

Univerza v Ljubljani
Fakulteta za *kemijo in kemijsko tehnologijo*



ZNANSTVENO – RAZISKOVALNO DELO V LETU 2003

Ljubljana, februar 2004

Znanstveno – raziskovalno delo v letu 2003

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

Uredila: prodekan doc. dr. Matjaž Krajnc in Olga Belavič

Tisk: Tiskarna Univerze v Ljubljani

Ljubljana, februar 2004

Naklada: 500 izvodov

ISSN 1408-3213

KAZALO

UVOD.....	III
DIPLOME	1
UNIVERZITETNI ŠTUDIJ KEMIJE.....	1
KEMIJSKO IZOBRAŽEVANJE	5
UNIVERZITETNI ŠTUDIJ BIOKEMIJE	5
UNIVERZITETNI ŠTUDIJ KEMIJSKEGA INŽENIRSTVA	6
UNIVERZITETNI ŠTUDIJ KEMIJSKE TEHNOLOGIJE	8
VISOKOŠOLSKE DIPLOME.....	9
MAGISTERIJI.....	21
KEMIJA	21
KEMIJSKA TEHNOLOGIJA	21
KEMIJSKO INŽENIRSTVO	21
DOKTORATI.....	23
KEMIJA	23
KEMIJSKO INŽENIRSTVO	24
MATERIALI	25
PREGLED PROJEKTOV ZA LETO 2003	
<i>RESEARCH PROJECTS OVERVIEW IN YEAR 2003.....</i>	<i>27</i>
PREGLED PROGRAMOV ZA LETO 2003	
<i>RESEARCH PROGRAMMES OVERVIEW IN YEAR 2003</i>	<i>29</i>
PROGRAMSKE SKUPINE / RESEARCH PROGRAMMES	
REAKTIVNI INTERMEDIATI PRI REAKCIJAH OKSIDACIJE	
<i>REACTIVE INTERMEDIATES IN THE OXIDATION REACTIONS.....</i>	<i>31</i>
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>	<i>33</i>
ORGANSKA KEMIJA	
<i>ORGANIC CHEMISTRY</i>	<i>35</i>
ANALIZNA KEMIJA	
<i>ANALYTICAL CHEMISTRY.....</i>	<i>41</i>
TEORETIČNA KEMIJA	
<i>THEORETICAL CHEMISTRY</i>	<i>43</i>
FIZIKALNA KEMIJA	
<i>PHYSICAL CHEMISTRY</i>	<i>47</i>
MAKROMOLEKULARNA KEMIJA	
<i>MACROMOLECULAR CHEMISTRY</i>	<i>49</i>
KEMIJSKO INŽENIRSTVO	
<i>CHEMICAL ENGINEERING</i>	<i>51</i>

SINTEZA, STRUKTURA, LASTNOSTI SNOVI IN MATERIALOV	
<i>SYNTHESIS, STRUCTURE, PROPERTIES OF THE MATTER AND MATERIALS</i>	55

KATEDRE / CHAIRS

KATEDRA ZA ANORGANSKO KEMIJO	
<i>CHAIR OF INORGANIC CHEMISTRY</i>	57
KATEDRA ZA ORGANSKO KEMIJO	
<i>CHAIR OF ORGANIC CHEMISTRY</i>	65
KATEDRA ZA ANALIZNO KEMIJO	
<i>CHAIR OF ANALYTICAL CHEMISTRY</i>	71
KATEDRA ZA FIZIKALNO KEMIJO	
<i>CHAIR OF PHYSICAL CHEMISTRY</i>	77
KATEDRA ZA BIOKEMIJO	
<i>CHAIR OF BIOCHEMISTRY</i>	81
KATEDRA ZA KATEDRA ZA ANORGANSKO TEHNOLOGIJO IN MATERIALE	
<i>CHAIR OF INORGANIC TECHNOLOGY AND MATERIALS</i>	83
KATEDRA ZA POLIMERNO INŽENIRSTVO, ORGANSKO KEMIJSKO TEHNOLOGIJO IN MATERIALE	
<i>CHAIR OF POLYMER ENGINEERING, ORGANIC CHEMICAL TECHNOLOGY AND MATERIALS</i>	87
KATEDRA ZA KEMIJSKO, BIOKEMIJSKO IN EKOLOŠKO INŽENIRSTVO	
<i>CHAIR OF CHEMICAL, BIOCHEMICAL AND ENVIRONMENTAL ENGINEERING</i>	91
KATEDRA ZA VARSTVO PRI DELU	
<i>CHAIR FOR SAFETY AT WORK</i>	97

Opomba: Z * so označeni rezultati, vezani na delo, ki je v celoti ali pretežno opravljeno v drugih JRO.

UVOD

V poročilu Fakultete za kemijo in kemijsko tehnologijo za leto 2003 so prikazani rezultati raziskovalne dejavnosti fakultete v preteklem letu. Pregledu opravljenih diplom, magisterijev in doktoratov sledi predstavitev dela programskih skupin in posameznih kateder. Poleg znanstvenih in strokovnih del so v poročilu prikazane še nekatere druge pomembnejše aktivnosti, kot so obiski tujih znanstvenikov, sodelovanje pri organizaciji znanstvenih srečanj, sodelovanje v temeljnih in aplikativnih projektih MŠZŠ, v mednarodnih projektih ter sodelovanje z industrijo. Kljub manj ugodnim razmeram za raziskovalno delo predvsem zaradi neustreznih delovnih pogojev in manjšega števila mladih raziskovalcev lahko ugotovimo, da je bilo raziskovalno delo na fakulteti v preteklem obdobju dovolj uspešno in predstavlja soliden temelj kvalitetnega podiplomskega izobraževanja.

doc. dr. Matjaž Krajnc
prodekan za znanstveno-raziskovalno delo
in podiplomski študij

DIPLOME

UNIVERZITETNI ŠTUDIJ KEMIJE

Sabina Beranič

Mentor: doc. dr. Matija Strlič

VLOGA NEKATERIH KOVIN PREHODA V FENTONOVEM REAKCIJSKEM SISTEMU

Datum zagovora: 4. 4. 2003

Rok Brinc

Mentor: prof. dr. Franc Gubenšek

JASMONSKA KISLINA V RASTLINAH PODVRŽENEM STRESU

Datum zagovora: 16. 5. 2003

Judita Burger

Mentorica: prof. dr. Lucija Zupančič-Kralj

OPTIMIZACIJA METOD ZA KVANTITATIVNO DOLOČANJE VSEBNOSTI SIMVASTATINA IN NEČISTOT V FARMACEVTSKEM PREPARATU

Datum zagovora: 5. 6. 2003

Tina Celestina

Mentor: akad. prof. dr. Branko Stanovnik

TERMIČNE CIKLIZACIJE METAL (E)-3-ARILAMINO-2-(BENZOILAMINO)BUT-2-ENOATOV V 1-ARIL-2-FENIL-5-METIL-4-METOKSIKARBONIL-1H-IMIDAZOLE

Datum zagovora: 24. 11. 2003

Peter Cvelbar

Mentorica: prof. dr. Nataša Bukovec

SINTEZA IN KARAKTERIZACIJA KOMPLEKSOV PLATINE(II) Z RAZLIČNIMI AMINSKIMI LIGANDI

Datum zagovora: 14. 2. 2003

Petra Čebašek

Mentor: prof. dr. Jurij Svete

PARALELNA SINTEZA NA OSNOVI METIL 2-ACETILAMINO-3-DIMETILAMINOPROPENOATA

Datum zagovora: 29. 9. 2003

Benjamin Černugelj

Mentor: prof. dr. Boris Pihlar

POSKUS SEPARACIJE NEKATERIH BIOLOŠKO AKTIVNIH KIRALNIH SPOJIN S KAPILARNO ELEKTROFOREZO

Datum zagovora: 8. 7. 2003

Maja Gričar

Mentor: prof. dr. Boris Pihlar

OPTIMIZACIJA PULZNE AMPEROMETRIČNE DETEKCIJE V IONSKI KROMATOGRAFIJI

Datum zagovora: 13. 5. 2003

Andrej Grubišič

Mentor: prof. dr. Ciril Pohar

OSMOZNI KOEFICIENT VODNIH RAZTOPIN 4,5-, 6,6- IN 6,9-IONEN-KLORIDOV

Datum zagovora: 12. 6. 2003

ocena odlično

Anja Horvat

Mentor: prof. dr. Bojan Verček
SINTEZA SPIRO-2-OKSAZOLINOV
Datum zagovora: 10. 6. 2003

Mihaela Jaćimović

Mentor: prof. dr. Primož Šegedin
KOMPLEKSI MED BAKROVIMI HALOGENIDI IN IMIDAZOLOM
Datum zagovora: 29. 5. 2003

Rožle Jakopič

Mentor: prof. dr. Boris Pihlar
RAZVOJ METODE ZA DOLOČANJE ⁹⁰Sr V VZORCIH IZ OKOLJA
Datum zagovora: 16. 5. 2003
ocena odlično

Janja Jakše

Mentorica: prof. dr. Lucija Zupančič-Kralj
DOLOČEVANJE ORGANOKOSITROVIH SPOJIN V VODI S PLINSKO KROMATOGRAFIJO
Datum zagovora: 21. 3. 2003

Boštjan Jerman

Mentor: doc. dr. Ksenija Kogej
ŠTUDIJ KONFORMACIJSKIH SPREMENB IZOTAKTIČNE POLIMETAKRILNE KISLINE V
MEŠANIH TOPILIH
Datum zagovora: 3. 9. 2003

Maja Kulovec

Mentor: prof. dr. Jože Pungerčar
ANALIZA VIRULENČNIH DEJAVNIKOV IN ODPORNOSTI PROTI ANTIBIOTIKOM SEVOV
BAKTERIJE Escherichia coli, IZOLIRANIH IZ URINA BOLNIKOM Z INFEKCIJO SEČIL
Datum zagovora: 13. 2. 2003

Nika Lendero

Mentor: prof. dr. Božo Plesničar
POSKUSI DETEKCIJE ORGANSKIH HIDROPEROKSIDOV IN HIDROTRIOKSIDOV Z
NIZKOTEMPERATURNO INFRARDEČO SPEKTROSKOPIJO
Datum zagovora: 12. 9. 2003
ocena odlično

Klavdija Lukman

Mentor: prof. dr. Marijan Kočever
SINTEZA ESTROV HETEROCIKLIČNIH α,β -DIDEHIDRO- α -AMINOKISLINSKIH DERIVATOV
Datum zagovora: 30. 9. 2003

Damjan Makuc

Mentor: prof. dr. Vito Turk
PRIJAVA LASTNOSTI KATEPSINA S IZRAŽENEGA V BAKTERIJI ESCHERICHIA COLI IN
KVASOVKI PICHIA
Datum zagovora: 22. 10. 2003

Lucija Mandelj

Mentorica: prof. dr. Lucija Zupančič-Kralj
ŠTUDIJ ADSORPCIJE NEKATERIH KLORIRANIH SPOJIN NA PRST
Datum zagovora: 18. 12. 2003

Borut Markošek

Mentor: prof. dr. Anton Meden

DOLOČITEV STRUKTUR DVEH NOVIH SPOJIN V SISTEMU La-Nb-Ti-O Z RENTGENSKO PRAŠKOVNO DIFRAKCIJO

Datum zagovora: 4. 7. 2003

Fedja Marušič

Mentor: prof. dr. Primož Šegedin

SINTEZA IN KARAKTERIZACIJA NEKATERIH Cu(II) KOMPLEKSOV Z METANOATNIM IONOM IN PIRIDINOM

Datum zagovora: 10. 7. 2003

Matjaž Mazaj

Mentor: prof. dr. Anton Meden

Somentor: prof. dr. Venčeslav Kaučič

SINTEZA ALUMINOFOSFATNIH MOLEKULSKIH SIT V MIKROVALOVNI PEČI

Datum zagovora: 4. 7. 2003

Katarina Mestnik

Mentor: prof. dr. Bojan Verček

SINTEZA NEKATERIH 3-HIDROKSI-1H-PIRAZOLOV

Datum zagovora: 10. 6. 2003

Katja Muhič

Mentorica: prof. dr. Bojana Boh

DOLOČANJA FENOLNIH ANTIOKSIDANTOV V OLUPKIH KROMPIRJA S SPEKTROFOTOMETRIJO IN TENKOPLASTNO KROMATOGRAFIJO

Datum zagovora: 6. 6. 2003

Ksenja Nadu

Mentorica: doc. dr. Barbara Modec

PRIPRAVA IN KARAKTERIZACIJA OKSOMOLIBDENOVIIH(V) SPOJIN Z ANIONI NEKATERIH DIKARBOKSILNIH KISLIN

Datum zagovora: 22. 5. 2003

Andrej Nemarnik

Mentorica: doc. dr. Nataša Gros

DOLOČANJE HIDROGENKARBONATA V NARAVNIH VODAH V PRISOTNOSTI ORGANSKIH KISLIN

Datum zagovora: 7. 2. 2003

Žiga Nose

Mentor: doc. dr. Franc Kovač

ŠTUDIJ OKSIDACIJE SUBSTITUIRANIH DIFENTIL IMINOV Z DIMETILDIOKSIRANOM

Datum zagovora: 17. 10. 2003

Igor Pravst

Mentor: prof. dr. Marko Zupan

REAKCIJE ALKIL SUBSTITUIRANIH FENOLOV IN AROMATSKIH ETROV Z "F-L" REAGENTI

Datum zagovora: 24. 6. 2003

ocena odlično

Martin Tine Perger

Mentorica: prof. dr. Marija Bešter-Rogač

TEMPERATURNI ODVISNOST ELEKTRIČNE PREVODNOSTI RAZREDČENIH VODNIH RAZTOPIN 2,2 – ELEKTROLITOV CoSO₄, CuSO₄ ZnSO₄

Datum zagovora: 15. 7. 2003

Ana Petelin

Mentor: prof. dr. vito Turk

ISKANJE IN IZOLACIJA PROTEAZ S SPECIFIČNOSTJO ZA ASPARAGINSKO KISLINO V KISLEM

Datum zagovora: 6. 10. 2003

Lidija Pezdirc

Mentor: prof. dr. Jurij Svete

1,3-DIPOLARNE CIKLOADICIJE RACEMNIH 3-PIRAZOLIDINON 1-AZOMETIN IMINOV NA DI-(-)METIL MALEINAT

Datum zagovora: 29. 9. 2003

Petra Potočnik

Mentor: doc. dr. Matija Strlič

POSTOPKI PRIPRAVE VZORCEV CELULOZE ZA VELIKOSTNO IZKLJUČITVENO KROMATOGRAFIJO

Datum zagovora: 10. 12. 2003

Mark Stanojević

Mentor: prof. dr. Franc Gubensek

Somentorica: dr. Milena Horvat, viš. znan. sodel.

GENI ZA ODPORNOST PROTI ŽIVEMU SREBRU V BAKTERIJAH NA OBMOČJU IDRIJE

Datum zagovora: 8. 7. 2003

Dženan Šarić

Mentor: doc. dr. Iztok Turel

SINTEZE NOVIH RUTENIJEVIH KOORDINACIJSKIH SPOJIN S HETEROCIKLIČNIMI DUŠIKOVIMI LIGANDI

Datum zagovora: 23. 6. 2003

Klavdija Škrlep

Mentor: prof. dr. Jože Pungerčar

ZAMRZOVANJE CELIČNE SUSPENZIJSKE KULTURE TISE (TAKUS X MEDIA REHD.)

Datum zagovora: 14. 11. 2003

Damjan Šterk

Mentor: prof. dr. Marijan Kočevar

SINTEZA NOVIH LIGANDOV ZA ASIMETRIČNO HIDROGENIRANJE S PRENOSOM VODIKA

Datum zagovora: 27. 6. 2003

Sašo Tomše

Mentorica: prof. dr. Lucija Zupančič-Kralj

VPLIV HUMINSKIH KISLIN NA EKSTRAKCIJE TRIAZINOV IZ VODE IN PRSTI

Datum zagovora: 22. 12. 2003

Saša Vertelj

Mentor: prof. dr. Alojz Demšar

KOMPLEKSI PREHODNIH KOVIN Z 1,3-BIS(DIMETILAMINO)-2PROPANOLOM IN KARBOKSILATI

Datum zagovora: 23. 6. 2003

Andrej Virag

Mentor: prof. dr. Slovenko Polanc

SINTEZE NEKATERIH 1,3-DIARILTRIAZENOV IN POSKUSI NJIHOVEGA ACILIRANJA

Datum zagovora: 23.9. 2003

Mateja Zorko

Mentor: doc. dr. Roman Jerala

MODIFIKACIJA IN ANALIZA BIOLOŠKE AKTIVNOSTI ANTIMIKROBNIH PEPTIDOV

Datum zagovora: 10. 9. 2003

Stanislav Zabret

Mentor: doc. dr. Roman Jerala

LIPOPEPTIDI NA OSNOVI EFEKTORSKE DOMENE PROTEINA MARCKS

Datum zagovora: 19. 12. 2003

Vojko Zupančič

Mentorica: prof. dr. Lucija Zupančič-Kralj

DOLOČEVANJE PESTICIDOV V ZELIŠČIH

Datum zagovora: 30. 6. 2003

Tanja Žibert

Mentor: doc. dr. Nataša Gros

DOLOČANJE ORGANSKIH KISLIN Z IONSKO IZKLJUČITVENO KROMATOGRAFIJO

Datum zagovora: 5. 12. 2003

Katja Žmitek

Mentor: prof. dr. Marko Zupan

UPORABA VODIKOVEGA PEROKSIDA IN FLUORIRANIH ALKOHOLOV ZA SELEKTIVNO SINTEZO TETRAOKSANOV S POTENCIALNO ANTIMALARIJSKO AKTIVNOSTJO

Datum zagovora: 24. 6. 2003

ocena odlično

KEMIJSKO IZOBRAŽEVANJE

Klavdija Škrlep

Mentor: prof. dr. Jože Pungertar

ZAMRZOVANJE CELIČNE SUSPENZIJSKE KULTURE TISE (TAKUS X MEDIA REHD.)

Datum zagovora: 14. 11. 2003

UNIVERZITETNI ŠTUDIJ BIOKEMIJE

Mirko Cevc

Mentor: doc. dr. Janez Plavec

VPLIV POVEZOVALNIH ZANK IN KATIONOV NA TVORBO GVANINSKIH KVADRUPLEKSOV

Datum zagovora: 30. 6. 2003

Polonca Jalovec

Mentor: prof. dr. Jože Pungertar

IZOLACIJA IN KARAKTERIZACIJA REKOMBINANTNEGA AMODITOKSINA C S KRATKO FUZIJO NA N-KONCU

Datum zagovora: 3. 7. 2003

Eva Jambrošič

Mentor: doc. dr. Matic Legiša

PRIMERJAVA AKTIVNOSTI H⁺-ATP_{az} PRI DVEH SEVIH GLIVE ASPERGILLUS NIGER

Datum zagovora: 4. 7. 2003

Zala Jenko

Mentor: prof. dr. Jože Pungerčar

VPLIV UVEDBE TRIPTOFANA NA STIČNO VEZAVNO POVRŠINO ZA AGREGIRAN
SUBSTRAT V MOLEKULI NEVROTOKSIČNE FOSFOLIPAZE A2

Datum zagovora: 9. 9. 2003

ocena odlično

Uroš Logonder

Mentor: doc. dr. Igor Križaj

SUBCELULARNA LOKALIZACIJA IN POSKUS IZOLACIJE AMODITOKSINSKEGA
RECEPTORJA Z MASO 25 KDA V PRAŠIČJI MOŽGANSKI SKORJI

Datum zagovora: 12. 6. 2003

ocena odlično

Tina Mlakar

Mentor: doc. dr. Matic Legiša

KINETIKA ENCIMSKE AKTIVNOSTI 6-FOSFOFRUKTO-1-KINAZE PRI GLIVI ASPERGILLUS
NIGER

Datum zagovora: 10. 9. 2003

Jožica Vašl

Mentor: doc. dr. Roman Jerala

DETEKCIJA IN VEZAVA ENDOTOKSINA NA PROTEINE

Datum zagovora: 9. 9. 2003

Manuela Vodeb

Mentorica: prof. dr. Tamara Lah Turnšek

SPREMLJANJE Z VODIKOVIM PEROKSIDOM POVZROČENIH POŠKODB DNA OVARIJSKIH
CELIC BUDRE (CHO) IN IZ NJIH IZPELJANIH HIBRIDNIH CELIC AL S TESTOM KOMET

Datum zagovora: 19. 9. 2003

UNIVERZITETNI ŠTUDIJ KEMIJSKEGA INŽENIRSTVA

Urška Ambrož Kajfež

Mentor: doc. dr. Igor Plazl

BIOLOŠKA RAZGRADLJIVOST INDUSTRIJSKE IN DEPONIJSKE ODPADNE VODE

Datum zagovora: 18. 6. 2003

Andrej Bobnar

Mentor: prof. dr. Janvit Golob

DESTILACIJSKE TEHNIKE ZA PREDHODNO ČIŠČENJE INDUSTRIJSKIH ODPADNIH VOD

Datum zagovora: 7. 2. 2003

Urban Došler

Mentor: prof. dr. Stane Pejovnik

SINTEZA IN DIELEKTRIČNE LASTNOSTI KERAMIKE IZ SITEMA $\text{Bi}_2\text{O}_3\text{-MoO}_3$

Datum zagovora: 26. 6. 2003

Goran Gril

Mentor: doc. dr. Igor Plazl

PRIMERJAVA METOD ZA EKSTRAKCIJO METABOLITOV IZ MICELIJA GLIVE ASPERGILLUS
NIGER

Datum zagovora: 15. 4. 2003

Sabina Hren

Mentorica: doc. dr. Andreja Zupančič-Valant

VPLIV KONCENTRACIJE HIDROFILNIH POLIMEROV NA TVORBO GELSKIH STRUKTUR

Datum zagovora: 5. 11. 2003

Alma Jazbinšek

Mentor: prof. dr. Viktor Grilec

KARAKTERIZACIJA IN NAČRTOVANJE SEPARACIJE DVOFAZNEGA VODNEGA SISTEMA PEG-DESTRAN-PRIOTEIN

Datum zagovora: 5. 12. 2003

Gregor Karlovšek

Mentor: doc. dr. Matjaž Krajnc

TEHNIČNA, EKOLOŠKA IN EKONOMSKA ANALIZA REKONSTRUKCIJE REZERVOARJA ZA NAFTNE DERIVATE

Datum zagovora: 15. 9. 2003

Matej Komel

Mentor: prof. dr. Janez Levec

SIMULACIJA KAPALNEGA REAKTORJA ZA SINTEZO METANOLA V KAPLJEVINASTI FAZI

Datum zagovora: 9. 9. 2003

Barbara Kumelj

Mentor: prof. dr. Janvit Golob

TEHNOLOGIJA LOČEVANJA ORGANSKIH PRODUKTOV S TANKOSLOJNIM UPAREVANJEM

Datum zagovora: 18. 12. 2003

Dijamant Osaj

Mentor: doc. dr. Igor Plazl

VPLIV OBRATOVALNIH PARAMETROV HLADILNEGA ZRAKA NA OBARVLJIVOST IN NAVIJALNO NAPETOST POLIAMIDNEGA FILAMENTA

Datum zagovora: 14. 2. 2003

Marko Polak

Mentor: prof. dr. Aleksander Pavko

OPTIMIRANJE MIKROFILTRACIJE INDUSTRIJSKE FERMENTACIJSKE BROZGE NA PILOTNI NAPRAVI

Datum zagovora: 23. 1. 2003

Tadej Rojac

Mentor: prof. dr. Stane Pejovnik

MEHANOKEMIJSKA SINTEZA ALKALIJSKIH NIOBATOV

Datum zagovora: 1. 7. 2003

Andreja Sivec

Mentorica: doc. dr. Andreja Zupančič-Valant

TRANSPORTNE LASTNOSTI POLTRDNIH DERMALNIH FARMACEVTSKIH OBLIK

Datum zagovora: 18. 12. 2003

Matjaž Spreitzer

Mentor: prof. dr. Stane Pejovnik

DIELEKTRIČNE LASTNOSTI TERNARNIH SPOJIN SISTEMA $\text{Bi}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2\text{-Nb}_2\text{O}_5$

Datum zagovora: 28. 8. 2003

Marko Slatnar

Mentor: doc. dr. Matjaž Krajnc

RAZVOJ BARVNIH PREMAZOV Z NIZKO TERMIČNO EMITIVNOSTJO ZA ABSORPCIJO V SONČNIH KOLEKTORJIH

Datum zagovora: 17. 10. 2003

Gregor Šorn

Mentor: prof. dr. Janvit Golob

ABSORPCIJA IN DESORPCIJA OGLIKOVEGA DIOKSIDA V VODNI RAZTOPINI N-METILDIETANOLAMINA

Datum zagovora: 30. 9. 2003

Polona Štrancar

Mentor: Igor Plazl

BIOTRANSFORMACIJA PROGESTERONA V PRISOTNOSTI V VODI NETOPNEGA ORGANSKEGA TOPILA

Datum zagovora: 28. 8. 2003

Helena Tomažič

Mentor: prof. dr. Aleksander Pavko

OCENA KONCENTRACIJSKIH PROFILOV SUBSTRATOV ZNOTRAJ PELETA GLIVE PHANEROCHAETE CHRYSOSPORIUM

Datum zagovora: 2. 7. 2003

Andrej Vašl

Mentorica: doc. dr. Andreja Zupančič-Valant

VPLIV KONCENTRACIJE POLIMERA NA REOLOŠKE LASTNOSTI POLIMERNO MODIFICIRANIH BITUMNOV

Datum zagovora: 7. 1. 2003

Nejc Zakrajšek

Mentor: prof. dr. Janvit Golob

VPLIV ZMANŠEVANJA SPECIFIČNE PORABE SVEŽE VODE NA LASTNOSTI PAPIRJA

Datum zagovora: 24. 6. 2003

Tea Zuliani

Mentor: prof. dr. Jana Zagorc-Končan

SIMULACIJA ČIŠČENJA ODPADNIH VOD NA BIOLOŠKI ČISTILNI NAPRAVI Z AKTIVNIM BLATOM

Datum zagovora: 4. 7. 2003

UNIVERZITETNI ŠTUDIJ KEMIJSKE TEHNOLOGIJE

Maša Bauer

Mentor: doc. dr. Matjaž Krajnc

EMULZIJSKA POLIMERIZACIJA AKRILATOV Z UPORABO POLIURETANSKIH KALI

Datum zagovora: 10. 4. 2003

Davor Cetina

Mentor: prof. dr. Marin Berovič

DOLOČITEV VPLIVOV NA RAZVOJ PREDFERMENTORSKE FAZE MIKROORGANIZMA ASPERGILLUS

Datum zagovora: 27. 6. 2003

Jernej Kajtna

Mentor: doc. dr. Matjaž Krajnc

VPLIV PROCESNIH PARAMETROV NA SINTEZO SEČNINSKO FORMALDEHIDNEGA
PREDKONDENZATA

Datum zagovora: 10. 6. 2003

Milenko Pavlović

Mentor: doc. dr. Matjaž Krajnc

VPLIV RECIKLIRANJA REAKCIJSKE VODE NA SINTEZO NENASIČENEGA POLIESTRA

Datum zagovora: 3. 10. 2003

Martin Poberaj

Mentor: prof. dr. Jandran Maček

PRIPRAVA IN DOLOČEVANJE ELEKTRIČNIH KARAKTERISTIK SOFC GORIVNIH CELIC

Datum zagovora: 26. 9. 2003

Matjaž Prislan

Mentor: prof. dr. Janvit Golob

TEHNOLOGIJA PREESTRENJA REPIČNEGA OLJA DO BIODIESELSKEGA GORIVA

Datum zagovora: 16. 5. 2003

Zlatko Šorn

Mentor: prof. dr. Jandran Maček

ŠTUDIJ KINETIKE TERMIČNIH RAZKROJEV NA OSNOVI ANALIZE PLINSKIH PRODUKTOV

Datum zagovora: 11. 11. 2003

Kristina Valentinčič

Mentor: doc. dr. Matjaž Krajnc

AKRILATNO POLIESTRSKE VODNE DISPERZIJE

Datum zagovora: 22. 9. 2003

VISOKOŠOLSKE DIPLOME

KEMIJSKA TEHNOLOGIJA

Barbara Anžič

Mentor: prof. dr. Jandran Maček

PRIPRAVA LANTANOVEGA GALATA Z ZGOREVALNO SINTEZO

Datum zagovora: 25. 9. 2003

Stanislav Brezar

Mentor: prof. dr. Alojz Demšar

ANALIZA SNOVI ZA KEMIJSKO DEKONTAMINACIJO

Datum zagovora: 10. 2. 2003

Primož Dobravec

Mentor: doc. dr. Matjaž Krajnc

ANALIZA PROCESA UTRJEVANJA EPOKSI SMOLE S TEMPERATURNI MODULIRANO
DIFERENČNO DINAMIČNO KALORIMETRIJO

Datum zagovora: 21. 3. 2003

Nadja Drobnič

Mentor: doc. dr. Anton Gantar

LASTNOSTI PREPLETENIH POLIMERNIH MREŽ NA OSNOVI POLIURETANA IN
POLIMETAKRILATOV

Datum zagovora: 8. 10. 2003

Bernarda Gazvoda

Mentor: prof. dr. Primož Šegedin

REAKCIJE BAKROVEGA (II) METANOATA S PIRIDINOM

Datum zagovora: 4. 3. 2003

Stanislava Grkman

Mentor: prof. dr. Marin Berovič

VPLIV VEZIVNOSTI ŠKROBA NA POSTOPEK RESTAVRIRANJA PAPIRJA

Datum zagovora: 12. 11. 2003

Karla Jereb

Mentorica: prof. dr. Jana Zagorc-Končan

FIZIKALNO-KEMIJSKO ČIŠČENJE KOMUNALNE IN INDUSTRIJSKE ODPADNE VODE

Datum zagovora: 17. 7. 2003

Kristina Jerič

Mentor: doc. dr. Matija Strlič

UPORABA NEKATERIH SPOJIN ZEMELJSKOALKALIJSKIH KOVIN ZA STABILIZACIJO
CELULOZE Z ŽELEZOTANINSKIM ČRNILOM

Datum zagovora: 15. 7. 2003

Gregor Kapun

Mentor: prof. dr. Jadran Maček

PRIPRAVA MIKRO- IN SUBMIKROMETERSKIH SREBROVIH DELCEV Z REDUKCIJO IZ
VODNIH RAZTOPIN

Datum zagovora: 28. 11. 2003

Marijan Kralj

Mentor: prof. dr. Janvit Golob

PREDČIŠČENJE IN BIORAZGRADLJIVOST ODPADNIH VOD SINTEZE FARMACEVTSKIH
UČINKOVIN

Datum zagovora: 26. 9. 2003

Jernej Kraševc

Mentor: prof. dr. Jadran Maček

PRIPRAVA CIKRONIJEVEGA OKSID NITRATA ZA ZGOREVALNO SINTEZO

Datum zagovora: 28. 11. 2003

Boštjan Lukančič

Mentor: doc. dr. Anton Gantar

PROJEKT NOVEGA SMUČARSKEGA ČEVLJA

Datum zagovora: 18. 12. 2003

Boštjan Novak

Mentor: doc. dr. Anton Gantar

UPORABA SATRASumm SISTEMA PRI PREVZEMU, KONTROLI KAKOVOSTI IN KROJENJU
USNJA ZA OBUTEV

Datum zagovora: 8. 10. 2003

Darja Odlazek**Mentor: prof. dr. Primož Šegedin**

SPOJINE BAKRA(II) Z VANILINSKO KISLINO – MODELNO SPOJINO ZA

Datum zagovora: 31. 1. 2003

Simona Omerzel**Mentorica: prof. dr. Lucija Zupančič-Kralj**LOČEVANJE ENANTIOMEROV METIL α -[[2-(TIENIL)ETIL]AMINO]- α -(2-KLOROFENIL) ACETATA S TEKOČINSKO KROMATOGRAFIJO

Datum zagovora: 7. 11. 2003

Natalija Petkovič**Mentor: prof. dr. Stane Pejovnik**PRIPRAVA GRADIENTNEGA KOMPOZITA Al_2O_3 - ZrO_2

Datum zagovora: 26. 9. 2003

Rok Pintar**Mentor: prof. dr. Janvit Golob****Somentor: dr. Adolf Može**

VPLIV ZAPIRANJA KROGOTOKA PAPIRNIŠKIH VODA NA RETENCIJO ŠKROBA

Datum zagovora: 6. 10. 2003

Danijela Pucko**Mentor: doc. dr. Matija Strlič**

OPTIMIZACIJA LASERSKEGA ČIŠČENJA PAPIRJA IN NEKATERIH NARAVNIH TEKSTILIJ

Datum zagovora: 29. 10. 2003

Urška Rački**Mentor: prof. dr. Alojz Demšar**

KRISTALIZACIJA SVINEC TITANOVIIH ALKOKSIDOV

Datum zagovora: 4. 6. 2003

Irena Svetlin**Mentorica: doc. dr. Andreja Zupančič-Valant**

VPLIV REOLOŠKEGA DODATKA NA TOKOVNE LASTNOSTI FASADNIH PREMAZOV

Datum zagovora: 14. 1. 2003

Lidija Sinovčič**Mentorica: prof. dr. Lucija Zupančič Kralj**

ŠTUDIJ FOTORAZGRADNJE ATRAZINA IN NJEGOVIIH RAZGRADNIH PRODUKTOV

Datum zagovora: 12. 5. 2003

Mateja Sotošek**Mentor: doc. dr. Matija Strlič**

VLOGA FITINSKE IN NEKATERIH POLIAMINOFOSFONSKIIH KISLIN V FENTONOVEM REAKCIJSKEM SISTEMU

Datum zagovora: 8. 7. 2003

Aleša Slak**Mentor: doc. dr. Matija Strlič**

VLOGA KARBONILNIH SKUPIN MED OKSIDATIVNO RAZGRADNJO CELULOZE

Datum zagovora: 21. 3. 2003

Urša Škantelj**Mentor: doc. dr. Matija Strlič**

PRESOJA NEKATERIH EKSTAKCIJSKIIH METOD ZA ODLOČANJE pH PAPIRJA

Datum zagovora: 30. 9. 2003

Jolanda Škof

Mentorica: doc. dr. Janko Žmitek

RAZVOJ METODE ZA UGOTAVLJANJE VPLIVOV NA HITROST RAZTAPLJANJA
UČINKOVINE IZ TABLET S HITRIM SPROŠČANJEM

Datum zagovora: 21. 3. 2003

Katarina Thaler

Mentor: doc. dr. Anton Gantar

IZDELAVA IN LASTNOSTI GUMENIH TRANSPORTNIH TRAKOV

Datum zagovora: 18. 12. 2003

VARSTVO PRI DELU IN POŽARNO VARSTVO

Vesna OMAN

Mentorja: mag. Barbara NOVOSEL in dr. Mitja KOŽUH

RAVNANJE S SNOVMI, KI VSEBUJEJO PCB TER DRUGE NEVARNE SNOVI V JAVNEM
PODJETJU ELEKTRO LJUBLJANA

Datum zagovora: 22. 1. 2003

Matjaž MELINC

Mentorica: mag. Barbara NOVOSEL

RAVNANJE S KEMIKALIAMI V PODJETJU GOSTOL - GOP AN D.O.O. PO PRIZNANIH
METODAH

Datum zagovora: 22. 1. 2003

Franc Branko MOČNIK

Mentor: mag. Jože JANEŽIČ

NAPRAVE ZA ODKRIVANJE POŽARA

Datum zagovora: 22. 1. 2003

Anton SLAK

Mentorja: mag. Jožef HORVAT in mag. Tatjana GAZVODA

VPLIV DELA NA ZDRAVJE DELAVCEV V VRTCIH

Datum zagovora: 22. 1. 2003

Marjan KNEZ

Mentor: doc. dr. Alojz MUHIČ

VARNA REŠEVALNA DELA OB UJMAH NAČRTOVANJE IN ORGANIZACIJA

Datum zagovora: 24. 1. 2003

Elvis ŠAVLI

Mentorica: prof. dr. Marija BEŠTER ROGAČ

PRESOJA RAZMER V DELOVNEM OKOLJU PRODAJNO - SERVISNEGA CENTRA IN
ZASEBNE DELAVNICE

Datum zagovora: 24. 1. 2003

Nevenka ROŽIČ

Mentorja doc. dr. Saša PETRIČEK in mag. Jože JANEŽIČ

POŽARNA VARNOST V OBRATU PIGMENTNI PREMAZI

Datum zagovora: 24. 1. 2003

Janez CESAR

Mentorja: doc. dr. Mitja KOŽUH in mag. Barbara NOVOSEL

VARNOSTNI PROBLEMI PRI SKLADIŠČENJU DERIVATOV ZA 90-DNEVNE REZERVE

Datum zagovora: 6. 2. 2003

Samo GUZEJ

Mentorica: mag. Barbara NOVOSEL

UPORABA SNOVI PRI TALJENJU AL ZLITIN IN RAVNANJE Z ODPADNIMI SNOVMI V

LIVARNI

Datum zagovora: 6. 2. 2003

Peter Medle

Mentorja: dr. Mitja Kožuh in mag. Barbara Novosel

OKOLJEVARNOSTNI PROBLEMI PRI SKLADIŠČENJU NAFTNIH DERIVATOV ZA 90- DNEVNE

REZERVE

Datum zagovora: 6. 2. 2003

Blaž Repše

Mentorja: dr. Mitja Kožuh in mag. Barbara Novosel

IZBIRA OSEBNE VAROVALNE OPREME NA TEMELJU OCENE TVEGANJA V LABORATORIJU

ZA ANORGANSKO KEMIJO IN TEHNOLOGIJO IJS

Datum zagovora: 6. 2. 2003

Ingrid Rusjan

Mentorici: mag. Barbara Novosel in mag. Tatjana Gazvoda

OCENA TVEGANJA NA DELOVNIH MESTIH V DELOVNEM POSTOPKU PROIZVODNJE

SREDSTEV ZA RAZŽVEPLEVANJE GRODLJA

Datum zagovora: 13. 3. 2003

Tomaž Drnovšek

Mentorja: dr. Mitja Kožuh in doc. dr. Gregor Bizjak

ELEKTROMAGNETNO SEVANJE KOT OBREMENITEV OKOLJA V BLIŽINI

VISOKONAPETOSTNIH ELEKTROENERGETSKIH OBJEKTOV

Datum zagovora: 13. 3. 2003

Patricij Zupančič

Mentorica: mag. Tatjana Gazvoda

NAČRTOVANJE POČITKA MED DELOM IN ERGONOMSKA PREUREDITEV DELOVNIH MEST

V OBRATU IŠ MONTAŽA - SESTAV ŠTEVCA V PODJETJU

ISKRAEMECO

Datum zagovora: 13. 3. 2003

Janko Gošte

Mentor: doc. dr. Alojz Muhič

PROGRAM VARNOSTNIH UKREPOV PRI MONTAŽI IN VZDRŽEVANJU KOVINSKIH

KONSTRUKCIJ ZA POTREBE MOBILNE TELEFONIJE

Datum zagovora: 28. 3. 2003

Gregor Gartner

Mentor: dr. Mitja Kožuh

ZASNOVA UPORABE STANDARD ISO 14001 ZA RAVNANJE Z ODPADKI V PODJETJU NIKO

ŽELEZNIKI

Datum zagovora: 22. 3. 2003

Primož Ermenc

Mentorica: mag. Barbara Novosel

VARNO DELO V ŠOLSKEM LABORATORIJU

Datum zagovora: 22. 3. 2003

Jože Krašovec

Mentor: mag. Jože Janežič

ORGANIZACIJA GASILSKE SLUŽBE V OBČINI IG

Datum zagovora: 10. 4. 2003

Andreja Arh Klančar

Mentorja: dr. Mitja Kožuh in mag. Barbara Novosel

TERMOELEKTRARNA ŠOSTANJ NAPRAVA ZA RAZŽVEPLAVANJE DIMNIH PLINOV V BLOKU 5 VARSTVO OKOLJA

Datum zagovora: 10. 4. 2003

Franc Klopčič

Mentorja: doc. dr. Alojz Muhič in mag. Marko Miš

SMERNICE PRI PROJEKTIRANJU IN POŽARNA VARNOST V PODZEMNIH OBJEKTIH

Datum zagovora: 23. 5. 2003

Stojan Iskra

Mentorica: mag. Barbara Novosel

PRENOVA LAKIRNICE V DRUŽBI KRAŠKI ZIDAR D.D. V SKLADU Z VELJAVNIMI PREDPISI

Datum zagovora: 23. 5. 2003

Domen Trunk

Mentorica: mag. Barbara Novosel

STRUPENE SNOVI II

Datum zagovora: 23. 5. 2003

Marija Nečimer

Mentorica: mag. Tatjana Gazvoda

KREPITEV ZDRAVJA DELAVCEV NA DELOVNEM MESTU ŠIVANJA IN PAKIRANJA

Datum zagovora: 5. 6. 2003

Žarko Lekič

Mentorica: mag. Tatjana Gazvoda

METODOLOGIJA OCENE TVEGANJA V POHIŠTVENI INDUSTRIJI - PRIMER DOBRE PRAKSE

Datum zagovora: 5. 6. 2003

Marko Prelovec

Mentor: doc. dr. Alojz Muhič

MEDNARODNI PREDPISI POŽARNEGA VARSTVA ZA GARAŽNE HIŠE IN NJIHOVA MEDSEBOJNA PRIMERJAVA

Datum zagovora: 5. 6. 2003

Viljem Strašek

Mentor: prof. dr. Primož Gspan

SISTEM VODENJA PODJETJA Z VIDIKA VAROVANJA OKOLJA V PODJETJU TUBA EMBALAŽA D.D.

Datum zagovora: 9. 6. 2003

Miroslav Nastan

Mentor: prof. dr. Primož Gspan

PROGRAM ZA VARNO DELO V KANALIH IN JAŠKIH KANALIZACIJSKEGA OMREŽJA

Datum zagovora: 9. 6. 2003

Milan Drnovšek

Mentorja: prof. dr. Primož Gspan in dr. Mitja Kožuh

IZKUŠNJE Z ZBIRANJEM IN SORTIRANJEM KOMUNALNIH ODPADKOV V SLOVENIJI

Datum zagovora: 9. 6. 2003

Peter Bevec in Alojz Žlender

Mentorja: doc. dr. Alojz Muhič in mag. Marko Miš

VPLIV PSIHOSOCIALNEGA VIDIKA NA PROJEKTIRANJE POŽARNE VARNOSTI IN UPORABA
STANDARDOV PRI OCENJEVANJU POŽARNEGA TVEGANJA V
PSIHIATRIČNI KLINIKI LJUBLJANA

Datum zagovora: 16.06.2003

Bojan Hojnik

Mentor: dr. Alojz Muhič

VARNOSTNI NAČRT ZA IZGRADNJO GRADBENEGA OBJEKTA : LABORATORIJ S
SKLADIŠČEM

Datum zagovora: 16.06.2003

Aleksander Klopčič

Mentor: dr. Mitja Kožuh

UREDITEV HRUPA V TE - TOL

Datum zagovora: 16. 6. 2003

Olivera Abram - Ilič

Mentorica: mag. Tatjana Gazvoda

PRILAGODITEV DELOVNEGA MESTA KASNEJE NASTALI SLABOVIDNI OZ. OSLEPELI
OSEBI

Datum zagovora: 26. 6. 2003

Borut Novak

Mentor: doc. dr. Alojz Muhič

ANALIZA SPLOŠNE VARNOSTI V BETONSKIH SILOSIH ZA SHRANJEVANJE ŽITARIC V
PIVKI D.D.

Datum zagovora: 26. 6. 2003

Jože Prezl

Mentorja: mag. Jože Janežič in mag. Aleš Jug

POŽARNI RED, POŽARNI NAČRT TER PRIPRAVLJENOST
IN ODZIV NA IZREDNE RAZMERE

Datum zagovora: 26. 6. 2003

Jelena Prodan

Mentor: dr. Mitja Kožuh

OBMORSKA ODLAGALIŠČA, ODPADKI IN EVROPSKA UNIJA

Datum zagovora: 4. 7. 2003

Darko Kromar

Mentor: dr. Mitja Kožuh

ANALIZA VPLIVOV NA OKOLJE PRI TRANSPORTU, PRETAKANJU IN SKLADIŠČENJU
NAFTNIH DERIVATOV NA BENCINSKIH SERVISIH

Datum zagovora: 4. 7. 2003

Gašper Bostič

Mentorica: mag. Barbara Novosel

VARNO DELO Z JEDKIMI SNOVMI

Datum zagovora: 4. 7. 2003

Erik Smerke

Mentor: dr. Mitja Kožuh

PROBLEMATIKA HRUPA IN MOŽNE REŠITVE V PROIZVODNI ENOTI JEKLENIH
KONSTRUKCIJ »Jeklo» PODJETJA TRIMO TREBNJE D.D

Datum zagovora: 4. 7. 2003

Andrej Mavsar

Mentor: dr. Mitja Kožuh

UGOTOVITEV STANJA HRUPA V PROSTORU IN PREDLOG UKREPOV

Datum zagovora: 4. 7. 2003

Željko Vrečar

Mentorica: mag. Tatjana GAZVODA

PRIMERJAVA DVEH ANALIZ DELOVNEGA MESTA "UPRAVLJALEC POLNILNE LINIJE
MINERALNE VODE IN BREZALKOHOLNIH PIJAČ" V KOLINSKI, PROGRAMSKA
PROIZVODNA ENOTA ROGAŠKI VRELCI, Z ZDRAVSTVENEGA VIDIKA

Datum zagovora: 15. 7. 2003

Stanko Seidl

Mentorica doc. dr. Saša Petriček

OCENA OGROŽENOSTI IN NAČRT ZA UKREP ANJE, S Poudarkom ZA PRIMER NESREČ Z
NEVARNIMI SNOVMI, POŽAROV IN EKSPLOZIJE ZA VEČJA SKLADIŠČA NAFTNIH
DERIVATOV - SKLADIŠČE SKLADIŠČE PETROL - ZALOG -JUG

Datum zagovora: 15. 7. 2003

Rudolf Rauh

Mentorja: doc. dr. Saša Petriček in dr. Mitja Kožuh

IZJAVA O VARNOSTI Z OCENO TVEGANJA ZA VARILCA Z ROČNO PLAMENSKO TEHNIKO
ACETILEN – KISIK

Datum zagovora: 15. 7. 2003

Stojan Debevec

Mentorja: dr. Mitja Kožuh

RAVNANJE Z ODPADKI V TELEKOM SLOVENIJE D.D.

Datum zagovora: 15. 7. 2003

Aleš Jarc

Mentorica: mag. Barbara Novosel

UGOTAVLJANJE IN NADZOR TVEGANJA V PODJETJU TOBAČNE LJUBLJANA

Datum zagovora: 17. 7. 2003

Simon Makovec Kržišnik

Mentorica: mag. Barbara Novosel

OCENA TVEGANJA ZA KEMIJSKI INSTRUMENTALNI LABORATORIJ

Datum zagovora: 17. 7. 2003

Boštjan Ožanič

Mentorica: prof. dr. Marija Bešter Rogač

FIZIKALNI DEJAVNIKI V DELOVNEM OKOLJU

Datum zagovora: 17. 7. 2003

Sabina Kavčič

Mentorja: prof. dr. Primož Gspan in prof. dr. Anjuta Bubnov - Škoberne

PREIZKUS MODELA ZVD ZA UGOTAVLJANJE RAVNI VARNOSTI IN ZDRAVJA PRI DELU

Datum zagovora: 17. 7. 2003

Nina Huš

Mentor: mag. Jože Šrekl

UVAJANJE DELOVNIH INVALIDOV V DELOVNO OKOLJE IN PREDLOGI ZA IZBOLJŠANJE

Datum zagovora: 28. 8. 2003

Mitja Rudel

Mentorja: mag. Jože Janežič in mag. Aleš JUG

STANJE UPORABNOSTI POŽARNIH NAČRTOV S PREDLOGI ZA SPREMEMBE

Datum zagovora: 28. 8. 2003

Aleš Godec

Mentor: mag. Jožef Horvat

OSEBNA VAROVALNA OPREMA CARNIKA

Datum zagovora: 28. 8. 2003

Helena Mesarič

Mentorja: dr. Mitja Kožuh in mag. Barbara Novosel

POIZKUS IZBIRE PRIMERNE METODE ZA OCENO TVEGANJA NA BENCINSKI ČRPALKI

Datum zagovora: 4. 9. 2003

Boštjan Ržen

Mentor: mag. Jože Janežič

POŽARNO VARNOSTNA ANALIZA EKSPLOZIJSKO OGROŽENEGA OBRATA IN PREDLOGI REŠITEV

Datum zagovora: 4. 9. 2003

Damjan Cvelbar

Mentorici: mag. Tatjana Gazvoda in mag. Barbara Novosel

ZMANJŠEVANJE UTRUJENOSTI PRI DELU (SESTAVLJANJE) OB UPOŠTEVANJU PREDPISOV

Datum zagovora: 4. 9. 2003

Uroš Strmec

Mentor: mag. Jožef Horvat

IZBIRA IN UPORABA OSEBNE VAROVALNE OPREME ZA VAROVANJE NOG TER KRATEK PREGLED TE OPREME NA TRŽIŠČU

Datum zagovora: 4. 9. 2003

Mark - Tim Atlanty

Mentor : prof. dr. Viktor Grilc

METODOLOGIJA RAVNANJA Z ODPADKI NA JZ LJUBLJANA

Datum zagovora: 4. 9. 2003

Rudolf Trček

Mentor: mag. Jože Horvat

PREGLED POŠKODB V PGD KOZARJE, POSEBEJ VPLIV NEPRIMERNE OPREME

Datum zagovora: 9. 10. 2003

Miha Zupan

Mentor: prof. dr. Primož Gspan

ZAHTEVE ZA NAČRTOVANJE KAKOVOSTI OKOLJA V NESTANOVANJSKIH ZGRADBAH PO CR 1752/98

Datum zagovora: 9. 10. 2003

Gregor Mavrič

Mentor: mag. Jože Horvat

ZAŠČITNA OPREMA ZA PROFESIONALNE VOZNIKE MOTORNIH KOLES

Datum zagovora: 9. 10. 2003

Mojca Turnšek

Mentorica: mag. Barbara Novosel

POSTOPEK KEMIČNE PRIPRAVE VODE V TERMoeLEKTRARNI TRBOVLJE

Datum zagovora: 29. 10. 2003

Daniel Brumen

Mentorica: mag. Barbara Novosel

UPORABA NEVARNIH SNOVI V BIVALNEM OKOLJU

Datum zagovora: 29. 10. 2003

Roman Drnjač

Mentorja: mag. Jože Šrekl in mag. Jože Horvat

OPREMLJENOST LABORATORIJEV V ŠOLSkih OBJEKTIH V SLOVENIJI Z ZAHTEVAMI ZVD
IN OSTALIMI VELJAVNIMI PREDPISI

Datum zagovora: 29. 10. 2003

Iztok Stavanja

Mentor: mag. Jože Janežič

ŠTUDIJA POŽARNE VARNOSTI IN POŽARNI RED V VOJAŠNICI PIVKA

Datum zagovora: 29. 10. 2003

Vojko Mevla

Mentorja: mag. Barbara Novosel in dr. Mitja Kožuh

EPD - MIKROKLIMA IN PREZRAČEVANJE V VOZNIŠKI KABINI DIZELSKE LOKOMOTIVE
SERIJE 664

Datum zagovora: 26. 11. 2003

Emira Bašić

Mentor: dr. Mitja Kožuh

VPLIV IONIZIRNEGA SEVANJA NA DELOVNO OKOLJE

Datum zagovora: 26. 11. 2003

Frančišek Zavašnik

Mentor: dr. Mitja Kožuh

UVEDBA MERILNE OPREME IN PRIPOMOČKOV ZA VZDRŽEVANJE RADIJSKIH NAPRAV HF
IN VHF V OPERATIVNO UPORABO

Datum zagovora: 26. 11. 2003

Andrej Kariž

Mentorja: doc. dr. Alojz Muhič in doc. dr. Grega Bizjak

VARNOSTNI NAČRT ZA GRADBIŠČE - REKONSTRUKCIJA VISOKONAPETOSTNIH POLJ V
STIKALIŠČU 400 KV V RTP DIVAČA

Datum zagovora: 26. 12. 2003

Vladimir Vesel

Mentorja: mag. Barbara Novosel in mag. Aleš Jug

EKONOMSKI UČINKI POŽARNE VARNOSTI VGRAJENIH ELEMENTOV – DOM
UPOKOJENCEV VRHNIKA

Datum zagovora: 22. 12. 2003

Bojan Voler

Mentorica: mag. Barbara Novosel

VARNA UPORABA TER PROMET Z EKSPLOZIVI

Datum zagovora: 23. 12. 2003

MAGISTERIJI

KEMIJA

Nadja Gerčar

Mentorica: prof. dr. L. Zupančič Kralj

ŠTUDIJ IZOMERIZACIJE cis, cis-LINOLNE IN cis, cis, cis-LINOLENSKE KISLINE

Datum zagovora: 9. 6. 2003

Barbara Plavšič

Mentor: prof. dr. P. Bukovec

VPLIV MAGNETNEGA POLJA IN ELEMENTOV NA TIP KRISTALIZACIJE KALCIJEVEGA
KARBONATA

Datum zagovora: 6. 6. 2003

Darinka Štajnbaher

Mentorica: prof. dr. L. Zupančič Kralj

RAZVOJ METODE ZA DOLOČEVANJE OSTANKOV PESTICIDOV V SADJU IN ZELENJAVI

Datum zagovora: 5. 12. 2003

KEMIJSKA TEHNOLOGIJA

Nataša Černila Zajc

Mentorica: prof. dr. J. Zagorc Končan

OCENA BIORAZGRADLJIVOSTI DEPONIJSKIH ODCEDNIH VOD Z LABORATORIJSKIMI IN
PILOTNIMI POSKUSI

Datum zagovora: 8. 12. 2003

KEMIJSKO INŽENIRSTVO

David Ravnjak

Mentor: dr. A. Može, znan. svet.

SIMULIRANJE KOPIČENJA PROCESNIH KEMIKALIJ V PROCESNIH VODAH PRI
PROIZVODNJI PAPIRJA

Datum zagovora: 24. 3. 2003

Andrej Šonc

Mentor: prof. dr. V. Grilc

IZPENJEVANJE POVRŠINSKO AKTIVNIH SNOVI IZ VODNIH RAZTOPIN

Datum zagovora: 5. 9. 2003

DOKTORATI

KEMIJA

Primož Benkič

Mentor: prof.dr. Ljubo Golič

ELEKTRON DONORSKE MOLEKULE IN ENOVALNTNI KATIONI – DEJAVNIK STABILNOSTI V SISTEMIH LEWISOVA KISLINA/BAZA

Datum zagovora: 9.5.2003

Martin Črnugelj

Mentor: prof.dr. Gorazd Vesnaver

NMR STRUKTURE DNK Z VEČ VIJAČNICAMI IN NJIHOVE INTERAKCIJE S KOVINSKIMI IONI

Datum zagovora: 23.5.2003

mag. Helena Gradišar

Mentor: doc.dr. Roman Jerala (KI)

KATALITIČNE LASTNOSTI KERATINOLITIČNIH ENCIMOV IZBRANIH NEDERMATOFITNIH GLIV

Datum zagovora: 16.6.2003

Renata Jakše

Mentor: akademik prof.dr. Branko Stanovnik

SINTEZA APLISINOPSINOV, TIOAPLISINOPSINOV IN SORODNIH SPOJIN

Datum zagovora: 20.10.2003

Maja Kincl

Mentor: prof.dr. Marjan Veber

HITROST SPROŠČANJA DIKLOFENAK NATRIJEVE SOLI IZ TABLET Z LIPOFILNIM OGRODNIM SISTEMOM

Datum zagovora: 7.11.2003

mag. Sonja Klemenc

Mentorica: prof.dr. Lucija Zupančič Kralj

FORENZIČNE PREISKAVE ILEGALNEGA HEROINA

Datum zagovora: 9.10.2003

Krištof Kranjc

Mentor: prof.dr. Marijan Kočevar

DIELS-ALDERJEVE REAKCIJE NEKATERIH 2H-PIRAN-2-ONOV IN PRIPOJENIH PIRAN-2-ONOV

Datum zagovora: 2.12.2003

Maja Mrak

Mentor: prof.dr. Venčeslav Kaučič (KI)

SINTEZA IN KARAKTERIZACIJA GALOFOSFATNIH MOLEKULSKIH SIT

Datum zagovora: 30.10.2003

mag. Gregor Muri

Mentor: prof.dr. Jadran Faganeli

SESTAVA IN IZVOR ORGANSKE SNOVI V OKSIČNIH IN ANOKSIČNIH ALPSKIH JEZERIH

Datum zagovora: 28.3.2003

mag. Črtomir Podlipnik

Mentor: prof.dr. Jože Koller

RAZVOJ IN OPTIMIZACIJA METOD ZA HITER IZRAČUN MOLEKULSKE PODOBNOSTI

Datum zagovora: 5.12.2003

mag. Helena Prosen

Mentorica: prof.dr. Lucija Zupančič Kralj

VPLIV HUMINSKIH KISLIN NA VEZAVO IN RAZGRADNJO TRIAZINSKIH IN
KLOROSUBSTITUIRANIH PESTICIDOV

Datum zagovora: 4.12.2003

Jernej Stare

Mentor: prof.dr. Jože Koller

DINAMIKA IN STRUKTURA SISTEMOV S KRATKIMI VODIKOVIMI VEZMI

Datum zagovora: 3.10.2003

mag. Alenka Turičnik

Mentor: prof.dr. Boris Žemva

XeF₂ KOT LIGAND V KOORDINACIJSKIH SPOJINAH Z NEKATERIMI KOVINSKIMI
FLUOROANTIMONATI(V) IN FLUOROBIZMUTATI(V)

Datum zagovora: 2.7.2003

KEMIJSKO INŽENIRSTVO

mag. Dušan Klinar

Mentor: prof.dr. Janvit Golob

Somentor: doc. dr. Matjaž Krajnc

INŽENIRSKA ANALIZA RADIKALSKE POLIMERIZACIJE DIALIL TEREFTALATA V MASI

Datum zagovora: 17.6.2003

Damjan Nemeč

Mentor: akademik prof.dr. Janez Levec

PADEC TLAKA IN DELEŽ ZADRŽEVANE KAPLJEVINE DVOFAZNEGA TOKA SKOZI
STRNJEN SLOJ PRI VISOKIH TLAKIH

Datum zagovora: 19.2.2003

Gregor Sedmak

Mentor: prof.dr. Janez Levec

KINETIKA SELEKTIVNE OKSIDACIJE OGLJIKOVEGA MONOKSIDA V PREBITNEM VODIKU
NA NANOSTRUKTURNEM BAKER-CERIJ OKSIDNEM KATALIZATORJU

Datum zagovora: 19.12.2003

Urška Šebenik

Mentor: doc.dr. Matjaž Krajnc

AKRILATNO POLIURETANSKE HIBRIDNE EMULZIJE ZA PREMAZE: SINTEZA,
KARAKTERIZACIJA IN UPORABNOST

Datum zagovora: 18.12.2003

MATERIALI

Marko Udovič

Mentor: prof.dr. Danilo Suvorov (IJS)

NIZKOSINTERABILNA DIELEKTRIČNA KERAMIKA NA OSNOVI SISTEMA $\text{Bi}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2\text{-TeO}_2$

Datum zagovora: 22.12.2003

PREGLED PROJEKTOV ZA LETO 2003
RESEARCH PROJECTS OVERVIEW IN YEAR 2003

Šifra pogodbe	Šifra nosilca	ime in priimek odg. nosilca	FTE	Naslov
J1-5010-0103-03	14121	Angela Šurca	0,06	Sol-gel priprava organsko-anorganskih hibridov z ionsko prevodnostjo
L1-5237-0103-03	11071	Jana Kolar	0,05	Mikroanalitske metode za določanje pH papirja
L2-3183-0103-03	05758	Lea Županc-Mežnar	0,18	Analiza in optimizacija postopkov predelave prešnih mas za komutatorje
L2-3195-0103-03	11071	Jana Kolar	0,29	Razvoj tehničnega prototipa laserskega sistema za restavriranje papirja
L2-3529-0103-03	12728	Aleš Podgornik	0,18	Konvekcija pri pripravi velikih monolitov, njihova hidrodinamika in miniaturizacija
L2-3539-0103-03	14126	Matjaž Krajnc	0,88	Polimerno inženirstvo
L4-3068-0103-03	12684	Helena Podgornik	0,17	Uporaba ligninolitičnih encimov gliv bele trohnobe za razgradnjo sintetičnih barvil
Z1-3029-0103-03	10983	Jurij Reščič	0,18	Lastnosti in stabilnost raztopin nabitih nanodelcev
Z1-3246-0103-03	12624	Amalija Golobič	0,18	Strukturna karakterizacija keramike s praškovno difrakcijo
Z2-3538-0103-03	14815	Andreja Žgajnar Gotvajn	0,33	Metodologija optimizacije delovanja biološke čistilne naprave s spremljanjem strupenosti in biorazgradljivosti odpadnih vod

Skupaj: 2,5 FTE

PREGLED PROGRAMOV ZA LETO 2003
RESEARCH PROGRAMMES OVERVIEW IN YEAR 2003

Šifra pogodbe	Šifra nosilca	ime in priimek odg. nosilca	FTE	Naslov
P0-0501-0103-03	06137	Božo Plesničar	1,67	Reaktivni intermedtiati pri reakcijah oksidacije
P0-0502-0103-03	00868	Branko Stanovnik	1,67	Sinteze in transformacije organskih spojin, novi reagenti, stereoselektivne in regioselekti
P0-0503-0103-03	02310	Slovenko Polanc	2,00	Organska kemija
P0-0504-0103-03	04323	Boris Pihlar	2,67	Analizna kemija
P0-0505-0103-03	02563	Vojeslav Vlachy	1,00	Teoretična kemija
P0-0506-0103-03	00872	Gorazd Vesnaver	2,33	Fizikalna kemija
P0-0508-0103-03	03439	Peter Bukovec	2,50	Makromolekularna kemija
P0-0510-0103-03	03071	Valentin Koloini	2,67	Kemijsko inženirstvo
P0-0511-0103-03	03374	Ivan Leban	3,00	Sinteza, struktura in lastnosti snovi in materialov

Skupaj: 19,51 FTE

REAKTIVNI INTERMEDIATI PRI REAKCIJAH OKSIDACIJE
REACTIVE INTERMEDIATES IN THE OXIDATION REACTIONS

Programska skupina / *Research programme group*:
Vodja programske skupine / *Principal researcher*:

P0-0501-0103
prof. dr. Božo Plesničar

Sodelavci programske skupine
Programme group co-workers

Raziskovalci / *Researchers*

dr. Božo Plesničar
dr. Boris Šket
dr. Franci Kovač
dr. Darko Dolenc
dr. Janez Cerkovnik
dr. Berta Košmrlj

Mladi raziskovalci / *Young Researchers*

Maja Harej

Tehniki / *Technicians*

Branka Miklavčič

Poročilo o realizaciji programa

(A) V letu 2003 smo nadaljevali s kvantnomehanskim študijem ozonizacije izopropil alkohola in ugotovili, da reakcija v plinasti fazi vključuje radikalski par, $R^{\bullet} \bullet OOOH$, medtem ko je reakcija v bazičnih (polarnih) topilih ionskega tipa in vključuje $^{\ominus}OOOH$ anion.

Študirali smo tudi reakcijo ozonizacije 1,2-difenilhidrazinov in 1,2-dimetilhidrazina in ugotovili, da se pri teh reakcijah tvori HOOOH v relativno visokih koncentracijah brez prisotnosti organskih hidrotriksidov (ROOOH).

Študij nizkotemperaturne ozonizacije norkarana in 2-norkaranola je pokazal, da se pri teh reakcijah tvorijo odgovarjajoči izomerni hidrotriksidi (ROOOH) in vodikov triksid (HOOOH).

Rezultati vseh zgoraj navedenih raziskav so že objavljeni (2003).

(B) V drugi polovici leta 2003 smo proučevali vplive topil na fotolizo 2-fluoro-1,2-difeniletanona in 2-fluoro-1-fenil-2-(3',5'-dimetoksifenil)etanona. Kot topila smo uporabili acetonitril, metanol in cikloheksan. Ugotovili smo, da se mehanizem fotolize teh dveh spojin razlikuje, kar je posebej očitno v cikloheksanu, kjer nastane v primeru 2-fluoro-1,2-difeniletanona kompleksna reakcijska zmes. Dobljeni produkti nastanejo predvsem preko alfa-cepitve in abstrakcije vodikovega atoma, medtem ko fotoliza 2-fluoro-1-fenil-2-(3',5'-dimetoksifenil)etanona v vseh treh topilih vodi izključno do nastanka cikličnega benzofuranskega derivata. Dobljeni rezultati še niso objavljeni.

Zaključili smo raziskave uporabe *N*-jodosaharina kot reagenta za sintezo epoksidov iz deaktiviranih alkenov.

Programme realisation report

(A) The continuation of theoretical studies on the ozonation of isopropyl alcohol (2003) has shown that the reaction in the gas phase involves radical pairs, $R^{\bullet} \bullet OOOH$, whereas the reaction of isopropyl alcohol with ozone in basic (polar) solvents involves the $^{\ominus}OOOH$ anion.

We have also studied the ozonation of 1,2-diphenylhydrazine and 1,2-dimethylhydrazine and found that in these reactions relatively high concentrations of HOOOH (without the interfering presence of organic hydrotrioxides, ROOOH) were formed.

A low-temperature study of the ozonation of norcarane and 2-norcaranol has demonstrated that the corresponding isomeric hydrotrioxides (ROOOH), as well as hydrogen trioxide (HOOOH), are formed in these reactions.

The results of all the above-mentioned studies have already been published (2003).

(B) In the second half of 2003, the solvent effect on the photolysis of 2-fluoro-1,2-diphenylethanone and 2-fluoro-1-phenyl-2-(3',5'-dimethoxyphenyl)ethanone were studied. The chosen solvents were acetonitrile, methanol, and cyclohexane. We have found that the reaction pathways of photolyses differ, which is obvious in cyclohexane solution where the photolysis of 2-fluoro-1,2-diphenylethanone leads to the complex reaction mixture. Obtained products are the result of alpha-cleavage and abstraction of hydrogen atom, whereas the photolyses of 2-fluoro-1-phenyl-2-(3',5'-dimethoxyphenyl)ethanone in all studied solvents lead to the formation of cyclic benzofurane derivative.

Research on the use of *N*-iodosaccharin as a reagent for the one-pot epoxidation of deactivated alkenes was concluded.

**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:*
Vodja programske skupine / *Principal researcher:*

P0-0502-0103
akademik prof. dr. Branko Stanovnik

Sodelavci programske skupine
Programme group co-workers

Raziskovalci / Researchers

akad. prof. dr. Branko Stanovnik
prof. dr. Jurij Svete
dr. Zdenko Časar

Mladi raziskovalci / Young Researchers

David Bevk
Uroš Grošelj
Renata Jakše
Samo Pirc
Petra Čebašek

Tehniki / Technicians

Tončka Kozamernik
Tatjana Stipanovič

Poročilo o realizaciji programa

V letu 2003 smo do zdaj objavili naslednje:

Iz metil 2-benzoilamino-2-oksobutanoata in aromatskih aminov smo pripravili metil 2-arilamino-2-benzoilaminobut-2-enoate, ki smo jih nato ciklizirali s segrevanjem v polifosforni kislini v derivate oksazolo[4,5-*c*]kinolina in 1-aril-2-fenil-5-metil-1*H*-imidazol-4-karboksilate (*Heterocycles*, **60**, 1161-1172 (2003)), (*Z*)-2-benzoilamino-4-dimetilamino-2-okso-3-butene, in (*Z*)-benzoilamino-4-ciano-2-okso-3-butene pa v derivate pirimidina, pirazola in izoksazola *ARKIVOC* **2003** (V), 77-86.

Pri hidrolizi *N,N*-dimetilenaminov smo opazili stereospecifično pretvorbo dimetilaminometilidenske skupine različnih (*Z*)-alkil [(2,2-disubstituiranih etenil)amino]-3-dimetilaminopropenoatov v hidroksimetiliden in benzoiloksi metiliden derivate z razmeroma dobrimi izkoristki. (*Heterocycles*, **60**, 1317-1328 (2003)).

Pri reakciji etil 3-[(*E*)-(dimetilamino)metiliden]piruvata in 3-(dimetilamino)metiliden]-2-oksosukcinata s hidrazinom in heteroarilhidrazini nastanejo regioselektivno 1-substituirani etil 1*H*-pirazol-5-karboksilati in dietil 1*H*-pirazol-3,4-dikarboksilati. Pri tem smo izolirali tudi ustrezne 4,5-dihidro derivate kot stabilne intermediate pri tej reakciji. (*J. Heterocycl. Chem.*, **40**, 487-498 (2003)). Alkil [(*Z*)-4-dimetilaminometiliden-5-okso-1-fenil-4,5-dihidro-1*H*-pirazol-3-il]acetate smo pretvorili s *C*- in *N*-nukleofili v alkil [4-(substituirane amino)metiliden-4,5-dihidro-1*H*-pirazol-3-il]acetate in (4-heteroarilmetiliden-4,5-dihidro-1*H*-pirazol-3-il)acetate in jih nato ciklizirali s segrevanjem v DMFDMA in DMF v 2*H*-pirazolo[4,3-*c*]piridin-7-karboksilate. (*Heterocycles*, **61**, 197-223 (2003)).

V sodelovanju z univerzo v Urbinu smo študirali reakcijo 2-benzoilamino-3-dimetilaminopropenoata z 1,2-diaza-1,3-butadieni. Pri tem so nastali preko zwitterionskega hidrazonskega intermedijata aziridinski sistemi kondenzirani na pirolinski sistem. (*Synlett*, **2003**, 995-996).

Programme realisation report

In the year 2003 the following paper were published:

Methyl 2-benzoylamino-2-oxobutanoate were transformed with aromatic amines into methyl 2-arylamino-2-benzoylamino-2-oxobutanoates which were cyclized by heating in polyphosphoric acid into derivatives of oxazolo[4,5-*c*]quinoline and 1-aryl-2-phenyl-5-methyl-1*H*-imidazole-4-carboxylates. (*Heterocycles*, **60**, 1161-1172 (2003)), while (*Z*)-2-benzoylamino-4-dimethylamino-2-oxo-3-butenes and (*Z*)-benzoylamino-4-cyano-2-oxo-3-butenes were cyclized into derivatives of pyrimidine, pyrazole and isoxazole. (*ARKIVOC* **2003** (V), 77-86).

By hydrolysis of *N,N*-dimethylamino derivatives a stereospecific transformation of dimethylaminomethylidene group of various alkyl (*Z*)-[2,2-disubstituted ethenyl]amino]-3-dimethylaminopropenoates into hydroxymethylidene and benzoyloxymethylidene derivatives in relatively good yield was observed. (*Heterocycles*, **60**, 1317-1328 (2003)).

In the reaction of ethyl 3-[(*E*)-(dimethylamino)methylidene]pyruvate in 3-(dimethylamino)methylidene]-2-oxosuccinate with hydrazine and heteroarylhydrazines 1-substituted ethyl 1*H*-pyrazol-5-carboxylates and diethyl 1*H*-pyrazol-3,4-dicarboxylates were formed. The corresponding 4,5-dihydro derivatives were isolated as stable intermediates. (*J. Heterocycl. Chem.*, **40**, 487-498 (2003)). Alkyl [(*Z*)-4-dimethylaminomethylidene-5-oxo-1-phenyl-4,5-dihydro-1*H*-pyrazol-3-yl]acetates were transformed with *C*- in *N*-nucleophiles into alkyl [4-(substituted amino)methylidene-4,5-dihydro-1*H*-pyrazol-3-yl]acetates and (4-heteroarylmethylidene-4,5-dihydro-1*H*-pyrazol-3-yl)acetates which were cyclized by heating in DMFDMA and DMF into 2*H*-pyrazolo[4,3-*c*]pyridine-7-carboxylates. (*Heterocycles*, **61**, 197-223 (2003)).

In collaboration with the University of Urbino (Italy) a reaction between 2-benzoylamino-3-dimethylaminopropenoate and 1,2-diaza-1,3-butadienes was studied. Polysubstituted aziridine fused pyrrolidines were formed via zwitterionic hydrazone type of intermediates. (*Synlett*, **2003**, 995-996).

ORGANSKA KEMIJA
ORGANIC CHEMISTRY

Programska skupina / *Research programme group*:
Vodja programske skupine / *Principal researcher*:

P0-0503-103
prof. dr. Slovenko Polanc

Sodelavci programske skupine
Programme group co-workers

Raziskovalci / Researchers

prof. dr. Slovenko Polanc
prof. dr. Marijan Kočevar
prof. dr. Andrej Petrič
prof. dr. Bojan Verček
doc. dr. Janez Košmrlj
dr. Bogdan Štefane
dr. Franc Požgan
dr. Krištof Kranjc

Mladi raziskovalci / Young Researchers

Sergeja Bombek

Tehniki / Technicians

Zdenka Kadunc
Irena Povalej

Poročilo o realizaciji programa

Raziskovali smo različne aspekte organske kemije, od popolne sinteze do pretvorb majhnih molekul v različnih smereh. Nova sinteza L-novioze, sladkorne enote novobiocina, je potekala iz D-gulonolaktona kot kiralnega sintona. Le-tega smo najprej pretvorili do ključnega estrskega derivata [1-*O*-benzil metil 2,3-*O*-(1-metiletiliden)- α -L-liksofuranoziduronata]; prava izbira zaščitnih skupin je omogočila njegovo nadaljnjo pretvorbo pod milimi reakcijskimi pogoji v 4-*O*-demetil-L-noviofuranozo and nekatere sorodne derivate. Sledila je pretvorba do ustreznih L-liksopiranov ali do metil L-liksofuranozida.

Pri več reakcijah smo izhajali iz ustrežno substituiranih 2*H*-piran-2-onov in pripojenih piran-2-onov. V Diels-Alderjevi reakciji nekaterih substituiranih 5,6,7,8-tetrahidro-2*H*-1-benzopiran-2-onov z *N*-substituiranimi maleimidi smo pripravili nekatere benz[*e*]izindole ali premostene dvojne cikloadukte (derivate pripojenega biciklo[2.2.2]oktena). Opazili smo prvo učinkovito aromatizacijo, pospešeno s substituenti na vmesno nastalem cikloaduktu. Podobna aromatizacija je potekla tudi pri novi katalizi z Rh/C. S hidrazini smo derivate 2*H*-piran-2-ona uspeli pretvoriti v hidrazonoetil-2*H*-piran-2-one kot glavne produkte; poleg tega so nastali še ustrezni (*E*)- ali (*Z*)- α,β -didehidro- α -aminokislinski derivati in njihove dekarboksilirane oblike. Katalitsko hidrogeniranje pod visokim pritiskom s Pd/C kot katalizatorjem je vodilo do racemnih derivatov alanina. 5,6,7,8-Tetrahidro-2*H*-1-benzopyran-2,5-dioni so se pri reakciji s hidrazidi, arilhidrazini in heterocikličnimi hidrazini, kot dušikovimi nukleofili, pretvorili do ustreznih 1-amino-5,6,7,8-tetrahidrokinolin-2,5-dionov.

Naše raziskave so zajele tudi termično premestitev 3-hidroksi-1*H*,3*H*-kinolin-2,4-dionov v 3-aciloksi-2,3-dihidro-1*H*-indol-2-one. To je v bistvu nadaljevanje prejšnjega neformalnega sodelovanja z raziskovalno skupino iz Zlina na Češkem, kjer smo ugotovili, da se 3-hidroksi-1*H*,3*H*-kinolin-2,4-dioni s pomočjo različnih organskih baz kot katalizatorjev premestijo v 2-hidroksiindoksile, dioksindole, in 4-acil-1,4-dihidro-3,1-benzoksazin-2-one. Namen raziskav, ki smo jih opravili v letu 2003, je prispevati k boljšemu razumevanju mehanizma premestitve ter najti reakcijske pogoje, primerne za preparativno sintezo novih 3-aciloksi-2,3-dihidro-1*H*-indol-2-onov.

Razvili smo tudi dva postopka za pripravo serije 3-[(2-amino-1,2-dicianovinil)amino]-2-(benzoil-amino)propenoatov. V 'one-pot' postopku smo segrevali zmes diaminomaleonitrila in 4-etoksimetiliden-2-feniloksazol-5(4*H*)-ona v ustreznem alkoholu. Drugi način je solvoliza 4-[(2-amino-1,2-dicianovinil)aminometiliden]-2-feniloksazol-5(4*H*)-ona. Študirali smo tudi nove pretvorbe nekaterih [1,2,3]triazolo[1,5-*a*]pirazinov. Glavni primer je pretvorba etil 3-ciano-4-amino[1,2,3]triazolo[1,5-*a*]pirazin-6-karboksilata v [1,2,3]triazolo[1,5-*a*][1,2,4]triazolo[5,1-*c*]pirazinski sistem. Raziskovali smo tudi pretvorbe 4-metiliden-2-feniloksazol-5(4*H*)-onov, 2-benzoilamino-3-kloropropenojske kisline in amida te kisline s hidrazinskimi derivati, ki vodijo do tvorbe pirazolov.

Nadalje smo razvili novo in zelo enostavno metodo za sintezo enamionov in pirazolov. Ugotovili smo, da tvorijo 1,3-diketoni z borovim triflorid eteratom stabilne komplekse. Slednji reagirajo z dušikovimi nukleofili regioselektivno in kemoselektivno, saj prisotnost OH ali pa SH skupine ne moti reakcije. Kot vemo dajo primarni in sekundarni amini z nesimetričnimi 1,3-diketoni v splošnem po dva enamiona, ki ju moramo ločiti. V nasprotju s tem pa pride pri napadu amina na borov kompleks do reakcije le na enem ogljiku, zato je izolacija ustreznega produkta preprosta. Podobno kot primarni in sekundarni amini reagirajo z omenjenimi borovimi kompleksi tudi alifatski in aromatski hidrazini. Tu dobimo namesto dveh izomernih pirazolov le enega.

Elektrofilna aminiranja halogeniranih fenolov z diizopropil diazendikarboksilati v prisotnosti ZrCl₄ so dala presenetljive rezultate. Diazenska molekula namreč ne vstopa samo na pričakovano orto mesto glede na OH skupino para-halogeniranih fenolov, temveč tudi na para mesto, čemur sledi premik halogena na orto pozicijo glede na OH. Kot vemo so premik broma ali joda, imenovan tudi "halogen dance", pod kislimi pogoji so doslej opazili samo v nekaj primerih. Ugotovili smo, da je pretvorba povsem splošna in poteče na para halogeniranih fenolih pod blagimi reakcijskimi pogoji; ne samo jod in brom, tudi klor in fluor z lahkoto migrirata.

V okviru sodelovanja med Eli Lilly and Company, Harvard University in Univerzo v Ljubljani smo razvili deracemizacijo aldehydov in ketonov, ki temelji na dinamični resoluciji inducirani s kristalizacijo. S to novo metodo je mogoče racemne zmesi ketonov ali aldehydov skoraj kvantitativno pretvoriti v optično aktivne. Kristalizacija iminov, pripravljenih iz racemnih ketonov ali aldehydov in *trans*-(1*R*,2*R*)-1-amino-6-nitroindan-2-ola da diastereomerno čiste kristalinične imine. Po dvofazni hidrolizi teh iminov dobimo, poleg regeneriranega *trans*-(1*R*,2*R*)-1-amino-6-nitroindan-2-ola, enantiomerno obogačene ketone oziroma aldehyde z visokimi izkoristki, v enantiomernih razmerjih do 99:1. Preučevali smo možnosti uporabe te metode v industrijskih procesih.

Vrsto diazenkarboksamidov, ki smo jih sintetizirali na različne načine, ki smo jih razvili v naši raziskovalni skupini, so testirali na Inštitutu Ruđer Bošković. N-fenil-2-(3-piridinil)diazenkarboksamid uspešno zavira rast tako matičnih tumorskih celic (parental cells), kot tudi tistih, ki so sicer resistantne na nekatera zdravila. Podobno kot omenjeni diazen je učinkovit tudi njegov hidroklorid. Zanimalo nas je tudi, če 2-kloroetilna skupina na dušiku diazenkarboksamida doprinese k biološki aktivnosti spojine; znano je namreč, da so 2-kloroetil substituirane sečnine antitumorna sredstva. V ta namen smo pripravili metil 2-(2-kloroetilaminokarbonil)diazenkarboksilat, ki je učinkovit tako na matičnih kot tudi na resistantnih (drug-resistant) tumorskih celicah.

Kot nadaljevanje naših raziskav, povezanih s sintezo, kemijskimi ter biokemijskimi lastnostmi diazenov, smo načrtovali sinteze novih diazenkarboksamidov, ki bi se lahko koordinirali na Pt^{2+} . Cilj projekta je pripraviti analoge cisplatin, ki bi bili topni v vodi in reaktivni do intracelularnega glutationa. Znano je namreč, da prisotnost glutationa v tumorskih celicah zmanjšuje učinke kemoterapevtskih reagentov kot je cisplatin, rezistenco pa je mogoče s sredstvi, ki zmanjšujejo intracelularno koncentracijo glutationa, omejiti. Glede na naša predhodna dognanja, da diazeni tudi zmanjšujejo intracelularno koncentracijo glutationa, se nam je zdelo smiselno pripraviti analoge cisplatin z diazenkarboksamidi kot dušikovimi ligandi. Uspešno smo pripravili *N*-(3-piridil)-2-(4-(trifluorometil)fenil)diazenkarboksamid (**L**) in koordinacijski spojini $[PtCl(en)(L-NI)]^+$ in $[Pt(en)(L-NI)]^{2+}$ (en = etilendiamin). Za obe koordinacijski spojini smo ugotovili, da sta vodotopni in da kažeta visoko citotoksičnost na rakaste celice človeškega mehurja T24.

V sodelovanju s kolegi z Department of Molecular and Medical Pharmacology, the David Geffen School of Medicine at UCLA, Los Angeles smo razvili sintezni postopek za s kratkoživim radioaktivnim izotopom ^{18}F označen 2-(1-{6-[(2- ^{18}F]fluoroetil)(metil)amino]-2-naftil}etiliden) malononitril (^{18}F -FDDNP). Ta spojina je omogočila razširitev raziskav sprememb v centralnem živčnem sistemu pri bolnikih z alzheimerjevo boleznijo na *in vivo* eksperimente s pozitronsko emisijsko tomografijo (PET). Rezultati eksperimentov so odprli možnost racionalnega načrtovanja učinkovine, ki bi vsaj upočasnila napredovanje alzheimerjeve bolezni. Ugotovili smo, da FDDNP podobno kot nekatere nesteroidne protivnetne spojine (naproxen, ibuprofen), upočasnijo izločanje amiloidnih agregatov. Raziskave smo v sodelovanju s kolegi z Inštituta za patofiziologijo v Ljubljani razširili na področje detekcije in označevanja prionskih plakov, ki se izločajo v možganih bolnikov z varianto Creutzfeld-Jacobove bolezni (človeške oblike bolezni norih krav).

Programme realisation report

We have investigated different aspects of organic chemistry, from a total synthesis to the conversion of small molecules into many directions. A new synthesis of L-noviose, a sugar moiety of novobiocin, started from D-gulonolactone as a chiral synthon. It was first converted to the key ester derivative [1-*O*-benzyl methyl 2,3-*O*-(1-methylethylidene)- α -L-lyxofuranosiduronate]; an appropriate selection of protecting groups enabled its transformation under mild reaction conditions to 4-*O*-demethyl-L-noviofuranose and some related derivatives. Further conversions led either to the corresponding L-lyxopyranoses or to a methyl L-lyxofuranoside.

Many reactions started from appropriately substituted 2*H*-pyran-2-ones and fused pyran-2-ones. In the Diels-Alder reaction of some substituted 5,6,7,8-tetrahydro-2*H*-1-benzopyran-2-ones with *N*-substituted maleimides we prepared some substituted benz[*e*]isoindoles or bridged double cycloadducts (fused bicyclo[2.2.2]octene derivatives). The first efficient, substituent-driven aromatization of an intermediary-formed cycloadduct was observed; the same type of aromatization was also achieved in an unprecedented catalysis with Rh/C. 2*H*-Pyran-2-one derivatives were also transformed with hydrazines into hydrazonoethyl-2*H*-pyran-2-ones as the main products, accompanied also by the corresponding (*E*)- or (*Z*)- α,β -didehydro- α -amino acid derivatives and their decarboxylated forms. Catalytic hydrogenation under high pressures with Pd/C as a catalyst resulted in the formation of racemic alanine derivatives. 5,6,7,8-Tetrahydro-2*H*-1-benzopyran-2,5-diones gave with hydrazides, arylhydrazines and heterocyclic hydrazines as nitrogen-containing nucleophiles the corresponding 1-amino-5,6,7,8-tetrahydroquinoline-2,5-diones.

Our research also involved thermal rearrangement of 3-hydroxy-1*H*,3*H*-quinoline-2,4-diones to 3-acyloxy-2,3-dihydro-1*H*-indol-2-ones. This is in fact a continuation of our previous informal collaboration with the research group from Zlin (Czech Republic), where we found out that the former transform to the isomeric 2-hydroxyindoxyls, dioxindols, and 4-acyl-1,4-dihydro-3,1-benzoxazin-2-ones

through the action of various organic bases as catalysts. The research, conducted in 2003, was aimed at better understanding of the reaction mechanism and finding general and robust reaction conditions for the synthesis of novel 3-acyloxy-2,3-dihydro-1*H*-indol-2-ones on a preparative scale.

Two procedures for the preparation of a series of 3-[(2-amino-1,2-dicyanovinyl)amino]-2-(benzoylamino)propenoates have also been elaborated. In a 'one-pot' procedure, a mixture of diaminomaleonitrile and 4-ethoxymethylidene-2-phenyloxazol-5(4*H*)-one was heated in the corresponding alcohol. The second procedure is solvolysis of 4-[(2-amino-1,2-dicyanovinyl)aminomethylidene]-2-phenyloxazol-5(4*H*)-one. We also studied new transformations of some [1,2,3]triazolo[1,5-*a*]pyrazines. The main example is the transformation of ethyl 3-cyano-4-amino[1,2,3]triazolo[1,5-*a*]pyrazine-6-carboxylate to the [1,2,3]triazolo[1,5-*a*][1,2,4]triazolo[5,1-*c*]pyrazine system. Transformations of 4-methylidene-2-phenyloxazol-5(4*H*)-ones, 2-benzoylamino-3-chloropropenoic acid and its amide with hydrazine derivatives leading to the formation of pyrazoles were also investigated.

Furthermore, we developed a new and very simple approach to enaminones and pyrazoles. Reactions of 1,3-diketones with borontrifluoride etherate resulted in the formation of the corresponding stable complexes. The latter react in regio- and chemoselective manner with nitrogen nucleophiles and tolerate OH and SH groups. It is well-known that a treatment of unsymmetrical 1,3-diketones with primary and secondary amines lead to a mixture of two enaminones that need to be separated. On the other hand, the above boron complexes give a single product when treated with primary or secondary amines. Similarly, a single pyrazole is formed from boron complex and either aliphatic or aromatic hydrazines.

Electrophilic aromatic substitutions of halophenols with diisopropyl diazenedicarboxylate in the presence of ZrCl₄ offered an unexpected results. Namely, the diazene does not attack only at an ortho position to OH group, but also at its para position, followed by the halogen shift to an ortho position with respect to OH. So far, only a shift of the bromine or the iodine atom, known as a 'halogen dance', under acidic conditions has been documented for few examples. The above transformation turned out to be a general one for para halophenols and takes place under mild reaction conditions; not only iodine and bromine, but also chlorine and fluorine atoms can easily migrate.

As a part of collaboration among Eli Lilly and Company, Harvard University, and the University of Ljubljana we developed operationally simple deracemization process of aldehydes and ketones. This new crystallization-induced dynamic resolution (CIDR) protocol allows for nearly complete conversion of the racemic mixture into one enantiomer. Crystallization of imines derived from racemic ketones or aldehydes and *trans*-(1*R*,2*R*)-1-amino-6-nitroindan-2-ol afforded diastereomerically pure, crystalline imines. Biphasic hydrolysis of these imines then affords recovered *trans*-(1*R*,2*R*)-1-amino-6-nitroindan-2-ol and enantiomerically enriched ketones or aldehydes in high yield and enantiomeric ratio of up to 99:1. This highly effective crystallization-induced dynamic resolution could easily be adapted to industrial processes.

A number of diazenecarboxamides, prepared by various methods that have been developed in our research group, were tested at the Ruder Bošković Institute. *N*-Phenyl-2-(3-pyridinyl)diazenecarboxamide was found to inhibit not only parental tumor cells, but their drug resistant sub-lines as well. The hydrochloride of this compound exhibits similar activity. We also investigated the influence of 2-chloroethyl group, attached at the diazene nitrogen, on biological activity of the appropriate diazene. Namely, 2-chloroethyl ureas are known as antitumor agents. In this respect we prepared methyl 2-(2-chloroethylaminocarbonyl)diazenecarboxylate which turned out to be efficient against various parental tumor cells and their drug resistant sub-lines.

As a part of our continuous interest on the synthesis, chemical and biochemical reactivity of diazenes, we focused our attention to the synthesis of diazenecarboxamides that could coordinate to Pt²⁺. The overall goal of the project is to prepare cisplatin analogues that would, through a modification of organic amine ligands, possess better water-solubility, reactivity towards intracellular glutathione, and thus an improved cytotoxicity against tumor cell-lines. It is known that glutathione reduces the cellular toxicity of various chemotherapeutic agents, including cisplatin. Glutathione-depleting agents, on the other hand, can reduce the resulting drug resistance. Based on our previous findings that diazenecarboxamides decrease intracellular glutathione concentration we thought that these compounds could be especially attractive Pt(II) ligand candidates. We were successful in preparing *N*-(3-pyridyl)-2-(4-(trifluoromethyl)phenyl)diazenecarboxamide (**L**), and complexes [PtCl(en)(**L-NI**)]⁺ and [Pt(en)(**L-NI**)]²⁺ (en = ethylenediamine). Both complexes were found to be water-soluble and exert high cytotoxicity against T24 human bladder carcinoma cells.

In collaboration with colleagues from the Department of Molecular and Medical Pharmacology, the David Geffen School of Medicine at UCLA, Los Angeles synthetic procedure for the preparation of 2-(1-

{6-[(2-[¹⁸F]fluoroethyl)(methyl)amino]-2-naphthyl}ethylidene) malononitrile (¹⁸F-FDDNP). This radiolabeled probe enabled in vivo investigation of the changes in the CNS in patients with the Alzheimer's disease by positron emission tomography (PET). Prompted by these results and the fact that FDDNP, similarly as nonsteroid anti-inflammatory drugs (naproxen, ibuprofen) prevent amyloid aggregation, we investigated binding properties of FDDNP and its anti-aggregation activity towards amyloid plaques. In collaboration with colleagues from the Institute of Pathophysiology, Ljubljana, the applicability of FDDNP as the probe for in vitro detection and labeling of prion plaques, which are found in the brain of the patients with variant Creutzfeld-Jacob disease (human variant of the mad cow disease).

ANALIZNA KEMIJA
ANALYTICAL CHEMISTRY

Programska skupina / *Research programme group*:
Vodja programske skupine / *Principal researcher*:

P0-504-103
prof. dr. Boris Pihlar

Sodelavci programske skupine
Programme group co-workers

Raziskovalci / *Researchers*

prof. dr. Boris Pihlar
prof. dr. Marjan Veber
izr. prof. dr. Lucija Zupančič Kralj
doc. dr. Nataša Gros
doc. dr. Strlič Matija
dr. Robert Susič
dr. Tatjana Zupančič
dr. Matevž Pompe
dr. Irena Kralj Cigić
dr. Helena Prosen
Polonca Kralj Razpotnik
mag. Ivanka Keber

Mladi raziskovalci / *Young Researchers*

Nataša Kovačič
Vid Simon Šelih
Kočar Drago

Tehniki / *Technicians*

Jolanda Furlan
Mojca Žitko
Zdenka Držaj

Poročilo o realizaciji programa

V letu 2003 so sodelavci programske skupine objavili 26 izvirnih znanstvenih člankov, od tega izhaja 17 člankov neposredno iz raziskav tematike načrtovane v okviru programa, 9 člankov pa je plod sodelovanja z drugimi raziskovalnimi skupinami. Poleg tega je bil iz tematike programa objavljen tudi en pregledni članek in en samostojni sestavek v znanstveni monografiji ter trije strokovni članki, objavljena pa so bila tudi štiri vabljeni predavanja, na konferencah. Tematika raziskav sodelavcev programske skupine je razvidna iz Bibliografije.

Programme realisation report

The members of the research programme group published in the last year 26 original scientific papers in recognised scientific journals and one review article. Research subjects and achievements are evident from the Bibliography of the programme group.

TEORETIČNA KEMIJA
THEORETICAL CHEMISTRY

Programska skupina / *Research programme group*:
Vodja programske skupine / *Principal researcher*:

P0-0505-0103
prof. dr. Vojeslav Vlachy

Sodelavci programske skupine
Programme group co-workers

Raziskovalci / *Researchers*

prof. dr. Vojeslav Vlachy
prof. dr. Andrej Jamnik
doc. dr. Barbara Hribar Lee
doc. dr. Jurij Reščič

Mladi raziskovalci / *Young Researchers*

Tomaž Urbič

Poročilo o realizaciji programa

a) Raziskave močno nesimetričnih elektrolitov. V prejšnjih delih smo z računalniškimi simulacijami ugotovili, da pride v raztopinah, kjer so prisotni večvalentni protiioni, do tvorbe skupkov enakonabityh makroionov. Da bi potrdili predhodne ugotovitve o vlogi korelacij med protiioni pri tvorbi takšnih gruč, smo raziskali vpliv kratkosežnih sil med protiioni ter makroioni na stabilnost raztopin. Prvi rezultati so pokazali, da obarjanje lahko povzročijo že kratkosežne privlačne sile med protiioni in makroioni. O rezultatih je V. Vlachy poročal na vabljenem predavanju v Zagrebu junija 2003 (Elektrokemijski dnevi) in na predavanju na 'Workshop on Attractive Interactions in Colloidal Systems' v Badgasteinu januarja 2003. V začetku septembra je imel na to temo predavanje na UC v San Franciscu, ZDA.

b) Raziskave heterogenih sistemov. Pri študiju adsorpcije nas zanima, kako povečati množino adsorbirane snovi. S teorijo na osnovi niza integralskih enačb (replika HNC), ki smo jo pred nekaj leti priredili v ta namen, smo raziskali, kako na adsorpcijo vpliva uporaba vključkov. Le – ti so prisotni pri procesu priprave adsorbenta, nato pa jih na poseben način odstranimo. Rezultati kažejo (Dominguez, et al, Physica A 324 (2003) 469), da v primeru, ko adsorbent ne vsebuje nabojev, z uporabo vključkov dosežemo precej boljšo adsorpcijo. V. Vlachy je imel o tej tematiki vabljeno predavanje na '28. International Conference on Solution Chemistry' avgusta 2003 v Debrecenu, Madžarska.

V naslednjem delu (Vlachy et al., J. Phys. Chem. B, 108 (2004) 1046) smo raziskali področje parametrov, v katerem je še moč dobiti veljavno rešitev replika HNC integralske enačbe. Pokazali smo, da je replika OZ enačba rešljiva v bistveno širšem območju parametrov kot to velja za navadno HNC (nemoten elektrolit) enačbo. Od tod je možno sklepati, da je adsorbirani elektrolit bolj stabilen kot nemoteni. To dejstvo je posledica manjšega števila ionskih parov adsorbiranem elektrolitu.

c) Študij modelov vode in vodnih raztopin. Teorija, ki smo jo s sodelavci razvili za študij vode in vodnih raztopin, eksplicitno upošteva odvisnost medmolekulskih interakcij od razdalje, orientacijska odvisnost pa ni zajeta povsem pravilno. Sklepali smo, da je to eden od možnih vzrokov za slabše ujemanje z rezultati računalniške simulacije pri nizkih temperaturah. Da bi teorijo izboljšali, smo razvili orientacijsko odvisno integralsko enačbo za študij takšnih sistemov. Primerjava s simulacijami kaže, da pravilnejše upoštevanje orientacijske odvisnosti precej izboljša rezultate (Urbič et al., J. Chem. Phys. 118 (2003) 5516). Teorijo je moč uporabiti tudi za druge modele s kotno odvisnimi interakcijami med molekulami.

d) Sistemi, ki so sestavljeni iz vsaj treh komponent (vodna komponenta, organska komponenta, surfaktant), so uporabni kot medij za encimsko katalizirane reakcije. Študirali smo jih z metodo SAXS, ki nam omogoča določanje oblike in velikosti 'nanostruktur', ki se v takšnih sistemih pojavljajo. Rezultati so objavljeni v J. Phys. Chem. B 107 (2003) 13862 (Preu, et al).

e) Monte Carlo simulacije in teoretične raziskave mešanic elektrolitov. Članek objavljen v Mol. Phys. 101 (2003) 2969 (Hribar-Lee et al.) poglobljeno in z različnimi metodami statistične termodinamike obravnava mešanice raztopin elektrolitov. Teoretične rezultate smo primerjali tudi z v literaturi dostopnimi eksperimentalnimi podatki. Ugotovili smo, da natančnost merjenja osmotskih tlakov v razredčenih raztopinah ni dovolj velika, da bi iz njih lahko določili koeficiente mešanja in le-te primerjali s teoretičnimi rezultati. To daje teoretičnim raziskavam na tem področju še pomembnejšo vlogo.

Programme realisation report

a) Study of highly asymmetric electrolytes. The computer simulations were used to study the solutions of highly asymmetric electrolytes. In our previous works we reported of the macroion clusters formation in presence of multivalent counterions. Here we investigated the influence of the short – range interactions to the stability of such solutions. The results show that the short-ranged attractive interaction can trigger the macroion cluster formation. V. Vlachy reported about these results in invited lecture in Zagreb (Electrochemical days), June 2003, and at 'Workshop on Attractive Interactions in Colloidal Systems' in Badgastein, January 2003. He also gave a lecture on this subject at UCSF, San Francisco, in September 2003.

b) Study of heterogeneous systems. In adsorption studies we are interested how to control the amount of the adsorbed material. The Replica OZ integral equation method was used to study the adsorption in a templated matrix. The template is removed after the quenching and in this way it influences the pore distribution. The calculations show (Dominguez et al, Physica A 324 (2003) 469) that the presence of a suitable template during the process of matrix preparation increases the electrolyte adsorption. V. Vlachy gave an invited talk on this subject at '28. International Conference on Solution Chemistry', Debrecen,

Hungary, in August 2003. The range of parameters in which the Replica integral equation theory gives a convergent solution was also investigated (Vlachy et al., *J. Phys. Chem. B*, 108 (2004) 1046). It was shown that the ROZ-HNC converges up to much lower temperatures than the usual HNC theory used for bulk electrolytes. The conclusions were made that the presence of the matrix particles increases the stability of electrolyte solutions. Low number of ionic pairs in adsorbed electrolyte can explain this finding.

c) Water and aqueous solutions: The integral equation theory was recently developed by us to study the systems with strong directional forces. While good agreement was obtained between integral equation and computer simulation results at moderate and high temperatures, the theory experiences some difficulties at low temperatures. To improve the theory, an orientation dependent version of the theory was developed and applied. The results for structure of the solution were largely improved (Urbič et al., *J. Chem. Phys.* 118 (2003) 5516). The new theory can also be applied to other systems with angular dependent interactions.

d) Three component systems consisting of water, organic component, and surfactant molecules can be used to study the enzyme – catalysed reactions. The systems were studied using the SAXS that enabled us to determine the size and shape of the nanostructures formed. The results were summarised in the recent paper (Preu, et al, *J. Phys. Chem. B* 107 (2003) 13862).

e) Studies of electrolyte mixtures using the Monte Carlo simulation method and various other theoretical approaches. The electrolyte mixtures were thoroughly studied using different methods of statistical thermodynamics (Hribar-Lee et al., *Mol. Phys.* 101 (2003) 2969). The theoretical results were compared with the literature experimental data. The main conclusion was that the accuracy of the osmotic pressure measurements is not good enough to evaluate the mixing coefficients to be compared with theoretical approach, emphasising this way the role of the theory in this field of research.

FIZIKALNA KEMIJA
PHYSICAL CHEMISTRY

Programska skupina / *Research programme group*:
Vodja programske skupine / *Principal researcher*:

P0-0506-0103
prof. dr. Gorazd Vesnaver

Sodelavci programske skupine
Programme group co-workers

Raziskovalci / *Researchers*

prof. dr. Gorazd Vesnaver
prof. dr. Jože Koller
prof. dr. Ciril Pohar
prof. dr. Marija Bešter Rogač
doc. dr. Ksenija Kogej
doc. dr. Jurij Lah
asist. dr. Janez Cerar

Mladi raziskovalci / *Young Researchers*

Jožica Dolenc
Iztok Prislán

Tehniki / *Technicians*

Cirila Peklaj
Anton Kelbl
Antron Kokalj

Poročilo o realizaciji programa

a) V sklopu raziskav termodinamskih in transportnih lastnosti vodotopnih fullerenskih derivatov smo merili električne prevodnosti, osmotske koeficiente, navidezne molske volumne in razredčilne entalpije litijeve, natrijeve in cezijeve soli fulerenheksamalonske kisline v vodi. Dobljeni eksperimentalni podatki se okvirno ujemajo s teoretičnimi napovedmi Poisson-Boltzmannove enačbe za celični model (J. Cerar & J. Škerjanc, *J. Phys. Chem. B* 107 (2003) 8255). Z metodo ozkokotnega sipanja rentgenskih žarkov smo študirali lastnosti kompleksov med poliakrilno kislino in površinsko aktivnimi snovmi. Ugotovili smo, da karakteristične dimenzije kompleksov naraščajo linearno s stopnjo nevtralizacije poliakrilne kisline (K. Kogej, *J. Phys. Chem. B* 107 (2003) 8003).

b) Določena je bila prva kristalna struktura antitoksina, ki sodeluje pri regulaciji celične smrti pri bakterijah. Z modeliranjem in na podlagi termodinamskih podatkov vezanja mutantov proteina MazE na DNK (ITC) smo ugotovili, da MazE prepozna DNK po doslej neznanem motivu (R. Loris et al., *J. Biol. Chem.* 278 (2003) 28252).

Kristalna struktura opredeli neposredno okolico vezanega mesta za kalijeve ione v arzenat reduktazi. Termodinamska študija vezave kalijevih ionov (ITC) in stabilnosti (CD, DSC) arzenat reduktaze in njenih mutantov je pokazala, da je vezanje kalijevih ionov specifično. To je prvi primer popolne termodinamske karakterizacije specifičnega veznega mesta na proteinu za monovalentne katione (N. Lah et al., *J. Biol. Chem.* 278 (2003) 24673). V ta sklop raziskav lastnosti proteinov sodi tudi študij vezanja in stabilnosti proteina MazE, ki sodeluje pri regulaciji celične smrti pri bakterijah. Z vezanjem ga stabilizira in strukturira, kar omogoči kristalizacijo in določitev kristalne strukture kompleksa. Termodinamska raziskava vezanja MazE (ITC, CD, fluorescenca) na kamelje protitelo in na DNK ter odgovarjajoča raziskava stabilnosti (CD, DSC) kažeta, da se MazE strukturira šele pri vezavi na specifičnega partnerja, kar je v skladu z njegovo vlogo v celici (J. Lah et al., *J. Biol. Chem.* 278 (2003) 14101).

c) Z merjenjem CD spektrov posameznih enantiomerov je bila raziskana analiza separacije enantiomerov na različnih kolonah (B. Zajc et al., *J. org. chem.* 68 (2003) 3291).

Programme realisation report

a) In our study of thermodynamic and transport properties of aqueous solutions of some fullerene derivatives we measured electrical conductivity, osmotic coefficients, apparent molar volumes and enthalpies of dilution of Li, Na and Cs salts of fullerenehexamalononic acid in water. Experimental results are in qualitative agreement with the prediction of the Poisson-Boltzmann equation applied to the cell model (J. Cerar & J. Škerjanc, *J. Phys. Chem. B* 107 (2003) 8255). By measuring the small angle X-ray scattering we studied the properties of polyacrylic acid-surfactant complexes. Our results show that the characteristic dimensions of these complexes increase linearly with the degree of neutralization of polyacrylic acid (K. Kogej, *J. Phys. Chem. B* 107 (2003) 8003).

b) The crystal structure of protein MazE is the first known 3D structure of the antitoxin that participates in the mechanism of programmed cell death in bacteria. Thermodynamic investigation of binding of MazE mutants to DNA (ITC) combined with the molecular modeling showed that MazE recognizes DNA through a new binding motive (R. Loris et al. *J. Biol. Chem.* 278 (2003) 28252).

The crystal structure of arsenate reductase (from *S. Aureus*) determines the exact location of its potassium ion-binding site. Thermodynamic study of binding of potassium ions (ITC) to arsenate reductase and stability (CD, DSC) of arsenate reductase and its mutants has shown that the binding of potassium is specific. This is the first complete thermodynamic description of the binding site for a monovalent cation in a protein (N. Lah et al. *J. Biol. Chem.* 278 (2003) 24673).

A thermodynamic study of stability (CD DSC) of MazE and its binding to the monoclonal camelid antibody fragment (ITC, CD, fluorescence) has shown that MazE is intrinsically flexible and it structures upon binding the specific partner (J. Lah et al. *J. Biol. Chem.* 278 (2003) 14101). This is fully consistent with its cell function.

c) Separation of enantiomers on different columns was analyzed using CD spectra of individual enantiomers (B. Zajc et al., *J. org. chem.* 68 (2003) 3291).

MAKROMOLEKULARNA KEMIJA
MACROMOLECULAR CHEMISTRY

Programska skupina / *Research programme group*:
Vodja programske skupine / *Principal researcher*:

P0-0508-0103
prof. dr. Peter Bukovec

Sodelavci programske skupine
Programme group co-workers

Raziskovalci / *Researchers*

prof.dr.Jurij Brenčič
prof.dr.Nataša Bukovec
prof.dr.Peter Bukovec
prof.dr.Marko Zupan
dr. Sabina Grabner
dr.Barbara Modec
dr.Elizabeta Tratar Pirc
dr.Romana Cerc Korošec
dr.Marija Zupančič
dr.Marjan Jereb
mag.Irena Kozjek Škofic
Nataša Čelan Korošin

Tehniki / *Technicians*

Damjan Erčulj
Urša Levec
Zdenka Sakešek

Poročilo o realizaciji programa

Študirali smo vpliv topila na direktno jodiranje aril alkil ketonov z uporabo elementarnega joda, nadalje selektivno jodiranje alkil-substituiranih benzenov z elementarnim jodom ter direktno jodiranje indanonovih in tetralonovih derivatov z elementarnim jodom. Študirali smo kinetiko reakcij fenolov z derivati fluorooktana. Študirali smo fluoriranje ketonov z N-F reagenti. Ugotavljali smo vlogo geometrije na regioselektivnost fluoriranja fluorena in difenilmetana. Strukturno smo karakterizirali bromo-koordinirane oksomolibdenove klastre z novimi ligandi v koordinacijski sferi. Študirali smo strukturno izomerijo oktajedrnih oksomolibdenovih(V) koordinacijskih spojin s piridini. Sintetizirali in karakterizirali smo polimerne molibdate z oksalatom kot mostovnim ligandom. Določili smo naravo interakcije med kobaltom(II) in ciprofloksacinom. S sol-gel postopkom smo pripravili optično selektivne prevleke iz kobaltovega aluminata in jih karakterizirali. S termično analizo smo optimirali elektrokromni efekt nikelj oksidnih tankih filmov. Študirali smo ionsko kapaciteto cerij-vanadijevih oksidnih filmov. S sol-gel sintezo smo pripravili tanke filme iz cerijevega dioksida in določili njihove karakteristike. Sintetizirali in karakterizirali smo komplekse platine(II) z diazeni in študirali njihove reakcije z glutationom.

Programme realisation report

We studied the influence of solvent on direct iodination of aryl and alyl ketons using elemental iodine, then selective iodination of alkyl substituted benzens with elemental iodine and direct iodination of indane and tetralone derivatives with elemental iodine. Further we studied kinetics of the reaction of fenoles with derivatives of fluorooctane. The role of geometry on regiospecificity of fluorene and difenylmethane has been evaluated. Bromocoordinated oksomolibden clusters with new ligands have been structuraly characterized. We studied structural isomerism of octanulcear oksomolibden(V) coordination compounds with pyridines. Polimeric molibdates with oxalate as bridge ligand have been synthesised and characterized. The interaction of cobalt(II) with ciprofloksacine has been evaluated. Sol-gel preparation and characterization of optically selective coatings of cobalt aluminate has been carried out. Electrochromic effect of nickel oxide thin films has been optimized using thermal analysis. Ionic capacity of cerium-vanadium oxide films has been studied. We have prepared and characterized complexes of platinum(II) with diazenes. Their reactions with glutation have been studied.

KEMIJSKO INŽENIRSTVO
CHEMICAL ENGINEERING

Programska skupina / *Research programme group*:
Vodja programske skupine / *Principal researcher*:

PS-0103-0510
prof. dr. Valentin Koloini

Sodelavci programske skupine
Programme group co-workers

Raziskovalci / *Researchers*

prof. dr. Valentin Koloini
prof. dr. Janvit Golob
prof. dr. Miha Žumer
izr. prof. dr. Jana Zagorc Končan
izr. prof. dr. Aleksander Pavko
doc. dr. Igor Plazl
doc. dr. Andreja Zupančič Valant
asist. dr. Ana Lakota Družina

Mladi raziskovalci / *Young Researchers*

Iztok Hace
Urška Roglič
mag. Lidija Slemenik Perše

Tehniki / *Technicians*

Vesna Delalut
Dušan Komel
Darinka Darja Radešček

Poročilo o realizaciji programa

Vpliv temperature na polimerizacijo metakrilatnih monolitov se demonstrira skozi kvaliteto porozne strukture, ki odločujoče vpliva tudi na dinamično kapaciteto monolitnih ionsko-izmenjevalnih nosilcev. Študij parametrične občutljivosti dinamičnega modela enostopenjske čistilne naprave je opozoril na probleme uporabljivosti, pri stacionarnih pogojih določenih parametrov, za dinamično napoved odziva čistilne naprave

Eksperimentalno raziskavo tokovnih oblik, hidrodinamskih parametrov in transportnih pojavov v koloni z mehurčki in njeni modificirani obliki s statičnimi polnili (Sulzerjevi elementi SMV 16) na sistemu zrak-voda je zaokrožila študija parametrične občutljivosti koeficienta snovnega transporta, ovrednotenega na podlagi izbranih tokovnih modelov. Študija obenem podaja smernice za nadaljne načrtovano zahtevno eksperimentalno delo na sistemih z newtonskimi tekočinami.

V okviru sodelovanja z LEK-om smo raziskovali mikrobnosti med kompostiranjem odpadne mikrobnosti biomase iz farmacevtske industrije. Proučevali smo tudi koncentriranje lisinopriila z reverzno ozmozo v pilotnem in industrijskem merilu in sodelovali pri raziskavah indukcije izražanja heteroloških proteinov v bakteriji *E. Coli*.

Določaje reoloških lastnosti kompleksnih tekočin z uporabo rotacijskih reometrov in analiza rezultatov z uporabo reoloških modelov za opis viskoelastičnega obnašanja proučevanih tekočin. (a) Reološke lastnosti *hidrofilnih biopolimerov, ki v vodnih medijih tvorijo šibke gelske strukture*: Na osnovi eksperimentalnih podatkov smo določali sol-gel prehode vodnih raztopin gellana - vpliv temperature in koncentracije polimera na formacijo gelskih struktur. Za analizo rezultatov obširne reološke karakterizacije različnih vodnih polisaharidnih raztopin smo uporabili integralni konstitutivni model tipa K-BKZ, ki vsebuje PSM-funkcijo dušenja in omogoča simulacijo reološkega obnašanja vodnih raztopin polisaharidov pri različnih deformacijskih procesih: opis dinamičnih viskoelastičnih lastnosti in stacionarnega strižnega obnašanja, ter napoved nekaterih materialnih funkcij kot so natezna viskoznost in normalne napetosti. Uporabljena so bila ustrezna orodja s področja numeričnih simulacij. (b) Reološke lastnosti *polimerno-modificiranih cestogradbenih bitumnov*: Proučevali smo vpliv temperature (20 -140 °C), na reološke lastnosti cestogradbenih bitumnov z namenom, določiti primerne merilne tehnike in postopke za opredelitev mehanskih lastnosti, ki v tem temperaturnem območju služijo kot ocena (kriterij) kakovosti polimerno modificiranih bitumnov.

Na področju mešanja je bil opravljen študij laminarnega mešanja visoko-viskoznih in reološko kompleksnih tekočin z različnimi mešali (tračno mešalo in šestkrilna turbina – vetrnica). Proučevali smo vpliv reološko kompleksnih lastnosti tekočin na krivuljo moči za posamezno mešalo in na tokovna polja znotraj mešalne posode. Za boljše razumevanje tokovnega polja v mešalni posodi so bile opravljene vizualizacijske meritve. Razvija se bolj natančna zveza med strižno hitrostjo in vrtilno hitrostjo.

Separacijski procesi:

Destilacija: Separacija zmesi metanol/voda/formaldehid (Fele/Golob člani Acta Chim. Slov. 2003); Tehnologija separacije organskih zmesi z diferencialno in ravnotežno destilacijo (diploma B. Kumelj).

Sušenje s kemijsko reakcijo: Tehnologija sušenja silikatov (doktorat A. Horvat); Tehnologija sušenja fosfatov (prijavljen projekt).

Absorpcija s kemijsko reakcijo: HCHO v raztopino CO(NH₂)₂ (razvoj tehnologije); SO₂ v raztopino Ca²⁺ (korekcija publikacije); CO₂ v raztopino N-metildietanolamina (diploma G. Šorn).

Raziskave s področja ekološkega inženirstva smo usmerili v študij biorazgradljivosti in strupenosti odpadnih vod v različnih naravnih okoljih kakor tudi v bioloških čistilnih napravah. Posebno pozornost smo posvetili študiju kinetičnih parametrov in ocenjevanju kinetičnih konstant anaerobne razgradnje. Ocenjevali smo možnosti in optimizacijo anaerobnega načina čiščenja koncentriranih industrijskih odpadnih vod v laboratorijskem in pilotnem UASB reaktorju. Del raziskav pa smo posvetili študiju strupenosti, razgradljivosti in možnim načinom čiščenja deponijskih izcednih vod.

Programme realisation report

The studies of the methacrylate-based monoliths were directed to the effect of temperature gradients during the polymerization on the quality of the pore size distribution. Dynamic binding capacity of a monolithic ion-exchange column is also affected by the temperature of the polymerization.

Experimental and theoretical study of the parametric sensitivity of the dynamic model for single stage wastewater treatment plant was also carried out.

Final results of broad experimental research of hydrodynamics and mass transfer in a bubble column and modified bubble column with internals (Sulzer SMV 16 static elements) on air-water system were gathered in the study of parametric sensitivity of mass transfer coefficients evaluated from different hydrodynamic models. The results of this study also enabled to design further complex experiments with nonnewtonian liquids in the same column.

In cooperation with LEK, microbial activities during composting of waste microbial biomass from pharmaceutical industry has been studied. Furthermore, concentration of lisinopril with reverse osmosis in pilot plant and production scale was studied as well as expression of heterologous proteins in *E.Coli* was investigated.

Rheological characterisation of complex fluids was performed by using rotational rheometers. The analysis of experimental data was carried out by applying the rheological models for describing viscoelastic behaviour. (a) *Rheological properties of hydrophilic bio-polymers which form weak-gel structures in aqueous media*: The effects of temperature and polymer concentration on sol-gel transition of aqueous solution of gellan were examined from experimental data. For the analysis of experimental data, from detailed rheological characterisation of various aqueous polysaccharide solutions, an integral constitutive equation of the K-BKZ type was used with a PSM damping function, which describes the rheological behavior of the polymer in many types of deformation. Namely, it describes its behavior in dynamic measurements and the steady properties, such as the shear and elongational viscosities and the normal stresses measured in shear. For simulation, the software program BESTFIT was used, which performs a non-linear regression analysis on the experimental data based on the Levenberg-Marquardt method. (b) *Rheological properties of polymer-modified bitumens*: The effect of temperature (20 -140 °C) on rheological properties of polymer-modified bitumens was examined in order to determine proper measuring procedures and measuring techniques suitable for describing the mechanical properties (in this temperature range) which can be used as a quality control criterion.

The study of laminar mixing of highly viscous and rheologically complex fluids was performed with different close-clearance impellers (helical ribbon impeller and six-bladed vane turbine). The main emphasis was laid on the effect of rheologically complex properties on power curves and flow fields inside mixing vessel. Visualization method was performed for better understanding of flow fields inside the vessel. More accurate relation between shear rate and impeller speed has been developed.

Activities on Separation processes:

Distillation: Separation of methanol/water/formaldehyde mixture (publikation in Acta Chim. Slov.); Separation technology of mixture of organic compounds by batch and flash distillation (Diploma work B. Kumelj).

Drying with chemical reaction: Drying technology of silicates (PhD Thessis A. Horvat); Drying technology of phosphates (project).

Absorption with chemical reaction: HCHO in CO(NH₂)₂ solution (technology development); SO₂ in Ca²⁺ solution (publication correction); CO₂ in N-methyldiethanolamine solution (Diploma work G. Šorn).

Research in the field of environmental engineering was focused to the study of biodegradability and toxicity of wastewaters in different environmental compartments and in biological treatment plants. Special attention was devoted to the study of kinetic parameters and to evaluation of kinetic constants of anaerobic degradation processes. Treatability and optimisation of anaerobic biological treatment of highly polluted industrial wastewaters was evaluated in laboratory and pilot UASB reactors. A great part of investigation was directed to toxicity and biodegradability assessment as well as to various treatability studies of municipal landfill leachates.

SINTEZA, STRUKTURA, LASTNOSTI SNOVI IN MATERIALOV
SYNTHESIS, STRUCTURE, PROPERTIES OF THE MATTER AND
MATERIALS

Programska skupina / *Research programme group*:
Vodja programske skupine / *Principal researcher*:

P0-511-103
prof.dr. Ivan Leban

Sodelavci programske skupine
Programme group co-workers

Raziskovalci / *Researchers*

Ivan Leban
Boris Čeh
Alojz Demšar
Amalija Golobič
Nives Kitanovski
Bojan Kozlevčar
Nina Lah
Anton Meden
Saša Petriček
Andrej Pevec
Primož Šegedin
Iztok Turel
Jadran Maček
Marjan Marinšek
Barbara Novosel
R.-Stane Pejovnik
Klementina Zupan

Mladi raziskovalci / *Young Researchers*

Petra Drevenšek
Franc Perdih
Petra Gorišek
Daniel Vrbanič
Tanja Razpotnik

Tehniki / *Technicians*

Vojmir Francetič
Vinko Volk

Poročilo o realizaciji programa

V skladu z osnovno znanstveno tematiko programske skupine smo uspešno dosegli predvidene cilje raziskav, četudi mnogokrat pri osnovnih raziskavah ne moreš z gotovostjo napovedati, kakšni bodo rezultati znanstveno-raziskovalnega dela. Sintetizirane in okarakterizirane so bile mnoge povsem nove spojine: koordinacijske, bioanorganske, organokovinske. Vedno bolj se usmerjamo tudi na testiranje biološke aktivnosti nekaterih pripravljenih spojin (npr. protibakterijska aktivnost, insulinski testi vanadijevih spojin). Posebej pa je tudi pomembno, da so sodelavci nesebično pomagali s svojim strukturnim znanjem drugim programskim skupinam.

Skupina je na področju raziskav procesov za pripravo nano in drugih zahtevnih materialov poglobljala temeljna znanja o osnovnih zakonitostih teh procesov tako, da lahko na tej osnovi in osnovi izkušenj in znanja pridobljenega z eksperimentalnim delom obvlada določene reakcijske sisteme v smeri načrtovanja in proizvodnje materialov z želenimi lastnostmi, ti. "product engineering".

Raziskave v okviru programske skupine so rezultirale v vrsti znanstvenih publikacij, pretežno v mednarodni periodiki. Še posebno smo ponosni, da so bili rezultati s sodelavci iz drugih programskih skupin, publicirani v znanstvenih revijah kot so: J. Am. Chem. Soc. (IF=6.201), J. Biol.Chem. (IF=6.696), New.J.Chem., J.Org.Chem., Helv. Chim. Acta, Org Lett., J. Chem.Soc.Dalton, Tetrahedron Lett., Organometallics in drugih. Posebej je potrebno omeniti pregledni članek našega sodelavca Dr. Turela v Coord. Chem. Rev. (IF=5.853).

Poleg vsega navedenega menimo, da je velik dosežek te programske skupine, da si je s sodobno raziskovalno opremo (ki jo UL dosti težje pridobiva kot raziskovalni inštituti) omogočila nemoteno delovanje tudi v prihodnje. V juniju 2001 smo uradno pričeli z delom na Rentgenskem difraktometru s CCD detektorjem za monokristale - KappaCCD Nonius - nabavna vrednost SIT 57.865.675.-. Rezultati delovanja aparature bodo predvsem vidni v prihodnosti. Nabavo aparature je omogočilo tedaj MZT RS s sofinanciranjem nominalno 37 % (paket X, postavka 256) in s posojilom UL FKKT. MZT RS je prispevalo k nabavi SIT 21.451.209.-. MZT RS nam je omogočilo, da smo denar namenjen osebnemu dohodku, namenili nakupu prepotrebne aparature. Podobno smo v letu 2003 izvedli nabavo suhe komore v vrednosti SIT 5.512.000.-.

Programme realisation report

The research project team was very successful within the frame of the aims of the group, although there are considerable difficulties while forecasting the scientific result when dealing with the fundamental research. Several new -previously unknown- coordination, bioinorganic and organometallic compounds were synthesised and characterized by the physico-chemical methods. The attempts towards the tests of the biological activities were made (for example: antibacterial, insuline tests of vanadium compounds).

However, the members of the team provided the regular structural service to the other research project team not only in Slovenia but also abroad.

One part of the research team was involved in the research in the field of material science. They specialised in the preparation of the nano materials hoping that the acquired knowledge will help us to find the extraordinary reaction systems and to produce the material with the special planned properties in the process called "product engineering".

The majority of the results of the research was published in the international journals. We can point the publications with a series of foreign coauthors published in: J. Am. Chem. Soc. (IF=6.201), J. Biol.Chem. (IF=6.696), New.J.Chem., J.Org.Chem., Helv. Chim. Acta, Org Lett., J. Chem.Soc.Dalton, Tetrahedron Lett., Organometallics in drugih. There is an integral survey of the results presented by I. Turel in Coord. Chem. Rev. (IF=5.853).

At the end the great achievement was the purchase of the modern research equipment which will enable the up-to-date research also in the future. The X-ray diffractometer with the CCD detector for small-structure monocrystals was installed at the Faculty of Chemistry and Chemical Technology, University of Ljubljana in June 2001. The purchase value was SIT 57.865.675.- (USD 243.748.-). The partial financing was done by the Ministry of Science in the grant packet X-256 with the sum of SIT 21.451.209.- (USD 90.358.-) - this means only 37 %. The rest was contributed from National Chemistry Institute SIT 4.000.000.- (USD 16.849.-), however the rest in the amount of 56 % of the whole value was contributed from the research group itself, namely (USD 136.539.-). In the similar way the dry-box of the value SIT 5.512.000.- (EUR 23.965.-) was bought.

KATEDRA ZA ANORGANSKO KEMIJO
CHAIR OF INORGANIC CHEMISTRY

Predstojnik katedre / *Head*: **izr. prof. dr. Alojz Demšar**

Sodelavci katedre
Employees

Učitelji / Faculty

prof. dr. Jurij Brenčič
prof. dr. Nataša Bukovec
prof. dr. Peter Bukovec
izr. prof. dr. Boris Čeh
izr. prof. dr. Alojz Demšar
prof. dr. Ivan Leban
izr. prof. dr. Anton Meden
prof. dr. Primož Šegedin
izr. prof. dr. Iztok Turel

Asistenti / Assistants

dr. Romana Cerc Korošec
Nataša Čelan Korošin
dr. Amalja Golobič
dr. Sabina Grabner
mag. Nives Kitanovski
mag. Irena Kozjek Škofic
dr. Bojan Kozlevčar
dr. Nina Lah
dr. Barbara Modec, docentka
doc. dr. Saša Petriček
dr. Andrej Pevec
dr. Elizabeta Tratar Pirc
dr. Marija Zupančič

Tehniki / Technicians

Damjan Erčulj
Karmen Klančar
Aleš Knez
Urška Levec
Igor Ponikvar
Vinko Volk

Mladi raziskovalci / Young researchers

	<i>Mentor / Advisor</i>	<i>Programme duration</i>	<i>Oblika usposabljanja / Degree</i>
Simona Gašperšič	Anton Meden	4.5 let	doktorski študij / PhD
Petra Drevenšek	Iztok Turel	3 leta	doktorski študij / PhD

Raziskovalna oprema / *Research Equipment*

Modularni sistem za termično analizo - Mettler / Modular system for thermal analysis - Mettler
Modularni sistem za termično analizo – Perkin Elmer / Modular system for thermal analysis – Perkin Elmer
HPLC kromatograf / HPLC chromatograph
Guinierjeva kamera / Guinier camera
Polarizacijski mikroskop / Polarization microscope
Stereomikroskop / Stereo microscope
Nonius Kappa CCD difraktometer za monokristale / Nonius Kappa CCD single-crystal diffractometer
Nonius 4-circle difraktometer za monokristale / Nonius 4-circle single-crystal diffractometer
Perkin Elmer 2000 FT-IR spektrometer / Perkin Elmer 2000 FT-IR spectrometer
Perkin Elmer 1720 X spektrometer / Perkin Elmer 1720 X spectrometer
UV/VIS/NIR Lambda 19 spektrometer / UV/VIS/NIR Lambda 19 spectrometer
Termoanalizator Mettler 2000C / Termoanalyzer Mettler 2000C
Suha komora MBraun Unilab / Dry-box MBraun Unilab

Temeljni projekti / *Basic Research*

J1-5010-0104 SOL-GEL PRIPRAVA ORGANSKO-ANORGANSKIH HIBRIDOV Z IONSKO PREVODNOSTJO / SOL-GEL SYNTHESIS OF ORGANIC-ANORGANIC HYBRIDS WITH IONIC CONDUCTIVITY
Nosilec / *Principal researcher*: dr. Romana Cerc Korošec

Z1-3246-0103-02 STRUKTURNA KARAKTERIZACIJA KERAMIKE S PRAŠKOVNO DIFRAKCIJO / STRUCTURAL CHARACTERIZATION OF CERAMICS WITH X-RAY POWDER DIFFRACTION
Nosilec / *Principal researcher*: dr. Amalija Golobič

Aplikativni projekti / *Applied Research*

L2-3183-1682 ANALIZA IN OPTIMIZACIJA POSTOPKOV PREDELAVE PREŠNIH MAS ZA KOMUTATORJE / ANALYSIS AND OPTIMISATION OF MANUFACTURING OF PLASTICS FOR COMMUTATORS
Nosilec / *Principal researcher*: dr. Romana Cerc Korošec

Razvojni projekti – subvencije / *Industrial Research and Development*

I/3-106653/2003 Analiza rentgenskih praškovnih difraktogramov / ANALYSIS OF X-RAY POWDER DIFFRACTION PATTERN
/Krka d.d. Novo mesto
Nosilec / *Principal researcher*: prof. dr. Anton Meden/

52/2003 Uporaba rentgenske difrakcije za industrijo cementa / THE USE OF X-RAY DIFFRACTION IN THE INDUSTRY OF CEMENT
/Salonit d.d. Anhovo
Nosilec / *Principal researcher*: prof. dr. Anton Meden/

Mednarodni projekti / *International Projects*

COST D20/0001/00	METAL COMPOUNDS IN THE TREATMENT OF CANCER Nosilec: prof. dr. Nataša Bukovec
LIFE03 ENV/SLO 00055-7	THE SUSTAINABLE REHABILITATION OF THE LANDFILL SITE Nosilec / <i>Principal researcher</i> : prof. dr. Peter Bukovec
COST D20-0006/01	METAL ION COMPLEXES WITH ANTIBACTERIAL QUINOLONES AND ANTIVIRAL NUCLEOTIDE ANALOGUES Nosilec / <i>Principal researcher</i> : prof. dr. I. Turel Sofinancer MŠZŠ, št. 3311-02-837100
SLO-A 30	STRUCTURAL FEATURES OF METAL CARBOXYLATES Nosilec / <i>Principal researcher</i> : prof. dr. Ivan Leban

Druge oblike mednarodnega sodelovanja / *Other Forms of International Cooperation*

TUREL, Iztok. *Interactions of metal ions with selected biologically active compounds* : [University of Sydney, School of Chemistry, Australia, 25.7.2003]. Sydney, 2003, predavanje.

Bibliografija / *References*

1.01 Izvirni znanstveni članek / *Original Scientific Article*

BEVK, David, JAKŠE, Renata, SVETE, Jurij, GOLOBIČ, Amalija, GOLIČ, Ljubo, STANOVNIK, Branko. Transformations of alkyl (5-oxo-1-phenyl-4, 5-dihydro-1H-pyrazol-3-yl)acetates into 5-heteroaryl-3-oxo-2-phenyl-3, 5-dihydro-2H-pyrazolo[4,3-c]pyridine-7-carboxylates. *Heterocycles*, 2003, vol. 61, no. 1, str. 197-223, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25594629]

*BOULLAY, Philippe, MERCURIO, D., BENČAN, Andreja, MEDEN, Anton, DRAŽIČ, Goran, KOSEC, Marija. An XRPD ab-initio structural determination of La₂RuO₅. *J. solid state chem.*, 2003, vol. 170, str. 294-302. [COBISS.SI-ID 17444391]

BRATUŠEK, Urška, MEDEN, Anton, SVETE, Jurij, STANOVNIK, Branko. Transformations of (Z)-2-benzoylamino-4-dimethylamino-2-oxo-3-butene and (E)-3-benzoylamino-4-cyano-2-oxo-3-butene into pyrimidine, pyrazole and isoxazole derivatives. *ARKIVOC*. [Online ed.], 2003, vol. V, str. 77-86, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25090053]

BRATUŠEK, Urška, REČNIK, Simon, SVETE, Jurij, MEDEN, Anton, STANOVNIK, Branko. Transformations of methyl 2-benzoylamino-2-oxo-butanoate. The synthesis of oxazolo[4,5-c]quinoline and 1-substituted 1H-imidazole-4-carboxylate derivatives. *Heterocycles*, 2003, vol. 60, no. 5, str. 1161-1172, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25090565]

CERC KOROŠEC, Romana, BUKOVEC, Peter, PIHLAR, Boris, PADEŽNIK GOMILŠEK, Jana. The role of thermal analysis in optimization of the electrochromic effect of nickel oxide thin films, prepared by the sol-gel method. Part 1. *Thermochim. acta*. [Print ed.], 2003, vol. 402, no. 1/2, str. 57-67, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25105669]

CERC KOROŠEC, Romana, BUKOVEC, Peter, PIHLAR, Boris, ŠURCA VUK, Angela, OREL, Boris, DRAŽIČ, Goran. Preparation and structural investigations of electrochromic nanosized NiO_x films made via the sol-gel route. *Solid state ion.*. [Print ed.], 2003, vol. 165, no. 1/4, str. 191-200. [COBISS.SI-ID 2944794]

*CETINA, Mario, ĐAKOVIĆ, Senka, RAPAČ, Vladimir, GOLOBIČ, Amalija. Ferrocene compounds. 39, 1-Ferrocenylisochromane. *Acta crystallogr., C Cryst. struct. commun.*, 2003, vol. C59, no. 8, str. m328-m330, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25305861]

*CETINA, Mario, JUKIĆ, Marijana, RAPAČIĆ, Vladimir, GOLOBIČ, Amalija. Ferrocene compounds. 38, Dimethyl ferrocene-1,1'-dicarboxylate. *Acta crystallogr., C Cryst. struct. commun.*, 2003, vol. C59, no. 6, str. m212-m214, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25190149]

DREVENŠEK, Petra, LEBAN, Ivan, TUREL, Iztok, GIESTER, Gerald, TILLMANN, Ekkehart. A novel copper(II) complex with 1,10-phenanthroline and ciprofloxacin. *Acta crystallogr., C Cryst. struct. commun.*, 2003, vol. C59, no. 9, str. m376-m378. [COBISS.SI-ID 25310725]

DREVENŠEK, Petra, TUREL, Iztok, POKLAR ULRIH, Nataša. Influence of copper(II) and magnesium(II) ions on the ciprofloxacin binding to DNA. *J. inorg. biochem.* [Print ed.], 2003, vol. 96, str.407-415. [COBISS.SI-ID 2788728]

GENORIO, Boštjan, KOBE, Jože, GIESTER, Gerald, LEBAN, Ivan. Cone and 1, 3-alternate conformers of 1,3-bis(ethoxycarbonylmethoxy)-2, 4-dihydroxycalix[4]arene and 1,2,3,4-tetrakis(ethoxycarbonylmethoxy) calix[4]arene. *Acta crystallogr., C Cryst. struct. commun.*, 2003, vol. C59, str. 221-224. [COBISS.SI-ID 2787866]

GOLOBIČ, Amalija, KLANČAR, Karmen, ŠEGEDIN, Primož. Catena-poly[disodium [[tris(formato-[kappa]O)copper(II)]-[mu]₂-formato-[kappa]²O:O]], with partial substitution of formate by acetate, Na₂[Cu(O₂CH)_{3-x}(O₂CCH₃)_x]_n : (x = 0.28). *Acta crystallographica. E, Structure Reports*, 2003, vol. E59, str. m165-m167, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 24902661]

GRABNER, Sabina, KOŠMRLJ, Janez, BUKOVEC, Nataša, ČEMAŽAR, Maja. Pt(II) complexes with N-(3-pyridyl)-2-(4-(trifluoromethyl)phenyl) diazenecarboxamide and their reactions with glutathione. *J. inorg. biochem.* [Print ed.], 2003, vol. 95, no. 2/3, str. 105-112, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25056261]

HANZLOWSKY, Andrej, JELENČIČ, Blanka, REČNIK, Simon, SVETE, Jurij, GOLOBIČ, Amalija, STANOVNIK, Branko. Regioselective synthesis of ethyl pyrazolecarboxylates from ethyl 3-[(dimethylamino)methylidene]pyruvate and diethyl 3-[(dimethylamino)methylidene]-2-oxosuccinate. Isolation of ethyl 4, 5-dihydro-1-heteroaryl-5-hydroxy-1H-pyrazole-5-carboxylates as stable intermediates in the pyrazole ring formation. *J. heterocycl. chem.*, 2003, vol. 40, no. 3, str. 487-498. [COBISS.SI-ID 25228549]

JEŠELNIK, Marjan, LEBAN, Ivan, POLANC, Slovenko, KOČEVAR, Marijan. D-Gulonolactone as synthon for L-noviose : first preparation of 4-O-demethyl-L-noviofuranose and related derivatives. *Org. lett.*, 2003, vol. 5, no. 15, str. 2651-2653, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25300741]

JUKIĆ, Marijana, CETINA, Mario, VORKAPIĆ-FURAC, Jasna, GOLOBIČ, Amalija, NAGL, Ante. N-(o-chlorophenyl)-2,5-dimethyl-pyrrole-3-carbaldehyde. *Acta crystallogr., C Cryst. struct. commun.*, 2003, vol. C59, no. 7, str. o357-o359, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25190405]

*KOBE, Spomenka, DRAŽIĆ, Goran, MCGUINNESS, Paul J., MEDEN, Anton, SARANTOPOULOU, Evangelia, KOLLIA, Zoe, CEFALAS, Aliviadis-Constantinos. Control over nanocrystalization in turbulent flow in the presence of magnetic fields. *Mater. sci. eng., C, Biomim. mater., sens. syst.* [Print ed.], 2003, vol. 23, str. 811-815. [COBISS.SI-ID 17933351]

*KOZLEVČAR, Bojan, GAMEZ, Patrick, GELDER, René de, DRIESSEN, Willem L., REEDIJK, Jan. Unprecedented change of the Jahn-Teller axis in a centrosymmetric Cu(II) complex induced by lattice water molecules : Crystal and molecular structures of bis[bis(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)acetato]copper(II) and its dihydrate. *European Journal of Inorganic Chemistry*, 2003, no. 1, str. 47-50, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 24798469]

*KRISTL, Matjaž, DROFENIK, Mihael, GOLIČ, Ljubo, GOLOBIČ, Amalija. Synthesis and characterisation of hydroxylammonium fluorochromate = Sinteza in karakterizacija hidroksilamonijevega fluorokromata. *Acta chim. slov.*, 2003, letn. 50, št. 3, str. 431-440, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25335557]

LAH, Nina, KRALJ CIGIĆ, Irena, LEBAN, Ivan. Solvothermal synthesis of a novel mixed valence Cu(I)/Cu(II) complex containing sulphate, malate and 4, 4'-bipyridine, [Cu^I(Cu₂)^{II}(mal)(SO₄)(bpy)₂·2H₂O]_n. Unique binding mode

- of the malate anion. *Inorg. chem. commun.* [Print ed.], 2003, vol. 6, no. 1, str. 1441-1444, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25391621]
- *LAH, Nina, LAH, Jurij, ZEGERS, Ingrid, WYNS, Lode, MESSENS, Joris. Specific potassium binding stabilizes pI258 arsenate reductase from *Staphylococcus aureus*. *J Biol Chem*, 2003, vol. 278, no. 27, str. 24673-24679. [COBISS.SI-ID 25296645]
- LAH, Nina, LEBAN, Ivan. 4-Aminopyridinium hydrogen maleate. *Acta crystallogr., C Cryst. struct. commun.*, 2003, vol. C59, no. 9, str. o537-0538, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25391365]
- MODEC Barbara, BRENČIČ Jurij V. in ZUBIETA Jon: The solvatothermal synthesis and the crystal structure of polymeric *N*-methylpyridinium octamolybdate(VI), (Me-NC₅H₅)_{4n}[Mo₈O₂₆]_n. *Inorg. Chem. Commun.* **6** (2003) 506–512. [COBISS.SI-ID 25191173]
- MODEC Barbara, BRENČIČ Jurij V., BURKHOLDER E. M. in ZUBIETA Jon, Novel Molybdenum(V) Squarate Complexes Based on the Dinuclear Metal-Metal Bonded Unit: Syntheses and Structural Characterization of Dinuclear [Mo₂O₄(C₄O₄)(R-Py)₄] (R-Py = pyridine) and Tetranuclear [Mo₄O₈(C₄O₄)₄]⁴⁻. *Dalton Trans.*, 2003, 4618–4625.
- *NIKIFOROV, Grigori B., ROESKY, Herbert W., MAGULL, Jörg, NOLTEMEYER, Mathias, SCHMIDT, Hans-Georg, ILYIN, Evgeny G., KOKUNOV, Yuri B., DEMŠAR, Alojz. Synthesis and structure of the first non-metallocene Ti[sup](III) fluoride complex LTiF[sub]2[times]2Me[sub]3SnCl supported by a β-diketiminato ligand. *European Journal of Inorganic Chemistry*, 2003, no. 3, str. 437-441, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 24796421]
- PEVEC, Andrej, MRAK, Maja, DEMŠAR, Alojz, PETRIČEK, Saša, ROESKY, Herbert W. Coordination number 12 in praseodymium and 11 in neodymium complexes with organofluorotitanate ligands. *Polyhedron*. [Print ed.], 2003, vol. 22, no. 4, str. 575-579. [COBISS.SI-ID 24796677]
- PEVEC, Andrej, PERDIH, Franc, KOŠMRLJ, Janez, MODEC, Barbara, ROESKY, Herbert W., DEMŠAR, Alojz Lithium complexes with a [Cp*₂Ti₂F₇] ligand: ¹⁹F NMR probe for lithium solvation. *Journal of the Chemical Society, Dalton Transactions*, 2003, no. 3, str. 420-425. [COBISS.SI-ID 24796933]
- PEVEC, Andrej. Crystal structures of (⁵-C₅Me₅)TiCl₃ and (⁵-C₅Me₄H)TiCl₃. *Acta chim. slov.*, 2003, letn. 50, št. 2, str. 199-206, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25192709]
- *RAJIĆ, Nevenka, ZABUKOVEC LOGAR, Nataša, GOLOBIČ, Amalija, KAUČIČ, Venčeslav. Synthesis and structure determination of a chain-like aluminophosphate obtained with 1,2-diaminopropane as the structure-directing agent. *J. phys. chem. solids*. [Print ed.], 2003, vol. 64, no. 7, str. 1097-1103. [COBISS.SI-ID 2814234]
- ŠALA, Martin, JAKŠE, Renata, SVETE, Jurij, GOLOBIČ, Amalija, GOLIČ, Ljubo, STANOVNIK, Branko. Synthesis of 3-([alpha]- and [beta]-D-arabinofuranosyl)-6-chloro-1,2,4-triazolo[4,3-b]pyridazine. *Carbohydr. res.* [Print ed.], 2003, vol. 338, no. 20, str. 2057-2066, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25366533]
- ŠTEFANIĆ, Zoran, KOJIĆ-PRODIĆ, Biserka, DŽOLIĆ, Zoran, KATALENIĆ, Darinka, ŽINIĆ, Mladen, MEDEN, Anton. Hydrogen bonding in N, N'-bis[(1S)-2-azido-1-(2-methylpropyl)ethyl]oxalamide : twofold symmetry of (R[sub]2)[sup]2(10) hydrogen-bonded dimers connected into an [alpha]-network. *Acta crystallogr., C Cryst. struct. commun.*, 2003, vol. C59, no. 6, str. o286-o288, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 24997893]
- *TOPLAK, Renata, LAH, Nina, VOLMAJER, Julija, LEBAN, Ivan, MAJCEN LE MARECHAL, Alenka. 2-Aminothiazole and 2-aminothiazolinone derivatives. *Acta crystallogr., C Cryst. struct. commun.*, 2003, c59, str. o502-o505. [COBISS.SI-ID 8129302]
- TUREL, Iztok, GOLOBIČ, Amalija, KLAUVŽAR, Aleš, PIHLAR, Boris, BUGLYÓ, Péter, TOLIS, Evangelos, REHDER, Dieter, SEPČIĆ, Kristina. Interactions of oxovanadium(IV) and the quinolone family member - ciprofloxacin. *J. inorg. biochem.* [Print ed.], 2003, letn. 95, str. 199-207. [COBISS.SI-ID 16256729]
- TUREL, Iztok, GOLOBIČ, Amalija. Crystal structure of ciprofloxacin hydrochloride 1.34-hydrate. *Anal. sci.*, 2003, vol. 19, str. 329-330, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25305349]

VILFAN, Igor D., DREVENŠEK, Petra, TUREL, Iztok, POKLAR ULRIH, Nataša. Characterization of ciprofloxacin binding to the linear single- and double-stranded DNA. *Biochim. biophys. acta N, Gene struct. expr.* [Print ed.], 2003, vol. 1628, str. 111-122. [COBISS.SI-ID 2788984]

*VREČER, Franc, VRBINC, Miha, MEDEN, Anton. Characterization of piroxicam crystal modifications. *Int. j. pharm.* [Print ed.], 2003, vol. 256, no. 1-2, str. 3-15. [COBISS.SI-ID 1276017]

1.04 Strokovni članek / Professional Article

BUKOVEC, Nataša. Molska prostornina in normalni pogoji. *Kem. šoli*, marec 2003, let. 15, št. 1, str. 8-9, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 24981253]

CERC KOROŠEC, Romana, BUKOVEC, Peter. Termična analiza tankih plasti. 2. del = Thermal analysis of thin films. Part 2. *Vakuumist*, 2003, let. 23, št. 1, str. 4-9. [COBISS.SI-ID 17580071]

CERC KOROŠEC, Romana, BUKOVEC, Peter. Thermogravimetric investigation of the formation electrochromic layers of nickel oxide. *User Com*, 2003, vol. 17, no. 1, str. 17-18, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25200901]

MEDEN, Anton. Rentgenski praškovni difraktogram – prstni odtis trdne snovi. *Kem. šoli*, december 2003, letn. 15, št. 4, str. 2-10 [čaka na vnos v COBISS]

TRATAR-PIRC, Elizabeta. Hialuronska kislina. *Kem. šoli*, marec 2003, let. 15, št. 1, str. 16-23, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 24981509]

2.03 Univerzitetni ali visokošolski učbenik z recenzijo / Reviewed University and Academic Textbook

BUKOVEC, Nataša, BULC, Nada, ČEH, Boris, DEMŠAR, Alojz, GOLOBIČ, Amalija, LEBAN, Ivan, MODEC, Barbara, ŠEGEDIN, Primož. *Vaje iz anorganske kemije, Zbirka nalog*. 5. dopolnjena izd. Ljubljana: Katedra za anorgansko kemijo, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2003. 193 str. ISBN 961-6286-52-8. [COBISS.SI-ID 125480192]

ČEH, Boris. *Kemijsko računanje in osnove kemijskega ravnotežja*. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2003. V, 198 str., ilustr., tabele. ISBN 961-6286-51-X. [COBISS.SI-ID 124744704]

2.04 Srednješolski, osnovnošolski ali drugi učbenik z recenzijo / Reviewed Secondary and Primary School Textbook or Other Textbook

BUKOVEC, Nataša, DOLENC, Darko, ŠKET, Boris. *Kemija za gimnazije 2, Učbenik*. 1. izd. Ljubljana: DZS, 2003. 272 str., ilustr. ISBN 86-341-2803-2. [COBISS.SI-ID 122529792]

BUKOVEC, Nataša, DOLENC, Darko, ŠKET, Boris. *Kemija za gimnazije 2, Priročnik za učitelje*. 1. izd. Ljubljana: DZS, 2003. 131 str., ilustr. ISBN 86-341-3064-9. [COBISS.SI-ID 123114752]

2.05 Drugo učno gradivo / Other Educational Material

KOZLEVČAR, Bojan, ZUPANČIČ, Marija. *Vaje kemija kompleksov : študijsko gradivo 2003/2004*. Ljubljana: Univerza v Ljubljani, fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2003. 14 str., graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25546757]

2.12 Končno poročilo o rezultatih raziskav / Final Research Report

CERC KOROŠEC, Romana, BUKOVEC, Peter, ŽUPANC MEŽNAR, Lea. *Poročilo o IR, in TG analizi vzorcev zmesi prešnih mas in o IR analizi kolektorjev ter žarin prešnih mas : [poročilo za Kolektor d.o.o. v okviru projekta L2-3183, Ljubljana, 24. junij 2002]*. Ljubljana: Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2002. 1 zv. (loč. pag.), graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 24795141]

CERC KOROŠEC, Romana, BUKOVEC, Peter, ŽUPANC MEŽNAR, Lea. *Poročilo o IR, TG in DSC analizi vzorcev zmesi prešne mase in hekse : [poročilo za Kolektor d.o.o. v okviru projekta L2-3183, Ljubljana, 20. junij 2002]*. Ljubljana: Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2002. 1 zv. (loč. pag.), graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 24794885]

CERC KOROŠEC, Romana, BUKOVEC, Peter, ŽUPANC MEŽNAR, Lea. *Poročilo o TG in DSC analizi nestaranih in staranih epoksidnih smol z različno sestavo zamreževala : [poročilo za Kolektor d.o.o. v okviru projekta L2-3183, Ljubljana, 19. april 2002]*. Ljubljana: Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2002. 1 zv. (loč. pag.), graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 24794629]

KATEDRA ZA ORGANSKO KEMIJO
CHAIR OF ORGANIC CHEMISTRY

Predstojnik katedre / *Head*: **prof. dr. Boris Šket**

Sodelavci katedre
Employees

Učitelji / *Faculty*

prof. dr. Marijan Kočevar
doc. dr. Janez Košmrlj
prof. dr. Božo Plesničar
prof. dr. Andrej Petrič
prof. dr. Slovenko Polanc
prof. dr. Branko Stanovnik
prof. dr. Boris Šket
prof. dr. Bojan Verček
prof. dr. Marko Zupan

Asistenti / *Assistants*

doc. dr. Janez Cerkovnik
doc. dr. Darko Dolenc
dr. Marjan Jereb
doc. dr. Franci Kovač
dr. Berta Košmrlj
dr. Franc Požgan
prof. dr. Jurij Svete
dr. Bogdan Štefane

Tehniki / *Technicians*

Zdenka Kadunc
Tončka Kozamernik
Branka Miklavčič
Irena Povalej
Zdenka Sakešsek
Tatjana Stipanovič

	<i>Mentor / Advisor</i>	<i>Čas usposabljanja / Programme duration</i>	<i>Oblika usposabljanja / Degree</i>
David Bevk	Stanovnik	4 leta	doktorski študij / PhD
Uroš Grošelj	Svete	4 leta	doktorski študij / PhD
Maja Harej	Darko Dolenc	4,5 let	doktorski študij / PhD
Samo Pirc	Branko Stanovnik	4 leta	doktorski študij / PhD
Igor Pravst	Marko Zupan	4,5 let	doktorski študij / PhD
Sergeja Bombek	Slovenko Polanc	4 leta	doktorski študij / PhD

Raziskovalna oprema / *Research Equipment*

Plinski kromatografi
GC/MS
HPLC
Ozonator
IR spektrofotometer
UV spektrofotometer
Elementna CHN mikroanaliza

Mednarodni projekti / *International Projects*

SLO-US-2001/34 Sinteza in karakterizacija novih prob za raziskave Alzheimerjeve bolezni
Nosilec / *Principal Researcher*: prof. dr. Andrej Petrič

BI-CZ/03-04-5 Syntheses and reactions of quinolinone derivatives
Nosilec / *Principal Researcher*: doc. dr. Janez Košmrlj

BI-HR/01-03-002 Diazeni kot potencialni citostatiki
Nosilec / *Principal Researcher*: prof. dr. Slovenko Polanc

D24/0007/02 Synthesis and application of new ligands for asymmetric heterogeneous
Catalysis
Nosilec / *Principal Researcher*: prof. dr. Marijan Kočevar

BI-GR/02-05-003 Transformations of 3-dimethylamino-propenoates. The Synthesis of
(4215) plysinopsins, β -carboline, pyrrolodiazepines and other heterocyclic systems,
analogous of naturally occurring compounds.
Nosilec / *Principal Researcher*: prof. dr. Branko Stanovnik

BI-IT/02-05-006 (6K) Cycloadditions of 1,2-Diaza-1,3-butadienes to 2-Substituted 3-
Dimethylaminopropenoates and Related Compounds.
Nosilec / *Principal Researcher*: prof. dr. Branko Stanovnik

Druge oblike mednarodnega sodelovanja / *Other Forms of International Cooperation*

SOCRATES PROGRAMME ERASMUS 3 MedNatNet – Medical Natural Sciences Network;
Coordinator: Willem H. Mager, Amsterdam. Network among 35 universities in Europe. Coordinator for
University of Ljubljana: Prof. Dr. B. Stanovnik

BARLOCCO, Daniela (University of Milan, Milano, Italija): Novel Selective α_1 Adrenoceptor
Antagonists. (16. 6. 2003)

CIRRINCIONE Girolamo (Dipartimento Farmacochimico Tossicologico e Biologico, Università degli
Studi di Palermo, Italia): Pyrrolo- and Indolo-Fused Heterocycles with Antitumor Activity. (6. 10. 2003)

DAL PIAZ Vittorio (Dipartimento de Scienze Farmaceutiche, Università di Firenze, Italia): Isoxazoles as
Versatile Precursors to different Classes of Pharmacologically Active Compounds Based on the 3(2H)-
Pyridazinone Scaffold. (6. 5. 2003).

FLORIO Saverio (Dipartimento Farmaco-Chimico, Facoltà di Farmacia, Università di Bari, Italia):
Oxyranil Anions in Organic Synthesis. (22. 10. 2003).

HAIDER Norbert (Institute of Pharmaceutical Chemistry, University of Vienna, Vienna, Austria):
Cycloaddition Routes to Condensed Carbazoles. (16. 5. 2003)

STARÁ, Irena (Academy of Sciences of the Czech Republic, Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Praga, Češka): Stereoselective Synthesis of Helicenes. (19. 6. 2003)

STARÝ, Ivo (Academy of Sciences of the Czech Republic, Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Praga, Češka): Molecular Screws – From Alkynes to Helicenes. (19. 6. 2003)

ŠIMÁNEK Vilím (Institute of Medical Chemistry and Biochemistry, Palacký University, Olomouc, Czech Republic): Sanguinarine and Chelerythrine: Chemical Behaviour and Biological Activities. (12. 11. 2003)

ŠUNJIĆ, Vitomir (Inštitut Ruđer Bošković, Zagreb, Hrvatska): Stereoselective reactions Monitored by Circular Dichroism (CD) Spectroscopy. (4. 6. 2003)

QUÉGUINER Guy (Institut de Recherche en Chimie Organique Fine, Faculté de Sciences et des Techniques, Université de Rouen, France): Synthesis of New Organometallics of Azines. (15. 4. 2003).

POLANC, Slovenko. *Chemistry and biological potential of some nitrogen-containing compounds : [Faculty of Pharmacy, Charles University, Hradec Kralove, Czech Republic, October 6, 2003]*. Hradec Kralove, 2003.

POLANC, Slovenko. *Diazenecarboxamides and similar compounds: various aspects of their applications : [Department of Organic Chemistry, Faculty of Science, Palacky University, Olomouc, Czech Republic, October 8, 2003]*. Olomouc, 2003.

POLANC, Slovenko. *New synthetic applications of diazenes and similar compounds : [Department of Chemistry, University of Toronto, Toronto, Ontario, Canada, August 19, 2003]*. Toronto, 2003.

POLANC, Slovenko. *Recent adventures in the chemistry of nitrogen-containing reagents : [Faculty of Technology, Tomas Bata University, Zlin, Czech Republic, October 9, 2003]*. Zlin, 2003.

POLANC, Slovenko. *Selective transformations employing diazenes and triazenes : [Department of Chemistry, York University, Toronto, Ontario, Canada, August 21, 2003]*. Toronto, 2003.

STANOVNIK, Branko. *[beta]-Dimethylamino-[alpha], [beta]-didehydro-[alpha]-amino acids derivatives in the synthesis of heterocyclic systems : [Universita di Milano, Istituto di Chimica Farmaceutica e Tossicologica, 2003]*. Milano, 6. junija, 2003.

SVETE, Jurij. *Synthetic Applications of Ex-Chiral Pool Enaminones and Related Compounds: University of Trieste, Department of Chemical Sciences*. Trst, 13. november, 2003.

Bibliografija / References

1.01 Izvirni znanstveni članek / Original Scientific Article

AGDEPPA, Eric D., KEPE, Vladimir, LIU, Jie, SMALL, Gary W., HUANG, Sung-Cheng, PETRIČ, Andrej, SATYAMURTHY, Nagichettiar, BARRIO, Jorge R. 2-Dialkylamino-6-acylmalononitrile substituted naphthalenes (DDNP analogs) : novel diagnostic and therapeutic tools in Alzheimer`s disease. *Molecular Imaging & Biology*. [Online ed.], 2003, vol. 5, no. 6, str. 404-417.

AGDEPPA, E. D., KEPE, Vladimir, PETRIČ, Andrej, SATYAMURTHY, N., LIU, J., HUANG, S. C., SMALL, G. W., COLE, G. M., BARRIO, J. R. In vitro detection of (S)-naproxen and ibuprofen binding to plaques in the Alzheimer`s brain using the positron emission tomography molecular imaging probe 2-(1-{6-[(2-[[sup](18)F]fluoroethyl)(methyl)amino]-2-naphthyl}ethylidene) malononitrile. *Neuroscience*. [Print ed.], 2003, vol. 117, no. 3, str. 723-730.

ATTANASI, Orazio A., FAVI, G., FILIPPONE, P., STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. Simple and convenient preparation of new highly protected aziridines fused with pyrroline rings. *Synlett*, 2003, no. 7, str. 995-996.

BEVK, David, JAKŠE, Renata, SVETE, Jurij, GOLOBIČ, Amalija, GOLIČ, Ljubo, STANOVNIK, Branko. Transformations of alkyl (5-oxo-1-phenyl-4, 5-dihydro-1H-pyrazol-3-yl)acetates into 5-

- heteroaryl-3-oxo-2-phenyl-3, 5-dihydro-2H-pyrazolo[4,3-c]pyridine-7-carboxylates. *Heterocycles*, 2003, vol. 61, no. 1, str. 197-223.
- BRATUŠEK, Urška, MEDEN, Anton, SVETE, Jurij, STANOVNIK, Branko. Transformations of (Z)-2-benzoylamino-4-dimethylamino-2-oxo-3-butene and (E)-3-benzoylamino-4-cyano-2-oxo-3-butene into pyrimidine, pyrazole and isoxazole derivatives. *ARKIVOC*. [Online ed.], 2003, vol. V, str. 77-86.
- BRATUŠEK, Urška, REČNIK, Simon, SVETE, Jurij, MEDEN, Anton, STANOVNIK, Branko. Transformations of methyl 2-benzoylamino-2-oxo-butanoate. The synthesis of oxazolo[4,5-c]quinoline and 1-substituted 1H-imidazole-4-carboxylate derivatives. *Heterocycles*, 2003, vol. 60, no. 5, str. 1161-1172.
- BRESJANAC, Maja, ŠMID, Alojz, VOVKO, Tomaž D., PETRIČ, Andrej, BARRIO, Jorge R., POPOVIĆ, Mara. Molecular-imaging probe 2-(1-{6-[(2-fluoroethyl)(methyl)amino]-2-naphthyl}ethylidene) malononitrile labels prion plaques in vitro. *J. Neurosci*, 2003, vol. 23, no. 22, str. 8029-8033.
- ČASAR, Zdenko, MAJCEN-LE MARECHAL, Alenka, LORCY, Dominique, A novel approach substituted 1,3-selenazole core as a precursor of electron rich olefins: diselenadiazafulvalene and azino-diselenadiazafulvalene. *New J. Chem.*, 2003, vol. 27, 1622-1626.
- ČIMBORA, Tamara, BOMBEEK, Sergeja, POLANC, Slovenko, OSMAK, Maja. Methyl 2-(2-chloroethylaminocarbonyl)diazenecarboxylate SB-166 inhibits the growth of different tumour cell lines, including drug-resistant sublines. *Toxicol. in Vitro*, 2003, vol. 17, no. 2, str. 159-164.
- DOLENC, Darko. Iodination of enol acetates and 1,3-diones using N-iodosaccharin. *Synth. Commun.*, 2003, vol. 33, no. 16, str. 2917-2924.
- ERŽEN, Evgen, CERKOVNIK, Janez, PLESNIČAR, Božo. Endo/exo isomerism in norcarane and 2-norcaranol hydrotrioxides (ROOOH). *J. Org. Chem.*, 2003, vol. 68, no. 23, str. 9129-9131.
- GRABNER, Sabina, KOŠMRLJ, Janez, BUKOVEC, Nataša, ČEMAŽAR, Maja. Pt(II) complexes with N-(3-pyridyl)-2-(4-(trifluoromethyl)phenyl)diazenecarboxamide and their reactions with glutathione. *J. Inorg. Biochem.* [Print ed.], 2003, vol. 95, no. 2/3, str. 105-112.
- HANZLOWSKY, Andrej, JELENČIČ, Blanka, REČNIK, Simon, SVETE, Jurij, GOLOBIČ, Amalija, STANOVNIK, Branko. Regioselective synthesis of ethyl pyrazolecarboxylates from ethyl 3-[(dimethylamino)methylidene]pyruvate and diethyl 3-[(dimethylamino)methylidene]-2-oxosuccinate. Isolation of ethyl 4, 5-dihydro-1-heteroaryl-5-hydroxy-1H-pyrazole-5-carboxylates as stable intermediates in the pyrazole ring formation. *J. Heterocycl. Chem.*, 2003, vol. 40, no. 3, str. 487-498.
- HODGSON, David M., STENT, Matthew A. H., ŠTEFANE, Bogdan, WILSON, Francis X. Enantioselective alkylative double ring-opening of epoxides derived from cyclic allylic ethers : synthesis of enantioenriched unsaturated diols. *Organic and Biomolecular Chemistry*. [Print ed.], 2003, vol. 1, no. 7, str. 1139-1150.
- ISKRA, Jernej, STAVBER, Stojan, ZUPAN, Marko. Use of a fluorous bridge for diffusion controlled uptake of molecular chlorine in chlorine addition to alkenes. *Chem. commun. (Lond., 1996)*, str. 2496-2497.
- ISKRA, Jernej, ZUPAN, Marko, STAVBER, Stojan. The role of geometry on regioselectivity and rate of fluorination of fluorene and diphenylmethane with SelectfluorTM F-TEDA-BF₄. *Organic and Biomolecular Chemistry*, 2003, vol. 1, str. 1528-1531.
- JEREB, Marjan, STAVBER, Stojan, ZUPAN, Marko. Direct [alpha]-iodination of aryl alkyl ketones by elemental iodine activated by 1-chloromethyl-4-fluoro-1,4-diazoniabicyclo[2.2.2]octane bis(tetrafluoroborate). *Synthesis (Stuttg.)*, 2003, no. 6, str. 853-858.
- JEREB, Marjan, STAVBER, Stojan, ZUPAN, Marko. Direct iodination of indanone and tetralone derivatives by elemental iodine activated by SelectfluorTM F-TEDA-BF₄. *Tetrahedron*, 2003, vol. 59, str. 5935-5940.
- JEŠELNIK, Marjan, LEBAN, Ivan, POLANC, Slovenko, KOČEVAR, Marijan. D-Gulonolactone as synthon for L-noviose : first preparation of 4-O-demethyl-L-noviofuranose and related derivatives. *Org. Lett.*, 2003, vol. 5, no. 15, str. 2651-2653.

- KLÁSEK, Antonín, KOŘISTEK, Kamil, KAFKA, Stanislav, KOŠMRLJ, Janez. Thermal rearrangement of 3-hydroxy-1H,3H-quinoline-2,4-diones to 3-acyloxy-2, 3-dihydro-1H-indol-2-ones. *Heterocycles*, 2003, vol. 60, no. 8, str. 1811-1820.
- KOŠMRLJ, Janez, WEIGEL, Leland O., EVANS, David A., DOWNEY, Wade C., WU, Jimmy. Unfunctionalized, [alpha]-epimerizable nonracemic ketones and aldehydes can be accessed by crystallization-induced dynamic resolution of imines. *J. Am. Chem. Soc.*, 2003, vol. 125, no. 11, str. 3208-3209.
- KRANJC, Krištof, POLANC, Slovenko, KOČEVAR, Marijan. Diels-Alder reactions of fused pyran-2-ones with maleimides : efficient syntheses of benz[e]isoindoles and related systems. *Org. Lett.*, 2003, vol. 5, no. 16, str. 2833-2836.
- PEVEC, Andrej, PERDIH, Franc, KOŠMRLJ, Janez, MODEC, Barbara, ROESKY, Herbert W., DEMŠAR, Alojz. Lithium complexes with a [Cp^{sup}]₂Ti₂F₇^{sup}- ligand: ⁽¹⁹⁾F NMR probe for lithium solvation. *J. Chem. Soc., Dalton Transactions*, 2003, no. 3, str. 420-425.
- PIRC, Samo, BEVK, David, GOLIČ-GRDADOLNIK, Simona, SVETE, Jurij. Parallel solution phase synthesis of benzyl (3*S*,4*E*)-4-[(arylamino)methylidene]-5-oxotetrahydrofuran-3-ylcarbamates. *ARKIVOC*: 2003 (Part xiv), 37-48.
- PLESNIČAR, Božo, TUTTLE, Tell, CERKOVNIK, Janez, KOLLER, Jože, CREMER, Dieter. Mechanism of formation of hydrogen trioxide (HOOH) in the ozonation of 1,2-diphenylhydrazine and 1,2-dimethylhydrazine : an experimental and theoretical investigation. *J. Am. Chem. Soc.*, 2003, vol. 125, no. 38, str. 11553-11564.
- POŽGAN, Franc, POLANC, Slovenko, KOČEVAR, Marijan. Ammonium cerium(IV) nitrate as an efficient oxidizing agent for fused 1,4-dihydropyridazine derivatives and hydrazides. *Synthesis*, 2003, no. 15, str. 2349-2352.
- SELIČ, Lovro, GOLIČ GRDADOLNIK, Simona, STANOVNIK, Branko. Hydrolysis of N, N-dimethylenamines. Stereospecific synthesis of their enol and enol ester derivatives. *Heterocycles*, 2003, vol. 60, no. 6, str. 1317-1328.
- ŠALA, Martin, JAKŠE, Renata, SVETE, Jurij, GOLOBIČ, Amalija, GOLIČ, Ljubo, STANOVNIK, Branko. Synthesis of 3-([alpha]- and [beta]-D-arabinofuranosyl)-6-chloro-1,2,4-triazolo[4,3-b]pyridazine. *Carbohydr. Res.* [Print ed.], 2003, vol. 338, no. 20, str. 2057-2066.
- ŠKET, Boris, KOŠMRLJ, Berta, HAREJ, Maja, DOLENC, Darko. Photolysis of 10, 10-difluorophenanthren-9(10H)-one. Evidence for solvent-assisted [alpha]-cleavage. *Tetrahedron Lett.*, 2003, vol. 44, no. 22, str. 4247-4250.
- TREBŠE, Polonca, POLANC, Slovenko, KOČEVAR, Marijan. A direct conversion of 5,6,7,8-tetrahydro-2H-1-benzopyran-2,5-diones into substituted 1-amino-5,6,7, 8-tetrahydroquinoline-2,5-diones. *Heterocycles*, 2003, vol. 59, no. 1, str. 129-136.
- VRANIČAR, Lidija, POLANC, Slovenko, KOČEVAR, Marijan. Transformations of N-(5-Acetyl-6-methyl-2-oxo-2H-pyran-2-yl)benzamide with hydrazines in the presence of an acid catalyst. *Heterocycles*, 2003, vol. 61, str. 105-112.
- VRANIČAR, Lidija, POŽGAN, Franc, POLANC, Slovenko, KOČEVAR, Marijan. Synthesis and transformations of a pyrazole containing [alpha], [beta]-didehydro-[alpha]-amino acid derivatives. *Amino Acids*, 2003, vol. 24, no. 3, str. 273-280.
- WU, Anan, CREMER, Dieter, PLESNIČAR, Božo. The role of the HOOO^{sup}- anion in the ozonation of alcohols: large differences in the gas-phase and in the solution-phase mechanism. *J. Am. Chem. Soc.*, 2003, vol. 125, no. 31, str. 9395-9402.
- ZAJC, Barbara, GRAHEK, Rok, KOCIJAN, Andrej, LAKSHMAN, Mahesh K., KOŠMRLJ, Janez, LAH, Jurij. Evaluation of the enantiomeric resolution of 7, 8-dihydroxy-7,8-dihydrobenzo[a]- pyrene and its 6-fluoro and 6-bromo derivatives on polysaccharide-derived stationary phases. *J. Org. Chem.*, 2003, vol. 68, no. 8, str. 3291-3294.

2.04 Srednješolski, osnovnošolski ali drugi učbenik z recenzijo / *Reviewed Secondary and Primary School Textbook or Other Textbook*

DOLENC, Darko, GRAUNAR, Mojca, MODEC, Barbara. *Kemija danes 2, Delovni zvezek za 9. razred devetletne osnovne šole*, (Raziskovalec 9). 1. izd. Ljubljana: DZS, 2003. 91 str., ilustr. ISBN 86-341-3061-4.

2.05 Drugo učno gradivo / *Other Educational Material*

PETRIČ, Andrej. *Spektroskopske metode v organski kemiji : (podiplomski študij kemije) : [interno študijsko gradivo]*. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za organsko kemijo, 2003. 109 f.

KATEDRA ZA ANALIZNO KEMIJO
CHAIR OF ANALYTICAL CHEMISTRY

Predstojnik katedre / *Head*: **izr. prof. dr. Lucija Zupančič-Kralj**

Sodelavci katedre
Employees

Učitelji / *Faculty*

prof. dr. Boris Pihlar
prof. dr. Marjan Veber
izr. prof. dr. Lucija Zupančič-Kralj
doc. dr. Nataša Gros

Asistenti / *Assistants*

doc. dr. Matija Strlič
dr. Robert Susič
dr. Tatjana Zupančič
dr. Matevž Pompe
dr. Helena Prosen
dr. Irena Kralj Cigić
Polonca Kralj Razpotnik
mag. Ivanka Keber

Tehniki / *Technicians*

Zdenka Držaj
Jolanda Furlan
Mojca Žitko

Mladi raziskovalci / *Young researchers*

	<i>Mentor / Advisor</i>	<i>Čas usposabljanja / Programme duration</i>	<i>Oblika usposabljanja / Degree</i>
Nataša Kovačič	Lucija Zupančič-Kralj	2000-2005	doktorski študij / PhD
Vid Simon Šelih	Boris Pihlar	2003-2007	doktorski študij / PhD
Kočar Drago	Matija Strlič	2003-2007	doktorski študij / PhD
Polonca Razpotnik	Marjan Veber	1999-2003	doktorski študij / PhD

Raziskovalna oprema / *Research Equipment*

Sklopljeni instrument plinski kromatograf-masni spektrometer Hewlett-Packard mod. 5989 A / GC-MS
Sklopljeni instrument plinski kromatograf- masni spektrometer Varian mod. Saturn 2000 / GC-MS
Robotski sistem Zymark Prelude / System Zymark Prelude
Kemiluminometer/Chemiluminometer
Pretočni analizni sistem za viskozimetrijo/Flow analysis system for viscometry
Potenciostat/Galvanostat M283, M273, EG&G PARC
HPLC- sistem (Hewlett Packard) 1100 Series
FAAS-ETAAS Perkin Elmer
ICP-MS
Ionski kromatografi-Dionex LC20/ Ion chromatograph
Avtotitator Metrohm, Tinet/Autotitrator
Kapilarna elektroforeza-Applied Biosystems, 270A-HT/Capillary electrophoresis

Aplikativni projekti / *Applied Research*

L2-3195 Razvoj tehničnega prototipa laserskega sistema za restavriranje papirja /
Development of the prototype of laser system for paper restoration
Nosilec / *Principal researcher*: doc. dr. Matija Strlič

L1-5237 Mikroanalitske metode za določanje pH papirja / Microanalytical methods for
paper pH determination
Nosilec / *Principal researcher*: doc. dr. Matija Strlič

CRP Fiziološki in kakovostni mejniki integrirane pridelave grozdja / Physiological
and qualitative aspects of grape production
Nosilec / *Principal researcher*: doc. dr. Matija Strlič

Mednarodni projekti / *International Projects*

PAPYLUM Chemiluminescence-a novel tool in paper conservation studies
EVK4-2000-00038 Nosilec / *Principal researcher*: prof. dr. Boris Pihlar
InkCor Stabilisation of iron gall ink containing paper
EVK4-2001-00049 Nosilec / *Principal researcher*: doc. dr. Matija Strlič
MIP Metals in paper
EVK4-2002-02001 Nosilec / *Principal researcher*: doc. dr. Matija Strlič
Eureka 2542 Relast Laser renovation of monuments and art works
Nosilec / *Principal researcher*: doc. dr. Matija Strlič
COST G7 Artwork conservation by a laser
Nosilec / *Principal researcher*: doc. dr. Matija Strlič
Culture 2000 Wall&Paper Schönbrunn
Nosilec / *Principal researcher*: doc. dr. Matija Strlič
SLO-POL 9/03 Laser renovation and Diagnosis of Artworks
Nosilec / *Principal researcher*: doc. dr. Matija Strlič
SI/03/B/F/PP-176012 Hands-on Approach to Analytical Chemistry for Vocational Schools
Nosilec / *Principal researcher*: doc. dr. Nataša Gros

Druge oblike mednarodnega sodelovanja / *Other Forms of International Cooperation***Predavanja na tuji univerzi / *Lecture at Foreign University***

KOLAR, Jana, STRLIČ, Matija. *Stabilization of iron gall ink corrosion : Topics in Preservation Science : [Library of Congress, November 21, Washington, USA]*. Washington, 2003. [COBISS.SI-ID 25459717]

STRLIČ, Matija, KOLAR, Jana. *Laser cleaning of paper : Topics in Preservation Science : [Library of Congress, November 21, Washington, USA]*. Washington, 2003. [COBISS.SI-ID 25460229]

Bibliografija / *References***1.01 Izvirni znanstveni članek / *Original Scientific Article***

BAVCON, Mojca, TREBŠE, Polonca, ZUPANČIČ-KRALJ, Lucija. Investigations of the determination and transformations of diazinon and malathion under environmental conditions using gas chromatography coupled with a flame ionisation detector. *Chemosphere (Oxford)*. [Print ed.], 2003, vol. 50, no. 5, str. 595-601. [COBISS.SI-ID 232699] JCR IF (2002): 1.461; SE, x: 1.062 (34/132), environmental sciences

CERC KOROŠEC, Romana, BUKOVEC, Peter, PIHLAR, Boris, PADEŽNIK GOMILŠEK, Jana. The role of thermal analysis in optimization of the electrochromic effect of nickel oxide thin films, prepared by the sol-gel method. Part 1. *Thermochim. acta*. [Print ed.], 2003, vol. 402, no. 1/2, str. 57-67, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25105669] JCR IF (2002): 0.974; SE, x: 1.5 (44/68), chemistry, analytical, x: 2.066 (66/95), chemistry, physical

CERC KOROŠEC, Romana, BUKOVEC, Peter, PIHLAR, Boris, ŠURCA VUK, Angela, OREL, Boris, DRAŽIČ, Goran. Preparation and structural investigations of electrochromic nanosized NiO_x films made via the sol-gel route. *Solid state ion.*. [Print ed.], 2003, vol. 165, no. 1/4, str. 191-200. [COBISS.SI-ID 2944794] JCR IF (2002): 1.768; SE, x: 2.066 (35/95), chemistry, physical, x: 1.524 (10/56), physics, condensed matter

GROS, Nataša. The comparison between Slovene and Central European mineral and thermal waters = Primerjava slovenskih in srednje evropskih mineralnih ter termalnih vod. *Acta chim. slov.*, 2003, letn. 50, št. 1, str. 57-66, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 24912133] JCR IF (2002): 0.538; SE, x: 1.557 (75/119), chemistry, multidisciplinary

HUMAR, Miha, POHLEVEN, Franci, ŠENTJURC, Marjeta, VEBER, Marjan, RAZPOTNIK, Polonca, POGNI, Rebecca, PETRIČ, Marko. Performance of waterborne Cu(II) octanoate/ethanolamine wood preservatives. *Holzforschung*, 2003, vol. 57, no. 2, str. 127-134. [COBISS.SI-ID 913033] JCR IF (2002): 0.816; SE, x: 0.767 (11/28), forestry, x: 0.409 (2/18), materials science, paper & wood

JEREB, Vesna, HORVAT, Milena, DROBNE, Damjana, PIHLAR, Boris. Transformations of mercury in the terrestrial isopod *Porcellio scaber* (Crustacea). *Sci. total environ.*. [Print ed.], 2003, vol. 304, str. 269-284. [COBISS.SI-ID 17455143] JCR IF (2002): 1.537; SE, x: 1.062 (29/132), environmental sciences

KINCL, Maja, BIBIČ, Renata, VEBER, Marjan, VREČER, Franc. Development and optimization of the drug release determination of iron from iron prolonged release tablets. *Pharmazie*, 2003, vol. 58, no. 4, str. 257-259. [COBISS.SI-ID 1274225] JCR IF (2002): 0.74; SE, x: 2.034 (28/35), chemistry, medicinal, x: 1.557 (61/119), chemistry, multidisciplinary, x: 2.12 (147/188), pharmacology & pharmacy

KOCIJAN, Aleksandra, MILOŠEV, Ingrid, PIHLAR, Boris. The influence of complexing agent and proteins on the corrosion of stainless steels and their metal components. *J. mater. sci., Mater. med.*, 2003, vol. 14, str. 69-77. [COBISS.SI-ID 17347623] JCR IF (2002): 0.996; SE, x: 1.297 (22/40), engineering, biomedical, x: 1.313 (7/11), materials science, biomaterials

KOKLIČ, Brigita, VEBER, Marjan, ZUPAN, Jure. Optimization of lamp control parameters in glow discharge optical emission spectroscopy for the analysis of copper-titanium-zinc alloy using the

- Simplex method. *J. anal. at. spectrom.*, 2003, vol. 18, no. 2, str. 157-160. [COBISS.SI-ID 24753925] JCR IF (2002): 4.25; SE, x: 1.5 (4/68), chemistry, analytical, x: 1.732 (3/38), spectroscopy
- KOKLIČ, Brigita, VEBER, Marjan. Influence of sampling to the homogeneity of Cu-Ti-Zn alloy samples for the analyses with glow discharge optical emission spectroscopy. *Accreditation and quality assurance*, 2003, vol. 8, no. 3/4, str. 146-149. [COBISS.SI-ID 24922117] JCR IF (2002): 0.658; SE, x: 1.5 (54/68), chemistry, analytical, x: 0.619 (21/52), instruments & instrumentation
- KOLAR, Jana, STRLIČ, Matija. Laser cleaning of paper using Nd: YAG laser running at 532 nm. *J. cult. herit.*, 2003, [No.] 4, str. 185s-187s. [COBISS.SI-ID 124725504]
- KOLAR, Jana, STRLIČ, Matija, ŠELIH, Vid Simon, BUDNAR, Miloš, MALEŠIČ, Jasna, SIMČIČ, Jure. Stabilisation of corrosive iron gall inks. *Acta Chim. Slov.* 2003, vol. 50, str. 763-770.
- KRALJ CIGIČ, Irena, GUČEK, Marjan, ZUPANČIČ-KRALJ, Lucija, PIHLAR, Boris. Separation of isomers of dienoic acids by electromigration techniques. *J. sep. sci.*, 2003, vol. 26, no. 14, str. 1253-1258, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25397765]
- KRALJ, Polonca, VEBER, Marjan. Investigations into nonspectroscopic effects of organic compounds in inductively coupled plasma mass spectrometry. *Acta chim. slov.*, 2003, vol. 50, no. 4, str. 633-644.
- KRISTL, Janja, VEBER, Marjan, SLEKOVEC, Metka. The contents of Cu, Mn, Zn, Cd, Cr, and Pb at different stages of the winemaking process. *Acta chim. slov.*, 2003, vol. 50, no. 1, str. 123-136. [COBISS.SI-ID 1967916] JCR IF (2002): 0.538; SE, x: 1.557 (75/119), chemistry, multidisciplinary
- LAH, Nina, KRALJ CIGIČ, Irena, LEBAN, Ivan. Solvothermal synthesis of a novel mixed valence Cu(I)/Cu(II) complex containing sulphate, malate and 4, 4'-bipyridine, [Cu^{sup}](Cu₂)^{sup}(II)(mal)(SO₄)(bpy)₂[times]H₂O]_n. Unique binding mode of the malate anion. *Inorg. chem. commun.* [Print ed.], 2003, vol. 6, no. 1, str. 1441-1444, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25391621] JCR IF (2002): 1.359; SE, x: 1.838 (22/45), chemistry, inorganic & nuclear
- MEŽNAR, Klavdija, PIHLAR, Boris, POGAČNIK, Lea, FRANKO, Mladen. Optimised calibration procedure for bioanalytical determination of organophosphate pesticides in apple juices by immobilised AChE. *Acta chim. slov.*, 2003, vol. 50, no. 3, str. 383-394. [COBISS.SI-ID 2799736] JCR IF (2002): 0.538; SE, x: 1.557 (75/119), chemistry, multidisciplinary
- PONIKVAR, Maja, PIHLAR, Boris, ŽEMVA, Boris. Chemical analysis of main arsenic species in mixtures of As^{sup}(III) and AsF₆^{sup}-. *J. fluorine chem.* [Print ed.], 2003, vol. 122, str. 215-217. [COBISS.SI-ID 17641255] JCR IF (2002): 1.191; SE, x: 1.838 (25/45), chemistry, inorganic & nuclear, x: 1.795 (31/53), chemistry, organic
- RAZPOTNIK, Polonca, TURŠIČ, Janja, VEBER, Marjan, NOVIČ, Milko. Efficiency and characteristics of solid-phase (ion exchange) extraction for removal of Cl^{sup}- matrix. *J. chromatogr.*, 2003, vol. A991, no. 1, str. 23-29, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 24848645] JCR IF (2002): 3.098; SE, x: 1.886 (7/47), biochemical research methods, x: 1.5 (6/68), chemistry, analytical
- STIPIČEVIČ, Sanja, FINGLER, Sanja, ZUPANČIČ-KRALJ, Lucija, DREVENKAR, Vlasta. Comparison of gas and high performance liquid chromatography with selective detection for determination of triazine herbicides and their degradation products extracted ultrasonically from soil. *J. sep. sci.*, 2003, vol. 26, no. 14, str. 1237-1246, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25398533]
- STRLIČ, Matija, KOČAR, Drago, KOLAR, Jana, RYCHLÝ, Jozef, PIHLAR, Boris. Degradation of pullulans of narrow molecular weight distribution : the role of aldehydes in the oxidation of polysaccharides. *Carbohydr. polym.* [Print ed.], 2003, vol. 54, no. 2, str. 221-228, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25315333] JCR IF (2002): 1.655; SE, x: 0.962 (9/59), chemistry, applied, x: 1.795 (26/53), chemistry, organic, x: 0.994 (10/74), polymer science
- STRLIČ, Matija, KOLAR, Jana, ŠELIH, Vid Simon, KOČAR, Drago, PIHLAR, Boris. A comparative study of several transition metals in Fenton-like reaction systems at circum neutral pH. *Acta Chim. Slov.*, 2003, vol. 50, str. 619-632.
- STRLIČ, Matija, KOLAR, Jana, ŠELIH, Vid Simon, MARINČEK, Marko. Surface modification during Nd:YAG (1064 nm) pulsed laser cleaning of organic fibrous materials. *Appl. surf. sci.* [Print ed.], 2003, vol. 207, no. 1/4, str. 236-245. [COBISS.SI-ID 24798213] JCR IF (2002): 1.295; SE, x: 2.066 (53/95),

chemistry, physical, x: 0.725 (4/17), materials science, coatings & films, x: 1.311 (25/71), physics, applied, x: 1.524 (21/56), physics, condensed matter

ŠTAJNBAHER, Darinka, ZUPANČIČ-KRALJ, Lucija. Multiresidue method for determination of 90 pesticides in fresh fruits and vegetables using solid-phase extraction and gas chromatography-mass spectrometry. *J. chromatogr.*, 2003, vol. 1015, no. 1/2, str. 185-198, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25393925] JCR IF (2002): 3.098; SE, x: 1.886 (7/47), biochemical research methods, x: 1.5 (6/68), chemistry, analytical

TUREL, Iztok, GOLOBIČ, Amalija, KLAVŽAR, Aleš, PIHLAR, Boris, BUGLYÓ, Péter, TOLIS, Evangelos, REHDER, Dieter, SEPČIČ, Kristina. Interactions of oxovanadium(IV) and the quinolone family member - ciprofloxacin. *J. inorg. biochem.* [Print ed.], 2003, letn. 95, str. 199-207. [COBISS.SI-ID 16256729] JCR IF (2002): 2.204; SE, x: 3.172 (134/266), biochemistry & molecular biology, x: 1.838 (14/45), chemistry, inorganic & nuclear

TURŠIČ, Janja, BERNER, Axel, VEBER, Marjan, BIZJAK, Mirko, PODKRAJŠEK, Boštjan, GRGIČ, Irena. Sulfate formation on synthetic deposits under haze conditions. *Atmos. environ. (1994)*. [Print ed.], 2003, vol. 37, no. 25, str. 3509-3516. [COBISS.SI-ID 2856986] JCR IF (2002): 2.352; SE, x: 1.062 (10/132), environmental sciences, x: 1.355 (7/46), meteorology & atmospheric sciences

1.02 Pregledni znanstveni članek / Review Article

STRLIČ, Matija, KOLAR, Jana. Size exclusion chromatography of cellulose in LiCl/N,N-dimethylacetamide : review. *J. Biochem. Biophys. Methods*. [Print ed.], 2003, vol. 56, no. 1/3, str. 265-279. [COBISS.SI-ID 25165829] JCR IF (2002): 1.383; SE, x: 1.886 (29/47), biochemical research methods, x: 3.172 (180/266), biochemistry & molecular biology, x: 2.76 (43/65), biophysics

1.03 Kratki znanstveni prispevek / Short Scientific Article

VEBER, Marjan. 4th Mediterranean basin conference on analytical chemistry : editorial. *Analytical and bioanalytical chemistry*, 2003, vol. 376, no. 4, str. 423. [COBISS.SI-ID 25310213] JCR IF (2002): ; SE, x: 1.886 (46/47), biochemical research methods, x: 1.5 (68/68), chemistry, analytical

1.04 Strokovni članek / Professional Article

GROS, Nataša. Poenostavljena izvedba titracije: Kako zagotoviti poznavanje pravilne tehnike titriranja in v krajšem času dobiti dovolj rezultatov titracij. *Kem. šoli*, 2002, letn.14, št. 4, str. 36-37.

GROS, Nataša. Razvoj poceni spektrometričnega mikrotitratorja – Zelena kemija tudi v laboratoriju. *Delo (Ljublj.)*, 2.junija 2003. let 45, str. 12.

KOLAR, Jana, STRLIČ, Matija. Spomin človeštva. *Kem. šoli*, 2003, letn. 15, št. 2, str. 2-6. [COBISS.SI-ID 25200389]

1.16 Samostojni znanstveni sestavek v monografiji / Independent Scientific Component Part in a Monograph

STRLIČ, Matija, KOLAR, Jana, RYCHLÝ, Jozef. Paper conservation chemistry: a review of chemiluminescence studies of cellulose stability. V: TOWNSEND, Joyce M. (ur.), EREMIN, Kirill (ur.), ADRIAENS, Annemie (ur.). *Conservation Science 2002 : papers from the Conference held in Edinburgh, Scotland, 22-24 May 2002*. London: Archetype, 2003, str. 182-187. [COBISS.SI-ID 24963333]

2.12 Končno poročilo o rezultatih raziskav / Final Research Report

ZIDAR, Martin, GOLOB, Janvit, VEBER, Marjan. *Test reaktivnosti kalcita Kresnice : študija*. Ljubljana: CEE, Inženiring za energetiko in ekologijo, 2003. 26 f., graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25559557]

KATEDRA ZA FIZIKALNO KEMIJO
CHAIR OF PHYSICAL CHEMISTRY

Predstojnik katedre / *Head*: **prof. dr. Gorazd Vesnaver**

Sodelavci katedre
Employees

Učitelji / Faculty

prof. dr. Gorazd Vesnaver
prof. dr. Vojko Vlachy
prof. dr. Jože Koller
prof. dr. Ciril Pohar
prof. dr. Andrej Jamnik
prof. dr. Marija Bešter Rogač
doc. dr. Ksenija Kogej
doc. dr. Barbara Hribar
doc. dr. Jurij Reščič
doc. dr. Jurij Lah

Asistenti / Assistants

dr. Tomaž Urbič
dr. Janez Cerar
dr. Črtomir Podlipnik
Aleksander Vrhovšek
Matija Tomšič
mag. Andrej Godec

Tehniki / Technicians

Cirila Peklaj
Anton Kelbl
Anton Kokalj

Mladi raziskovalci / Young researchers

	<i>Mentor / Advisor</i>	<i>Čas usposabljanja / Programme duration</i>	<i>Oblika usposabljanja / Degree</i>
Jožica Dolenc	Jože Koller	1.1.2002 – 30.6.2004	magistrski študij / MSc
Iztok Prisljan	Gorazd Vesnaver	1.1.2003 – 30.6.2007	doktorski študij / PhD

Raziskovalna oprema / *Research Equipment*

Sistem za merjenje malokotnega rentgenskega sipanja / SAXS system
DSC mikrokolorimeter / DSC microcalorimeter
CD spektropolarimeter-možno merjenje temperaturne odvisnosti / CD spectropolarimeter-thermoelectrically controlled cell holder
Titracijski in »batch« kalorimeter / Titration and batch calorimeter
UV spektrofotometer-možno merjenje temperaturne odvisnosti / UV spectrophotometer-thermoelectrically controlled cell holder
Membranski osmometer / Membrane osmometer
Osmometer na parni tlak / Vapour pressure osmometer
Gostotomer z vibracijsko celico / Vibrating tube densitometer
Konduktometer- Jonesov most / Conductivity meter-Jones bridge
pH metrija in potenciometrija / pH measurements and potentiometric titrations

Temeljni projekti / *Basic Research*

Z1-0329-0103-03 LASTNOSTI IN STABILNOST RAZTOPIN NABITIH
NANODELCEV/PROPERTIES AND STABILITY OF SOLUTIONS OF
CHARGED NANOPARTICLES
Nosilec / *Principal Researcher*: doc. dr. Jurij Rešič

Razvojni projekti – subvencije / *Industrial Research and Development*

RR-1548/2003 Določitev termodinamske stabilnosti epoetina β / Determination of
thermodynamic stability of epoetin β

Mednarodni projekti / *International Projects*

NIH Grant MODELIRANJE VODNE SOLVATACIJE V BIOLOGIJI/ MODELING
(2001-2005) AQUEOUS SOLVATION IN BIOLOGY
Nosilca / *Principal Researchers*: prof. dr. Vojko Vlachy, prof. dr. K. Dill

SLO - ZDA ŠTUDIJ ZMESI POLIELEKTROLIT-ELEKTROLIT / STUDIES OF
(2002-2004) POLYELECTROLYTE-ELECTROLYTE MIXTURES
Nosilec / *Principal Researcher*: prof. dr. Vojko Vlachy

SLO – ZDA MODELIRANJE VODNE SOLVATACIJE / MODELING AQUEOUS
(2002-2003) SOLVATION
Nosilec / *Principal Researcher*: doc. dr. Barbara Hribar Lee

SLO - Ukrajina HIDRATACIJA ENOSTAVNIH IN VERIŽNIH MOLEKUL / HYDRATION
(2003-2005) OF SIMPLE AND CHAIN-LIKE MOLECULES
Nosilec / *Principal Researcher*: prof. dr. Vojko Vlachy

SLO - Avstrija STRUKTURNE RAZISKAVE INTERAGIRAJOČIH SISTEMOV /
(2002–2003) STRUCTURAL INVESTIGATIONS OF INTERACTING SYSTEMS
Nosilec / *Principal Researcher*: prof. dr. Andrej Jamnik

COST D-11 SUPRAMOLEKULARNA KEMIJA / SUPRAMOLECULAR CHEMISTRY
Nosilec / *Principal Researcher*: prof. dr. Gorazd Vesnaver

Druge oblike mednarodnega sodelovanja / *Other Forms of International Cooperation*

Predavanja sodelavcev katedre na tujih univerzah / *Invited lectures at foreign Universities*

REŠČIČ, Jurij. *Catalytic properties of spherical polyelectrolytes: a theoretical study* : [University of Puerto Rico, Rio Piedrac campus, Faculty of Natural Sciences, department of Physics, Puerto Rico, 16. September 2003]. 2003.

VLACHY, Vojko. *Electrolyte theory: from Debye-Huckel to integral equation and the density-functional theories* : [Department of Pharmaceutical Chemistry and Graduate Group in Biophysics, University of California, San Francisco, Monday Sept. 15 and Tuesday Sept. 16, 2003]. San Francisco, 2003.

VLACHY, Vojko. "Beyond the Poisson-Boltzmann theory, for treating ionic interactions": [Department of Pharmaceutical Chemistry and Graduate Group in Biophysics, University of California, San Francisco, September 18, 2003]. San Francisco, 2003.

Bibliografija / *References*

1.01 Izvirni znanstveni članek / *Original Scientific Article*

CERAR, Janez, ŠKERJANC, Jože. Water-soluble fullerenes. 3, Alkali salts of fullerenehexamalononic acid T_h-C₆₆(COOH)₁₂. *J. phys. chem., B Mater. surf. interfaces biophys.*, 2003, vol. 107, no. 32, str. 8255-8259, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25299205]

DOMINGUEZ, H., VLACHY, Vojko, HRIBAR, Barbara, PIZIO, Orest. Adsorption of electrolyte in a templated hard-sphere matrix. Predictions of the continuum replica Ornstein-Zernike approach. *Physica, A*. [Print ed.], 2003, vol. 324, no. 3/4, str. 469-483, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25134853]

HRIBAR, Barbara, VLACHY, Vojko, BHUIYAN, L. B., OUTHWAITE, C. W., MOLERO, M. Theory and simulation of electrolyte mixtures. *Mol. Phys.*, 2003, vol. 101, no. 19, str. 2969-2980, ilustr. [COBISS.SI-ID 25430021]

KOGEJ, Ksenija. Study of the effect of polyion charge density on structural properties of complexes between poly(acrylic acid) and alkylpyridinium surfactants. *J. phys. chem., B Mater. surf. interfaces biophys.*, 2003, vol. 107, no. 32, str. 8003-8010. [COBISS.SI-ID 25294853]

LAH, Nina, LAH, Jurij, ZEGERS, Ingrid, WYNS, Lode, MESSENS, Joris. Specific potassium binding stabilizes pI258 arsenate reductase from *Staphylococcus aureus*. *J Biol Chem*, 2003, vol. 278, no. 27, str. 24673-24679. [COBISS.SI-ID 25296645]

LAH, Jurij, MARIANOVSKY, Irina, GLASER, Gad, ENGELBERG-KULKA, Hanna, KINNE, Jörg, WYNS, Lode, LORIS, Remy. Recognition of the intrinsically flexible addiction antidote mazEF by a dromedary single domain antibody fragment : structure, thermodynamics of binding, stability, and influence on interactions with DNA. *J Biol Chem*, 2003, vol. 278, no. 16, str. 14101-14111. [COBISS.SI-ID 25102853]

LORIS, Remy, MARIANOVSKY, Irina, LAH, Jurij, LAEREMANS, Toon, ENGELBERG-KULKA, Hanna, GLASER, Gad, MUYLDERMANS, Serge, WYNS, Lode. Crystal structure of the intrinsically flexible addiction antidote MazE. *J Biol Chem*, 2003, vol. 278, no. 30, str. 28252-28257. [COBISS.SI-ID 25297925]

PLESNIČAR, Božo, TUTTLE, Tell, CERKOVNIK, Janez, KOLLER, Jože, CREMER, Dieter. Mechanism of formation of hydrogen trioxide (HOOH) in the ozonation of 1,2-diphenylhydrazine and 1,2-dimethylhydrazine : an experimental and theoretical investigation. *J. Am. Chem. Soc.*, 2003, vol. 125, no. 38, str. 11553-11564. [COBISS.SI-ID 25327365]

PODLIPNIK, Črtomir, ŠOLMAJER, Tomaž, KOLLER, Jože. Lipophilic connectivity indices. *Match (Mühl.)*, September 2003, no. 49, str. 7-14. [COBISS.SI-ID 25295621]

URBIČ, Tomaž, VLACHY, Vojko, KALYUZHNYI, Yu. V., DILL, K. A. Orientation-dependent integral equation theory for a two-dimensional model of water. *J. chem. phys.*, 2003, vol. 118, no. 12, str. 5516-5525, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 24908805]

ZAJC, Barbara, GRAHEK, Rok, KOCIJAN, Andrej, LAKSHMAN, Mahesh K., KOŠMRLJ, Janez, LAH, Jurij. Evaluation of the enantiomeric resolution of 7, 8-dihydroxy-7,8-dihydrobenzo[a]- pyrene and its 6-fluoro and 6-bromo derivatives on polysaccharide-derived stationary phases. *J. org. chem.*, 2003, vol. 68, no. 8, str. 3291-3294. [COBISS.SI-ID 25102597]

1.03 Kratki znanstveni prispevek / Short Scientific Article

VESNAVER, Gorazd. Letters to the editor. *Croat. chem. acta*, 2003, vol. 76, no. 1, str. A1. [COBISS.SI-ID 25294597]

2.05 Drugo učno gradivo / Other Educational Material

LAH, Jurij, HRIBAR, Barbara, VESNAVER, Gorazd. *Navodila za vaje iz biofizikalne kemije : samo za interno uporabo!*. Ljubljana: Univerza v Ljubljani, fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2003. 37 f., graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25299461]

KATEDRA ZA BIOKEMIJO
CHAIR OF BIOCHEMISTRY

Predstojnik katedre / *Head*: **prof. dr. Metka Renko**

Sodelavci katedre
Employees

Učitelji / Faculty

prof. dr. Franc Gubenšek
prof. dr. Brigita Lenarčič
prof. dr. Metka Renko

Asistenti / Assistants

doc. dr. Marko Dolinar
dr. Nika Lovšin
dr. Petra Prijatelj
dr. Vera Župunski

Tehniki / Technicians

Matjaž Malavašič

Bibliografija / References

1.01 Izvirni znanstveni članek / Original Scientific Article

- *1. FAURE, Grazyna, ČOPIČ, Alenka, LE PORRIER, Sabine, GUBENŠEK, Franc, BON, Cassian, KRIŽAJ, Igor. Crotoxin acceptor protein isolated from Torpedo electric organ : binding properties to crotoxin by surface plasmon resonance. *Toxicon* (Oxford). [Print ed.], 2003, vol. 41, str. 509-517. [COBISS.SI-ID 17399079]
- *2. GALEŠA, Katja, PAIN, Roger H., JONGSMA, Maarten A., TURK, Vito, LENARČIČ, Brigita. Structural characterization of thyroglobulin type-1 domains of equistatin. *FEBS lett.* [Print ed.], 2003, vol. 539, str. 120-124. [COBISS.SI-ID 17460263]
- *3. OPPERT, B., LENARČIČ, Brigita, GALEŠA, Katja, BRZIN, Jože, TURK, Vito. Effects of proteinase inhibitors on digestive peroteinas and growth of the red flour beetle, *Tribolium castaneum* (Herbst)(Coleoptera: Tenebrionidaw). *Comp. biochem. physiol., Toxicol. pharmacol.*, 2003, vol. 134, str. 481-490. [COBISS.SI-ID 17464103]
- *4. PREŽELJ, Andrej, ŠTRANCAR, Janez, GUBENŠEK, Franc, PEČAR, Slavko, DEGAND, Guy. Quantification of binding of some thiol-reactive clenbuterol analogues to bovine serum albumin by electron paramagnetic resonance spectroscopy. *Anal. biochem.*, 2003, vol. 315, no. 2, str. 202-207. [COBISS.SI-ID 1292401]
- *5. PRIJATELJ, Petra, ŠRIBAR, Jernej, IVANOVSKI, Gabriela, KRIŽAJ, Igor, GUBENŠEK, Franc, PUNGERČAR, Jože. Identification of a novel site for calmodulin in ammodytoxin A, a neurotoxic group IIA phospholipase A₂. *Eur. j. biochem.*, 2003, vol. 270, str. 3018-3025. [COBISS.SI-ID 17611303]
- *6. ŠRIBAR, Jernej, ČOPIČ, Alenka, POLJŠAK-PRIJATELJ, Mateja, KURET, Jošt, LOGONDER, Uroš, GUBENŠEK, Franc, KRIŽAJ, Igor. R25 is an intracellular membrane receptor for a snake venom secretory phospholipase A₂¹. *FEBS lett.* [Print ed.], 2003, vol. 553, str. 309-314. [COBISS.SI-ID 17818151]
- *7. ŠRIBAR, Jernej, SHERMAN, Nicholas E., PRIJATELJ, Petra, FAURE, Grazyna, GUBENŠEK, Franc, FOX, Jay W., AITKEN, Alastair, PUNGERČAR, Jože, KRIŽAJ, Igor. The neurotoxic phospholipase A₂ associates, through a non-phosphorylated binding motif, with 14-3-3 protein [gamma] and [epsilon] isoforms. *Biochem. biophys. res. commun.*, 2003, vol. 302, str. 691-696. [COBISS.SI-ID 17405991]
- *8. VASILJEVA, Olga, DOLINAR, Marko, TURK, Vito, TURK, Boris. Recombinant human cathepsin H lacking the mini chain is an endopeptidase. *Biochemistry* (Easton), 2003, vol. 42, str. 13522-13528. [COBISS.SI-ID 17899303]
- *9. ŽUPUNSKI, Vera, KORDIŠ, Dušan, GUBENŠEK, Franc. Adaptive evolution in the snake venom Kunitz/BPTI protein family. *FEBS lett.* [Print ed.], 2003, vol. 547, str. 131-136. [COBISS.SI-ID 17648423]

**KATEDRA ZA KATEDRA ZA ANORGANSKO TEHNOLOGIJO IN
MATERIALE
CHAIR OF INORGANIC TECHNOLOGY AND MATERIALS**

Predstojnik katedre / *Head*: **izr. prof. dr. Jadran Maček**

**Sodelavci katedre
Employees**

Učitelji / Faculty

izr. prof. dr. Jadran Maček
prof. dr. Stane Pejovnik

Asistenti / Assistants

mag. Barbara Novosel, viš. predavatelj
dr. Klementina Zupan
doc. dr. Marjan Marinšek

Tehniki / Technicians

Vojimir Francetič

Mladi raziskovalci / Young researchers

	<i>Mentor / Advisor</i>	<i>Čas usposabljanja / Programme duration</i>	<i>Oblika usposabljanja / Degree</i>
Petra Gorišek	Jadran Maček	1. 10. 2000 - 30. 9. 2004	doktorski študij / PhD
Tanja Razpotnik	Jadran Maček	1. 1. 2003 - 30. 6. 2007	doktorski študij / PhD
Daniel Vrbanič	Stane Pejovnik	1. 10. 2000 - 30. 9. 2004	doktorski študij / PhD

Raziskovalna oprema / *Research Equipment*

TG, DTA, DSC sistem za termično analizo Netzsch STA 409 / TG, DTA, DSC Thermoanalyzer Netzsch STA 409

Mettler TA 4000:

TG 50 modul / TG 50 module

DSC 20 modul / DSC 20 module

MS - QMS 200 Laybold Heraeus

Agilent Mikro GC

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

Razvojni projekti – subvencije / *Industrial Research and Development*

73/2003 Testiranje primernosti alternativnih energentov in surovin za proizvodnjo cementa- Salonit Anhovo

Druge oblike mednarodnega sodelovanja / *Other Forms of International Cooperation*

Erasmus exchange of students: Research project of Pierre DEQUIER (3 month) University of Grenoble (EPUG).

Bibliografija / *References*

1.01 Izvirni znanstveni članek / *Original Scientific Article*

MARINŠEK, Marjan, ZUPAN, Klementina, MAČEK, Jadran. Citrate-nitrate gel transformation behavior during the synthesis of combustion-derived NiO-yttria-stabilized zirconia composite. *J. mater. res.*, 2003, vol. 18, no. 7, str. 1551-1560. [COBISS.SI-ID 25306373]

*CVELBAR, Uroš, PEJOVNIK, Stane, MOZETIČ, Miran, ZALAR, Anton. Increased surface roughness by oxygen plasma treatment of graphite/polymer composite. *Appl. surf. sci.*. [Print ed.], 2003, vol. 210, str. 255-261. [COBISS.SI-ID 17495591]

*DROFENIK, Jernej, GABERŠČEK, Miran, DOMINKO, Robert, POULSEN, Finn Willy, MOGENSEN, Mogens, PEJOVNIK, Stane, JAMNIK, Janko. Cellulose as a binding material in graphitic anodes for Li ion batteries : a performance and degradation study. *Electrochim. acta.* [Print ed.], 2003, vol. 8, no. 7, str. 883-889. [COBISS.SI-ID 2792218]

*DOMINKO, Robert, GABERŠČEK, Miran, ARČON, Denis, MRZEL, Aleš, REMŠKAR, Maja, MIHAILOVIĆ, Dragan, PEJOVNIK, Stane, JAMNIK, Janko. Electrochemical preparation and characterisation of Li_zMoS_(2-x) nanotubes. *Electrochim. acta.* [Print ed.], 2003, vol. 48, str. 3079-3084. [COBISS.SI-ID 17813543]

*DOMINKO, Robert, GABERŠČEK, Miran, DROFENIK, Jernej, BELE, Marjan, PEJOVNIK, Stane, JAMNIK, Janko. The role of carbon black distribution in cathodes for Li ion batteries. *J. power sources.* [Print ed.], 2003, vol. 119/121, str. 770-773. [COBISS.SI-ID 2860314]

2.03 Univerzitetni ali visokošolski učbenik z recenzijo / *Reviewed University and Academic Textbook*

NOVOSEL, Barbara, MARINŠEK, Marjan. *Mathematical treatment of chemical processes - Računska obravnava kemijskih procesov : collection of mathematical exercises*. Ljubljana: Faculty of chemistry and chemical technology, 2003. 132. str., ilustr. ISBN 961-6286-56-0. [COBISS.SI-ID 125977600]

**KATEDRA ZA POLIMERNO INŽENIRSTVO, ORGANSKO KEMIJSKO
TEHNOLOGIJO IN MATERIALE
CHAIR OF POLYMER ENGINEERING, ORGANIC CHEMICAL
TECHNOLOGY AND MATERIALS**

Predstojnik katedre / *Head*: **doc. dr. Matjaž Krajnc**

**Sodelavci katedre
Employees**

Učitelji / Faculty

prof. dr. Janvit Golob
doc. dr. Matjaž Krajnc

Asistenti / Assistants

dr. Ida Poljanšek

Tehniki / Technicians

Janez Malovrh

Mladi raziskovalci / Young researchers

	<i>Mentor / Advisor</i>	<i>Čas usposabljanja / Programme duration</i>	<i>Oblika usposabljanja / Degree</i>
Urška Šebenik	Matjaž Krajnc	1.1. 2002 – 31. 12. 2003	doktorski študij / PhD
Iztok Hace	Janvit Golob	1.11. 2000 – 31. 10. 2004	doktorski študij / PhD

Raziskovalna oprema / *Research Equipment*

Mettler Toledo DSC 821e
HP 5980II Gas Chromatograph
Perkin Elmer FTIR Spectrum 1000
ASI Applied Systems ReactIR 4000
LC Shimadzu LC-4A
Extruder Brabender Plasticorder PLD 651
pilotni tankoslojni uparjalnik / *pilot plant thin-film evaporator*

Aplikativni projekti / *Applied Research*

L2-3539 Polimerno inženirstvo / *Polymer Engineering*
Nosilec / *Principal Researcher*: doc. dr. Matjaž Krajnc

Razvojni projekti – subvencije / *Industrial Research and Development*

13/2002 Pilotska proizvodnja biodeiselskega goriva
Pilot plant production of biodiesel fuel
12/2002 Študij procesa proizvodnje sečninsko-formaldehidnih smol
Urea-formaldehyde process optimization
KP-1-01-MK/KPIOT Razvoj veziv in premazov
Bindings and coatings development
KP-1-02-MK/KPIOT Razvoj tehnologije proizvodnje akrilatnih emulzij
Acrylic emulsion technology development
P-40/03 Rekonstrukcija rezervoarjev za naftne derivate
Reconstruction of reservoirs for oil derivatives
51/2003 Vezivni sistemi guma-armatura
Adhesion bonding systems rubber – cords

Mednarodni projekti / *International Projects*

Solabs ENK6-CT- Development of unglazed solar absorbers
2002-00679 Nosilec / *Principal Researcher*: doc. dr. Matjaž Krajnc
(subcontractor 186/03-L02)

Druge oblike mednarodnega sodelovanja / *Other Forms of International Cooperation*

Socrates: Universidad Politecnica de Valencia, Španija (2003 – 2006)

Janvit Golob: University of Tuscon, Arizona, USA (avgust 2003)

ACHEMA 2003: 27th International Exhibition – Congress on Chemical Engineering, Environmental Protection and Biotechnology, Frankfurt am Main, 19 – 24 May 2003

Globe: International Conference of Environmental Protection and Sustainable Development, Milano, Dec. 2003

Bibliografija / References

1.01 Izvirni znanstveni članek / Original Scientific Article

FELE ŽILNIK, Ljudmila, GOLOB, Janvit. Analysis of separation of a water-methanol-formaldehyde mixture. Acta chim. slov., 2003, vol. 50, no. 3, str. 451-460. [COBISS.SI-ID 2902298]

KLINAR, Dušan, GOLOB, Janvit, KRAJNC, Matjaž. The curing of diallylterephthalate determination of the kinetic triplet A, Ea,app using the isoconversional method = Zamreževanje dialiltereftalata. Določitev kinetičnega tripleta A, Ea,app z uporabo izokonverzijske metode. Acta chim. slov., september 2003, letn. 50, št. 3, str. 473-489, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25331205]

HACE, Iztok, GOLOB, Janvit, KRAJNC, Matjaž. The kinetic modelling of a bulk diallylterephthalate polymerization. Chem. biochem. eng. q., 2003, vol. 17, no. 4, str. 251-259, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25510149]

ŠEBENIK, Urška, GOLOB, Janvit, KRAJNC, Matjaž. Comparison of properties of acrylic-polyurethane hybrid emulsions prepared by batch and semibatch processes with monomer emulsion feed. Polym. int., 2003, vol. 52, no. 5, str. 740-748. [COBISS.SI-ID 24954117]

POLJANŠEK, Ida, KRAJNC, Matjaž. Alternating differential scanning calorimetry : isothermal curing of the epoxy resin = Temperaturno modulirana diferenčna dinamična kalorimetrija : vpliv difuzijskih omejitev pri reakciji zamreževanja. Acta chim. slov., september 2003, letn. 50, št. 3, str. 461-472, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25330949]

LAVRENČIČ ŠTANGAR, Urška, OREL, Boris, KRAJNC, Matjaž. Preparation and spectroscopic characterization of blue CoAl₂O₄ coatings. J. sol-gel sci. technol., 2003, vol. 26, str. 771-775. [COBISS.SI-ID 2740250]

1.04 Strokovni članek / Professional Article

KRAJNC, Matjaž, POLJANŠEK, Ida. Duroplastične smole in eksperimentalne metode ugotavljanja stopnje zamreženja. PlastForma (Celje), 2003, št. 1, str. 30-31. [COBISS.SI-ID 25176325]

2.12 Končno poročilo o rezultatih raziskav / Final Research Report

GOLOB, Janvit, KRAJNC, Matjaž, KNEZ, Željko, PRISLAN, Matjaž, ŽERJAV, Radovan. Pilotska proizvodnja biodieselskega goriva : zaključno poročilo o delu po pogodbi št. 13/2002 med Fakulteto za kemijo in kemijsko tehnologijo in Nafto Lendava, Proizvodnja naftnih derivatov, d.o.o.. Maribor: Nafta Lendava, proizvodnja naftnih derivatov, d.o.o.: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, junij 2003. 37 str., ilustr. [COBISS.SI-ID 25187333]

ZIDAR, Martin, GOLOB, Janvit, VEBER, Marjan. Test reaktivnosti kalcita Kresnice : študija. Ljubljana: CEE, Inženiring za energetiko in ekologijo, 2003. 26 f., graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25559557]

KRAJNC, Matjaž, ŠEBENIK, Urška. Razvoj akrilatno-poliuretanskih hibridnih emulzij : poročilo o delu po pogodbi št. KP-1-01-MK/KPIOT : fazno poročilo za Helios, d.d., za obdobje (09/12/2002-15/03/2003). Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2003. 9 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 25176581]

**KATEDRA ZA KEMIJSKO, BIOKEMIJSKO IN EKOLOŠKO
INŽENIRSTVO
CHAIR OF CHEMICAL, BIOCHEMICAL AND ENVIRONMENTAL
ENGINEERING**

Predstojnik katedre / *Head*: **prof. dr. Valentin Koloini**

**Sodelavci katedre
*Employees***

Učitelji / *Faculty*

prof. dr. Valentin Koloini
prof. dr. Janez Levec
prof. dr. Miha Žumer
izr. prof. dr. Marin Berovič
izr. prof. dr. Aleksander Pavko
izr. prof. dr. Jana Zagorc Končan
doc. dr. Igor Plazl

Asistenti / *Assistants*

dr. Ana Lakota Družina
dr. Andreja Žgajnar Gotvajn
dr. Polona Žnidaršič Plazl
dr. Helena Podgornik (1 mesec)
doc. dr. Andreja Zupančič Valant

Tehniki / *Technicians*

Vesna Delalut
Dušan Komel
Darinka Darja Radešček

Mladi raziskovalci / *Young researchers*

	<i>Mentor / Advisor</i>	<i>Čas usposabljanja / Programme duration</i>	<i>Oblika usposabljanja / Degree</i>
Urška Roglič	Igor Plazl	01.01.2002 -31.12.2005	doktorski študij / PhD
Petra Milavec Žmak	Valentin Koloini	1999-2003	doktorski študij / PhD
Andrej Guštin	Andreja Zupančič Valant	01.01.2003 – 30.06.2006	doktorski študij / PhD
mag. Lidija Slemenik Perše	Miha Žumer	01.11.1999 – 30.09.2004	doktorski študij / PhD

Raziskovalna oprema / *Research Equipment*

Plinski kromatograf HP / Gas chromatograph HP
Tekočinski kromatograf Knauer / HPLC Knauer
Rotacijski reometer HAAKE RS 150 / Rheometer HAAKE RS 150
Rotacijski reometer HAAKE CV 20 / Rheometer HAAKE CV 20
UV-VIS spektrofotometer Varian
Mikrovalovni reaktor / Microwave reactor
Laboratorijski bioreaktor z mešalom / Benchtop Fermenter Tape KLF 2000
TOC 5000A Analysator Shimadzu
Vary 50 Varian spektrofotometer / Vary 50 Varian Spectrophotometer
pH/Oxi 340i WTW sonda / pH/Oxi meter 340i WTW

Temeljni projekti / *Basic Research*

- L4-3068-0103-03 UPORABA LIGNINOLITIČNIH ENCIMOV GLIV BELE TROHNOBE ZA RAZGRADNJO SINTETIČNIH BARVIL / APPLICATION OF THE LIGNINOLITIC ENZYMES EXPRESSED TO PHANEROCHAETE CHRYSOSPORIUM IN BIODEGRADATION OF SYNTHETIC DYES
Nosilec / *Principal Researcher*: dr. Helena Podgornik
- Z2-3538-0103-03 METODOLOGIJA OPTIMIZACIJE DELOVANJA BIOLOŠKE ČISTILNE NAPRAVE S SPREMLJANJEM STRUPENOSTI IN BIORAZGRADLJIVOSTI ODPADNIH VOD / METHODOLOGY FOR OPTIMIZATION OF BIOLOGICAL WASTEWATER TREATMENT PLANT OPERATION USING TOXICITY AND BIODEGRADABILITY TESTING OF THE WASTEWATERS
Nosilec / *Principal Researcher*: dr. Andreja Žgajnar Gotvajn

Mednarodni projekti / *International Projects*

- Bilateralni projekt Slovenija - Grčija REOLOŠKO OBNAŠANJE HIDROFILNIH POLIMEROV V MEŠALNIH POSODAH / RHEOLOGICAL BEHAVIOUR OF HYDROPHILIC POLYMERS IN MIXING VESSELS
GR 21/2003
Nosilec / *Principal Researcher*: doc. dr. Andreja Zupančič Valant (Slovenija) in prof. dr. Evan Mitsoulis (Grčija)

Bibliografija / *References*

1.01 Izvirni znanstveni članek / *Original Scientific Article*

- *BEROVIČ, Marin, MAVRI, Jan, WONDRA, Mojmir, KOŠMERL, Tatjana, BAVČAR, Dejan. Influence of temperature and carbon dioxide on fermentation of Cabernet Sauvignon must. *Food technol. biotechnol.*, 2003, vol. 41, no. 4, str. 353-359, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 2803832]
- *BEROVIČ, Marin, HABIJANIČ, Jožica, ZORE, Irena, WRABER-HERZOG, Branka, HODŽAR, Damjan, BOH, Bojana, POHLEVEN, Franci. Submerged cultivation of *Ganoderma lucidum* biomass and immunostimulatory effects of fungal polysaccharides. *J. biotechnol.* [Print ed.], 2003, vol. 103, str. 77-86. [COBISS.SI-ID 1224540]

GRGIČ, Irena, BEROVIČ, Marin, PERDIH, Anton. The effect of sterilisation on poly(ethylene glycol) used as the enzyme activity stimulator in the *Phanerochaete chrysosporium* culture. *Polym. degrad. stab.* [Print ed.], 2003, vol. 80, no. 2, str. 369-372, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25467909]

*JURKOVIČ, Polona, HOMAR, Miha, ZUPANČIČ-VALANT, Andreja, GAŠPERLIN, Mirjana. Sodium ascorbyl phosphate in topical microemulsions. *Int. j. pharm.* [Print ed.], 2003, vol. 256, no. 1-2, str. 65-73. [COBISS.SI-ID 1282161]

KUKEC, Aleksandra, BEROVIČ, Marin, WONDRA, Mojmir, ČELAN, Štefan, KOŠMERL, Tatjana. Influence of temperature shock on the glycerol production in cv. Sauvignon blanc fermentation. *Vitis*, 2003, vol. 42, no. 4, str. [1-2 sprejeto v tisk], graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25468421]

LAKOTA, Ana. Impact of structured packing on bubble column mass transfer characteristics evaluation. Part 3., Sensitivity of ADM volumetric mass transfer coefficient evaluation = Študija vpliva struktuiranega polnila na transportne lastnosti v koloni z mehurčki. Del 3., Občutljivost določitve ADM volumetričnega koeficienta snovnega transporta. *Acta chim. slov.*, December 2003, letn. 50, št. 4, str. 771-776, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25561861]

*MENART, Viktor, JEVŠEVAR, Simona, VILAR, Mateja, TROBIŠ, Andreja, PAVKO, Aleksander. Constitutive versus thermoinducible expression of heterologous proteins in *Escherichia coli* based on strong P_RP_L promoters from phage lambda. *Biotechnol. bioeng.*, 2003, vol. 83, no. 2, strž. [181]-190. [COBISS.SI-ID 2828826]

MIHELIC, Igor, KOLOINI, Tine, PODGORNIK, Aleš. Temperature distribution effects during polymerization of methacrylate-based monoliths. *J. appl. polym. sci.*, 2003, vol. 87, no. 14, str. 2326-2334, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 24847109]

MIHELIC, Igor, PODGORNIK, Aleš, KOLOINI, Tine. Temperature influence on the dynamic binding capacity of a monolithic ion-exchange column. *J. chromatogr.*, 2003, vol. 987, no. 1/2, str. 159-168, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 24846853]

*MILAVEC ŽMAK, Petra, PODGORNIK, Helena, JANČAR, Janez, PODGORNIK, Aleš, ŠTRANCAR, Aleš. Transfer of gradient chromatographic methods for protein separation to Convective Interaction Media monolithic columns. *J. chromatogr.*, 2003, vol. 1006, str. 195-205. [COBISS.SI-ID 2797432]

*RAEDER, Henrik, BREDESEN, Rune, CREHAN, Gabriel, MIACHON, Sylvain, DALMON, Jean-Alain, PINTAR, Albin, LEVEC, Janez, TORP, Eddy G. A wet air oxidation process using a catalytic membrane contactor. *Separation and purification technology*, 2003, vol. 32, no. 1/3, str. 349-355. [COBISS.SI-ID 2844442]

*SEDMAK, Gregor, HOČEVAR, Stanko, LEVEC, Janez. Kinetics of selective CO oxidation in excess of H₂ over the nanostructured Cu_(0.1)Ce_(0.9)O_(2-y) catalyst. *J. catal.*, 2003, vol. 213, no. 2, str. 135-150. [COBISS.SI-ID 2759706]

*SILVA, Adrián M. T., CASTELO-BRANCO, Isabel M., QUINTA-FERREIRA, Rosa M., LEVEC, Janez. Catalytic studies in wet oxidation of effluents from formaldehyde industry. *Chem. eng. sci.* [Print ed.], 2003, vol. 58, no. 3/6, str. 963-970. [COBISS.SI-ID 2773018]

*SILVA, Adrián M. T., QUINTA-FERREIRA, Rosa M., LEVEC, Janez. Catalytic and noncatalytic wet oxidation of formaldehyde. A novel kinetic model. *Ind. eng. chem. res.*, 2003, vol. 42, str. 5099-5108. [COBISS.SI-ID 2916378]

*SILVA, Adrián M. T., VAZ, Ricardo N. P., QUINTA-FERREIRA, Rosa M., LEVEC, Janez. Gas-liquid-solid reactions of polyvinyl alcohol on oxidation treatments for environmental pollution remediation. *Can. j. chem. eng.*, 2003, vol. 81, no. 3/4, str. 566-573. [COBISS.SI-ID 2892826]

STERGAR, Vesna, ZAGORC-KONČAN, Jana, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. Laboratory scale and pilot plant study on treatment of toxic wastewater from the petrochemical industry by UASB reactors. *Water sci. technol.*, 2003, vol. 48, no. 8, str. 97-102, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25510405]

*VODOPIVEC, Martina, PODGORNIK, Aleš, BEROVIČ, Marin, ŠTRANCAR, Aleš. Characterization of CIM monoliths as enzyme reactors. *Journal of chromatography. B, Analytical technologies in the biomedical and life sciences*, 2003, vol. 795, str. 105-113. [COBISS.SI-ID 2819704]

*VOSPERNIK, Matevž, PINTAR, Albin, BERČIČ, Gorazd, LEVEC, Janez. Mass transfer studies in gas-liquid-solid membrane contactors. *Catal. today*. [Print ed.], 2003, vol. 79/80, str. 169-179. [COBISS.SI-ID 2823450]

*VOSPERNIK, Matevž, PINTAR, Albin, BERČIČ, Gorazd, LEVEC, Janez. Experimental verification of ceramic membrane potentials for supporting three-phase catalytic reactions. *J. membr. sci.* [Print ed.], vol. 223, no. 1/2, str. 157-169. [COBISS.SI-ID 2908186]

*WAGNER, Ricardo, MITCHELL, David Alexander, LANZI SASSAKI, Guilherme, ALEMEIDA AMAZONAS, Angela Lopes de, BEROVIČ, Marin. Current techniques for the cultivation of *Ganoderma lucidum* for the production of biomass, ganoderic acid and polysaccharides. *Food technol. biotechnol.*, 2003, vol. 41, no. 4, str. 371-382, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25468165]

ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, ZAGORC-KONČAN, Jana. Hazard identification of pharmaceutical wastewaters using biodegradability studies. *Water sci. technol.*, 2003, vol. 47, no. 10, str. 197-204. [COBISS.SI-ID 25204997]

ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, ZAGORC-KONČAN, Jana. Comparison of diethylene glycol and phenol biodegradability by different test methods. *Arh. hig. rada toksikol.*, 2003, vol. 54, no. 3, str. 189-195, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25549317]

1.16 Samostojni znanstveni sestavek v monografiji / Independent Scientific Component Part in a Monograph

KOLOINI, Tine. Mass transfer in fermentation systems. V: BEROVIČ, Marin (ur.), KIERAN, Patricia (ur.). *Bioprocess engineering : doctoral/post-doctoral level course*. Ljubljana: Faculty of Chemistry and Chemical Technology, 2003, str. 95-112, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25423877]

MITCHELL, David, BEROVIČ, Marin. Solid state fermentations. V: BEROVIČ, Marin (ur.), KIERAN, Patricia (ur.). *Bioprocess engineering : doctoral/post-doctoral level course*. Ljubljana: Faculty of Chemistry and Chemical Technology, 2003, str. 202-230, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25427461]

PLAZL, Igor, PIPUŠ, Goran, KOLOINI, Tine. Parametric sensitivity of a dynamic model for single-stage wastewater treatment plant. V: AGATHOS, Spyridon Nicholas (ur.), REINEKE, Walter (ur.). *Biotechnology for the environment: wastewater treatment and modeling, waste gas handling*, (Focus on biotechnology, Vol. 3C). Dordrecht; Boston; London: Kluwer Academic, cop. 2003, str. 65-72. [COBISS.SI-ID 24952581]

PODGORNIK, Helena, PERDIH, Anton. The impact of sulfonation pattern on indigo degradation by *Phanerochaete chrysosporium* ligninolytic enzymes. V: ŠAŠEK, Václav (ur.), GLASER, John A. (ur.), BAVEYE, Philippe (ur.). *The utilization of bioremediation to reduce soil contamination : problems and solutions : proceedings of the NATO Advanced Workshop on the Utilization of Bioremediation to Reduce Soil Contamination: Problems and Solutions, held in Prague, Czech Republic, from 14 to 19 June 2000*, (NATO science series, 4, , Earth and environmental sciences, vol. 19.). Dordrecht; Boston; London: Kluwer Academic Publishers: Published in cooperation with NATO Scientific Affairs Division, cop. 2003, str. 135-142. [COBISS.SI-ID 24913413]

*POTOČNIK, Primož, GRABEC, Igor, ŠETINC, Marko, LEVEC, Janez. Hybrid modeling of kinetics for methanol synthesis. V: CARTWRIGHT, Hugh M. (ur.), SZTANDERA, Les M. *Soft computing approaches in chemistry*, (Studies in fuzziness and soft computing, 120). Berlin; Heidelberg; New York: Springer-Verlag, 2003, str. 295-315. [COBISS.SI-ID 5666331]

2.12 Končno poročilo o rezultatih raziskav / Final Research Report

ZAGORC-KONČAN, Jana, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, TIŠLER, Tatjana. *Študija biorazgradljivosti melaminskih smol (produktov MELAPRET PEA/A-1 in MELAPRET AAS 40/M)*. Ljubljana: Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za kemijsko, biokemijsko in ekološko inženirstvo, april 2003. 11 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 24952069]

ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, ZAGORC-KONČAN, Jana. *Karakterizacija farmacevtskih odpadnih voda : (Preiskava strupenosti in biorazgradljivosti odpadnih vod tovarne Lek d. d. Mengeš)*. Ljubljana: Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za kemijsko, biokemijsko in ekološko inženirstvo, september 2003. 63 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 25392133]

2.13 Elaborat, predstudija, študija / Treatise, Preliminary Study, Study

*BEROVIČ, Marin, VOKIĆ, Denis. *Primjena enzima u čišćenju dvaju slika Hansa Georga Geigerfelda iz Zagrebačke katedrale*. Ljubljana: [samozal.] M. Berovič, 2003. 26 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 25473541]

*NEMANIČ, Julij, KOCJANČIČ, Mitja, VRHOVŠEK, Urška, RESNIK, Mojca, BAVČAR, Dejan, WONDRA, Mojmir, BEROVIČ, Marin. *Pridelava vina brez uporabe SO₂ : CRP Zemlja (kmetijstvo in podeželje) : zaključno poročilo o rezultatih opravljenega raziskovalnega dela na projektu ciljnega raziskovalnega programa (CRP), (KIS - Poročila o raziskovalnih nalogah, 295)*. [Ljubljana]: Kmetijski inštitut Slovenije, 2003. 1 zv. (loč. pag.), tabele. [COBISS.SI-ID 1541736]

*TIŠLER, Tatjana, ROŠ, Milenko, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, MEDEN, Emil. *Preiskava biorazgradljivosti vzorcev odpadne vode papirniške industrije, (Delovno poročilo KI, 2215)*. Ljubljana: Kemijski inštitut, 13.jan.2003. 4 f. [COBISS.SI-ID 2773786]

KATEDRA ZA VARSTVO PRI DELU
CHAIR FOR SAFETY AT WORK

Predstojnik katedre / *Head*: **mag. Jože Šrekl**

Sodelavci katedre
Employees

Učitelji / Faculty

prof.dr. Vladimir Drusany
dr. Mitja Kožuh, viš.pred.
mag. Jože Šrekl, viš.pred.
mag. Aleš Jug, viš.pred.
mag. Tatjana Gazvoda, viš.pred. (1/3)
mag. Jože Šamu, viš.pred. (1/3)

Tehniki / Technicians

Miran Bamfi
Marjan Lukežič

Aplikativni projekti / Applied Research

- 404-09-17/2002-1 Primerjalna analiza grafičnih znakov za študije požarne varnosti in požarne rede /
Comparative Analysis of Graphical Symbols for Fire Safety Studies and Fire
safety Orders
Nosilec / *Principal Researcher*: mag. Jože Šrekl

Bibliografija / References

1.04 Strokovni članek / Professional Article

KOŽUH, Mitja. Uporaba računalniških programov pri modeliranju procesov in sistemov. *Delo + varnost*, okt. 2003, letn. 48, št. 5, str. 234-239. [COBISS.SI-ID 6582811] / The usage of computer programs for modelling process and system.

DROBNIČ VIDIC, Andreja. Tudi strokovne revije so lahko zelo dobro učno gradivo. *Delo + varnost*, feb. 2003, letn. 48, št. 1, str. 36-39, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 6096667] /

2.13 Elaborat, predštudija, študija / Treatise, Preliminary Study, Study

KOŽUH, Mitja, PEČKAJ, Marko, SIMONČIČ, Milan. *Energetski pregled bolnišnice Golnik - KOPA*, (IJS delovno poročilo, 8722). Ljubljana: Institut "Jožef Stefan", 2003. [COBISS.SI-ID 17522215] Power examination of Hospital Golnik-KOPA (IJS working report, 8722)

KOŽUH, Mitja, PEČKAJ, Marko, SIMONČIČ, Milan. *Energetski pregled Tekstilne tovarne Motvoz in platno d.d.*, (IJS delovno poročilo, 8731). Ljubljana: Institut "Jožef Stefan", 2003. [COBISS.SI-ID 17517351] Power examination of textile industry Motvoz in platno (IJS working report, 8722)