mesto, 19. oktober 2012*. Novo mesto: Krka, 2012, str. 20-23. [COBISS.SI-ID 36273413]. (Mentor B. Stanovnik)
2. ČRČEK, Bojana. Kombinatorna sinteza 4-(1-fenil-5-oksopirrolidin-3-il) pirimidin-5-karboksamidov = Combinatorial synthesis of 4-(5-oxo-1-phenylpyrrolidine-3-yl) pyrimidine-5-carboxamides. V: PLEVNIK, Miha (ur.). 42. *Krkine nagrade : znanost povezuje : zbornik povzetkov : 22. simpozij, Novo mesto, 19. oktober 2012*. Novo mesto: Krka, 2012, str. 64. [COBISS.SI-ID 36319237]. (Mentor J. Svete)
3. TESTEN, Ana. Sintaza novih pirazolo[1,2-a]pirazolonskih peptidomimetikov = Synthesis of new pyrazolo[1,2-a]pyrazolone peptidomimetics. V: PLEVNIK, Miha (ur.). 42. *Krkine nagrade : znanost povezuje : zbornik povzetkov : 22. simpozij, Novo mesto, 19. oktober 2012*. Novo mesto: Krka, 2012, str. 73. [COBISS.SI-ID 36320517]. (Mentor J. Svete).

# RESEARCH PROGRAMME REPORT

## SCIENTIFIC AND OTHER RELEVANT ACHIEVEMENTS

### 1. (2+2) Cycloadditions and alternative 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 and related compounds.

By cycloaddition of (*E*)-3-(dimethylamino)prop-2-en-1-ones, prepared from carbocyclic and heterocyclic methyl ketones and DMFDMA, and dimethyl acetylenedicarboxylate dimethyl (*2E,3E*)-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. These polysubstituted amino butadienes represent the isomeric compounds in comparison to those obtained by Michael's additions and consequently they represent an alternative group of intermediates for the synthesis of polysubstituted pyridines which can not be obtained by the Bohlmann-Rahtz synthesis. In the reaction with ammonium acetate 2-alkyl, 2-aryl and 2-heteroaryl-pyridine-4,5-dicarboxylates are formed while in the reaction with hydroxylamine the corresponding 2-alkyl, 2-aryl and 2-heteroaryl-pyridine-4,5-bis(methoxycarbonyl)-pyridine-N-oxides are obtained. This methodology was extended also to diacetyl and triacetylbenzenes, from which 1,2-, 1,4-, and 1,3,5-trisubstituted benzenes with two or three substituted pyridyl or two or three substituted pyridine N-oxide groups are attached.

(J. Bezenšek, B. Prek, U. Grošelj, M. Kasunič, J. Svete, B. Stanovnik, *Tetrahedron* 2012, 68, 4719–4731).

#### b) Transformation of enaminones. A simple »one-pot« synthesis of imidazolone derivatives.

Ethyl (5-benzoyl-2-oxo-3-substituted-2,3-dihydro-1H-imidazol-1-yl)carbamates were prepared by the Michael's addition of diethyl azodicarboxylate to (*E*)-3-(dimethylamino)-1-phenylprop-2-en-1-one followed by substitution of the dimethylamino group with primary amines 5aen to afford a mixture of (*E*) and (*Z*) diethyl 1-(1-(substituted)amino)-3-oxo-3-phenylprop-1-en-2-yl)hydrazine-1,2-dicarboxylates, followed by cyclization to give final products. All imidazolones were synthesized in one pot reaction sequences with individual reactions being very clean.

(J. Bezenšek, U. Grošelj, K. Stare, J. Svete, B. Stanovnik, *Tetrahedron* 2012, 68, 516–522).

#### d) Enamino esters in the synthesis of heterocyclic systems. Transformation of dimethyl acetone-1,3-dicarboxylate into polysubstituted derivatives of 1,6-naphthiridine-8-carboxylate.

A simple two-step synthesis of 1,6-naphthyridine derivatives is described. Methyl 2-(2-methoxy-2-oxoethyl)-6-oxo-1,6-dihydropyridine-3-carboxylate, prepared from dimethyl acetone-1,3-dicarboxylate and propionic acid amide according to the known procedure, was transformed with *N,N*-dimethylformamide dimethyl acetal (DMFDMA) first into 2-[1-(dimethylamino)-3-methoxy-3-oxoprop-2-en-1-yl]-6-oxo-1,6-dihydropyridine-3-dicarboxylate. This was followed by reaction with monosubstituted hydrazines to afford substituted 1,6-naphthyridine-8-carboxylates

(J. Šporar, J. Bezenšek, U. Uršič, A. Golobič, J. Svete, B. Stanovnik, *Heterocycles* 2012, 84, 449–459).

### 2. Parallel synthesis

#### a) Parallel synthesis of 2-substituted 6-(5-oxo-1-phenylpyrrolidine-3-yl)pyrimidine carboxamides.

A library of 24 6-(5-oxo-1-phenylpyrrolidine-3-yl)pyrimidine-5-carboxamides was prepared by a parallel solution-phase approach. The synthesis comprises a five-step transformation of itaconic

acid into 1-methyl and 1-phenyl substituted 6-(5-oxo-1-phenylpyrrolidin-3-yl)pyrimidine-5-carboxylic acids followed by parallel amidation with a series of 12 aliphatic amines to afford the corresponding carboxamides **10** in good overall yields and 80–100% purity.

(B. Črček, J. Baškovč, U. Grošelj, D. Kočar, G. Dahmann, B. Stanovnik, J. Svete, *Molecules*, 2012, 17, 5363–5384).

**b) Diversity-oriented synthesis of 1-substituted 4-aryl-6-oxo-1,6-dihydropyridine-3-carboxamides.**

A simple five-step diversity-oriented synthesis of 1-substituted 4-aryl-6-oxo-1,6-dihydropyridine-3-carboxamides was developed. Treatment of dimethyl 2 ((dimethylamino) methylidene)-3-oxopentanedioate with twenty primary amines gave 1-substituted methyl 4-hydroxy-6-oxo-1,6-dihydropyridine-3-carboxylates. Transformation into the corresponding 4-tosyloxy and 4-chloro derivatives, followed by Suzuki–Miyaura arylations gave a series of eleven N-substituted methyl 4-aryl-6-oxo-1,6-dihydropyridine-3-carboxylates. Combinatorial screening was employed to establish suitable reaction conditions for Suzuki–Miyaura arylation of N-alkylpyridones. Hydrolysis of the esters followed by parallel solution-phase amidation of the corresponding carboxylic acids with primary and secondary amines furnished a library of seventeen final products.

(J. Baškovč, G. Dahmann, A. Golobič, U. Grošelj, D. Kočar, B. Stanovnik, J. Svete, *ACS Combinatorial Science* 2012, 14, 513–519).

**3. Synthesis of 3-(2-aminoethyl)-5-hydroxy-1H-pyrazole derivatives**

Treatment of  $\beta$ -keto ester with hydrazines gave 1'-substituted *tert*-butyl 2-(5-hydroxy-1H-pyrazol-3-yl)ethylcarbamates and 2-(5-oxo-2,5-dihydro-1H-pyrazol-3-yl)ethylcarbamates. Acidolytic deprotection afforded the corresponding 3-(2-aminoethyl)-5-hydroxy-1H-pyrazoles in good yields. Acylation gave either the *N*-acyl compounds or the *N,O*-diacyl derivative. Next, three *N,N*-dialkyl analogues were prepared from dimethyl acetone-1,3-dicarboxylate via condensation with hydrazines followed by hydrolysis of the esters, amidation of the carboxylic acids, and reduction of tertiary carboxamides.

(U. Grošelj, D. Kralj, J. Wagger, G. Dahmann, B. Stanovnik, J. Svete, *ARKIVOC* 2012 (iii), 49–65).

**4. Synthesis of organocatalysts**

**a) Synthesis and structural characterization of novel camphor-derived amines**

Two novel 4-substituted camphidine derivatives have been prepared from (+)-camphor in five steps, the *Beckmann* rearrangement being the bottleneck of the synthesis. Isborneol derivative, formed as a side product during the hydrogenation of arylidene ketone, under *Beckmann* rearrangement conditions yielded two interesting novel rearrangement products. (1*S*)-(+)-Camphorquinone was transformed into *cis*- and *trans*-diamines in two steps, the former being cyclized into an imidazoline salt, an *N*-heterocyclic carbene precursor. The structures of all novel compounds have been meticulously characterized using NMR techniques and/or single crystal X-ray analysis.

(U. Grošelj, A. Sevšek, S. Ričko, A. Golobič, J. Svete, B. Stanovnik, *Synthesis and Structural Characterization of Novel Camphor-derived Amines*, *Chirality* 2012, 24, 778 – 788).

**b) Synthesis of 2-(3-(3,5-Bis(trifluoromethyl)phenyl)thioureido)-3 ((dimethylamino)methyl)- camphor**

In a stereo-divergent synthesis, three novel camphor-derived bifunctional thiourea organocatalysts have been prepared in five steps starting from (+)-camphor. In addition, borneol-derived bifunctional thiourea organocatalysts have been prepared in three steps from (1*S*)-(+)-camphorquinone. Novel organocatalysts have been evaluated in a model reaction of *Michael* addition of dime-

thyl malonate to *trans*- $\beta$ -nitrostyrene with low to moderate enantioselectivities (20%–60% ee). Configuration of all novel compounds has been meticulously determined using nuclear magnetic resonance (NMR) techniques.

(U. Grošelj, S. Ričko, J. Svete, B. Stanovnik, *Chirality* 2012, 24, 412–419).

#### e) Synthesis and Structural Elucidation of Novel Camphor-Derived Thioureas,

Nine novel (+)-camphor-derived thioureas have been prepared. 3-((dimethylamino)-methylene) camphor served as a common precursor for the preparation of both 2-thiourea and 3-thiourea functionalized camphor derivatives, the latter were prepared in two or three steps whereas the former in five steps, respectively. Configuration of all novel compounds has been meticulously determined using NMR techniques and/or single crystal X-ray crystallography.

(U. Grošelj, A. Golobič, K. Stare, J. Svete, B. Stanovnik, *Chirality* 2012, 24, 307–317).

### PATENT APPLICATIONS

1. BEZENŠEK, Jure, MEŽNAR, Eva, STRLE, Gregor, GROŠELJ, Uroš, SVETE, Jurij, STANOVNIK, Branko. *Postopek priprave imidazolonskih derivatov: patentna prijava št. P-201200183*. Ljubljana: Urad Republike Slovenije za intelektualno lastnino, 5. 6. 2012. [COBISS.SI-ID 36113413]
2. NOVAK, Ana, TESTEN, Ana, BEZENŠEK, Jure, GROŠELJ, Uroš, STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. *Sinteza mimetikov beta razvoja: patentna prijava št. P-201200183*. Ljubljana: Urad Republike Slovenije za intelektualno lastnino, 24. 5. 2012. [COBISS.SI-ID 36113669]

### PLENARY AND INVITED LECTURES

1. Stanovnik B., Bezenšek J., Prek B., Grošelj U., Svete J.. Thermal [2+2]cycloadditions. Metal-free synthesis of polysubstituted heterocycles: [invited lecture]. V: *25<sup>th</sup> European colloquium on heterocyclic chemistry: August 13<sup>th</sup> - 17<sup>th</sup>, 2012*. Reading, Great Britain: Book-of-Abstracts.com, cop. 2012, str. 11–12.
2. Stanovnik B.: Enaminones in organic synthesis from amino acids via heterocyclic compounds to natural products: [plenary lecture]. V: *1<sup>st</sup> International Conference on Science Diplomacy and Developments in Chemistry, 24-26 November 2012, Alexandria-Egypt. Book of abstracts*. [S. l.: s. n.], 2012, str. 62.
3. Stanovnik B.: Thermal [2+2] cycloadditions of electron-poor acetylenes to enaminones and further transformations of polysubstituted butadienes: [plenary lecture]. V: *XXXIV Convegno Nazionale Divisione di Chimica Organica: Università degli Studi di Pavia, 10-14 settembre 2012*. [S. l.: s. n.], 2012, str. 26.
4. Stanovnik B.: *Toplogredni plini: naravni viri metana in njegov vpliv na podnebne spremembe / Greenhouse gases: the natural sources of methane and their impact on climate changes*: vabljeno predavanje na simpoziju Vidmarjev dan, Ljubljana, 21. junij, 2012.

### LECTURES AT FOREIGN UNIVERSITIES AND OTHER INSTITUTIONS

1. Stanovnik B.: *Enaminones in organic synthesis: from [β]-dimethylamino-[α],[β]-didehydro-[α]-amino acids via heterocyclic compounds to natural products and their analogs: [Hochschule Aalen, Technik und Wirtschaft, Fakultät Chemie, 24. April 2012]*. Aalen, 2012.
2. Stanovnik B.: *New synthetic methodologies: from amino acids via heterocyclic systems to natural products: Consejo Superior de Investigaciones Científicas, Instituto de Química Médica, Madrid, June 5<sup>th</sup>, 2012*.
3. Stanovnik B.: *New synthetic methodologies: from amino acids via heterocyclic systems to natural products: Real Sociedad Española de Química in Universidad de Sevilla, Sevilla, June 6<sup>th</sup>, 2012*.

4. Stanovnik B.: *New synthetic methodologies: from amino acids via heterocyclic systems to natural products*: Universidad de Alicante, Alicante, June 13<sup>th</sup>, 2012.
5. Stanovnik B.: *New synthetic methodologies: from amino acids via heterocyclic systems to natural products*: Universidad de Granada, Granada, June 11<sup>th</sup>, 2012.

## COOPERATION WITH FOREIGN UNIVERSITIES AND OTHER INSTITUTIONS

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-butadien-ov/*Reactions of 3-dimethylaminopropenoates and related enamines and 1,2-diaza-1,3-butadienes* (vodja: B.Stanovnik) (an article in print).
2. Sodelovanje s prof. dr. W. Kantlehnerjem z univerze v Stuttgartu (Nemčija) na področju amid acetalov in sorodnih spojin kot reagentov v organski sintezni kemiji /*Amide acetals and related compounds as reagents in organic synthesis chemistry*(vodja: B. Stanovnik) (an article in print).
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 *Amide acetals and related compounds as reagents in organic synthesis chemistry* (vodja: B. Stanovnik) (an article in print).
4. Sodelovanje s prof. dr. Saverijem Florijem, z univerze v Bariju (Italija) na področju reakcij enaminonov in sorodnih spojin s kiralinimi aziridini in epoksidi/*Reactions of enamines and related compounds with chiral aziridines and epoxides* (vodja B. Stanovnik) (an article in print).
5. Zelo aktivno sodelovanje na področju sinteze heterocikličnih spojin s farmacevtsko tovarno BOEHRINGER-Biberach, Ingelheim (Nemčija)/*Syntheses of heterocyclic compounds* (vodja: J. Svete)

## INTERNATIONAL RECOGNITIONS

STANOVNIK, Branko. [*Honorary membership and medal : Società Chimica Italiana, Pavia, September 10th, 2012*]. [2012]. [COBISS.SI-ID 36221701]

## EDITORIAL BOARDS MEMBERSHIPS

1. *Acta chimica slovenica*. Stanovnik, Branko (predsednik uredniškega sveta 1995-). [Tiskana izd.]. Ljubljana: Slovensko kemijsko društvo: =Slovenian Chemical Society, 1993-. ISSN 1318-0207. <http://acta.chem-soc.si/>. [COBISS.SI-ID 14086149]
2. *Advances in heterocyclic chemistry*. Stanovnik, Branko (član uredniškega odbora 2003-). New York [etc.]: Academic Press, 1963-. ISSN 0065-2725. [COBISS.SI-ID 486917]
3. *ARKIVOC*. Stanovnik, Branko (Scientific Editor 2010-, član uredniškega sveta 2010-, gostujoči urednik 2013). [Print ed.]. Gainesville: Arkat USA Inc., 2000-. ISSN 1424-6376. [COBISS.SI-ID 28057605]
4. *Croatica chemica acta*. Stanovnik, Branko (član uredniškega odbora 1985-). Zagreb: Hrvatsko kemijsko društvo, 1956-. ISSN 0011-1643. [COBISS.SI-ID 22807]
5. *International journal of organic chemistry*. Stanovnik, Branko (član uredniškega odbora 2011-). [Print ed.]. Irvine, CA: Scientific Research Pub., 2011-. ISSN 2161-4687. <http://www.scirp.org/journal/ijoc>. [COBISS.SI-ID 35113989]
6. *Journal of heterocyclic chemistry*. Stanovnik, Branko (član uredniškega odbora 1997-). Provo, Utah, etc.: HeteroCorporation. ISSN 0022-152X. [COBISS.SI-ID 25749248]
7. *Molecules*. Stanovnik, Branko (član uredniškega odbora 1998-). Berlin: Springer; Basel: Molecular Diversity Preservation International. ISSN 1420-3049. [COBISS.SI-ID 18462981]
8. *Targets in heterocyclic systems chemistry and properties*. Stanovnik, Branko (član uredniškega odbora 2000-). Roma: Società Chimica Italiana. ISSN 1724-9449. [COBISS.SI-ID 1365807]



- 
9. *Trends in Heterocyclic Chemistry*. Stanovnik, Branko (član uredniškega odbora 2006-). Trivandrum: Research Trends. ISSN 0972-432X. [COBISS.SI-ID 1365551]

## AWARDS

1. BAŠKOVČ, Jernej. Uporaba kombinatorne sinteze v pripravi mono- in bicikličnih heterocikličnih sistemov / *Use of combinatorial synthesis in preparation of mono and bicyclic heterocyclic systems*. V: PLEVNIK, Miha (ur.). 42. *Krkine nagrade: znanost povezuje: zbornik povzetkov: 22. simpozij, Novo mesto, 19. oktober 2012*. Novo mesto: Krka, 2012, str. 20-23. [COBISS.SI-ID 36273413]. (Mentor B. Stanovnik)
2. ČRČEK, Bojana. Kombinatorna sinteza 4-(1-fenil-5-oksopirrolidin-3-il) pirimidin-5-karboksamidov / *Combinatorial synthesis of 4-(5-oxo-1-phenylpyrrolidine-3-yl) pyrimidine-5-carboxamides*. V: PLEVNIK, Miha (ur.). 42. *Krkine nagrade: znanost povezuje : zbornik povzetkov: 22. simpozij, Novo mesto, 19. oktober 2012*. Novo mesto: Krka, 2012, str. 64. [COBISS.SI-ID 36319237]. (Mentor J. Svete)
3. TESTEN, Ana. Sinteza novih pirazolo[1,2-a]pirazolonskih peptidomimetikov / *Synthesis of new pyrazolo[1,2-a]pyrazolone peptidomimetics*. V: PLEVNIK, Miha (ur.). 42. *Krkine nagrade: znanost povezuje: zbornik povzetkov: 22. simpozij, Novo mesto, 19. oktober 2012*. Novo mesto: Krka, 2012, str. 73. [COBISS.SI-ID 36320517]. (Mentor J. Svete).

## FIZIKALNA KEMIJA PHYSICAL CHEMISTRY

### PROGRAMSKA SKUPINA / RESEARCH PROGRAMME GROUP

P1-0201

### VODJA PROGRAMSKE SKUPINE / PRINCIPAL RESEARCHER

red. prof. dr. Vojeslav Vlachy

### SODELAVCI PROGRAMSKE SKUPINE / RESEARCH PROGRAMME STAFF

#### **Raziskovalci / *Researchers***

red. prof. dr. Vojeslav Vlachy  
red. prof. dr. Marija Bešter-Rogač  
dr. Matjaž Bončina  
doc. dr. Janez Cerar  
dr. Jožica Dolenc  
dr. Igor Drobnak  
dr. Andrej Godec  
izr. prof. dr. Barbara Hribar-Lee  
red. prof. dr. Andrej Jamnik  
red. prof. dr. Ksenija Kogej  
red. prof. dr. Jože Koller  
izr. prof. dr. Jurij Lah  
dr. Miha Lukšič  
doc. dr. Črtomir Podlipnik  
red. prof. dr. Ciril Pohar  
dr. Iztok Prislán  
izr. prof. dr. Jurij Reščič  
dr. Bojan Šarac  
doc. dr. Matija Tomšič  
doc. dr. Tomaž Urbič

#### **Mladi raziskovalci / *Young Researchers***

Elizabeta Benigar  
Sašo Čebašek  
Jure Gujt  
Gregor Hostnik  
Matej Huš  
Ana Kroflič  
Andrej Lajovic  
Andrej Mernik  
Tomaž Mohorič  
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. S pomočjo metode ozkokotnega rentgenskega sipanja (SAXS) in simulacij Monte Carlo smo raziskali strukturo preprostih organskih kislin in iskali vzporednice z rezultati podobnih predhodnih raziskav na preprostih aldehydih in alkoholih [COBISS.SI-ID 36188165] (FK12). Izvedli smo tudi raziskavo temperaturno vzbujenih strukturnih prehodov G-žičk, ki nastanejo iz oligonukleotida d(G4T2G4), pri kateri smo uspešno primerjali rezultate vrste eksperimentalnih tehnik – UV in CD spektroskopije, diferenčno dinamične kalorimetrije (DSC), gelske elektroforeze, metode SAXS in dinamičnega sipanja svetlobe (DLS) [COBISS.SI-ID 36188165] (FK12)
2. S fluorescenčnimi meritvami in dodatno analizo z metodami molekulskega modeliranja smo predpostavili model za vezavo različnih polifenolov na goveji serumski albumin [COBISS-ID 4113784] (FK21). Ugotovili smo, da je vezavno mesto za polifenole v bližini Trp213 in da se med vsemi proučevanimi ligandi se na BSA najboljše veže Epigalokatehin3galat.
3. Raziskave alifatskih ionenov so bile objavljene v treh člankih objavljenih v ugledni znanstveni reviji *PhysChemChemPhys*: i) Isothermal titration calorimetry and molecular dynamics study of ionselectivity in mixtures of hydrophobic polyelectrolytes with sodium halides in water. *PCCP. Phys. chem. chem. phys.* 2012, 14, str. 2024-2031, [COBISS.SI-ID 35707397] (FK36), ii) Specific counter-ion and co-ion effects revealed in mixing of aqueous solutions of 3,3 and 6,6-ionenes with solutions of low molecular weight salts. *PCCP. Phys. chem. chem. phys.* 2012, 14, 6805-6811. [35925509] (FK37), iii) Aqueous solutions of ionenes : interactions and counterion specific effects as seen by neutron scattering. *PCCP. Phys. chem. chem. phys.*, 2012, 14, 12898-12904, [36222725] (FK38). Sem sodi tudi raziskava dinamike molekul vode in ionov v raztopinah 3,3- in 6,6-ionenov z različnimi protiioni, ki je bila objavljena v *J. Chem. Phys.* 2012 (COBISS.SI-ID 36050437) (FK24). Gre za prvo študijo te vrste pri raztopinah polielektrolitov.
4. Za vodne raztopine natrijevih soli metil-, etil-, propil- in butilparabena smo ugotovili, da je glavna razlika med preiskovanimi parabeni in njihovim analogom p-salicilatom v hidrolizi. Vodne raztopine parabenov imajo zelo visoko vrednost pH (preko 9), kar je verjetno tudi vzrok za njihovo antiseptično delovanje [COBISS.SI-ID 35718661] (FK29).
5. Prikazali smo možnost uporabe globalne analize podatkov za električno prevodnost razredčenih raztopin elektrolitov v širokem temperaturnem območju in ga preverili na treh različnih sistemih [COBISS.SI-ID 36170501] (FK5). S pomočjo meritev električne prevodnosti raztopin smo ugotovili, da stopnja ionizacije micel alkiltrimetilamonijevih kloridov pada z povečevanjem dolžine alkilne verige in narašča z višanjem temperature. Dodatek soli zniža kritično micelno koncentracijo in vpliva tudi na stopnjo ionizacije micel [COBISS.SI-ID 36171013] (FK9). Izvedli smo sistematično raziskavo procesa micelizacije biokompatibilnega zwitterionskega surfaktanta CHAPS v vodi, raztopinah NaCl in različnih pufrov ter vpliv različnih anionov in kati-



onov na njegovo micelizacijo. Izkazalo se je, da se CHAPS v vodi in pufrih obnaša kot neionski, v raztopinah soli pa kot kationski surfaktant s šibkim nabojem micel. S pomočjo modelne enačbe smo določili vse termodinamske parametre za proces micelizacije. Iz vrednosti spremembe toplotne kapacitete pri procesu lahko sklepamo na delno hidratacijo notranjosti micel [COBISS.SI-ID 36016389] (FK33).

S termodinamsko analizo smo sodelovali pri raziskavah selektivnega vezanja ATP-kompetitivnih inhibitorjev nekaterih novih bakterijskih encimov [COBISS.SI-ID 3286897] (FK40).

Opisali smo s slovenskim patentom *SI 23379 (A)* zaščiteno izpopolnitev kondenzatorske celice ter nadgradnjo obstoječega sistema za merjenje električne prevodnosti raztopin za potrebe meritev dielektrične konstante topil [COBISS.SI-ID 36170757] (FK14)

6. S pomočjo kalorimetrije in spektroskopije smo določili mehanizem in termodinamične značilnosti zvitja/razvitja struktur DNA imenovanih G-kvadruleksi tvorjenih iz baznega zaporedja človeške telomere [COBISS.SI-ID 36015365] (FK32). V sodelovanju s farmacevtsko firmo Lek smo raziskali termodinamične in strukturne lastnosti prepoznavanja proteina z imenom dejavnik tumorske nekroze (odgovornega za številne avtoimunske bolezni) s terapevtskim protitelesom [COBISS.SI-ID 35833349] (FK22). Razlike v termodinamiki razvitja dveh sorodnih bakterijskih toksinov smo razložili s pomočjo njunih strukturnih značilnosti [COBISS.SI-ID 36185093] (FK7). S kombinacijo raziskav in vivo in in vitro (struktura, termodinamika) smo opredelili interakcije med toksinom in njegovo tarčo girazo [COBISS.SI-ID 36015877] (FK34). Za to delo smo bili nagrajeni z naslovnico v ugledni reviji *Mol. Microbiol.*
7. Preučevali smo termodinamiko vodnih raztopin ionskih in hidrofobnih topljencev. Določili smo območje veljavnosti približne enačbe za izračun ionskega aktivnostnega koeficienta v HNC približku [COBISS.SI-ID 36183557] (FK1), ter enačbo, skupaj z računalniško simulacijo, uporabili za študij anomalij enostavnega modela raztopine elektrolita, v katerem je topilo upoštevano eksplicitno [COBISS.SI-ID 36411653] (FK26). Razvili smo enostavno analitično teorijo, ki kvalitativno pravilno opiše vse bistvene lastnosti hidrofobnega efekta [COBISS.SI-ID 36007173] (FK31)
8. Na področju študija sistemov, v katerih so prostostne stopnje deloma zamrznjene, smo z metodo molekulske dinamike in ROZ enačb določili difuzijske koeficiente in aktivnostne koeficiente posameznih ionskih zvrsti v modelu vodne raztopine ter raziskali vpliv lastnosti adsorbenta na dinamiko in termodinamiko teh sistemov [COBISS.SI-ID 36230149, 35680773] (FK25, FK41). Z ROZ metodo smo, v kombinaciji z metodo Monte Carlo, študirali ionsko izmenjavo [COBISS.SI-ID 36019717] (FK17) ter adsorpcije modela raztopine elektrolita [COBISS.SI-ID 35669765] (FK35) v nabitem adsorbentu. Pokazali smo uporabnost ROZ metode v kombinaciji z ustreznim modelom za študij membranskih ravnotežij [COBISS.SI-ID 36184581] (FK4).
9. Raziskave preprostih modelov vode podajamo v štirih člankih. i) V prvem smo preverili natančnost enostavnih modelov vode. Z uporabo teorije gostotnega funkcionala smo izračunali potencial med molekulama vode v različnih položajih, ki smo ga nato primerjali z napovedmi modelov. Ugotovili smo, da je med tri, štiri in pettočkovnimi modeli TIP3P, TIP4P/2005 najbolj natančen TIP5P [COBISS.SI-ID . ii) V drugem [COBISS.SI-ID 36186373] (FK8) smo izračunali Gibbsovo prosto energijo na mikroskopskem nivoju. Izračun je preprost in računsko nezahteven. Uporabimo pa prave ionske radije in ne potrebujemo dielektrične konstante. Model dobro napove proste energije za prenos alkalijskih in halogenidnih ionov v vodo. iii) Tretji prispevek [COBISS.SI-ID 35935237] (FK23) obravnava vodo na kvantnem nivoju. Preverili smo kako lokalno okolje vpliva na moč vodikove vezi med dvema molekulama. Ugotovili smo preprosto empirično zvezo med močjo vezi in številom molekul vode v lokalnem okolju. Na moč vodikove vezi pa ne vplivajo samo vode v prvi solvacijski lupini, temveč tudi v drugi. iv) V tem prispevku [COBISS.SI-ID 36029445] (FK39) so avtorji razvili statističnomehanski model, ki opisuje termične in volumetrične lastnosti vodi podobnih molekul. Model je variacija modela, ki je bil prej razvit za dvodimenzionalni model vode. Raziskali smo lastnosti kot so molski volumen, gostota, toplotna kapa-

citeta pri konstantnem tlaku, termični razteznostni koeficient in izotermna stisljivost v odvisnosti od temperature in tlaka.

10. V članku »Attraction Between Like-Charged Surfaces: Effect of Counterion Dimerization«, (*Acta Chim. Slov.* 2012, 59, 601–608, [COBISS.SI-ID 36188677]) (FK13) sta avtorja raziskovala odvisnost sile med dvema ravnima, enakomerno nabitima ploščama od sestave vmesne raztopine. Le-ta je vsebovala mešanico enoatomnih monovalentnih protiionov ter dvoatomne dvovalentne paličaste protiione. Pri bolj nabitih površinah je potreben manjši delež dvovalentnih protiionov, da pride do privlaka.
11. Določili smo strukture faz in fazni diagram v mešanicah polistirensulfonatnega aniona, alkil-trimetilamonijevih kationov in vode [COBISS.SI-ID 36006917] (FK30). Splošna značilnost je asociativna ločitev faz zaradi močnih elektrostatskih interakcij. Dodatna hidrofobna interakcija med poliionom in surfaktantnimi agregati doprinese k boljši topnosti kompleksne soli, če je v presežku poliion, in k njeni dodatni stabilizaciji, če je v presežku surfaktantni ion. Strukture kompleksov v področju topne micelne faze [COBISS.SI-ID 36183813] (FK2) kažejo, da je posledica hidrofobne interakcije tudi manjša velikost micel, ki pri velikih koncentracijah služijo kot mrežna mesta za tvorbo obsežne premrežene strukture. Obširen pregled preteklega dela na področju interakcij med polielektroliti in surfaktanti je podan v preglednem delu [COBISS.SI-ID 36169221] (FK52).

## DRUGI POMEMBNI ZNANSTVENI DOSEŽKI

1. Jurij Lah: *Isothermal titration calorimetry and thermodynamics of interactions between biological macromolecules* : Jožef Stefan Institute, March 21, 2012. 2012; Ljubljana. [COBISS.SI-ID 35845637] (FK58)  
Jure Gujt: *On the preparation for study of salicylates mobility* : [Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Fakultät für Chemie, Universität Duisburg-Essen, 11. april 2012]. Duisburg, 2012. [COBISS.SI-ID 35924229] (FK59)  
Ksenija Kogej: *[Polyelectrolyte-surfactant complexes (PCBs): the role of hydrophobic substituents on the polyion chain on their properties* : University of Helsinki, Department of Chemistry, Laboratory of Polymer Chemistry, September 3rd, 2012]. [2012]. [COBISS.SI-ID 36175877] (FK60)  
Iztok Prislán: *[Kinetics says jump, G-quadruplexes say how high* : University of Notre Dame, Department of Chemistry and Biochemistry, Special seminar, 18. 9. 2012, South Bend, Indiana, USA]. [2012]. [COBISS.SI-ID 36445957] (FK61)  
Iztok Prislán: *[Calorimetry in life science: unfolding and targeting of proteins* : Creighton University, College of Arts and Sciences, Department of Physics, Student colloquium, 19. 9. 2012, Omaha, Nebraska, USA]. [2012]. [COBISS.SI-ID 36446469] (FK62)  
Matjaž Bončina: *[Folding of human telomeric DNA and its recognition with various ligands* : University of Nebraska Medical Center, College of Pharmacy, September 21st, 2012]. [2012]. [COBISS.SI-ID 36227333] (FK63)  
Matjaž Bončina: *[Telomeric G-quadruplexes: folding and molecular recognition* : Institut Ruđer Bošković, 9. 11. 2012, Zagreb]. [2012]. [COBISS.SI-ID 36328453] (FK64)  
Iztok Prislán: *[Using calorimetry to study intra- and intermolecular interactions* : Institut Ruđer Bošković, Zavod za organsko kemijo i biokemiju, XCIII. Kolokvij ZOKB i SOK Hrvatskog kemijskog društva, 9. 11. 2012, Zagreb, Croatia]. [2012]. [COBISS.SI-ID 36446725] (FK65)
2. Sodelovali smo v bilateralnih projektih z ZDA, Flandrijo, Hrvaško, Finsko, Francijo (CEA), Ukrajino in Srbijo. Sodelovali smo pri dveh COST projektih (MP-0802 J. Lah in CM-1101 M. Bešter-Rogač). Za obdobje 2010-2014 smo pri NIH (National Institute of Health U.S.A.) pridobili 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) .

3. Na obisku smo imeli nekaj uglednih raziskovalcev iz tujine, med njimi Miguela A. Estesa iz Španija, Pera Linseja iz Švedske, Renata Tomaša iz Hrvaške in Iva Pintanido iz Hrvaške.
4. Ksenija Kogej: Sodelovanje s Krko d.d.; št. pog. I78-106259/2008; naslov »Študij in analiza farmacevtskih materialov«.
5. Jurij Lah: Sodelovanje s farmacevtsko firmo Lek, d.d. ( BIO 02/2011).
6. Andrej Lajovic, Nagrada Maksa Samca za doktorsko disertacijo s področja kemije za leto 2012 za nalogo Teorijske in eksperimentalne raziskave strukture enostavnih organskih tekočin in njihovih zmesi; mentor prof. dr. Andrej Jamnik.
7. Matej Huš, Univerzitetna Prešernova nagrada za leto 2012 za diplomsko delo Odvisnost potenciala med molekulama vode od lokalnega okolja; mentor doc. dr. Tomaž Urbič.  
Tomaž Mohorič, Prešernova nagrada FKKT za leto 2012 za raziskovalno nalogo Izračun srednjega koeficienta aktivnosti asimetričnih elektrolitov z uporabo HNC integralske enačbe; mentorica prof. dr. Barbara Hribar-Lee.
8. Jure Gujt je bil od 15. 1. 2012 – 15. 4. 2012 na strokovnem izpopolnjevanju pri prof. Eckhardu Spohru na Univerzi Duisburg-Essen.
9. Miha Lukšič je na enoletnem podoktorskem usposabljanju v ZDA.

## RESEARCH PROGRAM REPORT

### PROGRAM GOALS

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

### RESEARCH TOPICS AND SCIENTIFIC ACHIEVEMENTS

1. Structure of simple pure organic acids was investigated utilizing the small-angle x-ray scattering (SAXS) and Monte Carlo simulations. The results were compared with the results on simple alcohols and aldehydes [COBISS.SI-ID 36188165] (*FK12*). We have also studied temperature-induced structural transitions of G-wires formed from oligonucleotide d(G4T2G4). In this study we compared the results of a number of techniques such as UV and CD spectroscopy, differential scanning calorimetry (DSC), gel electrophoresis, SAXS and dynamic light scattering (DLS) [COBISS.SI-ID 36188165] (*FK12*).
2. A model of polyphenol binding to bovine serum albumin (BSA) was evaluated with fluorescence measurements and with use of molecular modeling methods [COBISS-ID 4113784] (*FK21*). Our studies have shown that binding site for polyphenols' binding is in vicinity of BSA's Trp213 residue. Epigallocatechin-3-gallate has the highest affinity to BSA among all studied ligands.

3. Studies of aliphatic ionenes were published in three papers in a distinguished scientific journal *PhysChemChemPhys*: i) Isothermal titration calorimetry and molecular dynamics study of ion selectivity in mixtures of hydrophobic polyelectrolytes with sodium halides in water. *PCCP. Phys. chem. chem. phys.* 2012, 14, str. 2024-2031, [COBISS.SI-ID 35707397] (FK36), ii) Specific counter-ion and co-ion effects revealed in mixing of aqueous solutions of 3,3 and 6,6-ionenes with solutions of low molecular weight salts. *PCCP. Phys. chem. chem. phys.* 2012, 14, 6805-6811. [35925509] (FK37), iii) Aqueous solutions of ionenes: interactions and counterion specific effects as seen by neutron scattering. *PCCP. Phys. chem. chem. phys.*, 2012, 14, 12898-12904, [36222725] (FK38).
4. For aqueous solutions of sodium salts of methyl-, ethyl-, propyl- and butylparaben it was found out that the major difference between them and their analogue p-salicylate is in the hydrolysis. Parabens's solutions thus possess quite high pH value (above 9) what could be the reason for their antiseptic activity. [COBISS.SI-ID 35718661].
5. The application of global analysis of electrical conductivity data was shown and tested on three different systems in a broad temperature range [COBISS.SI-ID 36170501]. From experimental data on electrical conductivity of water solutions of alkyltrimethylammonium chlorides it turned out that the degree of micelle ionization is decreasing with the increasing length of alkyl chain and grows with the increase of temperature. The addition of salt decreases the critical micelle concentration and also influences the degree of micelle ionization [COBISS.SI-ID 36171013].  
A systematic investigation of the micellization process of biocompatible zwitterion surfactant CHAPS in water, NaCl and different buffer solutions has been carried out together with the study of the influence of some anions and cations on its micellization process. It turned out that CHAPS behaves like a non-ionic surfactant in water and buffer solutions, and like a cationic surfactant with a weak micelle charge in salt solutions. By applying a model equation all thermodynamic parameters for the micellization process were estimated. From the obtained values for heat capacity, partial hydration of the micelle interior was assumed [COBISS.SI-ID 36016389].  
By thermodynamic analysis we investigated selective binding of ATP-competitive inhibitors of some new bacterial enzymes [COBISS.SI-ID 3286897].  
A modification of an existing coaxial cylindrical capacitor cell for determining the relative permittivity of diverse solvents, protected already by Slovene patent *SI 23379 (A)*, was described [COBISS.SI-ID 36170757].
6. Mechanism and thermodynamic properties of folding/unfolding of DNA structures (G-quadruplexes) formed from human telomeric sequence were determined using calorimetry and spectroscopy [COBISS.SI-ID 36015365] (FK32). Thermodynamic and structural features of recognising human necrosis factor (responsible for severe autoimmune diseases) by therapeutic antibody was investigated in collaboration with pharmaceutical company Lek [COBISS.SI-ID 35833349] (FK22). Differences in unfolding thermodynamics of two related bacterial toxins were explained by their structural features [COBISS.SI-ID 36185093] (FK7). By combination of in vivo and in vitro (structure, thermodynamics) studies we got a deeper insight into interactions between toxins and their target gyrase [COBISS.SI-ID 36015877] (FK34). For this study we were awarded with the cover-page in a reputable journal *Mol. Microbiol.*
7. Thermodynamic properties of ionic and hydrophobic solutes in aqueous solutions were studied. The accuracy of the HVB equation for the calculation of the ionic activity coefficients, valid within HNC approximation, was systematically investigated [COBISS.SI-ID 36183557] (FK1). Together with the computer simulations, this equation was used to study anomalies of a simple model of electrolyte solution, in which the solvent was treated explicitly [COBISS.SI-ID 36411653] (FK26). A simple analytical theory was developed, which qualitatively correctly describes all the major features of the hydrophobic effect [COBISS.SI-ID 36007173] (FK31).
8. Studying partly quenched systems, the molecular dynamics method in combination with the ROZ equations was used to determine the self-diffusion coefficients, and activity coefficients of indi-



- vidual ionic species in a model aqueous electrolyte solution adsorbed in a charged matrix. Special attention was paid to the influence of the characteristics of the matrix on the dynamical and thermodynamical properties of these systems [COBISS.SI-ID 36230149, 35680773] (FK25, FK41). The ROZ method was, together with the Monte Carlo computer simulation, used to study the ion exchange processes [COBISS.SI-ID 36019717] (FK17), as well as the adsorption of a model electrolyte [COBISS.SI-ID 35669765] (FK35) in charged matrices. We applied the ROZ method, together with an appropriate model, to study the membrane equilibrium [COBISS.SI-ID 36184581] (FK4).
9. Research of simple water models was reported in four papers: i) In the first paper, we tested the correctness of different simple water models by comparing quantum chemical potential between two water molecules and the potential used in different models. We found out that TIP3P, TIP4P/2005 and TIP5P are in best agreement with calculations. ii) In the second paper [COBISS.SI-ID 36186373] (FK8) we calculated free energy of solvation of ions on microscopic level. Calculation is simple and computationally not demanding. We used real ionic radius and there was no need for dielectric constant in calculations. The model gives good prediction for free energy for monovalent anions and cations in water. iii) In the third paper [COBISS.SI-ID 35935237] (FK23) we studied how local environment affects the strength of hydrogen bond between two water molecules. A simple empirical linear relationship was discovered between maximum hydrogen bond strength and the number of water molecules in the local environment. The local environment effect was shown to be considerable even on the second coordination shell. iv) In this work we developed [COBISS.SI-ID 36029445] (FK39) a statistical model which describes thermal and volumetric properties of water-like molecules. This model, which is largely analytical, is a variant of a model developed before for a two-dimensional Mercedes-Benz model of water. We explored properties such as molar volume, density, heat capacity, thermal expansion coefficient, and isothermal compressibility as a function of temperature and pressure.
  10. In the contribution entitled »Attraction Between Like-Charged Surfaces: Effect of Counterion Dimerization« (*Acta Chim. Slov.* 2012, 59, 601–608, [COBISS.SI-ID 36188677]) (FK13) we studied the force between two uniformly charged plates as a function of the composition of the intervening ionic solution. The latter was composed from a mixture of monovalent and divalent, rod-like in shape, counterions. For higher surface charge densities the attraction between the plates was achieved at smaller fraction of divalent counterions.
  11. Structures of phases and phase diagram were determined in polystyrenesulfonate anion-alkyl-trimethyl cation-water mixtures [COBISS.SI-ID 36006917] (FK30). A general feature is associative phase separation as a result of strong electrostatic interactions. Additional hydrophobic interaction between polyion and surfactant aggregates promotes dissolution of the complex salt when the polyion salt is added and provides further stabilization of the dense phase when the surfactant salt is added.

## OTHER IMPORTANT SCIENTIFIC ACHIEVEMENTS

1. Jurij Lah: *Isothermal titration calorimetry and thermodynamics of interactions between biological macromolecules* : Jožef Stefan Institute, March 21, 2012. 2012; Ljubljana. [COBISS.SI-ID 35845637] (FK58)  
 Jure Gujt: *On the preparation for study of salicylates mobility* : [Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Fakultät für Chemie, Universität Duisburg-Essen, 11. april 2012]. Duisburg, 2012. [COBISS.SI-ID 35924229] (FK59)  
 Ksenija Kogej: *[Polyelectrolyte-surfactant complexes (PCBs): the role of hydrophobic substituents on the polyion chain on their properties* : University of Helsinki, Department of Chemistry, Laboratory of Polymer Chemistry, September 3rd, 2012]. [2012]. [COBISS.SI-ID 36175877] (FK60)

---

Iztok Prislan: [*Kinetics says jump, G-quadruplexes say how high : University of Notre Dame, Department of Chemistry and Biochemistry, Special seminar, 18. 9. 2012, South Bend, Indiana, USA*]. [2012]. [COBISS.SI-ID 36445957] (FK61)

Iztok Prislan: [Calorimetry in life science: unfolding and targeting of proteins : Creighton University, College of Arts and Sciences, Department of Physics, Student colloquium, 19. 9. 2012, Omaha, Nebraska, USA]. [2012]. [COBISS.SI-ID 36446469] (FK62)

Matjaž Bončina: [Folding of human telomeric DNA and its recognition with various ligands : University of Nebraska Medical Center, College of Pharmacy, September 21st, 2012]. [2012]. [COBISS.SI-ID 36227333] (FK63)

Matjaž Bončina: [*Telomeric G-quadruplexes: folding and molecular recognition : Institut Ruđer Bošković, 9. 11. 2012, Zagreb*]. [2012]. [COBISS.SI-ID 36328453] (FK64)

Iztok Prislan: [Using calorimetry to study intra- and intermolecular interactions : Institut Ruđer Bošković, Zavod za organsko kemiju i biokemiju, XCIII. Kolokvij ZOKB i SOK Hrvatskog kemijskog društva, 9. 11. 2012, Zagreb, Croatia]. [2012]. [COBISS.SI-ID 36446725] (FK65)

2. Participation in bilateral projects with the USA, Flanders, Croatia, Finland, France (CEA), Ukraine in Serbia. Participation in two COST projects (MP-0802 J. Lah and CM-1101 M. Bešter-Rogač). We obtained the NIH (National Institute of Health U.S.A.) grant for Solvation in Biology, Principal investigators: V. Vlachy and K. A. Dill (Stony Brook University, and Laufer Center for Physical and Quantitative Biology, NY, USA) for 2010-2014.
3. Visit of several renowned foreign researchers, including Miguel A. Esteso from Spain, Per Linse from Sweden, Renato Tomaš from Croatia and Ivo Pintanida from Croatia.
4. Ksenija Kogej: Cooperation with pharmaceutical company Krka, d. d., contract No. I78-106259/2008, "Studies and analysis of pharmaceutical materials".
5. Jurij Lah: Cooperation with pharmaceutical company Lek, d. d. (BIO 02/2011).
6. In 2012, Andrej Lajovic was awarded the Maks Samec Award in Chemistry for his doctoral dissertation "Teoretical and experimental studies of structure of simple organic liquids and their mixtures", mentor: prof. dr. Andrej Jamnik.
7. In 2012, Matej Huš was awarded the University Prešeren Award for his graduation thesis "Dependence of water-water potential upon local environment", mentor: doc. dr. Tomaž Urbič.  
In 2012, Tomaž Mohorič was awarded the Faculty Prešeren Award for his research project "Calculation of mean activity coefficient of asymmetric electrolytes using the HNC integral equation", mentor: prof. dr. Barbara Hribar Lee.
8. Jure Gujt visited prof. Eckhard Spohr at University Duisburg-Essen between 1/15/12 and 4/15/12.
9. Miha Lukšič started his postdoctoral research in USA in September 2012.

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

**PROGRAMSKA SKUPINA / RESEARCH PROGRAMME GROUP**

**P1-0230**

**VODJA PROGRAMSKE SKUPINE / PRINCIPAL RESEARCHER**

**red. prof. dr. Marijan Kočevar**

**SODELAVCI PROGRAMSKE SKUPINE / RESEARCH PROGRAMME STAFF**

**Raziskovalci / *Researchers***

red. prof. dr. Marijan Kočevar

red. prof. dr. Janez Košmrlj

red. prof. dr. Andrej Petrič

red. prof. dr. Slovenko Polanc

izr. prof. dr. Bojan Verček

doc. dr. Janez Cerkovnik

doc. dr. Franc Požgan

doc. dr. Bogdan Štefane

dr. Krištof Kranjc, znan. sod.

dr. Nenad Maraš

dr. Damijana Urankar

**Mladi raziskovalci / *Young Researchers***

Vita Majce

Amadej Juranovič

Martin Gazvoda

Marko Krivec

Aljoša Bolje

Luka Rejc

Gregor Strle

Jure Vajs

**Tehniki / *Technicians***

Zdenka Kadunc

Irena Povalej

## **POROČILO O REALIZACIJI PROGRAMA**

### **CILJI PROGRAMA**

Naša programska skupina razvija sinteze spojin za znanstvene in aplikativne namene, pod okolju čim bolj prijaznimi pogoji (zelena kemija) in z visoko atomsko ekonomičnostjo (kemija pod vplivom mikrovalov, kemija pod visokimi pritiski, uporaba zelenih topil). Te cilje dosegamo z lastnim kreativnim delom in znanjem, s sodelovanjem z znanstveniki iz 10 držav po svetu (ZDA, Belgije, Nemčije, Francije, Argentine, Češke republike, Romunije, Madžarske, BiH in Hrvaške), kot tudi z raziskovalci z več domačih akademskih in raziskovalnih institucij (UL, Medicinska fakulteta; UL, Fakulteta za farmacijo; IJS; Kemijski inštitut) in industrijskih ustanov (Krka, Lek). Sodelujemo tudi



v programu COST CM0905 Organocatalysis (ORCA) v delovni skupini 4 (Interdisciplinarni vidiki). Nekaj članov naše programske skupine sodeluje s centrom odličnosti EN-FIST na področju raziskav in razvoja spojin za diagnozo in terapijo v medicini.

## OSREDNJE TEME PROGRAMA IN ZNANSTVENI DOSEŽKI

Pomembno področje raziskav v letu 2012 so bile kovinsko katalizirane reakcije, organokatalitske in druge reakcije. Te reakcije predstavljajo eno od najbolj pomembnih orodij za selektivne pretvorbe organskih molekul, ki so zelo koristne tudi v industriji.

Na tem področju smo študirali z rutenijevimi kompleksi (Grubbsovi katalizatorji) katalizirano metatezno ciklizacijo terminalnih dialkenskih prekurzorjev, ki bi vodila do nastanka cikličnih sistemov s C1–C8 alkensko enoto v svoji strukturi. Veriga iz 8 ogljikovih atomov namreč predstavlja osrednje ogrodje farmacevtsko pomembne spojine, aliskirena. Ker je alkenska metateza z zapiranjem obroča v primeru nastanka srednje velikih obročev (7–9 členskih) neugodna, smo med dva alkenska prekurzorja vstavili vmesnik iz 4 atomov (C, N ali O) in nato izvedli ciklizacijo. Izkazalo se je, da v tem primeru metatezna ciklizacija učinkovito vodi do nastanka 12-členskih obročev z dobro stereoselektivnostjo C=C dvojne vezi v vsebujoči C1–C8 alkenski enoti. Pokazali smo tudi, da odpiranje obročev z izbranimi nukleofili (npr. voda) daje asimetričen alkenski sistem, ki bi lahko bil nadalje primeren za pretvorbo do derivatov aliskirena (POŽGAN, Franc, ŠTEFANE, Bogdan, KIDEMET, Davor, SMODIŠ, Janez, ZUPET, Rok. *Tetrahedron* [Print ed.], 2012, vol. 68, no. 25, str. 5081–5086, doi: 10.1016/j.tet.2012.04.043. [COBISS.SI-ID 35927045]).

Razvili smo učinkovito in enostavno metodo za pripravo 8-amino analogov farmacevtsko pomembnega nitroksolina (5-nitro-8-hidroksikinolin). Nitroksolin se je namreč izkazal kot potencialni inhibitor katepsina B, le-ta pa predstavlja zanimivo terapevtsko tarčo, saj sodeluje v razgradnji proteinov ekstracelularnega matriksa v tumorskih tkivih. Reakcije *O*-cianometiliranega nitroksolina s primernimi primarnimi in sekundarnimi amini so pod pogoji segrevanja z mikrovalovi selektivno vodile do nastanka 5-nitrokinolin-8-ilaminov. S tem smo tudi prvič pokazali, da je cianometoksi skupina lahko dobra izstopajoča skupina v nukleofilnih aromatskih substitucijah v kinolinskem sistemu (ŠTEFANE, Bogdan, POŽGAN, Franc, SOSIČ, Izidor, GOBEC, Stanislav. *Tetrahedron Lett.* [Print ed.], 2012, vol. 53, no. 15, str. 1964–1967. doi: 10.1016/j.tetlet.2012.02.017. [COBISS.SI-ID 3200625]).

Opisali smo stanje in napredek na področju asimetričnega hidrogeniranja ketonov, ki predstavlja enostavno in praktično metodo za tvorbo optično aktivnih alkoholov tako na laboratorijski kot industrijski ravni. Podani so primeri uporabe homogenih in heterogenih kovinskih katalizatorjev, katerih aktivnost in selektivnost se v nekaterih primerih približuje encimskemu delovanju. Z okoljskega in ekonomskega vidika je pomembna uporaba manj strupenih kovinskih katalizatorjev, npr. železa in bakra. Z izbiro primernih katalitskih sistemov pa so tovrstna hidrogeniranja izvedljiva tudi v vodnem mediju (ŠTEFANE, Bogdan, POŽGAN, Franc. Asymmetric hydrogenation and transfer hydrogenation of ketones. V: KARAMÉ, Iyad (ur.). *Hydrogenation*. Rijeka: InTech, cop. 2012, str. 31–68, doi: dx.doi.org/10.5772/47752. [COBISS.SI-ID 36250117]).

V sodelovanju z inštitutom Jožef Stefan in Fakulteto za elektrotehniko smo raziskovali funkcionalizacijo senzorskih površin in njihovo uporabo za selektivno detekcijo majhnih molekul v plinasti fazi. V ta namen smo SiO<sub>2</sub> površino COMB kapacitivnih senzorjev kemično modificirali s trialkoksialkilamino in trialkoksiamilamino silani. Z XPS-spektroskopijo smo potrdili prisotnostaminskih skupin na modificiranih površinah, kar pomeni, da je nalaganje silanskih molekul v plasti bilo uspešno. Tako modificirane senzorske površine smo uporabili za detekcijo molekul nekaterih eksploziv (TNT, RDX). Merilni sistem je zelo občutljiv, saj je na tak način možno detektirati manj kot 3,5 ppt molekul eksploziva v atmosferi (STRLE, Drago, ŠTEFANE, Bogdan, NAHTIGAL, Uroš, ZUPANIČ, Erik, POŽGAN, Franc, KVASIČ, Ivan, MAČEK, Marijan, TRONTELJ, Janez, MUŠEVIČ, Igor. *IEEE Sens. J.*, 2012, vol. 12, no. 5, str. 1048–1057, doi: 10.1109/JSEN.2011.2168203. [COBISS.SI-ID 25306919]).

Izoindoli in njihovi pripojeni derivati predstavljajo zelo pomemben razred spojin s široko uporabnostjo in biološko učinkovitostjo, ki se kaže od učinkov na kardiovaskularne in cerebralne sisteme do delovanja kot dopaminski agonisti, protirakavega delovanja, kot antibiotiki, sredstva z antikonvulzivnim in protivnetnim delovanjem. Raziskovali smo uporabo aktiviranega oglja (Darco® KB) za pospešitev in usmerjanje pretvorb različnih 2*H*-piran-2-onov z *N*-substituiranimi maleimidi in z uporabo reakcijskega zaporedja cikloadicija/eliminacija/dehidrogeniranje v derivate izoindola. Katalizator vpliva predvsem na stopnjo dehidrogeniranja, ki je nujna, da se izognemo tvorbi biciklo[2.2.2]oktenov, ki so drug možen produkt. Ugotovili smo, da predstavlja kombinacija Darco® KB, kot nekovinskega katalizatorja in dekalina, kot topila v zaprtem sistemu, najbolj učinkovite pogoje za reakcijo. Dokazali smo, da pride do aromatizacije preko prenosa vodika od cikloheksadienskega intermedata na derivate maleimida (ki pri tem daje derivate imida jantarne kisline). Ta prenos vodika omogoči aktivna površina heterogenega katalizatorja, ki temelji na ogljiku. Katalizator je možno enostavno reciklirati (KRIVEC, Marko, GAZVODA, Martin, KRANJC, Krištof, POLANC, Slovenko, KOČEVAR, Marijan. *J. Org. Chem.*, 2012, vol. 77, no. 6, str. 2857–2864, doi: 10.1021/jo3000783. [COBISS.SI-ID 35801349]).

Študirali smo tudi pretvorbe pripojenih 2*H*-piran-2-onov s prebitnim etil vinil etrom kot sinteznim ekvivalentom acetilena in pripravili set pripojenih derivatov anilina. Reakcije smo izvajali s segrevanjem z mikrovalovi in v prisotnosti DABCO kot organokatalizatorja ter z dodatkom *n*-butanola kot aditiva (JURANOVIČ, Amadej, KRANJC, Krištof, POLANC, Slovenko, PERDIH, Franc, KOČEVAR, Marijan. *Monatsh. Chem.*, 2012, vol. 143, no. 5, str. 771–777, doi: 10.1007/s00706-012-0734-4. [COBISS.SI-ID 35818757]). Na tem področju smo sintetizirali dva derivata 2*H*-piran-2-ona in določili njuno kristalno strukturo (KRANJC, Krištof, JURANOVIČ, Amadej, KOČEVAR, Marijan, PERDIH, Franc. *J. Chem. Crystallogr.*, 2012, vol. 42, no. 5, str. 443–449, doi: 10.1007/s10870-011-0266-5. [COBISS.SI-ID 35686405]).

1,4-Diazabiciklo[2.2.2]oktan (DABCO) smo študirali kot izhodno spojino za sintezo 1-alkil-4-(2-fenoksietil)piperazinov in sorodnih spojin. Ta tip heterocikličnih spojin se je izkazal kot zelo obetaven v kemiji zdravil. Ugotovili smo, da 1-alkil-1,4-diazabiciklo[2.2.2]oktan-1-ium soli, ki nastanejo z alkiliranjem DABCO, v polietilenglikolu (PEG) ali diglimu, učinkovito reagirajo pri visokih temperaturah z vrsto nukleofilov in dajejo piperazinske produkte, ki nastanejo kot rezultat odprtja obroča pod vplivom nukleofila. Stranska reakcija benziliranja je postala pomembna pri uporabi mehkejših nukleofilov, ko smo uporabljali 1-benzil-1,4-diazabiciklo[2.2.2]oktan-1-ium soli, medtem ko druge vrste alkiliranja nismo opazili. "One-pot" metodologije te sinteze omogočajo pripravo piperazinov neposredno iz primarnih alkoholov, alkil halidov ali sulfonatov, uporabljajoč fenole ali druge nukleofile in DABCO. Z uporabo te metode smo na enostaven način pripravili etrski izoster Vanokserina (GBR-12909), kot prototip za serijo inhibitorjev dopaminskega privzema (MARAŠ, Nenad, POLANC, Slovenko, KOČEVAR, Marijan. *Org. Biomol. Chem.*, 2012, vol. 10, no. 6, str. 1300–1310, doi: 10.1039/C1OB06676E. [COBISS.SI-ID 35543813]).

V okviru delovne skupine v COST D24 in neformalnem sodelovanju v COST D40 smo razvijali različne katalitske metode, ki so se že prej izkazale kot pomembne za industrijo, npr. heterogeno katalitsko hidrogeniranje dehidroaminokislin. V mednarodni sestavi štirih avtorjev smo opisali splošen razvoj na področju dehidroaminokislin in biciklooktenov, s poudarkom na naših rezultatih. Knjiga je izšla kot zaključek akcije COST D40, z editorjem P. G. Anderssonom kot koordinatorjem ene izmed delovnih skupin (MICHELET, Véronique, RATOVELOMANANA-VIDAL, V., PÂRVULESCU, Vasile I., KOČEVAR, Marijan. *Recent advances in the synthesis and catalytic hydrogenation of dehydroamino acid derivatives and bicyclo[2.2.2]octenes*. V: ANDERSSON, Pher G. (ur.). *Innovative catalysis in organic synthesis : oxidation, hydrogenation, and C-X bond forming reactions*. Weinheim: Wiley-VCH, cop. 2012, str. 131-151. [COBISS.SI-ID 35934469]).

Na področju spiro derivatov smo raziskovali odpiranje obroča 2-fenil-1*H*,5*H*-spiro[oksazol-4,2'-kinoksalin]-3'(4*H*)-onov (MUŠIČ, Irena, VERČEK, Bojan. *Heterocycles*, 2012, vol. 86, issue 1, str. 719–725, doi: 10.3987/COM-12-S(N)25. [COBISS.SI-ID 36171525]).

Nadaljevali smo tudi z raziskavami na področju molekularnih sond za detekcijo proteinskih agregatov v možganih bolnikov z nevrodegenerativnimi boleznimi. Strukturo molekule spojine vodnice FDDNP smo spreminjali tako, da smo fluorodialkilaminsko donorsko skupino zamenjali s 3- do 6-členskimi fluoroheterocikličnimi obroči. Spremembe strukture se odražajo v spremenjeni prostorski razporeditvi skupin okoli donorskega dušikovega atoma. Poleg tega smo pripravili analoge FDDNP, pri katerih smo dicianovinilno skupino formalno vključili v šestčlenski obroč in s tem onemogočili njeno bolj ali manj prosto rotacijo. Merjenje vezavnih lastnosti in izračuni vezave novih spojin na heksapeptidni model beta amiloidnih agregatov so potrdili, da je za čvrsto vezavo spojine potreben pogoj sposobnost molekule zavzeti planarno razporeditev skupin (FISTER, Andrej, BARRIO, Jorge R., PETRIČ, Andrej. Procedures for preparation and radiolabeling of a 3-fluoropyrrolidine-containing FDDNP analog. *Acta Chim. Slov.*, 2012, vol. 59, no. 2, str. 431–435. <http://acta.chem-soc.si/59/59-2-431.pdf>. [COBISS.SI-ID 36029957]; PETRIČ, Andrej, JOHNSON, Scott A., PHAM, Hung V., LI, Ying, ČEH, Simon, GOLOBIČ, Amalija, AGDEPPA, Eric D., TIMBOL, Gerald, LIU, Jie, KEUM, Gyochoang, SATYAMURTHY, Nagichettiar, KEPE, Vladimir, HOUK, Kendall N., BARRIO, Jorge R. *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.*, 2012, vol. 109, no. 41, str. 16492–16497, doi: 10.1073/pnas.1214134109. [COBISS.SI-ID 36232965]).

V patentu poročamo o analogih 1,3-bis(4-nitrofenil)triazenov, njihovih farmacevtsko sprejemljivih soleh in *N*-aciliranih derivatih kot novih spojinah za zdravljenje različnih vrst raka. Opisane spojine so citotoksične že pri nizkih koncentracijah. To so dejansko 4-nitro- substituirani 1,3-diariltriazeni, ki imajo dve dodatni elektron-privlačni skupini in so visoko citotoksični. Aciliranje na triazenskem dušiku poveča topnost. Nadalje, *N*-aciltriazene lahko obravnavamo kot 'prozdravila' neaciliranih analogov. Antiproliferativna aktivnost novih spojin je odvisna od substituentov na orto mestih na benzenskih obročih. Izkazalo se je, da poveča trifluorometilna skupina citotoksičnost spojine bolj kot drugi substituenti (OSMAK, Maja, POLANC, Slovenko, ČIMBORA, Tamara, BROZOVIČ, A., KOČEVAR, Marijan, MAJCE, Vita, ALIČ, Branko. *Patent : US 8217022 (B2), 2012-07-20*. [S. 1.]: World Intellectual Property Organization, 2012. 7 str., ilustr. [COBISS.SI-ID 30639621]).

Naše raziskave so prispevale nova znanja na področju sinteze kompleksnih spojin, predvsem sinteze novih tipov gradnikov, katalize s prehodnimi kovinami oz. ogljem v odsotnosti prehodnih kovin ter na področju razvoja novih sinteznih metod. Nove reakcije organske sinteze smo temeljito raziskali in pojasnili njihove karakteristike. Številne sintetizirane nove spojine kažejo zanimive biološke aktivnosti.

## DRUGI POMEMBNI ZNANSTVENI DOSEŽKI

### UČBENIKI IN UČNA GRADIVA

1. PETRIČ, Andrej. *Moderne NMR metode : interno študijsko gradivo : za izbirni predmet magistrskega programa Kemija*. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za organsko kemijo, 2012. 136 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 36340997]
2. PETRIČ, Andrej. *Organska kemija : interno študijsko gradivo : za obvezni predmet magistrskega programa Kemija*. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za organsko kemijo, 2012. 215 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 36431365]

### 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 organizaciji in usmerjanju 27. volumna. Knjiga je v tiskani obliki izšla v februarju 2012 (Series: Topics in Heterocyclic Chemistry, vol. 27; Halogenated Heterocycles: Synthesis, Application and Environment; Iskra Jernej (Ed.); XI, 316 str. 546 ilustr., 2 barvni.).
- Prof. J. Košmrlj je na vabilo uredniškega odbora Springerjeve serije 'Topics in Heterocyclic Chemistry' kot 'Volume Editor' uredil knjigo z naslovom 'Click Triazoles'.

- Doc. dr. J. Cerkovnik in dr. K. Kranjc, znanst. sod., sta delovala kot »associate« editorja v *Acta Chimica Slovenica*.
- Prof. Kočever je deloval kot član več uredniških odborov: *Periodica polytechnica*, *Chemical engineering*, *American journal of chemistry*, *Current organic chemistry* (faktor vpliva revije za leto 2011: 3,064; 5-letni faktor vpliva: 3,468), *E-Journal of Chemistry*.
- Doc. dr. F. Požgan je deloval kot član uredniških odborov: *Glasnik hemičara i tehnologa Bosne i Hercegovine*, *Recent patents on catalysis*.
- Sodelavca PS (prof. A. Petrič, prof. J. Košmrlj) intenzivno sodelujeta pri organizaciji in delovanju Infrastrukturnega centra na UL FKKT.
- Trije člani PS (prof. A. Petrič, doc. dr. B. Štefane, doc. dr. F. Požgan) sodelujejo pri delovanju Centra odličnosti ENFIST v okviru raziskovalno razvojnega programa RRP11 Spojine za diagnostiko in terapijo v medicini.
- Prof. M. Kočever je član upravnega odbora COST CM0905 (Organocatalysis, ORCA). (2010–2014).
- Uspešno smo izvedli tudi projekte za industrijo.

#### **PLENARNA IN VABLJENA PREDAVANJA**

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

#### **DRUGE DEJAVNOSTI IN PRIZNANJA**

Člani programske skupine smo sodelovali v bilateralnih projektih 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 the emphasis on eco-friendly conditions and high atom economy (i.e., microwave-assisted chemistry, high-pressure chemistry, and the utilization of green media). We are pursuing these goals by our creative work and expertise, through cooperation with scientists from 10 different foreign countries (USA, Belgium, Germany, France, Argentina, Czech Republic, Romania, Hungary, BiH and Croatia), as well as by cooperation with several academic and research institutions in Slovenia (UL, Faculty of Medicine; UL, Faculty of Pharmacy; Jožef Stefan Institute; National Institute of Chemistry) and industrial companies (Krka, Lek). We also cooperate in COST programme CM0905 Organocatalysis (ORCA) within the framework of the working group 4 (Interdisciplinary aspects). Some members of the programme group participate in the activities of the Centre of Excellence EN-FIST within the framework of the research and development of the compounds for diagnosis and therapy in medicine.

### RESEARCH TOPICS AND SCIENTIFIC ACHIEVEMENTS

An important field of our research in 2012 were metal-catalyzed reactions, organocatalytic and other reactions. They represent one of the most important tools for selective transformations of organic molecules that are also very important for industry.

Ruthenium-catalyzed (Grubbs' catalysts) metathesis cyclization of terminal dialkene precursors leading to cyclic systems with a C1–C8 alkene unit in their structure was investigated. Namely, an eight-carbon chain constitutes Aliskiren, the basic skeleton of pharmaceutically important compound. Since the formation of medium-sized rings (7–9-membered) by ring-closing metathesis is less favorable, we first introduced a four-atom tether (C, N, or O) between two alkene precursors and then performed cyclization. It was found that in these cases the metathesis cyclization efficiently led to 12-membered rings with good stereoselectivity of C=C double bond in the C1–C8 alkene unit. Additionally, we have also shown that the opening of rings with appropriate nucleophiles (for example water) give rise to asymmetric alkene system being suitable for the transformation to Aliskiren derivatives (POŽGAN, Franc, ŠTEFANE, Bogdan, KIDEMET, Davor, SMODIŠ, Janez, ZUPET, Rok. *Tetrahedron* [Print ed.], 2012, vol. 68, no. 25, pp. 5081–5086, doi: 10.1016/j.tet.2012.04.043. [COBISS.SI-ID 35927045]).

A simple and efficient method for the preparation of 8-amino analogues of pharmaceutically important nitroxoline (5-nitro-8-hydroxyquinoline) was investigated. Namely, nitroxoline is a potent inhibitor of cathepsin B, which is a promising target as it participates in the degradation of extracellular matrix proteins in tumor tissues. The microwave-assisted reactions of *O*-cyanomethylated nitroxoline with appropriate primary and secondary amines selectively led to 5-nitroquinolin-8-ylamines. Thus, we have demonstrated for the first time that cyanomethoxy group can serve as a good leaving group in nucleophilic aromatic substitutions in a quinoline system (ŠTEFANE, Bogdan, POŽGAN, Franc, SOSIČ, Izidor, GOBEC, Stanislav. *Tetrahedron Lett.* [Print ed.], 2012, vol. 53, no. 15, pp. 1964–1967. doi: 10.1016/j.tetlet.2012.02.017. [COBISS.SI-ID 3200625]).

The state-of-the art of asymmetric hydrogenation and transfer hydrogenation of ketones leading to optically active alcohols, on both, laboratory and industrial scales, has been described. The examples of the use of homogenous and heterogenous metal catalysts approaching enzymatic performance with respect to activity and selectivity in some cases are given. Concerning the environmental and economic issues, the introduction of less-toxic metal catalysts, e.g.iron and copper is highly desirable. Hydrogenation reactions are also feasible in water medium by choosing appropriate catalyst systems (ŠTEFANE, Bogdan, POŽGAN, Franc. Asymmetric hydrogenation and transfer hydrogenation



tion of ketones. V: KARAMÉ, Iyad (ur.). *Hydrogenation*. Rijeka: InTech, 2012, pp. 31–68, doi: dx.doi.org/10.5772/47752. [COBISS.SI-ID 36250117]).

In collaboration with the Jožef Stefan Institute and Faculty of Electrical Engineering functionalization of sensor surfaces and their application in selective detection of small molecules in gas phase has been investigated. The SiO<sub>2</sub> surface of COMB capacitive sensors was chemically modified with trialkoxyalkylamino and trialkoxyarylamino silanes. By using XPS-spectroscopy amino groups on modified surfaces were detected, thus confirming successful formation of silane molecule layers. The modified sensors were applied for detection of molecules of some explosives (TNT, RDX). The measurement system is very sensitive as it is possible to detect less than 3.5 ppt of molecules in the atmosphere (STRLE, Drago, ŠTEFANE, Bogdan, NAHTIGAL, Uroš, ZUPANIČ, Erik, POŽGAN, Franc, KVASIĆ, Ivan, MAČEK, Marijan, TRONTELJ, Janez, MUŠEVIČ, Igor. *IEEE Sens. J.*, 2012, vol. 12, no. 5, pp. 1048–1057, doi: 10.1109/JSEN.2011.2168203. [COBISS.SI-ID 25306919]).

Isoindoles and their fused derivatives represent a very important class of compounds with a wide scope of applications and biological activities, ranging from the effects on cardiovascular and cerebral systems to dopamine agonist, anticancer, antibiotic, anti-convulsive and anti-inflammatory effects. We investigated the application of activated carbon (Darco® KB) for the acceleration and direction of the transformation of various 2*H*-pyran-2-ones with *N*-substituted maleimides toward isoindole derivatives through the reaction sequence cycloaddition/elimination/dehydrogenation. The catalyst mainly influences the dehydrogenation step, which is essential to avoid the formation of bicyclo[2.2.2]octenes as the other possible products. We found that the combination of Darco® KB, as the metal-free catalyst, and decalin, as the solvent in a closed vessel, represents the most successful conditions. We have proven that the aromatization occurs *via* hydrogen transfer from the cyclohexadiene intermediate to the maleimide derivative (thus producing succinimides). This transfer is facilitated by the active surface of the heterogeneous carbon-based catalyst. The catalyst could easily be recycled (KRIVEC, Marko, GAZVODA, Martin, KRANJC, Krištof, POLANC, Slovenko, KOČEVAR, Marijan. *J. Org. Chem.*, 2012, vol. 77, no. 6, pp. 2857–2864, doi: 10.1021/jo3000783. [COBISS.SI-ID 35801349]).

We also investigated transformations of fused pyran-2-ones with an excess of ethyl vinyl ether as a synthetic equivalent of acetylene and synthesized a set of fused derivatives of aniline. The reactions were carried out by heating with microwaves, in the presence of DABCO as an organocatalyst, and by adding *n*-butanol as an additive (JURANOVIČ, Amadej, KRANJC, Krištof, POLANC, Slovenko, PERDIH, Franc, KOČEVAR, Marijan. *Monatsh. Chem.*, 2012, vol. 143, no. 5, pp. 771–777, doi: 10.1007/s00706-012-0734-4. [COBISS.SI-ID 35818757]). In this field we synthesized two 2*H*-pyran-2-one derivatives and determined their crystal structure (KRANJC, Krištof, JURANOVIČ, Amadej, KOČEVAR, Marijan, PERDIH, Franc. *J. Chem. Crystallogr.*, 2012, vol. 42, no. 5, pp. 443–449, doi: 10.1007/s10870-011-0266-5. [COBISS.SI-ID 35686405]).

Within the framework of the working group in COST D24 and in an informal cooperation within COST D40 we were developing different methods of catalysis, which had been previously shown to be industrially important; for example, heterogeneous catalytic hydrogenation of dehydroamino acids. As a team of four authors from three countries, we described general development in the field of dehydroamino acids and bicyclooctenes with the emphasis on our joint results. The book was published as a result of the activity COST D40, the editor was P. G. Andersson as a coordinator of one of the working groups (MICHELET, Véronique, RATOVELOMANANA-VIDAL, V., PÂRVULESCU, Vasile I., KOČEVAR, Marijan. Recent advances in the synthesis and catalytic hydrogenation of dehydroamino acid derivatives and bicyclo[2.2.2]octenes. V: ANDERSSON, Pher G. (ur.). *Innovative catalysis in organic synthesis : oxidation, hydrogenation, and C-X bond forming reactions*. Weinheim: Wiley-VCH, cop. 2012, str. 131-151. [COBISS.SI-ID 35934469]).

In the field of spiro derivatives we investigated ring opening of 2-phenyl-1*H*,5*H*-spiro[oxazole-4,2'-quinoxalin]-3'(4*H*)-ones (MUŠIČ, Irena, VERČEK, Bojan. *Heterocycles*, 2012, vol. 86, issue 1, pp. 719–725, doi: 10.3987/COM-12-S(N)25. [COBISS.SI-ID 36171525]).

We continued research in the field of molecular probes for the detection of protein aggregates' accumulation in the brain of patients with neurodegenerative diseases. The structure of the lead compound FDDNP was modified in such a way that the donor fluorodialkylamino group was formally replaced by a 3- to 6-membered saturated fluoroheterocyclic ring. The structural changes resulted in spatial arrangement of the groups at the donor nitrogen atom. In addition, we have also prepared FDDNP analogues in which the dicyanovinyl group was enclosed into a six-membered ring, thus forced into almost co-planar arrangement with the naphthalene ring. The experimental binding properties were correlated to calculated interactions of new compounds with hexapeptide beta amyloid aggregate model and confirmed that for tight binding the molecule must be able to attain planar arrangement without a substantial energy input (FISTER, Andrej, BARRIO, Jorge R., PETRIČ, Andrej. Procedures for preparation and radiolabeling of a 3-fluoropyrrolidine-containing FDDNP analog. *Acta Chim. Slov.*, 2012, vol. 59, no. 2, pp. 431–435. <http://acta.chem-soc.si/59/59-2-431.pdf>. [COBISS.SI-ID 36029957]; PETRIČ, Andrej, JOHNSON, Scott A., PHAM, Hung V., LI, Ying, ČEH, Simon, GOLOBIČ, Amalija, AGDEPPA, Eric D., TIMBOL, Gerald, LIU, Jie, KEUM, Gyochang, SATY-AMURTHY, Nagichettiar, KEPE, Vladimir, HOUK, Kendall N., BARRIO, Jorge R. *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.*, 2012, vol. 109, no. 41, pp. 16492–16497, doi: 10.1073/pnas.1214134109. [COBISS.SI-ID 36232965]).

Our patent reports on the analogues of 1,3-bis(4-nitrophenyl)triazenes, their pharmaceutically acceptable salts and *N*-acyl derivatives as new agents for the treatment of different types of tumors. The described compounds show cytotoxicity at very low concentrations. They are in fact 4-nitro-1,3-dialkyltriazenes that possess two additional electron-withdrawing groups and are highly cytotoxic compounds. Their acylation at the triazene nitrogen increases the solubility. Furthermore, *N*-acyltriazenes can be considered as prodrugs of their non-acylated analogues. The antiproliferative activity of new compounds also depends on the type of the substituent introduced at the ortho position of the two benzene rings. It turned out that trifluoromethyl substituent increased cytotoxicity of the compound more than other groups (OSMAK, Maja, POLANC, Slovenko, ČIMBORA, Tamara, BROZOVIČ, A., KOČEVAR, Marijan, MAJCE, Vita, ALIČ, Branko. *Patent : US 8217022 (B2), 2012-07-20*. [S. l.]: World Intellectual Property Organization, 2012. 7 p., illustr. [COBISS.SI-ID 30639621]).

Our research has contributed new knowledge to the field of synthesis of complex compounds, primarily new types of building blocks, catalysis by transition metals or charcoal in the absence of transition metals, and the development of new synthetic methods. We thoroughly investigated and explained the characteristics of new organic reactions. Many of the new synthesized compounds show interesting biological activities.

## OTHER IMPORTANT SCIENTIFIC ACHIEVEMENTS

### TEXTBOOKS AND STUDY MATERIALS

1. PETRIČ, Andrej. *Moderne NMR metode (Modern NMR Methods): study material for elective course in master study programme Chemistry*. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za organsko kemijo, 2012. 136 f., illustr. [COBISS.SI-ID 36340997].
2. PETRIČ, Andrej. *Organska kemija (Organic Chemistry) : study material for compulsory course in master study programme Chemistry*. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za organsko kemijo, 2012. 215 f., illustr. [COBISS.SI-ID 36431365].

### 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 27<sup>th</sup> 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 illustr., 2 in colour.).

- As a Volume Editor within the Springer series Topics in Heterocyclic Chemistry Prof. J. Košmrlj edited the book on “Click Triazoles”.
- 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 several journals: *Periodica polytechnica*, *Chemical engineering*, *American journal of chemistry*, *Current organic chemistry* (journal's impact factor for 2011: 3.064; 5-year impact factor: 3.468), *E-Journal of Chemistry*.
- Assistant Prof. F. Požgan was a member of the editorial board of: *Glasnik hemičara i tehnologa Bosne i Hercegovine*, *Recent patents on catalysis*.
- 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).
- 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.
- Prof. M. Kočevar was a member of the Management Committee COST CM0905 (Organocatalysis, ORCA).
- We successfully carried out projects for industry.

#### PLENARY AND INVITED LECTURES

Several invited lectures were delivered at international conferences, foreign universities and in industry.

#### OTHER ACTIVITIES

Our group has also participated in bilateral research projects, 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**

red. prof. dr. Matjaž Krajnc

**SODELAVCI PROGRAMSKE SKUPINE / RESEARCH PROGRAMME STAFF**

**Raziskovalci / Researchers**

red. prof. dr. Matjaž Krajnc

red. prof. dr. Marin Berovič

red. prof. dr. Aleksander Pavko

red. prof. dr. Igor Plazl

izr. prof. dr. Jana Zagorc Končan

izr. prof. dr. Urška Šebenik

izr. prof. dr. Polona Žnidaršič Plazl

doc. dr. Ana Lakota Družina

doc. dr. Andreja Zupančič Valant

doc. dr. Andreja Žgajnar Gotvajn

doc. dr. Mitja Lakner

**Mladi raziskovalci / Young Researchers**

Janja Babič

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

## **KEMIJSKO PROCESNO INŽENIRSTVO Z REOLOGIJO**

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

Večfazni sistemi zavzemajo pomembno vlogo v večini proizvodnih procesov. Visoka stopnja znanja pri načrtovanju izbrane naprave je ključnega pomena za njeno optimalno delovanje tako glede kvalitete produkcije kot ekonomike proizvodnje na okolju prijazen način. Glede na stopnjo izbranega kontrolnega volumna načrtovanje multifaznega sistema sloni na sofisticiranem numeričnem reševanju bilanc transportnih količin ali na postavitvi fenomenoloških modelov, ki bazirajo na eksperimentalnem opazovanju tokovne slike. Končni cilj je verodostojna napoved fluidne dinamike in transporta ter kinetično-adsorpcijskih pojavov v odvisnosti od operativnih parametrov. Kljub hitremu razvoju dosegljivih matematičnih orodij, ki omogočajo simulacijo tokovnih oblik v velikih napravah, je eksperimentalna verifikacija tista, ki potrди pravilnost izbire zaprtja (enclosure) sistema. Ne-newtonski mediji so z svojo kompleksno reološko sliko prisotni v večini procesov v bio-proizvodnji, vendar kljub temu v odprti literaturi primanjkuje eksperimentalnih študij o njihovem vplivu na performanco aparature. Smernice: v primeru ne-newtonskih medijev s poudarjeno elastično komponento se je pokazala izredno kompleksna slika hidrodinamskega dogajanja v koloni, ki jo je težko podvreči volumskemu ali časovnemu povprečenju, kar je običajno pri razvoju 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 jo lahko izvajamo pri nizkih temperaturah. V zadnjem času se raziskave in aplikacije koncentriranja s pomočjo membranskih operacij intenzivirajo tudi na sistemih raztopin z organskimi topili. V literaturi najdemo nekaj modelov transporta snovi skozi membrano, ki upoštevajo na primer porozno strukturo membrane, 'raztapljanje' topila v membrani, model zaporednih uporov ter površinske napetosti membrane in topila. Z izbiro industrijsko uporabnih topil in učinkovin ter določanjem fluksov in zadrževalnih faktorjev pri različnih obratovalnih pogojih so raziskave aplikativno naravnane. Vendar so po svoji vsebini tudi temeljne, ker poskušajo najti razlago za transport topila in separacijo topljenca s pomočjo obstoječih modelov ali postavitvijo 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 obolelosti. Za natančen opis hidrodinamskega obnašanja krvi in modelnih telesnih tekočin je treba določiti primeren reološki model, ki podaja odvisnost viskoznosti tekočine od strižne hitrosti v širokem območju strižnih hitrosti. V okviru raziskovalnega dela iz izmerjenih eksperimentalnih podatkov določamo reološke modele za opis strižno odvisnega obnašanja krvi, kardioplegičnih raztopin in modelnih telesnih tekočin in njihovo temperaturno odvisnost. Na osnovi poznavanja reologije krvi opredeljujemo učinek različnih dodatkov (volumski ekspanderji in drugi polisaharidi) na tokovno obnašanje modelnih telesnih tekočin pri različnih temperaturnih režimih. Konstitutivne enačbe za opis strižno odvisnega obnašanja preučevanih telesnih tekočin, ki vsebujejo temperaturno odvisne materialne parametre, uporabljamo pri simulaciji pretoka v 2D in 3D geometrijah. Rezultati simulacij lahko vodijo k izboljšanju nekaterih sestavin modelnih telesnih tekočin in k njihovi optimalni rabi v praksi. Numerične simulacije pretočnosti in tokov preučevanih raztopin in krvi v realnih geometrijah kot so koronarne žile in srčne poti pri različnih temperaturnih režimih dajejo koristne informacije v kirurgiji srca.

## **POLIMERNO INŽENIRSTVO**

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

PSA («Pressure Sensitive Adhesives») so lepila občutljiva na pritisk. Med PSA lepila spadajo materiali, ki imajo agresivno in trajno začetno adhezijo, se prilepijo z uporabo pritiska prsta, ne potrebujejo

aktivacijske energije za tvorbo vezi in imajo zadostno kohezijo za omogočanje enostavne odstranitve nosilca iz površine materiala (brez vidnih ostankov adheziva). Za sintezo PSA lepil se na svetovnem trgu v veliki meri uporabljajo akrilatni monomeri, katerih polimeri imajo edinstvene lastnosti. Glede na vrsto uporabljene tehnologije za pridobitev končnega produkta razdelimo PSA lepila na: lepila na osnovi organskih topil, lepila na vodni osnovi (emulzije in suspenzije), lepila v talini («hot melt» lepila) in radiacijsko zamrežljiva lepila. V prvem delu raziskav študiramo suspenzijsko polimerizacijo, s katero nastajajo mikrosferna PSA lepila na vodni osnovi. Cilj je razvoj metode in procesa za sintezo produkta 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 kapljevimi, ki v zadnjem času pritegujejo pozornost kot »zeleni« topila v organskih sintezah ter še posebno v katalitskih procesih. Nedavno se je uporaba ionskih kapljev kot reakcijskega medija razširila tudi na encimsko katalizo in biotransformacije s celotnimi celicami, vendar pa je njihova uporaba v industrijskem merilu zelo omejena zaradi visokih cen na trgu. Zaradi tega je razvoj procesov s temi topili na mikro nivoju obetavna alternativa.

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

## EKOLOŠKO INŽENIRSTVO

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

## OSREDNJE TEME PROGRAMA

*Kemijsko procesno inženirstvo z reologijo:*

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

*Polimerno inženirstvo:*

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

*Biokemijsko inženirstvo:*

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



*Ekološko inženirstvo:*

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

## RESEARCH PROGRAMME REPORT

### PROGRAMME GOALS

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

### CHEMICAL PROCESS ENGINEERING WITH RHEOLOGY

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

Multiphase systems have been integrated into many industrial processes. High level of fundamental knowledge is crucial for a suitable and effective design of a selected device. According to the selected level of control volume it is possible to describe the behaviour of multiphase system through sophisticated numerical solutions of the balances of transport quantities, or through phenomenological models, based on a thorough experimental work and exact observations of the system. In both cases the goal is to predict fluid dynamic behaviour and transport phenomena in the system as a function of given operating conditions. Non-Newtonian liquids are involved in most bio-chemical processes, yet in literature there is still a certain gap in understanding the impacts of such complex liquids on



---

the performance of a multiphase system. In our previous research with bubble column it was clearly shown that the presence of a non-Newtonian liquid with elastic properties causes highly complex hydrodynamic behaviour of the system; instead of time and volume-averaged approach in evaluation of the measured quantities, local time-dependant measurements of the experimental data is needed, which would allow for the development of a discrete cell model, or a reliable CFD model approach.

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

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

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

## POLYMER ENGINEERING

Micro-encapsulation is a process in which tiny particles or droplets are surrounded by a coating to give small capsules with many useful properties. The material inside the microcapsule is referred to as the core, internal phase, or a fill, whereas the wall is sometimes called a shell, coating, or membrane. The reasons for microencapsulation are countless. In some cases, the core must be isolated from its surroundings, as in isolating vitamins from the deteriorating effects of oxygen, retarding evaporation of a volatile core, improving the handling properties of a sticky material, or isolating a reactive core from chemical attack. In other cases, the objective is not to isolate the core completely but rather to control the rate at which the core leaves the microcapsule, as in the controlled release of drugs or pesticides. The problem may be simple, i.e. masking the taste or odour of the core, or complex, i.e. increasing the selectivity of the adsorption or extraction process. The goal of the research program is to develop a method for micro-encapsulation of different core substances in a polymeric shell. Different polymers, such as melamine-formaldehyde resin, will be used as shell material. The polymerization and curing processes by which the shell is formed have been studied. The application properties of microcapsules are also described by studying the mass release from the core through the shell into the environment.

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

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

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

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

## BIOCHEMICAL ENGINEERING

Biotransformations and biodegradations of chemical compounds of natural and synthetic origin are applied in several chemical, pharmaceutical and food industries, particularly in the processes of fine chemicals and environmental protection. Among priority goals is the design of processes employing immobilized enzymes or whole cells, which can be used repeatedly for as long as they remain active, by minimizing costs and enabling economically feasible operation in a continuous mode. Furthermore, integrated process operation with chemical operations and downstream processes would enable highly efficient and environmentally sustainable production. Integration of biocatalytic processes

---

with microreactor technology is of a great potential in this field. In recent years, a successful application of enzymatic microreactors has been reported, mainly in chemical analysis and kinetic studies. Within the research programme, the development of a continuous process of selected biotransformations in a microreactor with immobilized cells/enzymes and with integrated product separation is envisaged. Microreactor technology will further gain from the useful symbiosis between nanotechnology and ionic liquids which have recently received an increased attention as »green« solvents for organic synthesis in general and catalytic processes in particular. Recently, the use of ionic liquids as reaction media has been extended to enzymatic catalysis and whole cell biotransformations. However, their use in industrial processes is restricted due to high market prices, so the development of the processes with these solvents at a microscale level is suggested as a promising alternative.

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

## ENVIRONMENTAL ENGINEERING

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

## RESEARCH TOPICS

### *Chemical process engineering with rheology:*

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

### *Polymer engineering:*

- Microencapsulation research
- Synthesis, characterization and synthesis process optimization of acrylic adhesives
- Synthesis, characterization and synthesis process optimization of nanocomposite materials
- Synthesis, characterization and synthesis process optimization of polysiloxane emulsions
- Synthesis, characterization and optimization of the synthesis process of formaldehyde resins

- Research and development of a technology for the production of melamine foams
- Kinetic investigations during vulcanization process for different rubber blends and modelling
- Heat transfer investigations during vulcanization process for different rubber blends and modelling
- Testing of rubber and rubber composites

*Bioengineering and biotechnology:*

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

*Environmental engineering:*

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

## **DRUGI POMEMBNI ZNANSTVENI DOSEŽKI / OTHER RELEVANT SCIENTIFIC ACHIEVEMENTS**

### **IZVIRNI ZNANSTVENI ČLANEK / ORIGINAL SCIENTIFIC ARTICLE**

1. LIKOZAR, Blaž, SENICA, David, PAVKO, Aleksander. Equilibrium and kinetics of vancomycin adsorption on polymeric adsorbent. *AIChE j.*, 2012, vol. 58, no. 1, str. 99-106, doi: 10.1002/aic.12559. [COBISS.SI-ID 34832133]
2. BEROVIČ, Marin, HABIJANIČ, Jožica, BOH, Bojana, WRABER-HERZOG, Branka. Antitumor fungal  $\beta$ -glucines from of *Ganoderma lucidum* by submerged and solid state cultivation. *Ann. Agrar. Sci.*, 2012, vol. 10, no. 2, str. 39-47. [COBISS.SI-ID 36301829]
3. TIŠMA, Marina, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona, VASIĆ-RAČKI, Đurđa, ZELIĆ, Bruno. Optimization of laccase production by *Trametes versicolor* cultivated on industrial waste. *Appl. biochem. biotechnol.*, 2012, vol. 166, no. 1, str. 36-46. [COBISS.SI-ID 35452165]
4. JEMEC, Anita, TIŠLER, Tatjana, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Assessment of landfill leachate toxicity reduction after biological treatment. *Arch. environ. contam. toxicol.*, 2012, vol. 62, no. 2, str. 210-221. [COBISS.SI-ID 35351557]
5. NOVOTNÝ, Čeněk, TROŠT, Nina, ŠUŠLA, M., SVOBODOVÁ, Kateřina, MIKESKOVÁ, Hana, VÁLKOVÁ, Hana, MALACHOVÁ, Kateřina, PAVKO, Aleksander. The use of the fungus *Dichomitus squalens* for degradation in rotating biological contactor conditions. *Bioresour. technol.*. [Print ed.], 2012, vol. 114, no. 1, str. 241-246. [COBISS.SI-ID 35901445]

6. LIKOZAR, Blaž, SENICA, David, PAVKO, Aleksander. Comparison of adsorption equilibrium and kinetic models for a case study of pharmaceutical active ingredient adsorption from fermentation broths : parameter determination, simulation, sensitivity analysis and optimization. *Braz. j. chem. eng.*, 2012, vol. 29, no. 3, str. 635-652. [COBISS.SI-ID 36175621]
7. POHAR, Andrej, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona, PLAZL, Igor. Integrated system of a microbioreactor and a miniaturized continuous separator for enzyme catalyzed reactions. *Chem. eng. j.* 1996. [Print ed.], 2012, vol. 189/190, no. 1, str. 376-382. [COBISS.SI-ID 35790597]
8. ALIČ, Branko, ŠEBENIK, Urška, KRAJNC, Matjaž. Microencapsulation of butyl stearate with melamine-formaldehyde resin: effect of decreasing the pH value on the composition and thermal stability of microcapsules. *Express polym. lett.*, 2012, vol. 6, no. 10, str. 826-836. [COBISS.SI-ID 36126469]
9. KALČÍKOVÁ, Gabriela, ZAGORC-KONČAN, Jana, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Assessment of environmental impact of pyridinium-based ionic liquid. *Fresenius environ. bull.*. [Print ed.], 2012, vol. 21, no. 8b, str. 2320-2325. [COBISS.SI-ID 36161541]
10. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, KALČÍKOVÁ, Gabriela, ZUPANČIČ, Marija, ZAGORC-KONČAN, Jana. Determination of impact of landfill leachate to nitrification. *Fresenius environ. bull.*. [Print ed.], 2012, vol. 21, no. 8c, str. 2447-2452. [COBISS.SI-ID 36171269]
11. SKUBIC, Blaž, LAKNER, Mitja, PLAZL, Igor. Microwave drying of expanded perlite insulation board. *Ind. eng. chem. res.*. [Print ed.], 2012, vol. 51, no. 8, str. 3314-3321. [COBISS.SI-ID 35753989]
12. ŠVAGELJ, Mirjan, BEROVIČ, Marin, GREGORI, Andrej, WRABER-HERZOG, Branka, SIMČIČ, Saša, BOH, Bojana. Immunomodulating activities of cultivated Maitake medicinal mushroom *Grifola frondosa* (Dicks.: Fr.) S.F. Gray (higher Basidiomycetes) on peripheral blood mononuclear cells. *Int. j. medic. mushrooms*, 2012, vol. 14, no. 4, str. 377-383. [COBISS.SI-ID 36299269]
13. BEROVIČ, Marin, HABIJANIČ, Jožica, BOH, Bojana, WRABER-HERZOG, Branka, PETRAVIČ-TOMINAC, Vlatka. Production of Lingzhi or Reishi medicinal mushroom, *Ganoderma lucidum* (W.Curt.:Fr.) P.Karst. (higher Basidiomycetes), biomass and polysaccharides by solid state cultivation. *Int. j. medic. mushrooms*, 2012, vol. 14, no. 5, str. 513-520. [COBISS.SI-ID 36310533]
14. BABIČ, Janja, LIKOZAR, Blaž, PAVKO, Aleksander. Optimization of ligninolytic enzyme activity and production rate with *Ceriporiopsis subvermispota* for application in bioremediation by varying submerged media composition and growth immobilization support. *Int. j. mol. sci. (Print)*, 2012, vol. 13, no. 9, str. 11365-11384. [COBISS.SI-ID 36176901]
15. ŠEBENIK, Urška, KARGER-KOCSIS, József, KRAJNC, Matjaž, THOMANN, Ralf. Dynamic mechanical properties and structure of in situ cured polyurethane/hydrogenated nitrile rubber compounds: effect of carbon black type. *J. appl. polym. sci.*, 2012, vol. 125, no. S1, str. E41-E48. [COBISS.SI-ID 35685381]
16. KALČÍKOVÁ, Gabriela, ZAGORC-KONČAN, Jana, ZUPANČIČ, Marija, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Variation of landfill leachate phytotoxicity due to landfill ageing. *J. chem. technol. biotechnol. (1986)*. [Print ed.], 2012, vol. 87, no. 9, str. 1349-1353. [COBISS.SI-ID 35850757]
17. 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.*, 2012, vol. 39, no. 3, str. 449-457. [COBISS.SI-ID 35421957]
18. POHAR, Andrej, LAKNER, Mitja, PLAZL, Igor. Parallel flow of immiscible liquids in a microreactor: modeling and experimental study. *Microfluid. nanofluid. (Print)*, 2012, vol. 12, no. 1/4, str. 307-316. [COBISS.SI-ID 35319813]



19. MARQUES, M. P. C., FERNANDES, P., CABRAL, Joaquim M. S., ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona, PLAZL, Igor. Continuous steroid biotransformations in microchannel reactors. *New biotechnology*, 2012, vol. 29, no. 2, str. 227-234. [COBISS.SI-ID 35504645]
20. 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*, 2012, vol. 29, iss. 3, str. 325-331. [COBISS.SI-ID 35597317]
21. MOHORIČ, Ines, ŠEBENIK, Urška. Semibatch anionic ring-opening polymerization of octamethylcyclotetrasiloxane in emulsions: effect of the amount of seed polymer particles. *Polym. int.*, str. 1-7. doi: 10.1002/pi.4386. [COBISS.SI-ID 36249093]
22. STOJKOVIČ, Gorazd, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. Continuous synthesis of L-malic acid using whole-cell microreactor. *Process biochem. (1991)*, 2012, vol. 47, no. 7, str. 1102-1107. [COBISS.SI-ID 35882757]
23. CVJETKO, M., VORKAPIČ-FURAC, Jasna, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. Isoamyl acetate synthesis in imidazolium-based ionic liquids using packed bed enzyme microreactor. *Process biochem. (1991)*, 2012, vol. 47, no. 9, str. 1344-1350. [COBISS.SI-ID 35952389]
24. NOVAK, Uroš, POHAR, Andrej, PLAZL, Igor, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. Ionic liquid-based aqueous two-phase extraction within a microchannel system. *Sep. purif. technol.*, 2012, vol. 97, no. 1, str. 172-178. [COBISS.SI-ID 35736325]
25. KALČIKOVÁ, Gabriela, ZAGORC-KONČAN, Jana, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Artemia salina acute immobilization test : a possible tool for aquatic ecotoxicity assessment. *Water sci. technol.*, 2012, vol. 66, no. 5, str. 903-908. [COBISS.SI-ID 36049157]

#### **PREGLEDNI ZNANSTVENI ČLANEK / REVIEW SCIENTIFIC ARTICLE**

26. LUBEJ, Martin, PLAZL, Igor. Theoretical descriptions of carbon nanotubes synthesis in a chemical vapor deposition reactor : a review. *Chem. biochem. eng. q.*, 2012, vol. 26, no. 3, str. 277-284. [COBISS.SI-ID 36354821]

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

27. VOKIČ, Denis, BEROVIČ, Marin. Uporaba encimov pri čiščenju oljnih in tempera slik = Application of enzymes in the cleaning of oil and tempera paintings. V: TRČEK PEČAK, Tamara (ur.), MADŽARAC, Nada (ur.), TRČEK PEČAK, Tamara, MADŽARAC, Nada. *Znanost za umetnost : konservatorstvo in restavratorstvo danes : zbornik prispevkov mednarodnega simpozija : conservation and restoration today : international symposium proceedings*. Ljubljana: Zavod za varstvo kulturne dediščine Slovenije, Restavratorski center, 2012, str. 120-135. [http://www.zvkds.si/media/images/publications/Znanost\\_za\\_umetnost-posamezne.pdf](http://www.zvkds.si/media/images/publications/Znanost_za_umetnost-posamezne.pdf). [COBISS.SI-ID 36435973]
28. BEROVIČ, Marin. Biokorozija poslikav = Biocorrosion studies on painted surfaces. V: TRČEK PEČAK, Tamara (ur.), MADŽARAC, Nada (ur.), TRČEK PEČAK, Tamara, MADŽARAC, Nada. *Znanost za umetnost : konservatorstvo in restavratorstvo danes : zbornik prispevkov mednarodnega simpozija : conservation and restoration today : international symposium proceedings*. Ljubljana: Zavod za varstvo kulturne dediščine Slovenije, Restavratorski center, 2012, str. 136-145. [http://www.zvkds.si/media/images/publications/Znanost\\_za\\_umetnost-posamezne.pdf](http://www.zvkds.si/media/images/publications/Znanost_za_umetnost-posamezne.pdf). [COBISS.SI-ID 36436229]

#### **OBJAVLJEN ZNANSTVENI PRISPEVEK ALI POVZETEK NA KONFERENCI / PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTION**

29. NOVAK, Uroš, LAKNER, Mitja, PLAZL, Igor, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. Aqueous two-phase extraction of [alpha]-amylase within Y- and [psi]-shaped microchannels. V: 20th

- International Congress of Chemical and Process Engineering [and] 15th Conference PRES, 25 - 29 August 2012, Prague, Czech Republic. *CD-ROM of full texts*. Prague: [s. n.], cop. 2012, str. [1-11]. [COBISS.SI-ID 36176389]
30. SKUBIC, Blaž, LAKNER, Mitja, PLAZL, Igor. Thermal treatment of new inorganic thermal insulation board based on expanded perlite. V: LI, Yue (ur.). *Material sciences and technology : selected, peer reviewed papers from the 2012 Spring International Conference on Material Sciences and Technology (MST-S), May 27-30, 2012, Xi'an, China*, (Advanced materials research, Vol. 560-561). Durnten-Zurich, Switzerland; Enfield, NH: Trans Tech Publications, 2012, str. 249-253. [COBISS.SI-ID 36432133].
31. ŠUŠTERŠIČ, Ema, TUŠAR, Marjan, LUKAČ, Bojana, ZUPANČIČ-VALANT, Andreja. Utilization of PMMA/ATH waste powder in asphalt binder modification. V: *The seventh International Conference on Maintenance and Rehabilitation of Pavements and Technological Control, Auckland-New Zealand, August 28-30, 2012 : MAIRE PAV7*. Auckland: [s. n.], 2012, str. [1-9]. [COBISS.SI-ID 5052954]
32. BABIČ, Janja, PAVKO, Aleksander. Kinetika razgradnje lindana z ligninolitičnimi encimi = Kinetics of lindane degradation with ligninolytic enzymes. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. [1-5]. [COBISS.SI-ID 36207877]
33. LUBEJ, Martin, PLAZL, Igor. Uporaba ogljikovih nanovlaken kot nosilcev za katalitske reakcije. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. [1-5]. [COBISS.SI-ID 36211461]
34. ŠOŠTARIČ, Maja, RUČIGAJ, Aleš, BRICELJ, Mihael, LIKOZAR, Blaž, GOLOB, Janvit. Izgradnja pilotnega fotobioreaktorja za gojenje mikroalg : [predavanje]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. [1-6]. [COBISS.SI-ID 36206853]
35. PETRIC, Martin, LIKOZAR, Blaž, POHAR, Andrej, LEVEC, Janez. Kontinuirna proizvodnja biodizla v cevnem reaktorju s statičnimi mešali. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. [1-7]. [COBISS.SI-ID 36210949]
36. KALČÍKOVÁ, Gabriela, BABIČ, Janja, PAVKO, Aleksander, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Application of basidiomycete fungi enzymes for treatment and detoxification of municipal landfill leachate = [lecture]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. [1-8]. [COBISS.SI-ID 36208645]
37. BURJA, Roman, URŠIČ, Luka, PAVKO, Aleksander. Koncentriranje aktivne farmacevtske učinkovine v organskem topilu : [predavanje]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. [1-8]. [COBISS.SI-ID 36211973]
38. PIŠLAR, Bine, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Problem aerobnega biološkega čiščenja komunalne odpadne vode z visoko slanostjo. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. 1-8. [COBISS.SI-ID 36209413]
39. NOVAK, Uroš, PAVŠIČ, Jan, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. Integracija encimsko katalizirane esterifikacije z membransko separacijo v sistemu mikrofluidnih naprav = Integration of an enzyme-catalyzed esterification with a membrane separation within a microfluidic system: [predavanje]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. 1-11. [COBISS.SI-ID 36205573]



40. KALČÍKOVÁ, Gabriela, MELICHER, Michal, DERCO, Ján, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. The importance of bioassays in wastewater treatment monitoring : [lecture]. V: BODÍK, Igor (ur.), SEDLÁČEK, Stanislav (ur.), HUTŇAN, Miroslav (ur.). *Zborník prednášok 7. bienálnej konferencie s medzinárodnou účasťou odpadové vody 2012 : Štrbské Pleso, 17-19. október 2012*. Bratislava: Asociácia čistiarenských expertov Slovenskej republiky, cop. 2012, str. 106-110. [COBISS.SI-ID 36292869]
41. DERCO, Ján, ŠILHÁROVÁ, Katarína, VALIČKOVÁ, Mária, MELICHER, Michal, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, LUPTÁKOVÁ, Anna. Odstraňovanie mikropolutantov procesmi s využitím ozónu : [lecture]. V: BODÍK, Igor (ur.), SEDLÁČEK, Stanislav (ur.), HUTŇAN, Miroslav (ur.). *Zborník prednášok 7. bienálnej konferencie s medzinárodnou účasťou odpadové vody 2012 : Štrbské Pleso, 17-19. október 2012*. Bratislava: Asociácia čistiarenských expertov Slovenskej republiky, cop. 2012, str. 304-310. [COBISS.SI-ID 36295173]
42. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, KALČÍKOVÁ, Gabriela, ZAGORC-KONČAN, Jana, DERCO, Ján. Characterisation of environmental impact of newly designed solvents : [lecture]. V: BODÍK, Igor (ur.), SEDLÁČEK, Stanislav (ur.), HUTŇAN, Miroslav (ur.). *Zborník prednášok 7. bienálnej konferencie s medzinárodnou účasťou odpadové vody 2012 : Štrbské Pleso, 17-19. október 2012*. Bratislava: Asociácia čistiarenských expertov Slovenskej republiky, cop. 2012, str. 316-319. [COBISS.SI-ID 36295429]

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

43. PAVKO, Aleksander. Acta Chimica Slovenica - mednarodno priznana znanstvena revija : [simpozij Položaj znanstvenog i stručnog izdavaštva u Republici Hrvatskoj, 16. studeni 2012, Zagreb]. *Food technol. biotechnol.*, 2012, vol. 50, suppl. 50th anniversary issue, str. 17-18. [COBISS.SI-ID 36348421]
44. ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona, PLAZL, Igor. Uporaba mikrostrukturiranih naprav v biokemijskih procesih: [vabljeno predavanje]. V: KUŠČER, Danjela (ur.). Delavnica Mikrofluidika, 22. maj 2012, Ljubljana, Slovenija. *Knjiga povzetkov*. Ljubljana: Center odličnosti NAMASTE, 2012, str. 14-17. [COBISS.SI-ID 35997701]
45. BEROVIČ, Marin, ŠVAGELJ, Mirjan, HABIJANIČ, Jožica, BOH, Bojana, WRABER-HERZOG, Branka. Biosynthesis of antitumor fungal polysaccharides of Ganoderma lucidum and Grifola frondosa by solid state cultivation of wood industry wastes: [plenary lecture]. V: 3rd Conference for the African Society for Edible and Medicinal Mushrooms (ASEMM). *Mushrooms: food & nutraceuticals for Africa: abstracts book*. [S. l.: s. n.], 2012, str. 50. [COBISS.SI-ID 36302597]
46. ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. Biotransformations at the microreactor scale: [invited lecture]. V: 2012 International Conference on Small Science (ICSS), Dec. 16-19, 2012, Orlando FL, USA. *Program & abstracts: ICSS 2012*. [S. l.: s. n.], 2012, str. 89-90. [COBISS.SI-ID 36433669]
47. PLAZL, Igor. Transport phenomena and kinetics at the microreactor scale : [invited lecture]. V: 2012 International Conference on Small Science (ICSS), Dec. 16-19, 2012, Orlando FL, USA. *Program & abstracts: ICSS 2012*. [S. l.: s. n.], 2012, str. 121-122. [COBISS.SI-ID 36433925]

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

48. BERLOT, Matjaž, BEROVIČ, Marin. Influence of CO<sub>2</sub> pulses on Saccharomyces cerevisiae in wine fermentation. V: 35th World Congress of Vine and Wine, 18-22 June 2012, Izmir, Turkey. *Abstracts*. [S. l.]: TAPDK, 2012, str. [1-5]. [COBISS.SI-ID 36034053]
49. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, KALČÍKOVÁ, Gabriela, ZAGORC-KONČAN, Jana. The impact of solvent to ecotoxicological characterisation of hydrophobic ionic liquid. V: *ANQUE*

- ICCE 2012: 24 - 27 June, Sevilla: EFCE event no. 701. [S. l.: s. n.], 2012, str. [1]. [COBISS.SI-ID 36103429]
50. PLAZL, Igor, LUBEJ, Martin. Carbon nanotubes synthesis in microstructured device. V: *ANQUE ICCE 2012: 24 - 27 June, Sevilla: EFCE event no. 701*. [S. l.: s. n.], 2012, str. [1-2]. [COBISS.SI-ID 36103173]
51. RUGEL, Boris, RASPOR, Peter, DROBNE, Damjana, ČADEŽ, Neža, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. Microbioreactor-assisted screening of yeasts for L-malic acid production : [lecture]. V: *ANQUE ICCE 2012: 24 - 27 June, Sevilla: EFCE event no. 701*. [S. l.: s. n.], 2012, str. [1-2]. [COBISS.SI-ID 36102149]
52. STOJKOVIČ, Gorazd, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. Microbioreactors as a tool for whole-cell biotransformations: [lecture]. V: 12th International Conference on Microreaction Technology, 20th - 22nd February 2012 Lyon, France. *Book of abstracts: IMRET 12*. [S. l.: s. n.], 2012, str. 161-162. [COBISS.SI-ID 35821317]
53. NOVAK, Uroš, POHAR, Andrej, FONSECA, Luis P., CABRAL, Joaquim M. S., PLAZL, Igor, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. Aqueous two-phase extraction of proteins in a parallel flow microfluidic system. V: 12th International Conference on Microreaction Technology, 20th - 22nd February 2012 Lyon, France. *Book of abstracts: IMRET 12*. [S. l.: s. n.], 2012, str. 423-424. [COBISS.SI-ID 35822085]
54. POHAR, Andrej, UNGERBÖCK, B., MAYR, T., PLAZL, Igor. On-line oxygen measurements inside a microreactor with modeling of transport phenomena : [lecture]. V: 20th International Congress of Chemical and Process Engineering [and] 15th Conference PRES, 25 - 29 August 2012, Prague, Czech Republic. *CD-ROM of full texts*. Prague: [s. n.], cop. 2012, str. [1]. [COBISS.SI-ID 36176133]
55. ŠUŠTERŠIČ, Ema, TUŠAR, Marjan, LUKAČ, Bojana, ZUPANČIČ-VALANT, Andreja. Utilization of PMMA/ATH waste powder in asphalt binder modification. V: the seventh International Conference on Maintenance and Rehabilitation of Pavements and Technological Control, The University of Auckland - New Zealand, August 28-30, 2012. *Conference handbook: research, innovation, application: MAIRE PAV7*. Auckland: [s. n.], 2012, str. 46. [COBISS.SI-ID 5053466]
56. PIŠLAR, Bine, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. MBR-SBR combined technology for effective biological treatment of saline wastewater: [oral presentation]. V: IX. susret mladih kemijskih inženjera, Zagreb, 16. i 17. veljače 2012. *Knjiga sažetaka*. Zagreb: Hrvatsko društvo kemijskih inženjera i tehnologa, 2012, str. 33. [COBISS.SI-ID 35814405]
57. LUBEJ, Martin, PLAZL, Igor. Carbon nanotubes synthesis in microstructured device. V: IX. susret mladih kemijskih inženjera, Zagreb, 16. i 17. veljače 2012. *Knjiga sažetaka*. Zagreb: Hrvatsko društvo kemijskih inženjera i tehnologa, 2012, str. 197. [COBISS.SI-ID 35814661]
58. ŠINKOVEC, Ervin, KRAJNC, Matjaž, POHAR, Andrej. Experimental studies and modeling on phase transfer catalyzed esterification in the rectangular microreactor under parallel flow pattern. V: *Microwave and Flow Conference : abstracts booklet : The Hesperia Hotel, Lanzarote : 28th February-2nd March 2012*. [Cambridge]: Zing Conferences, cop. 2012, str. [76]. [COBISS.SI-ID 35942917]
59. MIHELIČ, Marko, PAVKO, Aleksander, ZUPET, Rok, GASPARIČ, Aleš. Enostaven način testiranja ketoreduktaznega delovanja v laboratorijskem modelnem membranskem reaktorju: [predavanje]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12. in 14. september 2012. *Zbornik povzetkov referatov s posvetovanja*. Maribor: FKKT, 2012, str. 34. [COBISS.SI-ID 36214533]
60. ŠUŠTERŠIČ, Ema, ZUPANČIČ-VALANT, Andreja, TUŠAR, Marjan. Določevanje odpornosti bitumenskih zmesi proti nastajanju trajnih deformacij. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). Slovenski kemijski dnevi

2012, Portorož, 12. in 14. september 2012. *Zbornik povzetkov referatov s posvetovanja*. Maribor: FKKT, 2012, str. 121. [COBISS.SI-ID 36217093]

61. ŠOŠTARIČ, Maja, RUČIGAJ, Aleš, BRICELJ, Mihael, LIKOZAR, Blaž, GOLOB, Janvit. Izgradnja pilotnega fotobioreaktorja za gojenje mikroalg. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12. in 14. september 2012. *Zbornik povzetkov referatov s posvetovanja*. Maribor: FKKT, 2012, str. 190. [COBISS.SI-ID 5070874]
62. PETRIC, Martin, LIKOZAR, Blaž, POHAR, Andrej, LEVEC, Janez. Kontinuirna proizvodnja biodizla v cevnem reaktorju s statičnimi mešali. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12. in 14. september 2012. *Zbornik povzetkov referatov s posvetovanja*. Maribor: FKKT, 2012, str. 222. [COBISS.SI-ID 5074714]
63. ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. Mikrobioreaktorji: [predavanje]. V: DOLINAR, Marko (ur.). Dan biomolekularnih znanosti, Ljubljana, 27. september 2012. *Zbornik povzetkov*. Ljubljana: Slovensko biokemijsko društvo, 2012, str. 16. [COBISS.SI-ID 36465157]

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

64. DERCO, Ján, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, MENCÁKOVÁ, Angelika. Oxidative treatment of landfill leachate. V: CABRAL, Gustavo B. C. (ur.), BOTELHO, Beatriz A. E. (ur.). *Landfills : waste management, regional practices and environmental impact*, (Waste and waste management). New York: Nova Science, cop. 2012, str. 1-82. [COBISS.SI-ID 36296197]
65. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, KALČÍKOVÁ, Gabriela, ZAGORC-KONČAN, Jana. Reduction of environmental impact of municipal landfill leachate during oxidative treatment : the importance of phytotoxicity assessment. V: CABRAL, Gustavo B. C. (ur.), BOTELHO, Beatriz A. E. (ur.). *Landfills : waste management, regional practices and environmental impact*, (Waste and waste management). New York: Nova Science, cop. 2012, str. 223-251. [COBISS.SI-ID 36291589]
66. BOH, Bojana, BEROVIČ, Marin. Cultivation of *Ganoderma lucidum* and *Grifola frondosa* and production of their pharmaceutical active compounds. V: PETRE, Marian (ur.), BEROVIČ, Marin (ur.). *Mushroom biotechnology and bioengineering*. Bucharest: CD Press Publishing House, cop. 2012, str. 21-84. [COBISS.SI-ID 36312581]

#### **DRUGI RELEVANTNI DOSEŽKI / OTHER RELEVANT ACHIEVEMENTS**

##### **PATENT / PATENT**

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

##### **PATENTNA PRIJAVA / PATENT APPLICATION**

68. TUŠAR, Marjan, BELIČIČ, Andrej, PREŠEREN, Marijan, ŠUŠTERŠIČ, Ema, NOVIČ, Marjana, ZUPANČIČ-VALANT, Andreja. *S PMMA/ATH kompozitnim prahom modificiran bitumen in uporaba le-tega : patentna prijava : P-201200213, 2012-06-20*. Ljubljana: Urad Republike Slovenije za intelektualno lastnino, 2012. 4 str., ilustr. [COBISS.SI-ID 5121818]

## STROKOVNI ČLANEK / PROFESSIONAL ARTICLE

69. ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. Mikrobioreaktorji. *Kemija v šoli in družbi*, 2012, vol. 24, no. 1, str. 16-20. [COBISS.SI-ID 35885061]

## UREDNIŠTVO / EDITORIAL WORK

70. *Acta chimica slovenica*. Pavko, Aleksander (glavni urednik 2006-). [Tiskana izd.]. Ljubljana: Slovensko kemijsko društvo: =Slovenian Chemical Society, 1993-. ISSN 1318-0207. <http://acta.chem-soc.si/>. [COBISS.SI-ID 14086149]
71. *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]
72. *Biotechnology annual review*. Berovič, Marin (član uredniškega odbora 2002-). Amsterdam; Lausanne; New York; Oxford; Shannon; Tokyo: Elsevier. ISSN 1387-2656. [COBISS.SI-ID 23725061]
73. *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]
74. *European water management*. Zagorc-Končan, Jana (član uredniškega odbora 1998-). Lavenham: Terence Dalton Publishers, 1998-. ISSN 1461-6971. [COBISS.SI-ID 1607450]
75. *Food technology and biotechnology*. Pavko, Aleksander (član uredniškega odbora 2004-). Zagreb: Faculty of Food Technology and Biotechnology, 1996-. ISSN 1330-9862. <http://www.ftb.com.hr/last.html>. [COBISS.SI-ID 40116737]
76. *International journal of medicinal mushrooms*. Berovič, Marin (član uredniškega odbora 2010-). New York, NY: Begell House. ISSN 1521-9437. [COBISS.SI-ID 1979418]
77. *Journal of biotechnology & biomaterials*. Berovič, Marin (član uredniškega odbora 2011-). Henderson: OMICS Publishing Group. <http://www.omicsonline.org/AimsandScopeJBIBM.php>. [COBISS.SI-ID 35604485]
78. *Kemija u industriji*. Plazl, Igor (član uredniškega odbora 2009-). [Print ed.]. Zagreb: Hrvatsko društvo kemijskih inženjera i tehnologa, 1952-. ISSN 0022-9830. <http://nippur.irb.hr/hrv/kui>. [COBISS.SI-ID 747524]
79. *Phytomedicine*. Berovič, Marin (član uredniškega odbora 2010-). Stuttgart; Jena; New York: Fischer, 1994-. ISSN 0944-7113. [COBISS.SI-ID 17566981]
80. PETRE, Marian (ur.), BEROVIČ, Marin (ur.). *Mushroom biotechnology and bioengineering*. Bucharest: CD Press Publishing House, cop. 2012. 204 str., ilustr. ISBN 978-606-528-146-2. [COBISS.SI-ID 36312325]

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

81. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. *[Advanced oxidation processes (AOPs) for removal of hazardous pollutants : invited lecture at INCDO INOE 2000 Research Institute for Analytical Instrumentation, Cluj Napoca, 4. 12. 2012]*. [2012]. [COBISS.SI-ID 36380677]
82. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. *[Persistent organic chemicals - a european perspective: Tulane University, School of Public Health & Tropical Medicine, September 11th, 2012, New Orleans, USA]*. [2012]. [COBISS.SI-ID 36190981]
83. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. *Sustainable municipal waste management : [Slovak University of Technology in Bratislava, Faculty of Chemical and Food Technology, Bratislava, March 6th, 2012]*. Bratislava, 2012. [COBISS.SI-ID 35833605]
84. KALČIKOVÁ, Gabriela, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. *[Sustainable waste management: is landfilling appropriate?: invited lecture at INCDO INOE 2000 Research Institute for Analytical Instrumentation, Cluj Napoca, 4. 12. 2012]*. [2012]. [COBISS.SI-ID 36381189]



## MENTOR PRI DOKTORSKIH DISERTACIJAH / SUPERVISOR FOR DOCTORAL DISSERTATIONS

85. MOHORIČ, Ines. *Anionska emulzijska polimerizacija ciklosiloksanov z odiranjem [!] obroča : doktorska disertacija*. Ljubljana: [I. Mohorič], 2012. [XII], 141 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 36405765]
86. POHAR, Andrej. *Intenzifikacija kemijskih procesov z miniaturizacijo naprav : doktorska disertacija*. Ljubljana: [A. Pohar], 2012. VIII, 158 str., ilustr. [COBISS.SI-ID 36018181]
87. ŠVAGELJ, Mirjan. *Kultivacija in pridobivanje imunsko aktivnih sestavin glive *Grifola frondosa* : doktorsko delo = Cultivation and production of immune-active components from the fungus *Grifola frondosa* : phd thesis*. Ljubljana: [M. Švagelj], 2012. XVII, 179 str., ilustr., preglednice. [COBISS.SI-ID 261453568]
88. HABIJANIČ, Jožica. *Vpliv polisaharidov slovenskega seva glive *Ganoderma lucidum* na vnetne in imunske odzive humanih mononuklearnih celic : doktorsko delo = Effect of polysaccharides from Slovenian strain *Ganoderma lucidum* on inflammatory and immune responses of human mononuclear cells : phd thesis*. Ljubljana: [J. Habijanič], 2012. XVIII, 158 str., ilustr., tabele. [COBISS.SI-ID 260558592]

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

89. ŠEBENIK, Urška. *Osnove polimernega inženirstva : zbirka nalog*. 1. izd. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2012. 41 str., ilustr. ISBN 978-961-6756-29-7. [COBISS.SI-ID 259131904]

## KONČNO POROČILO O REZULTATIH RAZISKAV / FINAL RESEARCH REPORT

90. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, ZAGORC-KONČAN, Jana, KALČÍKOVÁ, Gabriela. *Strupenost odpadnih lužnic iz proizvodnje nitrooksina : delovno poročilo : strogo zaupno*. Ljubljana: Univ. v Ljubljani, Fak. za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za kemijsko, biokemijsko in ekološko inženirstvo, 2012. 31 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 36103941]
91. KRAJNC, Matjaž, RUČIGAJ, Aleš, ALIČ, Branko. *Študij, razvoj in optimizacija »flow« reakcij : poročilo o delu po pogodbi 2011-349 za Lek farmacevtska družba d.d., Ljubljana za obdobje 1. 1. 2012 - 31. 3. 2012*. Ljubljana: Univ. v Ljubljani, Fak. za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za polimerno inženirstvo, organsko kemijsko tehnologijo in materiale, 2012. 1 zv., graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 36263173]

## RAZVOJNI PROJEKTI / INDUSTRIAL RESEARCH AND DEVELOPMENT

Akrilatna PSA lepila / *Acrylic PSA adhesives*  
Nosilec / *Principal Researcher*: M. Krajnc  
Financer / *Sponsored by*: Aero d.d.

Študij, razvoj in optimizacija "flow" reakcij / *Research, development and optimization of "flow" reactions*

Nosilec / *Principal Researcher*: M. Krajnc  
Financer / *Sponsored by*: Lek d.d.

Podpora pri implementaciji bioreaktorskih sistemov za enkratno uporabo v zgodnjo fazo razvoja bioloških zdravil / *Support during implementation of disposable bioreactor systems in the early phase of biosimilars development*

Nosilec / *Principal Researcher*: A. Pavko  
Financer / *Sponsored by*: Lek d.d.

Proces izboljšave testa raztapljanja in vpliv hidrodinamskih ter zunanjih pogojev na test in vrednotenje učinkovine / Improvement of dissolvent test and the effect of hydrodynamic end external conditions on test and evaluation of active ingredient

Nosilec / *Principal Researcher*: A. Pavko and J. Golob

Financer / *Sponsored by*: Lek d.d.

## **EU PROJEKTI / EU PROJECTS**

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

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

## **BILATERALNI PROJEKTI / BILATERAL PROJECTS**

Slovenija – Avstrija  
*Slovenia – Austria* Spremljanje bioprocsov v mikrofluidnih napravah / *Monitoring of bioprocesses within microfluidic devices*

Nosilec / *Principal Researcher*: I. Plazl

Slovenija – Slovaška  
*Slovenia – Slovakia* Razgradnje izbranih škodljivih snovi z ozonacijo / *Degradation of selected harmful compounds by ozonation*

Nosilec / *Principal Researcher*: A. Žgajnar Gotvajn

Slovenija – ZDA  
*Slovenia – USA* Odstranjevanje hormonskih motilcev (EDC) iz odpadnih vod z naprednimi oksidacijskimi procesi (AOP) / *Advanced Oxidation Processes (AOPs) for removal of endocrine disruptive chemicals (EDCs) from wastewaters*

Nosilec / *Principal Researcher*: A. Žgajnar Gotvajn

Slovenija – Ciper  
*Slovenia – Cyprus* Pretočnost krvi z različno vsebnostjo kisika / *The fluidity of blood at different levels of oxygen content*

Nosilec / *Principal Researcher*: A. Zupančič Valant

Slovenija – Romunija  
*Slovenia – Romania* Odstranjevanje nevarnih onesnaževal iz deponijskih izcednih vod z naprednimi oksidacijskimi procesi / *Advanced Oxidation Processes) for Removal of hazardous pollutants from landfill leachates*

Nosilec / *Principal Researcher*: A. Žgajnar Gotvajn

## **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**

**red. prof. dr. Janvit Golob**

**SODELAVCI PROGRAMSKE SKUPINE / RESEARCH PROGRAMME STAFF**

**Raziskovalci / *Researchers***

red. prof. dr. Janvit Golob

doc. dr. Blaž Likozar

doc. dr. Dušan Klinar

dr. Sergej Knez

dr. Aleksandra Pivec

dr. Klavdija Rižnar

dr. Štefan Čelan

**Mladi raziskovalci / *Young Researchers***

Maja Šoštarič

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 CO<sub>2</sub> so raziskave PS P2-0346 bile opravljene v 3 poglobitnih RR-podprogramih:

#### **1. TEHNOLOGIJA PRODUKCIJE LIPIDOV Z ALGO CHLORELLA VULGARIS V RAZLIČNIH MEDIJIH Z VGRADITVIJO CO<sub>2</sub> IZ DIMNIH PLINOV V BIOMASO:**

- zniževanje CO<sub>2</sub> v dimnih plinih,
- pridobivanje lipidov s pomočjo Chlor. vulgaris,
- optimizacija procesnih pogojev,
- modeliranje procesa,
- povečevanje procesa in prenos iz laboratorija na pilotni nivo.



## **2. RAZISKAVE INDUSTRIJSKIH PROCESOV Z NAMENOM EKOLOŠKE IN ENERGETSKE OPTIMIZACIJE:**

- obravnavanje kritičnih faz procesa,
- zniževanje specifične porabe energije na enoto produkta in emisij CO<sub>2</sub> na enoto produkta,
- zniževanje proizvodnih stroškov enote produkta,
- zviševanje dodane vrednosti produktov.

## **3. RAZISKAVE NA PODROČJU INŽENIRSTVA OKOLJU PRIJAZNIH PROIZVODOV:**

- zasnova produkta v laboratorijskih dimenzijah,
- optimizacija procesnih pogojev za pridobitev produkta,
- modeliranje procesa za pridobitev produkta,
- prenos dosežkov iz laboratorija na pilotske dimenzije,
- ekonomsko vrednotenje smiselnosti tehnološkega procesa.

Gojenje alg z nastajanjem olj z visoko kalorično vrednostjo in različno vsebnostjo različnih nenasičenih maščobnih kislin predstavljajo surovinski vir za predelavo v najkakovostnejša biogoriva. Na področju tehnologije alg smo v laboratoriju pridobili pomembna znanja o rasti algnih celic, za katere je bilo treba določiti ustrezne procesne pogoje za pridobitev podatkov o kinetiki rasti celic in prirastku algnih maščob. Celotne raziskave je spremljala izredno zahtevna analitika za pridobitev podatkov o količini lipidov, maščobno-kislinski sestavi, kalorični vrednosti, dobitku in sestavi plinov pri anaerobnem uplinjanju. Na podlagi rezultatov je bila zgrajena pilotna naprava za gojenje alg volumna 50 L in 1 m<sup>2</sup> osvetljevalne površine. Pilotna naprava omogoča študij parametrov potrebnih za prenos na večje – industrijsko merilo. Izvirnost rezultatov se kaže v dejstvu, da kljub temu, da se mikroalge še ne proizvajajo v velikem merilu za masovno uporabo, predstavlja priložnosti za razvoj tega procesa na vzdržen in ekonomičen način v naslednjih desetih - petnajstih letih. V sklopu teh raziskav je bila tudi vključena mlada raziskovalka.

V okviru raziskovalnega dela smo se osredotočili tudi na raziskovalne vsebine za zajemanje CO<sub>2</sub> iz plinskih zmesi. Analizirali smo edini koncentrador CO<sub>2</sub> v Sloveniji v proizvodnji H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> v fazi parnega reforminga in ločevanja zmesi CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>. Za Nafta Lendava d.o.o. je programska skupina pripravila vrsto elaboratov, ki se navezujejo na procese obdelave z vodikom in proizvodnjo formaldehida. Nadaljevanje raziskovalnega dela na področju tehnologij za zajemanje CO<sub>2</sub> je vključevalo izgradnjo postrojenja za proizvodnjo oborjenih kalcijevih karbonatov (CaCO<sub>3</sub>), ki predstavlja nadgradnjo doktorske disertacije [COBISS.SI-ID 27746309] (IAK Kresnice).

Usmeritev v trajnostni razvoj zahteva poleg zmanjševanja emisij CO<sub>2</sub> tudi uporabo lokalnih virov za pridobivanje energije z namenom uporabe lokalnih virov in zamenjavo fosilnih goriv. Poleg zanesljivih virov so pomembne tudi tehnologije za izkoriščanje teh virov, zato smo v naših raziskavah posvetili pozornost uplinjanju in pirolizi.

Uplinjanja smo izvajali tudi s pomočjo dveh mladih raziskovalcev v sodelovanju s podjetjem Bosio d.o.o. in Tehnične univerze na Dunaju (TUV) z raziskovalno skupino prof. Hermana Hofbauerja. S podjetjem Bosio d.o.o. smo načrtovali pilotno napravo velikosti 500kW za uplinjanje biomase in v letu 2012 pričeli s poskusnim obratovanjem. Osvojili smo znanja za povečevanje procesne opreme iz laboratorijskega nivoja na polindustrijski nivo. V sodelovanju s TUV smo na njihovi pilotni napravi (200kW) na Dunaju izvedli poskus uplinjanja SRF goriv iz odpadne plastike. Uspešno izveden poskus omogoča pridobitev podatkov potrebnih za načrtovanje industrijskih naprav za uplinjanje SRF goriv pridobljenih iz odpadkov. Poskus s čistim SRF gorivom pred tem še ni bil izveden in predstavlja novost.

Drugi pomemben proces je piroliza alternativnih goriv, ki smo jo raziskovali v sklopu sodelovanja s podjetjem Albin Promotion d.o.o., ki poseduje delujočo pilotno (2 m<sup>3</sup>) in laboratorijsko napravo

(2 L) za testiranje in študij procesa. V raziskovalno delo se je z določenim delom vključil tudi mladi raziskovalec v podjetju. Izveden je bil proces inženirskega povečevanja in zmanjševanja med laboratorijskim in pilotnim reaktorjem (merilo 1: 2000) z namenom študije in pridobivanja prenosnih kriterijev za prenos toplote in snovi na industrijsko merilo. Industrijsko merilo pomeni 1:10-20 krat več od pilotnega. Uspešno je bila izvedena serija 15 poskusov na različnih materialih in pri različnih procesnih pogojih.

Nadalje smo raziskovali proces anaerobne digestije biomase v strnjenem sloju. Gre za kompatibilen proces, ki ga je potrebno uporabiti v primeru biološko aktivne odpadne bio mase kot je: zelena in biomasa izločena iz komunalnih odpadkov. Takšno biomaso v procesu stabilne anaerobne digestije stabiliziramo, izločimo in uporabimo nevaren toplogredni plin CH<sub>4</sub>, ostanek pa pripravimo kot alternativno gorivo za uplinjanje ali pirolizo. Tudi raziskave dela tega procesa so potekale v povezavi z mlado raziskovalko in podjetjem JS Ptuj d.o.o., ki bo v letu 2013 zgradilo večjo pilotno napravo (manjši industrijski obrat).

Raziskave o tehnologijah CO<sub>2</sub> so tesno povezane z raziskavami širšega pomena, zajete v koncept ZERO WASTE, v okviru katerega programska skupina sodeluje s številnimi tujimi partnerji in konzorciji na evropskih projektih (E2BEBIS, SEBE, MED-IPPC-NET, ZERO WASTE, AGRO-ENVIRONMENTALMED in SOLBIOPOLYSY) v smereh raziskav uplinjanja, anaerobne digestije, pirolize in produktnega inženirstva okolju prijaznih proizvodov z visoko dodano vrednostjo.

## RESEARCH PROGRAMME REPORT

### PROGRAMME GOALS AND RESEARCH TOPICS

According to global development priorities within the sphere of carbon dioxide (CO<sub>2</sub>), the research topics of the PG P2-0346 were carried out under three major R&D subprograms:

#### 1. TECHNOLOGY OF LIPID PRODUCTION BY CHLORELLA VULGARIS ALGAE IN DIFFERENT MEDIA BY INCORPORATION OF CARBON DIOXIDE ORIGINATING FROM FLUE GASES:

- CO<sub>2</sub> reduction in flue gases,
- production of lipids utilizing Chlor. vulgaris,
- process condition optimization,
- process modeling,
- process scale-up and its transfer from laboratory to pilot level.

#### 2. RESEARCH OF INDUSTRIAL PROCESSES FOR THEIR ENVIRONMENT ACCEPTANCE AND ENERGY-USE IMPROVEMENT:

- study of critical phases of the process,
- reduction of specific energy consumption, CO<sub>2</sub> emissions and production costs per product unit,
- increase of product added value.

#### 3. PRODUCT ENGINEERING RESEARCH FOR SUSTAINABLE DEVELOPMENT:

- product development in laboratory conditions,
- optimization of process parameters for the production,

- 
- process modeling,
  - process scale-up from laboratory to pilot plant level,
  - economic evaluation of technological process viability.

Growing algae for the generation of oils with high calorific value and different contents of various unsaturated fatty acids represent a source of raw materials for processing the highest quality biofuels. In the field of algae technology in the lab, we have acquired important knowledge about the growth of the algae cells. It was necessary to determine appropriate processing conditions to obtain data on the kinetics of cell growth and increment of the algae fats. The whole research was followed by highly complex analytics to obtain data on the quantity of lipids, fatty acid composition, calorific value, volume and composition of gases in anaerobic gasification conditions. Based on the results, the pilot plant for growing algae with the volume of 50 L and an exposure area of 1m<sup>2</sup> was built. The pilot plant allows for the study of parameters needed for transferring the production to an industrial scale. Originality of results is reflected in that despite the fact that microalgae are not produced to large scale mass use, they represent an opportunity for the development of this process in a sustainable and economic manner over the next ten to fifteen years. As part of this research a young researcher was also engaged in the study.

Within the context of research work we also focused on the investigations of CO<sub>2</sub> capture from a gas mixture. We analyzed the only concentrator of CO<sub>2</sub> in Slovenia in the production of hydrogen peroxide (H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>) in steam reforming and phase separation of a mixture of CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>. For the company Nafta Lendava d.o.o. we prepared a series of elaborates referring to the processes of treatment with hydrogen and production of formaldehyde. The continuation of the research work in the field of technologies for CO<sub>2</sub> capturing included the construction of the plant for the production of precipitated calcium carbonates (CaCO<sub>3</sub>), which represents a follow-up of the doctoral dissertation [COBISS. SI-ID 27746309] (IAK Kresnice).

In addition to reducing CO<sub>2</sub>, sustainable development requires the use of local resources for energy production with intended use of local resources and the replacement of fossil fuels. As well as reliable resources, the technologies, the exploitation of these resources is also important, so we focused our research on the problems of gasification and pyrolysis.

Gasification was carried out with the assistance of two young researchers in collaboration with the Bosio d.o.o. and Technical University of Vienna (TUV) with a research group of Prof. Herman Hofbauer. With the company Bosio d.o.o. we designed a pilot device of 500kW for the gasification of biomass and started a trial operation in 2012. We acquired the knowledge to enhance the process equipment from laboratory level to semi-industrial level. In cooperation with TUV we carried out an experiment at their pilot plant (200kW) of SRF fuels gasification from waste plastics. Successfully carried out experiments provide information for the gasification of SRF fuels obtained from waste. The experiment with clean SRF fuel has not been carried out so far and thus represents a novelty.

Another important process is the pyrolysis of alternative fuels which we studied in collaboration with the Albin Promotion d.o.o. which possesses a working pilot device (2 m<sup>3</sup>) and a laboratory device (2 L) to test and analyse the process. In this research work a young researcher for the company was also involved. The process of engineering increases was carried out between the laboratory and the pilot reactor (scale 1: 2000) to study the transmission and acquisition criteria for heat and mass transfer in the industrial scale. Industrial scale means 1: 10-20 times more than the pilot device. A series of 15 experiments on different materials and different processing conditions was successfully carried out.

Furthermore, we studied the process of anaerobic digestion of biomass in a concentrated layer. This is a compatible process that should be used in case of biological waste biomass as: green biomass and biomass separated from municipal waste. Such biomass in the process of stable anaerobic digestion is stabilized, dangerous greenhouse CH<sub>4</sub> is eliminated and is used, the remainder is prepared as an alternative fuel for gasification or pyrolysis. The research of this part of the process took place together

with a young researcher and the company JS Ptuj d.o.o., which is going to build a larger pilot device (smaller industrial plant) in 2013.

Research on the technologies of CO<sub>2</sub> are closely related to the research of wider importance, including in the concept of ZERO WASTE. Within this context our program group cooperates with many foreign partners and consortia of the European projects (E2BEBIS, SEBE, MED-IPPC-NET, ZERO WASTE, AGRO-ENVIRONMED in SOLBIOPOLYSY) in the area of gasification, anaerobic digestion, pyrolysis and product engineering of environmentally friendly products with high added value.

## **ZNANSTVENI IN DRUGI POMEMBNI DOSEŽKI / SCIENTIFIC AND OTHER IMPORTANT ACHIEVEMENTS**

### **IZVIRNA ZNANSTVENA ČLANKA / ORIGINAL SCIENTIFIC ARTICLE**

GOLOB, Janvit, KLINAR, Dušan, BRICELJ, Mihael. Potential solutions for CO<sub>2</sub>-capturing technologies in the slovenian context. *Acta chim. slov.* [Tiskana izd.], 2012, vol. 59, no. 3, str. 615-621. <http://acta.chem-soc.si/59/59-3-615.pdf>. [COBISS.SI-ID 36189445], [JCR, Scopus do 31. 10. 2012: št. citatov (TC): 0, čistih citatov (CI): 0, normirano št. čistih citatov (NC): 0]

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*, 2012, vol. 29, iss. 3, str. 325-331, doi: 10.1016/j.nbt.2011.12.002. [COBISS.SI-ID 35597317], [JCR, WoS do 13. 2. 2013: št. citatov (TC): 2, čistih citatov (CI): 2, normirano št. čistih citatov (NC): 1, Scopus do 27. 2. 2013: št. citatov (TC): 3, čistih citatov (CI): 2, normirano št. čistih citatov (NC): 1]

### **OBJAVLJENI ZNANSTVENI PRISPEVEK NA KONFERENCI / PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTION**

ŠOŠTARIČ, Maja, RUČIGAJ, Aleš, BRICELJ, Mihael, LIKOZAR, Blaž, GOLOB, Janvit. Izgradnja pilotnega fotobioreaktorja za gojenje mikroalg : [predavanje]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. [1-6]. [COBISS.SI-ID 36206853]

GRILC, Miha, LEVEC, Janez, GOLOB, Janvit, DOHRN, Ralf, PEPER, Stephanie, FELE ŽILNIK, Ljudmila. Izgradnja visokotlačne ravnotežne celice in meritve faznega ravnotežja CO<sub>2</sub> + n-dekan z različnimi eksperimentalnimi metodami : [predavanje]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. [1-6]. [COBISS.SI-ID 36211205]

LAH, Branko, KLINAR, Dušan, LIKOZAR, Blaž. Vacuum pyrolysis of scrap rubber : determination of optimal process parameters from laboratory and pilot-scale measurements and calculations. V: *Proceedings*. Venice: [s. n.], 2012, str. [1-9]. [COBISS.SI-ID 5123610]

LAH, Branko, KLINAR, Dušan, LIKOZAR, Blaž. Piroliza odpadne gume : modeliranje kinetike, prenosa toplote in snovi. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. [1-6]. [COBISS.SI-ID 5071642]

### **OBJAVLJENI STROKOVNI PRISPEVEK NA KONFERENCI / PROFESSIONAL ARTICLE**

GRILC, Viktor, KLINAR, Dušan. Tehnološki, okoljski, energetski in ekonomski vidiki alternativnih načinov toplotne obdelave odpadkov. V: *Termična obdelava odpadkov v Sloveniji - kako naprej?* Celje: [s. n.], 2012, str. [1-11]. [COBISS.SI-ID 5141530]

## OBJAVLJENI POVZETEK ZNANSTVENEGA PRISPEVKA NA KONFERENCI / PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTION ABSTRACT

MALIN, Franci, SKALE, Saša, ŠEGEDIN, Urban, ZNOJ, Bogdan, GOLOB, Janvit, VENTURINI, Peter. Vpliv nanokaolina na zaščitne lastnosti premaza nad kritičnim deležem volumnske koncentracije pigmenta : [predavanje]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12. in 14. september 2012. *Zbornik povzetkov referatov s posvetovanja*. Maribor: FKKT, 2012, str. 115. [COBISS.SI-ID 36216581]

OCEPEK, Martin, ZABRET, Joži, BERCE, Peter, SKALE, Saša, KECELJ, Janez, ZNOJ, Bogdan, GOLOB, Janvit, VENTURINI, Peter. Spremembe fizikalno-kemijskih lastnosti poliuretanskih vodnih disperzij po sintezi : [predavanje]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12. in 14. september 2012. *Zbornik povzetkov referatov s posvetovanja*. Maribor: FKKT, 2012, str. 119. [COBISS.SI-ID 36215813]

ŠOŠTARIČ, Maja, RUČIGAJ, Aleš, BRICELJ, Mihael, LIKOZAR, Blaž, GOLOB, Janvit. Izgradnja pilotnega fotobioreaktorja za gojenje mikroalg. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12. in 14. september 2012. *Zbornik povzetkov referatov s posvetovanja*. Maribor: FKKT, 2012, str. 190. [COBISS.SI-ID 5070874]

GRILC, Miha, LEVEC, Janez, GOLOB, Janvit, DOHRN, Ralf, PEPER, Stephanie, FELE ŽILNIK, Ljudmila. Izgradnja visokotlačne ravnotežne celice in meritve faznega ravnotežja CO[spodaj]2 + n-dekan z različnimi eksperimentalnimi metodami. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12. in 14. september 2012. *Zbornik povzetkov referatov s posvetovanja*. Maribor: FKKT, 2012, str. 225. [COBISS.SI-ID 5074970]

LAH, Branko, KLINAR, Dušan, LIKOZAR, Blaž. Piroliza odpadne gume : modeliranje kinetike, prenosa toplote in snovi. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12. in 14. september 2012. *Zbornik povzetkov referatov s posvetovanja*. Maribor: FKKT, 2012, str. 219. [COBISS.SI-ID 5076506]

## PREDAVANJE NA TUJI UNIVERZI / LECTURE AT THE FOREIGN UNIVERSITY

GOLOB, Janvit. [*Capturing CO<sub>2</sub> : Laboratory for Environmental Biotechnology, École Polytechnique Fédérale de Lausanne, 23rd February, 2012*]. [2012]. [COBISS.SI-ID 36078341]

GOLOB, Janvit. [*Contribution to low carbon society through sustainable development : Department of Chemical and Environmental Engineering, University of Arizona, 23rd April, 2012*]. [2012]. [COBISS.SI-ID 36078597]

## DRUGO / OTHER

Patent: KLINAR, Dušan, BRENCELJ, Albin. *Metoda za ciklično vakumiranje v šaržnem reaktorju : patent št. SI 23545 A, datum objave 31. 05. 2012; patentna prijava št. P-201000369 z dne 09. 11. 2010*. Ljubljana: Urad RS za intelektualno lastnino, 2012. [5] str. [COBISS.SI-ID 16117782]

Patent: KLINAR, Dušan, BRENCELJ, Albin. *Metoda za hitro segrevanje trdne reakcijske zmesi v šaržnem reaktorju : patent št. SI 23553 A, datum objave 31. 05. 2012; patentna prijava št. P-201000368 z dne 09. 11. 2010*. Ljubljana: Urad RS za intelektualno lastnino, 2012. [6] str. [COBISS.SI-ID 16118038]





---

## 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 izposojajo, 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, promocijske aktivnosti, izvajanje postopkov javnega naročanja, vzdrževanje nepremičnin, vzdrževanje spletnih strani fakultete, vzdrževanje stavb in opreme, delovanje računalniške opreme fakultete in za administrativno-tehnična dela pri izvajanju nacionalnega programa visokega šolstva in nacionalnega raziskovalnega in razvojnega programa. Tajništvo sestavljajo naslednje podenote:

- pisarna (P),
- finančno računovodska služba (FRS):
  - knjigovodstvo,
  - finančne zadeve in obračun,
- kadrovska služba (KS),
- služba za varstvo pri delu (SVPD),
- študentski referat (ŠR):
  - služba za dodiplomski in magistrski študij (SDMŠ),
  - služba za doktorski študij (SDŠ),

- služba za raziskovalne zadeve in mednarodno sodelovanje (SRMS),
- služba za promocijo in javna naročila (SPJN),
- služba za vzdrževanje opreme in inventarja (SVOI):
  - finomehanična delavnica,
  - steklopihaška delavnica,
- računalniški center (RC) in
- služba za vzdrževanje prostorov (SVP).

---

**KATEDRE V LETU 2012**  
CHAIRS IN 2012



---

## KATEDRA ZA ANALIZNO KEMIJO

### CHAIR OF ANALYTICAL CHEMISTRY

#### PREDSTOJNIK KATEDRE / HEAD

red. prof. dr. Marjan Veber

#### SODELAVCI KATEDRE / PERSONNEL

##### Visokošolski učitelji / *Faculty*

red. prof. dr. Boris Pihlar  
red. prof. dr. Marjan Veber  
izr. prof. dr. Nataša Gros  
izr. prof. dr. Matevž Pompe

##### Znanstveni sodelavec / *Assistant*

dr. Milko Novič

##### Visokošolski sodelavci / *Assistants*

mag. Ivanka Keber  
(upokojena od 30.9.2012 / *retired since September 30, 2012*)  
doc. dr. Drago Kočar  
dr. Polonca Kralj  
doc. dr. Irena Kralj Cigić  
dr. Robert Susič  
izr. prof. dr. Helena Prosen  
dr. Tatjana Zupančič

##### Raziskovalec / *Researcher*

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

##### Tehniki / *Technicians*

Zdenka Držaj  
Jolanda Furlan  
Mojca Žitko

<b>Mladi raziskovalci</b> <i>Young Researchers</i>	Mentor <i>Mentor</i>	Čas usposabljanja <i>Programme Duration</i>	Oblika usposabljanja <i>Degree</i>
Andrej Ščavničar	M. Pompe	2007–2012 (do 31.3.2012)	doktorski študij / <i>PhD</i>
Tanja Trafela	M. Strlič	2006–2013	doktorski študij / <i>PhD</i>
Alenka Možir	M. Strlič	2008–2013	doktorski študij / <i>PhD</i>
Jernej Markelj	M. Pompe	2012–2016	doktorski študij / <i>PhD</i>
Gregor Marolt	B. Pihlar	2012–2016	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 1<sup>st</sup> Cycle Study Programmes*

Kemija / *Chemistry* – UN:

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

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

Instrumentalna analiza / *Instrumental analysis*

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

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

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

Biokemija / *Biochemistry* – UN:

Instrumentalne metode analize / *Instrumental Analytical Methods*

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

Kemijsko inženirstvo / *Chemical Engineering* – UN:

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:

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

Praktikum iz kemije / *General practical courses*

Kemija okolja / *Environmental Chemistry*

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

##### Predbolonjski dodiplomski programi / *Pre-Bologna Undergraduate Programmes*

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

Avtomatizirana analiza / *Automated Analysis* – UN

Instrumentalna analiza / *Instrumental Analysis* – UN

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

Kemija okolja / *Environmental Chemistry* – UN

Kemijska analiza živil / *Food Analysis* – UN

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

##### Bolonjski programi 2. stopnje / *Bologna 2<sup>nd</sup> Cycle Study Programmes*

Kemija / *Chemistry* – UN:

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

Tehniška varnost / *Technical Safety*:

Instrumentalna analiza in monitoring (izbirni predmet) / *Instrumental Analysis and Monitoring (elective course)*



---

Bolonjski programi 3. stopnje / *Bologna 3<sup>rd</sup> 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 1<sup>st</sup> 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 3<sup>rd</sup> Cycle Doctoral Study Programmes*

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

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

## **RAZISKOVALNA DEJAVNOST / RESEARCH ACTIVITIES**

Temeljna raziskovalna dejavnost 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

### NAGRADE, PRIZNANJA / AWARDS, RECOGNITIONS

- I. Kralj Cigić, pohvala Študentskega sveta za pedagoško delo na univerzitetnem študijskem programu Kemija / *Students Award for the Quality of Teaching in University Study Programme of Chemistry – 1<sup>st</sup> cycle*
- G. Marolt, Fakultetna Prešernova nagrada za diplomsko delo / *Faculty Prešeren Award for Diploma Thesis*

### ČLANSTVO V MEDNARODNIH UREDNIŠKIH ODBORIH / MEMBERSHIP IN INTERNATIONAL EDITORIAL BOARDS

- M. Veber, M. Strlič, 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
- 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 PoliMaT - Polimerni materiali / *Centre of Excellence: Polymeric Materials*
- Center odličnosti: CO NOT - Nizkoogljične tehnologije / *Centre of Excellence: Low-Carbon Technologies*

## **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**

### **Bilateralno mednarodno sodelovanje / Bilateral Cooperation**

- Slovenija – Kitajska                      Onesnaževala povezana s prometom: ocena virov emisij in tvorbenih Slovenija – China 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 – Srbija  
 Slovenia – Serbia                            Spektroskopska in LC-MS/MS določitev bioflavonoidov v živilih in farmaceutskih pripravkih / *Spectroscopic and LC-MS/MS Determination of Bioflavonoids in Food and Pharmaceutical Forms*  
 Nosilec / *Principal Researcher*: H. Prosen

## **BIBLIOGRAFIJA 2012 / REFERENCES 2012**

### **IZVIRNI ZNANSTVENI ČLANEK / ORIGINAL SCIENTIFIC ARTICLE**

- AL1.** BAŠKOVČ, Jernej, DAHMANN, Georg, GOLOBIČ, Amalija, GROŠELJ, Uroš, KOČAR, Drago, STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. Diversity-oriented synthesis of 1-substituted 4-aryl-6-oxo-1,6-dihydropyridine-3-carboxamides. *ACS combinatorial science*, 2012, vol. 14, no. 9, str. 513-519, doi: 10.1021/co3000709. [COBISS.SI-ID 36122373]
- AL2.** KOVAČEVIĆ, Nataša, PIHLAR, Boris, ŠELIH, Vid Simon, MILOŠEV, Ingrid. The effect of pH value of a simulated physiological solution on the corrosion resistance of orthopaedic alloys. *Acta chim. slov.* [Tiskana izd.], 2012, vol. 59, no. 1, str. 144-155. [COBISS.SI-ID 25686567]
- AL3.** MARTINS, Ana, DAFFNER, Lee Ann, FENECH, Ann, MCGLINCHY, Christopher, STRLIČ, Matija. Non-destructive dating of fiber-based gelatin silver prints using near-infrared spectroscopy and multivariate analysis. *Anal. bioanal. chem.*, 2012, vol. 402, no. 4, str. 1459-1469, doi: 10.1007/s00216-011-5566-2. [COBISS.SI-ID 35749381]
- AL4.** MOŽIR, Alenka, GONZALEZ, Lee, KRALJ CIGIĆ, Irena, WESS, Tim J., RABIN, Ira, HAHN, Oliver, STRLIČ, Matija. A study of degradation of historic parchment using small-angle x-ray scattering, synchrotron-IR and multivariate data analysis. *Anal. bioanal. chem.*, 2012, vol. 402, no. 4, str. 1559-1566, doi: 10.1007/s00216-011-5392-6. [COBISS.SI-ID 35750405]

- AL5.** PASTORELLI, Gianluca, TRAFELA, Tanja, TADAY, Phillip F., PORTIERI, Alessia, LOWE, David, FUKUNAGA, K., STRLIČ, Matija. Characterisation of historic plastics using terahertz time-domain spectroscopy and pulsed imaging. *Anal. bioanal. chem.*, 2012, vol. 403, no. 5, str. 1405-1414, doi: 10.1007/s00216-012-5931-9. [COBISS.SI-ID 35930373]
- AL6.** FENECH, Ann, STRLIČ, Matija, CASSAR, May. The past and the future of chromogenic colour photographs : lifetime modelling using near-infrared spectroscopy & enhancement using hypoxia. *Appl. phys., A, Mater. sci. process. (Print)*, 2012, vol. 106, no. 2, str. 411-417, doi: 10.1007/s00339-011-6688-2. [COBISS.SI-ID 35749893]
- AL7.** TRDIN, Miha, BENEDIK, Ljudmila, SAMARDŽIJA, Zoran, PIHLAR, Boris. Investigation of factors affecting the quality of americium electroplating. *Appl. radiat. isotopes*. [Print ed.], 2012, iss. 9, vol. 70, str. 2002-2005. [COBISS.SI-ID 26037031]
- AL8.** HONG, S. H., STRLIČ, Matija, RIDLEY, I., NTANOS, Kostas, BELL, Nancy, CASSAR, May. Climate change mitigation strategies for mechanically controlled repositories : the case of The National Archives, Kew. *Atmos. environ. (1994)*. [Print ed.], 2012, vol. 49, no. 1, str. 163-170, doi: 10.1016/j.atmosenv.2011.12.003. [COBISS.SI-ID 35749125]
- AL9.** JURIŠEVIČ, Mojca, VRTAČNIK, Margareta, KWIATKOWSKI, Marek, GROS, Nataša. The interplay of students' motivational orientations, their chemistry achievements and their perception of learning with the hands-on approach to visible spectrometry. *Chem. Educ. Res. Pract. (Athens)*, 2012, vol. 13, no. 2, str. 237-247. <http://pubs.rsc.org/en/Content/ArticleLanding/2012/RP/C2RP20004J>, doi: 10.1039/C2RP20004J. [COBISS.SI-ID 9165897]
- AL10.** GROS, Nataša. Evacuated blood-collection tubes for haematological tests : a quality evaluation prior to their intended use for specimen collection. *Clin Chem Lab Med*, str. 1-9, doi: 10.1515/ccml-2012-0507. [COBISS.SI-ID 36397061]
- AL11.** ULČNIK, Ajda, KRALJ CIGIČ, Irena, ZUPANČIČ-KRALJ, Lucija, TAVZES, Črtomir, POHLEVEN, Franc. Bioremediation of lindane by wood-decaying fungi = Biorazgradnja lindana pomoću gljiva uzročnika truljenja drva. *Drv. ind.*, 2012, vol. 63, no. 4, str. 271-276. [COBISS.SI-ID 2080137]
- AL12.** SOPHA, Hanna Ingrid, HOČEVAR, Samo B., PIHLAR, Boris, OGOREVC, Božidar. Bismuth film electrode for stripping voltammetric measurement of sildenafil citrate. *Electrochim. acta*. [Print ed.], 2012, vol. 60, str. 274-277. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0013468611017221>, doi: 10.1016/j.electacta.2011.11.049. [COBISS.SI-ID 4863770]
- AL13.** IVEKOVIČ, Damir, VLASIČ-TRBIČ, Hana, PETER, Robert, PETRAVIČ, Mladen, ČEH, Miran, PIHLAR, Boris. Enhancement of stability of Prussian blue thin films by electrochemical insertion of Ni<sup>[sup](2+)</sup> ions : a stable electrocatalytic sensing of H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> in mild alkaline media. *Electrochim. acta*. [Print ed.], 2012, vol. 78, str. 452-458, doi: 10.1016/j.electacta.2012.06.027. [COBISS.SI-ID 26051111]
- AL14.** KÖSE, Sevim, KORAL, Serkan, TUFAN, Bekir, POMPE, Matevž, ŠČAVNIČAR, Andrej, KOČAR, Drago. Biogenic amine contents of commercially processed traditional fish products originating from European countries and Turkey. *European Food Research and Technology. A, Zeitschrift für Lebensmittel-Untersuchung und -Forschung*. [Print ed.], 2012, vol. 235, no. 4, str. 669-683, doi: 10.1007/s00217-012-1794-8. [COBISS.SI-ID 36261637]
- AL15.** RADOJKOVIČ, Marija, ZEKOVIČ, Z., VIDOVIČ, S., KOČAR, Drago, MAŠKOVIČ, Pavle Z. Free radical scavenging activity and total phenolic and flavonoid contents of mulberry (*Morus spp. L.*, Moraceae) extracts = Antioksidativna aktivnost i ukupan sadržaj fenola i flavonoida u ekstraktima dudu (*Morus SPP. L.*, Moraceae). *Hem. ind.*, 2012, vol. 66, no. 4, str. 547-522, doi: 10.2298/HEMIND11111002R. [COBISS.SI-ID 36259077]
- AL16.** CAMILLERI, J., KRALJ, Polonca, VEBER, Marjan, SINAGRA, E. Characterization and analyses of acid-extractable and leached trace elements in dental cements. *Int. endod. j. (Print)*, 2012, vol. 45, no. 8, str. 737-743, doi: 10.1111/j.1365-2591.2012.02027.x. [COBISS.SI-ID 36005893]
- AL17.** RUSJAN, Denis, STRLIČ, Matija, KOŠMERL, Tatjana, PROSEN, Helena. Contribution of enzyme preparations to the linalool content of wines made from the non-aromatic grapevine variety 'Furmint' (*Vitis vinifera L.*). *Journal international des sciences de la vigne et du vin*, 2012, vol. 46, no. 2, str. 139-143. [COBISS.SI-ID 7174777]
- AL18.** JANEŠ, Damjan, PROSEN, Helena, KREFT, Samo. Identification and quantification of aroma compounds of tartary buckwheat (*Fagopyrum tataricum gaertn.*) and some of its milling fractions. *J. food sci.*, 2012, vol. 7, no. 7, str. C746-C751, ilustr. <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1111/j.1750-3841.2012.02778.x/pdf>, doi: 10.1111/j.1750-3841.2012.02778.x. [COBISS.SI-ID 3287153]
- AL19.** ČRČEK, Bojana, BAŠKOVČ, Jernej, GROŠELJ, Uroš, KOČAR, Drago, DAHMANN, Georg, STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. Parallel synthesis of 2-substituted 6-(5-oxo-1-phenylpyrrolidin-3-yl)pyrimidine-5-carboxamides. *Molecules (Basel)*, 2012, vol. 17, no. 5, str. 5363-5384, doi: 10.3390/molecules17055363. [COBISS.SI-ID 35944709]
- AL20.** MALEŠIČ, Jasna, KOČAR, Drago, BALAŽIČ, Aneta. Stabilization of copper- and iron-containing papers in mildly alkaline environment. *Polym. degrad. stab.*. [Print ed.], jan. 2012, vol. 97, no. 1, str. 118-123, graf. prikazi, doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.polymdegradstab.2011.09.025>. [COBISS.SI-ID 259804928]
- AL21.** FENECH, Ann, FEARN, Tom, STRLIČ, Matija. Use of Design-of-Experiment principles to develop a dose-response function for colour photographs. *Polym. degrad. stab.*. [Print ed.], 2012, vol. 97, no. 4, str. 621-625, doi: 10.1016/j.polymdegradstab.2012.01.012. [COBISS.SI-ID 35799813]
- AL22.** KOLAR, Jana, MALEŠIČ, Jasna, KOČAR, Drago, STRLIČ, Matija, BRUIN, G. de, KOLEŠA, Dušan. Characterisation of paper containing iron gall ink using size exclusion chromatography. *Polym. degrad. stab.*. [Print ed.], 2012, vol. 97, no. 11, str. 2212-2216, doi: 10.1016/j.polymdegradstab.2012.08.005. [COBISS.SI-ID 36309253]
- AL23.** ČIRIČ, Andrija, PROSEN, Helena, JELIKIČ STANKOV, Milena, ĐURĐEVIČ, Predrag. Evaluation of matrix effect on determination of some bioflavonoids in food samples by LC-MS/MS method. *Talanta (Oxford)*. [Print ed.], 2012, vol. 99, no. 1, str. 780-790, doi: 10.1016/j.talanta.2012.07.025. [COBISS.SI-ID 36369157]

## KRATKI ZNANSTVENI PRISPEVEK / SHORT SCIENTIFIC ARTICLE

- AL24.** 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.], 2012, vol. 70, no. 2, str. 365-367. <http://www.springerlink.com/content/p75522317tj46832/fulltext.pdf>. [COBISS.SI-ID 1881993]

## OBJAVLJENI ZNANSTVENI PRISPEVEK NA KONFERENCI / PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTION

- AL25. KOŠMERL, Tatjana, PROSEN, Helena, JUG, Tjaša, DEMŠAR, Lea, FRANCETIČ, Vojmir. Fermentation characteristics of wine yeast in the presence of oak chips. V: 35th World Congress of Vine and Wine, 18-22 June 2012, Izmir, Turkey. *Abstracts*. [S. l.]: TAPDK, 2012, [7] str. [COBISS.SI-ID 4109432]
- AL26. GROS, Nataša. Small-scale, low cost analytical instruments: extended opportunities for learning analytical chemistry : [lecture]. V: International Conference New Perspectives in Science Education, Florence, Italy, 8 - 9 March 2012. *Conference proceedings*. cop. Milano: Simonelli Editore, 2012, str. 212-218. [COBISS.SI-ID 35848453]
- AL27. BAVČAR, Dejan, ČUŠ, Franc, PROSEN, Helena, BAŠA ČESNIK, Helena, DEMŠAR, Lea, KOŠMERL, Tatjana. Vpliv maceracije na aromatične značilnosti primorskih belih vin = Influence of maceration on aromatic properties of white wines from Primorska region. V: DEMŠAR, Lea (ur.), ŽLENDER, Božidar (ur.). 27. Bitenčevi živilski dnevi 2012 = 27th Food Technology Days 2012 dedicated to prof. F. Bitenc, 26. september 2012, Ljubljana. *Nanotehnologije in nanoživila*. Ljubljana: Biotehniška fakulteta, Oddelek za živilstvo, 2012, str. 127-134. [COBISS.SI-ID 4136312]
- AL28. MALOVRH, Mateja, PROSEN, Helena. Stabilnost helidonina v pripravkih zelišča *Chelidonium majus* L. = Chelidone stability in preparations from the herb *Chelidonium majus* L. : [predavanje]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. 1-6. [COBISS.SI-ID 36197125]
- AL29. VNUČEC POPOV, Tanja, CVITKOVIČ-MARIČIČ, Lea, PROSEN, Helena, BRODNJAK-VONČINA, Darinka. Razvoj in uporaba tehnike suhe lise krvi za kvantitativno določevanje topiramata s tekočinsko kromatografijo in tandemsko masno spektrometrijo. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. [1-11]. [COBISS.SI-ID 36203525]

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

- AL30. POMPE, Matevž. Uporaba kemometrijskih pristopov pri analizi živil in okoljskih vzorcev : [plenarno predavanje]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12. in 14. september 2012. Zbornik povzetkov referatov s posvetovanja*. Maribor: FKKT, 2012, str. 111. [COBISS.SI-ID 36212741]

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

- AL31. NOVIČ, Milko, HADDAD, Paul R. Retention processes in ion-exclusion chromatography : a new perspective. V: BHATTACHARYYA, Lokesh (ur.), ROHRER, Jeffrey S. (ur.). *Applications of ion chromatography for pharmaceutical and biological products*. Hoboken, N. J.: John Wiley & Sons, cop. 2012, str. 23-47. [COBISS.SI-ID 36290053]

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

- AL32. PROSEN, Helena, KRALJ CIGIČ, Irena, STRLIČ, Matija. *Praktikum iz analizne kemije : za univerzitetni študij kemije*. 1. izd. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2012. 140 str., ilustr. ISBN 978-961-6756-34-1. [COBISS.SI-ID 263437824]
- AL33. PIHLAR, Boris. *Osnove analizne kemije : zapiski predavanj*. (Ponatis). Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2010-. Zv. <1>, ilustr. ISBN 961-6286-42-0. [COBISS.SI-ID 1025274978]
- AL34. 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]

## DRUGO UČNO GRADIVO / OTHER EDUCATIONAL MATERIAL

- AL35. PROSEN, Helena, KRALJ CIGIČ, Irena, KRALJ, Polonca. *Kemija okolja : strokovni izbirni predmet : navodila za laboratorijske vaje : verzija 2.0 : za 2. letnik univerzitetnega študija kemije*. Ljubljana: [H. Prosen], 2012. 23 str., ilustr. <http://ucilnica.fkkt.uni-lj.si/>. [COBISS.SI-ID 36003589]
- AL36. PROSEN, Helena, KRALJ CIGIČ, Irena. *Navodila za vaje pri predmetu Kemijska analiza živil*. 1. izd. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za analizo kemijo, 2006 [i. e.] 2012. 61 str., ilustr. ISBN 978-961-6286-64-0. [COBISS.SI-ID 262132992]

## VABLJENO PREDAVANJE NA KONFERENCI BREZ NATISA / UNPUBLISHED INVITED CONFERENCE LECTURE

- AL37. KOŠMERL, Tatjana, JENKO, Mojca, BAVČAR, Dejan, FRANCETIČ, Vojmir, PROSEN, Helena. *Ohranjanje aromatskega potenciala od vinograda do steklenice : [predavanje na] 5. vinogradniškem posvetu, Hoče, 6.12.2012*. Hoče: Fakulteta za kmetijstvo in biosistemske vede, 2012. [COBISS.SI-ID 4189048]



## KATEDRA ZA ANORGANSKO KEMIJO CHAIR OF INORGANIC CHEMISTRY

### PREDSTOJNIK KATEDRE / HEAD

red. prof. dr. Iztok Turel

### SODELAVCI KATEDRE / PERSONNEL

#### Visokošolski učitelji / *Faculty*

red. prof. dr. Nataša Bukovec

red. prof. dr. Peter Bukovec, znanstveni svetnik

(upokojen 50 % od 2. 10. 2012 / *retired 50% since October 2, 2012*)

izr. prof. dr. Boris Čeh

red. prof. dr. Alojz Demšar

red. prof. dr. Ivan Leban, znanstveni svetnik

(upokojen 50 % od 2. 10. 2012 / *retired 50% since October 2, 2012*)

red. prof. dr. Anton Meden

doc. dr. Barbara Modec

doc. dr. Saša Petriček

red. prof. dr. Iztok Turel

#### Visokošolski sodelavci / *Assistants*

doc. dr. Romana Cerc Korošec

dr. Nataša Čelan Korošin

doc. dr. Amalija Golobič

dr. Sabina Grabner

doc. dr. Nives Kitanovski

dr. Marta Kasunič

doc. dr. Irena Kozjek Škofic

doc. dr. Bojan Kozlevčar

doc. dr. Nina Lah

doc. dr. Andrej Pevec

doc. dr. Elizabeta Tratar Pirc

doc. dr. Marija Zupančič

doc. dr. Franc Perdih

dr. Katarina Stare

#### Tehniki / *Technicians*

Damjan Erčulj

Karmen Klančar

Aleš Knez

Jasna Mikola (od 19. 11. 2012)

Urška Levec Jazbinšek

Petra Vuković

Igor Ponikvar

Martina Tekavec (do 30. 6. 2012)

<b>Mladi raziskovalci</b> <i>Young Researchers</i>	Mentor <i>Mentor</i>	Čas usposabljanja <i>Programme Duration</i>	Oblika usposabljanja <i>Degree</i>
Rosana Hudej	I. Turel	2008–2012 (do 31.3.2012)	doktorski študij / <i>PhD</i>
Marta Kasunič	A. Golobič	2007–2012 (do 31. 3. 2012)	doktorski študij / <i>PhD</i>
Simona Medvešček	A. Meden	2003–2012 (do 30.11.2012)	doktorski študij / <i>PhD</i>
Jerneja Šauta Ogorevc	P. Bukovec	2007–2013	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 Koleča Dobravec	A. Meden	2011–2015	doktorski študij / <i>PhD</i>
Miha Trdin	I. Leban	2011–2015	doktorski študij / <i>PhD</i>
Katja Krančan	I. Turel	2012–2016	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 1<sup>st</sup> 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 2<sup>nd</sup> Cycle Study Programmes*

Kemija / *Chemistry* – MAG:  
Anorganska kemija / *Inorganic Chemistry*  
Analiza zgradbe kristalov / *Crystal Structure Analysis (elective course)*  
Koordinacijska kemija / *Coordination Chemistry (elective course)*  
Termična analiza / *Thermal analysis (elective course)*

Tehniška varnost / *Technical Safety* – MAG:  
Požarnovarnostna analiza objektov (izbirni predmet skupine B) / *Fire Safety Analysis of Constructions (elective course)*

#### Bolonjski programi 3. stopnje / *Bologna 3<sup>rd</sup> 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 1<sup>st</sup> 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 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

- I. Leban, Nagrada Maksa Samca za popularizacijo študijev na Fakulteti za kemijo in kemijsko tehnologijo Univerze v Ljubljani za leto 2012 / *Maks Samec Award for the Popularization of Studies at the UL FKKT for 2012*
- R. Cerc Korošec, pohvala Študentskega sveta za pedagoško delo na magistrskem študijskem programu Tehniška varnost / *Students Award for the Quality of Teaching in University Study Programme of Technical Safety – 2<sup>nd</sup> cycle*

### ČLANSTVO V MEDNARODNIH UREDNIŠKIH ODBORIH / MEMBERSHIP IN INTERNATIONAL EDITORIAL BOARDS

- I. Turel, regionalni urednik / *Regional Editor of "Molecules", A Journal of Synthetic Organic Chemistry and Natural Product Chemistry*
- I. 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, A. Golobič, N. Lah, A. Meden, člani organizacijskega odbora 21. Slovensko–hrvaškega srečanja kristalografov, Pokljuka, junij 2012 / *Co-Chairman and Members of the Organising Committee of the 21<sup>st</sup> Slovenian-Croatian Crystallographic Meeting, Pokljuka, June 2012*
- A. Meden, član znanstvenega odbora konference EPDIC-13 (13th European Powder diffraction Conference, Grenoble, 28-31 October 2012) in soorganizator mikrosimpozija 2 na tej konferenci (MS02: Ab Initio Structure Solution) / *Member of the Scientific Committee of EPDIC-13 (the 13th European Powder diffraction Conference, Grenoble, 28-31 October 2012) and co-chairman of the 2nd microsymposium at this conference (MS02: Ab Initio Structure Solution)*

### DRUGO / OTHER

- I. Leban, strokovnjak v Institutional Evaluation Programme Evropskega združenja univerz (EUA IEP) / *Expert in the Institutional Evaluation Programme, European Universities Association*
- I. Leban, A. Knez, "Noč raziskovalk in raziskovalcev 2012", eksperimentalno predavanje za popularizacijo kemije / *"Researchers' Night 2012" – Demonstration Lecture for the Popularization of Chemistry*
- S. Petriček, predsednica Državne predmetne komisije za splošno maturo iz kemije (do 30. 9. 2012) / *Chairman of the Subject Testing Committee for the Matura Exam in Chemistry*
- F. Perdih, predsednik Državne predmetne komisije za splošno maturo iz kemije (od 1. 10. 2012) / *Chairman of the Subject Testing Committee for the Matura Exam in Chemistry*
- F. Perdih, mentor znanstvene ekipe študentov FKKT na XVI. mednarodnem znanstveno-športnem srečanju - Tehnologijada 2012, Umag, Hrvaška, maj 2012 / *Mentor of the FKKT Students Scientific Team at the XVI. International Scientific and Sports Meeting – Tehnologijada 2012, Umag, Croatia, May 2012*
- 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, "Dan odprtih vrat", eksperimentalno predavanje za Zavod za slepo in slabovidno mladino, februar 2012 / *"Open access" experimental lecture for the Institute of the blind and visually impaired persons, February 2012*

- I. Leban, A. Knez, “Festival Hokus Pokus 2012, Pionirski Dom, Ljubljana, eksperimentalni prikaz, marec 2012 / *“Festival Hokus Pokus 2012, Pionirski Dom, experimental show, March 2012.*
- I. Leban, “Vrh kemijske industrije”, GZS, Brdo pri Kranju, maj 2012, predavanje Tehnološki trendi in top inovacije za aplikacijo v kemijski industriji / *“Slovenian Chemical Industry”, GZS, Brdo pri Kranju, May 2012, lecture Technological trends and top innovations for application in chemical industry*
- I. Leban, A. Knez, “Veselje do znanosti”, prikaz poskusov, Gimnazija Celje-Center, november 2012 / *“Joy of knowledge”, experimental show, Gimnazija Celje-Center, November 2012*
- I. Leban, A. Knez, Prikaz poskusov na Gimnaziji Ledina, Ljubljana, november 2012 / *experimental show at Gimnazija Ledina, Ljubljana, November 2012*
- I. Leban, A. Knez, “Popoldne kemijskih eksperimentov”, Gimnazija Moste Ljubljana, december 2012 / *“Afternoon with chemical experiments”, Gimnazija Moste Ljubljana, December 2012*

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

## **RAZISKOVALNI PROGRAMI IN PROJEKTI / RESEARCH PROGRAMMES AND PROJECTS**

### **RAZISKOVALNI PROGRAMI / RESEARCH PROGRAMMES**

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

### **TEMELJNI PROJEKTI / BASIC RESEARCH**

- J1-4131** Sinteza, karakterizacija in uporaba novih rutenijevih spojin velekemoterapiji 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)*



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

ESS (Evropski socialni sklad-projekti) / *Razvoj naravoslovnih kompetenc / Development of Competences in Natural Sciences*  
*European Social Fund* / 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 CM1105 / *Functional metal complexes that bind to biomolecules.*  
Nosilec / *Principal Researcher*: I. Turel

### BILATERALNO MEDNARODNO SODELOVANJE / BILATERAL COOPERATION

Slovenija-Češka republika / *Struktura in lastnosti aktivnih organorutenijevih protirakavih kompleksov / Structure and Properties of Organoruthenium Complexes Active in Anticancer Treatment*  
*Slovenia-Czech Republic* / Nosilec / *Principal Researcher*: I. Turel  
  
Slovenija-LR Kitajska / *Študij katalitskih in bioloških aktivnosti raznih rutenijevih kompleksov / Study of Catalytic and Biological Activity of Various Ruthenium Complexes*  
*Slovenia-PR of China* / Nosilec / *Principal Researcher*: I. Turel  
  
Slovenija-LR Kitajska / *Pd/Fe katalizirana aktivacija C–H vezi / Pd/Fe Catalyzed C–H Bond Activation*  
*Slovenia-PR of China* / Nosilec / *Principal Researcher*: F. Perdih

## BIBLIOGRAFIJA 2012 / REFERENCES 2012

### IZVIRNI ZNANSTVENI ČLANEK / ORIGINAL SCIENTIFIC ARTICLE

- AK1. BAŠKOVČ, Jernej, DAHMANN, Georg, GOLOBIČ, Amalija, GROŠELJ, Uroš, KOČAR, Drago, STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. Diversity-oriented synthesis of 1-substituted 4-aryl-6-oxo-1,6-dihydropyridine-3-carboxamides. *ACS combinatorial science*, 2012, vol. 14, no. 9, str. 513-519, doi: 10.1021/co3000709. [COBISS.SI-ID 36122373]
- AK2. KASUNIČ, Marta, ŠKAPIN, Srečo D., SUVOROV, Danilo, GOLOBIČ, Amalija. Polymorphism of LaTaTiO<sub>6</sub>. *Acta Chim. Slov.* [Tiskana izd.], 2012, vol. 59, no. 1, str. 117-123. <http://acta.chem-soc.si/59/59-1-117.pdf>. [COBISS.SI-ID 35849221]
- AK3. PEVEC, Andrej, DEMŠAR, Alojz, PINKAS, Jiri, NECAS, Marek. Synthesis of organotitanium(IV) fluoride phosphates and the crystal structure of [(C<sub>2</sub>Me<sub>4</sub>Et)TiF(μ-F){μ-O<sub>2</sub>P(OSiMe<sub>3</sub>)<sub>2</sub>}]<sub>2</sub>. *Acta Chim. Slov.* [Tiskana izd.], 2012, vol. 59, no. 1, str. 203-206. <http://acta.chem-soc.si/59/59-1-203.pdf>. [COBISS.SI-ID 35851013]
- AK4. ŠAUTA OGOREVC, Jerneja, TRATAR-PIRC, Elizabeta, MATOH, Lev, BUKOVEC, Peter. Antibacterial and photodegradative properties of metal doped TiO<sub>2</sub> thin films under visible light. *Acta Chim. Slov.* [Tiskana izd.], 2012, vol. 59, no. 2, str. 246-272. <http://acta.chem-soc.si/59/59-2-246.pdf>. [COBISS.SI-ID 36027397]

- AK5.** TRATAR-PIRC, Elizabeta, NOVOSEL, Barbara, BUKOVEC, Peter. Comparison of GC and OxiTop analysis of biogas composition produced by anaerobic digestion of glucose in cyanide inhibited systems. *Acta Chim. Slov.* [Tiskana izd.], 2012, vol. 59, no. 2, str. 398-404. <http://acta.chem-soc.si/59/59-2-398.pdf>. [COBISS.SI-ID 36027653]
- AK6.** TRDIN, Miha, BERGANT, Valter, LEBAN, Ivan, LAH, Nina. Two concomitant polymorphs of monomeric nickel acetate with 2-pyridineethanol. *Acta Chim. Slov.* [Tiskana izd.], 2012, vol. 59, no. 3, str. 478-483. <http://acta.chem-soc.si/59/59-3-478.pdf>. [COBISS.SI-ID 36182533]
- AK7.** MODEC, Barbara, KLANČAR, Karmen. Products of the reactions between pyridine and 1,2- or 1,3-phenylenediacetic acid : salts or co-crystals?. *Acta Chim. Slov.* [Tiskana izd.], vol. 59, no. 3, str. 484-489. <http://acta.chem-soc.si/59/59-3-484.pdf>. [COBISS.SI-ID 36183045]
- AK8.** MAZAJ, Matjaž, KAUČIČ, Venčeslav, GOLOBIČ, Amalija, ZABUKOVEC LOGAR, Nataša. A new layered Ca-succinate coordination polymer. *Acta Crystallogr., C Cryst. Struct. Commun.*, 2012, vol. 68, part 1, m4-m6. <http://journals.iucr.org/c/issues/2012/01/00/issconts.html>, doi: 10.1107/S0108270111051559. [COBISS.SI-ID 4875034]
- AK9.** PERDIH, Franc. (Pentane-2,4-dionato- $\kappa^2$ O,O')(pyridin-2-amine- $\kappa$ N<sup>1</sup>copper(II) and (pentane-2, 4-dionato- $\kappa^2$ O,O')(pyrimidin-2-amine- $\kappa$ N<sup>1</sup>)copper(II). *Acta Crystallogr., C Cryst. Struct. Commun.*, 2012, vol. C68, no. 3, str. m64-m68, doi: 10.1107/S0108270112004386. [COBISS.SI-ID 35792133]
- AK10.** TRDIN, Miha, LAH, Nina. A new polymorphic form of bis(acetato- $\kappa$  O)bis[2-(pyridin-2-yl)ethanol- $\kappa^2$ N,O]nickel(II). *Acta Crystallogr., C Cryst. Struct. Commun.*, 2012, vol. C68, no. 12, str. m359-m362, doi: 10.1107/S0108270112046422. [COBISS.SI-ID 36348165]
- AK11.** TARWAL, N. L., SHINDE, P. S., OH, Y. W., CERC KOROŠEC, Romana, PATIL, P. S. Nickel-induced microwheel-like surface morphological evolution of ZnO thin films by spray pyrolysis. *Appl. Phys., A, Mater. Sci. Process. (Print)*, 2012, vol. 109, no. 3, str. 591-599, doi: 10.1007/s00339-012-7071-7. [COBISS.SI-ID 36306693]
- AK12.** TRDIN, Miha, BENEDIK, Ljudmila, SAMARDŽIJA, Zoran, PIHLAR, Boris. Investigation of factors affecting the quality of americium electroplating. *Appl. Radiat. Isotopes*. [Print ed.], 2012, iss. 9, vol. 70, str. 2002-2005. [COBISS.SI-ID 26037031]
- AK13.** GROŠELJ, Uroš, GOLOBIČ, Amalija, STARE, Katarina, SVETE, Jurij, STANOVNIK, Branko. Synthesis and structural elucidation of novel camphor-derived thioureas. *Chirality (N. Y. N. Y.)*, 2012, vol. 24, no. 4, str. 307-317, doi: 10.1002/chir.21999. [COBISS.SI-ID 35831045]
- AK14.** GROŠELJ, Uroš, SEVŠEK, Alen, RIČKO, Sebastijan, GOLOBIČ, Amalija, SVETE, Jurij, STANOVNIK, Branko. Synthesis and structural characterization of novel camphor-derived amines. *Chirality (N. Y. N. Y.)*, 2012, vol. 24, no. 10, str. 778-788, doi: 10.1002/chir.22069. [COBISS.SI-ID 36227077]
- AK15.** DJERDJ, Igor, ŠKAPIN, Srečo D., ČEH, Miran, JAGLIČIČ, Zvonko, PAJIČ, Damir, KOZLEVČAR, Bojan, OREL, Bojan, CRNJAK OREL, Zorica. Interplay between the structural and magnetic probes in the elucidation of the structure of a novel 2D layered [V<sub>4</sub>O<sub>4</sub>(OH)<sub>2</sub>(O<sub>2</sub>C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>CO<sub>2</sub>)<sub>4</sub>]DMF. *Dalton Trans. (2003. Print)*, 2012, vol. 41, issue 2, str. 581-589. <http://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2011/dt/c1dt10985e>, doi: 10.1039/C1DT10985E. [COBISS.SI-ID 4817434]
- AK16.** RILAK, Ana, BRATSOS, Ioannis, ZANGRANDO, Ennio, KLJUN, Jakob, TUREL, Iztok, BUGARČIČ, Živadin D., ALESSIO, Enzo. Factors that influence the antiproliferative activity of half sandwich Ru<sup>II</sup>-[9]aneS3 coordination compounds : activation kinetics and interaction with guanine derivatives. *Dalton Trans. (2003. Print)*, 2012, vol. 41, no. 38, str. 11608-11618, doi: 10.1039/C2DT31225E. [COBISS.SI-ID 36106757]
- AK17.** TSILIOU, S., KEFALA, Lida, PERDIH, Franc, TUREL, Iztok, KESSISSOGLU, Dimitris P., PSOMAS, George. Cobalt(II) complexes with non-steroidal anti-inflammatory drug tolfenamic acid : structure and biological evaluation. *Eur. J. Med. Chem.* [Print ed.], 2012, vol. 48, no. 1, str. 132-142, doi: 10.1016/j.ejmech.2011.12.004. [COBISS.SI-ID 35714309]
- AK18.** ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, KALČIKOVÁ, Gabriela, ZUPANČIČ, Marija, ZAGORC-KONČAN, Jana. Determination of impact of landfill leachate to nitrification. *Fresenius Environ. Bull.* [Print ed.], 2012, vol. 21, no. 8c, str. 2447-2452. [COBISS.SI-ID 36171269]
- AK19.** ŠPORAR, Jože, BEZENŠEK, Jure, URŠIČ, Uroš, GOLOBIČ, Amalija, SVETE, Jurij, STANOVNIK, Branko. Enamino esters in the synthesis of heterocyclic systems. Transformation of dimethyl acetone-1,3-dicarboxylate into polysubstituted 1,6-naphthyridine-8-carboxylates. *Heterocycles*, 2012, vol. 84, no. 1, str. 449-459, doi: 10.3987/COM-11-S(P)4. [COBISS.SI-ID 35625733]
- AK20.** DATTA, Amitabha, CLEGG, Jack K., HUANG, Jui-Hsien, PEVEC, Andrej, GARRIBBA, Eugenio, FONDO, Matilde. Hydroxo-bridged 1-D coordination polymer of Cu(II) incorporating with salicylaldimine precursor : spectral and temperature dependent magneto structural correlation. *Inorg. Chem. Commun.* [Print ed.], 2012, vol. 24, no. 1, str. 216-220, doi: 10.1016/j.inoche.2012.07.017. [COBISS.SI-ID 36221189]
- AK21.** KOZLEVČAR, Bojan, KITANOVSKI, Nives, JAGLIČIČ, Zvonko, BANDEIRA, Nuno A. G., ROBERT, Vincent, LE GUENNIC, Boris, GAMEZ, Patrick. Cis-trans isomeric and polymorphic effects on the magnetic properties of water-bridged copper coordination chains. *Inorg. Chem.*, 2012, vol. 51, no. 5, str. 3094-3102, doi: 10.1021/ic202568y. [COBISS.SI-ID 35802373]
- AK22.** 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.], 2012, vol. 383, str. 98-104, doi: 10.1016/j.ica.2011.10.056. [COBISS.SI-ID 15502614]
- AK23.** ROY, Sudeshna, MAHESWARI, Palanisamy Uma, GOLOBIČ, Amalija, KOZLEVČAR, Bojan, REEDIJK, Jan. Synthesis, crystal structure and biological studies of the highly anticancer active compound trans-dichloridobis(4-methyl-2-N-(2-pyridylmethylene)-aminophenol)ruthenium(II). *Inorg. Chim. Acta*. [Print ed.], vol. 393, no. 1, str. 239-245, doi: 10.1016/j.ica.2012.07.023. [COBISS.SI-ID 36111365]
- AK24.** VERDEL, Nada, JERMAN, Igor, KRAŠOVEC, Rok, BUKOVEC, Peter, ZUPANČIČ, Marija. Possible time-dependent effect of ions and hydrophilic surfaces on the electrical conductivity of aqueous solutions. *Int. J. Mol. Sci. (Print)*, 2012, vol. 13, no. 4, str. 4048-4068, doi: 10.3390/ijms13044048. [COBISS.SI-ID 35901957]
- AK25.** TRATAR-PIRC, Elizabeta, ZIDAR, Jernej, BUKOVEC, Peter. A computational study of calcium(II) and copper(II) ion binding to the hyaluronate molecule. *Int. J. Mol. Sci. (Print)*, 2012, vol. 13, no. 9, str. 12036-12045, doi: 10.3390/ijms130912036. [COBISS.SI-ID 36212485]
- AK26.** KRANJC, Krištof, JURANOVIČ, Amadej, KOČEVAR, Marijan, PERDIH, Franc. Synthesis and crystal structures of methyl 3-(benzoylamino)-6-methyl-2-oxo-2H-pyran-5-carboxylate and N-[5-(3,4-dimethoxyphenyl)-6-methyl-2-oxo-2H-pyran-3-yl] benzamide. *J. Chem. Crystallogr.*, 2012, vol. 42, no. 5, str. 443-449, doi: 10.1007/s10870-011-0266-5. [COBISS.SI-ID 35686405]
- AK27.** KALČIKOVÁ, Gabriela, ZAGORC-KONČAN, Jana, ZUPANČIČ, Marija, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Variation of landfill leachate phytotoxicity due to landfill ageing. *J. Chem. Technol. Biotechnol. (1986)*. [Print ed.], 2012, vol. 87, no. 9, str. 1349-1353. <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/jctb.3776/pdf>. [COBISS.SI-ID 35850757]



- AK28.** PERDIH, Franc. Diversity of supramolecular aggregation in copper(II) pentane-2,4-dionato compounds with methyl substituted 2-aminopyridines. *J. Coord. Chem.*, 2012, vol. 65, no. 9, str. 1850-1591, doi: 10.1080/00958972.2012.676168. [COBISS.SI-ID 35882501]
- AK29.** ZUPANČIČ, Marija, LAVRIČ, Simona, BUKOVEC, Peter. Metal immobilization and phosphorus leaching after stabilization of pyrite ash contaminated soil by phosphate amendments. *J. Environ. Monit. (Print)*, 2012, vol. 14, no. 2, str. 704-710, doi: 10.1039/c2em10798h. [COBISS.SI-ID 35657733]
- AK30.** CHALKIDOU, Evropi, PERDIH, Franc, TUREL, Iztok, KESSISSOGLU, Dimitris P., PSOMAS, George. Copper(II) complexes with antimicrobial drug flumequine : structure and biological evaluation. *J. Inorg. Biochem.* [Print ed.], 2012, vol. 113, no. 1, str. 55-65, doi: 10.1016/j.jinorgbio.2012.03.005. [COBISS.SI-ID 35889925]
- AK31.** ŽIVEC, Petra, PERDIH, Franc, TUREL, Iztok, GIESTER, Gerald, PSOMAS, George. Different types of copper complexes with the quinolone antimicrobial drugs ofloxacin and norfloxacin : structure, DNA- and albumin-binding. *J. Inorg. Biochem.* [Print ed.], 2012, vol. 117, no. 1, str. 35-47, doi: 10.1016/j.jinorgbio.2012.08.008. [COBISS.SI-ID 36168965]
- AK32.** DJERDJ, Igor, POPOVIĆ, Jasminka, STARE, Jernej, AMBROŽIČ, Gabriela, ŠKAPIN, Srečo D., KOZLEVČAR, Bojan, PAJIĆ, Damir, JAGLIČIČ, Zvonko, CRNJAK OREL, Zorica. Nanocrystalline hybrid inorganic-organic one-dimensional chain systems tailored with 2- and 3-phenyl ring monocarboxylic acids. *J. Mater. Chem.* [Print ed.], 2012, vol. 22, no. 20, str. 10255-10265, doi: 10.1039/c2jm16213j. [COBISS.SI-ID 35817477]
- AK33.** MAHESWARI, Palanisamy Uma, ALBADA, Gé van, MODEC, Barbara, KOZLEVČAR, Bojan, REEDIJK, Jan. Synthesis, structure and properties of tetrachlorido[N<sub>2</sub>,N<sub>2</sub>,N<sub>4</sub>,N<sub>4</sub>,N<sub>6</sub>,N<sub>6</sub>-hexakis((pyridin-2-yl)methyl)-1,3,5-triazine-2,4,6-triamine]dicopper(II) bis(acetonitrile), [Cu<sub>2</sub>Cl<sub>4</sub>(L)]·2CH<sub>3</sub>CN. *J. Mol. Struct.* [Print ed.], vol. 1013, no. 1, str. 36-38, doi: 10.1016/j.molstruc.2011.12.046. [COBISS.SI-ID 35742213]
- AK34.** KUŠČER, Danjela, BAKARIČ, Tina, KOZLEVČAR, Bojan, KOSEC, Marija. Interactions between lead-zirconium titanate, polyacrylic acid and polyvinyl butyral in ethanol and their influence on electrophoretic deposition behaviour. *J. Phys. Chem., B Condens. Mater. Surf. Interfaces Biophys.*, [in press] 2012, 10 str., doi: 10.1021/jp305289u. [COBISS.SI-ID 26145319]
- AK35.** JAGLIČIČ, Zvonko, ZENTKOVÁ, Mária, MIHALIK, Marián, ARNOLD, Zdeněk, DROFENIK, Mihael, KRISTL, Matjaž, DOJER, Brina, KASUNIČ, Marta, GOLOBIČ, Amalija, JAGODIČ, Marko. Exchange bias in bulk layered hydroxylammonium fluorocobaltate (NH<sub>3</sub>OH)<sub>2</sub>CoF<sub>4</sub>. *J. Phys., Condens. Matter*, 2012, vol. 24, no. 5, 056002 (7 str.). <http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/24/5/056002>. [COBISS.SI-ID 16218201]
- AK36.** PIRNAT, Klemen, DOMINKO, Robert, CERC KOROŠEC, Romana, MALI, Gregor, GENORIO, Boštjan, GABERŠČEK, Miran. Electrochemically stabilised quinone based electrode composites for Li-ion batteries. *J. Power Sources*. [Print ed.], 2012, vol. 199, str. 308-314, ilustr. [http://www.sciencedirect.com/science?\\_ob=MIAMIImageURL&cid=271367&user=4776866&pii=S0378775311020611&\\_check=y&\\_origin=&\\_coverDate=01-Feb-2012&view=c&wchp=dGLzVIS-zSkzk&md5=cb70b39ce42ce36cd6b7e85b033af24c/1-s2.0-S0378775311020611-main.pdf](http://www.sciencedirect.com/science?_ob=MIAMIImageURL&cid=271367&user=4776866&pii=S0378775311020611&_check=y&_origin=&_coverDate=01-Feb-2012&view=c&wchp=dGLzVIS-zSkzk&md5=cb70b39ce42ce36cd6b7e85b033af24c/1-s2.0-S0378775311020611-main.pdf), doi: 10.1016/j.jpowsour.2011.10.068. [COBISS.SI-ID 4847898]
- AK37.** OBREZA, Aleš, PERDIH, Franc. Crystal structures of 4-(oxiran-2-ylmethoxy) benzoic acid and 4-acetoxybenzoic acid. *J. Struct. Chem.*, 2012, vol. 53, no. 4, str. 793-799, ilustr. <http://www.springerlink.com/content/e74651v78717724u/fulltext.pdf>. [COBISS.SI-ID 3319153]
- AK38.** MAKAROVIČ, Kostja, MEDEN, Anton, HROVAT, Marko, HOLC, Janez, BENČAN, Andreja, DAKSKOBLER, Aleš, KOSEC, Marija. The effect of processing conditions on the properties of LTCC material. *J. Am. Ceram. Soc.*, 2012, vol. 95, issue 2, str. 760-767, doi: 10.1111/j.1551-2916.2011.05027.x. [COBISS.SI-ID 25443367]
- AK39.** SKALAR, Tina, MAČEK, Jadran, GOLOBIČ, Amalija. A new simple synthesis and characterization of Sm-doped ceria and its homogeneous precursor [Ce<sub>(0.80)</sub>Sm<sub>(0.20)</sub>(Ac)<sub>3</sub>(Gly)]<sub>n</sub>. *J. Eur. Ceram. Soc.* [Print ed.], 2012, vol. 32, no. 10, str. 2333-2339, doi: 10.1016/j.jeurceramsoc.2012.02.008. [COBISS.SI-ID 35887365]
- AK40.** ČELAN KOROŠIN, Nataša, FRANCETIČ, Vojmir, BUKOVEC, Nataša. Thermal and luminescent properties of Eu<sup>2+</sup>-doped aluminates prepared by the sol-gel method. *J. Therm. Anal. Calorim.*, 2013, vol. 111, no. 2, str. 1291-1296, doi: 10.1007/s10973-012-2451-y. [COBISS.SI-ID 35935493]
- AK41.** LIKOZAR, Blaž, CERC KOROŠEC, Romana, POLJANŠEK, Ida, OGORELEC, Primož, BUKOVEC, Peter. Curing kinetics study of melamine-urea-formaldehyde resin. *J. Therm. Anal. Calorim.*, 2012, vol. 109, no. 3, str. 1413-1422, doi: 10.1007/s10973-011-1883-0. [COBISS.SI-ID 35496965]
- AK42.** UMEK, Polona, CERC KOROŠEC, Romana. The impact of K<sup>+</sup> content on the structural transformations and morphological changes during the thermal treatment of α-MnO<sub>2</sub> nanorods. *Mater. Res. Bull.* [Print ed.], 2012, vol. 47, issue 6, 1523-1528, doi: 10.1016/j.materresbull.2012.02.037. [COBISS.SI-ID 25707559]
- AK43.** 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.*, 2012, vol. 143, no. 1, str. 73-78, doi: 10.1007/s00706-011-0578-3. [COBISS.SI-ID 15248918]
- AK44.** DOJER, Brina, GOLOBIČ, Amalija, JAGLIČIČ, Zvonko, KRISTL, Matjaž, DROFENIK, Mihael. Hydroxylammonium fluorometalate : synthesis and characterisation of a new fluorozincate. *Monatsh. Chem.*, 2012, vol. 143, no. 2, str. 175-180, doi: 10.1007/s00706-011-0667-3. [COBISS.SI-ID 15508502]
- AK45.** CER KERČMAR, Ksenija, TRATAR-PIRC, Elizabeta, MODEC, Barbara, BUKOVEC, Peter. Synthesis and characterization of two copper(II) compounds with xanthurenic acid. *Monatsh. Chem.*, 2012, vol. 143, no. 3, str. 413-420, doi: 10.1007/s00706-011-0701-5. [COBISS.SI-ID 35834629]
- AK46.** JURANOVIČ, Amadej, KRANJC, Krištof, POLANC, Slovenko, PERDIH, Franc, KOČEVAR, Marijan. Diels-Alder reaction of fused pyran-2-ones with ethyl vinyl ether. *Monatsh. Chem.*, 2012, vol. 143, no. 5, str. 771-777, doi: 10.1007/s00706-012-0734-4. [COBISS.SI-ID 35818757]
- AK47.** PERDIH, Franc. Different coordination modes and supramolecular aggregations in copper(II) pentane-2,4-dionato compounds with 2-pyridone and 3-hydroxypyridine. *Monatsh. Chem.*, 2012, vol. 143, no. 7, str. 1011-1017, doi: 10.1007/s00706-012-0760-2. [COBISS.SI-ID 35938053]
- AK48.** TRATAR-PIRC, Elizabeta, CER KERČMAR, Ksenija, MODEC, Barbara, BUKOVEC, Peter. Supramolecular framework of a dinuclear cadmium complex with a dianion of xanthurenic acid [Cd<sub>2</sub>(Xan)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub>]. *Monatsh. Chem.*, 2012, vol. 143, no. 12, str. 1643-1648, doi: 10.1007/s00706-012-0855-9. [COBISS.SI-ID 36356869]
- AK49.** HUDEJ, Rosana, KLJUN, Jakob, KANDIOLLER, Wolfgang, REPNIK, Urška, TURK, Boris, HARTINGER, Christian G., KEPPLER, Bernhard K., MIKLAVČIČ, Damijan, TUREL, Iztok. Synthesis and biological evaluation of the thionated antibacterial agent nalidixic acid and its organoruthenium(II) complex. *Organometallics*, 2012, vol. 31, issue 16, str. 5867-5874. <http://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/om300424w>, doi: 10.1021/om300424w. [COBISS.SI-ID 36100357]

- AK50.** DATTA, Amitabha, LIU, Pei-Hsin, HUANG, Jui-Hsien, GARRIBA, Eugenio, TURNBULL, Mark, MACHURA, Barbara, HSU, Chin-Lin, CHANG, Wei-Tang, PEVEC, Andrej. End-to-end thiocyanato-bridged zig-zag polymers of Cu<sup>II</sup>, Co<sup>II</sup> and Ni<sup>II</sup> with a hydrazone ligand : EPR, magnetic susceptibility and biological study. *Polyhedron*. [Print ed.], 2012, vol. 44, no. 1, str. 77-87, doi: 10.1016/j.poly.2012.06.027. [COBISS.SI-ID 36127237]
- AK51.** PETRIČ, Andrej, JOHNSON, Scott A., PHAM, Hung V., LI, Ying, ČEH, Simon, GOLOBIČ, Amalija, AGDEPPA, Eric D., TIMBOL, Gerald, LIU, Jie, KEUM, Gyochang, SATYAMURTHY, Nagichettiar, KEPE, Vladimir, HOUK, Kendall N., BARRIO, Jorge R. Dicyanovinyl naphthalenes for neuroimaging of amyloids and relationships of electronic structures and geometries to binding affinities. *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.*, 2012, vol. 109, no. 41, str. 16492-16497, doi: 10.1073/pnas.1214134109. [COBISS.SI-ID 36232965]
- AK52.** LV, Jun, LIU, Qiancai, TANG, Jie, PERDIH, Franc, KRANJC, Krištof. A facile synthesis of indolo[3,2,1-jk]carbazoles via palladium-catalyzed intramolecular cyclization. *Tetrahedron Lett.* [Print ed.], 2012, vol. 53, no. 39, str. 5248-5252, doi: 10.1016/j.tetlet.2012.07.093. [COBISS.SI-ID 36145413]
- AK53.** BEZENŠEK, Jure, GROŠELJ, Uroš, STARE, Katarina, SVETE, Jurij, STANOVNIK, Branko. Transformations of enamines. A simple one-pot synthesis of imidazolone derivatives. *Tetrahedron*. [Print ed.], 2012, vol. 68, no. 2, str. 516-522, doi: 10.1016/j.tet.2011.11.013. [COBISS.SI-ID 35586309]
- AK54.** BEZENŠEK, Jure, PREK, Benjamin, GROŠELJ, Uroš, KASUNIČ, Marta, SVETE, Jurij, STANOVNIK, Branko. A simple metal-free synthesis of 2-substituted pyridine-4,5-dicarboxylates and their N-oxides. *Tetrahedron*. [Print ed.], 2012, vol. 68, no. 24, str. 4719-4731, doi: 10.1016/j.tet.2012.04.013. [COBISS.SI-ID 35958277]
- AK55.** ČELAN KOROŠIN, Nataša, MEDEN, Anton, BUKOVEC, Nataša. Structural and luminescent properties of Eu<sup>2+</sup>-doped aluminates prepared by the sol-gel method. *Acta Chim. Slov.* [Tiskana izd.], 2012, vol. 59, no. 4, str. 912-919. <http://acta.chem-soc.si/59/59-4-912.pdf>. [COBISS.SI-ID 36479749]
- AK56.** DOJER, Brina, KRISTL, Matjaž, JAGLIČIČ, Zvonko, GOLOBIČ, Amalija, KASUNIČ, Marta, DROFENIK, Mihael. Synthesis, crystal structure and magnetic properties of a new hydroxylammonium fluoroferrate. *Acta Chim. Slov.* [Tiskana izd.], 2012, vol. 59, no. 4, str. 789-794. <http://acta.chem-soc.si/59/59-4-789.pdf>. [COBISS.SI-ID 36480005]

## KRATKI ZNANSTVENI PRISPEVEK / SHORT SCIENTIFIC ARTICLE

- AK57.** VIDMAR, Maja, KOBAL, Tatjana, KOZLEVČAR, Bojan, ŠEGEDIN, Primož, GOLOBIČ, Amalija. Dichloridotetrakis(1H-1,2,4-triazole- $\kappa^4$ copper(II)). *Acta Crystallogr., E*, 2012, vol. E68, no. 4, str. m375-m376 (5 str. suppl.), doi: 10.1107/S160053681200894X. [COBISS.SI-ID 35887877]
- AK58.** LAPANJE, Katja, LEBAN, Ivan, LAH, Nina. Bis(acetato- $\kappa$ O)bis[2-(pyridin-2-yl)ethanol- $\kappa^2$ N,O]copper(II). *Acta Crystallogr., E*, 2012, vol. E68, no. 5, str. m599 (5 str. suppl.), doi: 10.1107/S1600536812015747. [COBISS.SI-ID 36245509]
- AK59.** PERDIH, Franc. Tris(2-acetylcyclopentan-1-onato- $\kappa^2$ O,O')aluminium. *Acta Crystallogr., E*, 2012, vol. E68, no. 6, str. m781 (9 str. suppl.), doi: 10.1107/S1600536812021848. [COBISS.SI-ID 35996677]
- AK60.** PERDIH, Franc. Tris(3-chloropentane-2,4-dionato- $\kappa^2$ O,O')aluminium. *Acta Crystallogr., E*, 2012, vol. E68, no. 6, str. m806 (6 str. suppl.), doi: 10.1107/S1600536812023203. [COBISS.SI-ID 35996933]
- AK61.** PERDIH, Franc. Tris(3-chloropentane-2,4-dionato- $\kappa^2$ O,O')iron(III). *Acta Crystallogr., E*, 2012, vol. E68, no. 6, str. m807 (6 str. suppl.), doi: 10.1107/S1600536812023215. [COBISS.SI-ID 35997189]
- AK62.** PERDIH, Franc. 4-Carbamoylpyridin-1-ium 2,2,2-trichloroacetate. *Acta Crystallogr., E*, 2012, vol. E68, no. 9, str. o2733 (7 str. suppl.), doi: 10.1107/S1600536812035507. [COBISS.SI-ID 36144901]
- AK63.** PERDIH, Franc. 4-Carbamoylpyridin-1-ium 2,2,2-trichloroacetate-isonicotinamide (1/1). *Acta Crystallogr., E*, 2012, vol. E68, no. 9, str. o2818 (8 str. suppl.), doi: 10.1107/S1600536812037002. [COBISS.SI-ID 36168709]
- AK64.** KAFKA, Stanislav, PEVEC, Andrej, PROISL, Karel, KIMMEL, Roman, KOŠMRLJ, Janez. 3-Ethyl-4-hydroxy-8-methoxyquinolin-2(1H)-one. *Acta Crystallogr., E*, 2012, vol. E68, no. 11, str. o3198 (6 str. suppl.), doi: 10.1107/S1600536812043279. [COBISS.SI-ID 36281605]
- AK65.** KAFKA, Stanislav, PEVEC, Andrej, PROISL, Karel, KIMMEL, Roman, KOŠMRLJ, Janez. 3-Ethyl-3-hydroxy-8-methoxyquinoline-2,4(1H,3H)-dione monohydrate. *Acta Crystallogr., E*, 2012, vol. E68, no. 11, str. o3199-o3200 (7 str. suppl.), doi: 10.1107/S1600536812043280. [COBISS.SI-ID 36282117]

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

- AK66.** TRATAR-PIRC, Elizabeta. Plastics - the material for the 21th century = Plastika -material 21. stoletja : plenarna predstavitev. V: OREL, Mojca (ur.). Sodobni pristopi poučevanja prihajajočih generacij. [Polhov Gradec]: Eduvision, 2012, str. 421-429. [COBISS.SI-ID 36499973]

## OBJAVLJENI ZNANSTVENI PRISPEVEK NA KONFERENCI / PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTION

- AK67.** ZUPANČIČ, Marija, BUKOVEC, Peter. A holistic approach to phosphate stabilization treatment of metal contaminated soil : [lecture]. V: 16th International Conference on Heavy Metals in the Environment, 23-27 September, 2012, Rome, Italy. *ICHMET 2012*. [S. l.: s. n.], 2012, str. [1-4]. [COBISS.SI-ID 36247301]
- AK68.** CERC KOROŠEC, Romana, REP, Gregor, POHLEVEN, Franc, BUKOVEC, Peter. Thermogravimetric analysis as a tool for determining the thermal modification degree of beech wood. V: JONES, Dennis (ur.), MILITZ, Holger (ur.), PETRIČ, Marko (ur.), POHLEVEN, Franc (ur.), HUMAR, Miha (ur.), PAVLIČ, Matjaž (ur.). *Proceedings*. Ljubljana: Biotechnical Faculty, Department of Wood Science and Technology, 2012, str. 208-211. [COBISS.SI-ID 2040969]
- AK69.** MAKAROVIČ, Kostja, MEDEN, Anton, HROVAT, Marko, HOLC, Janez, BENČAN, Andreja, DAKSKOBLER, Aleš, KOSEK, Marija. The effect of phase composition on the mechanical and thermal properties of LTCC material. V: IMAPS/ACerS, 8th International Conference and Exhibition on Ceramic Interconnect and Ceramic Microsystems Technologies (CICMT 2012), April 16-19, 2012, Erfurt, Germany. *Proceedings*. [S. l.]: International Microelectronics and Packaging Society, 2012, str. 492-497. [COBISS.SI-ID 25795367]
- AK70.** SERŠEN, Sara, KLJUN, Jakob, ŠTEFANE, Bogdan, POŽGAN, Franc, TUREL, Iztok. Nove rutenijeve(II) organokovinske spojine s fluoriranimi  $\beta$ -diketonati = Novel ruthenium(II) organometallic compounds with fluorinated  $\beta$ -diketonates : [predavanje].

- V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. [1-5]. [COBISS.SI-ID 36196613]
- AK71.** MATOH, Lev, KOZJEK-ŠKOFIC, Irena, BUKOVEC, Peter. Priprava dopiranih nano plasti foto-katalitsko aktivnega cinkovega oksida. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. [1-6]. [COBISS.SI-ID 36201477]
- AK72.** TRATAR-PIRC, Elizabeta. Protimikrobno delovanje srebrovih - hialuronatnih filmov in suspenzij : [predavanje]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. [1-6]. [COBISS.SI-ID 36196101]
- AK73.** KOZJEK-ŠKOFIC, Irena. Vpliv temperature priprave na delovanje platinskega katalizatorja : [predavanje]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. [1-6]. [COBISS.SI-ID 36201221]
- AK74.** KOLEŠA, Tanja, MEDEN, Anton, PERDIH, Franc. Cinkove in vanadijeve koordinacijske spojine, možni mimetiki inzulina = Zinc and vanadium complexes, possible insulin mimetics. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. [1-7]. [COBISS.SI-ID 36201989]
- AK75.** CER KERČMAR, Ksenija, TRATAR-PIRC, Elizabeta, MODEC, Barbara, BUKOVEC, Peter. Priprava in kristalna struktura nikljevega(II) ksanturenata. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. [1-7]. [COBISS.SI-ID 36199429]
- AK76.** KLJUN, Jakob, TUREL, Iztok. Rutenijevi kompleksi s kinoloni: študija vpliva spremembe koordinacijskega mesta liganda na fizikalno-kemijske in biološke lastnosti spojine = Ruthenium complexes with quinolone ligands: a study on the effects of the derivatization of the ligand binding site on the physico-chemical and biological properties of a compound : [predavanje]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. [1-7]. [COBISS.SI-ID 36196869]
- AK77.** ČELAN KOROŠIN, Nataša, BUKOVEC, Nataša. Obstojna luminescenca pri zemeljskoalkalijskih aluminatih dopiranimi z  $\text{Eu}^{2+}$  in  $\text{Nd}^{3+}$  ioni : [predavanje]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. [1-8]. [COBISS.SI-ID 36202757]
- AK78.** ZUPANČIČ, Marija, DUH, Zvone, BUKOVEC, Peter. Vpliv kemijske stabilizacije na mobilnost in rastlinski privzem potencialno toksičnih elementov : [predavanje]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. [1-8]. [COBISS.SI-ID 36206341]
- AK79.** DOJER, Brina, PEVEC, Andrej, JAGLIČIČ, Zvonko, KRISTL, Matjaž, DROFENIK, Mihael, Nikljevi(II) kompleksi s piridinkarboxamidnimi ligandi = Nickel(II) complexes with pyridinecarboxamide ligands. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. [1-9]. [COBISS.SI-ID 36203013]
- AK80.** LONCNR, Mojca, KOBAL, Lara, ZUPANČIČ, Marija, BUKOVEC, Peter. Vpliv pH na izluževalne karakteristike jeklarske žindre. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. 1-12. [COBISS.SI-ID 36209157]
- AK81.** TRATAR-PIRC, Elizabeta. Degradation of Plasmocorin B at anaerobic conditions : [lecture]. V: BODÍK, Igor (ur.), SEDLÁČEK, Stanislav (ur.), HUTŇAN, Miroslav (ur.). *Zborník prednášok 7. bienálnej konferencie s medzinárodnou účasťou odpadové vody 2012 : Štrbské Pleso, 17-19. október 2012*. Bratislava: Asociácia čistiarenských expertov Slovenskej republiky, cop. 2012, str. 268-273. [COBISS.SI-ID 36294661]
- AK82.** MAKAROVIČ, Kostja, MEDEN, Anton, HROVAT, Marko, HOLC, Janez, BENČAN, Andreja, DAKSKOBLER, Aleš, BELAVIČ, Darko, KOSEC, Marija. The effect of the firing temperature on the properties of LTCC. V: PETELIN, Dejan (ur.), TAVČAR, Aleš (ur.), KALUŽA, Boštjan (ur.). 4. študentska konferenca Mednarodne podiplomske šole Jožefa Stefana = 4th Jožef Stefan International Postgraduate School Students Conference, 25. maj 2012, Ljubljana, Slovenija. *Zbornik*. Ljubljana: Mednarodna podiplomska šola Jožefa Stefana, 2012, str. 261-267. [COBISS.SI-ID 26258983]

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

- AK83.** PERDIH, Franc. Structural aspects of organotitanium fluorides: [plenary lecture]. V: LAH, Nina (ur.), TRDIN, Miha (ur.), LEBAN, Ivan (ur.). Twenty-first Slovenian-Croatian Crystallographic Meeting, 14 - 17 June, 2012, Pokljuka, Šport Hotel Pokljuka, Slovenia. *Book of abstracts [and] programme*. Ljubljana: Faculty of Chemistry and Chem. Techn., 2012, str. 22. [COBISS.SI-ID 36055301]

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

- AK84.** DEVETAK, Iztok, PERDIH, Franc. *Kemija 1 : učbenik za kemijo v 1. letniku gimnazij*. 1. izd. Ljubljana: Mladinska knjiga, 2012. 155 str., ilustr. ISBN 978-961-01-2134-3. [COBISS.SI-ID 262091520]

## DRUGO UČNO GRADIVO / OTHER EDUCATIONAL MATERIAL

- AK85.** MODEC, Barbara. *Zbirka poskusov iz anorganske kemije za študente Pedagoške fakultete*. 1. izd. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2012. 88 str., ilustr. ISBN 978-961-6756-14-3. [COBISS.SI-ID 259694336]

## PATENTNA PRIJAVA / PATENT APPLICATION

- AK86.** MATOH, Lev, KOZJEK-ŠKOFIC, Irena, BUKOVEC, Nataša, BUKOVEC, Peter. *Postopek priprave tanke plasti Pt katalizatorja pri nizkih temperaturah : patentna prijava št. P-201200188*. Ljubljana: Urad Republike Slovenije za intelektualno lastnino, 7. 6. 2012. 20 str., ilustr. [COBISS.SI-ID 36029189]

### **PATENT / PATENT**

**AK87.** TUREL, Iztok, KLJUN, Jakob, ŠTEFANE, Bogdan. *Postopek za pripravo racemnega nikotina : patent : SI 23573 (A), 2012-06-29.* Ljubljana: Urad Republike Slovenije za intelektualno lastnino, 2012. 7 str. [COBISS.SI-ID 34764549]

### **PREDAVANJE NA TUJI UNIVERZI / INVITED LECTURE AT FOREIGN UNIVERSITY**

**AK88.** PERDIH, Franc. [*Organometallic fluorides : East China Normal University, Shanghai, China, May 24th, 2012*]. [2012]. [COBISS.SI-ID 35998213]

### **VABLJENO PREDAVANJE NA KONFERENCI BREZ NATISA / UNPUBLISHED INVITED CONFERENCE LECTURE**

**AK89.** TUREL, Iztok. *Mednarodno leto kemije in filatelija : Zaključni dogodek proslavljanja mednarodnega leta kemije v Sloveniji, Maribor, 26. januar 2012.* Maribor, 2012. [COBISS.SI-ID 35732229]

### **UREDNIK / EDITORSHIP**

**AK90.** Twenty-first Slovenian-Croatian Crystallographic Meeting, 14 - 17 June, 2012, Pokljuka, Šport Hotel Pokljuka, Slovenia, LAH, Nina (ur.), TRDIN, Miha (ur.), LEBAN, Ivan (ur.). *Book of abstracts [and] programme.* Ljubljana: Faculty of Chemistry and Chem. Techn., 2012. 73 str., 12 str. pril., ilustr. [COBISS.SI-ID 36055045]

---

## KATEDRA ZA BIOKEMIJO CHAIR OF BIOCHEMISTRY

### PREDSTOJNICA KATEDRE / HEAD

red. prof. dr. Brigita Lenarčič

### SODELAVCI KATEDRE / PERSONNEL

#### Visokošolski učitelji / *Faculty*

izr. prof. dr. Marko Dolinar

doc. dr. Gregor Gunčar

red. prof. dr. Brigita Lenarčič

v dopolnilnem razmerju / *part-time*

red. prof. dr. Vladka Čurin Šerbec (do 30. 9. 2012)

izr. prof. dr. Kristina Djinović Carugo

red. prof. dr. Roman Jerala

red. prof. dr. Igor Križaj

red. prof. dr. Tamara Lah Turnšek

red. prof. dr. Janez Plavec

red. prof. ddr. Boris Turk

#### Visokošolski sodelavci / *Assistants*

dr. Nejc Jelen

Marina Klemenčič, univ. dipl. biokem.

Matevž Korenč, univ. dipl. biokem.

dr. Marko Novinec

dr. Miha Pavšič

dr. Vera Župunski

#### Raziskovalke / *Researchers*

dr. Maruška Budič (do 13. 6. 2012)

dr. Helena Sabina Čelešnik (od 1. 12. 2012)

dr. Nika Lovšin (do 24. 5. 2012)

#### Strokovna sodelavka / *Research Assistant*

dr. Petra Prijatelj Žnidaršič

#### Tehnika / *Technicians*

Matjaž Malavašič

Mateja Presečnik, univ. dipl. inž. živ. tehnol.

Mladi raziskovalci <i>Young Researchers</i>	Mentor <i>Mentor</i>	Čas usposabljanja <i>Programme Duration</i>	Oblika usposabljanja <i>Degree</i>
Nataša Lindič	N. Lovšin	2009–2013	doktorski študij / <i>PhD</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>
Tilen Vidmar	B. Lenarčič	2010–2014	doktorski študij / <i>PhD</i>
Vid Puž	K. Djinović Carugo	2012–2016	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 1<sup>st</sup> Cycle Study Programmes*

Kemija / *Chemistry* – UN:

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

Biološka 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

Biokemija raka / *Cancer Biochemistry* – UN

Encimi / *Enzymes* – UN

Biokemija II / *Biochemistry II* - UN

##### Bolonjski programi 2. stopnje / *Bologna 2<sup>nd</sup> Cycle Study Programmes*

Biokemija / *Biochemistry* – UN:

Tehnologija DNA / *DNA Technology*

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

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

##### Bolonjski programi 3. stopnje / *Bologna 3<sup>rd</sup> 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 1<sup>st</sup> Cycle Study Programmes*

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

Bolonjski programi 3. stopnje / *Bologna 3<sup>rd</sup> 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 je potekalo na sedmih raziskovalnih projektih ter v okviru treh raziskovalnih programov: Toksini in biomembrane, Proteoliza in njena regulacija ter Strukturna biologija. Pri vseh treh večina raziskav sicer poteka na odsekih Instituta »Jožef Stefan«.

S strukturno karakterizacijo transmembranskega proteina EpCAM (epitelijska celična adhezijska molekula) in sorodne molekule Trop-2 želimo podrobneje razložiti delovanje obeh molekul pri medceličnih povezavah in signaliziranju. Za celovit vpogled v strukturo posameznih delov molekul združujemo rezultate, dobljene z rentgensko kristalografijo, jedrsko magnetno resonanco in računalniškimi simulacijami molekulske dinamike. Obe molekuli sta zaradi povišanega izražanja na karcinomskih celicah zanimivi tudi z diagnostičnega in terapevtskega vidika. Na tem področju sodelujemo z raziskovalno skupino prof. Plückthuna iz Švice, ki je razvila proteine DARPine, usmerjene proti EpCAM. Zanima nas, katere dele površine molekule EpCAM prepoznajo in kako bi lahko dosegli še boljši terapevtski učinek.

Preučujemo delovanje človeškega zunajceličnega kalcij-vezavnega proteina SMOC-1. Pripravili smo posamezne rekombinantne domene kot tudi celoten rekombinantni protein z namenom pridobitve funkcionalnih in strukturnih podatkov za določitev njegove vloge v zunajceličnem matriksu. Ugotovili smo, da sta procesa pritrjevanja in širjenja epitelijskih celic na imobiliziranem proteinu SMOC-1 uravnavana preko vezave proteina na zunajcelične heparansulfatne proteoglikane.

V tem letu smo nadaljevali z raziskovanjem strukturnih in funkcionalnih lastnosti ne-mišičnega proteina  $\alpha$ -aktinina 1. Poleg tega smo začeli z raziskovanjem interakcij med  $\alpha$ -aktininom 2, miotilinom in filaminom C, ki so proteini Z-diska. Določiti želimo tridimenzionalno zgradbo  $\alpha$ -aktinina 1 in opisati konformacijske spremembe, ki so posledica vezave kalcijevih ionov ter podrobneje opisati interakcije C-terminalnega dela miotilina v kompleksu z izbranimi strukturnimi partnerji.

V lanskem letu smo nadaljevali raziskave mehanizma interakcij med cisteinsko peptidazo katepsinom K in kolagenom, s čimer bomo pojasnili mehanizem delovanja te peptidaze v procesih preoblikovanja kosti ter nastanka osteoporoze. Identificirali smo protein klasterin kot nov zunajcelični šaperon katepsina K in nadaljevali delo na področju načrtovanja novih inhibitorjev katepsina K, ki bodo uporabni za uravnavanje njegove aktivnosti.

Pred dobrim letom dni so v človeškem genu C9orf72 odkrili novo mutacijo pri amiotrofični lateralni sklerozi in frontotemporalni demenci. Pri bolnikih se heksanukleotid GGGGCC v prvem intronu gena pojavi v več kot 1000 ponovitvah, pri zdravem človeku pa do 22-krat. Restriksijska analiza je pokazala, da zaporedje ni enotno, zato želimo določiti njegovo celotno zaporedje. Hkrati ugotavljamo interakcijske partnerje ponovitev GGGGCC v človeških celicah.

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

Ukvarjamo se tudi s proteini APOBEC, celičnimi citidin deaminazami, ki preprečujejo razmnoževanje številnih eksogenih in endogenih retrovirusov ter retrotranspozonov. Mehanizem inhibicije retrotranspozonov s proteini APOBEC želimo razjasniti s študijami na celičnih kulturah, živalskih modelih, in z analizami genomov. Naši najnovejši rezultati kažejo, da retrotranspozicijo inhibirajo različni vretenčarski proteini APOBEC ter da je mehanizem retrotranspozicije evolucijsko ohranjen.

Začeli smo izvajati poskuse na cianobakterijah, ki jih želimo uporabljati v biotehnoloških procesih. Predvsem nas zanimajo intrinzični sistemi toksin – antitoksin in njihova uporabnost za povečano biološko varnost.

Pojasniti želimo vlogo in delovanje nekaterih proteinov, ki se izražajo v makrofagih in modulirajo imunski odziv. Pripravili smo rekombinantni človeški MLKL protein in vse njegove domene ter posneli NMR spektre N-terminalne domene tega proteina, da bi na osnovi strukture lahko pojasnili njegovo vlogo v nekroptozii.

Razvijamo tudi nanosenzorje na osnovi hipervariabilnih domen kameljih protiteles. Eno od teh domen smo izrazili v bakterijah in dokazali njeno specifično vezavo na tarčni antigen ter pripravili kristale kompleksa med tako domeno in antigenom.

*Chair members were engaged in seven research projects and in three different research programmes (mainly involving Jožef Stefan Institute staff): Toxins and Biomembranes, Proteolysis and its Regulation, and Structural Biology.*

*We are investigating structure-function relationship of transmembrane protein EpCAM (epithelial cell adhesion molecule) and the related molecule Trop-2 which participate in cell-cell contacts and signalling. To get insight into the structure of different parts of both molecules we combined the results obtained by X-ray crystallography and nuclear magnetic resonance with computer simulations of molecular dynamics. In addition, both molecules already serve as diagnostic and therapeutic targets due to their increased expression on the surface of carcinoma cells. In this field we are collaborating with the group of Prof. Plückthun from Switzerland who developed EpCAM-targeting DARPins molecules. Specifically, we are interested in mapping the surface of EpCAM recognized by DARPins and to use this knowledge for developing enhanced therapies.*

*We are studying the function of human extracellular calcium-binding protein SMOC-1 (Secreted MOdular Calcium-binding protein-1). Recombinant full-length protein, as well as its individual domains, have been prepared to obtain structural and functional data for determining its roles in the extracellular matrix. We have identified a heparan sulfate-binding region on SMOC-1 which mediates the adhesion and spreading of epithelial cells on SMOC-1.*

*We continued with investigations of structural and functional properties of  $\alpha$ -actinin 1. We have also started studying interactions between  $\alpha$ -actinin 2, myotilin and filamin C, which are Z-disc proteins of the sarcomere. Our goal is to determine three-dimensional structure of this protein and to elucidate structural changes that result from binding of calcium ions. In addition, we would like to study structural elucidation of the C-terminal portion of myotilin in complex with selected binding partners.*

*In 2012, we continued our research on the interactions between the cysteine peptidase cathepsin K and collagen at the molecular level. The results of this study will explain the roles of this enzyme in the mechanisms of bone resorption and development of osteoporosis. We have also identified the glycoprotein clusterin as an extracellular chaperone for cathepsin K and continued our work on the development of novel regulators of cathepsin K for use in vitro and in vivo.*

---

*Recently, large expansion of GGGGCC repeat has been discovered in the first intron of the C9orf72 gene, causing ALS and FTD. In patients, over 1,000 repeats were shown while normal population carries up to 22 repeats. Restriction analysis of the large expansion has shown that the repeat is not uniform, therefore we would like to determine the sequence of the expansion. Furthermore, we are looking for GGGGCC repeats in interacting partners.*

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

*APOBEC3 proteins are cytidine deaminases, potent host restriction factors acting against various exogenous and endogenous retroviruses including retrotransposons. We are studying the mechanisms of APOBECs inhibition of retrotransposition in mammalian cell models, in vivo, and by genome analyses. Our studies reveal that various mammalian and non-mammalian APOBEC proteins are able to inhibit the pre-integration step of retrotransposition, and that the mechanism of retrotransposition is evolutionary conserved.*

*We started some experiments on cyanobacteria which will be used in biotechnological processes. Our major point of interest are intrinsic toxin – antitoxin systems and their suitability for increased biological safety.*

*Part of our research activities is focused on the proteins that are involved in immune response. In particular, we are interested in human MLKL protein, which we have expressed in bacteria. We have recorded NMR spectra of its structurally unknown N-terminal domain. The structure of this domain might help us to elucidate its biological role in necroptosis.*

*We are also developing nanobiosensors that are based on the hyper-variable domain of cameloid antibodies (nanobody). Target specific nanobody has been expressed in bacteria and the crystals of the nanobody in complex with small molecule antibody have been grown for structural studies.*

## **POMEMBNI DOSEŽKI SODELAVCEV KATEDRE / SIGNIFICANT ACHIEVEMENTS OF THE CHAIR STAFF**

### **NAGRADE, PRIZNANJA / AWARDS, RECOGNITIONS**

R. Jerala je bil vodja ekipe študentov, ki so novembra 2012 dosegli velik uspeh na tekmovanju študentskih ekip iz sintezne biologije iGEM na univerzi MIT v ZDA. Dosegli so drugo mesto v skupni uvrstitvi ter prvo v kategoriji medicina in zdravje. Med člani študentske ekipe je bil tudi študent biokemije Urban Bezeljak. / *R. Jerala was mentor of the student synthetic biology team that participated at the iGEM synthetic biology competition at the MIT in Cambridge, USA in November 2012. The team was second best overall and the best in the Health and Medicine track. Member of the student research team was Urban Bezeljak, our Biochemistry student.*

J. Plavec je bil mentor Maji Marušič in Damjanu Makucu, ki sta prejela Krkini nagradi za svoji raziskovalni nalogi. / *J. Plavec was mentor of Maja Marušič and Damjan Makuc, recipients of Krka Awards for 2012.*

Univerzitetno Prešernovo nagrado za leto 2012 je dobil Jernej Turnšek, sicer študent biotehnologije, za raziskovalno delo s področja sintezne biologije. Mentor nagrajenega dela je bil R. Jerala. Isto delo je bilo nagrajeno tudi s Krkino nagrado. / *Jernej Turnšek received the University Prešeren Award for 2012 for his synthetic biology research under the mentorship of R. Jerala. The same work was endowed with Krka Award as well.*

Prešernovo nagrado FKKT za leto 2012 sta prejela študentka Vesna Švarc za diplomsko delo, opravljeno pod mentorstvom V. Čurin Šerbec in študent San Hadži za diplomsko delo, opravljeno pod mentorstvom R. Jerale. / *Vesna Švarc and San Hadži were the recipients of Faculty Prešeren Awards for 2012 for their BSc theses in the Biochemistry programme, prepared under the mentorship of V. Čurin Šerbec and R. Jerale, respectively.*

## 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*
- CO<sub>2</sub> inkubator / *CO<sub>2</sub> 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 °C / *Two freezers -80 °C*
- Sistem za čisto vodo Milli-Q / *Ultrapure water system Milli-Q*

## **RAZISKOVALNI PROGRAMI IN PROJEKTI / RESEARCH PROGRAMMES AND PROJECTS**

### **RAZISKOVALNI PROGRAMI / RESEARCH PROGRAMMES**

- P1-0207 Toksini in biomembrane / *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)
- J3-4168 Patogenomika in sistemska biologija novih virulenčnih faktorjev pri patogenih bakterijah / *Pathogenomics and Systems Biology of New Virulence Factors in Pathogenic Bacteria*  
Nosilec / *Principal Researcher*: D. Kordiš (IJS)
- J1-0841 Dvojna narava matičnih celic v raku in njihova uporaba v zdravljenju / *Dual Nature of stem cells in cancer and their application in therapy*  
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 kathepsinov / *Design and Characterization of Allosteric Modifiers of Cysteine Cathepsins*  
Nosilec / *Principal Researcher*: M. Novinec

## MEDNARODNO ZNANSTVENO SODELOVANJE / INTERNATIONAL RESEARCH COOPERATION

### MEDNARODNI PROJEKT / INTERNATIONAL COLLABORATIVE PROJECT

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

## BIBLIOGRAFIJA 2012 / REFERENCES 2012

### IZVIRNI ZNANSTVENI ČLANEK / ORIGINAL SCIENTIFIC ARTICLE

- BIO1.** ŠKET, Primož, KOŽMIŃSKI, Wiktor, PLAVEC, Janez. Is there any proton exchange between ammonium ions localized within the d(G<sub>3</sub>T<sub>4</sub>)<sub>2</sub> quadruplex?. *Acta chim. slov.* [Tiskana izd.], 2012, vol. 59, no. 3, str. 473-477. <http://acta.chem-soc.si/59/59-3-473.pdf>. [COBISS.SI-ID 36190213]
- BIO2.** CARUGO, Olivero, DJINOVIĆ CARUGO, Kristina. A proteomic Ramachandran plot (PRplot). *Amino acids*, str. 1-10. <http://www.springerlink.com/content/f7187n32lp1rv17j/fulltext.pdf>, doi: 10.1007/s00726-012-1402-z. [COBISS.SI-ID 36244997]
- BIO3.** BILJAN, Ivana, GIACHIN, Gabriele, ILC, Gregor, ZHUKOV, Igor, PLAVEC, Janez, LEGNAME, Giuseppe. Structural basis for the protective effect of the human prion protein carrying the dominant-negative E219K polymorphism. *Biochem. j. (Lond., 1984)*, 2012, vol. 446, pt. 2, str. 243-251, doi: 10.1042/BJ20111940. [COBISS.SI-ID 5078554]
- BIO4.** DOLES, Tibor, BOŽIĆ, Sabina, GRADIŠAR, Helena, JERALA, Roman. Functional self-assembling polypeptide bionanomaterials. *Biochem Soc Trans*, 2012, vol. 40, no. 4, str. 629-634, doi: 10.1042/BST20120025. [COBISS.SI-ID 5025306]
- BIO5.** BILJAN, Ivana, ILC, Gregor, GIACHIN, Gabriele, PLAVEC, Janez, LEGNAME, Giuseppe. Structural rearrangements at physiological pH : nuclear magnetic resonance insights from the V210I human prion protein mutant. *Biochemistry (Easton)*. [Print ed.], 2012, vol. 51, no. 38, str. 7465-7474, doi: 10.1021/bi3009856. [COBISS.SI-ID 5119514]
- BIO6.** HOFBAUER, Stefan, GYSEL, Kira, MLYNEK, Georg, KOSTAN, Julius, HAGMÜLLER, Julius, DAIMS, Holger, FORTMÜLLER, Paul G., DJINOVIĆ CARUGO, Kristina, OBINGER, Christian. Impact of subunit and oligomeric structure on the thermal and conformational stability of chlorite dismutases. *Biochimica et biophysica acta, Proteins and proteomics*, 2012, vol. 1824, no. 9, str. 1031-1038, doi: 10.1016/j.bbapap.2012.05.012. [COBISS.SI-ID 36174853]
- BIO7.** ŠPES, Aleš, SOBOTIČ, Barbara, TURK, Vito, TURK, Boris. Cysteine cathepsins are not critical for TRAIL- and CD95-induced apoptosis in several human cancer cell lines. *Biol Chem*, 2012, vol. 393, issue 12, str. 1417-1431, doi: 10.1515/hsz-2012-0213. [COBISS.SI-ID 26316327]
- BIO8.** KLEY, Rudolf A., SERDAROGLU-OFLAZER, Piraye, LEBER, Yvonne, ODGEREL, Zagaa, VAN DER VEN, Peter F. M., OLIVÉ, Montse, FERRER, Isidro, ONIPE, Adekunle, MIHAYLOV, Mariya, BILBAO, Juan M., LEE, Hee S., HÖHFELD, Jörg, DJINOVIĆ CARUGO, Kristina, KONG, Kester, TEGENTHOFF, Martin, PETERS, Sören A., STENZEL, Werner, VORGERD, Matthias, GOLDFARB, Lev G., FÜRST, Dieter O. Pathophysiology of protein aggregation and extended phenotyping in filaminopathy. *Brain*, 2012, vol. 135, no. 9, str. 2642-2660, doi: 10.1093/brain/aws200. [COBISS.SI-ID 36244741]
- BIO9.** HAFNER BRATKOVIČ, Iva, BENČINA, Mojca, FITZGERALD, Katherine A., GOLENBOCK, Douglas, JERALA, Roman. NLRP3 inflammasome activation in macrophage cell lines by prion protein fibrils as the source of IL-1[ $\beta$ ] and neuronal toxicity. *Cell Mol Life Sci (Print. ed.)*, 2012, vol. 69, iss. 24, str. 4215-4228, doi: 10.1007/s00018-012-1140-0. [COBISS.SI-ID 5043226]
- BIO10.** TORKAR, Ana, BREGANT, S., DEVEL, Laurent, NOVINEC, Marko, LENARČIČ, Brigita, LAH TURNŠEK, Tamara, DIVE, Vincent. A novel photoaffinity-based probe for selective detection of cathepsin L active form. *ChemBioChem*. [Print ed.], 2012, vol. 13, issue 17, 2616-2621, doi: 10.1002/cbic.201200389. [COBISS.SI-ID 2681935]
- BIO11.** ZIDAR, Jernej, PAVLIN, Matic, MIHELIČ, Igor, OGORELEC, Primož, PLAVEC, Janez, MAVRI, Janez. Stability and reactivity of progressively methylolated melamine derivatives. *Computational and theoretical chemistry*, 2012, str. 1-7, ilustr. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2210271X12005804>, doi: 10.1016/j.comptc.2012.11.010. [COBISS.SI-ID 5143322]
- BIO12.** NOVINEC, Marko, LENARČIČ, Brigita, BAICI, Antonio. Clusterin is a specific stabilizer and liberator of extracellular cathepsin K. *FEBS Lett.* [Print ed.], 2012, vol. 586, no. 7, str. 1062-1066, doi: 10.1016/j.febslet.2012.03.004. [COBISS.SI-ID 25723175]
- BIO13.** SMOLE, Anže, KUŽNIK, Alenka, OBLAK, Alja, PIRHER, Nina, JERALA, Roman. Delivery system for the enhanced efficiency of immunostimulatory nucleic acids. *Innate Immun. (Online)*, 2012, str. [1-13]. <http://ini.sagepub.com/content/early/2012/06/22/1753425912450346.abstract>, doi: 10.1177/1753425912450346. [COBISS.SI-ID 4994842]
- BIO14.** NGUYEN, Tien-Thanh, NGUYEN, Hoang Anh, ARREOLA, Sheryl Lozel, MLYNEK, Georg, DJINOVIĆ CARUGO, Kristina, MATHIESEN, Geir, NGUYEN, Thu-Ha, HALTRICH, Dietmar. Homodimeric  $\beta$ -galactosidase from *Lactobacillus delbrueckii* subsp. *bulgaricus* DSM 20081 : expression in *Lactobacillus plantarum* and biochemical characterization. *J. agric. food chem.*, 2012, vol. 60, no. 7, str. 1713-1721, doi: 10.1021/jf203909e. [COBISS.SI-ID 36173829]



- BIO15.** POHAR, Jelka, PIRHER, Nina, BENČINA, Mojca, MANČEK KEBER, Mateja, JERALA, Roman. The role of UNC93B1 in surface localization of TLR3 and in cell priming to nucleic acid agonists. *J Biol Chem*, 2012, str. 1-24. <http://www.jbc.org/content/early/2012/11/19/jbc.M112.413922.full.pdf+html>, doi: 10.1074/jbc.M112.413922. [COBISS.SI-ID 5143066]
- BIO16.** FEKONJA, Ota, BENČINA, Mojca, JERALA, Roman. Toll/interleukin-1 receptor domain dimers as the platform for activation and enhanced inhibition of Toll-like receptor signaling. *J Biol Chem*, 2012, vol. 287, no. 37, str. 30993-31002. <http://www.jbc.org/content/early/2012/07/24/jbc.M112.376186.full.pdf+html?sid=b51120e9-84e2-4294-85c0-bccab8f1f1b5>, doi: 10.1074/jbc.M112.376186. [COBISS.SI-ID 5026586]
- BIO17.** MANČEK KEBER, Mateja, BENČINA, Mojca, JAPELJ, Boštjan, PANTER, Gabriela, ANDRÁ, Jörg, BRANDENBURG, Klaus, TRIANTAFILOU, Martha, TRIANTAFILOU, Kathy, JERALA, Roman. MARCKS as a negative regulator of lipopolysaccharide signaling. *J Immunol (Baltim. Md., 1950)*, 2012, vol. 188, no. 8, str. 3893-3902. <http://www.jimmunol.org/content/early/2012/03/16/jimmunol.1003605.abstract>, doi: 10.4049/jimmunol.1003605. [COBISS.SI-ID 4930586]
- BIO18.** TRAJKOVSKI, Marko, PLAVEC, Janez. Assessing roles of cations in G-quadruplex-based nanowires by NMR. *The journal of physical chemistry. C, Nanomaterials and interfaces*, 2012, vol. 116, no. 44, str. 23821-23825, doi: 10.1021/jp308824j. [COBISS.SI-ID 5119770]
- BIO19.** LEONARDI, Adrijana, BIASS, Daniel, KORDIŠ, Dušan, STÖCKLIN, Reto, FAVREAU, Philippe, KRIŽAJ, Igor. Conus consors snail venom proteomics proposes functions, pathways and novel families involved in its venomous system. *Journal of proteome research*, 2012, vol. 11, no. 10, str. 4765-5108, doi: 10.1021/pr3006155. [COBISS.SI-ID 26042407]
- BIO20.** CARUGO, Olivero, DJINOVIĆ CARUGO, Kristina. How many packing contacts are observed in protein crystals?. *J Struct Biol*, 2012, vol. 180, issue 1, str. 96-100. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1047847712001591>, doi: 10.1016/j.jsb.2012.05.009. [COBISS.SI-ID 36175365]
- BIO21.** TRAJKOVSKI, Marko, WEBBA DA SILVA, Mateus, PLAVEC, Janez. Unique structural features of interconverting monomeric and dimeric G-quadruplexes adopted by a sequence from the intron of the N-myc gene. *J. Am. Chem. Soc.*, 2012, vol. 134, iss. 9, str. 4132-4141. <http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ja208483v>. [COBISS.SI-ID 4920602]
- BIO22.** ŠTRUKIL, Vjekoslav, ĐILOVIĆ, Ivica, MATKOVIĆ-ČALOGOVIC, Dubravka, SAAME, Jaan, LEITO, Ivo, ŠKET, Primož, PLAVEC, Janez, ECKERT-MAKSIĆ, Mirjana. Molecular structure and acid/base properties of 1,2-dihydro-1,3,5-triazine derivatives. *New j. chem. (1987)*, 2012, vol. 36, iss. 1, str. 86-96. <http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2012/nj/c1nj20595a>. [COBISS.SI-ID 4935962]
- BIO23.** 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.*, 2012, vol. 40, no. 4, str. 1879-1889, ilustr. <http://nar.oxfordjournals.org/content/early/2011/10/22/nar.gkr888.full.pdf+html>, doi: 10.1093/nar/gkr888. [COBISS.SI-ID 4824602]
- BIO24.** MARUŠIČ, Maja, ŠKET, Primož, BAUER, Lubos, VIGLASKY, Viktor, PLAVEC, Janez. Solution-state structure of an intramolecular G-quadruplex with propeller, diagonal and edgewise loops. *Nucleic acids res.*, 2012, vol. 40, no. 14, str. 6946-6956, ilustr., doi: 10.1093/nar/gks329. [COBISS.SI-ID 5032474]
- BIO25.** JR. RIBEIRO, Euripedes de Almeida, BEICH-FRANSEN, Mads, KONAREV, Peter, SHANG, Weifeng, VEČEREK, Branislav, KONTAXIS, Georg, HÄMMERLE, Hermann, PETERLIK, Herwig, SVERGUN, Dmitrii Ivanovich, BLÄSI, Udo, DJINOVIĆ CARUGO, Kristina. Structural flexibility of RNA as molecular basis for Hfq chaperone function. *Nucleic acids res.*, 2012, vol. 40, no. 16, str. 8072-8084, doi: 10.1093/nar/gks510. [COBISS.SI-ID 36175109]
- BIO26.** ŠKET, Primož, VIRGILIO, Antonella, ESPOSITO, Veronica, GALEONE, Aldo, PLAVEC, Janez. Strand directionality affects cation binding and movement within tetramolecular G-quadruplexes. *Nucleic acids res.*, 2012, vol. 40, no. 21, str. 11047-11057, ilustr., doi: 10.1093/nar/gks851. [COBISS.SI-ID 5132570]
- BIO27.** HUDEJ, Rosana, KLJUN, Jakob, KANDIOLLER, Wolfgang, REPNIK, Urška, TURK, Boris, HARTINGER, Christian G., KEPPLER, Bernhard K., MIKLAVČIČ, Damijan, TUREL, Iztok. Synthesis and biological evaluation of the thionated antibacterial agent nalidixic acid and its organoruthenium(II) complex. *Organometallics*, 2012, vol. 31, issue 16, str. 5867-5874. <http://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/om300424w>, doi: 10.1021/om300424w. [COBISS.SI-ID 36100357]
- BIO28.** ZAJC, Irena, FILIPIČ, Metka, LAH TURNŠEK, Tamara. Xanthohumol induces different cytotoxicity and apoptotic pathways in malignant and normal astrocytes. *PTR, Phytother. res.*, 2012, vol. 26, issue 11, str. 1709-1713. <http://dx.doi.org/10.1002/ptr.4636>, doi: 10.1002/ptr.4636. [COBISS.SI-ID 2541135]
- BIO29.** NOVINEC, Marko, PAVŠIČ, Miha, LENARČIČ, Brigita. A simple and efficient protocol for the production of recombinant cathepsin V and other cysteine cathepsins in soluble form in *Escherichia coli*. *Protein expr. purif.*, 2012, vol. 82, no. 1, str. 1-5, doi: 10.1016/j.pep.2011.11.002. [COBISS.SI-ID 35594501]
- BIO30.** ŠTER, Branko, GABER, Rok, AVBELJ, Monika, JERALA, Roman, DOBNIKAR, Andrej. Design of information processing in cells using artificial gene repressors. *Prz. Elektrotech.*, 2012, no. 2, str. 105-109, graf. prikazi. <http://pe.org.pl/articles/2012/2/32.pdf>. [COBISS.SI-ID 8956756]
- BIO31.** PRIJATELJ, Petra, PUNGERČAR, Jože. A recent evaluation of the lethal potencies of amodytoxins. *Toxicon (Oxford)*. [Print ed.], 2012, vol. 59, no. 6, str. 642-643, doi: 10.1016/j.toxicon.2012.02.009. [COBISS.SI-ID 25685543]
- BIO32.** MORI, Jerneja, VRANAC, Tanja, SMREKAR, Boštjan, ČERNILEC, Maja, ČURIN-ŠERBEC, Vladka, HORVAT, Simon, IHAN, Alojz, BENČINA, Mojca, JERALA, Roman. Chimeric flagellin as the self-adjuvant antigen for the activation of immune response against *Helicobacter pylori*. *Vaccine*. [Print ed.], 2012, vol. 30, issue 40, str. 5856-5863. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0264410X12010134>, doi: 10.1016/j.vaccine.2012.07.011. [COBISS.SI-ID 5023770]

## PREGLEDNI ZNANSTVENI ČLANEK / REVIEW ARTICLE

- BIO33.** TURK, Boris, TURK, Dušan, TURK, Vito. Protease signalling : the cutting edge. *EMBO j.*, 2012, vol. 31, no. 7, str. 1630-1643, doi: 10.1038/emboj.2012.42. [COBISS.SI-ID 25737767]
- BIO34.** HAFNER ČESEN, Maruša, PEGAN, Katarina, ŠPES, Aleš, TURK, Boris. Lysosomal pathways to cell death and their therapeutic applications. *Exp. cell res.*, 2012, vol. 318, issue 11, str. 1245-1251, doi: 10.1016/j.yexcr.2012.03.005. [COBISS.SI-ID 25737511]
- BIO35.** REINHECKEL, Thomas, PETERS, Christoph, KRÜGER, Achim, TURK, Boris, VASILJEVA, Olga. Differential impact of cysteine cathepsins on genetic mouse models of de novo carcinogenesis : cathepsin B as emerging therapeutic target. *Front Pharmacol*, 2012, vol. 3, str. 133-1-133-6, doi: 10.3389/fphar.2012.00133. [COBISS.SI-ID 25963815]
- BIO36.** MATTIAZZI, Mojca, PETROVIČ, Uroš, KRIŽAJ, Igor. Yeast as a model eukaryote in toxicology : a functional genomics approach to studying the molecular basis of action of pharmacologically active molecules. *Toxicon (Oxford)*. [Print ed.], 2012, vol. 60, no. 4, str. 558-571, doi: 10.1016/j.toxicon.2012.03.014. [COBISS.SI-ID 25697319]

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

- BIO37.** PLAVEC, Janez. Unique structural features of G-quadruplexes from the intron of the N-myc gene. V: *25th ICMRBS 2012*. Lyon: [s. n.], 2012, str. 114. [COBISS.SI-ID 5049882]
- BIO38.** BOŽIČ, Sabina, DOLES, Tibor, GRADIŠAR, Helena, VENGUST, Damjan, HAFNER BRATKOVIČ, Iva, KLAVŽAR, Sandi, JERALA, Roman. Design self-assembling polypeptide tetrahedron. V: *Bionanotechnology III : from biomolecular assembly to applications : 4-6 January, Robinson College, Cambridge, UK : programme & abstracts*. London: Biochemical Society, 2012, 2012, str. 9. [COBISS.SI-ID 4911642]
- BIO39.** JERALA, Roman, MANČEK KEBER, Mateja, HORVAT, Simon, FEKONJA, Ota, AVBELJ, Monika. Molecular mechanism TLR4 and MyD88-mediated signaling and inhibition. V: DUMIČ, Jerka (ur.). *From molecules to life and back : book of abstract*. [Rijeka]: Croatian Society of Biochemistry and Molecular biology, 2012, str. 69. [COBISS.SI-ID 3070856]
- BIO40.** KRIŽAJ, Igor. Insights into pathophysiology of human secreted PLA[sub]2s through their toxic counterparts from snake venoms. V: DUMIČ, Jerka (ur.). *From molecules to life and back : book of abstract*. [Rijeka]: Croatian Society of Biochemistry and Molecular biology, 2012, str. 75. [COBISS.SI-ID 25901863]
- BIO41.** OBERČKAL, Jernej, KOVAČIČ, Lidija, KRIŽAJ, Igor. Synaptotagmin 1 is a novel receptor for ammodytoxin. V: DUMIČ, Jerka (ur.). *From molecules to life and back : book of abstract*. [Rijeka]: Croatian Society of Biochemistry and Molecular biology, 2012, str. 98. [COBISS.SI-ID 25902119]
- BIO42.** PLAVEC, Janez. Structural studies of G-quadruplexes involved in regulation. V: POTOČNIK, Uroš (ur.). *Genetika 2012 : book of abstracts*. Ljubljana: Slovensko genetsko društvo, 2012, str. 61. [COBISS.SI-ID 5082650]
- BIO43.** JERALA, Roman. Synthetic biology announcing the coming technological revolution. V: ROBNIK, Marko (ur.), SAMEC, Marko (ur.). 1st Out of the Box Conference, 15-17 May 2012, University of Maribor. *Innovative ways to improve the culture of living : [programme book]*. Maribor: RAZ:UM, 2012, 2012, str. 32. [COBISS.SI-ID 4972826]
- BIO44.** FEKONJA, Ota, AVBELJ, Monika, MANČEK KEBER, Mateja, HORVAT, Simon, JERALA, Roman. Molecular mechanism TLR4 and MyD88-mediated signaling and inhibition. V: HUDLER, Petra (ur.), VIDETIČ, Alja (ur.), JUVAN, Peter (ur.). Simpozij z mednarodno udeležbo ob 40. obletnici Inštituta za biokemijo in 20. obletnici Medicinskega centra za molekularno biologijo = International Symposium at 40th Anniversary of Institute of Biochemistry and 20th Anniversary of Medical Centre for Molecular Biology, Ljubljana, 27-29 June 2012. *Molekularna medicina in biotehnologija : book of abstracts*. Ljubljana: Inštitut za biokemijo, Medicinska fakulteta = Institute of Biochemistry, Faculty of Medicine, 2012, str. 27. [COBISS.SI-ID 5009946]
- BIO45.** TURK, Boris. Protease signaling : a point for therapeutic intervention. V: DUMIČ, Jerka (ur.). *From molecules to life and back : book of abstract*. [Rijeka]: Croatian Society of Biochemistry and Molecular biology, 2012, str. 55. [COBISS.SI-ID 26473767]
- BIO46.** PLAVEC, Janez. Structures of G-quadruplexes with unique features. V: *Programme and book of abstracts*. Golden Sands: [s. n.], 2012, str. 23. [COBISS.SI-ID 5081114]
- BIO47.** KRIŽAJ, Igor. Snake venom toxic phospholipases - valuable tools for dissecting activities of their mammalian orthologs. V: 1st Oxford World Symposium on Venoms, 18-20 September 2012, Oxford, UK. *Venoms 2012*. [S. l.: s. n.], 2012, str. 19-20. [COBISS.SI-ID 26118183]

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

- BIO48.** PLAVEC, Janez. Nucleic acids studied by NMR. V: BERTINI, Ivano (ur.), MCGREEVY, Kathleen S. (ur.), PARIGI, Giacomo (ur.). *NMR of biomolecules : towards mechanistic systems biology*. Weinheim; Chichester: Wiley-VCH, 2012, str. 47-50. [COBISS.SI-ID 4940570]
- BIO49.** PLAVEC, Janez. DNA. V: BERTINI, Ivano (ur.), MCGREEVY, Kathleen S. (ur.), PARIGI, Giacomo (ur.). *NMR of biomolecules : towards mechanistic systems biology*. Weinheim; Chichester: Wiley-VCH, 2012, str. 97-116. [COBISS.SI-ID 4940826]

## DRUGO UČNO GRADIVO / OTHER EDUCATIONAL MATERIAL

- BIO50.** ČERNILEC, Maja, KOSMAČ, Miha, ČURIN-ŠERBEC, Vladka, GALVANI, Vesna, GHIEMMETTI, Mascia, PRETNAR-HARTMAN, Katrina, KOPITAR, Andreja Nataša, KOREN, Simon, RUPREHT, Ruth, VRANAC, Tanja. *Priročnik za vaje pri predmetu Molekularna imunologija z imunokemijo za študente Univerzitetnega študijskega programa Biokemija*. Ljubljana: Zavod Republike Slovenije za transfuzijsko medicino, 2012. VI, 70 str., ilustr., graf. prikazi, tabele. ISBN 978-961-6596-13-8. [COBISS.SI-ID 260221952]

## ENCIKLOPEDIJA, SLOVAR, LEKSIKON, PRIROČNIK, ATLAS, ZEMLJEVID / ENCYCLOPEDIA, DICTIONARY, LEXICON, MANUAL, ATLAS, MAP

- BIO51.** ABRAM, Veronika, ČREŠNAR, Bronislava, DOLINAR, Marko, DOVČ, Peter, KOMEL, Radovan, MILISAV, Irina, SAJOVIC, Tomaž, ŠTERN, Igor, TURK, Tom, ŽAKELJ-MAVRIČ, Marija, GUBENŠEK, Franc, HERZOG-VELIKONJA, Blagajana, JERALA, Roman, KREGAR, Igor, PUNGERČAR, Jože, ŠTERLE, Maksimiljan. *Angleško-slovenski slovar izbranih izrazov iz biokemije in molekularne biologije*. Ljubljana: Slovensko biokemijsko društvo, 2012. 85 str. ISBN 978-961-91651-6-4. [COBISS.SI-ID 258088960]

## PREDAVANJE NA TUJI UNIVERZI / INVITED LECTURE AT FOREIGN UNIVERSITY

- BIO52.** JERALA, Roman. *Coliled-coil based designed polyhedra : [predavanje na] University of Bristol, School of Chemistry, 23 May, 2012*. Bristol: University of Bristol, 2012. [COBISS.SI-ID 4975898]
- BIO53.** DOLINAR, Marko. *Design and production of humanized anti-prion single-chain antibody fragments : [Center for Proteomics, Faculty of Medicine, University of Rijeka, February 13th, 2012]*. Rijeka, 2012. [COBISS.SI-ID 35777797]
- BIO54.** NOVINEC, Marko. *Mechanisms of allosteric regulation in cysteine cathepsins : University of Natural Resources and Life Sciences, Vienna, May 11th 2012*. Vienna, [2012]. [COBISS.SI-ID 35956229]

- 
- BIO55.** PLAVEC, Janez. *NMR studies of DNA G-quadruplexes and their interactions with cations : [lecture at] Molecular Structure Seminar, MRC National Institute for Medical Research, London, Wednesday 25th January [2012]*. London: National Institute for Medical Research, 2012. [COBISS.SI-ID 4899354]

## VABLJENO PREDAVANJE NA KONFERENCI BREZ NATISA / UNPUBLISHED INVITED CONFERENCE LECTURE

- BIO56.** JERALA, Roman. *Protein design in Synthetic biology : from nanoscale to the molecular assembly line : [plenary lecture at] EMBO global exchange lecture course, Introduction to synthetic biology, Buenos Aires, 16-21 April, 2012*. Buenos Aires, 2012. [COBISS.SI-ID 4947482]

## UREDNIK / EDITORSHIP

- BIO57.** XIIIth International Symposium on Proteinases, Inhibitors and Biological Control, Portorož, Slovenia, September 22-26, 2012, STOKA, Veronika (ur.), TURK, Boris (ur.). *Book of abstracts*. Ljubljana: Jožef Stefan Institute, 2012. 127 str. ISBN 978-961-264-044-6. [COBISS.SI-ID 263241984]
- BIO58.** the second Bio-NMR Annual User Meeting, Portorož, Slovenia, May 8-11, 2012, VODIŠKAR, Mateja (ur.), PLAVEC, Janez (ur.). *Breakthroughs in NMR of structural biology*. Ljubljana: Slovenian NMR Centre, National Institute of Chemistry, 2012. 129 str., ilustr. ISBN 978-961-6104-18-0. [COBISS.SI-ID 261370368]
- BIO59.** LAH TURNŠEK, Tamara (ur.). *Nacionalni inštitut za biologijo*. Ljubljana: Nacionalni inštitut za biologijo, 2012. Ni pag., ilustr. [COBISS.SI-ID 30097369]
- BIO60.** VODIŠKAR, Mateja (ur.), PODBEVŠEK, Peter (ur.), PLAVEC, Janez (ur.), LENARČIČ ŽIVKOVIČ, Martina (ur.). *3rd Annual East-NMR User Meeting, Laško, Slovenia, November 13-16, 2012*. Ljubljana: Slovenian NMR Centre, National Institute of Chemistry, 2012. 92 str., ilustr. ISBN 978-961-6104-21-0. [COBISS.SI-ID 263871488]
- BIO61.** Dan biomolekularnih znanosti, Ljubljana, 27. september 2012, DOLINAR, Marko (ur.). *Zbornik povzetkov*. Ljubljana: Slovensko biokemijsko društvo, 2012. 34 str. ISBN 978-961-91651-7-1. <http://biomolekularec.si/zbormik12.pdf>. [COBISS.SI-ID 263420928]

## KATEDRA ZA FIZIKALNO KEMIJO CHAIR OF PHYSICAL CHEMISTRY

### PREDSTOJNICA KATEDRE / HEAD

red. prof. dr. Ksenija Kogej

### SODELAVCI KATEDRE / PERSONNEL

#### Visokošolski učitelji / Faculty

red. prof. dr. Marija Bešter Rogač

izr. prof. dr. Barbara Hribar Lee

red. prof. dr. Andrej Jamnik

red. prof. dr. Ksenija Kogej

red. prof. dr. Jože Koller

(upokojen od 30. 9. 2012 / *retired since September 30, 2012*)

izr. prof. dr. Jurij Lah

red. prof. dr. Ciril Pohar

izr. prof. dr. Jurij Rešič

red. prof. dr. Jože Škerjanc

(zaslužni profesor (upokojen) / *Professor Emeritus*)

red. prof. dr. Gorazd Vesnaver

(upokojen od 31. 1. 2012 / *retired since January 31, 2012*)

red. prof. dr. Vojeslav Vlachy

#### Visokošolski sodelavci / Assistants

dr. Matjaž Bončina

doc. dr. Janez Cerar

dr. Igor Drobnak

dr. Andrej Godec

dr. Miha Lukšič

doc. dr. Črtomir Podlipnik

dr. Iztok Prislan

dr. Bojan Šarac

doc. dr. Matija Tomšič

doc. dr. Tomaž Urbič

#### Raziskovalci / Researchers

dr. Jožica Dolenc

dr. Igor Drobnak

dr. Andrej Lajovic (do / *until* 30. 6. 2012)

Mojca Seručnik, univ. dipl. kem.

#### Tehniki / Technicians

Anton Kelbl

Anton Kokalj

Cirila Peklaj

(upokojena od 30. 10. 2012 / *retired since October 30, 2012*)

<b>Mladi raziskovalci</b> <i>Young Researchers</i>	Mentor <i>Mentor</i>	Čas usposabljanja <i>Programme Duration</i>	Oblika usposabljanja <i>Degree</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>
Tomaž Mohorič	V. Vlachy	2012–2016	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 1<sup>st</sup> 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*

Osnove regulacije tehnoloških procesov (izbirni predmet) / *Fundamentals of Technological Process Regulation (elective course)*

Predbolonjski dodiplomski programi / *Pre-Bologna Undergraduate Programmes*

Fizikalna kemija / *Physical Chemistry* – UN

Fizikalna kemija II / *Physical Chemistry II* – UN



Praktikum – uvod v prakso / *Introduction to Practical Work* – VS  
Merjenje in regulacija / *Measurements and Regulations* – VS  
Fizikalna kemija in meritve / *Physical Chemistry and Measurements* – VS  
Površinska in koloidna kemija / *Surface and Colloid Chemistry* – UN  
Struktura atomov in molekul / *Structure of Atoms and Molecules* – UN  
Instrumentalne metode / *Instrumental Methods* – UN  
Makromolekulska kemija / *Macromolecular Chemistry* – UN  
Merjenje, regulacija, avtomatizacija / *Measurement, Regulations, Automation* – UN  
Biofizikalna kemija / *Biophysical Chemistry* – UN  
Metodika eksperimentov v fizikalni kemiji / *Methodology of Experiments in Physical Chemistry* – UN

#### Bolonjski programi 2. stopnje / *Bologna 2<sup>nd</sup> Cycle Master Study Programmes*

Tehniška varnost / *Technical Safety*:

Numerične metode v varnosti II / *Numerical Methods in Technical Safety II*

Kemija / *Chemistry*:

Numerične metode / *Numerical Methods*

Fizikalna kemija / *Physical Chemistry*

Molekularsko modeliranje / *Molecular Modelling*

Eksperimentalna fizikalna kemija / *Experimental Physical Chemistry*

Statistična termodinamika tekočin in raztopin / *Theory of Liquids and Solutions*

Elektrokemija raztopin / *Electrochemistry of Solutions*

Metode sipanja za določanje strukture in dinamike v nanosistemi / *Methods of Scattering for Determining Structure and Dynamics in Nanosystems*

Biofizikalna kemija / *Biophysical Chemistry*

Modeliranje kemijskih sistemov / *Modelling of Chemical Systems*

Kemijsko izobraževanje / *Chemical Education*:

Eksperimenti iz fizikalne kemije v šoli / *School experiments in physical chemistry*

Biokemija / *Biochemistry*

Biofizikalna kemija I / *Biophysical Chemistry I*

Biofizikalna kemija II / *Biophysical Chemistry II*

Molekularna razlaga bioloških sistemov / *Molecular Interpretation of Biological Systems*

#### Bolonjski programi 3. stopnje / *Bologna 3<sup>rd</sup> 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 1<sup>st</sup> 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

Fizikalna kemija / *Physical Chemistry*, FMF – 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 2<sup>nd</sup> 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 3<sup>rd</sup> 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 Agents and Polyelectrolytes*

Termodinamske raziskave asociacijskih procesov v raztopinah elektrolitov / *Thermodynamic Investigations of Association Processes 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*

Strukturne lastnosti raztopin component bakterijskega izvenceličnega polimernega matriksa / *Structural Properties of Solutions of Bacterial Extracellular Polymeric Substances*

3. Raziskave strukturnih in dinamičnih lastnosti koloidnih sistemov in kompleksnih fluidov / *Structure and Dynamics of Colloidal Systems and Complex Fluids*

4. Teoretične raziskave vodnih raztopin / *Theoretical Research of Aqueous Solutions*

Adsorpcija vodnih raztopin elektrolitov v neurejeni snovi; Dinamika in struktura / *Electrolyte Adsorption in a Disordered Material; Dynamics and Structure*

Lastnosti vode v zaprtih in nehomogenih sistemih / *Properties of Water in Confined and Non-homogeneous Systems*

Modeli vode in raziskave hidratacije preprostih topljencev / *Modelling Water and Solvation of Simple Solutes*

Dvodielne porazdelitvene funkcije ionov v okolici valjastega poliiona / *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**

- A. Lajovic, Nagrada Maksa Samca za doktorsko disertacijo s področja kemije za leto 2012 (mentor A. Jamnik) / *Maks Samec Award for the PhD Thesis in the Field of Chemistry for 2012*
- M. Huš, Prešernova nagrada Univerze v Ljubljani za leto 2012 (mentor. T. Urbič) / *University Prešeren Award for 2012*
- T. Mohorič, Prešernova nagrada FKKT za leto 2012 (mentorica B. Hribar Lee) / *Faculty Prešeren Award for 2012*

### **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 odbora / *Editorial Board Member, Acta Chimica Slovenica, 1998-*
- J. Lah, gostujoči urednik / *Guest Editor, Acta Chimica Slovenica, Issue 3, 2012*

### **DRUGO / OTHER**

- J. Dolenc, raziskovalka na Zvezni tehniški visoki šoli (ETH), Zürich / *Senior Researcher 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)*
- Diferenčni dinamični calorimeter Nano DSC Instrument (TA Instruments, New Castle, DE, ZDA) / *Nano Differential Scanning Calorimeter (TA Instruments, New Castle, DE, USA)*
- UV-VIS Spektrofotometer Cary BIO 100 (Varian, Australia)
- UV-VIS Spektrofotometer Cary BIO 1 (Varian, Australia)
- UV-VIS Spektrofotometer Cary BIO 50 (Varian, Australia)
- CD Spectrometer 62A DS (Aviv, ZDA)
- Titracijski mikrokolorimeter 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*
- Kalorimeter / *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, Thermostat LAUDA UB40 (+/- 0.003C), LCR Agilent 4284A, DM Agilent 4284A, DM Agilent 3458A Attached to Pt100, Set of Conductivity Cells*
- Sistem za merjenje dinamičnega in statičnega sipanja laserske svetlobe 3D DLS, LS Instruments / *3D DLS Spectrometer, LS Instruments*
- Diferenčni difraktometer DnDc 2010, Brookhaven Instruments / *Differential Diffractometer DnDc 2010, Brookhaven Instruments*
- TV100K termostatirana dvojna enota za gelsko elektroforezo ter Syngen G:BOX temnica s kame-ro / *TV100K Cooled Twin-Plate Mini-Gel Electrophoresis Unit & Syngen G:BOX Darkroom with a Camera*
- Fluorimeter: Fluorescence Spectrometer LS 55, Perkin Elmer / *Fluorimeter: Fluorescence Spectrometer LS 55, Perkin Elmer*
- Računalniška gruča iz 20 štirijedrnih 64 bitnih Intel Core i5 2500 procesorjev / *Twenty -Node Computer Cluster Based on Quad-Core Intel Core i5 2500 CPU*
- Sistem za merjenje viskoznosti (ViscoSystem AVS 370, SI Analytics GmbH, Nemčija, termostat Lauda ECO silver and DLK 10, Nemčija) / *Viscometer Systems (ViscoSystem AVS 370 (SI Analytics GmbH, Germany and Thermostat (Lauda ECO Silver and DLK 10, Germany)*

- Visokotlačna tekočinska kromatografija Knauer / *HPLC System Knauer*
- GPGPU Nvidia Tesla C2075

## **SODELOVANJE V CENTRIH ODLIČNOSTI, INFRASTRUKTURNIH CENTRIH, TEHNOLOŠKIH MREŽAH IN PLATFORMAH / COOPERATION IN CENTRES OF EXCELLENCE, INFRASTRUCTURAL CENTRES, TECHNOLOGICAL NETWORKS AND PLATFORMS**

- J. Cerar, predavanje “Izbrane fizikalno-kemijske vsebine na področju vodne kemije za barvno industrijo”, 14. 12. 2012, Kompetenčni center za kadre kemijske industrije (KoCKE) / *Invited Lecture “Selected Topics in Physical Chemistry of Water Solutions for Dye Industry” at KoCKE*

## **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**

- A. Godec, glavni mentor slovenske srednješolske ekipe na mednarodni kemijski olimpijadi v Washingtonu, ZDA, 2012 / *Head Mentor of the Slovenian Team at the International Chemistry Olympiad, Washington, D.C., USA, 2012*
- M. Huš, mentor za kemijo slovenske srednješolske ekipe na evropski naravoslovni olimpijadi v Vilni, Litva, 2012 / *Chemistry Mentor of the Slovenian Team at European Science Olympiad (EUSO), Vilnius, Lithuania, 2012*

---

## MEDNARODNO ZNANSTVENO SODELOVANJE / INTERNATIONAL SCIENTIFIC COOPERATION

### VEČSTRANSKO MEDNARODNO SODELOVANJE / MULTILATERAL COOPERATION

- COST MP-0802 *Self-Assembled Guanosine Structures for Molecular Electronic Devices*  
Koordinator / Coordinator: J. Lah
- COST CM-1101 *Colloidal Aspects of Nanoscience for Innovative Processes and Materials*  
Nosilka / Principal Researcher: M. Bešter Rogač

### 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  
Slovenia – USA *Modeli vode ter hidratacija preprostih in sestavljenih topilencev / Models of Water and Hydration of Simple and Complex Solutes*  
Nosilec / Principal Researcher: V. Vlachy
- Slovenija – Flandrija  
Slovenia – Flanders *Moduli toksin-antitoksin: Funkcija, struktura in termodinamika / Toxin-Antitoxin Modules: Function, Structure and Thermodynamics*  
Nosilec / Principal Researcher: J. Lah
- Slovenija – Hrvaška  
Slovenia – Croatia *Interakcije majhnih organskih molekul z nukleinskimi kislinami: Sinteza, strukturne značilnosti in termodinamika / Interactions of Small Organic Molecules with Nucleic Acids: Synthesis, Structural Features and Thermodynamics*  
Nosilec / Principal Researcher: J. Lah
- Slovenija – Finska  
Slovenia – Finland *Študij vodnih raztopin izotaktične polimetakrilne kisline z metodo sipanja svetlobe / Light Scattering Study of Aqueous Isotactic Poly(Methacrylic Acid) Solutions*  
Nosilec / Principal Researcher: K. Kogej
- Slovenija – Francija (CEA) *Študij raztopin hidrofobnih polielektrolitov s pomočjo tehnik sipanja ter termodinamskih in transportnih merjenj / Aqueous Solutions of Hydrophobic Polyelectrolytes Studied by a Combination of Scattering Techniques and Thermodynamic and Transport Measurements*  
Slovenia – France (CEA) Nosilec / Principal Researcher: 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 – Srbija <i>Slovenia – Serbia</i>	Strukturni prehodi proteinov in njihovo prepoznavanje z majhnimi molekulami: Termodinamika v povezavi s funkcijo / <i>Structural Transitions of Proteins and Their Recognition by Small Molecules: Thermodynamics in Correlation with Function</i> Nosilec / <i>Principal Researcher</i> : J. Lah

## DRUGE OBLIKE MEDNARODNEGA SODELOVANJA / OTHER FORMS OF INTERNATIONAL COOPERATION

### VABLJENA PREDAVANJA TUJCEV NA FKKT / INVITED LECTURERS AT FKKT

- Doc. dr. Lea Spindler, Univerza v Mariboru in Institut Jožef Stefan, Slovenija: Spontano urejanje gvanina od G-kvartetov do DNK kvadrupleksov/ *Spontaneous arranging of guanines: from G-quartets to DNA quadruplexes*, May 2012
- Prof. dr. Miguel Miguel A. Esteso, University of Alcalá, Spain: Meritve transportnih števil: koraki do avtomatskega postopka/ *Transference number measurements: steps forward to the automatic procedure*, June 2012
- Prof. dr. Per Linse, Lund University, Sweden; Modeliranje agregacije virusov s poliioni/ *Modeling of virus self-assembly induced by polyions*, October 02 2012.
- Prof. dr. Renato Tomaš, Department of Physical Chemistry, Faculty of Chemistry and Technology, University of Split, Croatia: Potenciometrične meritve v raztopinah elektrolitov v mešanih topilih/ *Potentiometry in mixed solvent-electrolyte systems*, November 2012
- Dr. Ivo Piantanida, Ruđer Bošković Institute; Zagreb, Croatia: Zaznavanje oblike struktur dvovezičnih DNK/RNK z nekovalentnimi interakcijami/ *Sensing the shape of the ds-DNA/RNA structures by non-covalent interactions*, December 2012

## BIBLIOGRAFIJA 2012 / REFERENCES 2012

### IZVIRNI ZNANSTVENI ČLANEK / ORIGINAL SCIENTIFIC ARTICLE

- FK1.** MOHORIČ, Tomaž, LUKŠIČ, Miha, HRIBAR, Barbara. Thermodynamics of asymmetric primitive model electrolytes via the hypernetted chain approximation. *Acta chim. slov.* [Tiskana izd.], 2012, vol. 59, no. 3, str. 490-502. <http://acta.chem-soc.si/59/59-3-490.pdf>. [COBISS.SI-ID 36183557]
- FK2.** PRELESNIK, Simona, GODERIS, Bart, HANSSON, Per, KOGEJ, Ksenija. The role of specific interaction in phase behavior of polyelectrolyte-surfactant-water mixtures. *Acta chim. slov.* [Tiskana izd.], 2012, vol. 59, no. 3, str. 503-512. <http://acta.chem-soc.si/59/59-3-503.pdf>. [COBISS.SI-ID 36183813]
- FK3.** LAJOVIC, Andrej, TOMŠIČ, Matija, JAMNIK, Andrej. Structural study of simple organic acids by small-angle x-ray scattering and Monte Carlo simulations. *Acta chim. slov.* [Tiskana izd.], 2012, vol. 59, no. 3, str. 520-527. <http://acta.chem-soc.si/59/59-3-520.pdf>. [COBISS.SI-ID 36184325]
- FK4.** HRIBAR, Barbara. The application of the replica Ornstein-Zernike methodology for studying ionic membrane equilibria. *Acta chim. slov.* [Tiskana izd.], 2012, vol. 59, no. 3, str. 528-535. <http://acta.chem-soc.si/59/59-3-528.pdf>. [COBISS.SI-ID 36184581]
- FK5.** BONČINA, Matjaž, BEŠTER-ROGAČ, Marija. Global thermodynamic analysis of conductivity data. *Acta chim. slov.* [Tiskana izd.], 2012, vol. 59, no. 3, str. 536-540. <http://acta.chem-soc.si/59/59-3-536.pdf>. [COBISS.SI-ID 36170501]



- FK6.** HUŠ, Matej, URBIČ, Tomaž. Quantum chemical tests of water-water potential for interaction site water models. *Acta chim. slov.* [Tiskana izd.], 2012, vol. 59, no. 3, str. 541-547. <http://acta.chem-soc.si/59/59-3-541.pdf>. [COBISS.SI-ID 36184837]
- FK7.** MERNIK, Andrej, ANDJELKOVIČ, Uroš, DROBNAK, Igor, LAH, Jurij. Differences in unfolding energetics of Ccdb toxins from *V. fischeri* and *E. coli*. *Acta chim. slov.* [Tiskana izd.], 2012, vol. 59, no. 3, str. 548-553. <http://acta.chem-soc.si/59/59-3-548.pdf>. [COBISS.SI-ID 36185093]
- FK8.** URBIČ, Tomaž, FENNELL, Christopher J., DILL, Ken A. A microscopic theory of solvation of monoions. *Acta chim. slov.* [Tiskana izd.], 2012, vol. 59, no. 3, str. 554-558. <http://acta.chem-soc.si/59/59-3-554.pdf>. [COBISS.SI-ID 36186373]
- FK9.** KROFLIČ, Ana, ŠARAC, Bojan, BEŠTER-ROGAČ, Marija. What affects the degree of micelle ionization : conductivity study of alkyltrimethylammonium chlorides. *Acta chim. slov.* [Tiskana izd.], 2012, vol. 59, no. 3, str. 564-570. <http://acta.chem-soc.si/59/59-3-564.pdf>. [COBISS.SI-ID 36171013]
- FK10.** HOSTNIK, Gregor, VLACHY, Vojko, BONDAREV, Dmitrij, VOHLÍDAL, Jiří, CERAR, Janez. UV/Vis study of the alkali salts of poly(thiophen-3-ylacetic acid) in water. *Acta chim. slov.* [Tiskana izd.], 2012, vol. 59, no. 3, str. 571-581. <http://acta.chem-soc.si/59/59-3-571.pdf>. [COBISS.SI-ID 36187141]
- FK11.** HOSTNIK, Gregor, VLACHY, Vojko, BONDAREV, Dmitrij, VOHLÍDAL, Jiří, CERAR, Janez. Potentiometric and conductometric study of aqueous solutions of lithium and sodium salts of poly(thiophen-3-ylacetic acid). *Acta chim. slov.* [Tiskana izd.], 2012, vol. 59, no. 3, str. 582-589. <http://acta.chem-soc.si/59/59-3-582.pdf>. [COBISS.SI-ID 36187397]
- FK12.** PRISLAN, Iztok, JAMNIK, Andrej, TOMŠIČ, Matija. Kinetically governed formation of d(G[sub]4T[sub]2G[sub]4) assemblies. *Acta chim. slov.* [Tiskana izd.], 2012, vol. 59, no. 3, str. 590-600. <http://acta.chem-soc.si/59/59-3-590.pdf>. [COBISS.SI-ID 36188165]
- FK13.** REŠČIČ, Jurij, BOHINC, Klemen. Attraction between like-charged surfaces : effect of counterion dimerization. *Acta chim. slov.* [Tiskana izd.], 2012, vol. 59, no. 3, str. 601-608. <http://acta.chem-soc.si/59/59-3-601.pdf>. [COBISS.SI-ID 36188677]
- FK14.** BEŠTER-ROGAČ, Marija, HABE, Dušan. Method and apparatus for determination of relative permittivity of solvents. *Acta chim. slov.* [Tiskana izd.], 2012, vol. 59, no. 3, str. 609-614. <http://acta.chem-soc.si/59/59-3-609.pdf>. [COBISS.SI-ID 36170757]
- FK15.** ANKO, Maja, MAJHENC, Janja, KOGEJ, Ksenija, SILLARD, Rannard, LANGEL, Ūlo, ANDERLUH, Gregor, ZORKO, Matjaž. Influence of steryl and trifluoromethylquinoline modifications of the cell penetrating peptide TP10 on its interaction with a lipid membrane. *Biochim. biophys. acta, Biomembr.* [Print ed.], 2012, vol. 1818, iss. 3, str. 915-924, ilustr. [http://pdn.sciencedirect.com/science?\\_ob=MiamiImageURL&cid=271033&user=4776866&pii=S0005273611004652&check=y&origin=article&zone=toolbar&coverDate=31-Mar-2012&view=c&originContentFamily=serial&wchp=dGLzVBA-zSkzS&md5=614f736667b286958f710855f90929dc/1-s2.0-S0005273611004652-main.pdf](http://pdn.sciencedirect.com/science?_ob=MiamiImageURL&cid=271033&user=4776866&pii=S0005273611004652&check=y&origin=article&zone=toolbar&coverDate=31-Mar-2012&view=c&originContentFamily=serial&wchp=dGLzVBA-zSkzS&md5=614f736667b286958f710855f90929dc/1-s2.0-S0005273611004652-main.pdf), doi: doi:10.1016/j.bbamem.2011.12.028. [COBISS.SI-ID 4881434]
- FK16.** 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.], 2012, vol. 50, no. 3, str. 1170-1178. <http://dx.doi.org/10.1016/j.carbon.2011.10.030>, doi: 10.1016/j.carbon.2011.10.030. [COBISS.SI-ID 2451279]
- FK17.** LUKŠIČ, Miha, VLACHY, Vojko, HRIBAR, Barbara. Modelling the ion-exchange equilibrium in nanoporous materials. *Condens. matter phys.*, 2012, vol. 15, no. 2, art. no. 23802 (12 str.), doi: 10.5488/CMP.15.23802. [COBISS.SI-ID 36019717]
- FK18.** JEROMEL, Miran, JEVTIČ, Vladimir, SERŠA, Igor, TOMŠIČ, Matija, TOMŠIČ, Matija. Quantification of synovitis in the cranio-cervical region : dynamic contrast enhanced and diffusion weighted magnetic resonance imaging in early rheumatoid arthritis : a feasibility follow up study. *Eur. j. radiol.* [Print ed.], 2012, vol. 81, no. 11, str. 3412-3419, doi: 10.1016/j.ejrad.2012.04.006. [COBISS.SI-ID 26343719]
- FK19.** ROŠIČ, Romana, PELIPENKO, Jan, KRISTL, Julijana, KOCBEK, Petra, BEŠTER-ROGAČ, Marija, BAUMGARTNER, Saša. Physical characteristics of poly (vinyl alcohol) solutions in relation to electrospun nanofiber formation. *Eur. Polym. J.* [Print ed.], 2012, vol., no., 32 str. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0014305712003825>, doi: 10.1016/j.eurpolymj.2012.11.013. [COBISS.SI-ID 3362417]
- FK20.** ROŠIČ, Romana, PELIPENKO, Jan, KOCBEK, Petra, BAUMGARTNER, Saša, BEŠTER-ROGAČ, Marija, KRISTL, Julijana. The role of rheology of polymer solutions in predicting nanofiber formation by electrospinning. *Eur. Polym. J.* [Print ed.], 2012, vol. 48, iss. 8, str. 1374-1384. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0014305712001516?v=s5>, doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.eurpolymj.2012.05.001>. [COBISS.SI-ID 3248753]
- FK21.** SKRT, Mihaela, BENEDIK, Evgen, PODLIPNIK, Črtomir, POKLAR ULRIH, Nataša. Interactions of different polyphenols with bovine serum albumin using fluorescence quenching and molecular docking. *Food chem.* [Print ed.], 2012, vol. 135, str. 2418-2424, doi: 10.1016/j.foodchem.2012.06.114. [COBISS.SI-ID 4113784]
- FK22.** MARUŠIČ, Jaka, PODLIPNIK, Črtomir, JEVEŠVAR, Simona, KUZMAN, Drago, VESNAVER, Gorazd, LAH, Jurij. Recognition of human tumor necrosis factor [alpha] (TNF-[alpha]) by therapeutic antibody fragment : energetics and structural features. *J Biol Chem*, 2012, vol. 287, no. 11, str. 8613-8620, doi: 10.1074/jbc.M111.318451. [COBISS.SI-ID 35833349]
- FK23.** HUŠ, Matej, URBIČ, Tomaž. Strength of hydrogen bonds of water depends on local environment. *J. chem. phys.*, 2012, vol. 136, no. 14, art. no. 144305 (7 str.), doi: 10.1063/1.3701616. [COBISS.SI-ID 35935237]
- FK24.** DRUCHOK, M., LUKŠIČ, Miha, VLACHY, Vojko. Explicit water molecular dynamics study of the mobility of halide ions in presence of ionene oligocations. *J. chem. phys.*, 2012, vol. 137, no. 1, art. no. 014511 (8 str.), doi: 10.1063/1.4731718. [COBISS.SI-ID 36050437]
- FK25.** JARDAT, Marie, HRIBAR, Barbara, DAHIREL, Vincent, VLACHY, Vojko. Self-diffusion and activity coefficients of ions in charged disordered media. *J. chem. phys.*, 2012, vol. 137, no. 11, art. no. 114507 (9 str.), doi: 10.1063/1.4752111. [COBISS.SI-ID 36230149]
- FK26.** LUKŠIČ, Miha, HRIBAR, Barbara, VLACHY, Vojko, PIZIO, Orest. Structural and thermodynamical properties of charged hard spheres in a mixture with core-softened model solvent. *J. chem. phys.*, 2012, vol. 137, no. 24, art. no. 244502 (10 str.), doi: 10.1063/1.4772582. [COBISS.SI-ID 36411653]
- FK27.** ANŽLOVAR, Alojz, CRNJAK OREL, Zorica, KOGEJ, Ksenija, ŽIGON, Majda. Polyol-mediated synthesis of zinc oxide nanorods and nanocomposites with poly(methyl methacrylate). *J. nanomater.*, 2012, vol. 2012, art. no. 760872 (9 str.), doi: 10.1155/2012/760872. [COBISS.SI-ID 36033029]
- FK28.** KLJAJIČ, Alen, BEŠTER-ROGAČ, Marija, KLOBČAR, Andrej, ZUPET, Rok, PEJOVNIK, Stane. Crystallization using reverse micelles and water-in-oil microemulsion systems : the highly selective tool for the purification of organic compounds from complex mixtures. *J. pharm. sci.*, str. 1-6. <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/jps.23376/pdf>, doi: 10.1002/jps.23376. [COBISS.SI-ID 36344837]
- FK29.** KROFLIČ, Ana, APELBLAT, Alexander, BEŠTER-ROGAČ, Marija. Dissociation constants of parabens and limiting conductances of their ions in water. *J. phys. chem., B Condens. mater. surf. interfaces biophys.*, 2012, vol. 116, issue 4, str. 1385-1392. <http://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/jp211150p>, doi: 10.1021/jp211150p. [COBISS.SI-ID 35718661]

- FK30.** PRELESNIK, Simona, GODERIS, Bart, HANSSON, Per, KOGEJ, Ksenija. Phase diagram and structures in mixtures of poly(styrenesulfonate anion) and alkyltrimethylammonium cations in water : significance of specific hydrophobic interaction. *J. phys. chem., B Condens. mater. surf. interfaces biophys.*, 2012, vol. 116, no. 15, str. 4634-4645, doi: 10.1021/jp212263b. [COBISS.SI-ID 36006917]
- FK31.** LUKŠIČ, Miha, URBIČ, Tomaž, HRIBAR, Barbara, DILL, Ken A. Simple model of hydrophobic hydration. *J. phys. chem., B Condens. mater. surf. interfaces biophys.*, 2012, vol. 116, no. 21, str. 6177-6186, doi: 10.1021/jp300743a. [COBISS.SI-ID 36007173]
- FK32.** BONČINA, Matjaž, LAH, Jurij, PRISLAN, Iztok, VESNAVER, Gorazd. Energetic basis of human telomeric DNK folding into G-quadruplex structures. *J. Am. Chem. Soc.*, 2012, vol. 134, no. 23, str. 9657-9663, doi: 10.1021/ja300605n. [COBISS.SI-ID 36015365]
- FK33.** KROFLIČ, Ana, ŠARAC, Bojan, BEŠTER-ROGAČ, Marija. Thermodynamic characterization of CHAPS micellization using isothermal titration calorimetry : temperature, salt, and pH dependence. *Langmuir*, 2012, vol. 28, no. 28, str. 10363-10371, doi: 10.1021/la302133q. [COBISS.SI-ID 36016389]
- FK34.** DE JONGE, Natalie, ŠIMIČ, Mario, BUTS, Lieven, HAESAERTS, Sarah, ROELANTS, Kim, GARCIA-PINO, Abel, STERCKX, Yann, DE GREVE, Henri, LAH, Jurij, LORIS, Remy. Alternative interactions define gyrase specificity in the CcdB family. *Mol. microbiol.*, 2012, vol. 84, no. 5, str. 965-978, doi: 10.1111/j.1365-2958.2012.08069.x. [COBISS.SI-ID 36015877]
- FK35.** LUKŠIČ, Miha, HRIBAR, Barbara, BALEÓN TOCHIMANI, Sergio, PIZIO, Orest. Solvent primitive model for electrolyte solutions in disordered porous matrices of charged species. Replica Ornstein-Zernike theory and grand canonical Monte Carlo simulations. *Mol. Phys.*, 2012, vol. 110, no. 1, str. 17-30, doi: 10.1080/00268976.2011.631057. [COBISS.SI-ID 35669765]
- FK36.** LUKŠIČ, Miha, BONČINA, Matjaž, VLACHY, Vojko, DRUCHOK, M. Isothermal titration calorimetry and molecular dynamics study of ion-selectivity in mixtures of hydrophobic polyelectrolytes with sodium halides in water. *PCCP. Phys. chem. chem. phys. (Print)*, 2012, vol. 14, no. 6, str. 2024-2031, doi: 10.1039/C2CP23137A. [COBISS.SI-ID 35707397]
- FK37.** SERUČNIK, Mojca, BONČINA, Matjaž, LUKŠIČ, Miha, VLACHY, Vojko. Specific counter-ion and co-ion effects revealed in mixing of aqueous solutions of 3,3 and 6,6-ionenes with solutions of low molecular weight salts. *PCCP. Phys. chem. chem. phys. (Print)*, 2012, vol. 14, no. 19, str. 6805-6811, doi: 10.1039/C2CP40571G. [COBISS.SI-ID 35925509]
- FK38.** MALIKOVA, Natalie, ČEBAŠEK, Sašo, GLENISSON, Vincent, BHOWMIK, Debsindhu, CARROT, Geraldine, VLACHY, Vojko. Aqueous solutions of ionenes : interactions and counterion specific effects as seen by neutron scattering. *PCCP. Phys. chem. chem. phys. (Print)*, 2012, vol. 14, no. 37, str. 12898-12904, doi: 10.1039/C2CP41859B. [COBISS.SI-ID 36222725]
- FK39.** URBIČ, Tomaž. Analytical model for three-dimensional Mercedes-Benz water molecules. *Phys. rev., E Stat. nonlinear soft matter phys. (Print)*, 2012, vol. E85, no. 6, art. no. 061503 (7 str.), doi: 10.1103/PhysRevE.85.061503. [COBISS.SI-ID 36029445]
- FK40.** ŠKEDELJ, Veronika, ARSOVSKA, Emilija, TOMAŠIČ, Tihomir, KROFLIČ, Ana, HODNIK, Vesna, HRAST, Martina, BEŠTER-ROGAČ, Marija, ANDERLUH, Gregor, GOBEC, Stanislav, BOSTOCK, Julianne M., CHOPRA, Ian, O'NEILL, Alex, RANDALL, Christopher, ZEGA, Anamarija. 6-arylpyrido[2,3-d]pyrimidines as novel ATP-competitive inhibitors of bacterial D-alanine: D-alanine ligase. *PLoS one*, 2012, vol. 7, no. 8, str. e39922-1-e39922-14, ilustr. <http://www.plosone.org/article/info%3Adoi%2F10.1371%2Fjournal.pone.0039922>. [COBISS.SI-ID 3286897]
- FK41.** JARDAT, Marie, HRIBAR, Barbara, VLACHY, Vojko. Self-diffusion of ions in charged nanoporous media. *Soft matter*, 2012, vol. 8, no. 4, str. 954-964, doi: 10.1039/c1sm05985h. [COBISS.SI-ID 35680773]
- FK42.** ZHANG, Jing, REILING, Calliste, REINECKE, James B., PRISLAN, Iztok, MARKY, Luis A., SORGEN, Paul L., NASLAVSKY, Naava, CAPLAN, Steve. Rabankyrin-5 interacts with EHD1 and Vps26 to regulate endocytic trafficking and retromer function. *Traffic. Print ed.*, vol. 13, issue 5, str. 745-757. <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1111/j.1600-0854.2012.01334.x/pdf>, doi: 10.1111/j.1600-0854.2012.01334.x. [COBISS.SI-ID 35763461]

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

- FK43.** PAHOVNIK, David, ŽAGAR, Ema, KOGEJ, Ksenija, VOHLÍDAL, Jiří, ŽIGON, Majda. Vpliv ionskih tekočin na nastanek nanostruktur polianilina. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. [1-8]. [COBISS.SI-ID 5067546]

## OBJAVLJENI ZNANSTVENI PRISPEVEK NA KONFERENCI / PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTION

- FK44.** URBIČ, Tomaž. Preprost analitični model vode = Simple analytical model of water : [predavanje]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. [1-6]. [COBISS.SI-ID 36205317]
- FK45.** HUŠ, Matej, URBIČ, Tomaž. Anomalne lastnosti tekočin brez kotno odvisnih interakcij = Anomalous properties of liquids without angular dependent interactions : [predavanje]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. [1-9]. [COBISS.SI-ID 36204549]
- FK46.** CERAR, Janez. Analiza mehanizma reakcije med Cr[na]3+ ionom in EDTA z uporabo vidne spektrofotometrije = Analysis of the mechanism of reaction between Cr[na]3+ ion and EDTA ligand with the use of visible spectrophotometry : [predavanje]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. 1-18. [COBISS.SI-ID 36204037]

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

- FK47.** ARSOVSKA, Emilija, ŠKEDELJ, Veronika, TOMAŠIČ, Tihomir, KROFLIČ, Ana, HODNIK, Vesna, HRAST, Martina, BEŠTER-ROGAČ, Marija, ANDERLUH, Gregor, GOBEC, Stanislav, BOSTOCK, Julianne M., CHOPRA, Ian, O'NEILL, Alex J., RANDALL, Christopher, ZEGA, Anamarija. Discovery of new ATP-competitive inhibitors of D-alanine: D-alanine ligase. V: TOMAŠIČ, Tihomir (ur.), PETERLIN-MAŠIČ, Lucija (ur.), ILAŠ, Janez (ur.), ZIDAR, Nace (ur.), KIKELJ, Danijel (ur.). *2nd Meeting of the Paul Ehrlich MedChem Euro-PhD Network : 9th - 11th September 2012, Ljubljana, Slovenia : [book of abstracts]*. Ljubljana: [s.n.], 2012, str. 43. <http://www.medchemeuropd2012.eu/>. [COBISS.SI-ID 3305841]

- FK48.** ROŠIČ, Romana, PELIPENKO, Jan, KOCBEK, Petra, BAUMGARTNER, Saša, BEŠTER-ROGAČ, Marija, KRISTL, Julijana. Investigation of physical characteristics of polymer solution in relation to morphology of electrospun product. V: *8th World Meeting on Pharmaceutics, Biopharmaceutics and Pharmaceutical Technology : Istanbul, Turkey, 19th to 22nd March 2012 : Istanbul Convention & Exhibition Centre (ICEC)*. [S.l.: s.n.], 2012, 2 str. [COBISS.SI-ID 3223665]
- FK49.** GOSENCA, Mirjam, BEŠTER-ROGAČ, Marija, GOVEDARICA, Biljana, GAŠPERLIN, Mirjana. Lamellar liquid crystals as dermal delivery systems: formulation, keratinocyte proliferation and morphology evaluation. V: *8th World Meeting on Pharmaceutics, Biopharmaceutics and Pharmaceutical Technology : Istanbul, Turkey, 19th to 22nd March 2012 : Istanbul Convention & Exhibition Centre (ICEC)*. [S.l.: s.n.], 2012, 2 str. [COBISS.SI-ID 3222641]
- FK50.** KOGEJ, Ksenija. Polyelectrolyte-surfactant complexes involving polyelectrolytes with hydrophobic side groups : [invited lecture]. V: *9th International symposium on polyelectrolytes : ISP 2012 : July 9-12, 2012, Lausanne, Switzerland*. [S. l.: s. n.], 2012, str. S4-IL3. [COBISS.SI-ID 36163333]
- FK51.** JAMNIK, Andrej, TOMŠIČ, Matija, LAJOVIC, Andrej. Rentgensko sipanje neperiodičnih koloidnih sistemov = X-ray scattering of nonperiodic colloidal systems : [plenarno predavanje]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12. in 14. september 2012. *Zbornik povzetkov referatov s posvetovanja*. Maribor: FKKT, 2012, str. 11. [COBISS.SI-ID 36215557]

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

- FK52.** KOGEJ, Ksenija. Polyelectrolytes and surfactants in aqueous solutions : from dilute to concentrated systems. V: IGLIČ, Aleš (ur.). *Advances in planar lipid bilayers and liposomes. Vol. 16*. Oxford [etc.]: Elsevier: Academic Press, 2012, str. 199-237. [COBISS.SI-ID 36169221]
- FK53.** PODLIPNIK, Črtomir, REINA, Jose J. Structure based design of Cholera toxin antagonists. V: GOWDER, Sivakumar Joghi Thatha (ur.). *Cholera*. Rijeka: InTech, cop. 2012, str. 177-200. <http://www.intechopen.com/books/cholera/structural-based-design-of-cholera-toxin-antagonists>. [COBISS.SI-ID 35855109]

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

- FK54.** BONČINA, Matjaž, CERAR, Janez, GODEC, Andrej, HRIBAR, Barbara, JAMNIK, Andrej, LAH, Jurij, LAJOVIC, Andrej, LUKŠIČ, Miha, PODLIPNIK, Črtomir, PRISLAN, Iztok, REŠČIČ, Jurij, ŠARAC, Bojan, TOMŠIČ, Matija, VESNAVER, Gorazd. *Fizikalna kemija - praktikum*. 1. izd. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2012. XXXII, 227 str., ilustr. ISBN 978-961-6756-32-7. [COBISS.SI-ID 261552640]

## **DRUGO UČNO GRADIVO / OTHER EDUCATIONAL MATERIAL**

- FK55.** URBIČ, Tomaž. *Kvantna mehanika : zbirka računskih vaj za študente kemijskega inženirstva*. Ljubljana: Univ. v Ljubljani, Fak. za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2012. 1 zv., graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 36161285]
- FK56.** URBIČ, Tomaž. *Numerične metode : naloge za praktične vaje za študente kemije*. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za fizikalno kemijo, 2012. 12 f. [COBISS.SI-ID 36421893]

## **PREDAVANJE NA TUJI UNIVERZI / INVITED LECTURE AT FOREIGN UNIVERSITY**

- FK57.** LAH, Jurij. *Isothermal titration calorimetry and thermodynamics of interactions between biological macromolecules : Jožef Stefan Institute, March 21, 2012*. 2012; Ljubljana. [COBISS.SI-ID 35845637]
- FK58.** GUJT, Jure. *On the preparation for study of salicylates mobility : [Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Fakultät für Chemie, Universität Duisburg-Essen, 11. april 2012]*. Duisburg, 2012. [COBISS.SI-ID 35924229]
- FK59.** KOGEJ, Ksenija. *[Polyelectrolyte-surfactant complexes (PCBs): the role of hydrophobic substituents on the polyion chain on their properties : University of Helsinki, Department of Chemistry, Laboratory of Polymer Chemistry, September 3rd, 2012]*. [2012]. [COBISS.SI-ID 36175877]
- FK60.** PRISLAN, Iztok. *[Kinetics says jump, G-quadruplexes say how high : University of Notre Dame, Department of Chemistry and Biochemistry, Special seminar, 18. 9. 2012, South Bend, Indiana, USA]*. [2012]. [COBISS.SI-ID 36445957]
- FK61.** PRISLAN, Iztok. *[Calorimetry in life science: unfolding and targeting of proteins : Creighton University, College of Arts and Sciences, Department of Physics, Student colloquium, 19. 9. 2012, Omaha, Nebraska, USA]*. [2012]. [COBISS.SI-ID 36446469]
- FK62.** BONČINA, Matjaž. *[Folding of human telomeric DNA and its recognition with various ligands : University of Nebraska Medical Center, College of Pharmacy, September 21st, 2012]*. [2012]. [COBISS.SI-ID 36227333]
- FK63.** BONČINA, Matjaž. *[Telomeric G-quadruplexes: folding and molecular recognition : Institut Ruđer Bošković, 9. 11. 2012, Zagreb]*. [2012]. [COBISS.SI-ID 36328453]
- FK64.** PRISLAN, Iztok. *[Using calorimetry to study intra- and intermolecular interactions : Institut Ruđer Bošković, Zavod za organsko kemijo i biokemiju, XIII. Kolokvij ZOKB i SOK Hrvatskog kemijskog društva, 9. 11. 2012, Zagreb, Croatia]*. [2012]. [COBISS.SI-ID 36446725]

## KATEDRA ZA ORGANSKO KEMIJO CHAIR OF ORGANIC CHEMISTRY

### PREDSTOJNIK KATEDRE / HEAD

red. prof. dr. Boris Šket

### SODELAVCI KATEDRE / PERSONNEL

#### Visokošolski učitelji / Faculty

red. prof. dr. Marijan Kočevar

red. prof. dr. Janez Košmrlj

red. prof. dr. Andrej Petrič

red. prof. dr. Božo Plesničar

zaslužni profesor (upokojen) / *Professor Emeritus (retired)*

red. prof. dr. Slovenko Polanc

akademik red. prof. dr. Branko Stanovnik, znanstveni svetnik

(upokojen 50 % od 1. 10. 2012 / *retired 50% since October 1, 2012*)

red. prof. dr. Jurij Svete

red. prof. dr. Boris Šket

akademik red. prof. dr. Miha Tišler

zaslužni profesor (upokojen) / *Professor Emeritus (retired)*

red. prof. dr. Bojan Verček

(upokojen od 30. 11. 2012 / *retired since November 30, 2012*)

red. prof. dr. Marko Zupan

zaslužni profesor (upokojen) / *Professor Emeritus (retired)*

#### Visokošolski sodelavci / Assistants

doc. dr. Janez Cerkovnik

red. 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

dr. Damijana Urankar

#### Tehniki / Technicians

Zdenka Kadunc

(upokojena od 27. 7. 2012 / *retired since July 27, 2012*)

Tončka Kozamernik Hudeček

(upokojena od 31. 7. 2012 / *retired since July 31, 2012*)

Branka Miklavčič

Irena Povalej

Zdenka Sakelšek

Tatjana Toporiš Stipanović

<b>Mladi raziskovalci</b> <i>Young Researchers</i>	Mentor <i>Mentor</i>	Čas usposabljanja <i>Programme Duration</i>	Oblika usposabljanja <i>Degree</i>
Jernej Baškovč	B. Stanovnik	2007–2012 (do 31. 3. 2012)	doktorski študij / <i>PhD</i>
Vita Majce	S. Polanc	2007–2012 (do 31. 3. 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. Kočevar	2008–2012	doktorski študij / <i>PhD</i>
Marko Krivec	M. Kočevar	2010–2014	doktorski študij / <i>PhD</i>
Ana Novak	J. Svete	2009–2013	doktorski študij / <i>PhD</i>
Luka Rejc	A. Petrič	2011–2015	doktorski študij / <i>PhD</i>
Gregor Strle	J. Cerkovnik	2011–2015	doktorski študij / <i>PhD</i>
Luka Šenica	J. Svete	2011–2015	doktorski študij / <i>PhD</i>
Jure Vajs	S. Polanc	2011–2015	doktorski študij / <i>PhD</i>
Jona Mirnik	J. Svete	2012–2016	doktorski študij / <i>PhD</i>
Sebastijan Ričko	B. Stanovnik	2012–2016	doktorski študij / <i>PhD</i>

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

Žiga Nose

Benjamin Prek (zaposlen v CO EN-FIST)

## **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 1<sup>st</sup> Cycle Study Programmes*

Kemija / *Chemistry* – UN:

Organska kemija I–III / *Organic Chemistry I–III*

Praktikum iz organske kemije / *Practical Course in Organic Chemistry*

Organska analiza / *Organic Analysis*

Spektroskopija / *Spectroscopy*

Sintezna organska kemija (izbirni predmet) / *Organic Chemistry Synthesis (elective course)*

Principi zelene kemije (izbirni predmet) / *Principles of Green Chemistry (elective course)*

Kemija heterocikličnih spojin (izbirni predmet) / *Chemistry of Heterocyclic Compounds (elective course)*

Biokemija / *Biochemistry* – UN:

Organska kemija I, II / *Organic Chemistry I, II*

Spektroskopske metode v biokemiji / *Spectroscopic Methods in Biochemistry*



Kemijsko inženirstvo / *Chemical Engineering* – UN:  
Organska kemija / *Organic Chemistry*

Tehniška varnost / *Technical Safety* – UN:  
Kemija / *Chemistry*

Kemijska tehnologija / *Chemical Technology* – VS:  
Organska kemija I, II / *Organic Chemistry I, II*  
Praktikum iz kemije I / *Practicals in Chemistry I*  
Sintezne tehnike v organski kemiji (izbirni predmet) / *Synthetic Techniques in Organic Chemistry (elective course)*  
Organska analitika in spektroskopija (izbirni predmet) / *Organic Analysis and Spectroscopy (elective course)*

#### 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 2. stopnje / *Bologna 2<sup>nd</sup> Cycle Study Programmes*

Kemija / *Chemistry* – UN:  
Moderne NMR metode / *Modern NMR Methods*  
Biokemija / *Biochemistry* – UN:  
Načrtovanje organskih sintez s kemijo zdravil / *Target Oriented Synthesis with Drug Chemistry*

#### Bolonjski programi 3. stopnje / *Bologna 3<sup>rd</sup> 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 1<sup>st</sup> Cycle Study Programmes*

Organska kemija / *Organic Chemistry*, FFA – UN  
Splošna in organska kemija / *General and Organic Chemistry*, FFA – UN  
Organska kemija / *Organic Chemistry*, BF – UN  
Teoretske osnove tiskarskih procesov / *Fundamental Theoretical Principles of Printing*



---

Processes, NTF – UN  
Kemija II / Chemistry II, NTF – VS  
Kemija / Chemistry, PEF – UN

Bolonjski programi 2. stopnje / Bologna 2<sup>nd</sup> 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

Vita Majce je prejela prestižno mednarodno nagrado (UNESCO-L'OREAL - mednarodna nagrada za mlade ženske v znanosti / UNESCO-L'OREAL International Fellowships for Young Women in Life Sciences), Pariz, marec 2012.

[http://www.youtube.com/watch?v=QOxexwaoeSU&feature=player\\_embedded](http://www.youtube.com/watch?v=QOxexwaoeSU&feature=player_embedded).

### Krkine nagrade 2012

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

- Jernej Baškovič, (mentor B. Stanovnik): Uporaba kombinatorne sinteze v pripravi mono- in bicikličnih heterocikličnih sistemov / *Use of combinatorial synthesis in preparation of mono and bicyclic heterocyclic systems.*

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

- Bojana Črček, (mentor J. Svete): Kombinatorna sinteza 4-(1-fenil-5-oksopirrolidin-3-il) pirimidin-5-karboksamidov / *Combinatorial synthesis of 4-(5-oxo-1-phenylpyrrolidine-3-yl) pyrimidine-5-carboxamides.*
- Vita Majce (mentor S. Polanc): Načrtovanje, sinteza in vrednotenje diazenov ter njihovih analogov kot možnih inhibitorjev nekaterih encimov / *Design, synthesis and evaluation of diazenes and their analogues as potential inhibitors of some enzymes.*
- Nenad Maraš, (mentor M. Kočevar): Reakcije fenolov s tetraalkilamonijevimi solmi in sinteza 3-acetamido- $\beta$ -rezorcinskih kislin s prilagojeno Kolbe-Schmittovo reakcijo / *Reactions of phenols with tetraalkylammonium salts and synthesis of 3-acetamido- $\beta$ -resorcylic acids with modified Kolbe-Schmitt reaction.*
- Ana Testen, (mentor J. Svete): Sinteza novih pirazolo[1,2-a]pirazolonskih peptidomimetikov / *Synthesis of new pyrazolo[1,2-a]pyrazolone peptidomimetics.*

### ČLANSTVO V AKADEMIJAH / MEMBERSHIP IN ACADEMIES

- M. Tišler, redni član Slovenske akademije znanosti in umetnosti / *Full Member, Slovenian Academy of Sciences and Arts*
- B. Stanovnik, redni član Slovenske akademije znanosti in umetnosti / *Full Member, Slovenian Academy of Sciences and Arts*
- M. Tišler, član Evropske akademije znanosti in umetnosti / *Member, European Academy of Sciences and Arts*
- B. Stanovnik, član Evropske akademije znanosti in umetnosti / *Member, European Academy of Sciences and Arts*
- J. Svete, član Evropske akademije znanosti in umetnosti / *Member, European Academy of Sciences and Arts*

### DRUGO / OTHER

- J. Cerkovnik, član uredniškega sveta (*Associate Editor*), *Acta Chimica Slovenica*
- M. Jereb, član uredniškega odbora (*Member of the Editorial Board*), *Recent Patents on Catalysis*
- M. Kočevar, IUPAC Fellow od 2010.
- M. Kočevar, na povabilo predsednika IUPAC Professor Jun-II 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
- M. Kočevar, član uredniškega odbora (*Member of the Editorial Board*), American Journal of Chemistry.
- M. Kočevar, član uredniškega odbora (*Member of the Editorial Board*), Current Organic Chemistry (IF: 3,064; 5-letni IF: 3,468).
- M. Kočevar, član uredniškega odbora (*Member of the Editorial Board*), E-Journal of Chemistry.
- F. Kovač, član uredniškega odbora (*Member of the Editorial Board*), Glasnik hemičara i tehnologa Bosne i Hercegovine.
- K. Kranjc, član uredniškega sveta (*Associate Editor*), Acta Chimica Slovenica
- 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.
- F. Požgan, član uredniškega odbora (*Member of the Editorial Board*), Recent patents on catalysis (od 2012).
- 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:
  - Member of the Scientific Committee, European Colloquia of Heterocyclic Chemistry;
  - Member of the Scientific Committee, Blue Danube Symposia of Heterocyclic Chemistry;
  - Member of the Board of Electronic Journal ARKIVOC;
  - Member of the Advisory Board, Advances in Heterocyclic Chemistry
  - Member of the Scientific Committee, TRAMECH Transmediterranean Symposia on Heterocyclic Chemistry;
  - Member of the International Advisory Committee of the IBN SINA International Conferences on Pure and Applied Heterocyclic Chemistry;
  - Member of the Scientific Committee of Eurasian Meetings on Heterocyclic Chemistry
  - Member of the Advisory Board, Trends in Heterocyclic Chemistry
  - Head of the Unit for International Cooperation and Scientific Coordination, Slovenian Academy of Sciences and Arts, Ljubljana, Slovenia
  - 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
  - 1998-2004 Member of the Scientific Advisory Board of the Organization for the Prohibition of Chemical Weapons, The Hague, The Netherlands
  - Member of the Editorial Board, International Journal of Organic Chemistry, [Print ed.]. Irvine, CA: Scientific Research Pub.
  - Member of the Editorial Board, Journal of Heterocyclic Chemistry, Provo, Utah, etc.: HeteroCorporation.
  - Member of the Editorial Board, Molecules, Berlin: Springer; Basel: Molecular Diversity Preservation International

- Member of the Editorial Board, Targets in Heterocyclic Systems Chemistry and Properties. Roma: Società Chimica Italiana
- Member of the Editorial Board, Trends in Heterocyclic Chemistry. Trivandrum: Research Trends
- Member of the Editorial Board, Croatica Chemica Acta. Zagreb: Hrvatsko kemijsko društvo
- Chairman of the Advisory Editorial Board, Acta Chimica Slovenica
- Fellow, Royal Society of Chemistry, London, Great Britain
- Honorary Member, Hungarian Chemical Society
- 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 Spectrum BX FTIR Perkin-Elmer / *IR Spectrometer Spectrum BX FTIR Perkin-Elmer*
- IR spektrometer Bruker FTIR Alpha Platinum ATR/ *IR Spectrometer Bruker FTIR Alpha Platinum ATR* (v sklopu CO EN-FIST)
- 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 Paralel 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 Syntesizer 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* (v sklopu CO EN-FIST)
- Fotokemijski reaktor Buckinghamshire model MLU/8 / *Photochemical Reactor Buckinghamshire Model MLU/8*
- NMR spektrometer – Bruker Avance DPX 300 / *NMR Spectrometer – Bruker Avance DPX 300* (v sklopu IC FKKT UL)
- NMR spektrometer – Bruker Avance Ultrashield 500 plus / *NMR Spectrometer – Bruker Avance Ultrashield 500 plus* (v sklopu IC FKKT UL)
- LC MS sistem Agilent 6224 Accurate Mass TOF LC/MS (v sklopu IC FKKT UL)
- 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*
- Laboratorijski reaktor (1 L) Radleys Reactor-Ready Lab Reactor / Laboratory Reactor (1 L) Radleys Reactor-Ready Lab Reactor
- Pretočni Hidrogenator H-Cube® / *Flow Hydrogenator H-Cube®* (v sklopu CO EN-FIST)
- Industrijski rotavapor Büchi R-220 (20 L) z recirkulatorjem / *Industrial rotavapor Büchi R-220 (20 L) with recirculator* (v sklopu CO EN-FIST)

## **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-*

Projekt RRP11: Spojine za diagnostiko in terapijo v medicini.

Direktor: prof. dr. Andrej Petrič

Raziskovalca: doc. dr. Bogdan Štefane in doc. dr. Franc Požgan

Projekt RRP18: Organska sinteza

Direktor: prof. dr. Jurij Svete

Raziskovalca: akad. prof. dr. Branko Stanovnik in Benjamin Prek

## **RAZISKOVALNI PROGRAMI IN PROJEKTI / RESEARCH PROGRAMMES AND PROJECTS**

### **RAZISKOVALNI PROGRAMI / RESEARCH PROGRAMMES**

P1-0179 Sinteze in transformacije organskih spojin. Novi reagenti v stereoselektivni in regioselektivni sintezi aminokislin kot intermediatov v organski sintezi / *Syntheses and Transformations of Organic Compounds. New Reagents in Stereoselective and Regioselective Synthesis of Amino Acids as Intermediates in Organic Synthesis*  
Nosilec / *Principal Researcher*: B. Stanovnik

P1-0230 Organska kemija: Sinteza, struktura in aplikacija / *Organic Chemistry: Synthesis, Structure, and Application*  
Nosilec / *Principal Researcher*: M. Kočvar

### **TEMELJNI PROJEKTI / BASIC RESEARCH**

J1-6254 Reaktivni intermediati pri transformacijah organskih spojin / *Reactive Intermediates in the Transformation of Organic Compounds*  
Nosilec / *Principal Researcher*: B. Šket

### **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 CM0905                      *Organocatalysis, ORCA (2011-)*  
Član upravnega odbora / *Member of the Management Committee*:  
M. Kočevar  
Član delovne skupine / *Working group member*: WG4 Interdisciplinary  
aspects: M. Kočevar

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

### 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–Romunija              *Načrtovanje novih biološko aktivnih peptidov / Innovative design of*  
*Slovenia–Romania*                      *new biologically active peptide systems with specific properties*  
Nosilec / *Principal Researcher*: A. Petrič

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*  
*Slovenia–Argentina*                      *za trajnostno organsko sintezo / Functionalization of Selected Organic Sub-*  
*strates and Development of Strategies for a Sustainable Organic Synthesis*  
Nosilec / *Principal Researcher*: S. Polanc



Slovenija–Češka <i>Slovenia–Czech Republic</i>	Nov pristop k antibakterijsko aktivnim molekulam / <i>New Approach to Antibacterial Active Molecules</i> Nosilec / <i>Principal Researcher</i> : S. Polanc
Slovenija–Hrvaška <i>Slovenia–Croatia</i>	Kompleksi platine in diazenkarboksamidov kot potencialne učinkovine proti raku / <i>Platinum complexes with diazenecarboxamides as potential anti-cancer drugs</i> Nosilec / <i>Principal Researcher</i> : J. Košmrlj
Slovenija– Bosna in Hercegovina <i>Slovenia– Bosnia and Herzegovina</i>	Kemijsko raziskovanje fenolnih kislin iz nekaterih rastlin iz družine Lamiaceae in njihova modifikacija z namenom povečanja biološkega delovanja / <i>Chemical studies of phenolic acids from the species of the family Lamiaceae in relation to enhanced biological activity via their modifications</i> Nosilec / <i>Principal Researcher</i> : F. Požgan

## **DRUGE OBLIKE MEDNARODNEGA SODELOVANJA / OTHER FORMS OF INTERNATIONAL COOPERATION**

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

- Dr. Georg Dahmann, Boehringer-Ingelheim Pharma, Biberach (Riss), Germany: *Boehringer-Ingelheim: Chemistry and Diversity*, May 2012.
- Professor Albrecht Berkessel, *Department of Chemistry, University of Cologne, Germany*, Organocatalysts and Enzymes: Complementary and Cooperative, June 2012.
- Dr. Balazs Pinter, Department of General Chemistry, Free University Brussels (VUB), Brussels, Belgium: *I. Halogen bonding: origins and manifestations. II. Ligand redox non-innocence: tracking the structural and electronic requirements*. September 2012.
- Prof. Dr. Frank De Proft, Department of General Chemistry, Free University Brussels (VUB), Brussels, Belgium: *Conceptual and Computational Density Functional Theory in the Study of Chemical Reactivity*, Oktober 2012.

### **Pogodbno mednarodno sodelovanje / *International Contractual Cooperation***

- Pogodba o sodelovanju med FKKT in Inštitutom Ruder Bošković iz Zagreba (2001 – ) na skupnem projektu: 'Diazeni kot potencialne antitumorne učinkovine; celični odgovor na genotoksične agense'/*Diazenes as potentially antitumor agents: cell response to genotoxic agents*. Nosilca / *Principal Researchers*: Zagreb – dr. Maja Osmak, znanstvena svetnica; Ljubljana – S. Polanc.

### **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/*Development of molecular sensors for the application in diagnosing Alzheimer disease* (1992-).

B. Plesničar, J. Cerkovnik

- Z Univerzo Strathclyde (Glasgow, Velika Britanija) z raziskovalno skupino dr. Tella Tuttle-a na področju kvantno-mehanskih izračunov/*Quantum mechanical calculations* (2004-).

S. Polanc

- S Karlovo univerzo v Pragi in sicer s Fakulteto za farmacijo Hradec Kralove; sodelovanje z raziskovalnima skupinama prof. Jarmile Vinšove in prof. Martina Doležala na novih pristopih k antibakterijsko aktivnim molekulam/*New approaches to antibacterial active molecules* (2005–).

B. Stanovnik, J. Svete

- Z Univerzo v Urbino z raziskovalno skupino prof. Orazia Antonia Attansija na adicijah enamino estrov/*Additions of enamine esters* (1998-).
- Z Univerzov Bariju z raziskovalno skupino prof. Saveria Floria na sintezi oksaziridinov iz enamino estrov/*Syntheses of oxaziridine esters* (2000-).
- Z Univerzo v Ulmu z raziskovalno skupino prof. Gerharda Maasa na (2+2) cikloadicijah elektronsko revnih acetilenov na enamino ketone in enamino estre/(2+2) *cycloadditions of electrone-poor acetylenes on enamino ketones and enamino esters*. (2006-).
- Z Univerzo v Aalenu z raziskovalno skupino prof. Willija Kantelehnerja na (2+2) cikloadicijah elektronsko revnih acetilenov na enamino ketone in enamino estre/(2+2) *cycloadditions of electrone-poor acetylenes on enamino ketones and enamino esters*. (1999-).
- Z Univerzo v Pardubicah z raziskovalno skupino prof. dr. Petra Šimuneka na kemiji enamionov/*Enamine chemistry*.

B. Šket

- Z Univerzo v Baslu z raziskovalno skupino prof. Jakoba Wirza na področju organske fotokemije in bliskovne laserske fotolize /*Flash laser photolysis*, 2000-).

J. Košmrlj

- Z Department of Chemistry, Faculty of Technology, Tomas Bata University in Zlin: sodelovanje z raziskovalno skupino doc. Ing. Stanislava Kafke na pretvorbah kinolindionov/*Quinolindione transformations* (1998-).
- S Scientific Institute of Public Health, Immunology & Vaccinology: sodelovanje z raziskovalno skupino dr. Kris Huygen na novih antibakterijsko aktivnih molekulah/*New molecules with active antibacterial effects* (2011-).
- Z Institut für Chemie und Biochemie – Anorganische Chemie, Freie Universität Berlin: sodelovanje z raziskovalno skupino prof. Biprajita Sarkarja na sintezi novih ligandov na osnovi 1,2,3-triazola in njihovih kompleksov s kovinami prehoda/*Synthesis of new ligands based on 1,2,3-triazole and their complexes with transition metals* (2011-).

## BIBLIOGRAFIJA 2012 / REFERENCES 2012

### IZVIRNI ZNANSTVENI ČLANEK / ORIGINAL SCIENTIFIC ARTICLE

- OK1.** BAŠKOVČ, Jernej, DAHMANN, Georg, GOLOBIČ, Amalija, GROŠELJ, Uroš, KOČAR, Drago, STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. Diversity-oriented synthesis of 1-substituted 4-aryl-6-oxo-1,6-dihydropyridine-3-carboxamides. *ACS combinatorial science*, 2012, vol. 14, no. 9, str. 513-519, doi: 10.1021/co3000709. [COBISS.SI-ID 36122373]
- OK2.** FISTER, Andrej, BARRIO, Jorge R., PETRIČ, Andrej. Procedures for preparation and radiolabeling of a 3-fluoropyrrolidine-containing FDDNP analog. *Acta chim. slov.* [Tiskana izd.], 2012, vol. 59, no. 2, str. 431-435. <http://acta.chem-soc.si/59/59-2-431.pdf>. [COBISS.SI-ID 36029957]
- OK3.** GROŠELJ, Uroš, KRALJ, David, WAGGER, Jernej, DAHMANN, Georg, STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. Synthesis of 3-(2-aminoethyl)-5-hydroxy-1H-pyrazole derivatives. *ARKIVOC*. [Print ed.], 2012, no. III, str. 49-65. [COBISS.SI-ID 35571717]
- OK4.** KLEMENČIČ, Danijela, TOMŠIČ, Brigita, KOVAČ, Franci, SIMONČIČ, Barbara. Antimicrobial cotton fibres prepared by in situ synthesis of AgCl into a silica matrix. *Cellulose (Lond.)*, 2012, vol. 19, no. 5, str. 1715-1729, doi: 10.1007/s10570-012-9735-z. [COBISS.SI-ID 36032773]
- OK5.** GROŠELJ, Uroš, GOLOBIČ, Amalija, STARE, Katarina, SVETE, Jurij, STANOVNIK, Branko. Synthesis and structural elucidation of novel camphor-derived thioureas. *Chirality (N. Y. N. Y.)*, 2012, vol. 24, no. 4, str. 307-317, doi: 10.1002/chir.21999. [COBISS.SI-ID 35831045]

- OK6.** GROŠELJ, Uroš, RIČKO, Sebastijan, SVETE, Jurij, STANOVNIK, Branko. Synthesis of 2-(3-(3, 5-bis(trifluoromethyl)phenyl)thioureido)- 3-((dimethylamino)methyl)camphor organocatalysts. *Chirality (N. Y. N. Y.)*, 2012, vol. 24, no. 5, str. 412-419, doi: 10.1002/chir.22035. [COBISS.SI-ID 35926533]
- OK7.** GROŠELJ, Uroš, SEVŠEK, Alen, RIČKO, Sebastijan, GOLOBIČ, Amalija, SVETE, Jurij, STANOVNIK, Branko. Synthesis and structural characterization of novel camphor-derived amines. *Chirality (N. Y. N. Y.)*, 2012, vol. 24, no. 10, str. 778-788, doi: 10.1002/chir.22069. [COBISS.SI-ID 36227077]
- OK8.** ČAVAR, Sanja, KOVAČ, Franci, MAKSIMOVIĆ, Milka. Evaluation of the antioxidant activity of a series of 4-methylcoumarins using different testing methods. *Food chem.* [Print ed.], 2012, vol. 133, no. 3, str. 930-937, doi: 10.1016/j.foodchem.2012.02.006. [COBISS.SI-ID 35828229]
- OK9.** ČAVAR, Sanja, KOVAČ, Franci. Three novel 4-methylcoumarin derivatives. *Glas. hem. tehnol. Bosne Herceg.*, 2012, vol. 38, no. 1, str. 1-4. [COBISS.SI-ID 35827461]
- OK10.** JEREB, Marjan. Highly atom-economic, catalyst- and solvent-free oxidation of sulfides into sulfones using 30% aqueous H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>. *Green chem. (Print)*, 2012, vol. 14, no. 11, str. 3047-3052, doi: 10.1039/C2GC36073J. [COBISS.SI-ID 36306437]
- OK11.** ŠPORAR, Jože, BEZENŠEK, Jure, URŠIČ, Uroš, GOLOBIČ, Amalija, SVETE, Jurij, STANOVNIK, Branko. Enamino esters in the synthesis of heterocyclic systems. Transformation of dimethyl acetone-1,3-dicarboxylate into polysubstituted 1, 6-naphthyridine-8-carboxylates. *Heterocycles*, 2012, vol. 84, no. 1, str. 449-459, doi: 10.3987/COM-11-S(P)4. [COBISS.SI-ID 35625733]
- OK12.** MUŠIČ, Irena, VERČEK, Bojan. Ring-opening reactions of 2-phenyl-1'H,5H-spiro[oxazole-4,2'-quinoxalin]-3'(4'H)-ones. *Heterocycles*, 2012, vol. 86, issue 1, str. 719-725, doi: 10.3987/COM-12-S(N)25. [COBISS.SI-ID 36171525]
- OK13.** STRLE, Drago, ŠTEFANE, Bogdan, NAHTIGAL, Uroš, ZUPANIČ, Erik, POŽGAN, Franc, KVASIC, 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.], 2012, vol. 12, issue 5, str. 1048-1057, doi: 10.1109/JSEN.2011.2168203. [COBISS.SI-ID 25306919]
- OK14.** KRANJC, Krištof, JURANOVIČ, Amadej, KOČEVAR, Marijan, PERDIH, Franc. Synthesis and crystal structures of methyl 3-(benzoylamino)-6-methyl-2-oxo-2H-pyran-5-carboxylate and N-[5-(3,4-dimethoxyphenyl)-6-methyl-2-oxo-2H-pyran-3-yl] benzamide. *J. chem. crystallogr.*, 2012, vol. 42, no. 5, str. 443-449, doi: 10.1007/s10870-011-0266-5. [COBISS.SI-ID 35686405]
- OK15.** ČAVAR, Sanja, KOVAČ, Franci. Oxidative transformations of 4-methylcoumarins using dimethyldioxirane. *J. heterocycl. chem.*, 2012, vol. 49, issue 2, str. 261-266. <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/jhet.826/pdf>, doi: 10.1002/jhet.826. [COBISS.SI-ID 35827973]
- OK16.** KRIVEC, Marko, GAZVODA, Martin, KRANJC, Krištof, POLANC, Slovenko, KOČEVAR, Marijan. A way to avoid using precious metals : the application of high-surface activated carbon for the synthesis of isoindoles via the Diels-Alder reaction of 2H-pyran-2-ones. *J. org. chem.*, 2012, vol. 77, no. 6, str. 2857-2864, doi: 10.1021/jo3000783. [COBISS.SI-ID 35801349]
- OK17.** ČRČEK, Bojana, BAŠKOVČ, Jernej, GROŠELJ, Uroš, KOČAR, Drago, DAHMANN, Georg, STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. Parallel synthesis of 2-substituted 6-(5-oxo-1-phenylpyrrolidin-3-yl)pyrimidine-5-carboxamides. *Molecules (Basel)*, 2012, vol. 17, no. 5, str. 5363-5384, doi: 10.3390/molecules17055363. [COBISS.SI-ID 35944709]
- OK18.** JURANOVIČ, Amadej, KRANJC, Krištof, POLANC, Slovenko, PERDIH, Franc, KOČEVAR, Marijan. Diels-Alder reaction of fused pyran-2-ones with ethyl vinyl ether. *Monatsh. Chem.*, 2012, vol. 143, no. 5, str. 771-777, doi: 10.1007/s00706-012-0734-4. [COBISS.SI-ID 35818757]
- OK19.** MARAŠ, Nenad, POLANC, Slovenko, KOČEVAR, Marijan. Ring-opening reactions of 1,4-diazabicyclo[2.2.2]octane (DABCO) derived quaternary ammonium salts with phenols and related nucleophiles. *Organic and Biomolecular Chemistry*. [Print ed.], 2012, vol. 10, no. 6, str. 1300-1310, doi: 10.1039/C1OB06676E. [COBISS.SI-ID 35543813]
- OK20.** PETRIČ, Andrej, JOHNSON, Scott A., PHAM, Hung V., LI, Ying, ČEH, Simon, GOLOBIČ, Amalija, AGDEPPA, Eric D., TIMBOL, Gerald, LIU, Jie, KEUM, Gyochang, SATYAMURTHY, Nagichettiar, KEPE, Vladimir, HOUK, Kendall N., BARRIO, Jorge R. Dicyanovinyl-naphthalenes for neuroimaging of amyloids and relationships of electronic structures and geometries to binding affinities. *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.*, 2012, vol. 109, no. 41, str. 16492-16497, doi: 10.1073/pnas.1214134109. [COBISS.SI-ID 36232965]
- OK21.** ŠTEFANE, Bogdan, POŽGAN, Franc, SOSIČ, Izidor, GOBEC, Stanislav. A microwave-assisted nucleophilic substitution reaction on a quinoline system: the synthesis of amino analogues of nitroxoline : Bogdan Štefane ... [et al.]. *Tetrahedron lett.* [Print ed.], 2012, vol. 53, no. 15, str. 1964-1967. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0040403912002274?v=s5>, doi: 10.1016/j.tetlet.2012.02.017. [COBISS.SI-ID 3200625]
- OK22.** LV, Jun, LIU, Qiancai, TANG, Jie, PERDIH, Franc, KRANJC, Krištof. A facile synthesis of indolo[3,2,1-j][kappa]carbazoles via palladium-catalyzed intramolecular cyclization. *Tetrahedron lett.* [Print ed.], 2012, vol. 53, no. 39, str. 5248-5252, doi: 10.1016/j.tetlet.2012.07.093. [COBISS.SI-ID 36145413]
- OK23.** BEZENŠEK, Jure, GROŠELJ, Uroš, STARE, Katarina, SVETE, Jurij, STANOVNIK, Branko. Transformations of enamines. A simple one-pot synthesis of imidazolone derivatives. *Tetrahedron*. [Print ed.], 2012, vol. 68, no. 2, str. 516-522, doi: 10.1016/j.tet.2011.11.013. [COBISS.SI-ID 35586309]
- OK24.** ŠTERK, Damjan, ČASAR, Zdenko, JUKIČ, Marko, KOŠMRLJ, Janez. Concise and highly efficient approach to three key pyrimidine precursors for rosuvastatin synthesis. *Tetrahedron*. [Print ed.], 2012, vol. 68, issue 9, str. 2155-2160, doi: 10.1016/j.tet.2012.01.013. [COBISS.SI-ID 1487196]
- OK25.** JEREB, Marjan. Highly atom economical uncatalysed and [sub]2-catalysed silylation of phenols, alcohols and carbohydrates, using HMDS under solvent-free reaction conditions (SFRC). *Tetrahedron*. [Print ed.], 2012, vol. 68, no. 20, str. 3861-3867, doi: 10.1016/j.tet.2012.03.040. [COBISS.SI-ID 35924485]
- OK26.** BEZENŠEK, Jure, PREK, Benjamin, GROŠELJ, Uroš, KASUNIČ, Marta, SVETE, Jurij, STANOVNIK, Branko. A simple metal-free synthesis of 2-substituted pyridine-4,5-dicarboxylates and their N-oxides. *Tetrahedron*. [Print ed.], 2012, vol. 68, no. 24, str. 4719-4731, doi: 10.1016/j.tet.2012.04.013. [COBISS.SI-ID 35958277]
- OK27.** POŽGAN, Franc, ŠTEFANE, Bogdan, KIDEMET, Davor, SMODIŠ, Janez, ZUPET, Rok. The synthesis of 12-membered macrocycles containing a C1-C8 alkene unit via ring-closing metathesis. *Tetrahedron*. [Print ed.], 2012, vol. 68, no. 25, str. 5081-5086, doi: 10.1016/j.tet.2012.04.043. [COBISS.SI-ID 35927045]
- OK28.** GORJANC, Marija, KOVAČ, Franci, GORENŠEK, Marija. The influence of vat dyeing on the adsorption of synthesized colloidal silver onto cotton fabrics. *Tex. res. j.*, 2012, vol. 82, no. 1, str. 62-69, ilustr., doi: 10.1177/0040517511420754. [COBISS.SI-ID 2680432]

**KRATKI ZNANSTVENI PRISPEVEK / SHORT SCIENTIFIC ARTICLE**

- OK29.** KAFKA, Stanislav, PEVEC, Andrej, PROISL, Karel, KIMMEL, Roman, KOŠMRLJ, Janez. 3-Ethyl-4-hydroxy-8-methoxyquinolin-2(1H)-one. *Acta crystallogr., E*, 2012, vol. E68, no. 11, str. o3198 (6 str. suppl.), doi: 10.1107/S1600536812043279. [COBISS.SI-ID 36281605]
- OK30.** KAFKA, Stanislav, PEVEC, Andrej, PROISL, Karel, KIMMEL, Roman, KOŠMRLJ, Janez. 3-Ethyl-3-hydroxy-8-methoxyquinoline-2,4(1H,3H)-dione monohydrate. *Acta crystallogr., E*, 2012, vol. E68, no. 11, str. o3199-o3200 (7 str. suppl.), doi: 10.1107/S1600536812043280. [COBISS.SI-ID 36282117]

**OBJAVLJENI ZNANSTVENI PRISPEVEK NA KONFERENCI / PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTION**

- OK31.** BAJT, Oliver, ŠKET, Boris. Photochemical degradation of selected organic pollutants in natural waters. V: 7th European Meeting on Solar Chemistry and Photocatalysis, Environmental applications, 17-20 June 2012, Porto, Portuga. *Book of proceedings*. Porto: Sociedade Portuguesa de Quimica, 2012, str. 728-729, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 2622287]
- OK32.** STRLE, Drago, TRONTELJ, Janez, ŠTEFANE, Bogdan, MUŠEVIČ, Igor. Sensor system for vapor trace detection of explosives. V: IEEE SENSORS 2012, October 28-31, 2012, Taipei, Taiwan. *IEEE SENSORS 2012 proceedings*. Piscataway: Institute of Electrical and Electronics Engineers: = IEEE, cop. 2012, str. 80-83, ilustr. [COBISS.SI-ID 9504596]
- OK33.** STRLE, Drago, ŠTEFANE, Bogdan, MUŠEVIČ, Igor. Detecting vapor traces of explosives using a self-assembled mono layer on a surface-modified MEMS capacitor and CMOS electronics. V: 7th IEEE International Conference on Nano/Micro Engineered and Molecular Systems, Kyoto, Japan, 5-8 March 2012. *IEEE-NEMS 2012*. [Piscataway]: Institute of Electrical and Electronics Engineers: = IEEE, cop. 2012, str. 86-89, ilustr. [COBISS.SI-ID 9003092]
- OK34.** JURANOVIČ, Amadej, KOČEVAR, Marijan. Diels-Alder reaction of 2H-pyran-2-ones and fused pyran-2-ones with vinyl-group-containing dienophiles: [lecture]. V: BALÁZS, Endrődi (ur.). XXXV. Kémiai Előadói Napok, Szegedi Akadémiai Bizottság Székháza, Szeged, 2012. október 29-31. *Program és előadás-összefoglalók: KEN: Magyar Kémikusok Egyesülete Csongrád Megyei: Csoportja és a Magyar Kémikusok Egyesülete rendezvénye*. Szeged: JATE Press, 2012, str. 80-84. [COBISS.SI-ID 36307717]
- OK35.** SERŠEN, Sara, KLJUN, Jakob, ŠTEFANE, Bogdan, POŽGAN, Franc, TUREL, Iztok. Nove rutenijeve(II) organokovinske spojine s fluoriranimi β-diketonati = Novel ruthenium(II) organometallic compounds with fluorinated β-diketonates: [predavanje]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. [1-5]. [COBISS.SI-ID 36196613]
- OK36.** ŠTEFANE, Bogdan, POŽGAN, Franc. Sinteza 9- do 12-členskih heterocikličnih obročev z alkeno metatezo = Synthesis of 9- to 12-membered heterocycles applying ring-closing metathesis reaction. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. [1-7]. [COBISS.SI-ID 36198149]
- OK37.** KRIVEC, Marko, KRANJC, Krištof, POLANC, Slovenko, KOČEVAR, Marijan. Sinteza izoindolov iz 2H-piran-2-onov in derivatov maleimida v prisotnosti aktivnega oglja: [predavanje]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. 1-7. [COBISS.SI-ID 36198917]
- OK38.** POŽGAN, Franc, ŠTEFANE, Bogdan. Priprava disubstituiranih linearnih C[spodaj]8-alkenov z rutenij-katalizirano metatezno reakcijo = Preparation of disubstituted linear C[sub]8-alkenes by ruthenium-catalyzed metathesis reaction: [predavanje]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. [1-8]. [COBISS.SI-ID 36197637]
- OK39.** JURANOVIČ, Amadej, KRANJC, Krištof, KEGLEVICH, G., POLANC, Slovenko, KOČEVAR, Marijan. Diels-Alder reaction of electron deficient 2H-pyran-2-ones with vinyl moiety containing dienophiles and characterization of the intermediate products: [preface section lecture]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. 1-13. [COBISS.SI-ID 36198405]
- OK40.** STRLE, Drago, ŠTEFANE, Bogdan, MUŠEVIČ, Igor. Design of smart sensing system for vapour trace detection of explosives. V: GESSNER, T. (ur.). 6th International Conference & Exhibition on Integration Issues of Miniaturized Systems - MEMS, NEMS, ICs and Electronic Components, Zurich, Switzerland, 21-22 March 2012. *Smart systems integration*. Berlin; Offenbach: VDE Verlag, cop. 2012, str. 1-8, ilustr. [COBISS.SI-ID 9034324]

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

- OK41.** STANOVNIK, Branko, BEZENŠEK, Jure, PREK, Benjamin, GROŠELJ, Uroš, SVETE, Jurij. Thermal [2+2]cycloadditions. Metal-free synthesis of polysubstituted heterocycles: [invited lecture]. V: *25th European colloquium on heterocyclic chemistry: August 13th - 17th, 2012*. Reading, Velika Britanija. Book-of-Abstracts.com, cop. 2012, str. IL-12. [COBISS.SI-ID 36146693]
- OK42.** STANOVNIK, Branko. Enaminones in organic synthesis from amino acids via heterocyclic compounds to natural products: [plenary lecture]. V: 1st International Conference on Science Diplomacy and Developments in Chemistry, 24-26 November 2012, Alexandria-Egypt. *Book of abstracts*. [S. l.: s. n.], 2012, str. 62. [COBISS.SI-ID 36359941]
- OK43.** KRANJC, Krištof, KOČEVAR, Marijan. Regio- and stereoselectivity of cycloadditions of 2H-pyran-2-one derivatives: [invited lecture]. V: *FloHet-2012 Florida Heterocyclic and Synthetic Conference: March 4th - March 7th, 2012*. [S. l.: s. n.], 2012, str. 41. [COBISS.SI-ID 35848197]
- OK44.** STANOVNIK, Branko. Thermal [2+2] cycloadditions of electron-poor acetylenes to enaminones and further transformations of polysubstituted butadienes: [plenary lecture]. V: *XXXIV convegno Nazionale Divisione di Chimica Organica: Università degli Studi di Pavia, 10-14 settembre 2012*. [S. l.: s. n.], 2012, str. 26. [COBISS.SI-ID 36222213]

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

- OK45.** ŠTEFANE, Bogdan, POŽGAN, Franc. Asymmetric hydrogenation and transfer hydrogenation of ketones. V: KARAMÉ, Iyad (ur.). *Hydrogenation*. Rijeka: InTech, cop. 2012, str. 31-68, doi: dx.doi.org/10.5772/47752. [COBISS.SI-ID 36250117]



- OK46.** MICHELET, Véronique, RATOVELOMANANA-VIDAL, V., PÂRVULESCU, Vasile I., KOČEVAR, Marijan. Recent advances in the synthesis and catalytic hydrogenation of dehydroamino acid derivatives and bicyclo[2.2.2]octenes. V: ANDERSSON, Pher G. (ur.). *Innovative catalysis in organic synthesis : oxidation, hydrogenation, and C-X bond forming reactions*. Weinheim: Wiley-VCH, cop. 2012, str. 131-151. [COBISS.SI-ID 35934469]

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

- OK48.** KOŠMRLJ, Berta, MOZER, Alenka, PETRIČEK, Saša, SMRDU, Andrej, ZMAZEK, Boris, WISSIAK GRM, Katarina Senta, KRAFOGEL, Bernarda (ur.), TRKOV, Joži (ur.). *Kemija, Zbirka maturitetnih nalog z rešitvami 2005-2010*, (Maturitetni izpiti). 2. izd. Ljubljana: Državni izpitni center, 2011 [i. e.] 2012. 297 str., ilustr. ISBN 978-961-6322-96-6. [COBISS.SI-ID 11493281]
- OK49.** DOLENC, Darko, ŠKET, Boris. *Kemija za gimnazije 3, Učbenik za 3. letnik gimnazij*, (Tako lahko). El. izd. Ljubljana: DZS, 2012. ISBN 978-961-02-0453-4. <http://trafika.klika.si>. [COBISS.SI-ID 263873024]

## DRUGO UČNO GRADIVO / OTHER EDUCATIONAL MATERIAL

- OK50.** JEREB, Marjan. *Laboratorijske vaje iz zelene kemije*. 1. izd. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2012. 91 str., ilustr. ISBN 978-961-6756-30-3. [COBISS.SI-ID 259670016]
- OK51.** PETRIČ, Andrej. *Moderne NMR metode : interno študijsko gradivo : za izbirni predmet magistrskega programa Kemija*. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za organsko kemijo, 2012. 136 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 36340997]
- OK52.** CERKOVNIK, Janez. *Sintezne tehnike v organski kemiji : vaje : interno študijsko gradivo za študente Kemijske tehnologije*. Ljubljana: Univ. v Ljubljani, Fak. za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2012. 1 el. optični disk, ilustr. [COBISS.SI-ID 36279557]
- OK53.** GLAŽAR, Saša A., GRAUNAR, Mojca, MODEC, Barbara, ŠKET, Barbara, ŠKET, Boris. *Kemija danes : učenje z nalogami : zbirka nalog za 8. in 9. razred devetletne osnovne šole*, (Raziskovalec 8), (Raziskovalec 9). 1. izd. Ljubljana: DZS, 2012. 184 str., ilustr. ISBN 978-86-341-3645-6. [COBISS.SI-ID 260017920]

## PATENTNA PRIJAVA / PATENT APPLICATION

- OK54.** BEZENŠEK, Jure, MEŽNAR, Eva, STRLE, Gregor, GROŠELJ, Uroš, SVETE, Jurij, STANOVNIK, Branko. *Postopek priprave imidazolonskih derivatov : patentna prijava št. P-201200183*. Ljubljana: Urad Republike Slovenije za intelektualno lastnino, 5. 6. 2012. 26 str., ilustr. [COBISS.SI-ID 36113413]
- OK55.** NOVAK, Ana, TESTEN, Ana, BEZENŠEK, Jure, GROŠELJ, Uroš, STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. *Sinteza mimetikov beta razvoja : patentna prijava št. P-201200183*. Ljubljana: Urad Republike Slovenije za intelektualno lastnino, 24. 5. 2012. 63 str., ilustr. [COBISS.SI-ID 36113669]

## PATENT / PATENT

- OK56.** OSMAK, Maja, POLANC, Slovenko, ČIMBORA, Tamara, BROZOVIĆ, A., KOČEVAR, Marijan, MAJCE, Vita, ALIČ, Branko. *Analogues of 1, 3-bis(4-nitrophenyl)triazenes, their pharmaceutically acceptable salts and N-acyl derivatives for tumor treatment : patent : US 8217022 (B2), 2012-07-20*. [S. l.]: World Intellectual Property Organization, 2012. 7 str., ilustr. [COBISS.SI-ID 30639621]
- OK57.** TUREL, Iztok, KLJUN, Jakob, ŠTEFANE, Bogdan. *Postopek za pripravo racemnega nikotina : patent : SI 23573 (A), 2012-06-29*. Ljubljana: Urad Republike Slovenije za intelektualno lastnino, 2012. 7 str. [COBISS.SI-ID 34764549]

## PREDAVANJE NA TUJI UNIVERZI / INVITED LECTURE AT FOREIGN UNIVERSITY

- OK58.** KRANJC, Krištof. *[2H-Pyran-2-ones and their fused derivatives as dienes in Diels-Alder reactions : East China Normal University, Shanghai, China, May 24th, 2012]*. [2012]. [COBISS.SI-ID 35998469]
- OK59.** KOŠMRLJ, Janez. *[Collaboration between LEK Pharmaceuticals, d.d., Sandoz Development Center Slovenia and Department of Organic Chemistry, UL FKKT : Sandoz GmbH, Kundl, Austria, 28. 11. 2012]*. [2012]. [COBISS.SI-ID 36376069]
- OK60.** KOŠMRLJ, Janez. *[Diazene-metal conjugates for potential anti-cancer treatment : Ruđer Bošković Institute, 13. 12. 2012, Zagreb]*. [2012]. [COBISS.SI-ID 36394757]
- OK61.** STANOVNIK, Branko. *Enaminones in organic synthesis: from [beta]-dimethylamino-[alpha],[beta]-didehydro-[alpha]-amino acids via heterocyclic compounds to natural products and their analogs : [Hochschule Aalen, Technik und Wirtschaft, Fakultät Chemie, 24. April 2012]*. Aalen, 2012. [COBISS.SI-ID 35926789]
- OK62.** STANOVNIK, Branko. *[New synthetic methodologies: from amino acids via heterocyclic systems to natural products : Consejo Superior de Investigaciones Científicas, Instituto de Química Médica, Madrid, June 5th, 2012]*. [2012]. [COBISS.SI-ID 36031237]
- OK63.** STANOVNIK, Branko. *[New synthetic methodologies: from amino acids via heterocyclic systems to natural products : Real Sociedad Espaneda de Química in Universidad de Sevilla, Sevilla, June 6th, 2012]*. [2012]. [COBISS.SI-ID 36031493]
- OK64.** STANOVNIK, Branko. *[New synthetic methodologies: from amino acids via heterocyclic systems to natural products : Universidad de Alicante, Alicante, June 13th, 2012]*. [2012]. [COBISS.SI-ID 36032005]
- OK65.** STANOVNIK, Branko. *[New synthetic methodologies: from amino acids via heterocyclic systems to natural products : Universidad de Granada, Granada, June 11th, 2012]*. [2012]. [COBISS.SI-ID 36031749]
- OK66.** ŠTEFANE, Bogdan. *[Olefin metathesis as an industrial synthetic step: yes or no? : Prirodno-matematički fakultet Sarajevo, 25. 6. 2012]*. [2012]. [COBISS.SI-ID 36040197]
- OK67.** KOČEVAR, Marijan. *[Transformations of 2H-pyran-2-ones and their fused systems : Department of Organic Chemistry and Technology, Budapest University of Technology and Economics, Budapest, Hungary, June 28th, 2012]*. [2012]. [COBISS.SI-ID 36039941]
- OK68.** POŽGAN, Franc. *[Transition-metal-catalyzed selective carbon-carbon bond formations : Prirodno-matematički fakultet Sarajevo, 25. 6. 2012]*. [2012]. [COBISS.SI-ID 36040453]

**VABLJENO PREDAVANJE NA KONFERENCI BREZ NATISA / UNPUBLISHED INVITED CONFERENCE LECTURE**

**OK69.** STANOVNIK, Branko. [*Toplogredni plini: naravni viri metana in njegov vpliv na podnebne spremembe = Greenhouse gases: the natural sources of methane and its impact on climate changes : vabljeno predavanje na simpoziju Vidmarjev dan, Ljubljana, 21. junij, 2012 J.*] [2012]. [COBISS.SI-ID 36032261]

**UREDNIK / EDITORSHIP**

**OK70.** *Topics in heterocyclic chemistry*. Košmrlj, Janez (gostujoči urednik 2012). Heidelberg; Berlin: Springer. ISSN 1861-9282. <http://springerlink.metapress.com/content/120013/>. [COBISS.SI-ID 33679621].



# KATEDRA ZA ANORGANSKO KEMIJSKO TEHNOLOGIJO IN MATERIALE

## CHAIR OF INORGANIC CHEMICAL TECHNOLOGY AND MATERIALS

### PREDSTOJNIK KATEDRE / HEAD

red. prof. dr. Jadran Maček

### SODELAVCI KATEDRE / PERSONNEL

#### Visokošolski učitelji / *Faculty*

red. prof. dr. Jadran Maček

izr. prof. dr. Marjan Marinšek

v dopolnilnem razmerju / *part time*

izr. prof. dr. Miran Gaberšček

red. prof. dr. Stanislav Radovan Pejovnik

red. prof. dr. Danilo Suvorov

#### Visokošolski sodelavci / *Assistants*

doc. dr. Barbara Novosel

doc. dr. Klementina Zupan

#### Raziskovalni sodelavec / *Researcher*

asistent dr. Boštjan Genorio

#### Strokovni sodelavec / *Research Assistant*

doc. dr. Vojmir Francetič

Mladi raziskovalci <i>Young Researchers</i>	Mentor <i>Mentor</i>	Čas usposabljanja <i>Programme Duration</i>	Oblika usposabljanja <i>Degree</i>
Tina Skalar	J. Maček	2008–2013	doktorski študij / <i>PhD</i>
Tina Prinčič	S. Pejovnik	2009–2012 (do 21. 6. 2012)	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 1<sup>st</sup> Cycle Study Programmes*

Kemijsko inženirstvo / *Chemical Engineering* – UN:

Kemijska in procesna varnost / *Chemical and Process Safety*

Materiali za inženirje / *Engineering Materials*

Praktikum iz materialov (izbirni predmet) / *Practical Course in Materials Characterisation (elective course)*

Sodobne metode karakterizacije materialov (izbirni predmet) / *Advanced Methods of Materials Characterisation (elective course)*

Praktikum iz kemijskega inženirstva / *Chemical engineering laboratory*

Tehniška varnost / *Technical Safety* – UN:

Osnove materialov / *Fundamentals of Materials*

Nevarne snovi / *Hazardous Substances*

Kemijska tehnologija / *Chemical Technology* – VS:

Osnove industrijske kemije / *Fundamentals of Industrial Chemistry*

Procesi v industrijski kemiji / *Processes in Industrial Chemistry*

Mehanske operacije (izbirni predmet) / *Mechanical Operations (elective course)*

Praktikum iz materialov (izbirni predmet) / *Practical Course in Materials Characterisation (elective course)*

Bolonjski programi 2. stopnje / *Bologna 2<sup>st</sup> Cycle Study Programmes*

Nanomateriali in kompoziti / *Nanomaterials and Composites*

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 3<sup>rd</sup> 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 1<sup>st</sup> Cycle Study Programmes*

Tehnologija materialov I, II / *Technology of Materials I, II*, ALUO-UN

Industrijski materiali (izbirni predmet) / *Industrial Materials (elective course)*, FMF – VS

## **RAZISKOVALNA DEJAVNOST / RESEARCH ACTIVITIES**

- Raziskave in razvoj anorganskih materialov in produktov ter procesov za njihovo pripravo, materiali in kompoziti za visokotemperaturne gorivne celice, karakterizacija materialov / *Research and Development of Inorganic Materials, Products and Processes for their Preparation; Materials and Composites for High Temperature Fuel Cells; Characterization of Materials*
- Nanomateriali in nanokompoziti / *Nanomaterials and Nanocomposites*
- Industrijske odpadne snovi / *Industrial Waste Materials*
- Vpliv defektne strukture na sintranje oksidov, pretežno rutila / *Defect Structure Influence on Sintering of Oxides (Mostly Rutile)*
- Eksperimentalna verifikacija in statistična analiza veljavnosti različnih modelov procesa sintranja / *Experimental Verification and Statistical Analysis of Different Sintering Models*

- Proučevanje procesa sintranja v prisotnosti tekoče faze ter sintranja v kemijsko heterogenih sistemih / *Study of Liquid Phase Sintering and Sintering in Heterogeneous Systems*
- Razvoj in uporaba impedančne spektroskopije za proučevanje ionskih prevodnikov in meje ionski prevodnik-kovina; znaten del aktivnosti poteka tudi na področju Li ionskih akumulatorjev / *Impedance Spectroscopy Method for the Development of Ionic Conductors and Ionic Conductor-Metal Boundary Characterisation*
- Sinteza in karakterizacija keramičnih in kompozitnih materialov za visokotemperaturne tehnologije npr. visokotemperaturne gorivne celice / *Synthesis and Characterisation of Ceramic and Composite Materials for High Temperature Technologies e.g. High Temperature Fuel Cells*
- Priprava kompleksnih keramičnih oksidov, mešanih oksidov in kompozitov z uporabo sol-gel tehnike in zgorevalne sinteze / *Sol-Gel and Combustion Synthesis Techniques for the Preparation of Complex Ceramic Oxides, Mixed Oxides and Composites*
- Sinteza, karakterizacija in raziskave lastnosti enodimenzionalnih nanostrukturiranih materialov / *Synthesis, Characterisation and Properties of One-Dimensional Nanostructured Materials*

## **RAZISKOVALNA OPREMA / RESEARCH EQUIPMENT**

- Netzsch STA 409 aparatura za simultano termično analizo / *Apparatus for Simultaneous Thermal Analysis*
- Mettler TA 4000:
- TG 50 modul / *TG 50 Module*
- DSC 20 modul / *DSC 20 Module*
- Masni spektrometer Pfeiffer / *Mass Spectrometer Pfeiffer*
- Agilent Micro GC 3000A, plinski kromatograf / *Gas Chromatograph*
- Vrstični elektronski mikroskop Jeol T300 / *Scanning Electron Microscope Jeol T300*
- Segrevalni mikroskop Leitz Wetzlar 301-200-301 / *Heating Microscope Leitz Wetzlar 301-200-301*
- Optični mikroskop za metalografske preiskave Leitz / *Optical Microscope Leitz*
- Analizator velikosti in porazdelitve velikosti delcev
- 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 aparatura za simultano termično analizo / *Netzsch STA 449 F3 Jupiter Apparatus for Simultaneous Thermal Analysis (CO-NOT)*
- Masni spektrometer Netzsch QMS 403C Aëolos / *Mass Spectrometer Netzsch QMS 403C Aëolos (CO-NOT)*
- Analizator specifične površine in poroznosti Micromeritics ASAP 2020 / *Surface Area and Porosity Analyzer Micromeritics ASAP 2020 (CO-NOT)*
- Mikroskop za korelacijsko, konfokalno in svetlobno mikroskopijo Zeiss / *Microscope for Correlation, Confocal and Light Microscopy Zeiss (CO-NAMASTE)*

## SODELOVANJE V CENTRIH ODLIČNOSTI / CENTRES OF EXCELLENCE

- Center odličnosti: CO NOT-Nizkoogljične tehnologije / *Center 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 2012 / REFERENCES 2012

### IZVIRNI ZNANSTVENI ČLANEK / ORIGINAL SCIENTIFIC ARTICLE

- ATM1. GENORIO, Boštjan, LU, Wei, DIMIEV, Ayrat M., ZHU, Yu, RAJI, Abdul-Rahman O., NOVOSEL, Barbara, ALEMANY, Lawrence B., TOUR, James M. In-situ intercalation replacement and selective functionalization of graphene nanoribbon stacks. *ACS nano*, 2012, vol. 6, no. 5, str. 4231-4240, doi: 10.1021/nm300757t. [COBISS.SI-ID 35878405]
- ATM2. GENORIO, Boštjan, PENG, Zhiwei, LU, Wei, PRICE HOELSCHER, B. Katherine, NOVOSEL, Barbara, TOUR, James M. Synthesis of dispersible ferromagnetic graphene nanoribbon stacks with enhanced electrical percolation properties in a magnetic field. *ACS nano*, 2012, vol. 6, no. 11, str. 10396-10404, doi: 10.1021/nm304509c. [COBISS.SI-ID 36326405]
- ATM3. TRATAR-PIRC, Elizabeta, NOVOSEL, Barbara, BUKOVEC, Peter. Comparison of GC and OxiTop analysis of biogas composition produced by anaerobic digestion of glucose in cyanide inhibited systems. *Acta chim. slov.* [Tiskana izd.], 2012, vol. 59, no. 2, str. 398-404. <http://acta.chem-soc.si/59/59-2-398.pdf>. [COBISS.SI-ID 36027653]
- ATM4. DIMITROVSKA-LAZOVA, Sandra, KOVACHEVA, D., ALEKSOVSKA, Slobotka, MARINŠEK, Marjan, TZVETKOV, P. Synthesis and structural details of perovskites within the series  $\text{PrCo}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}_3$  ( $x = 0, 0.33, 0.67$  and 1). *Bulg. Chem. Commun.*, 2012, vol. 44, no. 1, str. 37-46. [COBISS.SI-ID 36418821]
- ATM5. PIVKO, Maja, BELE, Marjan, TCHERNYCHOVA, Elena, ZABUKOVEC LOGAR, Nataša, DOMINKO, Robert, GABERŠČEK, Miran. Synthesis of nanometric  $\text{LiMnPO}_4$  via a two-step technique. *Chem. mater.* [Print ed.], 2012, vol. 24, iss. 6, str. 1041-1047. <http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/cm203095d>. [COBISS.SI-ID 4931610]
- ATM6. NOVOSEL, Barbara, MARINŠEK, Marjan, MAČEK, Jadran. Deactivation of Ni-YSZ material in dry methane and oxidation of various forms of deposited carbon. *J. fuel cell sci. technol. (Print)*, 2012, vol. 9, no. 6, art. no. 061003 (7 str.), doi: 10.1115/1.4007272. [COBISS.SI-ID 36119301]
- ATM7. JAPIČ, Dajana, PARAMO, Jorge Antonio, MARINŠEK, Marjan, STRZHEMECHNY, Yuri M., CRNJAK OREL, Zorica. Growth-morphology-luminescence correlation in ZnO-containing nanostructures synthesized in different media. *J. lumin.* [Print ed.], 2012, vol. 132, iss. 6, str. 1589-1596. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002223131200052X>. [COBISS.SI-ID 4910362]
- ATM8. UKMAR, Tina, MAVER, Uroš, PLANINŠEK, Odon, PINTAR, Albin, KAUČIČ, Venčeslav, GODEC, Aljaž, GABERŠČEK, Miran. Guest-host van der Waals interactions decisively affect the molecular transport in mesoporous media. *J. mater. chem.* [Print ed.], 2012, vol. 22, str. 1112-1120. [COBISS.SI-ID 4837914]
- ATM9. KLJAJIČ, Alen, BEŠTER-ROGAČ, Marija, KLOBČAR, Andrej, ZUPET, Rok, PEJOVNIK, Stane. Crystallization using reverse micelles and water-in-oil microemulsion systems : the highly selective tool for the purification of organic compounds from complex mixtures. *J. pharm. sci.*, str. 1-6. <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/jps.23376/pdf>, doi: 10.1002/jps.23376. [COBISS.SI-ID 36344837]
- ATM10. PIRNAT, Klemen, DOMINKO, Robert, CERC KOROŠEC, Romana, MALI, Gregor, GENORIO, Boštjan, GABERŠČEK, Miran. Electrochemically stabilised quinone based electrode composites for Li-ion batteries. *J. power sources*. [Print ed.], 2012, vol. 199, str. 308-314, ilustr. [http://www.sciencedirect.com/science?\\_ob= MiamiImageURL&\\_cid=271367&\\_user=4776866&\\_pii=S0378775311020611&\\_check=y&\\_origin=&\\_coverDate=01-Feb-2012&view=c&wchp=dGLzVIS-zSkz&md5=cb70b39ce42ce36cd6b7e85b033af24c/1-s2.0-S0378775311020611-main.pdf](http://www.sciencedirect.com/science?_ob= MiamiImageURL&_cid=271367&_user=4776866&_pii=S0378775311020611&_check=y&_origin=&_coverDate=01-Feb-2012&view=c&wchp=dGLzVIS-zSkz&md5=cb70b39ce42ce36cd6b7e85b033af24c/1-s2.0-S0378775311020611-main.pdf), doi: 10.1016/j.jpowsour.2011.10.068. [COBISS.SI-ID 4847898]
- ATM11. SKALAR, Tina, MAČEK, Jadran, GOLOBIČ, Amalija. A new simple synthesis and characterization of Sm-doped ceria and its homogeneous precursor  $[\text{Ce}_{0.80}\text{Sm}_{0.20}(\text{Ac})_3(\text{Gly})_3]$ . *J. Eur. Ceram. Soc.* [Print ed.], 2012, vol. 32, no. 10, str. 2333-2339, doi: 10.1016/j.jeurceramsoc.2012.02.008. [COBISS.SI-ID 35887365]

- ATM12.** ČELAN KOROŠIN, Nataša, FRANCETIČ, Vojmir, BUKOVEC, Nataša. Thermal and luminescent properties of Eu[sup]2+-doped aluminates prepared by the sol-gel method. *J. therm. anal. calorim.*, str. 1-6. <http://www.springerlink.com/content/q130672r77353115/fulltext.pdf>, doi: 10.1007/s10973-012-2451-y. [COBISS.SI-ID 35935493]
- ATM13.** ZUPAN, Klementina, MARINŠEK, Marjan. Microstructure development of the Ni-GDC anode materials for IT-SOFC = Razvoj mikrostrukture Ni-GDC anodnega materiala za srednjetermperaturne SOFC. *Mater. tehnol.*, 2012, letn. 46, št. 5, str. 445-451. <http://www.imt.si/Revija/>. [COBISS.SI-ID 942762]

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

- ATM14.** KOŠMERL, Tatjana, FRANCETIČ, Vojmir. Pregled uspešnih aplikacij nanotehnologij na področju pijač = An overview of successful applications of nanotechnology in the beverages. V: DEMŠAR, Lea (ur.), ŽLENDER, Božidar (ur.). 27. Bitenčevi živilski dnevi 2012 = 27th Food Technology Days 2012 dedicated to prof. F. Bitenc, 26. september 2012, Ljubljana. *Nanotehnologije in nanoživila*. Ljubljana: Biotehniška fakulteta, Oddelek za živilstvo, 2012, str. 93-101. [COBISS.SI-ID 4134264]
- ATM15.** UBRANI M., Manu Patel, DEMIR-CAKAN, Rezan, MORCLETTE, Mathieu, TARASCON, Jean-Marie, GABERŠČEK, Miran, DOMINKO, Robert. Analytical techniques for Li-S batteries. V: 36th International Conference on Advanced Ceramics and Composites, January 22-27, 2012, Daytona Beach, Florida. *Proceedings of the 36th International Conference on Advanced Ceramics and Composites, January 22-27, 2012, Daytona Beach, Florida*. Florida: The American Ceramic Society, 2012, str. [1-9]. [COBISS.SI-ID 5105946]

## **OBJAVLJENI ZNANSTVENI PRISPEVEK NA KONFERENCI / PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTION**

- ATM16.** KOŠMERL, Tatjana, JAMNIK, Polona, FRANCETIČ, Vojmir. Comparison of antioxidant activity of wine and wine lees. V: 35th World Congress of Vine and Wine, 18-22 June 2012, Izmir, Turkey. *Abstracts*. [S. l.]: TAPDK, 2012, [7] str. [COBISS.SI-ID 4109176]
- ATM17.** KOŠMERL, Tatjana, PROSEN, Helena, JUG, Tjaša, DEMŠAR, Lea, FRANCETIČ, Vojmir. Fermentation characteristics of wine yeast in the presence of oak chips. V: 35th World Congress of Vine and Wine, 18-22 June 2012, Izmir, Turkey. *Abstracts*. [S. l.]: TAPDK, 2012, [7] str. [COBISS.SI-ID 4109432]
- ATM18.** MISLEJ, Vesna, NOVOSEL, Barbara, VUK, Tomaž, GRILC, Viktor, MLAKAR, Ernest. Combustion behaviour and products of dried sewage sludge - prediction by thermogravimetric analysis and monitoring the co-incineration process in a cement factory. V: 20th International Congress of Chemical and Process Engineering [and] 15th Conference PRES, 25 - 29 August 2012, Prague, Czech Republic. *CD-ROM of full texts*. Prague: [s. n.], cop. 2012, str. [1-11]. [COBISS.SI-ID 5083674]
- ATM19.** ROZMAN, Nejc, ŠKRLEP, Luka, MARINŠEK, Marjan, SEVER ŠKAPIN, Andriana. Development of visible light active TiO2 for interior self-cleaning coatings. V: KONSTA-GDOUTOS, Maria S. (ur.). Nanotechnology in construction, 4th International Symposium, NICOM4, Agios Nikolaos, Crete, Greece, May 20 - 22, 2012. *NICOM4*. Agios Nikolaos: NICOM, 2012, [7] str., ilustr. [COBISS.SI-ID 1900135]
- ATM20.** MISLEJ, Vesna, NOVOSEL, Barbara, VUK, Tomaž, GRILC, Viktor, MLAKAR, Ernest. Combustion behaviour and products of dried sewage sludge - prediction by thermogravimetric analysis and monitoring the co-incineration process in a cement factory. V: VARBANOV, Petar (ur.). 15th Conference Process Integration, Modelling and Optimisation for Energy Saving and Pollution Reduction, 25-29 August 2012, Prague, Czech Republic. *PRES 2012*, (Chemical Engineering transactions, Vol. 29, pt. 1,2 (2012)). Prague: ČSCHI: AIDIC, 2012, str. 685-690. [COBISS.SI-ID 5055002]
- ATM21.** JAPIČ, Dajana, MARINŠEK, Marjan, DJERDJ, Igor, CRNJAK OREL, Zorica. Oplaščevanje ZnO nanodelcev s siliko po in situ in ex situ metodi in priprava kompozita PMMA/ZnO : [predavanje]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. [1-6]. [COBISS.SI-ID 36201733]
- ATM22.** NAPAST, Viktor, HOMŠAK, Marko, GABERŠČEK, Miran, BELE, Marjan, MOŠKON, Jože, PETEK, Aljana. Baterije z veliko kapaciteto. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. [1-10]. [COBISS.SI-ID 5063450]
- ATM23.** LUKEŽIČ, Marjan, MARINŠEK, Marjan. Preprečevanje zasičenja niza PEM gorivnih celic z ogljikovim monoksidom in analiza odpovedi PEM gorivne celice. V: *Varstvo pri delu, varstvo pred požari in medicina dela : dvodnevni posvet z mednarodno udeležbo, Portorož 2012, 15.-16. 5. 2012*. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Oddelek za tehniško varnost, 2012, str. 1-12. [COBISS.SI-ID 35974917]

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

- ATM24.** DOMINKO, Robert, UBRANI M., Manu Patel, DEMIR-CAKAN, Rezan, GABERŠČEK, Miran, MORCLETTE, Mathieu, TARASCON, Jean-Marie. Analytical tools for advanced Li-S batteries. V: 36th International Conference and Exposition on Advanced Ceramics and Composites, January 22-27, 2012, Daytona Beach, Florida, USA. *Abstracts book*. [S. l.]: The American Ceramic Society, 2012, 2012, str. 79. [COBISS.SI-ID 4925722]

## **VABLJENO PREDAVANJE NA KONFERENCI BREZ NATISA / UNPUBLISHED INVITED CONFERENCE LECTURE**

- ATM25.** KOŠMERL, Tatjana, JENKO, Mojca, BAVČAR, Dejan, FRANCETIČ, Vojmir, PROSEN, Helena. *Ohranjanje aromatskega potenciala od vinograda do steklenice : [predavanje na] 5. vinogradniškem posvetu, Hoče, 6.12.2012*. Hoče: Fakulteta za kmetijstvo in biosistemske vede, 2012. [COBISS.SI-ID 4189048]

## **UREDNIK / EDITORSHIP**

- ATM26.** SVETLIK, Ivan, KRISTL, Julijana, ŠIROK, Majda, KOMLJENOVIČ, Janja, PEJOVNIK, Stane (ur.). *Bolonjska prenova po ljubljansko*. V Ljubljani: Univerza, 2012. 103 str., ilustr. ISBN 978-961-6410-38-0. [COBISS.SI-ID 264233472]



## KATEDRA ZA KEMIJSKO, BIOKEMIJSKO IN EKOLOŠKO INŽENIRSTVO

### CHAIR OF CHEMICAL, BIOCHEMICAL AND ENVIRONMENTAL ENGINEERING

#### PREDSTOJNIK KATEDRE / HEAD

red. prof. dr. Igor Plazl

#### SODELAVCI KATEDRE / PERSONNEL

##### Visokošolski učitelji / Faculty

red. prof. dr. Marin Berovič

doc. dr. Ana Lakota

red. prof. dr. Aleksander Pavko

red. prof. dr. Igor Plazl

izr. prof. dr. Jana Zagorc Končan

(upokojena od 15. 12. 2012 / *retired since December 15, 2012*)

v dopolnilnem razmerju / *part-time*

akademik red. prof. dr. Janez Levec

##### Visokošolski sodelavci / Assistants

doc. dr. Andreja Zupančič Valant

doc. dr. Andreja Žgajnar Gotvajn

izr. prof. dr. Polona Žnidaršič Plazl

##### Strokovni sodelavci / Research Assistants

Sonja Intihar

Nataša Miložič

mag. Nada Verdel

##### 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 (do 31. 3. 2012)	doktorski študij / <i>PhD</i>
Janja Babič	A. Pavko	2005–2013	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 (mentorica A. Žgajnar Gotvajn)



---

## 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 1<sup>st</sup> 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)*  
Fluidna mehanika / *Fluid Mechanics*

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*  
Biotehnoški procesi in naprave (izbirni predmet) / *Processes and Equipment in Biotechnology (elective course)*  
Industrijski procesi in trajnostni razvoj / *Industrial Processes and Sustainable Development*  
Kemijsko inženirski praktikum / *Practicum in Chemical Engineering*  
Diplomsko delo / *Diploma Work*

##### Bolonjski programi 2. stopnje / *Bologna 2<sup>nd</sup> Cycle Master Study Programmes*

Kemijsko inženirstvo / *Chemical Engineering* – UN:  
Bioproceno inženirstvo / *Bioprocess engineering*  
Procesi v tehnologijah varstva okolja / *Environmental protection technology processes*  
*Industrijska ekologija in čistejša proizvodnja / Industrial ecology and clean technology*

##### Predbolonjski dodiplomski programi / *Pre-Bologna Undergraduate Programmes*

Načrtovanje procesov in ekološko inženirstvo / *Process Design and Environmental Engineering* – UN  
Kemijsko reakcijsko inženirstvo / *Chemical Reaction Engineering* – UN  
Biokemijsko inženirstvo in biotehnologija / *Biochemical Engineering and Biotechnology* – UN  
Biotehnologija z biokemijskim inženirstvom / *Biotechnology and Biochemical Engineering* – UN  
Kemija okolja / *Environmental Chemistry* – UN  
Ekološko inženirstvo / *Environmental Engineering* – UN  
Modeliranje procesov / *Process Modelling* – UN  
Kemijsko inženirski praktikum / *Chemical Engineering Practicals* – UN

##### Bolonjski programi 3. stopnje / *Bologna 3<sup>rd</sup> 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 1<sup>st</sup> Cycle Study Programmes*

Kemijske in fizikalne osnove / *Chemical and Physical Principles*, ALUO  
Naravoslovje v restavraciji I, II, III / *Natural Sciences in Restoration I, II, III*, ALUO  
Tehnološko procesništvo / *Unit Operations in Food Industry*, BF – UN

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

Industrijsko biokemijsko inženirstvo / *Industrial Biochemical Engineering*, BF

Bolonjski programi 3. stopnje / *Bologna 3<sup>rd</sup> 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**

– Raziskave s področja procesnega inženirstva / *Process Engineering Research*

Mikrofluidika / *Microfluidics*

Transportni pojavi v mikro in nano tehnologiji / *Transport Phenomena in Micro-& Nano-technology*

Sinteze in aplikacije inženirskih nanomaterialov / *Synthesis and Application of Engineered Nanomaterials*

Raziskave in razvoj znanj za tehnološko in okoljsko optimizacijo procesov / *Optimization Research in the Field of Process and Environmental Technology*

---

Reologija in mešanje / *Rheology and Mixing*

Snovni prenos v koloni z mehurčki / *Mass Transfer in a Bubble Column*

- Raziskave s področja biokemijskega inženirstva / *Research in the Field of Biochemical Engineering and Biotechnology*

Raziskave in razvoj biotransformacij in izolacije bioproduktov v mikrofluidnih sistemih / *Research and Development of Biotransformations and Downstream Processes within Microfluidic Systems*

Pridobivanje encimov z nitastimi glivami / *Enzyme production with filamentous fungi*

Adsorpcija farmacevtskih učinkovin v koloni s polnilom / *Adsorption of Pharmaceutical Compounds in a Packed Bed Column*

- Raziskave s področja okoljskega inženirstva / *Research in the Field of Environmental Engineering*

Bioremediacija z glivami bele trohnobe / *Bioremediation with White Rot Fungi*

Čiščenje močno onesnaženih odpadnih vod z naprednimi oksidacijskimi postopki / *Advanced Oxidation Processes for Treatment of Heavily Polluted Wastewaters*

Spremljanje učinkovitosti čiščenja odpadnih vod z biotesti / *Evaluation of Wastewater Treatment Efficiency Using Biotests*

Vrednotenje vpliva kemikalij in odpadnih vod na okolje / *Assessment of environmental impact of compounds and wastewaters*

## **POMEMBNI DOSEŽKI SODELAVCEV KATEDRE / SIGNIFICANT ACHIEVEMENTS OF THE CHAIR STAFF**

### **NAGRADE, PRIZNANJA / AWARDS, RECOGNITIONS**

- A. Lakota, pohvala Študentskega sveta za pedagoško delo na smeri Tehniška varnost (bolonjski program 1. stopnje) / *Students Award for the Quality of Teaching in Technical Safety Study Programme, 1<sup>st</sup> cycle*
- G. Kalčíková, priznanje za drugo mesto v sekciji FORUM 33 za najboljše predavanje avtorjev do 33 let - kategorija Znanstveno-raziskovalni prispevki na konferenci Odpadne vode 2012, Štrbské Pleso, Slovaška.
- Nina Pekolj (UN Biokemija), dobitnica Krkine nagrade 2012 za diplomsko delo z naslovom *Določanje strupenosti in razgradljivosti hidrofobnih ionskih tekočin/ Determination of toxicity and biodegradability of hydrophobic ionic liquids* (mentorica A. Žgajnar Gotvajn).
- Tjaša Milenkovič (UN Kemijsko inženirstvo), dobitnica Saubermacherjeve okoljske nagrade 2012 za diplomsko delo z naslovom *Vpliv hidrofobnih ionskih tekočin na osnovi imidazola na okolje/ Environmental impact of hydrophobic imidasol-based ionic liquids* (mentorica A. Žgajnar Gotvajn).

### **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*
- Tekočinski kromatograf Shimadzu / *HPLC Shimadzu*
- Rotacijski reometer HAAKE RS 150 / *Rheometer HAAKE RS 150*
- Rotacijski reometer HAAKE CV 20 / *Rheometer HAAKE CV 20*
- UV-VIS spektrofotometer Perkin Elmer Lambda 25 / *UV-VIS Spectrophotometer Perkin Elmer Lambda 25*
- Mikrovalovni reaktor / *Microwave Reactor*
- Laboratorijski bioreaktor / *Benchtop Fermenter Type KLF 2000*
- TOC 5000A Shimadzu aparatura / *TOC 5000A Analyser Shimadzu*
- Vary 50 Varian spektrofotometer / *Vary 50 Varian Spectrophotometer*
- Aparatura za določanje toksičnosti LUMISTox Dr. Lange / *Luminometer for Toxicity Tests LUMISTox Dr. Lange*
- Aparatura aerobni digester W11-A / *Aerobic Digester W11-A*
- Rotacijski reometer – Physica MCR 301 / *Modular Compact Rheometer Physica MCR 301*
- Merilni sistem Protos 3400C za merjenje raztopljenega kisika / *Measuring System Protos 3400C with DO Measuring Module*
- Laboratorijski bioreaktorji Bioengineering AG, 2, 5,10, 15 l / *Laboratory Bioreactors Bioengineering AG, 2, 5,10, 15 l*
- Laboratorijski bioreaktorji INFORS 5,10 50 l / *Laboratory Bioreactors INFORS 5,10 50 l*
- Laboratorijski bioreaktorji Chemap AG, 3x10 l / *Laboratory Bioreactors Chemap AG, 3x10l*
- Stresalnik KS 40001 inkubatorski Control IKA / *Thermostated Shaker Control IKA*
- Invertni fluorescenčni mikroskop Leica DM IL LED Fluo / *Inverted Fluorescence Microscope Leica DM IL LED Fluo*

## **SODELOVANJE V KOMPETENČNIH CENTRIH / COMPETENCE CENTRES**

- **Kompetenčni center: KC TIGR - Trajnostno in inovativno gradbeništvo / Competence Centre: CC TIGR - 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**

102-52142/PLAZL            Študij transpornih pojavov izolacijskih plošč / *Transport phenomena in insulating materials*  
Nosilec / *Principal Researcher*: I. Plazl  
Sofinancer / *Co-sponsored by*: UL FGG, TIGR

Raziskave procesa depolimerizacije / *Research of depolymerization processes*

Nosilec / *Principal Researcher*: I.Plazl

Sofinancer / *Co-sponsored by*: JULON d.d.

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

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

- A. Žgajnar Gotvajn, *Erasmus Teaching Exchange, Slovak Technical University, Bratislava, Slovaška.*
- A. Žgajnar Gotvajn, FKKT koordinatorka IP ERASMUS programa Zelena Kemija (2012–2015)/ Faculty coordinator of IP ERASMUS programme Green Chemistry (2012–2015).
- 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

### VEČSTRANSKO MEDNARODNO SODELOVANJE / MULTILATERAL COOPERATION

FP7-312148 *BIOINTENSE-Mastering bioprocess integration and intensification across scales*  
Nosilka / *Principal Researcher*: P. Žnidaršič Plazl

### BILATERALNO MEDNARODNO SODELOVANJE / BILATERAL COOPERATION

Slovenija–  
Kitajska  
*Slovenia-China*      Produkcija farmacevtsko aktivnih spojin *Grifola frondoza* s postopkom gojenja na trdnem in tekočem gojišču / *Production of Pharmaceutically Active Compounds from Grifola Frondosa by Solid State and Submerged Cultivation*  
Nosilec / *Principal Researcher*: M. Berovič

Slovenija–Avstrija  
*Slovenia-Austria*      Spremljanje bioprocsov v mikrofluidnih napravah / *Monitoring of Bioprocesses within Microfluidic Devices*  
Nosilec / *Principal Researcher*: I. Plazl

Slovenija–Slovaška  
*Slovenia-Slovak Republic*      Razgradnja izbranih škodljivih snovi z ozonacijo / *Degradation of Selected Harmful Compounds by Ozonation*  
Nosilec / *Principal Researcher*: A. Žgajnar Gotvajn

Slovenija–ZDA  
*Slovenia-USA*      Odstranjevanje hormonskih motilcev (EDC) iz odpadnih vod z naprednimi oksidacijskimi procesi (AOP) / *Advanced Oxidation Processes (AOPs) for the Removal of Endocrine Disruptive Chemicals (EDCs) from Wastewaters*  
Nosilec / *Principal Researcher*: A. Žgajnar Gotvajn

Slovenija–Romunija  
*Slovenia-Romania*      Odstranjevanje nevarnih onesnaževal iz deponijskih izcednih vod z naprednimi oksidacijskimi procesi / *Advanced Oxidation Processes) for Removal of hazardous pollutants from landfill leachates*  
Nosilec / *Principal Researcher*: A. Žgajnar Gotvajn

Slovenija–Ciper  
*Slovenia-Cyprus*      Pretočnost krvi z različno vsebnostjo kisika / *The Fluidity of Blood at Different Levels of Oxygen Content*  
Nosilec / *Principal Researcher*: A. Zupančič Valant

### DRUGE OBLIKE MEDNARODNEGA SODELOVANJA / OTHER FORMS OF INTERNATIONAL COOPERATION

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

- Prof. Andrew J. Englande, Tulane University New Orleans, School of Public Health and Tropical Medicine, *Microconstituents in Wastewaters – Characteristics, Treatment and Research Needs*, May 2011.
- Dr. Erika-Andera Levei, INCDO-INOE 2000 Research Institute for Analytical Instrumentation, Cluj-Napoca, Romania, *Determination of hazardous compounds in environmental samples*, October 2012.
- Dr. Mirela Miclean, INCDO-INOE 2000 Research Institute for Analytical Instrumentation, Cluj-Napoca, Romania, *Gas chromatographic analysis of organic compounds*, October 2012.



## BIBLIOGRAFIJA 2012 / REFERENCES 2012

### IZVIRNI ZNANSTVENI ČLANEK / ORIGINAL SCIENTIFIC ARTICLE

- KIŽ1.** LIKOZAR, Blaž, SENICA, David, PAVKO, Aleksander. Equilibrium and kinetics of vancomycin adsorption on polymeric adsorbent. *AIChe J.*, 2012, vol. 58, no. 1, str. 99-106, doi: 10.1002/aic.12559. [COBISS.SI-ID 34832133]
- KIŽ2.** BEROVIČ, Marin, HABIJANIČ, Jožica, BOH, Bojana, WRABER-HERZOG, Branka. Antitumor fungal  $\beta$ -glucines from of *Ganoderma lucidum* by submerged and solid state cultivation. *Ann. Agrar. Sci.*, 2012, vol. 10, no. 2, str. 39-47. [COBISS.SI-ID 36301829]
- KIŽ3.** TIŠMA, Marina, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona, VASIĆ-RAČKI, Đurđa, ZELIĆ, Bruno. Optimization of laccase production by *Trametes versicolor* cultivated on industrial waste. *Appl. biochem. biotechnol.*, 2012, vol. 166, no. 1, str. 36-46, doi: 10.1007/s12010-011-9401-1. [COBISS.SI-ID 35452165]
- KIŽ4.** JEMEC, Anita, TIŠLER, Tatjana, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Assessment of landfill leachate toxicity reduction after biological treatment. *Arch. environ. contam. toxicol.*, 2012, vol. 62, no. 2, str. 210-221. <http://www.springerlink.com/content/p816889546225103/fulltext.pdf>, doi: 10.1007/s00244-011-9703-X. [COBISS.SI-ID 35351557]
- KIŽ5.** NOVOTNÝ, Čeněk, TROŠT, Nina, ŠUŠLA, M., SVOBODOVÁ, Kateřina, MIKESKOVÁ, Hana, VÁLKOVÁ, Hana, MALACHOVÁ, Kateřina, PAVKO, Aleksander. The use of the fungus *Dichomitus squalens* for degradation in rotating biological contactor conditions. *Bioresour. technol.* [Print ed.], 2012, vol. 114, no. 1, str. 241-246, doi: 10.1016/j.biortech.2012.03.080. [COBISS.SI-ID 35901445]
- KIŽ6.** LIKOZAR, Blaž, SENICA, David, PAVKO, Aleksander. Comparison of adsorption equilibrium and kinetic models for a case study of pharmaceutical active ingredient adsorption from fermentation broths : parameter determination, simulation, sensitivity analysis and optimization. *Braz. j. chem. eng.*, 2012, vol. 29, no. 3, str. 635-652. [COBISS.SI-ID 36175621]
- KIŽ7.** POHAR, Andrej, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona, PLAZL, Igor. Integrated system of a microbioreactor and a miniaturized continuous separator for enzyme catalyzed reactions. *Chem. eng. j.* 1996. [Print ed.], 2012, vol. 189/190, no. 1, str. 376-382, doi: 10.1016/j.cej.2012.02.035. [COBISS.SI-ID 35790597]
- KIŽ8.** KALČÍKOVÁ, Gabriela, ZAGORC-KONČAN, Jana, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Assessment of environmental impact of pyridinium-based ionic liquid. *Fresenius environ. bull.* [Print ed.], 2012, vol. 21, no. 8b, str. 2320-2325. [COBISS.SI-ID 36161541]
- KIŽ9.** ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, KALČÍKOVÁ, Gabriela, ZUPANČIČ, Marija, ZAGORC-KONČAN, Jana. Determination of impact of landfill leachate to nitrification. *Fresenius environ. bull.* [Print ed.], 2012, vol. 21, no. 8c, str. 2447-2452. [COBISS.SI-ID 36171269]
- KIŽ10.** PERKO, David, LEVEC, Janez. Kinetic study of methanol synthesis over CuO/ZnO/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> 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]
- KIŽ11.** SKUBIC, Blaž, LAKNER, Mitja, PLAZL, Igor. Microwave drying of expanded perlite insulation board. *Ind. eng. chem. res.* [Print ed.], 2012, vol. 51, no. 8, str. 3314-3321, doi: 10.1021/ie201790w. [COBISS.SI-ID 35753989]
- KIŽ12.** ŠVAGELJ, Mirjan, BEROVIČ, Marin, GREGORI, Andrej, WRABER-HERZOG, Branka, SIMČIČ, Saša, BOH, Bojana. Immunomodulating activities of cultivated Maitake medicinal mushroom *Grifola frondosa* (Dicks.: Fr.) S.F. Gray (higher Basidiomycetes) on peripheral blood mononuclear cells. *Int. j. medic. mushrooms*, 2012, vol. 14, no. 4, str. 377-383. [COBISS.SI-ID 36299269]
- KIŽ13.** BEROVIČ, Marin, HABIJANIČ, Jožica, BOH, Bojana, WRABER-HERZOG, Branka, PETRAVIČ-TOMINAC, Vlatka. Production of Lingzhi or Reishi medicinal mushroom, *Ganoderma lucidum* (W.Curt.:Fr.) P. Karst. (higher Basidiomycetes) biomass and polysaccharides by solid state cultivation. *Int. j. medic. mushrooms*, 2012, vol. 14, no. 5, str. 513-520. [COBISS.SI-ID 36310533]
- KIŽ14.** BABIČ, Janja, LIKOZAR, Blaž, PAVKO, Aleksander. Optimization of ligninolytic enzyme activity and production rate with *Ceriporiopsis subvermispora* for application in bioremediation by varying submerged media composition and growth immobilization support. *Int. j. mol. sci. (Print)*, 2012, vol. 13, no. 9, str. 11365-11384, doi: 10.3390/ijms130911365. [COBISS.SI-ID 36176901]
- KIŽ15.** KALČÍKOVÁ, Gabriela, ZAGORC-KONČAN, Jana, ZUPANČIČ, Marija, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Variation of landfill leachate phytotoxicity due to landfill ageing. *J. chem. technol. biotechnol. (1986)*. [Print ed.], 2012, vol. 87, no. 9, str. 1349-1353. <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/jctb.3776/pdf>. [COBISS.SI-ID 35850757]
- KIŽ16.** 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.*, 2012, vol. 39, no. 3, str. 449-457, doi: 10.1007/s10295-011-1036-2. [COBISS.SI-ID 35421957]
- KIŽ17.** UNGERBÖCK, B., POHAR, Andrej, MAYR, T., PLAZL, Igor. Online oxygen measurements inside a microreactor with modeling of transport phenomena. *Microfluid. nanofluid. (Print)*, str. 1-10. <http://www.springerlink.com/content/r56h4k6906428025/fulltext.pdf>, doi: 10.1007/s10404-012-1074-8. [COBISS.SI-ID 36271621]
- KIŽ18.** ŠINKOVEC, Ervin, POHAR, Andrej, KRAJNC, Matjaž. Phase transfer catalyzed esterification : modeling and experimental studies in a microreactor under parallel flow conditions. *Microfluid. nanofluid. (Print)*, str. 1-10. [http://link.springer.com/static-content/0.5480/pdf/852/art%253A10.1007%252F10404-012-1067-7.pdf?token=1350551374475--e36a7ac75df0edf55cadde298a701ef40cfb7477dfa505fcd0b83a264efe1e847bfff4df6c809779227c3cf85bd6d5b88\\_b6cb1d5fdad6ce51f61b481e3b315&doi=10.1007%2F10404-012-1067-7&contentType=article](http://link.springer.com/static-content/0.5480/pdf/852/art%253A10.1007%252F10404-012-1067-7.pdf?token=1350551374475--e36a7ac75df0edf55cadde298a701ef40cfb7477dfa505fcd0b83a264efe1e847bfff4df6c809779227c3cf85bd6d5b88_b6cb1d5fdad6ce51f61b481e3b315&doi=10.1007%2F10404-012-1067-7&contentType=article), doi: 10.1007/s10404-012-1067-7. [COBISS.SI-ID 36262917]
- KIŽ19.** POHAR, Andrej, LAKNER, Mitja, PLAZL, Igor. Parallel flow of immiscible liquids in a microreactor : modeling and experimental study. *Microfluid. nanofluid. (Print)*, 2012, vol. 12, no. 1/4, str. 307-316, doi: 10.1007/s10404-011-0873-7. [COBISS.SI-ID 35319813]
- KIŽ20.** MARQUES, M. P. C., FERNANDES, P., CABRAL, Joaquim M. S., ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona, PLAZL, Igor. Continuous steroid biotransformations in microchannel reactors. *New biotechnology*, 2012, vol. 29, no. 2, str. 227-234, doi: 10.1016/j.nbt.2011.10.001. [COBISS.SI-ID 35504645]
- KIŽ21.** 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*, 2012, vol. 29, iss. 3, str. 325-331, doi: 10.1016/j.nbt.2011.12.002. [COBISS.SI-ID 35597317]
- KIŽ22.** STOJKOVIČ, Gorazd, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. Continuous synthesis of L-malic acid using whole-cell microreactor. *Process biochem. (1991)*, 2012, vol. 47, no. 7, str. 1102-1107, doi: 10.1016/j.procbio.2012.03.023. [COBISS.SI-ID 35882757]

- KIŽ23.** CVJETKO, M., VORKAPIČ-FURAC, Jasna, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. Isoamyl acetate synthesis in imidazolium-based ionic liquids using packed bed enzyme microreactor. *Process biochem.* (1991), 2012, vol. 47, no. 9, str. 1344-1350, doi: 10.1016/j.procbio.2012.04.028. [COBISS.SI-ID 35952389]
- KIŽ24.** NOVAK, Uroš, POHAR, Andrej, PLAZL, Igor, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. Ionic liquid-based aqueous two-phase extraction within a microchannel system. *Sep. purif. technol.*, 2012, vol. 97, no. 1, str. 172-178, doi: 10.1016/j.seppur.2012.01.033. [COBISS.SI-ID 35736325]
- KIŽ25.** KALČIKOVÁ, Gabriela, ZAGORC-KONČAN, Jana, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Artemia salina acute immobilization test : a possible tool for aquatic ecotoxicity assessment. *Water sci. technol.*, 2012, vol. 66, no. 5, str. 903-908. [COBISS.SI-ID 36049157]

## PREGLEDNI ZNANSTVENI ČLANEK / REVIEW ARTICLE

- KIŽ26.** LUBEJ, Martin, PLAZL, Igor. Theoretical descriptions of carbon nanotubes synthesis in a chemical vapor deposition reactor : a review. *Chem. biochem. eng. q.*, 2012, vol. 26, no. 3, str. 277-284. [COBISS.SI-ID 36354821]

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

- KIŽ27.** VOKIČ, Denis, BEROVIČ, Marin. Uporaba encimov pri čiščenju oljnih in tempera slik = Application of enzymes in the cleaning of oil and tempera paintings. V: BEROVIČ, Marin, BILLINGE, Rachel, HOLDEN, Christopher, KIRBY, Jo, ROPRET, Polonca, VOKIČ, Denis, WESER, Ulrich. *Znanost za umetnost : konservatorstvo in restavracijsko danes : zbornik prispevkov mednarodnega simpozija : conservation and restoration today : international symposium proceedings*. Ljubljana: Zavod za varstvo kulturne dediščine Slovenije, Restavratorski center, 2012, str. 120-135. [COBISS.SI-ID 36435973]
- KIŽ28.** BEROVIČ, Marin. Biokorozija poslikav = Biocorrosion studies on painted surfaces. V: BEROVIČ, Marin, BILLINGE, Rachel, HOLDEN, Christopher, KIRBY, Jo, ROPRET, Polonca, VOKIČ, Denis, WESER, Ulrich. *Znanost za umetnost : konservatorstvo in restavracijsko danes : zbornik prispevkov mednarodnega simpozija : conservation and restoration today : international symposium proceedings*. Ljubljana: Zavod za varstvo kulturne dediščine Slovenije, Restavratorski center, 2012, str. 136-145. [COBISS.SI-ID 36436229]

## OBJAVLJENI ZNANSTVENI PRISPEVEK NA KONFERENCI / PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTION

- KIŽ29.** LIKOZAR, Blaž, LEVEC, Janez. Effect of temperature, hydrodynamic conditions, phase ratio and catalyst concentration on biodiesel production : kinetics and mass transfer modelling. V: 20th International Congress of Chemical and Process Engineering [and] 15th Conference PRES, 25 - 29 August 2012, Prague, Czech Republic. *CD-ROM of full texts*. Prague: [s. n.], cop. 2012, str. [1-4]. [COBISS.SI-ID 5047066]
- KIŽ30.** NOVAK, Uroš, LAKNER, Mitja, PLAZL, Igor, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. Aqueous two-phase extraction of [alpha]-amylase within Y- and [psi]-shaped microchannels. V: 20th International Congress of Chemical and Process Engineering [and] 15th Conference PRES, 25 - 29 August 2012, Prague, Czech Republic. *CD-ROM of full texts*. Prague: [s. n.], cop. 2012, str. [1-11]. [COBISS.SI-ID 36176389]
- KIŽ31.** BERČIČ, Gorazd, LINEC, Mitja, LEVEC, Janez. Analysis of mass transfer and observed catalytic activities in the laboratory membrane contactors. V: MARSH, Nicola (ur.). *Euromembrane Conference 2012, [London, 23-27 September 2012]*, (Procedia engineering, Vol. 44 (2012)). Elsevier, 2012, str. 1210-1212. [http://ac.els-cdn.com/S187770581203740X/1-s2.0-S187770581203740X-main.pdf?\\_tid=40728076-3948-11e2-8c26-00000a0b0f27&acdnat=1354099505\\_3a58940523c81045adf5f878333b0a86](http://ac.els-cdn.com/S187770581203740X/1-s2.0-S187770581203740X-main.pdf?_tid=40728076-3948-11e2-8c26-00000a0b0f27&acdnat=1354099505_3a58940523c81045adf5f878333b0a86), doi: 10.1016/j.proeng.2012.08.728. [COBISS.SI-ID 5130010]
- KIŽ32.** GRILC, Miha, LIKOZAR, Blaž, LEVEC, Janez. Catalytic hydro-treatment of liquefied wood or biomass waste : optimization of process parameters. V: *Proceedings*. Venice: [s. n.], 2012, str. [1-5]. [COBISS.SI-ID 5123866]
- KIŽ33.** ŠUŠTERŠIČ, Ema, TUŠAR, Marjan, LUKAČ, Bojana, ZUPANČIČ-VALANT, Andreja. Utilization of PMMA/ATH waste powder in asphalt binder modification. V: *The seventh International Conference on Maintenance and Rehabilitation of Pavements and Technological Control, Auckland-New Zealand, August 28-30, 2012 : MAIRE PAV7*. Auckland: [s. n.], 2012, str. [1-9]. [COBISS.SI-ID 5052954]
- KIŽ34.** BABIČ, Janja, PAVKO, Aleksander. Kinetika razgradnje lindana z ligninolitičnimi encimi = Kinetics of lindane degradation with ligninolytic enzymes. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. [1-5]. [COBISS.SI-ID 36207877]
- KIŽ35.** LIKOZAR, Blaž, LEVEC, Janez. Sinteza biodizla iz različnih olj in alkoholov. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. [1-5]. [COBISS.SI-ID 36210437]
- KIŽ36.** LUBEJ, Martin, PLAZL, Igor. Uporaba ogljikovih nanovlaken kot nosilcev za katalitske reakcije. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. [1-5]. [COBISS.SI-ID 36211461]
- KIŽ37.** GRILC, Miha, LIKOZAR, Blaž, LEVEC, Janez. Vpliv Ni-Mo, Pd in Ni katalizatorjev na hidroleoksidacijo utekočinjenega lesa v reaktorju z goščo : [predavanje]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. [1-5]. [COBISS.SI-ID 36209925]
- KIŽ38.** GRILC, Miha, LEVEC, Janez, GOLOB, Janvit, DOHRN, Ralf, PEPER, Stephanie, FELE ŽILNIK, Ljudmila. Izgradnja visokotlačne ravnotežne celice in meritve faznega ravnotežja CO[spodaj]2 + n-dekan z različnimi eksperimentalnimi metodami : [predavanje]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. [1-6]. [COBISS.SI-ID 36211205]
- KIŽ39.** SKORNŠEK, Matic, LIKOZAR, Blaž, LEVEC, Janez. Sinteza biodizla s heterogenimi katalizatorji na osnovi kalcijevih, magnezijevih in barijevih oksidov in hidroksidov. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. [1-6]. [COBISS.SI-ID 36210181]
- KIŽ40.** PETRIC, Martin, LIKOZAR, Blaž, POHAR, Andrej, LEVEC, Janez. Kontinuirna proizvodnja biodizla v cevem reaktorju s stacionarnimi mešali. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. [1-7]. [COBISS.SI-ID 36210949]

- KIŽ41.** KALČIKOVÁ, Gabriela, BABIČ, Janja, PAVKO, Aleksander, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Application of basidiomycete fungi enzymes for treatment and detoxification of municipal landfill leachate = [lecture]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. [1-8]. [COBISS.SI-ID 36208645]
- KIŽ42.** BURJA, Roman, URŠIČ, Luka, PAVKO, Aleksander. Koncentriranje aktivne farmacevtske učinkovine v organskem topilu : [predavanje]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. [1-8]. [COBISS.SI-ID 36211973]
- KIŽ43.** PIŠLAR, Bine, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Problem aerobnega biološkega čiščenja komunalne odpadne vode z visoko slanostjo. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. 1-8. [COBISS.SI-ID 36209413]
- KIŽ44.** NOVAK, Uroš, PAVŠIČ, Jan, ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. Integracija encimsko katalizirane esterifikacije z membransko separacijo v sistemu mikrofluidnih naprav = Integration of an enzyme-catalyzed esterification with a membrane separation within a microfluidic system : [predavanje]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. 1-11. [COBISS.SI-ID 36205573]
- KIŽ45.** KALČIKOVÁ, Gabriela, MELICHER, Michal, DERCO, Ján, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. The importance of bioassays in wastewater treatment monitoring : [lecture]. V: BODÍK, Igor (ur.), SEDLÁČEK, Stanislav (ur.), HUTŇAN, Miroslav (ur.). *Zborník prednášok 7. bienálnej konferencie s medzinárodnou účasťou odpadové vody 2012 : Štrbské Pleso, 17-19. október 2012*. Bratislava: Asociácia čistiarenských expertov Slovenskej republiky, cop. 2012, str. 106-110. [COBISS.SI-ID 36292869]
- KIŽ46.** DERCO, Ján, ŠILHÁROVÁ, Katarína, VALIČKOVÁ, Mária, MELICHER, Michal, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, LUPTÁKOVÁ, Anna. Odstraňovanie mikropolutantov procesmi s využitím ozónu : [lecture]. V: BODÍK, Igor (ur.), SEDLÁČEK, Stanislav (ur.), HUTŇAN, Miroslav (ur.). *Zborník prednášok 7. bienálnej konferencie s medzinárodnou účasťou odpadové vody 2012 : Štrbské Pleso, 17-19. október 2012*. Bratislava: Asociácia čistiarenských expertov Slovenskej republiky, cop. 2012, str. 304-310. [COBISS.SI-ID 36295173]
- KIŽ47.** ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, KALČIKOVÁ, Gabriela, ZAGORC-KONČAN, Jana, DERCO, Ján. Characterisation of environmental impact of newly designed solvents : [lecture]. V: BODÍK, Igor (ur.), SEDLÁČEK, Stanislav (ur.), HUTŇAN, Miroslav (ur.). *Zborník prednášok 7. bienálnej konferencie s medzinárodnou účasťou odpadové vody 2012 : Štrbské Pleso, 17-19. október 2012*. Bratislava: Asociácia čistiarenských expertov Slovenskej republiky, cop. 2012, str. 316-319. [COBISS.SI-ID 36295429]
- KIŽ48.** VALIČKOVÁ, Mária, DERCO, Ján, ŠILHÁROVÁ, Katarína, CZÖLDEROVÁ, Marianna, KALČIKOVÁ, Gabriela. Odstraňovanie vybraných pesticídov z vôd : [lecture]. V: BODÍK, Igor (ur.), SEDLÁČEK, Stanislav (ur.), HUTŇAN, Miroslav (ur.). *Zborník prednášok 7. bienálnej konferencie s medzinárodnou účasťou odpadové vody 2012 : Štrbské Pleso, 17-19. október 2012*. Bratislava: Asociácia čistiarenských expertov Slovenskej republiky, cop. 2012, str. 117-122. [COBISS.SI-ID 36294149]
- KIŽ49.** MELICHER, Michal, DERCO, Ján, SUMEGOVÁ, Lenka, KALČIKOVÁ, Gabriela. Vplyv produktov ozonizácie benziazolových derivátov na aktivitu mikroorganizmov v aktivovanom kale : [lecture]. V: BODÍK, Igor (ur.), SEDLÁČEK, Stanislav (ur.), HUTŇAN, Miroslav (ur.). *Zborník prednášok 7. bienálnej konferencie s medzinárodnou účasťou odpadové vody 2012 : Štrbské Pleso, 17-19. október 2012*. Bratislava: Asociácia čistiarenských expertov Slovenskej republiky, cop. 2012, str. 147-152. [COBISS.SI-ID 36294405]

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

- KIŽ50.** PAVKO, Aleksander. Acta Chimica Slovenica - mednarodno priznana znanstvena revija : [simpozij Položaj znanstvenog i stručnog izdavaštva u Republici Hrvatskoj, 16. studeni 2012, Zagreb]. *Food technol. biotechnol.*, 2012, vol. 50, suppl. 50th anniversary issue, str. 17-18. [COBISS.SI-ID 36348421]
- KIŽ51.** BEROVIČ, Marin, ŠVAGELJ, Mirjan, HABIJANIČ, Jožica, BOH, Bojana, WRABER-HERZOG, Branka. Biosynthesis of antitumor fungal polysaccharides of Ganoderma lucidum and Grifola frondosa by solid state cultivation of wood industry wastes : [plenary lecture]. V: 3rd Conference for the African Society for Edible and Medicinal Mushrooms (ASEMM). *Mushrooms: food & nutraceuticals for Africa : abstracts book*. [S. l.: s. n.], 2012, str. 50. [COBISS.SI-ID 36302597]
- KIŽ52.** BERLOT, Matjaž, BEROVIČ, Marin. Influence of CO<sub>2</sub> pulses on Saccharomyces cerevisiae in wine fermentation. V: 35th World Congress of Vine and Wine, 18-22 June 2012, Izmir, Turkey. Abstracts. [S. l.]: TAPDK, 2012, str. [1-5]. [COBISS.SI-ID 36034053]
- KIŽ53.** ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona, PLAZL, Igor. Uporaba mikrostrukturiranih naprav v biokemijskih procesih. [vabljeni predavanje] V: KUŠČER, Danjela (ur.). Delavnica Mikrofluidika, 22. maj 2012, Ljubljana, Slovenija. *Knjiga povzetkov*. Ljubljana: Center odličnosti NAMASTE, 2012, str. 14-17. [COBISS.SI-ID 35997701]
- KIŽ54.** PLAZL, Igor. Transport phenomena and kinetics at the microreactor scale : [invited lecture]. V: 2012 International Conference on Small Science (ICSS), Dec. 16-19, 2012, Orlando FL, USA. Program & abstracts : ICSS 2012. [S. l.: s. n.], 2012, str. 121-122. [COBISS.SI-ID 36433925]
- KIŽ55.** ŽNIDARŠIČ PLAZL, Polona. Biotransformations at the microreactor scale : [invited lecture]. V: 2012 International Conference on Small Science (ICSS), Dec. 16-19, 2012, Orlando FL, USA. Program & abstracts : ICSS 2012. [S. l.: s. n.], 2012, str. 89-90. [COBISS.SI-ID 36433669]

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

- KIŽ56.** ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, KALČIKOVÁ, Gabriela, ZAGORC-KONČAN, Jana. Reduction of environmental impact of municipal landfill leachate during oxidative treatment : the importance of phytotoxicity assessment. V: CABRAL, Gustavo B. C. (ur.), BOTELHO, Beatriz A. E. (ur.). *Landfills : waste management, regional practices, and environmental impact*. Hauppauge, N. Y.: Nova Science Publishers, [2012], str. 1-29. [COBISS.SI-ID 36291589]
- KIŽ57.** DERCO, Ján, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, MENCÁKOVÁ, Angelika. Oxidative treatment of landfill leachate. V: CABRAL, Gustavo B. C. (ur.), BOTELHO, Beatriz A. E. (ur.). *Landfills : waste management, regional practices, and environmental impact*. Hauppauge, N. Y.: Nova Science Publishers, [2012], str. 1-84. [COBISS.SI-ID 36296197]
- KIŽ58.** BOH, Bojana, BEROVIČ, Marin. Cultivation of Ganoderma lucidum and Grifola frondosa and production of their pharmaceutical active compounds. V: PETRE, Marian (ur.), BEROVIČ, Marin (ur.). *Mushroom biotechnology and bioengineering*. Bucharest: CD Press Publishing House, cop. 2012, str. 21-84. [COBISS.SI-ID 36312581]

## DRUGO UČNO GRADIVO / OTHER EDUCATIONAL MATERIAL

**KIŽ59.** ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, KALČIKOVÁ, Gabriela, ZAGORC-KONČAN, Jana. *Navodila za vaje iz predmeta Industrijski procesi in trajnostni razvoj : (skripta za vaje za interno uporabo)*. Ljubljana: Univ. v Ljubljani, Fak. za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za kemijsko, biokemijsko in ekološko inženirstvo, 2012. 49 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 35643909]

## KONČNO POROČILO O REZULTATIH RAZISKAV / FINAL RESEARCH REPORT

**KIŽ60.** KAVČIČ, Urška, JAVORNIK, Saška, LEVEC, Janez. *Poročilo o izvedenih eksperimentih : preliminarnih testov in študije sintez ferumoxytola*, (Delovno poročilo KI, 2736). v Ljubljani: Kemijski inštitut, 2012. 32 str., ilustr. [COBISS.SI-ID 5040922]

**KIŽ61.** JAVORNIK, Saška, KAVČIČ, Urška, LEVEC, Janez. *Poročilo o izvedenih eksperimentih termične obdelave (vpliv aditivov) na vzorcih : lycre, pletenine in filamenta*, (Delovno poročilo KI, 2735). v Ljubljani: Kemijski inštitut, 2012. 59 str., ilustr. [COBISS.SI-ID 5040666]

**KIŽ62.** ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, ZAGORC-KONČAN, Jana, KALČIKOVÁ, Gabriela. *Strupenost odpadnih lužnic iz proizvodnje nitrooksina : delovno poročilo : strogo zaupno*. Ljubljana: Univ. v Ljubljani, Fak. za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za kemijsko, biokemijsko in ekološko inženirstvo, 2012. 31 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 36103941]

## PATENTNA PRIJAVA / PATENT APPLICATION

**KIŽ63.** TUŠAR, Marjan, BELIČIČ, Andrej, PREŠEREN, Marijan, ŠUŠTERŠIČ, Ema, NOVIČ, Marjana, ZUPANČIČ-VALANT, Andreja. *S PMMA/ATH kompozitnim prahom modificiran bitumen in uporaba le-tega : patentna prijava : P-201200213, 2012-06-20*. Ljubljana: Urad Republike Slovenije za intelektualno lastnino, 2012. 4 str., ilustr. [COBISS.SI-ID 5121818]

## PREDAVANJE NA TUJI UNIVERZI / INVITED LECTURE AT FOREIGN UNIVERSITY

**KIŽ64.** ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. *[Advanced oxidation processes (AOPs) for removal of hazardous pollutants : invited lecture at INCDO INOE 2000 Research Institute for Analytical Instrumentation, Cluj Napoca, 4. 12. 2012]*. [2012]. [COBISS.SI-ID 36380677]

**KIŽ65.** ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. *[Persistent organic chemicals - a european perspective : Tulane University, School of Public Health & Tropical Medicine, September 11th, 2012, New Orleans, USA]*. [2012]. [COBISS.SI-ID 36190981]

**KIŽ66.** ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. *Sustainable municipal waste management : [Slovak University of Technology in Bratislava, Faculty of Chemical and Food Technology, Bratislava, March 6th, 2012]*. Bratislava, 2012. [COBISS.SI-ID 35833605]

**KIŽ67.** KALČIKOVÁ, Gabriela, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. *[Sustainable waste management: is landfilling appropriate? : invited lecture at INCDO INOE 2000 Research Institute for Analytical Instrumentation, Cluj Napoca, 4. 12. 2012]*. [2012]. [COBISS.SI-ID 36381189]

## VABLJENO PREDAVANJE NA KONFERENCI BREZ NATISA / UNPUBLISHED INVITED CONFERENCE LECTURE

**KIŽ68.** BEROVIČ, Marin. *[Biosynthesis of antitumor fungal polysaccharides of Ganoderma lucidum and grifola frondosa by solid state cultivation of wood industry wastes : lecture at the 2nd IOBB international conference on: Biotechnology for the sustainability of human society, 8th October, Kyambogo University School of Management, Kampala, Uganda]*. [2012]. [COBISS.SI-ID 36303365]

**KIŽ69.** BEROVIČ, Marin. *[Challenges and achievements in european cultivation of edible and medicinal mushrooms : lecture at International School of Advanced Studies on Mushroom Biotechnology and Bioengineering (ISASMBB), University of Pitești, 24th September 2012]*. [2012]. [COBISS.SI-ID 36302853]

## UREDNIK / EDITORSHIP

**KIŽ70.** PETRE, Marian (ur.), BEROVIČ, Marin (ur.). *Mushroom biotechnology and bioengineering*. Bucharest: CD Press Publishing House, cop. 2012. 204 str., ilustr. ISBN 978-606-528-146-2. [COBISS.SI-ID 36312325]



# KATEDRA ZA POLIMERNO INŽENIRSTVO, ORGANSKO KEMIJSKO TEHNOLOGIJO IN MATERIALE

CHAIR OF POLYMER ENGINEERING, ORGANIC CHEMICAL  
TECHNOLOGY AND MATERIALS

## PREDSTOJNIK KATEDRE / HEAD

red. prof. dr. Matjaž Krajnc

## SODELAVCI KATEDRE / PERSONNEL

### Visokošolski učitelji / Faculty

red. prof. dr. Janvit Golob

(upokojen 50 % od 30. 9. 2012 / retired 50% since September 30, 2012)

red. prof. dr. Matjaž Krajnc

izr. prof. dr. Urška Šebenik

### Visokošolski sodelavci / Assistants

Branko Alič, univ.dipl. kem.

### Raziskovalci / Researchers

dr. Dušan Klinar (do 30. 6. 2012)

v dopolnilnem razmerju / part time

doc. dr. Jernej Kajtna

dr. Igor Mihelič

### Tehnik / Technician

Janez Malovrh

Mladi raziskovalci <i>Young Researchers</i>	Mentor	Čas usposabljanja <i>Programme Duration</i>	Oblika usposabljanja <i>Degree</i>
Maja Šoštarič	J. Golob	2007–2013	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>
Rok Ambrožič	M. Krajnc	2012–2016	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 1<sup>st</sup> 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*  
Kemijško 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)*

Kemijška 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*

Organski procesi in produkti / *Organic Processes and Products – VS*  
Separacijski procesi / *Separation Processes – UN*  
Organski materiali in produkti / *Organic Materials and Products – UN*

Bolonjski programi 3. stopnje / *Bologna 3<sup>rd</sup> 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 2<sup>nd</sup> Cycle Study Programmes*

Polimerni materiali (izbirni predmet) / *Polymer Materials (elective course)*, BF

## **RAZISKOVALNA DEJAVNOST / RESEARCH ACTIVITIES**

- 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*

## **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**

Študij, razvoj in optimizacija »flow« reakcij / *Study, development and optimization of »flow« reactions*

Nosilec / *Principal Researcher*: M. Krajnc

Financer / *Sponsored by*: LEK d.d.

Akrilna PSA lepila / *Acrylic PSA Adhesives*

Nosilec / *Principal Researcher*: M. Krajnc

Financer / *Sponsored by*: Aero d.d.

Raziskave za razvoj in pridobitev znanj za zmanjševanje CO<sub>2</sub>

Nosilec / *Principal Researcher*: J. Golob

Financer / *Sponsored by*: Holding slovenske elektrarne d.o.o.

Proces izboljšave testa raztapljanja in vpliv hidrodinamskih ter zunanjih pogojev na ta test in na vrednotenje učinkovine

Nosilec / *Principal Researcher*: J. Golob

Financer / *Sponsored by*: LEK d.d.

## MEDNARODNO ZNANSTVENO SODELOVANJE / INTERNATIONAL RESEARCH COOPERATION

### BILATERALNO MEDNARODNO SODELOVANJE / BILATERAL COOPERATION

Slovenija–Madžarska Kompoziti guma / poliuretani /nanopolnilo: Struktura in lastnosti /  
*Slovenia–Hungary Rubber / Polyurethane / Nanofiller Systems: Structure and Properties*  
Nosilka / *Principal Researcher*: U. Šebenik

## BIBLIOGRAFIJA 2012 / REFERENCES 2012

### IZVIRNI ZNANSTVENI ČLANEK / ORIGINAL SCIENTIFIC ARTICLE

- POT1.** GOLOB, Janvit, KLINAR, Dušan, BRICELJ, Mihael. Potential solutions for CO<sub>2</sub>-capturing technologies in the slovenian context. *Acta chim. slov.* [Tiskana izd.], 2012, vol. 59, no. 3, str. 615-621. <http://acta.chem-soc.si/59/59-3-615.pdf>. [COBISS.SI-ID 36189445]
- POT2.** FISCALETTI, Davide, ŠORLI, Srečko, KLINAR, Dušan. The symmetrized quantum potential and space as a direct information medium. *Ann. fond. Louis Broglie*, 2012, letn. 37, str. 41-72. [COBISS.SI-ID 23701304]
- POT3.** ZIDAR, Jernej, PAVLIN, Matic, MIHELIC, Igor, OGORELEC, Primož, PLAVEC, Janez, MAVRI, Janez. Stability and reactivity of progressively methylolated melamine derivatives. *Computational and theoretical chemistry*, 2012, str. 1-7, ilustr. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2210271X12005804>, doi: 10.1016/j.comptc.2012.11.010. [COBISS.SI-ID 5143322]
- POT4.** ALIČ, Branko, ŠEBENIK, Urška, KRAJNC, Matjaž. Microencapsulation of butyl stearate with melamine-formaldehyde resin : effect of decreasing the pH value on the composition and thermal stability of microcapsules. *Express polym. lett.*, 2012, vol. 6, no. 10, str. 826-836, doi: 10.3144/expresspolymlett.2012.88. [COBISS.SI-ID 36126469]
- POT5.** KAJTNA, Jernej, KRAJNC, Matjaž. »Design of experiments« analysis in study of solventless UV crosslinkable acrylic pressure sensitive adhesives. *Int. j. adhes. adhes.* [Print ed.], str. 1-24. [http://ac.els-cdn.com/S0143749612001790/1-s2.0-S0143749612001790-main.pdf?\\_tid=774728ce-3563-11e2-8ee8-00000a0b0f02&acdnat=1353671389\\_9bce332e44cbcd92aca900d31fa196f6](http://ac.els-cdn.com/S0143749612001790/1-s2.0-S0143749612001790-main.pdf?_tid=774728ce-3563-11e2-8ee8-00000a0b0f02&acdnat=1353671389_9bce332e44cbcd92aca900d31fa196f6), doi: 10.1016/j.ijadhadh.2012.11.005. [COBISS.SI-ID 36354565]
- POT6.** ŠEBENIK, Urška, KARGER-KOCSIS, József, KRAJNC, Matjaž, THOMANN, Ralf. Dynamic mechanical properties and structure of in situ cured polyurethane/hydrogenated nitrile rubber compounds : effect of carbon black type. *J. appl. polym. sci.*, 2012, vol. 125, no. S1, str. E41-E48, doi: 10.1002/app.35626. [COBISS.SI-ID 35685381]
- POT7.** ŠINKOVEC, Ervin, POHAR, Andrej, KRAJNC, Matjaž. Phase transfer catalyzed esterification : modeling and experimental studies in a microreactor under parallel flow conditions. *Microfluid. nanofluid. (Print)*, str. 1-10. [http://link.springer.com/static-content/0.5480/pdf/852/art%253A10.1007%252Fs10404-012-1067-7.pdf?token=1350551374475--e36a7ac75df0edf55cadde298a701ef40c7fb7477dfa505fed0b83a264efe1e847bfff4d4d6\\_c809779227c3cf85bd6d5b88b6cb1d5fdad6ce51f61b481e3b315&doi=10.1007%252Fs10404-012-1067-7&contentType=article](http://link.springer.com/static-content/0.5480/pdf/852/art%253A10.1007%252Fs10404-012-1067-7.pdf?token=1350551374475--e36a7ac75df0edf55cadde298a701ef40c7fb7477dfa505fed0b83a264efe1e847bfff4d4d6_c809779227c3cf85bd6d5b88b6cb1d5fdad6ce51f61b481e3b315&doi=10.1007%252Fs10404-012-1067-7&contentType=article), doi: 10.1007/s10404-012-1067-7. [COBISS.SI-ID 36262917]
- POT8.** 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*, 2012, vol. 29, iss. 3, str. 325-331, doi: 10.1016/j.nbt.2011.12.002. [COBISS.SI-ID 35597317]
- POT9.** MOHORIC, Ines, ŠEBENIK, Urška. Semibatch anionic ring-opening polymerization of octamethylcyclotetrasiloxane in emulsions : effect of the amount of seed polymer particles. *Polym. int.*, str. 1-7. <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/pi.4386/pdf>, doi: 10.1002/pi.4386. [COBISS.SI-ID 36249093]

### OBJAVLJENI ZNANSTVENI PRISPEVEK NA KONFERENCI / PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTION

- POT10.** LAH, Branko, KLINAR, Dušan, LIKOZAR, Blaž. Vacuum pyrolysis of scrap rubber : determination of optimal process parameters from laboratory and pilot-scale measurements and calculations. V: *Proceedings*. Venice: [s. n.], 2012, str. [1-9]. [COBISS.SI-ID 5123610]
- POT11.** ŠOŠTARIČ, Maja, RUČIGAJ, Aleš, BRICELJ, Mihael, LIKOZAR, Blaž, GOLOB, Janvit. Izgradnja pilotnega fotobioreaktorja za gojenje mikroalg : [predavanje]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. [1-6]. [COBISS.SI-ID 36206853]
- POT12.** GRILC, Miha, LEVEC, Janez, GOLOB, Janvit, DOHRN, Ralf, PEPER, Stephanie, FELE ŽILNIK, Ljudmila. Izgradnja visokotlačne ravnotežne celice in meritve faznega ravnotežja CO<sub>2</sub> + n-dekan z različnimi eksperimentalnimi metodami : [predavanje]. V: KRAVANJA, Zdravko (ur.), BRODNJAK-VONČINA, Darinka (ur.), BOGATAJ, Miloš (ur.). *Slovenski kemijski dnevi 2012, Portorož, 12.-14. september 2012*. Maribor: FKKT, 2012, str. [1-6]. [COBISS.SI-ID 36211205]

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

- POT13.** ŠEBENIK, Urška. *Osnove polimernega inženirstva : zbirka nalog*. 1. izd. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2012. 41 str., ilustr. ISBN 978-961-6756-29-7. [COBISS.SI-ID 259131904]

## KONČNO POROČILO O REZULTATIH RAZISKAV / FINAL RESEARCH REPORT

**POT14.** KRAJNC, Matjaž, RUČIGAJ, Aleš, ALIČ, Branko. *Študij, razvoj in optimizacija »flow« reakcij : poročilo o delu po pogodbi 2011-349 za Lek farmacevtska družba d.d., Ljubljana za obdobje 1. 1. 2012 - 31. 3. 2012.* Ljubljana: Univ. v Ljubljani, Fak. za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za polimerno inženirstvo, organsko kemijsko tehnologijo in materiale, 2012. 1 zv., graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 36263173]

## PATENT / PATENT

**POT15.** OSMAK, Maja, POLANC, Slovenko, ČIMBORA, Tamara, BROZOVIČ, A., KOČEVAR, Marijan, MAJCE, Vita, ALIČ, Branko. *Analogues of 1, 3-bis(4-nitrophenyl)triazenes, their pharmaceutically acceptable salts and N-acyl derivatives for tumor treatment : patent : US 8217022 (B2), 2012-07-20.* [S. 1.]: World Intellectual Property Organization, 2012. 7 str., ilustr. [COBISS.SI-ID 30639621]

**POT16.** KLINAR, Dušan, BRENCELJ, Albin. *Metoda za ciklično vakumiranje v šaržnem reaktorju : patent št. SI 23545 A, datum objave 31. 05. 2012; patentna prijava št. P-201000369 z dne 09. 11. 2010.* Ljubljana: Urad RS za intelektualno lastnino, 2012. [5] str. [COBISS.SI-ID 16117782]

**POT17.** KLINAR, Dušan, BRENCELJ, Albin. *Metoda za hitro segrevanje trdne reakcijske zmesi v šaržnem reaktorju : patent št. SI 23553 A, datum objave 31. 05. 2012; patentna prijava št. P-201000368 z dne 09. 11. 2010.* Ljubljana: Urad RS za intelektualno lastnino, 2012. [6] str. [COBISS.SI-ID 16118038]

## PREDAVANJE NA TUJI UNIVERZI / INVITED LECTURE AT FOREIGN UNIVERSITY

**POT18.** GOLOB, Janvit. *[Capturing CO<sub>2</sub> : Laboratory for Environmental Biotechnology, École Polytechnique Fédérale de Lausanne, 23rd February, 2012].* [2012]. [COBISS.SI-ID 36078341]

**POT19.** GOLOB, Janvit. *[Contribution to low carbon society through sustainable development : Department of Chemical and Environmental Engineering, University of Arizona, 23rd April, 2012].* [2012]. [COBISS.SI-ID 36078597]

## KATEDRA ZA VARSTVO PRI DELU CHAIR OF SAFETY AT WORK

### PREDSTOJNIK KATEDRE / HEAD

doc. dr. Jože Šrekl

### SODELAVCI KATEDRE / PERSONNEL

#### Visokošolski učitelji / *Faculty*

dr. Aleš Jug, pred.

doc. dr. Mitja Robert Kožuh

doc. dr. Jože Šrekl

v dopolnilnem razmerju / *part time*

doc. dr. Marija Molan (do 30. 9. 2012)

prof. dr. Stojan Petelin (do 30. 9. 2012)

doc. dr. Peter Vidmar (do 30. 9. 2012)

#### Visokošolski sodelavci / *Assistant*

Marjan Lukežič, univ. dipl. inž.

#### Tehnika / *Technicians*

Miran Banfi

Iztok Košir

## IZOBRAŽEVALNA IN RAZISKOVALNA DEJAVNOST KATEDRE / EDUCATIONAL AND RESEARCH ACTIVITIES

### IZOBRAŽEVALNA DEJAVNOST / LECTURED COURSES

#### FKKT / FACULTY OF CHEMISTRY AND CHEMICAL TECHNOLOGY

Bolonjski program 1. stopnje / *Bologna 1<sup>st</sup> 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 2<sup>nd</sup> Cycle Master Study Programme*

Tehniška varnost / *Technical Safety*:

Numerične metode v varnosti II / *Numerical Methods in Safety II*

Vodenje tveganja in procesna varnost / *Risk Management and Process Safety*

Varno projektiranje in ranljivost sistemov / *Safe Design and Vulnerability of Systems*

Intervencije in reševanje / *Interventions and Rescue*

Človeški in organizacijski dejavniki / *Human and Organizational Factors*

Tehniška varnost (izbirni predmet) / *Technical Safety (elective course)*

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

Okoljska tveganja (izbirni predmet) / *Environmental Risks (elective course)*

Analiza vedenja in varnost (izbirni predmet) / *Analysis of the Behavior and Safety (elective course)*

Profesionalna patologija (izbirni predmet) / *Professional Pathology (elective course)*

Varstvo okolja II (izbirni predmet) / *Environmental Protection II (elective course)*

Požarnovarnostna analiza objektov (izbirni predmet) / *Fire Safety Analysis of Buildings (elective course)*

Delovne priprave in naprave II (izbirni predmet) / *Work Appliances and Devices II (elective course)*

## **RAZISKOVALNA DEJAVNOST / RESEARCH ACTIVITIES**

- Nove metodologije ocenjevanja tveganja / *New Methods in Risk Assessment*
- Ocenjevanje kompleksnih tehnoloških sistemov / *Assessment of Complex Technological Systems*
- Človek – element tveganja / *Human as a Risk Factor*
- Metodologija statistike požarov / *Methodology of Fire Statistics*
- Inženirske metode pri vrednotenju požarne varnosti / *Engineering Methods in Fire Safety Assessment*
- Modeliranje s strukturnimi enačbami v oceni požarne ogroženosti / *Structural Equation Modeling in Fire Risk Assessment*
- Problemsko zasnovan študij na področju statistike / *Problem-Based Learning in Statistics*
- Razvoj simulatorja cestnega predora za usposabljanje operabilnega osebja v nadzornem centru / *Development of Road Tunnel Simulator for Staff Training in Operation Control Center*
- Analiza dejanskega požara v predoru Trojane / *Analysis of Actual Fire in the Trojane Tunnel*
- Varnostna analiza predora Karavanke / *Safety Analysis of the Karavanke Tunnel*
- Analize tveganj nekaterih slovenskih cestnih predorov / *Risk Analysis of Some Road Tunnels in Slovenia*
- Analize varnosti načrtovanih plinskih terminalov v Tržaškem zalivu / *Safety Analysis of LNG Terminals Planned in the Gulf of Trieste*

## **POMEMBNI DOSEŽKI SODELAVCEV KATEDRE / SIGNIFICANT ACHIEVEMENTS OF THE CHAIR STAFF**

### **NAGRADE, PRIZNANJA / AWARDS, RECOGNITIONS**

- A. Nadler, Nagrada Avgusta Kuharja za najboljšo diplomsko delo za leto 2012 (mentor M. Molan) / *The Avgust Kuhar Award for the Best Diploma Thesis in 2012*

## ORGANIZACIJA MEDNARODNIH SREČANJ / ORGANISATION OF INTERNATIONAL MEETINGS

- Varstvo pri delu, varstvo pred požari in medicina dela : dvodnevni posvet z mednarodno udeležbo, Portorož, maj 2012 / *Safety at Work, Fire Safety and Occupational Medicine, Two-day Symposium with International Participation, Portorož, May 2012*

## 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 2012 / REFERENCES 2012

### IZVIRNI ZNANSTVENI ČLANEK / ORIGINAL SCIENTIFIC ARTICLE

- VP1. PERKOVIČ, Marko, GUCMA, Lucjan, PRZYWARTY, Marcin, GUCMA, Maciej, PETELIN, Stojan, VIDMAR, Peter. Nautical risk assessment for LNG operations at the Port of Koper. *Stroj. vestn.*, 2012, vol. 58, no. 10, str. 607-613. [http://www.sv-jme.eu/data/upload/2012/10/06\\_2010\\_265\\_Perkovic\\_04.pdf](http://www.sv-jme.eu/data/upload/2012/10/06_2010_265_Perkovic_04.pdf), doi: 10.5545/sv-jme.2010.265. [COBISS.SI-ID 2348643]  
VP2. VIDMAR, Peter, PETELIN, Stojan, LUJN, Blaž. Upgrade of a transverse ventilation system in a bi-directional tunnel. *Therm. sci.*, 2012, vol. 16, no. 4, str. 1067-1080, doi: 10.2298/TSCI120212053V. [COBISS.SI-ID 2289507]

### KRATKI ZNANSTVENI PRISPEVEK / SHORT SCIENTIFIC ARTICLE

- VP3. MOLAN, Marija, MOLAN, Gregor. Duševno zdravje in počutje zaposlenih. *HRM (Ljubl.)*, nov. 2012, letn. 10, št. 50, str. 61-64, ilustr. [COBISS.SI-ID 50712930]  
VP4. PERKOVIČ, Marko, TWRDY, Elen, HARSCH, Rick, VIDMAR, Peter, GUCMA, Maciej. Technological advances and efforts to reduce piracy. *TransNav (Print)*, 2012, vol. 6, no. 2, str. 203-206. [COBISS.SI-ID 2303075]

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

- VP5. GUCMA, Lucjan, GUCMA, Maciej, PUSZCZ, Agnieszka, JUSZKIEWICZ, Wieslaw, BAK, Andrzej, GRALAK, Rafał, PERKOVIČ, Marko, VIDMAR, Peter, PETELIN, Stojan. Studies over integrated full mission maritime simulators. V: BEZJAK, Jožica (ur.). *Technical creativity in school's curricula with the form of project learning From idea to the product : from the kindergarten to the technical faculty : proceedings : 10th international science symposium : od vrta do fakultetnega tehniškega študija : zbornik prispevkov : 10. mednarodni znanstveni posvet, 18.-20. April 2012, Portorož, Slovenia*. Ljubljana: Somaru, 2012, 2012, str. 146-149. [COBISS.SI-ID 2295907]

### OBJAVLJENI ZNANSTVENI PRISPEVEK NA KONFERENCI / PUBLISHED SCIENTIFIC CONFERENCE CONTRIBUTION

- VP6. GRALAK, Rafał, GUCMA, Maciej, GUCMA, Lucjan, BAK, Andrzej, PERKOVIČ, Marko, VIDMAR, Peter, NEMEC, David. Vision in integrated full mission simulators. V: KNUD, Benedict (ur.). *INSLC 17 : proceedings*. Warnemuende: University of Applied Science, 2012, 2012, 10 str. [COBISS.SI-ID 2369123]  
VP7. SUBAN, Valter, PERKOVIČ, Marko, VIDMAR, Peter, DIMC, Franc. AIS on fast rescue boats; an effective aid for training and responding to oil spill. V: RIJAVEC, Robert (ur.), ANŽEK, Mario (ur.), HERNAVS, Boštjan (ur.), MEŠE, Pavel (ur.), ŠTERN, Andrej (ur.), GOSTIŠA, Blaž (ur.), KOS, Serdjo (ur.), PETELIN, Stojan (ur.), JANŠA, Srečko (ur.). *20th International Symposium on Electronics in Transport [being] ISEP 2012, March 26-27, 2012, Ljubljana, Slovenia*. *Linking people with ITS : proceedings*. Ljubljana: Electrotechnical Association of Slovenia: Slovensko društvo za inteligentne transportne sisteme, 2012, 2012, str. M3, [1-4]. [COBISS.SI-ID 2270819]  
VP8. NIKOLIČ, Vesna, MARKIČ, Mirko, ŠREKL, Jože, TARADI, Josip. Analiza zastrupljenosti nastavnih sadržaja iz področja upravljanja ljudskim resursima u studijskim programima zaštite na radu u Srbiji, Sloveniji i Hrvatskoj. V: TARADI, Josip (ur.). *Menadžment i sigurnost : tema konferencije: Upravljanje ljudskim resursima i sigurnost*. (Menadžment i sigurnost). Čakovac: Hrvatsko društvo inženjera sigurnosti, 2012, jun. 2012, str. 58-76. [COBISS.SI-ID 4416471]  
VP9. VIDMAR, Peter, PERKOVIČ, Marko. Improvement of steering efficiency for sailing boats. V: RIZZUTO, Enrico (ur.), SOARES, C. Guedes (ur.). *Sustainable maritime transportation and exploitation of sea resources, volume 1 : proceedings*. Leiden: Taylor & Francis, cop. 2012, 2012, str. 173-180. [COBISS.SI-ID 2211427]



- VP10.** GUCMA, Lucian, GUCMA, Maciej, PERKOVIČ, Marko, VIDMAR, Peter. Simulation method for risk assessment in LNG terminal design. V: RIZZUTO, Enrico (ur.), SOARES, C. Guedes (ur.). *Sustainable maritime transportation and exploitation of sea resources, volume 2 : proceedings*. Leiden: Taylor & Francis, cop. 2012, 2012, str. 755-761. [COBISS.SI-ID 2211683]
- VP11.** VIDMAR, Peter, PETELIN, Stojan, PERKOVIČ, Marko, GUCMA, Lucian, GUCMA, Maciej. The influence of large accidents on risk assessment for LNG terminals. V: RIZZUTO, Enrico (ur.), SOARES, C. Guedes (ur.). *Sustainable maritime transportation and exploitation of sea resources, volume 2 : proceedings*. Leiden: Taylor & Francis, cop. 2012, 2012, str. 763-773. [COBISS.SI-ID 2213731]
- VP12.** LUIN, Blaž, PETELIN, Stojan. Usposabljanje operaterov cestnih predorov na modularnem simulatorju. V: *Varstvo pri delu, varstvo pred požari in medicina dela : dvodnevni posvet z mednarodno udeležbo, Portorož 2012, 15.-16. 5. 2012*. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Oddelek za tehniško varnost, 2012, 2012, str. [1-7]. [COBISS.SI-ID 2362723]
- VP13.** JUG, Aleš. Usposabljanje na področju pred požarom v luči novih predpisov. V: *Varstvo pri delu, varstvo pred požari in medicina dela : dvodnevni posvet z mednarodno udeležbo, Portorož 2012, 15.-16. 5. 2012*. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Oddelek za tehniško varnost, 2012, str. [1-10]. [COBISS.SI-ID 35975685]
- VP14.** ŠREKL, Jože. Pregled problematike varne rabe vodika kot pogonskega goriva za vozila. V: *Varstvo pri delu, varstvo pred požari in medicina dela : dvodnevni posvet z mednarodno udeležbo, Portorož 2012, 15.-16. 5. 2012*. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Oddelek za tehniško varnost, 2012, str. 1-12. [COBISS.SI-ID 35974405]
- VP15.** LUKEŽIČ, Marjan, MARINŠEK, Marjan. Preprečevanje zasičenja niza PEM gorivnih celic z ogljikovim monoksidom in analiza odpovedi PEM gorivne celice. V: *Varstvo pri delu, varstvo pred požari in medicina dela : dvodnevni posvet z mednarodno udeležbo, Portorož 2012, 15.-16. 5. 2012*. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Oddelek za tehniško varnost, 2012, str. 1-12. [COBISS.SI-ID 35974917]
- VP16.** NIKOLIČ, Vesna, MARKIČ, Mirko, ŠREKL, Jože, TARADI, Josip. Analiza zastupljenosti nastavnih sadržaja iz področja upravljanja ljudskim resursima u studijskim programima zaštite na radu u Srbiji, Sloveniji i Hrvatskoj. V: TARADI, Josip (ur.). *Zbornik radova VII. znanstveno-stručne konferencije s međunarodnim sudjelovanjem : menadžment i sigurnost : upravljanje ljudskim resursima i sigurnost*. Čakovec: Hrvatsko društvo inženjera sigurnosti: Visoka škola za sigurnost, 2012, str. 58-76. [COBISS.SI-ID 36027141]

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

- VP17.** GUCMA, Lucjan, GUCMA, Maciej, PUSZCZ, Agnieszka, JUSZKIEWICZ, Wieslaw, BAK, Andrzej, GRALAK, Rafał, PERKOVIČ, Marko, VIDMAR, Peter, PETELIN, Stojan. Studies over integrated full mission maritime simulators. V: BEZJAK, Jožica (ur.). *Technical creativity in school's curricula with the form of project learning From idea to the product : from the kindergarten to the technical faculty : 10th international science symposium, Abstracts : od vrtca do fakultetnega tehniškega študija : 10. mednarodni znanstveni posvet, 18.-20. april 2012, Portorož, Slovenia, Zbornik povzetkov*. Ljubljana: Somaru, 2012, 2012, str. 41. [COBISS.SI-ID 2296675]

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

- VP18.** VIDMAR, Peter, PETELIN, Stojan, PERKOVIČ, Marko. Fluid dynamic models application in risk assessment. V: JUAREZ, Hector L. (ur.). *Fluid dynamics, computational modeling and applications*. Rijeka: InTech, cop. 2012, 2012, str. 67-90. [COBISS.SI-ID 2267491]
- VP19.** VIDMAR, Peter, PETELIN, Stojan, PERKOVIČ, Marko, LUIN, Blaž, KOŽUH, Mitja. LNG terminals : a safety perspective. V: ČALETA, Denis (ur.), SHEMELLA, Paul (ur.). *Managing the consequences of terrorist acts - efficiency and coordination challenges*. Ljubljana: Institute for Corporative Security Studies; Monterey: Center for Civil-Military Relations, 2012, 2012, str. 69-82. [COBISS.SI-ID 2375523]

## **KONČNO POROČILO O REZULTATIH RAZISKAV / FINAL RESEARCH REPORT**

- VP20.** PETELIN, Stojan, VIDMAR, Peter, VATOVEC-KRMAC, Evelin, LUIN, Blaž, VALIČ, Marko, DIMC, Franc, JENČEK, Peter, PERKOVIČ, Marko, BAŽEC, Matej, KOŽUH, Mitja, JUG, Aleš. *Optimizacija upravljanja cestnih predorov med normalnimi in izrednimi razmerami (L2-2324) v letu 2011 : letno poročilo o rezultatih raziskovalnega projekta*. Portorož: Univ. Ljubljana, Fak. za pomorstvo in promet, 2012. 9 f. [COBISS.SI-ID 2292067]



