

Univerza v Ljubljani
Fakulteta za *kemijo in kemijsko tehnologijo*



ZNANSTVENO – RAZISKOVALNO DELO V LETU 2004

ANNUAL REVIEW 2004

Ljubljana, junij 2004

Znanstveno – raziskovalno delo v letu 2004

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

Uredila: prodekan izr. prof. dr. Matjaž Krajnc in Olga Belavič

Tisk: Tiskarna Univerze v Ljubljani

Ljubljana, junij 2004

Naklada: 200 izvodov

ISSN 1408-3213

KAZALO

UVOD.....	III
INTRODUCTION	III
DIPLOME / DIPLOMAS	1
UNIVERZITETNI ŠTUDIJ KEMIJE	1
KEMIJSKO IZOBRAŽEVANJE	4
UNIVERZITETNI ŠTUDIJ BIOKEMIJE	4
UNIVERZITETNI ŠTUDIJ KEMIJSKEGA INŽENIRSTVA	7
VISOKOŠOLSKE DIPLOME.....	11
MAGISTERIJI / MASTER THESES	21
KEMIJA	21
KEMIJSKA TEHNOLOGIJA	21
KEMIJSKO INŽENIRSTVO	21
DOKTORATI / DOCTORAL THESES	23
KEMIJA	23
KEMIJSKO INŽENIRSTVO	24
MATERIALI	25
PREGLED PROJEKTOV ZA LETO 2004	27
RESEARCH PROJECTS OVERVIEW IN YEAR 2004.....	27
PREGLED PROGRAMOV ZA LETO 2004.....	29
RESEARCH PROGRAMMES OVERVIEW IN YEAR 2004	29
SINTEZE IN TRANSFORMACIJE ORGANSKIH SPOJIN. NOVI REAGENTI V STEREOSELEKTIVNI IN REGIOSELEKTIVNI SINTEZI AMINOKISLIN KOT INTERMEDIATOV V ORGANSKI SINTEZI..	31
SYNTHESSES AND TRANSFORMATIONS OF ORGANIC COMPOUNDS. NEW REAGENTS IN STEREOSELECTIVE AND REGIOSELECTIVE SYNTHESIS OF AMINO ACIDS AS INTERMEDIATES IN ORGANIC SYNTHESIS.....	31
ORGANSKA KEMIJA: SINTEZA, STRUKTURA IN APLIKACIJA.....	35
ORGANIC CHEMISTRY: SYNTHESIS, STRUCTURE, AND APPLICATION	35
ANALIZNA KEMIJA	41
ANALYTICAL CHEMISTRY.....	41
FIZIKALNA KEMIJA	45
PHYSICAL CHEMISTRY.....	45
BIOANORGANSKA IN BIOORGANSKA KEMIJA	49
BIOINORGANIC AND BIOORGANIC CHEMISTRY	49
KEMIJSKO INŽENIRSTVO	53
CHEMICAL ENGINEERING	53
SINTEZA, STRUKTURA, LASTNOSTI SNOVI IN MATERIALOV.....	61
SYNTHESIS, STRUCTURE, PROPERTIES OF THE COMPOUNDS AND MATERIALS	61
KATEDRA ZA ANORGANSKO KEMIJO	63
CHAIR OF INORGANIC CHEMISTRY.....	63
KATEDRA ZA ORGANSKO KEMIJO.....	69
CHAIR OF ORGANIC CHEMISTRY	69
KATEDRA ZA ANALIZNO KEMIJO.....	73
CHAIR OF ANALYTICAL CHEMISTRY	73

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

UVOD

V poročilu Fakultete za kemijo in kemijsko tehnologijo za leto 2004 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 MVŠZT, 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.

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

INTRODUCTION

The Annual Review of scientific research work presents the achievements of the Faculty of Chemistry and Chemical Technology in 2004. It gives an overview of the diploma works, master and doctoral theses, followed by the reports of research units and individual organisational units. The report presents the results of scientific and professional achievements, as well as some other activities, e.g. professional visits of foreign scientists, organisation of professional meetings and a survey of basic and applied projects, financed by the Ministry of Education, Science and Sports. Included are also international projects and our cooperation with the industry. Based on the results, and considering less favourable conditions we were working in (e.g. work space conditions, less young researchers), we can conclude that the Faculty has achieved good results which represent a solid foundation for quality post-graduate education.

Assoc. Prof. Matjaž Krajnc, PhD
Vice-Dean for research and postgraduate studies

DIPLOME / DIPLOMAS

UNIVERZITETNI ŠTUDIJ KEMIJE

Urban BREN

Mentor: prof. dr. Jože Koller

RAZVOJ EMPIRIČNEGA POTENCIALA ZA MOLEKULO NETROPSINA

Datum zagovora: 14. 5. 2004

Marijanca BAHAR

Mentorica: prof. dr. Metka Renko

DOLOČANJE ZNOTRAJCELIČNIH TARČ BESTATINA V LEVKEMIČNIH CELICAH

Datum zagovora: 29. 9. 2004

Ana BERGANT

Mentor: doc. dr. Janez Cerkovnik

OKSIDACIJE FOSFINOV Z ORGANSKIMI HIDROPEROKSIDI IN HIDROTRIOKSIDI

Datum zagovora: 9. 9. 2004

Alma BUNIĆ

Mentor: prof. dr. Marijan Kočevvar

SINTEZA HETEROCIKLIČNIH α,β -DIDEHIDRO- α -AMINOKISLINSKIH DERIVATOV

Datum zagovora: 29. 9. 2004

Črtomir DONIK

Mentor: prof. dr. Boris Pihlar

VPLIV RADIOAKTIVNIH ODPADKOV NA KOROZIJSKO ODPORNOST NERJAVNIH JEKEL

Datum zagovora: 19. 4. 2004

Tadej GEC

Mentor: prof. dr. Anton Meden

RENTGENSKA STRUKTURNA ANALIZA RAZLIČNIH HETEROCIKLIČNIH ORGANSKI SPOJIN

Datum zagovora: 2. 7. 2004

Boštjan GENORIO

Mentor: prof. dr. Marijan Kočevvar

Somentor: prof. dr. Ivan Leban

SAMOESTAVLJIVE NANOCEVKE NA OSNOVI NUKLEINSKIH KISLIN KOT

SUPRAMOLEKUL II

Datum zagovora: 28. 6. 2004

Saša HROVAT

Mentor: doc. dr. Dušan Turk

PRIPRAVA IN IZRAŽANJE ČLOVEŠKEGA KATEPSINA S IN NJEGOVE MUTANTE D104Y V

KVASOVKI *Pichia pastoris*

Datum zagovora: 14. 6. 2004

Nina HUDOBIVNIK

Mentor: prof. dr. Boris Šket

VPLIV TOPILA NA FOTOLIZO 1,2-DIFENIL-2-HALOETANONOV

Datum zagovora: 25. 11. 2004

Jernej HVALA**Mentor: doc. dr. Matija Strlič**OPTIMIZACIJA DOLOČEVANJA AMINOKISLINSKE SESTAVE S TEKOČINSKO
KROMATOGRAFIJO

Datum zagovora: 27. 2. 2004

Jernej JORGAČEVSKI**Mentor: doc. dr. Igor Križaj**SPREMLJANJE INTERAKCIJE MED KALMODULINOM IN AMODITOKSINOM C S POMOČJO
LASERSKE PINCETE

Datum zagovora: 4. 10. 2004

Žiga KALČIČ**Mentor: prof. dr. Roman Jerala**

VEZAVA LIGANDOV NA CD14

Datum zagovora: 8. 7. 2004

Andreja KERIN**Mentor: prof. dr. Radovan Komel**

VPLIV NEESENCIJALNIH GENOV NF11, ECM11 IN SAP1 NA DOLŽINO TELOMEROV PRI

KVASOVKI *Saccharomyces cerevisiae*

Datum zagovora: 10. 12. 2004

Anton KOČEVAR**Mentor: prof. dr. Anton Meden**DOLOČITEV STRUKTUR TREH NOVIH SPOJIN V SISTEMU $\text{Bi}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2\text{-TeO}_2$ Z RENTGENSKO
PRAŠKOVNO DIFRAKCIJO

Datum zagovora: 21. 4. 2004

Tanja KOLEŠA**Mentorica: doc. dr. Nataša Gros**

ŠTUDIJ PROCESOV V NARAVNIH VODAH

Datum zagovora: 3. 9. 2004

Špela KONJAR**Mentor: prof. dr. Vito Turk**KARAKTERIZACIJA APOPTOZE SPROŽENE V CELICAH SH-SY5Y Z LIZOSOMOTROPNO
SNOVJO LeuLeuOMe

Datum zagovora: 8. 9. 2004

David KRALJ**Mentor: prof. dr. Jurij Svetec**

PRIPRAVA NOVIH INTERMEDIATOV V SINTEZI APLISINOPSINSKIH ANALOGOV

Datum zagovora: 2. 9. 2004

Martina MAKŠE**Mentorica: doc. dr. Barbara Modec**PRIPRAVA IN KARAKTERIZACIJA KOORDINACIJSKIH SPOJIN MOLIBDENA(V) Z
ACETATNIM IN FORMATNIM IONOM

Datum zagovora: 14. 4. 2004

Mitja MARTELANC**Mentor: prof. dr. Marijan Kočvar**

PRETVORBE NEKATERIH DERIVATOV BICIKLO[2.2.2]OKTENA S HIDRAZINI

Datum zagovora: 6. 9. 2004

Elizabeta MATE**Mentor: prof. dr. Primož Šegedin**

SINTEZA IN KARAKTERIZACIJA KOORDINACIJSKIH SPOJIN BAKRA Z METANOATNIM IONOM IN 2-METILPIRIDINOM

Datum zagovora: 12. 5. 2004

Andreja MOŠET ZUPAN**Mentor: doc. dr. Barbara MODEC**

REAKCIJE ENOJEDRNIH OKSOHALOMOLIBDATOV (V) Z RAZLIČNIMI KISIKOVIMI LIGANDI

Datum zagovora: 15. 12. 2004

Matej OŠLAJ**Mentor: doc. dr. Dušan Turk**

PRIPRAVA IN IZRAŽANJE MUTANT FRAGMENTA P41 INVARIANTNE VERIGE MHC II POGLAVITNEGA HISTOKOMPATIBILNOSTNEGA KOMPLEKSA

Datum zagovora: 6. 9. 2004

Jasminka PAVLINAC**Mentor: prof. dr. Marko Zupan**

HALOGENIRANJE NEKATERIH BIOMIMETSKIH MODELNIH MOLEKUL IZ SKUPINE METOKSI SUBSTITUIRANIH BENZENOVIH DERIVATOV

Datum zagovora: 30. 6. 2004

Vanja PEROVŠEK**Mentor: prof. dr. Andrej Petrič**

SINTEZA FLUORESCENTNIH DERIVATOV CIKLOPENTA[a]NAFTALENA

Datum zagovora: 13. 7. 2004

Ajda PODGORŠEK**Mentor: prof. dr. Marko Zupan**

ŠTUDIJ UPORABE FLUORNEGA TOPILA ZA DIFUZIJSKO KONTROLIRANO RADIKALSKO BROMIRANJE METILBENZENSKIH DERIVATOV

Datum zagovora: 21. 6. 2004

Urška POŽGAN**Mentor: prof. dr. Vito Turk**

AKTIVACIJA PROVNETNIH KASPAZ Z REKOMBINANTNIM ČLOVEŠKIM KATEPSINOM B

Datum zagovora: 2. 9. 2004

Marjeta RADIŠEK**Mentor: prof. dr. Primož Šegedin**

SINTEZA IN KARAKTERIZACIJA KOORDINACIJSKIH SPOJIN BAKRA Z METANOATNIM IONOM IN 2-HIDROKSIPIRIDINOM

Datum zagovora: 8. 7. 2004

Andreja RAZPET**Mentorica: prof. dr. Lucija Zupančič-Kralj**

RAZGRADNJA INSEKTICIDOV Z RENTGENSKIMI ŽARKI

Datum zagovora: 3. 9. 2004

Miha RENKO**Mentor: doc. dr. Dušan Turk**

KLONIRANJE IN IZRAŽANJE UGOTOVLJENE MUTANTE KATEPSINA C PRI ČLOVEKU

Datum zagovora: 13. 7. 2004

Petra SAMASTUR

Mentor: prof. dr. Iztok Turel

RAZISKAVE RUTENIEVIH KOMPLEKSOV Z DUŠIK VSEBUJOČIMI LIGANDI

Datum zagovora: 19. 5. 2004

Sabina SROVIN

Mentorica: doc. dr. Barbara Modec

SINTEZA, KARAKTERIZACIJA IN REAKTIVNOST OKSOVOLFRAMOVIH(V) IN

OKSOMOLIBDENOVIH(V) SPOJIN

Datum zagovora: 26. 3. 2004

Gaj STAVBER

Mentor: prof. dr. Marko Zupan

FLUORIRANJE ORGANSKIH MOLEKUL S SELECTFLUOR™ F-TEDA-BF₄ V VODI

Datum zagovora: 30. 6. 2004

Katja ŠKERGET

Mentorica: prof. dr. Vladka Čurin Šerbec

VPLIV POLIMORFIZMA GENOV HLA II. RAZREDA NA DOVZETNOST ZA MULTIPLO SKLEROZO V KOČEVSKI POPULACIJI

Datum zagovora: 2. 9. 2004

Tina ŠMUC

Mentor: prof. dr. Franc Gubenšek

IZOLACIJA IN KARAKTERIZACIJA REKOMBINANTNE ČLOVEŠKE HIDROKSISTEROID-DEHIDROGENAZE AKR1C3 IN ŠTUDIJE IZRAŽANJA GENA AKR1C3 PRI RAKU

ENDOMETRIJA

Datum zagovora: 6. 9. 2004

Uroš URŠIČ

Mentor: akademik prof. dr. Branko Stanovnik

SINTEZA IN PRETVORBE 1-BENZIL 6-METIL (2S)-2-{[(BENZILOKSI)KARBONIL]AMINO}-4-OKSOHEKSANDIOATA

Datum zagovora: 9. 6. 2004

KEMIJSKO IZOBRAŽEVANJE

Natalija BOHINC

Mentorica: prof. dr. Margareta Vrtačnik

UČENJE IN POUČEVANJE KEMIJE Z UPORABO MEDMREŽJA

Datum zagovora: 29. 9. 2004

UNIVERZITETNI ŠTUDIJ BIOKEMIJE

Petra BOHANEC

Mentorica: prof. dr. Katja Breskvar

VPLIV GENSKIH POLIMORFIZMOV V PRESNOVNI POTI FOLATA NA TVEGANJE ZA AKUTNO LIMFATIČNO LEVKEMIJO PRI OTROCIH

Datum zagovora: 17. 6. 2004

Jani BOŽIČ**Mentor: doc. dr. Igor Križaj**

PROTEIN-DISULFID-IZOMERAZA IZ PRAŠIČJE MOŽGANSKE SKORJE – IZOLACIJA IN TEST INTERAKCIJE Z AMODITOKSINOM C

Datum zagovora: 19. 11. 2004

Maja CAPUDER**Mentor: doc. dr. Matic Legiša**SINTEZA AKTIVNEGA FRAGMENTA 6-FOSFOFRUKTO-1-KINAZE IZ SKRAJŠANEGA GENA pfkA GLIVE *Aspergillus niger*

Datum zagovora: 8. 10. 2004

Petra DRAŠKOVIČ**Mentor: prof. dr. Radovan Komel**

IZOLACIJA IN KARAKTERIZACIJA REKOMBINANTNE MIŠJE INOZITOLHEKSAKISFOSFAT-KINAZE

Datum zagovora: 21. 6. 2004

Matevž GOBEC**Mentor: prof. dr. Tatjana Avšič - Županc**DOLOČANJE VIRUSA KLOPNEGA MENINGOENCEFALITISA V KLOPIH *Ixodes ricinus*

Datum zagovora: 17. 12. 2004

Gorazd HRIBAR**Mentor: doc. dr. Roman Jerala**

KLONIRANJE IZVENCeliČNE DOMENE ČLOVEŠKEGA RECEPTORJA TLR4

Datum zagovora: 10. 9. 2004

Gregor ILC**Mentor: doc. dr. Janez Plavec**

VPLIV MODIFIKACIJ NA GVANINSKEM OBROČU NA TVORBO G-KVADRUPLEKSOV

Datum zagovora: 13. 7. 2004

Urška JAMNIKAR**Mentor: doc. dr. Marko Dolinar**

DOKAZOVANJE PESTIVIRUSOV Z METODO VERIŽNE REAKCIJE S POLIMERAZO V REALNEM ČASU

Datum zagovora: 2. 9. 2004

Nejc JELEN**Mentor: prof. dr. Radovan Komel****Somentorica: prof. dr. Damjana Rozman**

PRIPRAVA IN ANALIZA DNA MIKROMREŽ HOMEOSTAZE HOLESTEROLA

Datum zagovora: 21. 6. 2004

Saša KENIG**Mentorica: prof. dr. Tamara Lah Turnšek**

TRANSKRIPCIJSKE RAZLIČICE KATEPSINA L V TUMORSKIH CELIČNIH LINIJAH DOJKE IN MOŽGANOV

Datum zagovora: 1. 7. 2004

Katja KERČ**Mentor: doc. dr. Marko Dolinar**

PRIPRAVA REKOMBINANTNEGA ČLOVEŠKEGA PROKATEPSINA W IN POSKUS NJEGOVE AKTIVACIJE

Datum zagovora: 24. 9. 2004

Simon KOREN**Mentorica: prof. dr. Vladka Čurin Šerbec**

DOLOČANJE PRIONSKEGA PROTEINA V ČLOVEŠKI KRVI

Datum zagovora: 10. 6. 2004

Lidija KOVAČIČ**Mentor: doc. dr. Janez Košmrlj**

PRIPRAVA IN CITOTOKSIČNE LASTNOSTI Z IMIDAZOLOM ALI PIRIDINOM

SUBSTITUIRANIH DIAZENKARBOKSAMIDOV

Datum zagovora: 21. 6. 2004

Maruša LOKAR**Mentor: prof. dr. Vito Turk****Somentor: doc. dr. Boris Turk**

Karakterizacija apoptoze, inducirane s čezmernim izražanjem

proapoptotkih Bcl-2 homologov Bax in Bak, pri celični liniji Hek293

Datum zagovora: 25. 8. 2004

Janja LUKAČ**Mentorica: prof. dr. Jana Lukač-Bajalo**

Ugotavljanje alelske frekvence najpogostejših mutacij v genu za

galaktoza-1-fosfat uridiltransferazo v slovenski populaciji

Datum zagovora: 2. 7. 2004

Tina MAVEC**Mentorica: prof. dr. Jana Lukač-Bajalo**

Ugotavljanje pogostosti gibertovega sindroma v slovenski populaciji

Datum zagovora: 16. 9. 2004

Miha MILEK**Mentorica: prof. dr. Jana Lukač Bajalo****Somentorica: doc. dr. Irena Mlinarič Raščan**

Povezava med genskim polimorfizmom in encimsko aktivnostjo tiopurin-s-metiltransferaze

Datum zagovora: 10. 9. 2004

Nina MOHORKO**Mentorica: doc. dr. Mara Bresjanac**

Bisbenzimid Hoechst 33342 kot celični označevalci: preizkus na modelu

podganjih stromalnih celic kostnega mozga in vitro

Datum zagovora: 28. 6. 2004

Marko NOVINEC**Mentorica: prof. dr. Brigit Lenarčič**

kloniranje in izražanje smoc-1 in njegovih tiroglobulinskih domen

Datum zagovora: 21. 6. 2004

Anja PUCER**Mentorica: prof. dr. Jasna Štrus**

interakcija kадмија in metalotioneinov v humanih astrocitomih

Datum zagovora: 3. 6. 2004

Mario ŠIMIĆ**Mentor: doc. dr. Jurij Lah**

Termodynamска stabilnost proteina MazE, ki sodeluje pri programirani

celični smrti bakterij

Datum zagovora: 17. 3. 2004

Tomaž VAUPOTIČ**Mentorica: prof. dr. Vladka Čurin - Šerbec**OPTIMIZACIJA PRESEJALNEGA TESTA ZA DOLOČANJE MUTACIJ V GENU *HFE* Z UPORABO*PCR* V REALNEM ČASU

Datum zagovora: 26. 8. 2004

Anja VENTURINI**Mentorica: prof. dr. Vladka Čurin - Šerbec**

IZBIRA IN DOLOČITEV LASTNOSTI MONOKLONSKIH PROTITELES PROTI

REKOMBINANTNEMU HUMANEMU PRIONSKEMU PROTEINU

Datum zagovora: 10. 6. 2004

Alja VIDETIČ**Mentor: prof. dr. Radovan Komel**

PREISKAVA MIKROSATELITSKIH OBMOČIJ DNA PRI RAKU ŽELODCA

Datum zagovora: 30. 8. 2004

Matjaž VOGELSANG**Mentor: prof. dr. Radovan Komel**FUNKCIJSKA ANALIZA MUTACIJE G274C ČLOVEŠKEGA GENA *MLH1* V KVASOVKI*Saccharomyces cerevisiae*

Datum zagovora: 10. 9. 2004

Kristina ŽUMER**Mentor: prof. dr. Franc Gubenšek****Somentor: doc. dr. Peter Stušek**SPREMLJANJE OKSIDATIVNEGA METABOLIZMA IZOLIRANE MIŠICE Z DINAMIČNO
DIFERENČNO OPTIČNO SPEKTROSKOPIO

Datum zagovora: 9. 7. 2004

UNIVERZITETNI ŠTUDIJ KEMIJSKEGA INŽENIRSTVA**Monja BAŠELJ****Mentor: prof. dr. Aleksander Pavko**VPLIV STRUKTURNEGA MATERIALA NA POTEK KOMPOSTIRANJA BIOLOŠKIH
ODPADKOV IZ FARMACEVTSKE INDUSTRIJE

Datum zagovora: 30. 6. 2004

Nina BEGUŠ**Mentor: prof. dr. Matjaž Krajnc**STATISTIČNA ANALIZA VPLIVA TKANINE IN IZOCIANATA NA KVALITETO VEZAVE
GUMENEGA KOMPOZITA

Datum zagovora: 15. 11. 2004

Marjetka CIZELJ**Mentorica: doc. dr. Andreja Zupančič-Valant**

ZGOŠČEVANJE MIKROEMULZIJ OLJA V VODI

Datum zagovora: 11. 6. 2004

Miha DEBELAK**Mentor: prof. dr. Janvit Golob**

KARAKTERIZACIJA PRODUKTA PRI PROCESU OBARJANJA KALCIJEVEGA KARBONATA ZA POTREBE PAPIRNE INDUSTRIJE

Datum zagovora: 23. 12. 2004

Marjan DOLAR**Mentor: prof. dr. Viktor Grilec**

POSTOPKI IN TEHNIKE RECIKLIRANJA PAPIRJA

Datum zagovora: 19. 3. 2004

Vesna FLIS**Mentor: prof. dr. Valentin Koloini**

VLAŽENJE, OGREVANJE IN HLAJENJE PROCESNEGA ZRAKA MED FERMENTACIJO

Datum zagovora: 27. 2. 2004

Andrej FOJKAR**Mentor: prof. dr. Aleksander Pavko**

OMAKANJE MEDICINSKIH MAVČNIH POVOJEV

Datum zagovora: 26. 3. 2004

Armin GORJUP**Mentor: prof. dr. Janvit Golob**

KALCINACIJA APNENCA IN HIDRATACIJA ŽGANEGA APNA

Datum zagovora: 15. 11. 2004

Jože GRANDOVEC**Mentor: prof. dr. Valentin Koloini**

PRENOS TOPLOTE IN SNOVI MED ZRAKOM IN VODNIM MEDIJEM V KOLONI Z MEHURČKI

Datum zagovora: 28. 9. 2004

Eva HACE**Mentor: prof. dr. Janvit Golob**

PRIDOBIVANJE OBORJENEGA KALCIJEVEGA KARBONATA S KARBONATIZACIJO

APNENEGA MLEKA ZA UPORABO V PAPIRNI INDUSTRIJI

Datum zagovora: 26. 10. 2004

Sanja IGNJATOVIĆ**Mentor: prof. dr. Miha Žumer**

MEŠANJE VISKOZNIH TEKOČIN Z RADIALNIM MEŠALOM

Datum zagovora: 13. 2. 2004

Gabrijela JURGL**Mentor: prof. dr. Marin Berovič**MOŽNOSTI UPORABE POTENCIOMETRIČNEGA SENZORJA ZA DOLOČANJE SO₂ V VINIH

Datum zagovora: 14. 6. 2004

Gregor KEPEC**Mentorica: doc. dr. Andreja Zupančič-Valant**

VPLIV STOPNJE DISPERGIRANosti PIGMENTOV NA REOLOŠKE LASTNOSTI PREMAZOV Z VISOKO VSEBNOSTJO TRDNIH DELCEV

Datum zagovora: 2. 2. 2004

Andraž KOCJAN**Mentor: prof. dr. Matjaž Krajnc**

MATEMATIČNI MODEL POLIMERIZACIJE STIRENA V KONTINUIRANEM MEŠALNEM REAKTORJU

Datum zagovora: 17. 6. 2004

Jakob KÖNIG**Mentor: prof. dr. Jadran Maček**

IZLOČANJE OGLIKA NA ANODNIH MATERIALIH VISOKOTEMPERATURNIH GORIVNIH CELIC

Datum zagovora: 15. 6. 2004

Rok KOSEC**Mentor: prof. dr. Matjaž Krajnc**

VPLIV PROCESNIH PARAMETROV NA PROCES IMPREGNACIJE OJAČITVENE TKANINE V GUMENEM KOMPOZITU

Datum zagovora: 24. 5. 2004

Željko KOVAČEVIĆ**Mentor: prof. dr. Matjaž Krajnc**

VPLIV KATALIZATORJA NA SINTEZO POLIESTRA ZA KOVINSKI PREMAZ IN POLIURETANSKO PENO

Datum zagovora: 22. 12. 2004

Sabina KRALJ**Mentor: prof. dr. Marin Berovič**

VPLIV GLUKOZE NA FERMENTACIJSKI PROCES Z MIKROORGANIZMOM STREPTOMYCES ALBUS

Datum zagovora: 24. 5. 2004

Blaž LIKOZAR**Mentor: prof. dr. Matjaž Krajnc**

PRIMERJAVA KONTROLIRANE IN KONVENCIONALNE POLIMERIZACIJE STIRENA

Datum zagovora: 10. 9. 2004

Manca LOGAR**Mentor: prof. dr. Jadran Maček**

POOGLJIČENJE ANODNEGA MATERIALA ZA GORIVNE CELICE

Datum zagovora: 29. 9. 2004

Urška MUHIČ**Mentor: prof. dr. Janvit Golob**

TEHNOLOŠKO-EKOLOŠKA PROBLEMATIKA PEKARSKE INDUSTRIJE

Datum zagovora: 30. 6. 2004

Jernej PALČIČ**Mentor: prof. dr. Aleksander Pavko**

VPLIV SESTAVE GOJIŠČA NA BIOSINTEZO hG-CSF V BAKTERIJI E.coli OB UPORABI

EKSPRESIJSKEGA SISTEMA T7

Datum zagovora: 22. 12. 2004

Benjamin PODMILJŠAK**Mentor: prof. dr. Stane Pejovnik**

ŠTUDIJ LASTNOSTI MAGNETNIH PRAHOV NA OSNOVI NITRIDOV ZLITIN Sm-Fe in Sm-Fe-Ta

Datum zagovora: 5. 3. 2004

Jasna POTOČAR**Mentor: prof. dr. Marin Berovič**

PRODUKCIJA PROTEINA LZ-8 Z GLIVO GANODERMA LUCIDUM V SUBMERZNI

FERMENTACIJI

Datum zagovora: 2. 4. 2004

Mateja POTOČNIK**Mentor: prof. dr. Marin Berovič****Somentorica: prof. dr. Jasna Štrus**

VPLIV GALVANSKEGA POLJA NA METABOLIZEM VINSKE KVASOVKE V FERMENTACIJI

GROZDNEGA MOŠTA

Datum zagovora: 19. 1. 2004

Tatjana POVŠE**Mentor: prof. dr. Marin Berovič**

ŠTUDIJA RAZPADA SALINOMICINA

Datum zagovora: 1. 7. 2004

Gregor PRAH**Mentor: prof. dr. Stane Pejovnik**

RAZVOJ NAPRAVE ZA DOLOČANJE PREPUSTNOSTI KISIKA V POLIMERNIH FILMIH

Datum zagovora: 6. 7. 2004

Leila RAMADAN**Mentor: prof. dr. Matjaž Krajnc**

ŠTUDIJ PROCESA SINTEZE FENOL-SEČNINSKO-FORMALDEHIDNIH SMOL

Datum zagovora: 8. 7. 2004

Sonja RIBIČ**Mentorica: doc. dr. Ana Lakota Družina**

ANALIZA DELEŽA PLINA V KOLONI Z MEHURČKI PRI OBRATOVANJU S TEKOČINO Z UPADAJOČO VISKOZNOSTJO

Datum zagovora: 6. 7. 2004

Ksenija SLATNAR**Mentor: prof. dr. Janvit Golob**

LOČEVANJE KOMPONENT LUŽNICE IZ POSTOPKA PRIDOBIVANJA FARMACEVTSKE UČINKOVINE

Datum zagovora: 8. 7. 2004

Aleš SOPČIČ**Mentor: prof. dr. Janvit Golob**

DESORPCIJA PROSTIH MAŠCOBNIH KISLIN IZ JEDILNEGA OLJA

Datum zagovora: 15. 11. 2004

Saša ŠIJK**Mentor: prof. dr. Janvit Golob**

PREDCIŠČENJE IN BIORAZGRADLJIVOST ODPADNE VODE IZ PROIZVODNJE SMOL

Datum zagovora: 23. 4. 2004

Kajetan TROŠT**Mentor: prof. dr. Marin Berovič**

ŠTUDIJ OKSIDACIJE IN NEENCIMSKEGA TEMNENJA SOKOV IZ CITRUSOV

Datum zagovora: 13. 1. 2004

Tina VIHER**Mentor: prof. dr. Janvit Golob**INŽENIRSKA ANALIZA INTEGRIRANEGA RAZPRŠILNEGA SUŠILNIKA V PROIZVODNJI
NATRIJEVEGA TRIPOLIFOSFATA

Datum zagovora: 30. 9. 2004

Matej ŽINKO**Mentor: prof. dr. Janvit Golob**INŽENIRSKA ANALIZA PROIZVODNJE GUMENIH PROFILOV Z OPTIMIZACIJO
TEHNOLOGIJE MEŠANJA

Datum zagovora: 16. 4. 2004

VISOKOŠOLSKE DIPLOME**KEMIJSKA TEHNOLOGIJA****Janez AMBROŽ****Mentorica: prof. dr. Jana Zagorc-Končan**POSTOPEK ČIŠČENJA IZRABLJENEGA PREPARATA ULTRAZVOČNE KOPELI PROIZVODNJE
ALUMINIJEVIH ODLITKOV

Datum zagovora: 1. 7. 2004

Vesna ARRIGLER**Mentorica: doc. dr. Ksenija Kogej**VGRAJEVANJE KATIONSKIH POVRŠINSKO AKTIVNIH SNOVI V LIPIDNE MEHURČKE
CELIČNE VELIKOSTI

Datum zagovora: 22. 4. 2004

Dejan BAJŽELJ**Mentor: prof. dr. Matjaž Krajnc**

OPTIMIZACIJA MLETJA PIGMENTNIH PAST

Datum zagovora: 13. 5. 2004

Polonca BAŠKOVIĆ**Mentor: prof. dr. Primož Šegedin**KOORDINACIJSKE SPOJINE BAKRA Z MODELNIMA SPOJINAMA ZA LIGNIN IN
NIKOTINAMIDOM

Datum zagovora: 1. 3. 2004

Majda BIZJAK**Mentor: prof. dr. Stane Pejovnik**

KOROZIJA IN GALVANSKI NANOS CINKA

Datum zagovora: 18. 6. 2004

Vjekoslava CAR**Mentorica: prof. dr. Lucija Zupančič-Kralj**ČIŠČENJE PRAVASTATINA Z IZPODRINJEVALNO PREPARATIVNO TEKOČINSKO
KROMATOGRAFIJO

Datum zagovora: 25. 2. 2004

Karmen ČERKIĆ**Mentor: prof. dr. Andrej Petrič**DOLOČITEV BIOLOŠKE AKTINVNOSTI MONOMERNE IN OLIGOMERNIH OBLIK
FILGRASTIMA

Datum zagovora: 7. 7. 2004

Danijela ČURMAN**Mentor: prof. dr. Iztok Turel**

INTERAKCIJE KINOLONOV Z Bi(III), Eu(III), Mn(II) in Zr(IV)

Datum zagovora: 7. 4. 2004

Katja DIMC**Mentor: prof.dr. Matjaž Krajnc**

ŠTUDIJ PROCESA SINTEZE REZOLNIH SMOL Z »IN LINE« IR SPEKTROSKOPSKO METODO

Datum zagovora: 24. 3. 2004

Ivan ERENDA**Mentor: prof. dr. Anton Gantar**

UPORABA STATISTIČNIH METOD PRI KONTROLI IN IZBOLJŠANJU KAKOVOSTI USNJA

Datum zagovora: 15. 7. 2004

Sanja EROR**Mentor: prof. dr. Primož Šegedin**

POSKUSI SINTEZE IN KARAKTERIZACIJE NOVIH KOORDINACIJSKIH SPOJIN BAKRA Z METANOATNIM IONOM IN 2-AMINOPIRIDINOM

Datum zagovora: 22. 4. 2004

Nataša FILIPIČ**Mentor: prof. dr. Matjaž KRAJNC**

STRANSKOVERIŽNI TEKOČEKRISTALINIČNI POLIESTRI Z MEZOGENO ENOTO V DIOLNI IN KISLINSKI KOMPONENTI

Datum zagovora: 21. 12. 2004

Klara FORTE**Mentor: doc. dr. Matija Strlič**

PRESOJA NEKATERIH POSTOPKOV ZA STABILIZACIJO PAPIRJA Z ŽELEZO-TANINSKIM ČRNILOM

Datum zagovora: 19. 7. 2004

Aleš GANTAR**Mentor: doc.dr. Anton Gantar**

TISKANJE NA SESTAVNE DELE OBUTVE IZ POLIMERNIH MATERIALOV

Datum zagovora: 11. 3. 2004

Alenka KALEM**Mentor: prof. dr. Primož Šegedin**

SINTEZA IN KARAKTERIZACIJA MONOMERNE KOORDINACIJSKE SPOJINE BAKRA Z METANOATNIMI IONI IN 2-AMINOPIRIDINOM

Datum zagovora: 3. 3. 2004

Brigita KASTELIC**Mentorica: doc. dr. Nataša Gros**

VREDNOTENJE ANALIZNE METODE ZA DOLOČANJE KONCENTRACIJE ADSORBLJIVIH HALOGEN VSEBUJOČIH ORGANSKIH SPOJIN V ODPADNIH VODAH

Datum zagovora: 14. 10. 2004

Domen KLANČAR**Mentorica: doc. dr. Nataša GROS**

VPLIV SPREMENJENIH LASTNOSTI TRIBARVNE SVETLEČE DIODE NA SPEKTROMETRIČNE POSTOPKE

Datum zagovora: 23. 12. 2004

Tatjana KOBAL**Mentor: prof. dr. Primož Šegedin**

KOORDINACIJSKE SPOJINE BAKRA(II) Z 1,2,4-TRIAZOLOM

Datum zagovora: 23. 6. 2004

Dušan KOMEL**Mentor: prof. dr. Marin Berovič**

ŠTUDIJ ALKOHOLNE FERMENTACIJE V STACIONARNEM IN MEŠALNEM REAKTORJU

Datum zagovora: 9. 4. 2004

Špela Mateja KURNIK**Mentor: doc.dr. Anton Gantar**

IZDELAVA ELASTIČNEGA VELUR USNJA

Datum zagovora: 11. 3. 2004

Simon MATJAŽIČ**Mentor: prof. dr. Boris Čeh**PRODUKTI OKSIDACIJE ($\text{pic}_2\text{H}[\text{Mo}(\text{NCS})_4\text{pic}_2]$)

Datum zagovora: 5. 2. 2004

Alenka MOŽIR**Mentor: doc. dr. Matija Strlič**

PRESOJA METODE DOLOČANJA VSEBNOSTI VLAGE V PAPIRJU Z BLIŽNJO INFRARDEČO SPEKTROSKOPIO

Datum zagovora: 22. 9. 2004

Barbara MUSTAR**Mentor: prof. dr. Marjan Weber**

UPORABA HPLC TEHNIK ZA TESTIRANJE STABILNOSTI FARMACEVTSKEGA IZDELKA

Datum zagovora: 18. 2. 2004

Tanja MUŠIČ**Mentor: prof. dr. Marijan Kočevar**

KRISTALIZACIJA XP01

Datum zagovora: 7. 7. 2004

Anita PLANINC**Mentorica: prof. dr. Jana Zagorc - Končan**

SANACIJA INDUSTRIJSKE ČISTILNE NAPRAVE V KOVINSKO PREDELOVALNEM PODJETJU

Datum zagovora: 17. 12. 2004

Klavdija PUCELJ**Mentor: prof. dr. Stane Pejovnik**

VGRAJEVANJE PLATINE V ANODNI KOMPOZIT

Datum zagovora: 6. 7. 2004

Saša SODNIK**Mentor: prof. dr. Alojz Demšar**

TERMIČNA ANALIZA USNJA IN STROJILNIH SREDSTEV

Datum zagovora: 3. 12. 2004

Andreja SPOLENAK**Mentorica: doc. dr. Nataša Gros**

VALIDACIJA METODE ZA DOLOČANJE VSEBNOSTI KROMA(VI) V TALNIH VZORCIH

Datum zagovora: 20. 9. 2004

Andreja STANIŠA

Mentor: doc. dr. Nataša GROS

VALIDACIJA ČIŠČENJA KADIC PO TESTU RAZTAPLJANJA UČINKOVINE IZ TRDNIH FARMACEVTSKIH OBLIK

Datum zagovora: 17. 12. 2004

Damjan VERDEV

Mentor: prof.dr. Aleksander PAVKO

ODSTRANJEVANJE NaH_2PO_4 IZ VODNE RAZTOPINE AKTIVNE FARMACEVTSKE UČINKOVINE Z ULTRAFILTRACIJO

Datum zagovora: 27. 12.2004

Gregor VILFAN

Mentor: prof.dr. Matjaž Krajnc

OPTIMIZACIJA SINTEZE INTERMEDIATOV INHIBITORJEV β -LAKTAMAZ

Datum zagovora: 30. 6. 2004

Mojca VRČON

Mentor: prof. dr. Jadran Maček

OBARJANJE BAKROVIH IN CINKOVIH SPOJIN S HIDROLIZO V SISTEMU KOVINSKA SOL – SEČNINA - VODA

Datum zagovora: 26. 11. 2004

Robert ZIMŠEK

Mentor: prof. dr. Jadran Maček

RAZVOJ SISTEMA ZA TESTIRANJE ELEMENTOV SOFC GORIVNIH CELIC

Datum zagovora: 2. 4. 2004

Nina ZOREC

Mentor: prof .doc. dr. Matjaž Krajnc

ŠTUDIJ STARANJA PREMAZANIH POLIAMIDNIH TKANIN

Datum zagovora: 13. 9. 2004

Milena ZORKO

Mentor: prof. dr. Stane Pejovnik

PRIPRAVA IN KARAKTERIZACIJA SiO_2 DELCEV RAZLIČNIH VELIKOSTI IZ TETRAETIL ORTOSILIKATA

Datum zagovora: 23. 2. 2004

VARSTVO PRI DELU IN POŽARNO VARSTVO

Jadranko ANDROČEC

Mentor: višja pred. mag. Barbara NOVOSEL

ŽIVLJENSKI KROG KEMIKALIJ PRI TEHNOLOŠKEM POSTOPKU LAKIRANJA OHIŠIJ TELEVIZIJSKIH SPREJEMNIKOV

Datum zagovora: 25.3.2004

Janez BALANTIČ

Mentor: prof. dr. Primož GSPAN

VARNOSTNI UKREPI NEVARNOSTI IN KONKRETNI PREDLOGI ZA VARNO PROIZVODNJO AI PRAHOV

Datum zagovora: 15. 7. 2004

Dušan BALUTTO**Mentor: mag. Marko MIŠ**

APLIKACIJA VPRAŠALNIKA SLOVE MEDNARODNE ORGANIZACIJE DELA ILO

Datum zagovora: 27. 5. 2004

Uroš BAN**Mentor: višja pred. mag. Barbara NOVOSEL**

OCENA TVEGANJA V RAZISKOVALNO-KEMIJSKEM LABORATORIJU INŠTITUTA "Jožef

Stefan" metoda VF

Datum zagovora: 25. 3. 2004

Tina BELAJ**Mentor: mag. Marko MIŠ****Somentor: višji pred. mag. Jože ŠREKL**

SOLVE VPRAŠALNIK V PODJETJU POSLOVNI SISTEM CIMOS TITAN LIVARNA DO.O.

Datum zagovora: 25. 5. 2004

Bojan BOGOVIČ**Mentor: doc. dr. Alojz MUHIČ**

PRIMERJAVA ZAHTEV VARNOSTI IN ZDRAVJA PRI DELU V GRADBENIŠTVU PRED IN PO

UVELJAVITVI UREWDBE 75/3

Datum zagovora: 27. 5. 2004

Luka BRATEC**Mentor: pred. mag. Aleš JUG**

VPLIV PROSTOVOLJNEGA INDRUSTRIJSKEGA GASILSKEGA DRUŠTVA NA OCENO

POŽARNE OGROŽENOSTI V PAPIRNICEVČE

Datum zagovora: 30. 9. 2004

Aleš BREMEC**Mentor: višji pred. dr. Mitja KOŽUH**

UVAJANJE STANDARDA OHSAS 18001 V DRUŽBO AET TOLMIN D.O.O.

Datum zagovora: 30. 09. 2004

Klemen BREZNIKAR**Mentor: višja pred. mag. Tatjana GAZVODA**

ZMANJŠANJE UTRUJENOSTI NA DELOVNEM MESTU SNEMALKA

Datum zagovora: 21. 12. 2004

Jernej BRIC**Mentor: mag. Marko MIŠ**IZJAVA O VARNOSTI Z OCENO TVEGANJA ZA DELOVNO MESTO VOZNIK TOVORNEGA
VOZILA - PRIKLOPNIKA

Datum zagovora: 21. 12. 2004

Zoran BUČALIČ**Mentor: višji pred. mag. Jožef HORVAT**

UREDITEV DELOVNEGA MESTA MIG7MAG VARILCA

Datum zagovora: 28. 10. 2004

Mladen CVJETIČANIN**Mentor: doc. dr. Alojz MUHIČ****Somentor: višja pred. mag. Barbara NOVOSEL**

UPORABA NFPA STANDARDOV PRI PROJEKTIRANJU AKADEMSKIH LABORATORIJEV

Datum zagovora: 3. 5. 2004

Dario ČABAKOVIĆ**Mentor: višja pred. mag. Barbara NOVOSEL**

UPORABA NEV, SNOVI ZA PRIPRAVO POLI.TESNILA V PROCESU IZDELAVE POMIVALNIH KORIT IZ NERJAVEČE PLOŠČEVINE

Datum zagovora: 22. 4. 2004

Marjan DOMJAN**Mentor: višja pred. mag. Barbara NOVOSEL**

VARNO DELO IN MANIPULACIJA Z RAZSTRELILOM V KAMNOLOMIH

Datum zagovora: 15. 7. 2004

Irena FELICIJAN**Mentor: višji pred. dr. Mitja KOŽUH**

RAVNANJE Z BOLNIŠNIČNIMI ODPADKI

Datum zagovora: 15. 7. 2004

Mihael FIŠER**Mentor: višji pred. dr. Mitja KOŽUH**

OCENA OGROŽENOSTI PRED NARAVNIMI IN DRUGIMI NESREČAMI V OBČINI LENART

Datum zagovora: 22. 4. 2004

Mateja GABER**Mentor: višja pred. mag. Tatjana GAZVODA**

ANALIZA NEVARNOSTNIH DEJAVNIKOV S POSEBNIM POUĐARKOM NA PROBLEMU

DEMOTIVACIJE V PODJETJU IBI KRANJ D.D.

Datum zagovora: 15. 7. 2004

Dušan GOMBAČ**Mentor: višji pred. dr. Mitja KOŽUH**

ODLAGANJE NIZKO IN SREDNJE RADIAKTIVNIH ODPADKOV TER MOŽMOSTI

ODLAGANJA V OBČINI ILIRSKA BISTRICA

Datum zagovora: 15. 7. 2004

Igor JAKŠE**Mentor: višji pred. dr. Mitja KOŽUH****Somentor: višja pred. mag. Barbara NOVOSEL**

VARNO DELO Z AZBESTOM

Datum zagovora: 30. 9. 2004

Ladislav JERIN**Mentor: mag. Marko MIŠ**

PROGRAM SPOSABLJANJA DELAVCEV ZA VARNO DELO V ETI D.D.

Datum zagovora: 28. 5. 2004

Dejan KUZMIČKI**Mentor: višji pred. dr. Mitja KOŽUH**

PROGRAM USPOSABLJANJA IN PREVERJANJA ZNANJA ZA DELOVNO MESTO

VZDRŽEVALCA IN ADMINISTRATIVNEGA DELAVCA V NEK

Datum zagovora: 27. 5. 2004

Blaž LAVRINC**Mentor: višji pred. mag. Jože JANEŽIČ**

PREZRĀČEVANJE IN KONTROLA DIMA PRI POŽARU V OBJEKTU

Datum zagovora: 21. 12. 2004

Anita LEMEŽ

Mentor: višji pred. dr. Mitja KOŽUH

MONITORING PITNIH VOD

Datum zagovora: 23. 9. 2004

Vesna LETIČ

Mentor: doc. dr. Alojz MUHIČ

VARNOST URBANIH POVRŠIN

Datrum zagovora: 28. 10. 2004

Uroš MALI

Mentor: višji pred. dr. Mitja KOŽUH

BIODIZELSKO GORIVO IN OKOLJE

Datum zagovora: 28. 10. 2004

Viktor MIHELČIČ

Mentor: višji pred. dr. Mitja KOŽUH

ZAŠČITA SLUHA PRI PRITRKA VANJU NA ZVONOVE

Datum zagovora: 22. 4. 2004

Enver MUSTEDANAGIĆ

Mentor: pred. mag. Aleš JUG

POŽARNO VARNOSTNI UKREPI PRI TOČENJU GORIVA IN POLNJENJU REZERVOARJEV NA BENCINSKIH SERVISIH BREZ ZAPOSLENEGA OSEBJA

Datum zagovora: 21.12. 2004

Peter NOSE

Mentor: pred. mag. Aleš JUG

USPOSOBLJANJE POKLICNIH GASILCEV

Datum zagovora: 19. 1. 2004

Boštjan OBID

Mentor: prof. dr. Marija BEŠTER - ROGAČ

METODE NAJBOLJ POGOSTIH FIZIKALNIH MERITEV IN OBREMENITEV V DELOVNEM IN NARAVNEM OKOLJU

Datum zagovora: 30. 9. 2004

Simon PAVŠEK

Mentor: višja pred. mag. Barbara NOVOSEL

Somentor: višja pred. mag. Tatjana GAZVODA

POGRAM USPOSOBLJANJA ZA VARNO IN ZDRAVO DELO OSEB PRI ROKOVANJU S CITOSTATIKI NA ONKOLOŠKEM INSTITUTU

Datum zagovora: 23. 9. 2004

Mitja PELJHAN

Mentor: doc. dr. Alojz MUHIČ

PRIMERJAVA SIMULACIJSKEGA IN REALNEGA ČASA EVAKUACIJE IZ OBJEKTA

Datum zagovora: 28. 10. 2004

Nikolaj PETRIŠIČ

Mentor: višji pred. dr. Mitja KOŽUH

METODE ZA IDENTIFIKACIJO TVEGANJA PRI ZAVEZANCIH DIREKTIVE SEVESO II

Darum zagovora: 27. 5. 2004

Robert POZVEK**Mentor: prof. dr. Primož GSPAN**

VZOREC ZA OCENO TVEGANJA V OPERACIJSKIH DVORANAH

Darum zagovora: 25. 3. 2004

Boštjan RAJH**Mentor: višji pred. dr. Mitja KOŽUH**

ČIŠČENJE KOMUNALNIH ODPADNIH VOD V OBČINI ORMOŽ

Datum zagovora: 28. 10. 2004

Aleksander RIFELJ**Mentor: višja pred. mag. Tatjana GAZVODA**

MOTIVACIJA IN IZBOLJŠANJE DELOVNIH POGOJEV BANČNIH DELAVCEV

Datum zagovora: 17. 3. 2004

Peter ROŠ**Mentor: višji pred. mag. Jožef HORVAT**

HRUP NA DELOVNEM MESTU

Datum zagovora: 22. 9. 2004

Jože ROZMARIČ**Mentor: višji pred. dr. Mitja KOŽUH**

PREKMURSKI REGISKI CENTER ZA RAVNANJE Z ODPADKI V LUČI EVROPSKE

ZAKONODAJE

Datum zagovora: 15. 7. 2004

Karin SERVATZY**Mentor: prof. dr. Viktor GRILC**

NADGRADNJA PROJEKTA EKOŠOLA Z NADGRADNJO ISO 14001

Datum zagovora: 22. 4. 2004

Anton SIMONI**Mentor: višja pred. mag. Barbara NOVOSEL**

VARNA UPORABA IN SKLADIŠČENJE KLORA ZA PRIPRAVO BAZENSKIH VODA

Datum zagovora: 25. 3. 2004

Maja SKALJA**Mentor: doc. dr. Saša PETRIČEK**

NAČRT EVAKUACIJE IZ OBJEKTOV

Datum zagovora: 15. 7. 2004

Nataša SRDOČ**Mentor: višji pred. dr. Mitja KOŽUH**

ŽIVLJENSKI CIKLI MOBILNIH TELEFONOV

Datum zagovora: 19. 1. 2004

Aleš STOPAR**Mentor: pred. mag. Aleš JUG**

POJAV POV RATNEGA OGNJA IN UKREPI ZA VARNO GAŠENJE IN REŠEVANJE

Datum zagovora: 3. 5. 2004

Erik STRITIH**Mentor: višja pred. mag. Barbara NOVOSEL**

VARNOSTNI ASPEKTI DELA S PIROTEHNIČNIMI SREDSTVI

Datum zagovora: 25. 3. 2004

Jernej ŠEPEC**Mentor: višji pred. mag. Jožef HORVAT****Somentor: prof. dr. Vladimir DRUSANY**

OCENA TVEGANJA TER DOLOČITEV OSEBNE VAROVALNE OPREME ZA DELOVNO MESTO

IZKOŠČEVALEC V PODJETJU

Datum zagovora: 28. 5. 2004

Damjan Samo ŠMIDOVNIK**Mentor: višja pred. mag. Tatjana GAZVODA**

ERGONOMSKA UREDITEV DELOVNEGA MESSTA KROJENJA

Datum zagovora: 5. 5. 2004

Benjamin ŠTERK**Mentor: višji pred. mag. Jožef HORVAT****Somentor: višji pred. mag. Jože ŠREKL**

PREVENTIVNE USTREZNOSTI OSEBNE VAROVALNE OPREME V IZBRANEM PODJETJU

Datum zagovora: 28. 5. 2004

Primož TERNIK**Mentor: višja pred. mag. Barbara NOVOSEL****Somentor: pred. mag. Aleš JUG**

PREVOZ JEDKIH SNOVI TER INTERVENCIJA GASILCEV OB NEZGODI

Datum zagovora: 3. 5. 2004

Mojca TURNŠEK**Mentor: višja pred. mag. Barbara NOVOSEL**

POSTOPEK KEMIČNE PRIPRAVE VODE V TERMOMELEKTRARNI TRBOVLJE

Darum zagovora: 3. 5. 2004

Janez UHAN**Mentor: prof. dr. Vladimir DRUSANY**

TEHNIČNA DOKUMENTACIJA ZA NOSILNO KONZOLO ZA PRENAŠANJE KOLUTOV

PLOČEVINE V PODJETJU TRIMO TREBNJE

Darum zagovora: 17. 3. 2004

Boštjan ULAGA**Mentor: višja pred. mag. Barbara NOVOSEL**

PLAN UKREPOV GLEDE VARNOSTI PRED PRAŠNIMI EKSPLOZIJAMI V PEKARNI

MLINOTEST AJDOVŠČINA D. D. - OBRAT V IDRIJI, V SKLADU Z UREDBO O

PROTIEXPLOZJSKI ZAŠČITI

Datum zagovora: 28. 10. 2004

Dušan VALANT**Mentor: višja pred. mag. Tatjana GAZVODA**

ERGONOMSKA PREUREDITEV DELOVNIH MEST V PISARNI PLANERJEV ISKRA STIKALA

D.D.

Datum zagovora: 15. 7. 2004

Simon VENDRAMIN**Mentor: višji pred. mag. Jože JANEŽIČ**

NADZOR DIMA S PRISILNO VENTILACIJO PRI GAŠENJU POŽAROV

Datum zagovora: 17. 3. 2004

Robert VODUŠEK**Mentor: doc. dr. Grega BIZJAK**

MERITVE NA ELEKTRIČNIH INŠTALACIJAH ZGRADB

Datum zagovora: 23. 9. 2004

MAGISTERIJI / MASTER THESES

KEMIJA

Jožica DOLENC

Mentor: prof. dr. Jože Koller

MOLEKULSKO MODELIRANJE VEZAVE NETROPSINA V OŽJI KANAL DNA

Datum zagovora: 17. 6. 2004

Gregor KOSEC

Mentor: doc. dr. Boris Turk

METAKASPAZA IZ PARAZITA TRYPANOSOMA CRUZI: KLONIRANJE IN EKSPERZIJA V HETEROLOGNIH SISTEMIH

Datum zagovora: 30. 6. 2004

Renata ZAJC

Mentor: prof. dr. Miha Japelj

USKLAJEVANJE TEHNOLOGIJ ZA KEMIJSKO SINTEZO UČINKOVIN S PREDPISI EVROPSKE UNIJE

Datum zagovora: 23. 6. 2004

KEMIJSKA TEHNOLOGIJA

Peter BASTL

Mentor: prof. dr. Jadran Maček

PRIPRAVA SUBMIKRO IN MIKROMETRSKIH NIKLJEVIH DELCEV Z REDUKCIJO V SISTEMU NIKLJEVA SOL-HIDRAZIN-VODA

Datum zagovora: 20. 1. 2004

Karmen RIBIČ REP

Mentor: prof. dr. Milenko Roš

Somentor: prof. dr. Boris Kompare

OPTIMIZACIJA ČISTILNE NAPRAVE GLEDE NA KAKOVOST ODVODNIKA

Datum zagovora: 30. 9. 2004

Erna TOMAŽEVIČ

Mentor: prof. dr. Milenko Roš

EMISIJE HRANIV V VODNO OKOLJE IN PREDLOG UKREPOV ZA NJIHOVO ZMANJŠANJE

Datum zagovora: 6. 7. 2004

KEMIJSKO INŽENIRSTVO

Alenka GLAVAČ

Mentor: prof. dr. Matjaž Krajnc

SINTEZA IN KARAKTERIZACIJA POLIURETANSKIH VODNIH DISPERZIJ

Datum zagovora: 12. 5. 2004

Mirko HORVAT

Mentor: prof. dr. Matjaž Krajnc

ANALIZA IN PRIMERJAVA KARAKTERISTIK UREA-FORMALDEHIDNIH
PREDKONDENZATOV, PRIDOBLJENIH PO RAZLIČNIH TEHHNOLOŠKIH POSTOPKIH
Datum zagovora: 15. 12. 2004

Janez ZUPANČIČ

Mentor: prof. dr. Viktor Grilc

IZOLACIJA AKTIVNE FARMACEVTSKE UČINKOVINE IZ SINTEZNE MEŠANICE S
SOLVENTNO EKSTRAKCIJO

Datum zagovora: 6. 7. 2004

DOKTORATI / DOCTORAL THESES

KEMIJA

Polonca Kralj

Mentor: prof. dr. Marjan Veber

ŠTUDIJ POSTOPKOV ZA KARAKTERIZACIJO KOMPLEKSOV MED KOVINAMI IN ORGANSKIMI LIGANDI Z MASNO SPEKTROMETRIJO Z INDUKTIVNO SKLOPLJENO PLAZMO

Datum zagovora: 19.3.2004

Miroslav Kovačevič

Mentor: prof. dr. Marjan Veber

UPORABA SKLOPLJENEGA SISTEMA TEKOČINSKA KROMATOGRAFIJA – ELEMENTNA MASNA SPEKTROMETRIJA ZA KARAKTERIZACIJO ORGANOFOSFORNIH SPOJIN

Datum zagovora: 26.3.2004

Samo Andrenšek

Mentor: prof. dr. Boris Šket

IDENTIFIKACIJA POLIFENOLNIH SPOJIN IZ HRASTA, ZELENEGA ČAJA IN JAKUNA

Datum zagovora: 4.6.2004

Aleksandra Kocijan

Mentorica: dr. Ingrid Milošev, znan.sod. (IJS)

RAZISKAVE PASIVNIH PLASTI NA POVRŠINI KOBALTOVIH ZLITIN V SIMULIRANI FIZIOLOŠKI RAZTOPINI

Datum zagovora: 30.6.2004

Koklič Brigit

Mentor: prof. dr. Marjan Veber

OPTIMIZACIJA VZORČENJA IN SPEKTROSKOPSKE ANALIZE TALINE BAKER-TITAN-CINK

Datum zagovora: 15.10.2004

Samo Pirc

Mentor: akademik prof. dr. Branko Stanovnik

STEREOSELEKTIVNE IN REGIOSELEKTIVNE SINTEZE IN PRETVORBE NEKATERIH -

LAKTAMOV IN -LAKTONOV

Datum zagovora: 21.10.2004

Marjan Tušar

Mentor: prof. dr. Jure Zupan (KI)

IZBOLJŠAVE PRI MODELIRANJU KEMIJSKIH PROBLEMOV Z NEVRONSKIMI MREŽAMI

Datum zagovora: 5.11.2004

Darja Mazej

Mentor: prof. dr. Marjan Veber

OPREDELJEVANJE SELENOVIH SPOJIN V BIOLOŠKIH VZORCIH

Datum zagovora: 26.11.2004

Uroš Grošelj

Mentor: prof. dr. Jurij Svetec

STEREOSELEKTIVNE SINTEZE IN PRETVORBE V VRSTI SPIROHIDANTOINOV IN TERPENSKIH ENAMINONOV

Datum zagovora: 3.12.2004

Matija Tomšič**Mentor: prof. dr. Andrej Jamnik**

STRUKTURNE RAZISKAVE MIKROEMULZIJ Z METODO OZKOKOTNEGA RENTGENSKEGA SIPANJA

Datum zagovora: 20.12.2004

Boštjan Podkrajšek**Mentorica: dr. Irena Grgič, znan.sod. (KI)**

VPLIV MANGANA IN KARBOKSILNIH KISLIN NA OKSIDACIJO ŽVEPLOVIH (iv) ZVRSTI V TROPOSFERSKI VODNI FAZI

Datum zagovora: 20.12.2004

Petra Drevenšek**Mentor: prof. dr. Iztok Turel**

SINTEZA IN KARAKTERIZACIJA NOVIH KOVINSKIH KOMPLEKSOV KINOLONOV

Datum zagovora: 23.12.2004

Nives Kitanovski**Mentor: prof. dr. Boris Čeh**

SINTEZA IN KARAKTERIZACIJA NOVIH KOVINSKIH KOMPLEKSOV KINOLONOV

Datum zagovora: 23.12.2004

Polona Tavčar**Mentorica: dr. Ljudmila Benedik, znan.sod.**

ANALIZNE METODE ZA IDENTIFIKACIJO IN KARAKTERIZACIJO NIZKO IN SREDNJE RADIOAKTIVNIH ODPADKOV

Datum zagovora: 24.12.2004

KEMIJSKO INŽENIRSTVO

Magda Cotman**Mentorica: prof. dr. Jana Zagorc Končan**

RAZVOJ NOVE METODOLOGIJE ZA OCENO VPLIVOV EKOTOXIKOLOŠKIH POTENCIALOV ODPADNE VODE NA VODOTOK

Datum zagovora: 8.7.2004

Iztok Hace**Mentor: prof. dr. Janvit Golob**

MODELIRANJE KINETIKE POLIMERIZACIJE DIALIL FTALATOV

Datum zagovora: 8.10.2004

Lidija Slemenik Perše**Mentor: prof. dr. Miha Žumer**

LAMINARNO MEŠANJE IN DOLOČEVANJE VISKOZNOSTI KOMPLEKSNIH TEKOČIN V MEŠALNIKU

Datum zagovora: 12.11.2004

Andrej Horvat**Mentor: prof. dr. Janvit Golob**

TEHNIKE SUŠENJA IZBRANIH SILIKATOV DO PROIZVODOV S SPECIFIČNIMI FIZIKALNO-KEMIJSKIMI LASTNOSTMI

Datum zagovora: 1.12.2004

MATERIALI

Daniel Vrbanč

Mentor: prof. dr. Stane Pejovnik

SINTEZA, KARAKTERIZACIJA IN RAZISKAVE LASTNOSTI NIZKODIMENZIONALNIH MATERIALOV NA OSNOVI HALKOGENIDOV PREHODNIH KOVIN IN OGLJIKA

Datum zagovora: 8.12.2004

PREGLED PROJEKTOV ZA LETO 2004

RESEARCH PROJECTS OVERVIEW IN YEAR 2004

Šifra pogodbe	Šifra nosilca	ime in priimek odg. nosilca	FTE	Naslov
J1-6254	6137	Božo Plesničar	1.1	Reaktivni intermediati pri transformacijah organskih spojin
J1-6653	2563	Vojko Vlachy	0.6	Lastnosti ionskih raztopin in disperznih sistemov
J1-6689	868	Branko Stanovnik	0.6	Sinteza heterocikličnih analogov amino kislin in peptidov
J1-6693	3904	Marijan Kočevar	0.6	Od multifunkcionalnih gradnikov do biološko aktivnih spojin
L1-6709	6117	Marjan Veber	0.26	Transport atmosferskih onesnaževal preko Slovenije
L2-6344	853	Janvit Golob	1.2	Aplikativne, procesno inženirske raziskave proizvodov na osnovi fosfornih spojin prve generacije in produktno inženirske raziskave ...
L2-6686	14126	Matjaž Krajnc	1.56	Vezivni sistemi v gumenih kompozitih z izboljšano površinsko aktivnostjo
L4-6420	06110	Marin Berovič	0.05	Producija farmacevtsko aktivnih spojin glive Grifola frondosa s postopkom gojenja na trdnem in tekočem gojišču
J1-5010	14121	Angela Šurca	0.06	Sol-gel priprava organsko-anorganskih hibridov z ionsko prevodnostjo
J2-6027	07254	Zorica Crnjak Orel	0.3	Priprava in karakterizacija kompozitnih uniformnih delcev
L1-5237	11071	Jana Kolar	0.05	Mikroanalitske metode za določanje pH papirja
L1-6334	02565	Boris Orel	0.17	Nanokompozitni tanki filmi in pigmenti za industrijo premazov
L2-6471	05101	Stojan Petelin	0.11	Razvoj metodologij za oceno tveganj v cestnih predorih
L4-6207	19106	Miha Humar	0.08	Razvoj anorganskih zaščitnih sredstev za les brez kromovih spojin

Skupaj: FTE 6.74

PREGLED PROGRAMOV ZA LETO 2004

RESEARCH PROGRAMMES OVERVIEW IN YEAR 2004

Šifra pogodbe	Šifra nosilca	ime in priimek odg. nosilca	FTE	Naslov
P1-0134	3439	prof. dr. Peter Bukovec	4.0	Bioanorganska in bioorganska kemija
P1-0153	4323	prof. dr. Boris Pihlar	3.5	Raziskave in razvoj analiznih metod in postopkov
P1-0175	3374	prof. dr. Ivan Leban	2.8	Sinteza, struktura, lastnosti snovi in materialov
P1-0179	868	akad. prof. dr. Branko Stanovnik	1.2	Sinteze in transformacije organskih spojin. Novi reagenti v stereoselektivni in regioselektivni sintezi aminokislin kot intermediarov
P2-0191	3071	prof. dr. Valentin Koloini	2.3	Kemijsko inženirstvo
P1-0201	2563	prof. dr. Vojko Vlachy	3.5	Fizikalna kemija
P1-0230	3904	prof. dr. Marijan Kočevar	2.0	Organska kemija: sinteza, struktura in aplikacija
P1-0048	04988	prof. dr. Dušan Turk	0.1	Strukturna biologija
P1-0140	01085	prof. dr. Vito Turk	0.2	Proteoliza in njena regulacija
P2-0150	06111	prof. dr. Milenko Roš	0.3	Integralni pristop k preprečevanju onesnaževanja voda
P1-0207	01083	prof. dr. Igor Križaj	0.3	Toksini in biomembrane

Skupaj: FTE 19.3

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

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

P1-0179
akademik prof. dr. Branko Stanovnik

Sodelavci programske skupine
Programme group co-workers

Raziskovalci / Researchers

akad. prof. dr. Branko Stanovnik
izr. prof. dr. Jurij Svete
dr. Zdenko Časar
dr. Lovro Selič
dr. Silvo Zupančič

Mladi raziskovalci / Young Researchers

David Bevk
Uroš Grošelj
Uroš Uršič
Samo Pirc
Petra Čebašek
Jernej Wagger
David Kralj
Lidija Pezdirc

Tehniki / Technicians

Tončka Kozamernik
Tatjana Stipanovič

Poročilo o realizaciji programa

Raziskovalno delo v letu 2004 je potekalo v skladu s predpostavljenimi cilji na sledečih področjih: V nadaljevanju raziskav na področju aplikacij alkyl 3-dimetilaminopropenoatov in njihovih analogov v sintezi heterociklov smo študirali sintezo etil (2E)-3-dimetilamino-2-[(4Z)-4-dimetilaminometiliden-5-okso-1-fenil-4,5-dihidro-1H-pirazolil]propenoata, pripravljenega iz etil (5-okso-1-fenil-4,5-dihidro-1H-pirazol-3-il)acetata in dimetilformamid dimetil acetala v DMF, in njegove transformacije z N-nukleofili, kot so npr. primarni amini, hidrazini in hidroksilamin, v 5-substituirane etil 3-okso-2H-pirazolo[4,3-c]piridin-7-karboksilate. (D. Bevk, R. Jakše, A. Golobič, L. Golič, A. Meden, J. Svete, B. Stanovnik, *Heterocycles* 63, 609-629 (2004)).

Segrevanje metil 3-anilino-2-(benzoilamino)but-2-enoatov, pripravljenih iz metil 2-benzoilamino-3-oksobutanoata in anilinov rezultira v intramolekularni ciklokondenzaciji med arilaminsko in benzoilno skupino. Pri tem nastanejo metil 1-aryl-5-metil-2-fenil-1H-imidazol-4-karboksilate. V nekateri primerih pa nastanejo tudi 4-[1-(arilamino)etiliden]-2-fenil-1,3-oksazol-5(4H)-oni kot stranski produkti. (T. Celestina, A. Golobič, J. Svete, B. Stanovnik, *ARKIVOC* 2004 (vii), 169-176).

Odkar so bili aplisinopsini izolirani kot metaboliti iz nekaterih morskih organizmov so vzbujali veliko zanimanje zaradi njihovih citotoksičnih lastnosti in nevrotransmiterskih lastnosti. V zadnjem času so bili izolirani še nortopsentini in meridianini, ki spadajo tudi med indolove alkalioide z zanimivimi antitumorskimi lastnostmi, izoliranimi iz spužev Spogosorites ruetzleri in družine tunikat *Aplidium meridianum*. V nadaljevanju naših raziskav na področju indolovih alkaloidov smo sintetizirali alkil 3-dimetilamino-2-(1H-indol-3-il)propenoate in jih pretvarjali z N,N- in C,O-dinukleofili v kondenzirane 3-(1H-indol-3-il)-4H-pirimidin-4-one kot meridianinske analoge in v kondenzirane 3-(1H-indol-3-il)-2H-piran-2-one kot kromenske derivate. (R. Jakše, J. Svete, B. Stanovnik, A. Golobič, *Tetrahedron* 60, 4601-4608 (2004)).

Študirali smo tudi reakcije 1-ciano-4-okso-4H-kinolizin-3-diazonijevega tetrafluoroborata in 4-okso-4H-pirimidino[1,2-a]pirimidin-3-diazonijevega tetrafluoroborata z alifatskimi amini. Pri reakciji heteroarildiazonijevih soli s sekundarnimi amini nastanejo ustrezní N-alkil-N'-heteroariltriazeni z visokimi izkoristki. Na drugi strani pa poteče pri reakcijah kinolizindiazonijevih tetrafluoroboratov z alifatskimi primarnimi amini nepričakovana premestitev v ustrezne N-alkylkarboksamide pikolinske kisline. (S. Rečnik, J. Svete, B. Stanovnik, *Z. Naturforsch.* 59b, 380-385 (2004)).

Kot nadaljevanje naše v novejšem času izdelane metodologije, ki je osnavana na alkil 3-(dimetilamino)propenoatih in sorodnih enaminonih smo pripravili N-zaščitene (Z)-3-(arilamino)-2,3-dehidroalanin estre v eni stopnji iz metil (Z)-2-acilamino-3-(dimetilamino)prop-2-enoatov in anilinov s paralelno »solution-phase« sintezno strategijo. V večini primerov smo izolirali analitsko čiste produkte. Na drugi strani pa smo tudi razvili tristopenjsko paralelno »solid-phase« sintezo 2-acetilamino-4H-azino[1,2-x]primid-4-onov na polimer vezanem metil (Z)-2-acetilamino-3-(dimetilamino)prop-2-enoatu. (P. Čebašek, J. Wagger, D. Bevk, R. Jakše, J. Svete, B. Stanovnik, *J. Comb. Chem.* 6, 356-362 (2004)).

Naše študije smo razširili na kiralne enaminone. V ta namen smo pripravili enaminone, ki so derivati (+)-kafre. N-Substituirane (1R,5S)-4-aminometiliden-1,8,8-trimetil-2-oksabaciclo[3.2.1]oktan-3-one smo pripravili v treh stopnjah iz (1R)-(+)-kafre s pripajanjem (1R,4E,5S)-3-[(dimetilamino)metiliden]-1,8,8-trimetil-2-oksabaciclo[3.2.1]oktan-3-ona na primarne amine. N, N'-Bis-{[(1R,5S)-1,8,8-trimetil-3-okso-2-oksabaciclo[3.2.1]okt-4-ilidene]metillbenzene-1,2-diamin smo uporabili kot ligand pri pripravi ustreznik koordinacijskih spojin s paladijem(II), bakrom(II) in nikljem(II). Strukture smo določili z 2D NMR tehnikami, NOESY spektroskopijo in rentgensko difrakcijo. (U. Grošelj, D. Bevk, R. Jakše, A. Meden, S. Pirc, S. Rečnik, B. Stanovnik, J. Svete, *Tetrahedron: Asymmetry* 15, 2367-2383 (2004))

(1R,5S)-4-[(E)-Alkiliden]-1,8,8-trimetil-2-oksabaciclo[3.2.1]oktan-3-one smo pripravili stereoselektivno v reakciji (1R,5S)-4-[(E)-(dimetilamino)metiliden]-1,8,8-trimetil-2-oksabaciclo[3.2.1]oktan-3-onov z Grignardovim reagentom, kalijevim cianidom in 2-methyl-1H-indolom. (U. Grošelj, D. Bevk, R. Jakše, A. Meden, S. Rečnik, B. Stanovnik, and J. Svete, *Synthesis* 2005, sprejeto v tisk).

Študirali smo tudi reakcije 3-[(E)-(dimetilamino)metiliden]-(+)-kafre in (1R,5S)-4-[(E)-(dimetilamino)metiliden]-1,8,8-trimetil-2-oksabaciclo[3.2.1]oktan-3-onov s hidrazinom in njegovimi derivati. Pri reakciji 3-[(E)-(dimetilamino)metiliden]-(+)-kafre s hidrazini nastanejo ustrezní kondenzirani pirazoli. Podobno nastanejo kondenzirani pirazoli tudi pri reakciji (1R,5S)-4-[(E)-(dimetilamino)metiliden]-1,8,8-trimetil-2-oksabaciclo[3.2.1]oktan-3-onov z orto nesubstituiranimi fenil hidrazini, medtem ko nastanejo pri reakciji s hidrazin hidrokloridom po preklopu obroča in premestitvi 2-aryl-4-[(1S,3R)-3-hidroksi-2,2,3-trimetilciklopentil]-1,2-dihidro-3H-pirazol-3-oni. (U. Grošelj, D. Bevk, R. Jakše, A. Meden, S. Rečnik, B. Stanovnik, and J. Svete, *Tetrahedron* 61 (2005), sprejeto v tisk).

V nadaljevanju raziskav na področju azometin iminov smo študirali cikloadicije (1Z,4R*,5R*)-4-benzoilamino-5-fenilpirazolidin-3-on-1-azometin iminov na olefinske dipolarofile. Ugotovili smo, da je stereokemija cikloadicije azometin iminov kontrolirana z stereosmerjajočo fenilno skupino na mestu 3, kakor tudi z orto-substituentami na aromatskem obroču na položaju 1'. Strukturo dipolov in produktov smo določili z NMR in rentgensko difrakcijo. (Lidija Pezdirc, Vasko Jovanovski, David Bevk, Renata Jakše, Samo Pirc, Anton Meden, Branko Stanovnik, and Jurij Svetec, *Tetrahedron* 61 (2005) sprejeto v tisk).

Pregledni članek o raziskavah naše skupine v zadnjih desetih letih v zvezi s sintezo heterociklov, heterocikličnih amino kislin in naravnih spojin in analogov in alkil 3-(dimethylamino)propenoatov in sorodnih enaminonov je bil napisan na povabilo urednika Chemical Reviews. (B. Stanovnik, J. Svetec, *Chem. Rev.* 104, 2433-2480 (2004)).

Pregledni članek o kiralnih enaminonih v sintezi funkcionaliziranih heterociklov je osnovan na povabljenem predavanju na Blue Danube Symposium on the Chemistry of Heterocyclic Compounds. (Dunaj 2003). (J. Svetec, *Monatsh. Chem.* 135, 629-647 (2004))

Programme realisation report

Research work in 2004 was carried out according to the proposed program in the following areas.

In continuation of our research in the field of applications of alkyl 3-dimethylaminopropenoates and their analogs in heterocyclic synthesis of ethyl (2E)-3-dimethylamino-2-[(4Z)-4-dimethylaminomethylidene-5-oxo-1-phenyl-4,5-dihydro-1H-pyrazolyl]propenoate, prepared from ethyl (5-oxo-1-phenyl-4,5-dihydro-1H-pyrazol-3-yl)acetate and dimethylformamide dimethyl acetal in DMF, and its transformations with N-nucleophiles, such as primary amines, hydrazines and hydroxylamine, into 5-substituted ethyl 3-oxo-2H-pyrazolo[4,3-c]pyridine-7-carboxylates was studied. (D. Bevk, R. Jakše, A. Golobič, L. Golič, A. Meden, J. Svetec, B. Stanovnik, *Heterocycles* 63, 609-629 (2004)).

Heating of methyl 3-anilino-2-(benzoylamino)but-2-enoates, prepared from methyl 2-benzoylamino-3-oxobutanoate and anilines, resulted in intramolecular cyclocondensation between the arylamino and benzoyl group affording methyl 1-aryl-5-methyl-2-phenyl-1H-imidazole-4-carboxylates. In some instances 4-[1-(arylamino)ethylidene]-2-phenyl-1,3-oxazol-5(4H)-ones were also formed as side products. (T. Celestina, A. Golobič, J. Svetec, B. Stanovnik, *ARKIVOC* 2004 (vii), 169-176).

Since their isolation from various marine organisms, aplisynopsins have attracted considerable interest, especially due to their cytotoxicity toward cancer cells and their ability to affect neurotransmitters. Recently, the nortopsentins and meridianines, another series of indole alkaloids showing interesting antitumor properties, have been isolated from the sponge *Spogosorites ruetzleri* and from tunicate *Aplidium meridianum*. In continuation of our research on the synthesis of indole alkaloids we reported the preparation of alkyl 3-dimethylamino-2-(1H-indol-3-yl)propenoates and their transformations with N,N- and C,O-dinucleophiles into condensed 3-(1H-indol-3-yl)-4H-pyrimidin-4-ones as the meridianine analogues and into condensed 3-(1H-indol-3-yl)-2H-pyran-2-ones as the chromene derivatives. (R. Jakše, J. Svetec, B. Stanovnik, A. Golobič, *Tetrahedron* 60, 4601-4608 (2004)).

Reactions of 1-cyano-4-oxo-4H-quinolizine-3-diazonium tetrafluoroborate and 4-oxo-4H-pyridino[1,2-a]pyrimidine-3-diazonium tetrafluoroborate with aliphatic amines were studied. Treatment of heteroaryldiazonium salts with secondary amines afforded the corresponding N-alkyl-N'hetereoaryltriazenes in high yields. On the other hand, reactions of quinolizinediazonium tetrafluoroborates with aliphatic primary amines resulted in an unexpected rearrangements into the corresponding picolinic acid N-alkylcarboxamides, (S. Rečnik, J. Svetec, B. Stanovnik, Z. *Naturforsch.* 59b, 380-385 (2004)).

As an extension of our recently developed methodology based on alkyl 3-(dimethylamino)propenoates and related enaminones N-protected (Z)-3-(arylamino)-2,3-didehydroalanine esters were prepared in one step from methyl (Z)-2-acylamino-3-(dimethylamino)prop-2-enoates and anilines employing a parallel solution-phase synthetic approach. In most cases, analytically pure products were obtained. On the other hand, a three-step parallel solid-phase synthesis of 2-acetylamino-4H-azino[1,2-x]pyrimid-4-ones via the polymer-bound methyl (Z)-2-acetylamino-3-(dimethylamino)prop-2-enoate was also developed. (P. Čebašek, J. Wagger, D. Bevk, R. Jakše, J. Svetec, B. Stanovnik, *J. Comb. Chem.* 6, 356-362 (2004)).

Our studies on exchiral pool derived enaminones have recently been extended on the preparation and synthetic application of (+)-camphor derived enaminones. N-Substituted (1R,5S)-4-aminomethylidene-1,8,8-trimethyl-2-oxabicyclo[3.2.1]-octan-3-ones were prepared in three steps from (1R)-(+)-camphor via

coupling of (1R,4E,5S)-3-[(dimethylamino)methylidene]-1,8,8-trimethyl-2-oxabicyclo[3.2.1]-octan-3-one with primary amines. N,N'-Bis-{[(1R,5S)-1,8,8-trimethyl-3-oxo-2-oxabicyclo[3.2.1]oct-4-ylidene]methyl}benzene-1,2-diamine was used as the ligand in the preparation of the corresponding coordination compounds with palladium(II), copper(II) and nickel(II). The structures were determined by 2D NMR techniques, NOESY spectroscopy and X-ray diffraction. (U. Grošelj, D. Bevk, R. Jakše, A. Meden, S. Pirc, S. Rečnik, B. Stanovnik, and J. Svete, *Tetrahedron: Asymmetry* 15, 2367-2383 (2004)) (1R,5S)-4-[(E)-Alkylidene]-1,8,8-trimethyl-2-oxabicyclo[3.2.1]-octan-3-ones were prepared, stereoselectively, via coupling of (1R,5S)-4-[(E)-(dimethylamino)-methylidene]-1,8,8-trimethyl-2-oxabicyclo[3.2.1]octan-3-ones with Grignard reagents, potassium cyanide and 2-methyl-1H-indole. (U. Grošelj, D. Bevk, R. Jakše, A. Meden, S. Rečnik, B. Stanovnik, and J. Svete, *Synthesis* 2005, accepted for publication))

Reactions of 3-[(E)-(dimethylamino)methylidene]-(+)-camphor and (1R,5S)-4-[(E)-(dimethylamino)methylidene]-1,8,8-trimethyl-2-oxabicyclo[3.2.1]octan-3-ones with hydrazine derivatives were also studied. Treatment of 3-[(E)-(dimethylamino)methylidene]-(+)-camphor with hydrazines afforded the corresponding fused pyrazoles. Similarly fused pyrazoles were obtained upon reaction of (1R,5S)-4-[(E)-(dimethylamino)methylidene]-1,8,8-trimethyl-2-oxabicyclo[3.2.1]octan-3-ones with ortho unsubstituted phenylhydrazines, while reactions with hydrazine hydrochloride resulted in "ring switching" type of transformation to furnish 2-aryl-4-[(1S,3R)-3-hydroxy-2,2,3-trimethylcyclopentyl]-1,2-dihydro-3H-pyrazol-3-ones. (U. Grošelj, D. Bevk, R. Jakše, A. Meden, S. Rečnik, B. Stanovnik, and J. Svete, *Tetrahedron* 61 (2005), accepted for publication)).

In continuation in the field of azomethine imines, cycloadditions of (1Z,4R*,5R*)-4-benzoylamino-5-phenylpyrazolidin-3-on-1-azomethine imines to olefinic dipolarophiles were studied. Stereochemistry of cycloadditions to azomethine imines 3 was found to be controlled by stereodirecting phenyl group at position 3, as well as by the ortho-substituents at the aromatic ring at position 1'. The structures of dipoles and products were confirmed by NMR and X-Ray diffraction. (L. Pezdirc, V. Jovanovski, D. Bevk, R. Jakše, S. Pirc, A. Meden, B. Stanovnik, and J. Svete, *Tetrahedron* 61 (2005) accepted for publication).

The review article on the research of this group in last ten years dealing with the synthesis of heterocycles from alkyl 3-(dimethylamino)propenoates and related enaminones was written on invitation of the editor of Chemical Reviews. (B. Stanovnik, J. Svete, *Chem. Rev.* 104, 2433-2480 (2004)).

The review article on the ex-chiral pool enaminones in the synthesis of functionalized heterocycles is based on the invited lecture on the Blue Danube Symposium on Heterocyclic Chemistry, Vienna, 2003. (J. Svete, *Monatsh. Chem.* 135, 629-647 (2004))

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

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

P0-0230
prof. dr. Marijan Kočevar

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

Raziskave naše programske skupine potekajo v tesni povezavi z drugimi skupinami v okviru več mednarodnih projektov (COST, bilateralni), pa tudi v povezavi z domaćimi raziskovalnimi skupinami in delno z industrijo. Naš cilj je razvijati sinteze spojin za znanstvene in aplikativne namene pod ekološko čim bolj čistimi pogoji (zelena kemija) in z visoko atomsko ekonomijo. Navajamo nekaj podrobnejših rezultatov.

Reakcije 4-fluorofenola z dialkil diazendikarboksilati v prisotnosti $ZrCl_4$ kot Lewisove kisline so vodile do 2-klorofenolov, ki so bili aminirani na mestu 4 glede na OH skupino. Iste produkte smo izolirali pri aminiranju 2-klorofenola z ustreznimi diazeni. Podobno je potekla reakcija z 2-fluoro-fenolom, le da so bili produkti 2-fluorofenoli, aminirani na mestu 4. Navedeni rezultati jasno pokažejo, da aminiranje 4-fluorofenola ni le elektrofilni proces. Izgleda, da zajema reakcijska pot najprej nastanek ustreznih ionskih parov, kjer nato poteče ipso napad elektrofilnega dušika. Naslednja stopnja je verjetno odcep aniona $ZrCl_4F^-$, čemur sledi vezava kloridnega iona, kar vodi do tavto-me-ra končne-ga produkta (*J. Org. Chem.* 2004, 69, 2224–2227).

Raziskave β -keto estrov smo usmerili tudi v njihove transformacije z $BF_3\cdot Et_2O$. Ugotovili smo, da reagirajo 5,6-disubstituirani 2,2-difluoro-4-alkoksi-1,3,2-dioksaborinani, pripravljeni iz β -keto estrov, z amini regio- in kemoselektivno pod blagimi reakcijskimi pogoji. Pri tem nastanejo skoraj kvantitativno ustrejni 2,2-difluoro-4-alkil-amino-1,3,2-dioksaborinani. Odcep zaščitnih skupin v takih spojinah daje β -keto amide ali pa β -enamino karboksamide. Podobne pretvorbe 2,2-difluoro-4-alkoksi-1,3,2-dioksa-bori-nanov z arilhidrazini vodijo do β -hidrazono estrov, v nekaterih primerih tudi brez ciklizacije v pirazolone (*Synlett* 2004, 680–702).

V sklopu sodelovanja z raziskovalno skupino dr. M. Osmak (Institut Ruđer Bošković, Zagreb) smo pripravili serijo diazenkarboksamidov, nekatere nesimetrične diazendikarboksamide, Michaelove adukte aminokarbonildiazenkarboksilatov z 1,3-dikarbonilnimi spojinami in aminirane halofenole. Testiranja so pokazala, da je najaktivnejši N-(2-kloroetil)-2-(2,3,4,5,6-pentafluorofenil)diazene-karboksamid. IC_{50} za omenjeno spojino je v mikromolarjem območju (16–42 μM) za različne rakaste celice. Poudariti velja, da spojina zavira rast tudi nekaterih rakavih celic, ki so sicer rezistentne na cisplatin, vinkristin in doktorubi-cin (*Drug Develop. Res.* 2004, 61, 95–100.).

Na področju sinteze in pretvorb aminokislinskih derivatov različnih tipov (cikličnih in necikličnih) smo uspeli sintetizirati izomerno čiste β -pirazolil- in β -pirimidinil- α,β -didehidro- α -aminokislinske derivate, ki so sedaj v nadaljnji obdelavi v okviru projekta COST D24/007, kjer iščemo nove metode za asimetrično hidrogeniranje tovrstnih spojin, kar je industrijsko relevantna pretvorba. Na področju cikličnih aminokislinskih derivatov smo raziskovali predvsem pretvorbo s hidrazini, kjer je prišlo do nove pretvorbe piran-2-onskega sistema v dihidropiridazinskega. Pri tej pretvorbi smo uspeli izolirati tudi intermediat, tako, da so se odprle možnosti za pojasnitev celotne reakcije. Poleg navedenih pretvorb raziskujemo tudi cikloadicijske reakcije 2H-piran-2-onskih derivatov. Tako smo raziskovali Diels-Alderjevo reakcijo navedenih spojin z alkini, pri čemer so nastali substituirani derivati anilina in ortofenilendiamina. Osredotočili smo se predvsem na 3-benzoilamino-6-metil-2H-piran-2-one, ki vsebujejo na mestu 5 elektronsko privlačno skupino, ki močno vpliva na hitrost reakcije (*J. Org. Chem.*, 2004, 69, 3190–3193).

Raziskovali smo tudi uporabnost dveh derivatov 2-benzoilamino-3-kloropropenojske kisline, N-(1-karbamoil-2-klorovinil)benzamida in metil 2-benzoilamino-3-kloropropenoata, v sintezi delno nasičenih spiro-oksazol-kinoksalinov in njihovih analogov. Rezultati teh preliminarnih raziskav kažejo, da amid v reakcijah z aromatskimi in heteroaromatskimi diamini podobno kot sama kislina tvori omenjene spiro sisteme. Reakcije smo izvedli z benzen-1,2-diaminom, 3-nitrobenzen-1,2-diaminom, 4-nitrobenzen-1,2-diaminom, 4,5-diklorobenzen-1,2-diaminom, 4-metilbenzen-1,2-diaminom, 4-benzoilbenzen-1,2-diaminom, 4-klorobenzen-1,2-diaminom, 4-metoksikarbonil-benzen-1,2-diaminom, naftalen-2,3-diaminom in piridin-2,3-diaminom. Na drugi strani pa se je izkazalo, da ester ni primeren za ta namen. Le v enem primeru, v reakciji z naftalen-2,3-diaminom, smo v reakcijski zmesi ugotovili sledove ustrezne spiro spojine.

V sklopu bilateralnega sodelovanja BI-CZ/03-04-5 (s skupino S. Kafka in A. Klasek, Tomas Bata University in Zlin) smo študirali novo tandemsko reakcijo hidratacije/dehidratacije 3-tiocianatokinolin-2,4(1H,3H)-dionov v 3a-substituirane tiazolo[5,4-c]kinolin-2,4(3aH,5H)-dione, preko tiokarbamatnih intermediarov (3-karbamoilsulfanilkalin-2,4(1H,3H)-dionov), s pomočjo žveplove(VI) kisline. Izkazalo se je, da je žveplova(VI) kislina kritična za uspešno izvedbo reakcije saj sicer obe spojini, 3-tiocianatokinolin-2,4(1H,3H)-dion in 3-karbamoilsulfanilkalin-2,4(1H,3H)-dion, hitro razpadeta v 4-

hidroksikinolin-2(1H)-on. Predvidevamo, da bodo rezultati dela zanimivi za širšo kemijsko javnost, saj smo v nastali publikaciji opisali: hidratacijo organskih tiocianatov v ustrezne tiokarbamate pod pogoji, kjer sta obe vrsti molekul v prisotnosti vlage nestabilni, sintezo novih tiazolo[5,4-c]kinolin-2,4(3aH,5H)-dionov (struktурno sorodni 2-ariltiazolo[4,5-c]kinolin-4(5H)-oni so pred kratkim vzbudili pozornost kot kandidati antagonistov GABA receptorjev) in 3-tiocianatokinolin-2,4(1H,3H)-dionov in hidrolizo 3-karbamoilsulfanilkolin-2,4(1H,3H)-dionov in 3-tiocianatokinolin-2,4(1H,3H)-dionov v 4-hidroksikinolin-2(1H)-one. Opisali smo tudi anizotropni efekt, ki na kinolinonskih derivatih do sedaj še ni bil opažen. Čeprav smo se pri našem delu osredotočili na kinolinonske derivate, pa bo rezultate možno uporabit tudi širše, pri sintezi 2-okso-3-tiazolinov (*J. Org. Chem.* 2004, 69, 5646–5651).

V sodelovanju z raziskovalnimi skupinami dr. J. R. Barria z UCLA (Los Angeles), dr. M. Bresjanac z MF UL in dr. R. Jerale s KI potekajo raziskave možnosti razširitve uporabe sintetiziranih derivatov naftalena za diagnostiko bolezni, pri katerih je degeneracija centralnega živčnega sistema posledica izločanja beta-amiloidnih agregatov, na bolezni, pri katerih je značilen pojav prionskih proteinov. Takšne bolezni so bolezen norih krav pri kravah ter varianta Creutzfeld-Jacobove bolezni pri človeku. Raziskujemo tudi potek odstranjevanje acilne skupine z aromatskega jedra, ki je v literaturi zelo redko omenjena in omejena na spojine z velikim stičnimi ovirami med skupinami. Opazili smo, da z močnimi kislinami v prisotnosti primernega topila lahko pri derivatih aromatskih spojin z acetilno in hidroksi oziroma metoksi skupino pride do odstranitve acetilne skupine. Ugotavljam omejitve in možnosti te pretvorbe.

V okviru postdoktorske izpopolnjevanja so bile opravljene raziskave sinteze nenasičenih 1,2-amino alkoholov in etrov iz aziridinov in organolitijevih spojin. (B. Štefane et al. *Chem. Commun.* 2004, 2234–2235).

Z raziskovalnima skupinama B.U.W Maesa (University of Antwerp) in P. Matyusa (Hungarian Academy of Sciences) smo raziskovali nove sintezne poti za pripravo 5H-piridazino[4,5-b]indolov (*Tetrahedron* 2004, 60, 2283–2291).

Del raziskav članov programske skupine poteka tudi v okviru raziskovalnega projekta *Od multifunkcionalnih gradnikov do biološko aktivnih spojin*.

Člani programske skupine so opravili tudi več predavanj (1 plenarno in več vabljenih) na mednarodnih konferencah.

Programme realisation report

The research work of our program group is mutually connected with the investigation of different research teams via a variety of international projects (COST, bilateral), and also in connection with domestic groups and partially industry. Our goal is to develop the synthesis of target molecules for the scientific purposes and for the application with the emphasis on the ecologically-pure conditions (green chemistry) and high atom economy. Here we present some details.

Dialkyl diazenedicarboxylate reacted with 4-fluorophenol in the presence of $ZrCl_4$ to give the derivatives of 2-chlorophenol, aminated at the position 4 with regard to the OH group. The same products were formed on amination of 2-chlorophenol with the corresponding diazenes. On the other hand, the amination of 2-fluorophenol led to 2-fluorophenols, aminated at the position 4. The above results clearly indicated that the aminations of 4-fluorophenol was not only an electrophilic process. A plausible reaction pathway seems to involve an ion pair intermediate, followed by an ipso attack of the nitrogen electrophile at position 4. The next step is probably the elimination of $ZrCl_4F^-$ and the entrance of the chloride ion what resulted in a tautomer of the final product (*J. Org. Chem.* 2004, 69, 2224–2227).

Our research also involved transformations of β -keto esters with $BF_3 \cdot Et_2O$. We found that 5,6-di-substituted 2,2-difluoro-4-alkoxy-1,3,2-dioxaborinanes, which can be easily obtained from β -keto esters, reacted regio- and chemoselectively with amines under mild reaction conditions to form 2,2-difluoro-4-alkyl-amino-1,3,2-ioxaborinanes in almost quantitative yields. The latter compounds can be easily deprotected, yielding β -keto amides, or directly transformed into β -enamino carboxamides. This procedure was also applied to the reaction of 2,2-difluoro-4-alkoxy-1,3,2-dioxaborinanes with arylhydrazines which selectively afforded β -hydrazono esters, in some cases without further cyclization to pyrazolones (*Synlett* 2004, 680–702).

In collaboration with the research group of Dr. M. Osmak (Institute Ruđer Bošković, Zagreb) a cyto-toxicity of several compounds was studied. We prepared a number of various diazene-carboxamides, unsymmetrical diazenedicarboxamides, Michael adducts, obtained from aminocarbonyl-diazene-carboxamides and 1,3-dicarbonyl compounds, as well as aminated halophenols. The best results were obtained with N-(2-chloroethyl)-2-(2,3,4,5,6-

pentafluorophenyl)diazene carboxamide. IC₅₀ for this compound is in the range of 16–42 µM for several carcinoma cells. It should be mentioned that this compound does not inhibit only the growth of parental cells but also the growth of drug-resistant cell lines, resistant to cisplatin, vincristine and doxorubicin (*Drug Develop. Res.* 2004, 61, 95–100).

In the field of the synthesis and transformations of different amino acid derivatives (cyclic and non-cyclic) we succeeded to synthesize isomerically-pure β-pyrazolyl- and β pyrimidinyl-α,β-dihydro-α-amino acid derivatives, which are now under further treatment in the frame of the research project COST D24/007, where we are developing new methods for the industrially relevant asymmetric hydrogenation of such compounds. In the field of the cyclic amino acid derivatives we investigated the transformation with hydrazines, where the new conversion of the pyran-2-one system into the dihydropyridazine occurred. Here we succeeded to isolate an intermediate, thus enabling the possibility to clarify the whole transformation. Beside the above transformations we have also investigated the cycloaddition reactions of 2H-pyran-2-one derivatives. So we studied the Diels-Alder reaction of pyran-2-ones with alkynes, in which highly substituted derivatives of aniline in ortho-phenylenediamine were obtained. We focused our attention on the synthesis of 3-benzoylamino-6-methyl-2H-pyran-2-ones containing at the position 5 an electron withdrawing group, which exhibits a strong influence on the reaction rate (*J. Org. Chem.*, 2004, 69, 319–3193).

We also studied the utility of two 2-benzoylamino-3-chloropropenoic acid derivatives, N-(1-carbamoyl-2-chlorovinyl)benzamide and methyl 2-benzoylamino-3-chloropropenoate, in the synthesis of partly saturated spiro-oxazole-quinoxalines and their analogues. Results of these preliminary investigations show that the amide reacts with aromatic and heteroaromatic diamines similarly as the acid giving the spiro systems mentioned above. The reactions were carried out with benzene-1,2-diamine, 3-nitrobenzene-1,2-diamine, 4-nitrobenzene-1,2-diamine, 4,5-dichloro-benzene-1,2-diamine, 4-methylbenzene-1,2-diamine, 4-benzoylbenzene-1,2-diamine, 4-chloro-benzene-1,2-diamine, 4-methoxycarbonylbenzene-1,2-diamine, naphthalene-2,3-diamine and pyridine-2,3-diamine. On the other hand, it turned out that the ester is not suitable for this purpose. Only in one case, in the reaction with naphthalene-2,3-diamine, we discovered traces of the corresponding spiro compound in the reaction mixture.

As a part of BI-CZ/03-04-5 bilateral collaboration with the research group from Czech Republic (S. Kafka and A. Klasek, Tomas Bata University in Zlin) we have studied novel tandem hydration-cyclocondensation of 3-substituted 3-thiocyanatoquinoline-2,4(1H,3H)-diones, to 3a-substituted thiazolo[5,4-c]quinoline-2,4(3aH,5H)-diones via thiocarbamate intermediates (3-carbamoyl-sulfanyl-quinoline-2,4(1H,3H)-diones) with the use of sulfuric acid as a ‘water-containing water-reactive’ agent. Concentrated sulfuric acid was found to be critical for the reaction as both corresponding 3-thiocyanatoquinoline-2,4(1H,3H)-diones and 3-carbamoylsulfanylquinoline-2,4(1H,3H)-diones in the presence of water rapidly transform to 4-hydroxyquinolin-2(1H)-ones. Several issues were addressed in this work that would be of interest to a broader chemical community, such as: hydration of organic thiocyanates to the corresponding thiocarbamates under conditions where both compounds are highly water sensitive, the appearance of novel 3-carbamoylsulfanylquinoline-2,4(1H,3H)-diones and thiazolo[5,4-c]quinoline-2,4(3aH,5H)-diones (structurally similar 2-arylthiazolo[4,5-c]quinolin-4(5H)-ones have been recently disclosed to possess high affinity for the GABA receptor), hydrolysis of 3-thiocyanatoquinoline-2,4(1H,3H)-diones and 3-carbamoylsulfanylquinoline-2,4(1H,3H)-diones to 4-hydroxyquinolin-2(1H)-ones, a novel anisotropic effect in some quinolinone derivatives. Although we have demonstrated this methodology on quinolinedione derivatives, we believe this protocol will find a broader application in the synthesis of 2-oxo-3-thiazolines (*J. Org. Chem.* 2004, 69, 5646–5651).

Collaborative efforts of research groups from UCLA (Dr. J. R. Barrio), School of Medicine UL (Dr. M. Bresjanac), and National Institute of Chemistry (Dr. R. Jerala) were directed towards extending the application of naphthalene-based probes for detection of amyloid deposits in CNS in Alzheimer's patients to other neurodegenerative diseases in which prion proteins play crucial role. These diseases are Mad Cow Disease in cow or variant Creutzfeld Jacob disease in humans. We are also exploring the scope and limits of acid catalyzed deacylation of activated aromatic compounds. So far only examples of such reactions of sterically crowded aromatic acyl compounds were described. We have noticed that acyl and hydroxy (or methoxy) group containing aromatic compounds react with acids like HBr in the presence of an appropriate solvent to give deacylated products.

During the postdoctoral research activity the investigation of the syntheses of unsaturated 1,2-amino alcohols and ethers from aziridines and organolithiums was performed by one of us (B. Štefane et al. *Chem. Commun.* 2004, 223–2235).

New synthetic approaches to 5H-pyridazino[4,5-b]indoles were investigated in joint research with groups of B. U. W Maes (University of Antwerp) and P. Matyus (Hungarian Academy of Sciences) (*Tetrahedron* 2004, 60, 2283–2291).

A part of our investigations is also taking place within the research project *From multifunctional building blocks to biologically active compounds*.

The members of the program group have delivered several lectures (1 plenary and several invited) at the international conferences.

ANALIZNA KEMIJA
ANALYTICAL CHEMISTRY

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

P1-0153
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
dr. Jana Kolar
Polonca Kralj

Mladi raziskovalci / Young Researchers

Nataša Kovačič
Vid Simon Šelih
Kočar Drago
Martin Šala

Tehniki / Technicians

Jolanda Furlan
Mojca Žitko
Zdenka Držaj

Poročilo o realizaciji programa

Raziskovalci programske skupine so v letu 2004 objavili 19 izvirnih znanstvenih člankov (Bibliografija katedre za analizno kemijo). Raziskovali smo naslednje:

Metode za določanje atrazina in njegovih razkrojkov s HPLC in micelarno elektrokinetično kromatografijo (*Chromatographia*, 2004, 60, S107-S112).

Kemiluminiscenca papirja: vpliv kristaliničnosti, morfologije in velikosti vzorca (*Polym. Degrad. Stab.*, 2004, 86, 269-274); vpliv vode na termično oksidacijo celuloze (*Carbohydr. Polym.*, 2004, 58, 301-309). Obdelava dokumentov korodiranih s črnili na železo-taninski osnovi: izdelava nove analizne metodologije (*Restaurator*, 2004, 25, 94-103). Kakšen je pH alkalnih papirjev (*e-PS*, 2004, 1, 35-47).

Vpliv fizikalno kemijskih parametrov na sproščanje diklofenaka iz tablet z lipofilnim ogrodnim sistemom (*Acta Chim. Slov.*, 2004, 51, 409-425); karakterizacija parametrov, ki vplivajo na sproščanje slabo topnih učinkovin iz farmacevtskih proizvodov (*Anal. Chim. Acta*, 2004, 502, 107-113).

Karakterizacija Co-zlitin z elektrokemijskimi in XPS tehnikami (*J. Appl. Electrochem.*, 2004, 34, 517-524; *J. Mater. Sci., Mater. Med.*, 2004, 15, 643-650) (sodelovanje z Inštitutom Jožef Stefan).

Spektrometer s tribarvno diodo in mikroreakcijsko komoro (*Talanta*, 2004, 62, 143-150).

Napovedovanje termodinamskih količin pri določanju ogljikovodikov s plinsko kromatografijo (*J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, 2004, 44, 399-409); napovedovanje reakcijskih hitrosti pri reakcijah nenasičenih ogljikovodikov z OH radikali s pomočjo variabilnih povezovalnih indeksov (*Molecules*, 2004, 9, 1160-1176). Modeliranje strukturnih lastnosti s pomočjo variabilnih povezovalnih indeksov (*Molecules*, 2004, 9, 1177-1193). Frekvenčna analiza meritnih podatkov ozonske plasti v troposferi (*J. Geophys. Res.*, 2004, 109, 1-9).

Določanje triazinov in metabolitov atrazina v tleh: optimizacija priprave vzorca za HPLC analizo s pomočjo ekstrakcije pod vplivom mikrovalov (*Acta Chim. Slov.* 2004, 51, 395-407). Vpliv nekaterih bistvenih sestavin (nitrati in fosfati) in kovinskih ionov (Mn, Co, Zn) na razvoj zelene alge (*Ulva rigida*) (*Nova Hedwigia*, 2004, 79, 353-375). Ovrednotenje sproščanja nekaterih plinov na deponiji premoga ob termoelektarni Šoštanj (*Chemosphere*, 2004, 55, 1121 – 1126).

Določanje ^{210}Pb in ^{210}Po v sedimentih in bioloških materialih (*Appl. radiat. Isotopes*, 2004, 60, 717-723), (v sodelovanju z IJS). Vpliv sestava pufra na »in vitro« preiskave permeabilnosti (*Int. J. Pharm.*, 2004, 272, 173-180), (sodelovanje s FFA, UL).

Programme realisation report

The members of the research programme team published in the year 2004 19 original scientific papers (Chair of Analytical Chemistry-References). Following subjects were studied:

Optimization of liquid chromatography and micellar electrokinetic chromatography for the determination of atrazine and its first degradation products in humic waters (*Chromatographia*, 2004, 60, S107-S112).

Chemiluminiscence from paper: the effect of sample crystallinity, morphology and size (*Polym. Degrad. Stab.*, 2004, 86, 269-274); thermal oxidation of cellulose and the effect of water at temperatures above 100°C (*Carbohydr. Polym.*, 2004, 58, 301-309). The effects of treatments on iron gall ink corroded documents (*Restaurator*, 2004, 25, 94-103). What is the pH of alkaline paper? (*e-PS*, 2004, 1, 35-47).

Physicochemical parameters affecting the release of diclofenac sodium from lipophilic matrix tablets (*Acta Chim. Slov.*, 2004, 51, 409-425); characterization of factors affecting the release of low-solubility drug from prolonged release tablets (*Anal. Chim. Acta.*, 2004, 502, 107-113).

Electrochemical and XPS study of Co-based alloys for orthopaedic applications (*J. Appl. Electrochem.*, 2004, 34, 517-524; *J. Mater. Sci., Mater. Med.*, 2004, 15, 643-650) (collaboration with IJS).

Spectrometer with microreaction chamber and tri-colour light emitting diode as a light source (*Talanta*, 2004, 62, 143-150),

Prediction of thermodynamic parameters of hydrocarbons in gas chromatography from molecular structure (*J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, 2004, 44, 399-409); prediction of reaction rate constants of volatile unsaturated hydrocarbons with OH radicals (*Molecules*, 2004, 9, 1160-1176); modeling structure-property relationships by a variable connectivity index (*Molecules*, 2004, 9, 1177-1193). Spectral analysis of boundary layer ozone data from the EUROTRAC TOR network. (*J. Geophys. Res.*, 2004, 109, 1-9).

Determination of triazines and atrazine metabolites in soil by microwave-assisted solvent extraction and HPLC (*Acta Chim. Slov.*, 2004, 51, 395-407). Interactive effects of macronutrients and metals (Mn, Co, Zn) on the ephemeral green alga *Ulva rigida* (*Nova Hedwigia*, 2004, 79, 353-375). Evaluation of gas emissions from coal stockpile (*Chemosphere*, 2004, 55, 1121 – 1126).

Determination of ^{210}Pb and ^{210}Po in sediment and soil leachates and in biological materials (*Appl. Radiat. Isotopes*, 2004, 60, 717-723), (colaboration with the Jožef Stefan Institute). The influence of buffer composition on tissue integrity during permeability experiments "in vitro" (*Int. J. Pharm.*, 2004, 272, 173-180), (colaboration with Faculty of Pharmacy, UL).

FIZIKALNA KEMIJA
PHYSICAL CHEMISTRY

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

P1-201
prof. dr. Vojeslav Vlachy

Sodelavci programske skupine
Programme group co-workers

Raziskovalci / Researchers

prof. dr. Vojeslav Vlachy
prof. dr. Gorazd Vesnaver
prof. dr. Jože Koller
prof. dr. Cyril Pohar
prof. dr. Marija Bešter Rogač
prof. dr. Andrej Jamnik
doc. dr. Ksenija Kogej
doc. dr. Barbara Hribar Lee
doc. dr. Jurij Reščič
doc. dr. Jurij Lah
asist. dr. Tomaž Urbič
asist. dr. Janez Cerar
asist. dr. Črtomir Podlipnik
asist. dr. Matija Tomšič

Mladi raziskovalci / Young Researchers

mag. Jožica Dolenc
Iztok Prislan
Boštjan Jerman
Tine Martin Perger

Tehniki / Technicians

Cirila Peklaj
Anton Kelbl
Anton Kokalj

Poročilo o realizaciji programa

Naše raziskave so tesno povezane s pedagoškim programom katedre. Eksperimentalne in teoretične raziskave se dopolnjujejo; namen našega dela je razumevanje lastnosti snovi na molekularnem nivoju.

V preteklem letu smo proučevali:

1. termodinamične in transportne lastnosti raztopin +2:-2 elektrolitov ter fulerenkih polielektrolitov,
2. polimetakrilno kislino in nekatere poliamfolite na osnovi maleinske kisline ter njihove interakcije s površinsko aktivnimi snovmi,
3. mikroemulzije in sicer z metodo ozkokotnega sisanja (SAXS), z merjenjem gostote, viskoznosti in z DSC,
4. termodinamiko vezanja antibiotikov na DNK in tvorbe micel kiralnih površinsko aktivnih snovi,
5. s skupino prof. Plesničarja smo sodelovali pri raziskavah polioksidov,
6. vpliv magnetnega polja na izločanje kalcijevega karbonata,
7. vezanje netropsina v ožji kanal Dickerson-Drew-jevega dodekamera s pomočjo MM/MQ računov,
8. katalitični efekt v raztopinah polielektrolitov - pri tem smo uporabili različne teoretične metode,
9. absorpcijo ionov in molekul v neurejeni snovi in tudi v drugih omejenih sistemih z metodami Monte Carlo, DFT, in integralnimi enačbami, ter
10. hidratacijo ionov in nevtralnih delcev s pomočjo različnih modelov vode.

V okviru uporabnih raziskav smo

1. v predformulacijski študiji smo za Lek d.d. določili termodinamčno stabilnost nekaterih aktivnih učinkovin,
2. sodelovali smo pri optimizaciji procesa pridobivanja fungicida Cuprablau-Z, in
3. raziskovali možnosti uporabe odpadne žveplove kisline za izdelavo mavca., oboje s Cinkarno Celje.

V letu 2004 smo objavili dvanajst člankov, osem prispevkov pa je v tisku in bodo objavljeni v letu 2005.

Programme realisation report

Our research is closely related to the courses taught in the department. Experimental and theoretical studies complement each other; the purpose of our research is a better understanding of the material properties on the molecular level.

In the previous year we studied:

1. thermodynamic and transport properties of +2:-2 electrolytes and fullerene derived polyelectrolytes,
2. polymetacrylic acid and some polyampholytes on the basis of maleinic acid, and their interactions with surfactants,
3. microemulsions, with the small angle x-ray scattering method (SAXS), density and viscosity measurements, and DSC,
4. thermodynamics of binding of antibiotics to DNA, and micelle formation of chiral surfactants,
5. with a group of Prof. Plesničar we collaborated in polyoxide research,
6. the influence of the magnetic field on the extraction of calcium carbonate,
7. binding of netropsin in the minor groove of Dickerson-Drew dodecamere using MM/MQ calculations,
8. catalytic effect in the polyelectrolyte solutions – using various theoretical methods,
9. the adsorption of ions and molecules in random matrixes and other confined systems using Monte Carlo method, DFT, and integral equations,
10. hydration of ions and neutral particles in different water models

In applicative research we

1. in the preformulation studies we determined the thermodynamic stability of some active substances for Lek d.d.
2. participated in optimization of a process of producing fungicide Cuprablau-Z, and
3. explored the possible use of waste sulfuric acid for production of gypsum, both with Cinkarna Celje

Twelve papers were published in the year of 2004 while eight papers are currently in press and will be out of print in 2005.

BIOANORGANSKA IN BIOORGANSKA KEMIJA *BIOINORGANIC AND BIOORGANIC CHEMISTRY*

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

P1-0134
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
Vojmir Francetič

Mladi raziskovalci / Young Researchers

Igor Pravst

Tehniki / Technicians

Damjan Erčulj
Urša Levec
Zdenka Sakelšek

Poročilo o realizaciji programa

BIOANORGANSKI SKLOP:

Prvi med predvidenimi cilji se nanaša na biomimetske modele interakcij kovinskih ionov z izbranimi organskimi molekulami. Kot kovino smo izbrali molibden, ki je esencialni element in ima vrsto funkcij v živih organizmih. Za molibden v oksidacijskem stanju +5 so značilne $\{Mo_2O_4\}^{2+}$ dinuklearne enote, ki se pri reakcijah z ligandi s kisikovimi donorimi atomi, na različne načine samourejajo. Naslednji cilj se nanaša na študij vezave kovinskih ionov na biološke makromolekule. Vezava kovinskega iona lahko bistveno spremeni lastnosti makromolekule, pri čemer ima vsak kovinski ion svoj specifični vpliv. Študirali smo koordinacijsko sfero Mn(II), Co(II) in Ni(II) v njihovih kompleksih s hialuronsko kislino. S FTIR in EXAFS spektroskopijo smo ugotovili, da je v večini primerov koordinacija kovinskih ionov oktaedrična, redkeje pa tetraedrična. Naslednji cilj predvideva pripravo in študij tankih plasti kovinskih oksidov, ki imajo vrsto potencialnih aplikacij. V seriji treh člankov smo objavili študij sol-gel priprave filmov iz CeO_2 in CeO_2 , dopiranega z vanadijevimi oksidi. S primerjavo termične analize kserogelov in tankih filmov smo prikazali uporabnost termoanalizne tehnike za tanke filme, ki smo jo sami razvili. Naslednja dva prispevka se nanašata na XANES in EXAFS meritve omenjenih tankih plasti. Dobre elektrokemijske lastnosti pripravljenih filmov smo korelirali z neredom v strukturi filma. Vlogo termične analize Pri optimizaciji elektrokromnega efekta tankih plasti nikljevega oksida sintetiziranega po sol-gel postopku, smo ugotavljali vpliv prekurzorja (Ni-acetat, Ni-sulfat) in zmožnosti termične analize pri tej optimizaciji. Zadnji cilj predvideva ukvarjanje s problematiko kovin v biološkem in širšem okolju, iskanje specifičnih analiznih rešitev in študij možnosti imobilizacije kovin, ki so v topni obliki in predstavlajo onesnaževanje okolja. Tako smo uvedli metodo za določevanje visokomolekularnih zvrsti aluminija v bioloških vzorcih. Na področju onesnaževanja okolja s kovinami pa smo prikazali možnosti imobilizacije Ni in Zn topnih zvrsti s fosfatnimi stabilizatorji.

BIOORGANSKI SKLOP:

Glavni cilj raziskovalnega programa v omenjenem sklopu so nova spoznanja na področju halogenske organske kemije. Naš poglavitni namen je raziskovanje novih pristopov k selektivni uvedbi halogenskih atomov v organske molekule, tako da pri tem čim bolj posnemamo procese, ki potekajo v naravi. Reagente, substrate in reakcijske pogoje modeliramo tako, da imajo čim večji biomimetski značaj. Raziskovali smo metode direktnega jodiranja organskih molekul z jodidom ali elementarnim jodom in ugotovili, da je 30% vodikov peroksid (H_2O_2) lahko odličen aktivator teh reakcij, ki hkrati regenerira nastali vodikov jodid v aktiven jodirni reagent. Prav tako smo odkrili, da je moč selektivno in efektivno jodirati organske molekule v vodi kot topilu, pri tem pa lahko uporabimo jodid ali elementarni jod v kombinaciji s 30% vodikovim peroksidom. Po tako odkriti novi metodi smo uspešno jodirali aromatske spojine s 100% izkoristkom halogenskega atoma. Raziskovali smo reakcije fluoriranja organskih spojin v vodi in ugotovili, da je SelectfluorTM F-TEDA-BF4 odličen reagent za selektivno fluoriranje tudi v vodnem mediju. Prav tako smo uspešno uporabili fluorna topila (npr. perfluorooktan, C_8F_{18}) kot tekočo membrano za počasno in difuzijsko kontrolirano dodajanje broma v reakcijsko zmes, pri čemer se izognemo uporabi kloriranih topil, zmanjšamo količina organskih topil, medtem ko se fluorno topilo v celoti ponovno uporabi brez potrebnega čiščenja. Omenjena odkritja pomenijo velik preboj na področju halogeniranja organskih spojin in pomemben prispevek k zelenem pristopu pri sintezi organskih molekul. Pri raziskavah sinteze antimalarisksko aktivnih cikličnih peroksidov smo ugotovili, da uporaba fluoriranih alkoholov kot topil, ki aktivirajo oksidacijske lastnosti vodikovega peroksidu, omogoča enostavno in direktno sintezo simetričnih in nesimetričnih 1,2,4,5-tetraoksanov iz enostavnih ketonov. Pri tem ni potrebno predhodno sintetizirati nestabilnih in eksplozivnih geminalnih dihidroperoksidov, prav tako pa se izognemo uporabi ozona in predhodni sintezi bolj komplikiranih izhodnih spojin (N-metilosimov...).

Programme realisation report

BIOINORGANIC PART:

Biomimetic models for metal ions interactions with selected organic molecules represent one of the goals of the present research. Molybdenum has been selected as it plays an important role in living organisms. It forms dinuclear $\{Mo_2O_4\}^{2+}$ units, which assemble themselves in specific ways, when reacting with oxygen donor ligands. Next we studied the binding of metal ions to biological macromolecules. Such as binding can change significantly the properties of macromolecule, with the specific influence of each particular cation. We studied the coordination spheres of Mn(II), Co(II) and Ni(II) in their complexes

with hyaluronic acid. It was shown by FTIR and EXAFS, the coordination is usually octahedral, in some cases also tetrahedral. The next goal is the preparation of thin films of metal oxides with a number of potential applications. In a series of three articles we published sol-gel coatings preparation and characterisation of CeO_2 and CeO_2 doped with vanadium oxides. Comparing thermal analysis of xerogels and films revealed the applicability of the technique for thin films analysis developed in our laboratory. Two papers have been published on XANES and EXAFS studies of mentioned films. Good electrochemical properties of these films were correlated with the disorder in their structure. The role of thermal analysis in optimisation of electrochromic effect of nickel oxide thin films using Ni acetate and Ni sulfate as precursors has been studied. Soluble aluminium species in the food represent a health hazard for humans, where the toxicity probably depends on aluminium species present. We introduced an analytical technique for determination of high-molecular aluminium species in biological samples. Finally, the possibilities of immobilization of soluble Ni and Zn species in the environment using fosfate stabilisation agents have been studied.

BIOORGANIC PART:

This research program is focused mostly in chemistry of halogenated organic compounds. Our main goal is development of new procedures for selective introduction of fluorine into organic molecules with imitating processes which occur in nature when possible. Reagents, substrates and reaction conditions are chosen with care to achieve biomimetic character. We have researched methods of direct iodination of organic molecules with iodides or elemental iodine. We found out that 30% hydrogen peroxide (H_2O_2) can be excellent reaction activator which can additionally regenerate formed hydrogen iodide into active iodination reagent. Furthermore we showed that selective and effective iodination is also possible in water (as solvent) in combination with 30% hydrogen peroxide. Applying this new method several aromatic compounds were iodinated with 100% use of halogen atom. Research was also focused on fluorination of organic compounds in water. We showed that SelectfluorTM F-TEDA-BF₄ is an excellent fluorinating reagent for selective fluorine introduction in water media. Fluorous solvents (Perfluoroctane, C₈F₁₈ etc.) were successfully used for slow membrane diffusion controlled bromine addition into reaction mixture. This enable us to avoid use of chlorinated solvents and reduce the quantity of used solvents as fluorous solvents can be reused with no need of previous purification. These discoveries represent important breakthrough in halogenations of organic compounds and contribute to green approach in synthesis of organic molecules. In area of antimalarial active cyclic peroxides we found out that use of fluorinated alcohols as solvents enables easy accessible direct synthesis of symmetric and nonsymmetric 1,2,4,5-tetraoxanes from ketones by activation of oxidizing properties of hydrogen peroxide. Using this procedure we can avoid previous synthesis of unstable and in some cases explosive geminal dihydroperoxides, use of ozone and previous synthesis based on more complex substances (N-methyloximes,...)

**KEMIJSKO INŽENIRSTVO
CHEMICAL ENGINEERING**

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

PS-0191
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
izr. prof. dr. Igor Plazl
izr. prof. dr. Matjaž Krajnc
doc. dr. Andreja Zupančič Valant
doc. dr. Ana Lakota Družina
dr. Ida Poljanšek
dr. Polona Žnidaršič Plazl
dr. Mitja Lakner

Mladi raziskovalci / Young Researchers

Iztok Hace
Urška Roglič
mag. Lidija Slemenik Perše

Tehniki / Technicians

Vesna Delalut
Dušan Komel
Darinka Darja Radešček
Janez Malovrh

Poročilo o realizaciji programa

V programu KEMIJSKO INŽENIRSTVO so osnovni cilj kvalitetne, predvsem temeljne, raziskave s področja procesnega, biokemijskega in polimernega inženirstva.

Med pomembne dosežke na področju procesnega inženirstva uvrščamo raziskavo preobarjanja bakrovega oksiklorida s suspenzijo kalcijevega hidroksida. Pri tem odvisno od pogojev nastanejo lahko nezaželeni CuO ali zaželena MB3 $[CaCu_3Cl_2(OH)_6]$ oziroma MB4 $[CaCu_4Cl_2(OH)_8]$. Ustrezno kinetično vodenje procesa omogoča proizvodnjo kvalitetnega MB4.

Raziskave hidrodinamičnih karakteristik polimernih monolitov potekajo uspešno, ustrezne publikacije so v pripravi.

Industrijski proces absorpcije SO_2 dimnih plinov v raztopino Ca^{2+} je bil modeliran na osnovi ravnotežnih podatkov, masnih bilanc, prenosa snovi in industrijskih parametrov. Izdelan je bil ravnotežni diagram za sistem Ca^{2+} - SO_2 - H_2O pri $25^\circ C$. Diagram vključuje totalno koncentracijo SO_2 , koncentracijo kombiniranega SO_2 , koncentracijo prostega SO_2 , pH vrednost in krivuljo topnosti $CaSO_3 \cdot 1/2H_2O$. Poleg glavnih kemijskih reakcij, ki potekajo v industrijskem procesu, je v modelu upoštevan in razložen tudi vpliv in pomen reakcij v katerih sodelujejo ostale kemijske specije, ki so prav tako prisotne na industrijski napravi. Industrijski proces absorpcije je bil razdeljen na tri delne procese: absorpcija SO_2 in sulfita do nastanka bisulfita; razapljanje apnenca in njegova reakcija s $Ca(HSO_3)_2$; absorpcija O_2 , oksidacija $CaSO_3$ in kristalizacija sadre (masna bilanca in prenos snovi). Model je bil validiran z industrijskimi podatki. Rezultati študije so objavljeni v članku Equilibrium and mass transfer in the Ca^{2+} - SO_2 - H_2O system for the analysis of the flue gas desulphurization process v reviji *Process Safety and Environmental Protection* 82 (B5), 371-380, 2004.

Raziskava s področja delovanja in dimenzioniranja reaktorja/absorberja v primeru dvofaznega toka (klasična kolona z mehurčki), kjer tekoča faza izkazuje lastnosti nenewtonskega medija, je bila usmerjena v ustvarjanje baze eksperimentalno posnetih hidrodinamskih parametrov v odvisnosti od obratovalnih spremenljivk. Že postavljena kompleksna eksperimentalna aparatura je zahtevala nekaj ključnih posegov za prilagoditev le-tega na obratovanje z visokoviskoznimi mediji (do 300 mPas) v širokem področju pretoka obeh mobilnih faz. Raztopine karboksi metil celuloze (CMC) in ksantana so predstavljale nenewtonske tekočine. Eksperimenti so bili glede na izbrani distributer posneti v heterogenem tokovnem režimu, ter delno v režimu čepastega toka plina. Primerjalna študija z vodo (newtonski medij) je pokazala na izrazit, in še vedno ne dovolj raziskan, vpliv nenewtonskega medija na samo kvaliteto plinske disperzije. V primeru raztopin CMC je bila s pristopom volumskega povprečenja z uporabo programskih paketov Mathematica določena dvoparametrska eksponentna funkcionalna odvisnost deleža plina od pretoka plinske faze in ocnjene efektivne viskoznosti tekočine. Raztopine ksantana, kjer je z vidika reološkega obnašanja elastična komponenta močno zastopana, je vpliv efektivne viskoznosti na delovanje kolone bolj kompleksen in zaenkrat še nedorečen.

Reologija: Reološka karakterizacija suspenzij z visoko vsebnostjo trdnih delcev (zaključek reoloških meritev vzorcev zemeljskega plazu Slano blato pri Ajdovščin, reološka, karakterizacija suspenzij glinice v parafinu, vpliv stopnje dispergiranosti pigmentov na reološke lastnosti premazov) Reološka karakterizacija polimernih talin: določevanje viskoelastičnih lastnosti poliamida 6 v odvisnosti od vlage in temperature (230 - $260^\circ C$) z namenom pridobiti potrebne reološke parametre za simulacijo pretoka polimerne taline skozi šobo, določanje reoloških lastnosti visokopremreženih poliestrov (Boltron BH40) pri različnih temperaturah (60 - $90^\circ C$) z namenom proučiti kinetiko tvorbe vodikovih vezi in posledično, časovno odvisnost mehanskih lastnosti polimera. Reološka karakterizacija zgoščenih mikroemulzij: na osnovi meritev je bilo izbrano primerno gostilo in koncentracija gostila, ki omogoča stabilen produkt.

Mešanje: Laminarno mešanje visokoviskoznih in reološko kompleksnih tekočin: določevanje viskoznosti z merjenjem navora na mešalu, določevanje lokalnih hitrosti v mešalniku s pomočjo laser-Dopler anemometrije in intenzivnostjo mešanja s pomočjo vizualizacije in numerične simulacije.

Raziskave na področju biokemijskega inženirstva so potekale v več smereh :

Namen raziskav je bil proučevanje mikrobnih aktivnosti med gojenjem na trdnem gojišču in možnost njihove uporabe pri ravnjanju z odpadki oziroma zaščiti okolja. Raziskave so potekale v skladu s programom in so dale v tej fazi raziskav obetajoče rezultate. V okviru sodelovanja z LEK-om in KRKO

smo raziskovali mikrobne aktivnosti med kompostiranjem odpadne mikrobne biomase iz farmacevtske industrije. V okviru slovensko-češkega bilateralnega projekta smo proučevali razgradnjo organskih barvil z imobilizirano glivo Irpex lacteus. Naredili smo tudi aplikativne raziskave učinkovitosti omakanja mavčnih povojev za Tosamo.

Nadaljevali smo s študijem procesa biotransformacije progesterona s filamentozno glivo *Rhizopus nigricans* ob prisotnosti b-ciklodekstrina v stresanih kulturah. V sklopu raziskav o vplivu organskega topila na biotransformacijo nas je zanimala topnost reaktanta in produkta 11a-hidroksilacije v različnih topilih. Čeprav izbrana topila izredno povečajo topnost progesterona in 11a-hidroksiprogesterona (tudi za faktor 104 v N,N-dimetilformamidu), pa že prisotnost majhnih količin dodanega topila (pod 0,3 vol. %) inhibira rast glive *Rhizopus nigricans* v submerznem gojišču. Zaradi toksičnosti organskih topil lahko pride tudi do inhibicije ali celo denaturacije biokatalizatorja. Po drugi strani pa smo potrdili predhodna spoznanja, da ciklodekstrin ne vpliva inhibitorno na glivo in aktivnost encimskega kompleksa. Zaradi njegove lastnosti, da enkapsulira steroide, pa poveča topnost do 10-krat in s tem hitrost reakcije brez upora proti raztplavljanju. Članek o kinetiki raztplavljanja progesterona ob dodatku b-ciklodekstrina je v fazi recenzije v izbrani znanstveni publikaciji.

Farmacevtske učinkovine glive *Ganoderma lucidum*

V sklopu raziskav farmacevtskih učinkovin s submerzno kultivacijo pridobljene aktivne biomase glive *Ganoderma lucidum*, smo iz aktivne glivine biomase izolirali protein LZ-8. Ob tem smo optimizirali gojišča za izvirni slovenski soj in kitajski soj pridobljen v bilateralnem sodelovanju z Institute of Edible Mushrooms iz Šanghaja.

Protein LZ-8 je intracelularni protein, za katerega je bilo potrebno izdelati metode izolacije, homogenizacije, čiščenja in koncentracije. Komponente smo ločevali na CIM DEAE diskih. Zbrane frakcije smo po koncentriranju analizirali z visoko občutljivo metodo SDS PAGE in hemaglutinacijskim testom. Pri SDS PAGE se je pojavila detekcija pri 15,3 kDa, kar potrjuje prisotnost proteina LZ-8. S hemaglutinacijskim testom smo potrdili uspešno izolacijo proteina in njegovo aktivnost.

Procesno inženirstvo tehnologije vina

Uporaba različnih kovin v fermentacijski tehniki povzroča nastanek šibkih galvanskih tokov. Za simulacijo teh pogojev, oziroma elektrostimulacijo vinske kvasovke *Saccharomyces cerevisiae* v fermentaciji grozdnega mošta sorte Sauvignon, je bil uporabljen enosmerni električni tok različnih jakosti (1,3, 7,7, 30 µA). Rezultati plinske in visokoločljivostne tekočinske kromatografije so pokazali, da se z uvajanjem enosmernega električnega toka v grozjni mošt se poveča metabolna aktivnost vinskih kvasovk sorazmerno s tem pa se poveča tudi količina nastalih produktov. Tako lahko pri nižjih temperaturah z uporabo električnega toka dosežemo podobne rezultate kot pri povišanih temperaturah. Uporaba elektronske mikroskopije ob tem ni pokazala vidnih morfoloških in ultrastrukturnih sprememb v kvasovkah *S. cerevisiae*.

Pridobljena znanja in rezultati o vplivu enosmernega električnega toka na proces fermentacije z vinsko kvasovko *S. cerevisiae* predstavljajo nov vpogled na potek fermentacije grozdnega mošta in nastajanja vina. Empirične izkušnje laboratorijskih eksperimentov, omogočajo v praksi nov pristop v vodenju procesa fermentacije grozdnega mošta, kar je posebnega pomena za proces nastajanja in kvaliteto vina.

Izdelali smo metodo za merjenje prostega SO₂ v vinu. Z modificirano potenciometrično elektrodo za detekcijo CO₂ smo, primerjali izmerjene rezultate z rezultati klasične jodometrične določitve SO₂. Ob tem smo študirali možnosti izbire primerne membrane za prepuščanje SO₂, primerne interne pufrne raztopine, v vodnem mediju območje meje SO₂ v odvisnosti od koncentracije interne pufrne raztopine na osnovi umeritvene krivulje, testiranje membrane za možnost prehajanja H⁺ ionov, testiranje membrane za možnost prehajanja plina CO₂, in testiranje modificirane elektrode za določevanje prostega SO₂ v vinih.

V sklopu raziskovalnega dela v sodelovanju z industrijo KRKA, Novo mesto, smo izvedli raziskavi Študij razpada salinomicina

Uporabili smo kislinsko hidrolizo, nastale produkte smo ločevali s tekočinsko kromatografijo na silikagelu z različnimi mobilnimi fazami. Razpad povzročen z oksalno in p-toluensulfonsko kislino, ni vodil do predvidenih rezultatov. Dobljene frakcije smo izolirali naprej s tekočinsko kromatografijo na silikagelu, radialno preparativno tenkoplastno kromatografijo na silikagelu ter z ekstrakcijo na trdni fazi.

Pri razpadu salinomicina s solno kislino sem s HPLC, MS in NMR tehniko, smo detektirali dva znana razpadna produkta salinomicina ter enega pri razpadu antibiotika s tionilkloridom.

Vpliv glukoze na fermentacijski proces z mikroorganizmom *Streptomyces albus*

Študirali smo primarni metabolizem mikroorganizma *Streptomyces albus* in njegov vpliv na produkcijsko fazo antibiotika salinomicina, ki nastaja kot sekundarni metabolit mikroorganizma. Izhodiščni namen je bil v zamenjavi posameznih kompleksnih komponent s kemijsko definiranimi. V prvi fazi smo določili sladkorje, s katerimi smo nadomestili škrob kot kompleksno komponento. Primerni susbstituti so bili: glukoza, maltoza, laktoza in manitol. V drugi fazi smo z glukozo, kot optimalno zamenjavo, izvedli serijo poskusov, v katerih smo za izbrano koncentracijsko območje dokazali, da prisotnost glukoze v začetnem gojišču ni imela vpliva na produktivnost antibiotika. Ob tem sem razvila tudi novo analizno metodo za določevanje organskih kislin, ki po do sedaj znanih podatkih iz literature v procesu z mikroorganizmom *S. albus* še ni bila uporabljena.

Študirali smo kinetiko radikalske polimerizacije dialil tereftalata v masi v širokem temperaturnem območju od 50 °C do 150°C s širimi različnimi peroksidnimi iniciatorji. Konverzijo smo določali s pomočjo FTIR spektroskopije. Učinkovitost iniciatorja in konstanto hitrosti razpada iniciatorja smo določili s pomočjo "dead end" teorije polimerizacije. Z izmerjenih vrednosti molskih mas smo določili vrednost konstant reakcijskih hitrosti za degradativni in efektivni prenos radikalov. Razmerje hitrostnih konstant za kemijsko kontrolirano terminacijo in propagacijo k_{p0} / k_t polimerizacijskega sistema smo določili iz začetne hitrosti polimerizacije in številčnega povprečja molskih mas. Vrednosti so med 0.25×10^{-3} and 15.7×10^{-3} L mol⁻¹ s⁻¹. Temperaturo steklastega prehoda (191 °C) smo določili s pomočjo ADSC metode. Izračunane konverzijske točke dobljene iz kinetičnega modela so se dobro ujemale z izmerjenimi konverzijami kot tudi z povprečnimi molskimi masami. Vrednosti hitrostnih konstant difuzijsko kontrolirane propagacije in terminacije k_{t0} in k_{p0} z jasnimi fizikalno kemijskimi lastnostmi sta edina dva parametra ki smo ju določili z regresijo razvitega kinetičnega modela. Rezultati študije so objavljeni v članku Kinetics and modeling of the diffusion-controlled diallyl terephthalate polymerization v reviji *Polymer Engineering and Science* 44 (10), 2005-2018, 2004.

V nadaljevanju smo z uporabo Attenuated total reflection infrardeče spektroskopije (ATR-FTIR) določili vrednost difuzijskega koeficiente za difuzijo monomera dialil tereftalata (DAT) v polimerni film dialil tereftalata. Meritve so bile izvedene pri različnih temperaturah med 21°C in 50°C in različnih debelinah filmov od 60 mm do 180 mm. V različnih časih smo posneli FTIR spektre in določili vrednost koeficiente difuzije z regresijo razvite enačbe na izmerjene podatke. Rezultati študije so objavljeni v članku Diffusion coefficient of diallyl terephthalate monomer into thin polymer film v reviji *Chemical and Biochemical Engineering Quarterly* 18 (1), 73-76, 2004.

Alilni polimeri predstavljajo pomembne materiale za izdelovanje optičnih leč izjemnih lastnosti in kakovosti. Modeliranje procesa polimerizacije je še posebej zahtevno, saj se pri tem sprosti relativno visoka reakcijska toplota. Tako sta dinamika nastajanja toplotne in njen prenos iz jedra izdelka, ključna dejavnika doseganja kakovosti končnih izdelkov. Namen predstavljenih raziskav je raziskati polimerizacijo dialil tereftalatov v masi s pomočjo DSC metode ter določiti navidezne kinetične parametre. Obdelali smo pristop k izračunavanju reakcijske kinetike na osnovi termoanalitičnih podatkov. Med neizotermnimi ali dinamičnimi metodami sta najpomembnejši metoda ene meritve – SHR, ki je v opuščanju in metoda večih dinamičnih meritev – MHR. Med slednjimi so najpomembnejše izokonverzijske metode, kjer smo posvetili posebno pozornost metodi S. Vyazovkina. Na koncu smo obravnavali izokinetično enačbo ali kompenzacjski učinek – IKE, katero smo uporabili kot osrednje orodje inženirske analize in oblikovanja predloga nove metodologije za izračun inženirske relevantnega kinetičnega tripla (»trojke«) – (E_a, n_{av}; A in reakcijskega modela). Kot glavno metodo smo uporabili izokonverzijsko analizo brez predhodne določitve reakcijskega modela. Proses polimerizacije je bil izvajan predvsem pri neizotermnih pogojih v DSC aparaturi pri različnih hitrostih segrevanja β za dva primerljiva alilna sistema (DAT/5%CHPC in DADC/5%CHPC). Rezultati kinetične analize, izraženi v obliki kinetične »trojke« (E_a, A, f(α)), se spremenjajo glede na uporabljeni metodo računanja, glede na obseg reakcije in uporabljene procesne parametre, predvsem hitrosti segrevanja β . Takšno spremenjanje je znak večstopenjskega in kompleksnega reakcijskega mehanizma. Reakcijski mehanizem smo skušali poenostaviti z uporabo enostopenjskega reakcijskega modela f(α) v obliki (1- α)ⁿ. Metoda testa ustreznosti po Málek-u je pokazala upravičenost takšne poenostavitev. S pomočjo uporabe izokinetične enačbe – IKE v obliki enačbe premice $\ln A\alpha = aE_{a,app} + b$ smo odkrili, da premice za različne obsege reakcije α konvergirajo v skupno točko. Enako obnašanje izkazujejo rezultati, dobljeni pri izotermnih in neizotermnih pogojih polimerizacije. S pomočjo metode najboljšega prileganja podatkovnih matrik med seboj (r^2) smo izbrali skupno točko (in v njej kinetično »trojko«), ki jo je mogoče uporabiti za simulacijo polimerizacije, tako pri izotermnih kakor neizotermnih pogojih. Opravljena je bila primerjava med

načrtovanimi in dejanskimi podatki konverzije α za polimerizacijski cikel, ki se uporablja v industrijskem procesu. Zelo dobro ujemanje rezultatov inženirskega modela in preskusa ($r^2=0,9971$) kaže na njegovo inženirsko relevantnost in ustreznost postopka za njegov izračun. Rezultati študije so objavljeni v članku Curing of the diethylene glycol bis(allyl carbonate) determination of the kinetic triplet A $E_{a,app}$ α using the isoconversional method and compensation effect v reviji *Chemical and Biochemical Engineering Quarterly* 18 (1), 65-71, 2004.

Vodne akrilatno poliuretanske (AC-PU) hibridne emulzije so bile pripravljene s polšaržno emulzijsko kopolimerizacijo metil metakrilata in butil akrilata v prisotnosti dveh različnih poliuretanskih disperzij. Poliuretanske disperzije so bile sintetizirane iz izoforondiizocianata (IPDI), poliestrskih poliolov z molekulsko maso 1000 ali 2000 in iz dimetilol propionske kisline (DMPA). Mešanica akrilatnih monomerov je bila dodajana v reaktor v obliki predemulzije. Študirali smo vpliv rigidnosti poliuretanske verige na hitrost polimerizacije akrilatnih monomerov, na velikost in porazdelitev hibridnih delcev, na totalno število delcev v reaktorju in na povprečno število radikalov na delec. Rigidnost poliuretanske verige smo kontrolirano spreminjali s spreminjanjem molekulske mase poliola, ki predstavlja mehke segmente poliuretanske verige. Spreminjali smo hitrost dodajanja monomerne predemulzije v reaktor in študirali njen vpliv na proces. Ugotovili smo, da so poliuretanski delci, ki so bili pripravljeni iz poliola z višjo molekulsko maso, močnejše nabrekali z akrilatno komponento. V psevdo-stacionarnih pogojih je bila hitrost polimerizacije konstantna in istega velikostnega reda kot hitrost dodajanja monomera. Totalno število delcev je bilo v psevdo-stacionarnem stanju konstantno in enako številu poliuretanskih delcev v začetni polnitvi. Izračunali smo, da je bilo povprečno število radikalov na hibriden delec med 0,03 in 0,5. Glede na rezultate raziskav je mogoče sklepati, da je potekala kopolimerizacija metil metakrilata in butil akrilata v prisotnosti poliuretanskih kali po mehanizmu med Smith-Ewartovim primerom I in II. Rezultati študije so objavljeni v članku Seeded semibatch emulsion copolymerization of methyl methacrylate and butyl acrylate using polyurethane dispersion: effect of soft segment length on kinetics v reviji *Colloids And Surfaces A-Physicochemical and Engineering Aspects* 233 (1-3), 51-62, 2004.

Programme realisation report

The main goal of the Chemical Engineering Program is the high quality research, fundamental and applied, in the fields of process, biochemical and polymer engineering.

The industrial production of sparingly soluble copper complex compounds is based on the reactions between copper oxychloride and slaked lime. Our investigation was aimed toward explanation of different reaction mechanisms which can result in several different products. The process control through operating conditions enables the production of the desired compound of acceptable purity.

The research of the hydrodynamics in polymeric monoliths is under way with promising results and will be continued in the next year.

An industrial desulphurization process is modelled on the basis of equilibrium data, mass balance, mass transfer and plant data. For the Ca^{2+} - SO_2 - H_2O system the equilibrium diagram at 25 degrees C is constructed. The diagram presents the concentration of total SO_2 combined SO_2 , true free SO_2 , the pH value and the solubility curve for $\text{CaSO}_3 \cdot 1/2\text{H}_2\text{O}$. Besides the basic chemistry occurring in the process, the role of relevant additional chemical species is explained. The overall desulphurization process is studied through the analysis of the partial processes: absorption of SO_2 and sulphite to bisulphite reaction: limestone dissolution and its reaction with $\text{Ca}(\text{HSO}_3)_2$; absorption of O_2 , oxidation of CaSO_3 and gypsum crystallization mass balance and the mass transfer. The model is tested on the basis of data taken from an industrial plant. The results of this study are summarized in the article Equilibrium and mass transfer in the Ca^{2+} - SO_2 - H_2O system for the analysis of the flue gas desulphurization process published in *Process Safety and Environmental Protection* 82 (B5), 371-380, 2004.

In a conventional bubble column the impact of the gas velocity and consequently of the effective viscosity of the selected non-Newtonian liquids on the quality of gas-liquid structure was studied. Experimental values of gas holdup as the most important hydrodynamic parameter were recorded simultaneously. Also the effect of the liquid flow rate on the gas holdups was examined. Experiments were carried out in a bubble column of 0.14 m in diameter and 2.4 m of total height. A perforated plate served as the gas distributor. The column operated in a concurrent upflow mode and also as the liquid-

batch. Different concentrations of aqueous carboxyl methyl cellulose and xanthan took the role of the non-Newtonian liquids, and air was used as the gas phase. For comparison the same sets of experiments were performed with tap water. Due to the experimental conditions most of these experiments were taken in the heterogeneous hydrodynamic regime and partly under the slug flow conditions. In both modes of operation the highest values of the gas holdup were obtained with water. The linear gas velocity affected the gas hold-up most, for both polymer solutions, while the impact of the effective viscosity was much more pronounced in the case of xanthan solutions. The liquid flow rate showed minor effect on the measured parameter. Finally an exponential type of correlation for the gas holdup prediction in the function of the gas velocity and the effective viscosity of the liquid was successfully developed for CMC solutions. The xanthan solutions exhibit a more complex dependence on the prevailing effective liquid viscosity, which need to be studied.

Rheology:

Rheological characterisation of suspensions with high solid loadings: final part of rheological characterisation of samples taken from different locations of landslide Slano blato, Ajdovščina; rheological investigation of alumina suspensions in paraffin; influence of dispersion quality of pigments on rheological properties of coatings.

Rheological characterisation of polymer melts: determination of viscoelastic properties of polyamide 6 in dependence of humidity content and temperature (230- 260°C) in order to determine the effect of the post-condensation process on the rheological properties of the polymer melt and to gather all necessary material properties for numerical simulations of pressure drop for polymer flow through industrial spinneret; rheological investigations of commercially available fourth generation hyperbranched polyester, Boltron H40 in the temperature range (60- 90°C) to examine the effect of annealing temperature on the kinetic of formation H-bonding structure and, consequently, to study changes in mechanical properties of the polymer with time.

Rheological characterisation of thickened microemulsions: a proper thickener and its concentration to achieve a stable composition of microemulsion was selected on the basis of rheological examination.

Mixing:

Laminar mixing of complex highly viscous fluids: The computer-controlled mixing system enabled measurements of torque in the dependence on the impeller speed. 6-bladed baffled impeller and helical ribbon impeller was used for determination of the viscosity of highly viscous fluid at different impeller speed; determination of local velocities in the mixing vessel by using laser-Doppler anemometry and the intensity of the mixing by visualization method and numerical simulations.

Biochemical Engineering

In cooperation with LEK and KRKA microbial activities during composting of waste microbial biomass from pharmaceutical industry have been investigated. Degradation of organic dyes with immobilised fungus Irpex lacteus in the frame of Slovene-Czech bilateral project has been studied. Research of wetting efficiency of immobilising plaster bandages as an applied research project for Tosama was also done.

A mathematical model, based on the Michaelis-Menten enzyme kinetics and the rate of substrate dissolution is developed to describe the process of progesterone 11 α -hydroxylation by pelleted growth form of filamentous fungus Rhizopus nigricans. It is confirmed that low water solubility of steroids is the limiting step of this process at high steroid concentrations. In order to overcome this problem, β -cyclodextrin, which is known to form inclusion complexes with these organic compounds, is added to the production medium. The phase solubility of steroid - β -cyclodextrin system is investigated and the effect of β -cyclodextrin addition on progesterone biotransformation is evaluated. In the model, Michaelis-Menten kinetics and the rate of substrate dissolution are considered. Furthermore, the effect of β -cyclodextrin (β -CD) addition is investigated. DSC analysis confirms the formation of inclusion complex. The solubility of steroid- β -CD complex in water is determined and the influence of β -cyclodextrin on progesterone biotransformation is evaluated. The enhancement of steroid solubility is shown and the increase in reaction rate is found in the presence of β -cyclodextrin, confirming reasonableness of process optimization with this compound.

Ganoderma lucidum pharmaceutically active protein LZ-8

The World research is directed to discovering components from fungi with the low molecular weight. It has been isolated a lot of interesting components from *G. lucidum*. This area is still unresearched and a lot of new active components are expected. LZ-8 is the immunomodulatory protein isolated from the mycelium of the medicinal fungus Ling Zhi (*G. lucidum*) which gave it its name. The original *Ganoderma lucidum* strain G115 Shanghai was produced in a liquid substrate based on potato dextrose and 2% olive oil. From shaking cultures 7% (v/v) inoculum was taken from submerged culture therefore biomass reaches of 23 g/L. Because the LZ-8 protein is the intracellular protein, the stages of homogenisation, purification and concentration were followed. The components were separated on the CIM DEAE disc. The fractions were collected and analysed with the »silver staining« SDS PAGE and the test of hemagglutination. The level was appeared at 15,3 kDa at the SDS PAGE. The positive reaction turned up after 72 hours at the test of hemagglutination. The results showed that the LZ-8 protein could be presented in the samples R4 and M12.

Process engineering and applications in wine technology

For simulation of various low current galvanic fields in fermentation of Sauvignon blanc grape must with wine yeast *Saccharomyces cerevisiae*, constant electric current of different strength (1.3, 7.7, 30 µA) was applied. By introducing direct current into grape must, the metabolic activity of wine yeasts increases and a proportional increase in the quantity of products can be observed. The results of high performance liquid chromatography (HPLC) and gas chromatography (GC) indicate that by using the direct current at low temperature, similar results, to those using higher temperatures can be achieved. *Saccharomyces cerevisiae* morphology was controlled by electronic and optical microscopy. No visible morphological and ultrastructural changes in yeast *S. cerevisiae* were detected.

The results and knowledge of this research present new knowledge in the process of fermentation and consequently quality of wine. The empirical experience resulting from present laboratory experiments enable an introduction in new approach in fermentation of grape musts wine and in wine process control. Method for on-line SO₂ monitoring in wine was developed. Modified potentiometric electrode for CO₂ detection based on potentiometric pH measurement of the internal solution of the sensor was used. Teflon gas permeable membrane SO₂ was applied. As the most suitable buffer solution 0.1 M Na₂SO₄ / NaHSO₄ with pH 3.3 was found. Developed method has great practical value in wine technology.

Industrial research projects (KRKA, Pharmaceutics d.d. Novo mesto)

Hydrolysis of antibiotic salinomycin

The influence of the particular acids involved in hydrolysis of antibiotic salinomycin as well as to isolate the decomposition products were studied. The experiments were performed with hydrochloric acid, p-toluenesulphonic acid, oxalic acid and tetrachloride as the initiator of hydrochloric acid delivery. Various solvents were also tested. The results were controlled with thin layer chromatography and out of this analysis further steps in isolation processes were followed. The products of hydrolysis were separated by using the high pressure liquid chromatography on silicagel, radial preparative thin layer chromatography on silicagel including and by the solid phase extraction.

Out of hydrolysis the analyses by HPLC, MS, NMR two known degradation products of salinomycin and one out of tetrachloride degradation were indicated. Hydrolysis with oxalic acid and p-toluenesulphonic acid did not give the expected results.

Influence of glucose in secondary metabolism of *Streptomyces albus*

Primary metabolism of *Streptomyces albus* and its influence on productional phase of antibiotic salinomycin, as secondary metabolite was studied. The main purpose was to switch some complex components of the production substrate with chemically defined ones. In the first part of research various carbohydrate supplements for starch to the production substrate as glucose, maltose, lactose and mannitol were studied.

In the second series of experiments proceeded with glucose as the most reasonable substitute. In selected concentration area of glucose it was found that the presence of glucose at starting medium did not have reasonable influence on antibiotic productivity. Related to this research a new analytic method for organic acids (citric acid and acetic acid) determination in process with *S. albus* was developed.

Polymer Engineering

Free radical polymerization kinetics of diallyl terephthalate in bulk was investigated in a wide temperature range from 50 °C to 150 °C with four different peroxide initiators. Conversion points were measured using Fourier Transform Infrared (FTIR) measurements. The initiator efficiencies and the

initiator decomposition rate constants were evaluated from special experiments, applying the theory of dead end polymerization. In addition, the ratios between the degradative and the effective kinetic rate constants to propagation rate constants were obtained from molecular weight measurements at various initiator concentrations. The ratio of chemically controlled termination and propagation rate constant k_{pc}^2/k_{tc} of the polymerization system was PC obtained using the initial rates of polymerization and the number average molecular weight data between 0.25×10^{-3} and 15.7×10^{-3} L mol $^{-1}$ s $^{-1}$. The glass transition temperature of the polymer, 191 °C, was measured by the Alternating Differential Scanning Calorimetry (ADSC) technique. Computed conversions from the developed kinetic model were in good agreement with the conversion and molecular weight measured data. The values of diffusion controlled propagation and termination rate constants k_{td0} and k_{pd0} with clear and physical meaning were the only two parameters obtained from the developed kinetic model fitting. The results of this study are summarized in the article Kinetics and modeling of the diffusion-controlled diallyl terephthalate polymerization published in *Polymer Engineering and Science* 44 (10), 2005-2018, 2004.

Attenuated total reflection infrared spectroscopy (ATR-FTIR) was used to measure diffusion of diallyl terephthalate monomer (DAT) into a poly-DAT film. The assembly, consisting of an ATR crystal, polymer film and a monomer, was heated to a desirable interdiffusion temperature, the spectra thus obtained were deconvoluted and the diffusion coefficient of DAY monomer into polymer was calculated by least square regression technique at various temperatures from 21 °C to 50 °C and, various film thicknesses from 60 μm to 180 μm. The results of this study are summarized in the article Diffusion coefficient of diallyl terephthalate monomer into thin polymer film published in *Chemical and Biochemical Engineering Quarterly* 18 (1), 73-76, 2004.

Lenses (made of allyl monomers like DADC) of different shapes and sizes are produced via free-radical bulk polymerization in a casting process. Preparation of large number products of different sizes can represent a problem because of the heat released during polymerization, which can consequently lead to distortion of the structure. An investigation of the polymerization, using DSC, was performed in order to determine apparent kinetic parameters of the system. Isoconversional multiple heating rate method (MHR) according to Friedman, residual heat analysis of isothermally precured samples and single heat method (SHR), was applied to determine the kinetic parameters. ROn single step reaction model was used to approximate the complex and multi step process. With the application of the "compensation effect" in the form of linear equation. $\ln A = aE_{a,app} + b$ the possibility to unify the kinetic parameters, from the different methods to common one, was established. Kinetic triplet from the common point $E_{a,app} = 128.23$ kJ/mol, $\ln A = 37.133$ (1.34×10^{16} s $^{-1}$) and $f(\alpha) = (1-\alpha)(1,33)$ can be successfully used for the simulations of nonisothermal and isothermal curing processes of DADC initiated with 5 % of CHPC. On a basis of the proposed method it can be concluded that all applied kinetic analysis methods give almost the same equivalent kinetic results. The results of this study are summarized in the article Curing of the diethylene glycol bis(allyl carbonate) determination of the kinetic triplet A, $E_{a,app}$, α using the isoconversional method and compensation effect published in *Chemical and Biochemical Engineering Quarterly* 18 (1), 65-71, 2004.

Aqueous acrylic-polyurethane (AC-PU) hybrid emulsions were prepared by semibatch emulsion copolymerization of methyl methacrylate (MMA) and butyl acrylate (BA) in the presence of two polyurethane (PU) dispersions. PU dispersions were synthesized using isophorone diisocyanate (IPDI), 1000 or 2000 molecular weight poly(neopentyl)adipate, and dimethylol propionic acid (DMPA). The monomer mixture was added in the monomer emulsion feed. We studied the effect of PU chain rigidity on the rate of polymerization, the particle size and distribution, the number of particles, and the average number of radicals per particle. The rigidity was controlled by varying the molecular weight of the polyol, which represents the soft chain segment. The monomer feed rate was varied in order to study its influence on the process. It was observed that PU particles, prepared with higher molecular weight polyol, swelled to a greater extent with acrylic (AC) component. In the pseudo steady state the polymerization rate acquired a constant value, comparable to the value of monomer addition rate. The total particle number in the reactor in the pseudo steady state was constant and similar to the number of PU particles in the initial charge. The obtained results suggested that the MMA/BA copolymerization in the presence of PU seeds showed intermediate behavior between Smith-Ewart cases I and II. The results of this study are summarized in the article Seeded semibatch emulsion copolymerization of methyl methacrylate and butyl acrylate using polyurethane dispersion: effect of soft segment length on kinetics published in *Colloids And Surfaces A-Physicochemical and Engineering Aspects* 233 (1-3), 51-62, 2004.

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

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

P1-0175
prof.dr. Ivan Leban

Sodelavci programske skupine *Programme group co-workers*

Raziskovalci / Researchers

prof. dr. Ivan Leban
prof.dr. Jadran Maček
prof.dr. Radovan-Stane Pejovnik
prof.dr. Primož Šegedin
prof.dr. Boris Čeh
viš. pred. Mitja Robert Kožuh
prof.dr. Alojz Demšar
as.dr. Klementina Zupan
doc.dr. Saša Petriček
prof.dr. Anton Meden
prof.dr. Iztok Turel
doc.dr. Amalija Golobič
doc.dr. Marjan Marinšek
as.dr. Bojan Kozlevčar
as.dr. Andrej Pevec
as.dr. Nina Lah
as.dr. Franc Perdih
as.dr. Daniel Vrbanič
viš.pred. Barbara Novosel

Mladi raziskovalci / Young Researchers

Petra Drevenská
Simona Medvešček
Petra Gorišek
Tanja Razpotnik

Tehniki / Technicians

Aleš Knez
Vinko Volk
Igor Ponikvar

Poročilo o realizaciji programa

V letu 2004 smo načrtovali nadaljevanje in zaključek del iz programske skupine P0-511-103, skupaj s pregledom možnih novih področij delovanja in pridobivanje mladih raziskovalcev, kjer pa nismo bili uspešni.

Sam raziskovalni program, predviden v letu 2004, smo uspešno izvedli.

Prvi sklop programa se ukvarja z bazičnimi raziskavami, drugi sklop pa je bolj aplikativno usmerjen.

V okviru raziskovalnega programa Katedre za anorgansko kemijo, UL FKKT smo raziskovali pogoje priprave različnih anorganskih koordinacijskih in organokovinskih spojin z različnimi ligandi (sintezni del). Kemijsko čiste produkte smo karakterizirali z različnimi fizikalno-kemijskimi metodami. V sklopu katedre deluje strukturni center, ki se ukvarja z rentgensko strukturno analizo tako monokristalov kot praškastih vzorcev (strukturni del). Rentgenski laboratorij nudi svoje usluge ne samo v okviru programske skupine, ampak tudi širšemu raziskovalnemu prostoru kakor tudi farmacevtski industriji (Lek, Krka, Salonit). Za spojine, ki smo jih lahko pripravili v obliki monokristalov, smo določili kristalno in molekulsko strukturo z metodo rentgenske strukturne analize. Iz bibliografskih podatkov je razvidno, katere kristalne strukture smo obravnavali. Raziskave so temeljnega značaja, vendar za nekatere spojine preverjamo tudi njihov biološko aktivnost.

Del raziskovalnega programa na Katedri za anorgansko tehnologijo in materiale je usmerjen v raziskave novih materialov kot tudi procesov za pripravo teh zahtevnih produktov. V letošnjem letu je bila preizkušena sinteza in karakterizacija nekaj nanomaterialov in kompozitov. Predvsem je bila preverjena zgorevalna sinteza, ki se je izkazala za zelo obetavno pri pripravi teh materialov. Iz publiciranih rezultatov so razvidni rezultati redukcije heksakloroplatinske kisline na nosilcu aluminijevega nosilca, rezultati zgorevalne sinteze citratno-nitratne začetne zmesi, sintranja NiO-YSZ kompozitov ter priprava lantanovega galata.

Programme realisation report

In the year 2004 we attempted to complete the investigations from the previous years under the contract No. P0-511-103 together with the wish to find and include new areas of the research. We tried to attract the new junior researchers in the group, but we were not very successful.

We reckon that the research plan for the year 2004 was achieved as a whole.

First part of the programme is dealing with the basic research, while the second part is more applied.

Within the research work of the Chair of the Inorganic Chemistry, the investigations were focused to find the appropriate conditions for the synthesis of the variety of inorganic coordination and organometallic compounds using various ligands. The synthesised compounds were characterised with numerous physico-chemical methods. The X-ray structural work were also performed on the monocrystals as well as on the polycrystalline materials. The collaboration with the various firms have been also established (Lek, Krka, Salonit). The structural research is of the fundamental character, but some of compounds were tested for the biological activity.

Part of the research is performed at the Chair of the Inorganic Technology and Materials. The synthesis and characterization of some nanomaterials and composites were done. The results of the combustion syntheses were found to be promising. We published the results of the reduction of hexachloroplatinum acid on the alumina carriers, the results of the combustion synthesis starting from citrate-nitrate mixture, the results of the sintering NiO-YSZ composites and the synthesis of the lanthanum gallate.

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

Predstojnik katedre / Head: **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
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
doc. dr Amalja Golobič
dr. Sabina Grabner
dr. Nives Kitanovski
mag. Irena Kozjek Škofic
dr. Bojan Kozlevčar
dr. Nina Lah
doc. dr. Barbara Modec
doc. dr. Saša Petriček
dr. Franc Perdih
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
Čas usposabljanja / *Programme duration* Oblika usposabljanja / *Degree*

Mentor / Advisor

Simona Gašperšič
Petrica Drevenšek

Anton Meden
Iztok Turel

4.5 let doktorski študij / PhD
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 singe-crystal diffractometer
Nonius 4-circle difraktometer za monokristale / Nonius 4-circle singe-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 SYNTESSES OF ORGANIC-ANORGANIC HYBRIDS WITH IONIC CONDUCTIVITY Nosilec / <i>Principal researcher:</i> dr. Angela Šurca Vuk
Z1-3246-0103-02	STRUKTURNΑ KARAKTERIZACIJA KERAMIKE S PRAŠKOVNO DIFRAKCIJO / STRUCTURAL CHARACTERIZATION OF CERAMICS WITH X-RAY POWDER DIFFRACTION Nosilec / <i>Principal researcher:</i> dr. Amalija Golobič

Aplikativni projekti / Applied Research

L2-6334	RAZVOJ MATERIALOV PO SOL-GEL POSTOPKIH IN NJIHOVA UPORABA V SISTEMIH ZA IZKORIŠČANJE NEKONVENTIONALNIH VIROV ENERGIJE / DEVELOPMENT OF SOL-GEL MATERIALS FOR NONCONVENTIONAL SOURCES OF ENERGY Nosilec / <i>Principal researcher:</i> dr. Boris Orel
---------	---

Razvojni projekti – subvencije / Industrial Research and Development

I/3-106653/2004	Analiza rentgenskih praškovnih difraktogramov / ANALYSIS OF X-RAY POWDER DIFFRACTION PATTERN /Krka d.d. Novo mesto Nosilec / <i>Principal researcher:</i> prof. dr. Anton Meden/
52/2004	Uporaba rentgenske difrakcije za industrijo cementa / THE USE OF X-RAY DIFFRACTION IN THE INDUSTRY OF CEMENT /Salonit d.d. Anhovo Nosilec / <i>Principal researcher:</i> 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 PARTNERSTVO FAKULTET IN ŠOL (Evropski socialni sklad Nosilec / <i>Principal researcher</i> : prof. dr. Nataša Bukovec

Bibliografija / References

1.01 Izvirni znanstveni članek / Original Scientific Article

- BEVK, David, JAKŠE, Renata, GOLOBIČ, Amalija, GOLIČ, Ljubo, MEDEN, Anton, SVETE, Jurij, STANOVNIK, Branko. Synthesis of 5-substituted ethyl 3-oxo-2H-pyrazolo[4,3-c]pyridine-7-carboxylates. *Heterocycles*, 2004, vol. 63, no. 3, str. 609-629, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25801733]
- CELESTINA, Tina, GOLOBIČ, Amalija, SVETE, Jurij, STANOVNIK, Branko. Intramolecular thermal cyclizations of methyl (E)-3-arylarnino-2-benzoylaminobut-2-enoates. *ARKIVOC*. [Online ed.], 2004, no. (vii), str. 169-176, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25801989]
- CERC KOROŠEC, Romana, BUKOVEC, Peter. The role of thermal analysis in optimization of the electrochromic effect of nickel oxide thin films, prepared by the sol-gel method. Part 2. *Thermochim. acta*. [Print ed.], 2004, vol. 410, no. 1/2, str. 65-71, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25595397]
- CERC KOROŠEC, Romana, KOZJEK-ŠKOFIC, Irena, BUKOVEC, Nataša. Influence of thermal treatment on the ion-storage capacity of Ce oxide and Ce-V mixed oxide films. *Thermochim. acta*. [Print ed.], 2004, vol. 411, no. 2, str. 211-217, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25681925]
- DURÁN PACHÓN, Laura, GOLOBIČ, Amalija, KOZLEVČAR, Bojan, GAMEZ, Patrick, KOOIJMAN, Huub, SPEK, Anthony L., REEDIJK, Jan. Intramolecular oxidation of the ligand 4-methyl-2-N-(2-pyridylmethyl)aminophenol (Hpyramol) upon coordination with iron(II) chloride and manganese(II) perchlorate. *Inorg. Chim. Acta*. [Print ed.], 2004, vol. 357, no. 12, str. 3697-3702, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 26338309]
- GROŠELJ, Uroš, BEVK, David, JAKŠE, Renata, MEDEN, Anton, PIRC, Samo, REČNIK, Simon, STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. Synthesis and properties of N-substituted (1R,5S)-4-aminomethylidene-1,8, 8-trimethyl-2-oxabicyclo[3.2.1]octan-2-ones. *Tetrahedron: asymmetry*. [Print ed.], 2004, vol. 15, no. 15, str. 2367-2383, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 26059013]
- JAKŠE, Renata, SVETE, Jurij, STANOVNIK, Branko, GOLOBIČ, Amalija. Application of alkyl 3-dimethylarnino-2-(1H-indol-3-yl)propenoates in the synthesis of 3-heteroaryllindoles. *Tetrahedron*. [Print ed.], 2004, vol. 60, no. 21, str. 4601-4508, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25828613]
- KITANOVSKI, Nives, GOLOBIČ, Amalija, ČEH, Boris. Synthesis and characterization of trans-(pyH)[Mo(NCS)4py₂] and trans-(py₂H)[Mo(NCS)₄. Crystal structure of trans-(pyH[Mo(NCS)4py₂]. *Croat. chem. acta*, 2004, vol. 77, no. 4, str. 593-598, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 26312453]
- KLÁSEK, Antonín, MRKVÍČKA, Vladimír, PEVEC, Andrej, KOŠMRLJ, Janez. Novel tandem hydration/cyclodehydration of [alpha]-thiocyanatoketones to 2-oxo-3-thiazolines. Application to thiazolo[5,4-c]quinoline-2,3(3aH, 5H)-dione synthesis. *J. org. chem.*, 2004, vol. 69, no. 17, str. 5646-5651, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 26055941]
- KOJIĆ-PRODIĆ, Biserka, PERIĆ, Berislav, ŠTEFANIĆ, Zoran, MEDEN, Anton, MAKAREVIĆ, Janja, JOKIĆ, Milan, ŽINIĆ, Mladen. Supramolecular assembling using synthons with NH-CO(S)-CS-NH and NH-CO-CO-NH functionalites : crystal structures of (S,S)-N,N'-monothiooxalyldileucine methyl ester

and its dithio analogue. *Acta crystallogr., B Struct. sci.*, 2004, vol. 60, no. 1, str. 90-96, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25601797]

KOZLEVČAR, Bojan, MURN, Anica, PODLIPNIK, Katja, LAH, Nina, LEBAN, Ivan, ŠEGEDIN, Primož. Two types of pyridine ligands in mononuclear and dinuclear copper(II) carboxylates. *Croat. chem. acta*, 2004, vol. 77, no. 4, str. 613-618, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 26312709]

KOZLEVČAR, Bojan, LEBAN, Ivan, PETRIČ, Marko, PETRIČEK, Saša, ROUBEAU, Olivier, REEDIJK, Jan, ŠEGEDIN, Primož. Phase transitions and antiferromagnetism in copper(II) hexanoates : a new tetranuclear type of copper carboxylate paddle-wheel association. *Inorg. Chim. Acta*. [Print ed.], 2004, vol. 357, no. 14, str. 4220-4230, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 1184649]

KRALJ, Blaž, ŠCANČAR, Janez, KRIŽAJ, Igor, BENEDIK, Miha, BUKOVEC, Peter, MILAČIČ, Radmila. Determination of high molecular mass Al species in serum and spent CAPD fluids of dialysis patients combining SEC and anion-exchange FPLC with ETAAS detection. *J. anal. at. spectrom.*, 2004, vol. 19, str. 101-106. [COBISS.SI-ID 17963559]

LEBAN, Ivan, JEŠELNIK, Marjan, SIELER, Joachim, KOBE, Jože. Conformational flexibility in a triazole nucleoside derivative : 4-cyano-5-cyanomethyl-1- (2,3,5-tri-O-acetyl-[beta]-D-ribofuranosyl) -1,2,3- triazole. *Nucleosides, nucleotides & nucleic acids*, 2004, vol. 23, no. 1/2, str. 521-530. [COBISS.SI-ID 2947354]

MODEC, Barbara, BRENČIČ, Jurij. Novel hydrogenmaleato molybdenum(V) complexes based on a dinuclear metal-metal bonded unit : syntheses and structural characterization of (PyH)₃[Mo₂O₄Cl₄(OOCCH=CHCOOH)] and (PyH)₃[Mo₂O₄Br₄(OOCCH=CHCOOH)][times]CH₃CN. *Inorg. chem. commun.*. [Print ed.], 2004, vol. 7, no. 4, str. 516-520, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25812997]

MODEC, Barbara, BRENČIČ, Jurij, KOLLER, Jože. A series of molybdenum(V) complexes with the oxalato ligand engaged in different binding roles : an unusual staggered conformation of the [mu₄-oxalate in {[Mo₂O₄([eta]₂-C₂O₄)₂}₂([mu]₄-C₂O₄)₆-. *European Journal of Inorganic Chemistry*, 2004, no. 8, str. 1611-1620, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25840645]

PADEŽNIK GOMILŠEK, Jana, KODRE, Alojz, BUKOVEC, Nataša, KOZJEK-ŠKOFIC, Irena. Atomic effects in EXAFS structural analysis of mixed Ce oxide thin films. *Acta chim. slov.*. [Tiskana izd.], 2004, 51, str. 23-32. [COBISS.SI-ID 1734244]

PADEŽNIK GOMILŠEK, Jana, KOZJEK-ŠKOFIC, Irena, BUKOVEC, Nataša, KODRE, Alojz. x-ray absorption study of CeO₂ and Ce/V mixed oxide thin films obtained by sol-gel deposition. *Thin solid films*. [Print ed.], 2004, vol. 446, issue 1, str. 117-123.. [COBISS.SI-ID 8471574]

PETRIČEK, Saša. Syntheses of lanthanide bromide complexes from oxides and the crystal structures of [LnBr₃(DME)₂] (Ln = Pr, Nd, Sm, Eu), [LnBr₃(THF)₄](Ln = Pr, Sm) and [EuBr₂(THF)₅][EuBr₄(THF)₂]. *Polyhedron*. [Print ed.], 2004, vol. 23, no. 14, str. 2293-2301, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 26180101]

PEVEC, Andrej. Syntheses and solid-state and solution structures of [Ba{-(C₅Me₅)₂Ti₂F₇}]₂(hmpa)] and [Ba₈Ti₆F₍₃₀₎I₂(C₅Me₅)₆(hmpa)₆][I]₃]₂. *Inorg. chem.*, 2004, vol. 43, no. 4, str. 1250-1256, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 26421509]

ŠTEFANIĆ, Zoran, MEDEN, Anton, LUTZ, Martin, SCHREURS, Antoine M. M., KOJIĆ-PRODIĆ, Biserka. The twinned crystal structure of rac-(R,R)-N, N'-oxalyldivalinol. *Acta crystallogr., C Cryst. struct. commun.*, 2004, vol. C60, no. 10, str. o754-756, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 26236165]

TRATAR-PIRC, Elizabeta, ARČON, Iztok, KODRE, Alojz, BUKOVEC, Peter. Metal-ion environment in solid Mn(II), Co(II) and Ni(II) hyaluronates. *Carbohydr. res.*. [Print ed.], 2004, vol. 339, no. 15, str. 2549-2554, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 26393605]

TUREL, Iztok, PEČANAC, Milena, GOLOBIČ, Amalija, ALESSIO, Enzo, SERLI, Barbara, BERGAMO, Alberta, SAVA, Gianni. Solution, solid state and biological characterization of ruthenium(III)-DMSO complexes with purine base derivatives. *J. inorg. biochem.*. [Print ed.], 2004, vol. 98, no. 2, str. 393-401, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25877253]

VALANT, Matjaž, MEDEN, Anton, SUVOROV, Danilo. Isomorphic A-site substitution on sillenite-type compounds. *J. Am. Ceram. Soc.*, 2004, vol. 87, str. 677-682. [COBISS.SI-ID 18709799]

VRBANIĆ, Daniel, REMŠKAR, Maja, JESIH, Adolf, MRZEL, Aleš, UMEK, Polona, PONIKVAR, Maja, JANČAR, Boštjan, MEDEN, Anton, NOVOSEL, Barbara, PEJOVNIK, Stane, VENTURINI, Peter, COLEMAN, J. C., MIHAJOVIĆ, Dragan. Air-stable monodispersed $\text{Mo}_6\text{S}_3\text{I}_6$ nanowires. *Nanotechnology (Bristol)*, 2004, vol. 15, str. 635-638. [COBISS.SI-ID 18208807]

ZUPANČIČ, Marija, BUKOVEC, Nataša, MILAČIČ, Radmila, ŠCANČAR, Janez. Comparison of various phosphate stabilisation agents for the immobilisation of Ni and Zn in sewage sludge. *Water air soil pollut.*, 2004, vol. 156, str. 57-69. [COBISS.SI-ID 18365735]

1.02 Pregledni znanstveni članek / Review Article

GOLOBIČ, Amalija, ŠKAPIN, Srečo D., SUVOROV, Danilo, MEDEN, Anton. Solving structural problems of ceramic materials. *Croat. chem. acta*, 2004, vol. 77, no. 3, str. 435-446, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 26235909]

1.04 Strokovni članek / Professional Article

LEBAN, Ivan. Implementacija bolonjskih načel v Sloveniji. *Farm. vestn.*, maj 2004, letn. 55, str. 97-101, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 26100485]

LEBAN, Ivan. Vloga splošne izobrazba v reformi visokega šolstva. *Vzgoja izob.*, 2004, letn. 35, št. 2, str. 7. [COBISS.SI-ID 26100229]

PERDIH, Franc. Paul Sabatier in začetek katalitičnega hidrogeniranja : Ob 150. letnici rojstva Nobelovega nagrajenca za kemijo 1912. *Kem. šoli*, december 2004, letn. 16, št. 4, str. 33-36, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 26376197]

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

LAZARINI, Franc, BRENČIČ, Jurij. *Splošna in anorganska kemija : [visokošolski učbenik]*. Ljubljana: [DZS], 2004. 557 str., ilustr. [COBISS.SI-ID 26239749]

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

GLAŽAR, Saša A., GRAUNAR, Mojca, MODEC, Barbara, ŠKET, Barbara, ŠKET, Boris. *Kemija danes : učenje z nalogami : zbirka nalog za 8. in 9. razred devetletne osnovne šole*, (Raziskovalec 8), (Raziskovalec 9). 1. izd. Ljubljana: DZS, 2004. 184 str., ilustr. ISBN 86-341-3645-0. [COBISS.SI-ID 214811136]

2.05 Drugo učno gradivo / Other Educational Material

BUKOVEC, Nataša, LEBAN, Ivan. *Vaje iz anorganske kemije*. 4. dopolnjena izd. Ljubljana: Katedra za anorgansko kemijo, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2004. 89 str., ilustr. ISBN 961-6286-24-2. [COBISS.SI-ID 214627072]

BUKOVEC, Nataša, GLAŽAR, Saša A.. *Naloge iz splošne in anorganske kemije za srednjo šolo*. 4. izd. Ljubljana: DZS, 2004. 139 str., ilustr. ISBN 86-341-3063-0. [COBISS.SI-ID 128477696]

KOZLEVČAR, Bojan, KITANOVSKI, Nives, ŠEGEDIN, Primož. *Navodila za laboratorijske vaje iz splošne kemije : [interni] šudijsko gradivo VSŠKT 2004/2005*. Ljubljana: Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2004. 28 str., graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 26300165]

TRATAR-PIRC, Elizabeta, DEMŠAR, Alojz. *Vaje iz anorganske kemije, Navodila za vaje z zbirko računskih nalog*. 1. izd. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2004. 55 str. ISBN 961-6286-12-9. [COBISS.SI-ID 214627328]

TUREL, Iztok, LEBAN, Ivan. *Kemija, Zbirka računskih nalog*. 3., prenovljena izd. Ljubljana: Fakulteta za strojništvo, 2004. 73 str., tabele. ISBN 961-6238-86-8. [COBISS.SI-ID 128387328]

2.12 Končno poročilo o rezultatih raziskav / Final Research Report

CERC KOROŠEC, Romana, BUKOVEC, Peter, ŽUPANC MEŽNAR, Lea. Letno poročilo o aplikativnem projektu L2-3183 : termogravimetrična analiza in visokotlačna diferenčna dinamična kalorimetrija kompozitnih materialov. Ljubljana: Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2004. 1 zv. (loč. pag.), graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 26226693]

**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. 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 Svetec
dr. Bogdan Štefane

Tehniki / Technicians

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

Mentor / Advisor		Čas usposabljanja / Programme duration	Oblika usposabljanja / Degree
David Bevk	Stanovnik	4 leta	doktorski študij / PhD
Uroš Grošelj	Svetec	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
Uroš Uršič	Branko Stanovnik	4,5 let	doktorski študij / PhD

Raziskovalna oprema / Research Equipment

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

Temeljni projekti / Basic Research

- J1-6254 Reaktivni intermediati pri transformacijah organskih spojin / *Reactive intermediates in the transformation of organic compounds*
Nosilec / Principal Researcher: prof. dr. Božo Plesničar
- J1-6693 Od multifunkcionalnih gradnikov do biološko aktivnih spojin / *From Multifunctional Building Blocks to Biologically Active Compounds*
Nosilec / Principal Researcher: prof.. dr. Marijan Kočevar
- J1-6689 Sinteza heterocikličnih analogov amino kislin in peptidov / *Synthesis of heterocyclic analogs of amino acids and peptides*
Nosilec / Principal Researcher: prof. dr. Branko Stanovnik

Mednarodni projekti / International Projects

- BI-CZ/03-04-5 Syntheses and reactions of quinolinone derivatives
Nosilec / Principal Researcher: doc. dr. Janez Košmrlj
- BI-HR/04-05-012 Novi potencialni citostatiki: diazeni in triazeni
Nosilec / Principal Researcher: prof. dr. Slovenko Polanc
- COST D24/007/02 Synthesis and application of new ligands for asymmetric heterogeneous Catalysis
Nosilec / Principal Researcher: prof. dr. Marijan Kočevar
- BI-GR/02-05-003 (4215) Transformations of 3-dimethylamino-propenoates. The Synthesis of plyninopsins, β -carbolines, 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

Bach, Thorsten (Lehrstuhl für Organische Chemie, Technische Universität München, München, Germany): Enantioselective Photochemical Reactions in Solution (3..5.2004)

Maas, Gerhard (Abteilung Organische Chemie I, Universität Ulm, Ulm, Germany): From Propyne Iminium Salts to Aminoallenes, Azepine Derivatives, and Pyrroles (17.5.2004)

Varvounis, George (Department of Chemistry, University of Ioannina, Ioannina, Greece): Expedient Routes to Selected Heterocycles Containing N, N and O or N and S (26.2.2004).

F. POŽGAN: Unsaturated amino acid derivatives as reagents and substrates in heterocyclic synthesis : [School of Engineering and Science, International University Bremen, Bremen, Germany, 11th May 2004]. Bremen, 2004. [COBISS.SI-ID 26451973]

STANOVNIK, Branko. Synthesis of heterocyclic systems from alkyl 3-(dimethylamino)propenoates and related enaminones: [Dipartimento Farmacochimico, Tossicologico e Biologico, Universita degli Studi di Palermo, Palermo, Italia, 14.6.2004]. Palermo, 2004.

Bibliografija / References

1.01 Izvirni znanstveni članek / Original Scientific Article

BEVK, David, JAKŠE, Renata, GOLOBIČ, Amalija, GOLIČ, Ljubo, MEDEN, Anton, SVETE, Jurij, STANOVNIK, Branko. Synthesis of 5-substituted ethyl 3-oxo-2H-pyrazolo[4,3-c]pyridine-7-carboxylates. *Heterocycles*, 2004, vol. 63, no. 3, str. 609-629.

BOMBEK, Sergeja, POŽGAN, Franc, KOČEVAR, Marijan, POLANC, Slovenko. Electrophilic amination of 4-fluorophenol with diazenes : a complete removal of the fluorine atom. *J. org. chem.*, 2004, vol. 69, no. 6, str. 2224-2227, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25767941]

CELESTINA, Tina, GOLOBIČ, Amalija, SVETE, Jurij, STANOVNIK, Branko. Intramolecular thermal cyclizations of methyl (E)-3-arylamino-2-benzoylaminobut-2-enoates. *ARKIVOC*. [Online ed.], 2004, no. (vii), str. 169-176.

ČEBAŠEK, Petra, WAGGER, Jernej, BEVK, David, JAKŠE, Renata, SVETE, Jurij, STANOVNIK, Branko. Parallel solution-phase synthesis of (Z)-3-(arylamino)-2, 3-dehydroalanine derivatives and solid-phase synthesis of fused pyrimidones. *J. Com. Chem.*, 2004, vol. 6, no. 3, str. 356-362.

ČIMBORA, Tamara, BOMBEK, Sergeja, KOŠMRLJ, Janez, KOVAČIČ, Lidija, POLANC, Slovenko, KATALINIĆ, Ana, OSMAK, Maja. Development of potential anti-cancer agents : diazenes and derivatives. *Drug dev. res.*, 2004, vol. 61, no. 2, str. 95-100, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25768197]

DAJKA-HALÁSZ, Beáta, MONSIEURS, Katrien, ÉLIÁS, Olivér, KÁROLYHÁZY, László, TAPOLCSÁNYI, Pál, MAES, Bert U. W., RIEDL, Zsuzsanna, HAJÓS, György, DOMMISSE, Roger A., LEMIERE, Guy L. F., KOŠMRLJ, Janez, MÁTYUS, Péter. Synthesis of 5H-pyridazino[4,5-b]indoles and their benzofuran analogues utilizing an intramolecular Heck-type reaction. *Tetrahedron*. [Print ed.], 2004, vol. 60, no. 10, str. 2283-2291, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25665029]

GROŠELJ, Uroš, BEVK, David, JAKŠE, Renata, MEDEN, Anton, PIRC, Samo, REČNIK, Simon, STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. Synthesis and properties of N-substituted (1R,5S)-4-aminomethylidene-1,8,8-trimethyl-2-oxabicyclo[3.2.1]octan-2-ones. *Tetrahedron: asymmetry*. [Print ed.], 2004, vol. 15, no. 15, str. 2367-2383.

HODGSON, David M., ŠTEFANE, Bogdan, MILES, Timothy J., WITHERINGTON, Jason. Unsaturated 1,2-amino alcohols and ethers from aziridines and organolithiums. *Chem. commun. (Lond.)*, 1996, 2004, no. 19, str. 2234-2235, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 26498053]

ISKRA, Jernej, STAVBER, Stojan, ZUPAN, Marko. Nonmetal-catalyzed iodination of arenes with iodide and hydrogen peroxide. *Synthesis (Stuttg.)*, 2004, no. 11, str. 1868-1873. [COBISS.SI-ID 18356263]

JAKŠE, Renata, SVETE, Jurij, STANOVNIK, Branko, GOLOBIČ, Amalija. Application of alkyl 3-dimethylamino-2-(1*H*-indol-3-yl)propenoates in the synthesis of 3-heteroarylindoles. *Tetrahedron*. [Print ed.], 2004, vol. 60, no. 21, str. 4601-4508.

JEREŠ, Marjan, ZUPAN, Marko, STAVBER, Stojan. Effective and selective iodofunctionalisation of organic molecules in water using iodine-hydrogen peroxide tandem. *Chem. commun. (Lond.)*, 1996, 2004, str. 2614-2615. [COBISS.SI-ID 18616871]

KLÁSEK, Antonín, MRKVÍČKA, Vladimír, PEVEC, Andrej, KOŠMRLJ, Janez. Novel tandem hydration/cyclodehydration of [alpha]-thiocyanatoketones to 2-oxo-3-thiazolines. Application to

thiazolo[5,4-c]quinoline-2,3(3aH, 5H)-dione synthesis. *J. org. chem.*, 2004, vol. 69, no. 17, str. 5646-5651, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 26055941]

KOVAČ, Nives, FAGANELI, Jadran, BAJT, Oliver, ŠKET, Boris, OREL, Boris, PENNA, Nunzio. Chemical composition of macroaggregates in the northern Adriatic sea. *Org. geochem.* [Print ed.], 2004, vol. 35, št. 10, str. 1095-1104. [COBISS.SI-ID 1430095]

KRANJC, Krištof, ŠTEFANE, Bogdan, POLANC, Slovenko, KOČEVAR, Marijan. Synthesis of highly substituted aniline and *o*-phenylenediamine derivatives containing various substitution patterns. *J. org. chem.*, 2004, vol. 69, no. 9, str. 3190-3193, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25825029]

REČNIK, Simon, SVETE, Jurij, STANOVNIK, Branko. Reactions of quinolizine- and pyridino[1,2-*a*]pyrimidine-3-diazonium tetrafluoroborates with aliphatic amines. *Z. Nat.forsch., B J. Chem. Sci.*, 2004, vol. 59b, no. 4, str. 380-385.

STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. Synthesis of heterocycles from alkyl 3-(dimethylamino)propenoates and related enaminones. *Chem. Rev.*, 2004, vol. 104, no. 5, str. 2433-2480.

STAVBER, Gaj, ZUPAN, Marko, JEREV, Marjan, STAVBER, Stojan. Selective and effective fluorination of organic compounds in water using Selectfluor F-TEDA-BF₄. *Org. lett.*, 2004, vol. 6, str. 4973-4976. [COBISS.SI-ID 18711079]

SVETE Jurij. Ex-chiral pool enaminones in the synthesis of functionalized heterocycles. *Monatsh Chem.*, 2004, vol. 135, 629-647.

ŠTEFANE, Bogdan, POLANC, Slovenko. A new regio- and chemoselective approach to β-keto amides and β-enamino carboxamides via 1,3,2-dioxaborinanes. *Synlett*, 2004, no. 4, str. 698-702, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25767685]

TUTTLE, Tell, CERKOVNIK, Janez, PLESNIČAR, Božo, CREMER, Dieter. Hemioortho esters and hydrotrioxides as the primary products in the low-temperature ozonation of cyclic acetals : an experimental and theoretical investigation. *J. Am. Chem. Soc.*, 2004, vol. 126, no. 49, str. 16093-16104, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 26307333]

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

DOLENČ, Darko, GLAŽAR, Saša A., GABRIČ, Alenka, GRAUNAR, Mojca, MODEC, Barbara, SLATINEK-ŽIGON, Milica. *Kemija danes 2, Priročnik za učitelje*, (Raziskovalec 9). 1. izd. Ljubljana: DZS, 2004. 156 str., ilustr. ISBN 86-341-3062-2. [COBISS.SI-ID 128006912]

GLAŽAR, Saša A., GRAUNAR, Mojca, MODEC, Barbara, ŠKET, Barbara, ŠKET, Boris. *Kemija danes : učenje z nalogami : zbirka nalog za 8. in 9. razred devetletne osnovne šole*, (Raziskovalec 8), (Raziskovalec 9). 1. izd. Ljubljana: DZS, 2004. 184 str., ilustr. ISBN 86-341-3645-0. [COBISS.SI-ID 214811136]

**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 Susić
dr. Tatjana Zupančič
dr. Matevž Pompe
dr. Helena Prosen
dr. Irena Kralj Cigić
dr. Polonca Kralj
mag. Ivanka Keber

Tehniki / Technicians

Zdenka Držaj
Jolanda Furlan
Mojca Žitko

Mladi raziskovalci / Young researchers

Čas usposabljanja / Oblika usposabljanja /
Programme duration *Degree*

<i>Mentor / Advisor</i>			
Nataša Kovačić	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
Martin Šala	Jana Kolar	2004-2007	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

Mednarodni projekti / International Projects

PAPYLUM	Kemiluminiscenca -novo orodje v konzervaciji papirja / Chemiluminescence-a novel tool in paper conservation studies
EVK4-2000-00038	Nosilec / <i>Principal researcher:</i> prof. dr. Boris Pihlar
InkCor	Stabilizacija papirja z železo-galnim črnilom / Stabilisation of iron gall ink containing paper
EVK4-2001-00049	Nosilec / <i>Principal researcher:</i> doc. dr. Matija Strlič
MIP	Prehodne kovine v papirju/ Metals in paper
EVK4-2002-02001	Nosilec / <i>Principal researcher:</i> doc. dr. Matija Strlič
Eureka 2542 Relast	Laser renovation of monuments and art works
	Nosilec / <i>Principal researcher:</i> doc. dr. Matija Strlič
COST G7	Artwork conservation by a laser
	Nosilec / <i>Principal researcher:</i> doc. dr. Matija Strlič
SI/03/B/F/PP-176012	Hands-on Approach to Analytical Chemistry for Vocational Schools
	Nosilec / <i>Principal researcher:</i> doc. dr. Nataša Gros
COST E41	Analytical tools with applications in wood and pulping chemistry
	Nosilec / <i>Principal researcher:</i> doc. dr. Matija Strlič

Druge oblike mednarodnega sodelovanja / Other Forms of International Cooperation

BI-HR/04-05-006 Študij interakcije pesticidov z anorganskimi in organskimi snovmi v tleh (prof.dr.Lucija Zupančič-Kralj)

BI-HR/04-05 Nastanek, transport in razgradnja fotooksidantov na področju Mediterana (dr.Matevž Pompe)

Bibliografija / References

1.01 Izvirni znanstveni članek / Original Scientific Article

CVITAŠ, Tomislav, FURGER, M., GIRGZDIENE, R., HASZPRA, L., KEZELE, N., KLASINC, L., PLANINŠEK, Anton, POMPE, Matevž, PREVOT, A. S. H., SCHEEL, H. E., SCHUEPBACH, E. Spectral analysis of boundary layer ozone data from the EUROTRAC TOR network. *J. geophys. res.*,

2004, vol. 109, no. D2, str. 1-9, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25784069] JCR IF (2003): 2.992; SE, x: 1.11 (7/128), geosciences, multidisciplinary

DONIK, Črtomir, JENKO, Monika, PIHLAR, Boris, LEGAT, Andraž, KROŠELJ, Vladislav, VOJVODIČ-TUMA, Jelena. Vpliv radioaktivnih odpadkov na korozjske lastnosti nerjavnih jekel = The influence of radioactive wastes on the corrosion resistance of stainless steels. *Mater. tehnol.*, nov./dec. 2004, letn. 38, štev. 6, str. 345-348. [COBISS.SI-ID 365482]

GROS, Nataša. Spectrometer with microreaction chamber and tri-colour light emitting diode as a light source. *Talanta (Oxford)*. [Print ed.], 2004, vol. 62, no. 1, str. 143-150, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25549829] JCR IF (2003): 2.091; SE, x: 1.562 (19/67), chemistry, analytical

KINCL, Maja, MELEH, Marija, VEBER, Marjan, VREČER, Franc. Study of physicochemical parameters affecting the release of diclofenac sodium from lipophilic matrix tablets. *Acta chim. slov.* [Tiskana izd.], september 2004, #Let. #51, #št. #3, str. 409-425, graf. prikazi. <http://acta.chem-soc.si/51/51-3-409.pdf>. [COBISS.SI-ID 26133765] JCR IF (2003): 0.528; SE, x: 1.633 (81/123), chemistry, multidisciplinary

KINCL, Maja, VREČER, Franc, VEBER, Marjan. Characterization of factors affecting the release of low-solubility drug from prolonged release tablets. *Anal. chim. acta*. [Print ed.], 2004, vol. 502, no. 1, str. 107-113. [COBISS.SI-ID 1438577] JCR IF (2003): 2.21; SE, x: 1.562 (15/67), chemistry, analytical

KOCIJAN, Aleksandra, MILOŠEV, Ingrid, KEK, Darinka, PIHLAR, Boris. Electrochemical study of Co-based alloys in simulated physiological solution. *J. Appl. Electrochem.*, 2004, letn. 34, str. 517-524. [COBISS.SI-ID 17668313] JCR IF (2003): 0.923; SE, x: 1.491 (11/15), electrochemistry

KOCIJAN, Aleksandra, MILOŠEV, Ingrid, PIHLAR, Boris. Cobalt-based alloys for orthopaedic applications studied by electrochemical and XPS analysis. *J. mater. sci., Mater. med.*, 2004, vol. 15, str. 643-650. [COBISS.SI-ID 18268711] JCR IF (2003): 0.93; SE, x: 1.409 (27/42), engineering, biomedical, x: 1.201 (7/14), materials science, biomaterials

KOČAR, Drago, PEDERSOLI, José Luiz, STRLIČ, Matija, KOLAR, Jana, RYCHLÝ, Jozef, MATISOVÁ-RYCHLÁ, Lyda. Chemiluminescence from paper. Part 2, The effect of sample crystallinity, morphology and size. *Polym. degrad. stab.*. [Print ed.], 2004, vol. 86, no. 2, str. 269-274, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 26156037] JCR IF (2003): 1.405; SE, x: 1.109 (14/72), polymer science

KOLAR, Jana, STRLIČ, Matija. Evaluating the effects of treatments on iron gall ink corroded documents : a new analytical methodology. *Restaurator*, 2004, vol. 25, no. 2, str. 94-103. [COBISS.SI-ID 214488576] JCR IF (2003): 0.559; SSE, x: 0.709 (24/55), information science & library science

KOSEC MIKIĆ, Tadeja, MILOŠEV, Ingrid, PIHLAR, Boris. Vedenje zlitin Cu-xZn zlitin v boratnem pufru z dodatkom kloridnih ionov = The behaviour of Cu-xZn alloys in a borate solution containing chloride ions. *Mater. tehnol.*, 2004, vol. 38, str. 349-352. [COBISS.SI-ID 18793255]

KOVAČIĆ, Nataša, PROSEN, Helena, ZUPANČIČ-KRALJ, Lucija. Determination of triazines and atrazine metabolites in soil by microwave-assisted solvent extraction and high-pressure liquid chromatography with photo-diode-array detection. *Acta chim. slov.* [Tiskana izd.], september 2004, #Let. #51, #št. #3, str. 395-407, graf. prikazi. <http://acta.chem-soc.si/51/51-3-395.pdf>. [COBISS.SI-ID 621526] JCR IF (2003): 0.528; SE, x: 1.633 (81/123), chemistry, multidisciplinary

KOZINC, Janez, ZUPANČIČ-KRALJ, Lucija, ZAPUŠEK, Alenka. Evaluation of gas emissions from coal stockpile. *Chemosphere (Oxford)*. [Print ed.], 2004, #Let. #55, str. 1121 - 1126. [COBISS.SI-ID 560342] JCR IF (2003): 1.904; SE, x: 1.167 (19/131), environmental sciences

MUNDA, Ivka-Marija, VEBER, Marjan. Interactive effects of macronutrients and metals (Mn, Co, Zn) on the ephemeral green alga *Ulva rigida* C. Agardh (Chlorophyta, Ulvophyceae, Ulvales). *Nova Hedwigia*, 2004, vol. 79, no. 3/4, str. 353-375, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 26291973] JCR IF (2003): 0.819; SE, x: 1.55 (79/136), plant sciences

POMPE, Matevž, DAVIS, Joe M., SAMUEL, Clint D. Prediction of thermodynamic parameters in gas chromatography from molecular structure : hydrocarbons. *J. chem. inf. comput. sci.*, 2004, vol. 44, no. 2, str. 399-409, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25800197] JCR IF (2003): 3.078; SE, x: 1.633 (17/123), chemistry, multidisciplinary, x: 1.145 (7/78), computer science, information systems, x: 0.985 (5/83), computer science, interdisciplinary applications

POMPE, Matevž, VEBER, Marjan, RANDIĆ, Milan, BALABAN, Alexandru T. Using variable and fixed topological indices for the prediction of reaction rate constants of volatile unsaturated hydrocarbons with OH radicals. *Molecules (Basel)*, 2004, vol. 9, no. 12, str. 1160-1176, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 26342917] JCR IF (2003): 0.911; SE, x: 1.888 (35/55), chemistry, organic

PROSEN, Helena, GUČEK, Marjan, ZUPANČIČ-KRALJ, Lucija. Optimization of liquid chromatography and micellar electrokinetic chromatography for the determination of atrazine and its first degradation products in humic waters without sample preparation : [presented at: 5th Balaton Symposium on High-Performance Separation Methods, Siófok, Hungary, September 3-5. 2003]. *Chromatographia*, 2004, vol. 60, no. Suppl. 1, str. S107-S112, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 26061829] JCR IF (2003): 1.145; SE, x: 2.411 (40/50), biochemical research methods, x: 1.562 (39/67), chemistry, analytical

RANDIĆ, Milan, POMPE, Matevž, MILLS, Denise, BASAK, Subhash C. Variable connectivity index as a tool for modeling structure-property relationships. *Molecules (Basel)*, 2004, vol. 9, no. 12, str. 1177-1193, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 26342661] JCR IF (2003): 0.911; SE, x: 1.888 (35/55), chemistry, organic

RYCHLÝ, Jozef, MATISOVÁ-RYCHLÁ, Lyda, LAZÁR, Milan, SLOVÁK, Kristian, STRLIČ, Matija, KOČAR, Drago, KOLAR, Jana. Thermal oxidation of cellulose investigated by chemiluminiscence. The effect of water at temperatures above 100°C. *Carbohydr. polym.* [Print ed.], 2004, vol. 58, no. 3, str. 301-309, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 26299653] JCR IF (2003): 1.597; SE, x: 0.991 (10/57), chemistry, applied, x: 1.888 (27/55), chemistry, organic, x: 1.109 (11/72), polymer science

STRLIČ, Matija, KOLAR, Jana, KOČAR, Drago, DRNOVŠEK, Tjaša, ŠELIH, Vid Simon, SUSIČ, Robert, PIHLAR, Boris. What is the pH of alkaline paper?. *e-PS*, 2004, vol. 1, str. 35-47, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 26114309]

TAVČAR, Polona, BENEDIK, Ljudmila, PIHLAR, Boris. Determination of ^{210}Pb and ^{210}Po in sediment and soil leachates and in biological materials using a Sr-resin column and evaluation of column reuse. *Appl. radiat. isotopes*. [Print ed.], 2004, vol. 60, str. 717-723. [COBISS.SI-ID 18183463] JCR IF (2003): 0.69; SE, x: 1.811 (32/46), chemistry, inorganic & nuclear, x: 0.75 (13/33), nuclear science & technology, x: 1.769 (70/83), radiology, nuclear medicine & medical imaging

ŽAKELJ, Simon, LEGEN, Igor, VEBER, Marjan, KRISTL, Albin. The influence of buffer composition on tissue integrity during permeability experiments "in vitro". *Int. j. pharm.* [Print ed.], 2004, vol. 272, no. 1-2, str. 173-180. [COBISS.SI-ID 1472113] JCR IF (2003): 1.539; SE, x: 2.403 (101/185), pharmacology & pharmacy

1.03 Kratki znanstveni prispevek / Short Scientific Article

KOZINC, Janez, TREEBY, Mireille, ZUPANČIČ-KRALJ, Lucija. Determination of sulphur gases from Velenje coal stockpile. *Acta chim. slov.* [Tiskana izd.], 2004, #let. #51, #št. #3, str. 529 - 536. [COBISS.SI-ID 621782] JCR IF (2003): 0.528; SE, x: 1.633 (81/123), chemistry, multidisciplinary

1.04 Strokovni članek / Professional Article

KOLAR, Jana. Primer izginjajočih črk in prizadevanja naravoslovcev za njihovo ohranitev. *Kvarkadabra*. <http://www.kvarkadabra.net/article.php/predavanje-kolar>. [COBISS.SI-ID 217228032]

STRLIČ, Matija, KOLAR, Jana, KOČAR, Drago, DRNOVŠEK, Tjaša, ŠELIH, Vid Simon, SUSIČ, Robert, PIHLAR, Boris. Kakšen je pH alkalnega papirja? = What is the pH of alkaline paper?. *Papir (Ljublj.)*, 2004, letn. 32, št. 1, str. 20-21, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25910533]

STRLIČ, Matija. The malodorous or the curly? : unveilling the identity of Dorstenia foetida (FORSSK.). SCHWEINF. *Cactus succul. j. (St. Barbara)*, 2004, vol. 76, no. 3, str. 150-154, ilustr. [COBISS.SI-ID 26067973]

ŠELIH, Vid Simon, STRLIČ, Matija, KOLAR, Jana. Avtomatizirana titrimetrična določitev alkalne zaloge v papirju. *Papir (Ljublj.)*, 2004, letn. 32, št. 2, str. 27-28, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 26276869]

**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
Mario Šimić

Tehniki / Technicians

Cirila Peklaj
Anton Kelbl
Anton Kokalj

Mladi raziskovalci / Young researchers

	Mentor / Advisor	Čas usposabljanja / Programme duration	Oblika usposabljanja / Degree
Jožica Dolenc	Jože Koller	1.7.2004 – 30.6.2006	doktorski študij / PhD
Iztok Prislan	Gorazd Vesnaver	1.1.2003 – 30.6.2007	doktorski študij / PhD
Martin Tine Perger	Marija Bešter Rogač	1.10.2004-31.3.2008	doktorski študij / PhD
Boštjan Jerman	Ksenija Kogej	1.10.2004-31.3.2008	doktorski študij / PhD

Raziskovalna oprema / Research Equipment

Sistem za merjenje malokotnega rentgenskega sipanja / SAXS system

DSC mikrokalorimeter / 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

Z1-3029 LASTNOSTI IN STABILNOST RAZTOPIN NABITIH NANODELCEV /
PROPERTIES AND STABILITY OF SOLUTIONS OF CHARGED NANOPARTICLES

Nosilec / Principal Researcher: doc. dr. Jurij Reščič

J1-6653 LASTNOSTI IONSKIH RAZTOPIN IN DISPERZNIH SISTEMOV /
PROPERTIES OF IONIC SOLUTIONS AND DISPERSED SYSTEMS

Nosilec / Principal Researcher: prof. dr. Vojko Vlachy

Mednarodni projekti / International Projects

NIH Grant MODELIRANJE VODNE SOLVATACIJE V BIOLOGIJI/ *MODELING AQUEOUS SOLVATION IN BIOLOGY*
(2001-2005)

Nosilca / Principal Researchers: prof. dr. Vojko Vlachy, prof. dr. K. Dill

COST D-31 ORGANISING NONCOVALENT CHEMICAL SYSTEMS WITH SELECTED FUNCTIONS

Nosilec / Principal Researcher: prof. dr. Gorazd Vesnauer
HIDRATACIJA ENOSTAVNIH IN VERIŽNIH MOLEKUL / *HYDRATION OF SIMPLE AND CHAIN-LIKE MOLECULES*

Nosilec / Principal Researcher: prof. dr. Vojko Vlachy
STRUKTURA IN DINAMIKA V KONCENTRIRANIH SISTEMIH / *STRUCTURE AND DYNAMICS IN CONCENTRATED SYSTEMS*

SLO-Avstria SI-AT/04-05/04
Nosilca / Principal Researchers: prof. dr. Andrej Jamnik, prof. dr. Otto Glatter
MODELIRANJE SOLVATACIJE V VODNIH RAZTOPINAH / *MODELING AQUEOUS SOLVATION*

SLO-US /2002/04
Nosilka / Principal Resercher: doc. dr. Barbara Hribar Lee
RAZISKAVE SPECIFIČNIH VEZAV IONOV IN SURFAKTANTOV NA AKTIVNA MESTA POLIELEKTROLITOVI / *STUDIES OF SITE SPECIFIC SURFACTANT- AND ION-POLYELECTROLYTE ASSOCIATION*

SLO-Portugalska SI-PT/04-06-012
Nosilec / Principal Researcher: doc. dr. Jurij Reščič

Druge oblike mednarodnega sodelovanja / Other Forms of International Cooperation

URBIČ, Tomaž. *2D model of water. Theory and computer simulations : [Baker center of Bio-informatics and Computational Biology, Iowa State University, Ames, Iowa, September 27, 2004]*. Ames, 2004. [COBISS.SI-ID 26193413]

URBIČ, Tomaž. *Thermodynamic perturbation and integral equation theory study of MB : [Department of Pharmaceutical Chemistry and Graduate Group in Biophysics, University of California, San Francisco, November 23 rd., 2004]*. California, 2004. [COBISS.SI-ID 26267653]

Bibliografija / References

1.01 Izvirni znanstveni članek / Original Scientific Article

MANCINI, Giovanna, MENCARELLI, Paolo, VESNAVER, Gorazd, VILLANI, Claudio. New biphenylic derivatives : synthesis, characterisation and enantiodiscrimination in chiral aggregates. *Tetrahedron: asymmetry*. [Print ed.], 2004, vol. 15, no. 6, str. 987-994, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25723141]

LAH, Jurij, VESNAVER, Gorazd. Energetic diversity of DNA minor-groove recognition by small molecules displayed through some model ligand-DNA systems. *J. mol. biol.*, 2004, vol. 342, no. 1, str. 73-89, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 26114821]

LUBEJ, Andrej, KOLOINI, Tine, POHAR, Ciril. Industrial precipitation of cupric hydroxy-salts. *Acta chim. slov.* [Tiskana izd.], december 2004, letn. 51, št. 4, str. 751-768, graf. prikazi. <http://acta.chem-soc.si/51/51-4-751.pdf>. [COBISS.SI-ID 26331909]

KOGEJ, Ksenija, BERGHMANS, Hugo, REYNAERS, Harry, PAOLETTI, Sergio. Unusual behavior of atactic poly(methacrylic acid) in aqueous solutions monitored by wide-angle light scattering. *J. phys. chem., B Mater. surf. interfaces biophys.*, 2004, vol. 108, no. 47, str. 18164-18173, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 26328581]

MODEC, Barbara, BRENCIČ, Jurij, KOLLER, Jože. A series of molybdenum(V) complexes with the oxalato ligand engaged in different binding roles : an unusual staggered conformation of the $[\mu]_{4-}$ -oxalate in $\{[Mo_2O_4(\text{eta}-C_2O_4)_2]_2[\mu]_{4-}C_2O_4\}_{6-}$. *European Journal of Inorganic Chemistry*, 2004, no. 8, str. 1611-1620, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25840645]

PODLIPNIK, Črtomir, ŠOLMAJER, Tomaž, KOLLER, Jože. A new method for indirect evaluation of molecular shape similarity. *Match (Krag.)*, 2004, vol. 52, str. 55-63. [COBISS.SI-ID 3085594]

PODLOGAR, Filip, GAŠPERLIN, Mirjana, TOMŠIČ, Matija, JAMNIK, Andrej, BEŠTER-ROGAČ, Marija. Structural characterisation of water-Tween 40r/Imwitor 308r-isopropyl myristate microemulsions using different experimental methods. *Int. j. pharm.* [Print ed.], 2004, vol. 276, no. 1-2, str. 115-128. [COBISS.SI-ID 1504881]

SPINDLER, Lea, DREVENŠEK OLENIK, Irena, ČOPIČ, Martin, CERAR, Janez, ŠKERJANC, Jože, MARIANI, Paolo. Dynamic light scattering in ^{31}P NMR study of the self-assembly of deoxyguanosine 5'-monophosphate : the effect of added salt. *The European physical journal. E, Soft matter*, 2004, 13, str. 27-33. [COBISS.SI-ID 1730148]

TOMŠIČ, Matija, BEŠTER-ROGAČ, Marija, JAMNIK, Andrej, KUNZ, Werner, TOURAUD, Didier, BERGMANN, Alexander, GLATTER, Otto. Nonionic surfactant Brij 35 in water and in various simple alcohols : structural investigations by small-angle x-ray scattering and dynamic light scattering. *J. phys. chem., B Mater. surf. interfaces biophys.*, 2004, vol. 108, no. 22, str. 7021-7032, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25964293]

URBIČ, Tomaž, VLACHY, Vojko, PIZIO, Orest, DILL, Ken A. Water-like fluid in the presence of Lennard-Jones obstacles : predictions of an associative replica Ornstein-Zernike theory. *J. mol. liq.* [Print ed.], 2004, vol. 112, no. 1/2, str. 71-80, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25866245]

VLACHY, Vojko, DOMINGUEZ, H., PIZIO, Orest. Temperature effects in adsorption of a primitive model electrolyte in disordered quenched media : predictions of the replica OZ/HNC approximation. *J.*

phys. chem., B Mater. surf. interfaces biophys., 2004, vol. 108, no. 3, str. 1046-1055, graf. prikazi.
[COBISS.SI-ID 25866501]

VLACHY, Vojko, HRIBAR, Barbara, KALYUZHNYI, Yu. V., DILL, Ken A. Short-range interactions : from simple ions to polyelectrolyte solutions. *Curr. opin. colloid interface sci.*. [Print ed.], 2004, vol. 9, no. 1/2, str. 128-132, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 26336261]

**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

Raziskovalna oprema / Research Equipment

Termostatirani stresalnik: Sanyo Orbi-Safe /Orbital shaker incubator

PCR: Applied Biosystems GeneAmp PCR System 2700

Bibliografija / References

1.01 Izvirni znanstveni članek / Original Scientific Article

PETROVIČ, Uroš, ŠRIBAR, Jernej, PARIŠ, Alenka, RUPNIK, Marjan, KRŽAN, Mojca, VARDJAN, Nina, GUBENŠEK, Franc, ZOREC, Robert, KRIŽAJ, Igor. Ammodytoxin, a neurotoxic secreted phospholipase A₂ can act in the cytosol of the nerve cell. *Biochem. biophys. res. commun.*, 2004, vol. 324, str. 981-985. [COBISS.SI-ID 18531623]

IVANOVSKI, Gabriela, PETAN, Toni, KRIŽAJ, Igor, GELB, Michael H., GUBENŠEK, Franc, PUNGERČAR, Jože. Basic amino acid residues in the[β]-structure region contribute, but not critically, to presynaptic neurotoxicity of ammodytoxin A. *Biochimica et biophysica acta, Proteins and proteomics*, 2004, vol. 1702, str. 217-225. [COBISS.SI-ID 18557223]

GORINŠEK, Benjamin, GUBENŠEK, Franc, KORDIŠ, Dušan. Evolutionary genomics of chromoviruses in Eukaryotes. *Molecular biology and evolution*, 2004, vol. 21, str. 781-798. [COBISS.SI-ID 18458663]

**KATEDRA ZA ANORGANSKO KEMIJSKO TEHNOLOGIJO IN
MATERIALE**
CHAIR OF INORGANIC CHEMICAL 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
dr. Daniel Vrbanič

Tehniki / Technicians

Vojimir Francetič

Mladi raziskovalci / Young researchers

Čas usposabljanja / Oblika usposabljanja /
Programme duration Degree

Mentor / Advisor			
Petra Brulc	Jadran Maček	1. 10. 2000 - 30. 9. 2005	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

Netzsch STA 409 aparatura za simultano termično analizo / apparatus for simultaneous thermal analysis⁹

Mettler TA 4000:

TG 50 modul / TG 50 module

DSC 20 modul / DSC 20 module

Leybold Heraeus Inficon Quadrex QMS-200, masni spektrometer / quadropol mass spectrometer

Agilent Micro GC 3000A, plinski kromatograf / gas chromatograph

Vrstični elektronski mikroskop Jeol T300 / Scanning electron microscope Jeol T300

Segrevalni mikroskop Leitz Wetzlar 301-200-301 / Heating microscope Leitz Wetzlar 301-200-301

Optični mikroskop za metalografske preiskave Leitz / Optical microscope Leitz

Analizator velikosti in porazdelitve velikosti delcev

Fritsch Analysette 22 / Particle sizer Fritsch Analysette 22

Aplikativni projekti / Applied Research

J2-6027 (D)

Priprava in karakterizacija kompozitnih uniformnih delcev / Preparation and Characterization of Uniform Composite Particles

Nosilec / Principal Researcher: dr. Zorica Crnjak Orel

Razvojni projekti - subvencije / Industrial Research and Development

M1 – 0010 (MORS) Jedska kvadrupolna resonanca dušika kot selektivna metoda za detekcijo eksplozivov - Nuclear Quadropol Resonance of Nitrogen as a Selective Technique for Detection of Explosives

Nosilec / Principal Researcher: prof. dr. Zvonko Trontelj

Mednarodni projekti / International Projects

C.No: 502759

Biocellus

Nosilec / Principal Researcher: prof. dr. Jadran Maček

Druge oblike mednarodnega sodelovanja / Other Forms of International Cooperation

PEJOVNIK, Stane. Li-ion Accumulators: (invited talk), Seoul, Korea, Korean Institute for Science and Technology, November 16, 2004

VRBANIĆ, Daniel. A new class of one dimensional molybdenum clusters Mo₆S₃I₆ nanowires: invited talk. Ecully, France: Laboratoire de Tribologie et de Dynamique des Systèmes, 14.5.2004..

Bibliografija / References

1.01 Izvirni znanstveni članek / Original Scientific Article

DEQUIER, Pierre, MARINŠEK, Marjan, ZUPAN, Klementina, MAČEK, Jadran. Sposobnost sintranja kompozitov NiO-YSZ pripravljenih z zgorevalno sintezo = The sintering properties of combustion-derived NiO-YSZ composites. *Mater. tehnol.*, 2004, 38, 1/2, str. 61-66. [COBISS.SI-ID 342954]

DOMINKO, Robert, BELE, Marjan, GABERŠČEK, Miran, REMŠKAR, Maja, HANŽEL, Darko, PEJOVNIK, Stane, JAMNIK, Janko. Impact of the carbon coating thickness on the electrochemical performance of LiFePO₄/C composites. *J. Electrochem. Soc.*, 2005, vol. 152, str. A607-A610. [COBISS.SI-ID 18788391]

GORIŠEK, Petra, FRANCETIČ, Vojmir, LENGAUER, Christian L., MAČEK, Jadran. The reduction of hexachloroplatinic(IV) acid on the surface of alumina. *Acta chim. slov.* [Tiskana izd.], junij 2004, letn. 51, št. 2, str. 203-211, graf. prikazi. <http://acta.chem-soc.si/51/51-2-203.pdf>. [COBISS.SI-ID 25993989]

MARINŠEK, Marjan, MAČEK, Jadran, PLAHUTNIK, Filip. Termične lastnosti citratno-nitratnih gelov za pripravo mešanega oksida NiO-YSZ = A thermo-analytical study of the citrate-nitrate precursors for NiO-YSZ mixed-oxide preparation. *Mater. tehnol.*, maj/avg. 2004, letn. 38, št. 3/4, str. 165-169. [COBISS.SI-ID 360106]

MARINŠEK, Marjan, MAČEK, Jadran. EGA-karakterizacija zgorevalne sinteze iz citratno-nitratne začetne snovi = EGA characterization of combustion synthesis from citrate-nitrate precursor. *Mater. tehnol.*, 2004, 38, 1/2, str. 55-59. [COBISS.SI-ID 342698]

RAZPOTNIK, Tanja, NOVOSEL, Barbara, MAČEK, Jadran. Termični razkroj hidrazidokarbonatov v reduktivni atmosferi do kovinskih prahov niklja in kobalta = Termal decomposition of hydrazidocarbonates in reducing atmosphere to nickel and cobalt powders. *Mater. tehnol.*, sept./okt. 2004, letn. 38, št. 5, str. 275-278. [COBISS.SI-ID 363434]

VERDEL, Nada, BENEDEJČIČ, Nataša, BOKAN-BOSILJKOV, Violeta, PEJOVNIK, Stane, KRŽAN, Andrej. Polimerni betoni na osnovi nenasičenih poliestrskih smol iz recikliranega poli(etylentereftalata) = Polymer concrete based on unsaturated polyester resins from recycled poly(ethylene terephthalate). *Mater. tehnol.*, jan.-apr. 2004, let. 38, št. 1/2, str. 87-92, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 3034394]

VRBANIĆ, Daniel, REMŠKAR, Maja, JESIH, Adolf, MRZEL, Aleš, UMEK, Polona, PONIKVAR, Maja, JANČAR, Boštjan, MEDEN, Anton, NOVOSEL, Barbara, PEJOVNIK, Stane, VENTURINI, Peter, COLEMAN, J. C., MIHAILOVIĆ, Dragan. Air-stable monodispersed Mo₆S₃I₆ nanowires. *Nanotechnology (Bristol)*, 2004, vol. 15, str. 635-638. [COBISS.SI-ID 18208807]

ZUPAN, Klementina, MAČEK, Jadran, PEJOVNIK, Stane, ANŽIČ, Barbara. Priprava lantanovega galata iz mešanega sistema reducentov in nitrata = Lanthanum gallate preparation from a mixed reductant-nitrate system. *Mater. tehnol.*, maj/avg. 2004, letn. 38, št. 3/4, str. 171-175. [COBISS.SI-ID 360362]

ZUPAN, Klementina, MARINŠEK, Marjan, PEJOVNIK, Stane, MAČEK, Jadran, ZORE, Karmen. Combustion synthesis and the influence of precursor packing on the sintering properties of LCC nanopowders. *J. Eur. Ceram. Soc.* [Print ed.], 2004, vol. 24, no. 6, str. 1935-1939, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25812485]

1.04 Strokovni članek / Professional Article

NOVOSEL, Barbara. Akrilonitril : vinilcianid 2-propen nitril cianoetilen. *Požar (Ljubl.)*, Avgust 2004, letn. 10, št. 3, str. 45-47, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 26103045]

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

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

Sodelavci katedre
Employees

Učitelji / Faculty

prof. dr. Janvit Golob
izr. prof. dr. Matjaž Krajnc

Asistenti / Assistants

dr. Ida Poljanšek
dr. Urška Šebenik

Tehniki / Technicians

Janez Malovrh

Mladi raziskovalci / Young researchers

Čas usposabljanja / Oblika usposabljanja /

Programme duration Degree

Mentor / Advisor

Blaž Likozar

Matjaž Krajnc

1.10. 2004 – 30. 9. 2008

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

L2-6344	Aplikativne, procesno inženirske raziskave proizvodov na osnovi fosfornih spojin prve generacije in produktno inženirske raziskave nove 3E+I generacije proizvodov / Applied process engineering research of first generation products based on phosphoric substances and product engineering research of new generation 3E+C products Nosilec / Principal Researcher: prof. dr. Janvit Golob
L2-6686	Vezivni sistemi v gumenih kompozitih z izboljšano površinsko aktivnostjo / Rubber composites - Adhesion bonding systems with improved surface activity Nosilec / Principal Researcher: izr. prof. dr. Matjaž Krajnc

Razvojni projekti – subvencije / Industrial Research and Development

EP-MD 3/2004	Testiranje gume in gumenih kompozitov Rubber and rubber composites testing
129/2004	Bazni inženiring za proizvodnjo oborjenega kalcijevega karbonata Basic engineering for the production of PCC
KPIOT-1/2004	Raziskave in razvoj na področju proizvodnje sečninsko-formaldeidnih smol Research and development of urea-formaldehyde resins

Mednarodni projekti / International Projects

Solabs ENK6-CT-2002-00679	Development of unglazed solar absorbers Nosilec / Principal Researcher: prof. 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 (november 2004)

Bibliografija / References

1.01 Izvirni znanstveni članek / Original Scientific Article

KLINAR, Dušan, GOLOB, Janvit, KRAJNC, Matjaž. Curing of the diethylene glycol bis(allyl carbonate) determination of the kinetic triplet A, $E_{a,app,\alpha}$ using the isoconversional method and compensation effect. *Chem. biochem. eng. q.*, 2004, vol. 18, no. 1, str. 65-71. [COBISS.SI-ID 25780229]

HACE, Iztok, GOLOB, Janvit, KRAJNC, Matjaž. Diffusion coefficient of diallyl terephthalate monomer into thin polymer film. *Chem. biochem. eng. q.*, 2004, vol. 18, no. 1, str. 73-76. [COBISS.SI-ID 25780485]

ŠEBENIK, Urška, KRAJNC, Matjaž. Seeded semibatch emulsion copolymerization of methyl methacrylate and butyl acrylate using polyurethane dispersion : effect of soft segment length on kinetics. *Colloids surf., A Physicochem. eng. asp.*. [Print ed.], 2004, vol. 233, no. 1/3, str. 51-62. [COBISS.SI-ID 25609989]

HACE, Iztok, GOLOB, Janvit, KRAJNC, Matjaž. Kinetics and modelling of the diffusion-controlled diallyl terephthalate polymerization. *Polym. eng. sci.*, 2004, vol. 44, no. 10, str. 2005-2018. [COBISS.SI-ID 26238469]

RECELJ, Tadej, GOLOB, Janvit. Equilibrium and mass transfer in the Ca^{2+} - SO_4^{2-} - H_2O system for the analysis of the flue gas desulphurization process. *Process saf. environ. prot.*, 2004, vol. 82, no. B5, str. 371-380. [COBISS.SI-ID 26238213]

2.12 Končno poročilo o rezultatih raziskav / Final Research Report

KRAJNC, Matjaž, ŠEBENIK, Urška, POLJANŠEK, Ida. Vezivni sistemi guma-armatura : drugo fazno poročilo za Goodyear Engineered Products Europe, d.o.o. za obdobje (29/10/2003-26/04/2004). Ljubljana: Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2004. 11 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 26211845]

KRAJNC, Matjaž, ŠEBENIK, Urška, POLJANŠEK, Ida. Vezivni sistemi guma-armatura : Fazno poročilo : za Goodyear Engineered Products Europe, d.o.o. za obdobje (JULIJ-SEPTEMBER 2004) : Ljubljana, 05/10/2004. Ljubljana: Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2004. 8 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 26334981]

KRAJNC, Matjaž, ŠEBENIK, Urška, POLJANŠEK, Ida. Vezivni sistemi guma-armatura : Fazno poročilo : za Goodyear Engineered Products Europe, d.o.o. za obdobje (SEPTEMBER-DECEMBER 2004) : Ljubljana, 15/12/2004. Ljubljana: Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2004. 10 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 26335237]

KRAJNC, Matjaž, ŠEBENIK, Urška, POLJANŠEK, Ida. Vezivni sistemi guma-armatura : zaključno poročilo za Goodyear Engineered Products Europe, d.o.o. za obdobje (01/07/2003-27/10/2004). Ljubljana: Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2004. 26 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 26212101]

ZIDAR, Martin, GOLOB, Janvit, VEBER, Marjan. Analiza kvalitete sadre, ki nastaja na RDP bloka 4 in bloka 5 : študija. Ljubljana: CEE, Inženiring za energetiko in ekologijo, 2004. 34 f. [COBISS.SI-ID 26511877]

ZIDAR, Martin, GOLOB, Janvit, DERMOL, Jože. Tehnično-tehnološki del razvojnega projekta proizvodnja oborjenih kalcijevih karbonatov : študija. Ljubljana: CEE, Inženiring za energetiko in ekologijo, 2004. 13 f. [COBISS.SI-ID 26514181]

**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
izr. prof. dr. Igor Plazl

Asistenti / Assistants

doc. dr. Ana Lakota Družina
dr. Andreja Žgajnar Gotvajn
dr. Polona Žnidaršič Plazl
doc. dr. Andreja Zupančič Valant

Tehnički / Technicians

Vesna Delalut
Dušan Komel
Darinka Darja Radešček

Mladi raziskovalci / Young researchers

Mentor / Advisor		Čas usposabljanja / Programme duration	Oblika usposabljanja / Degree
Urška Roglič	Igor Plazl	01.01.2002 -31.12.2005	doktorski študij / PhD
Petra Milavec Žmak	Valentin Koloini	1999-30.4.2005	doktorski študij / PhD
Andrej Guštin	Andreja Zupančič Valant	01.01.2003 – 30.06.2006	doktorski študij / PhD
mag. Lidija Slemenik	Miha Žumer	01.11.1999 – 30.09.2004	doktorski študij / PhD
Perše			

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

Aplikativni projekti / Applied Research

L2-6686	VEZIVNI SISTEMI V GUMENIH KOMPOZITIH Z IZBOLJŠANO POVRŠINSKO AKTIVNOSTJO / RUBBER COMPOSITES - ADHESION BONDING SYSTEMS WITH IMPROVED SURFACE ACTIVITY Nosilec / Principal Researcher: izr. prof. dr. Matjaž Krajnc
L4-6420	PRODUKCIJA FARMACEVTSKO AKTIVNIH SPOJIN Grifola frondosa S POSTOPKOM GOJENJA NA TRDNEM IN TEKOČEM GOJIŠČU / PRODUCTION OF PHARMACEUTICALLY ACTIVE COMPOUNDS FROM GRIFOLA FRONDOSA BY SOLID STATE AND SUBMERGED CULTIVATION Nosilec / Principal Researcher: izr. prof. dr. Marin Berovič

Razvojni projekti – subvencije / Industrial Research and Development

R-5330-75568-04/04	RAZVOJ NOVEGA MATERIALA ZA JEDRO PANELA IZ EKSPANDIRANEGA PERLITA / DEVELOPMENT OF NEW MATERIAL FOR PANEL COVE BASED ON EXPANDED PERLITE Nosilec / Principal Researcher: izr. prof. dr. Igor Plazl
KOMB-04/LEK	KOMPOSTIRANJE ODPADNE MIKROBNE BIOMASE IZ PROIZVODNJE PRAVASTATINA / COMPOSTING OF WASTE MICROBIAL BIOMASS FROM THE PRODUCTION OF PRAVASTATIN Nosilec / Principal Researcher: izr. prof. dr. Aleksander Pavko
PE-STOE 02/04-KRKA	KOMPOSTIRANJE ODPADNE MIKROBNE BIOMASE IZ PROIZVODNJE IN BLATA IZ BIOLOŠKE ČISTILNE NAPRAVE / COMPOSTING OF WASTE MICROBIAL BIOMASS FROM ACTIVATED SLUDGE WASTE WATER TREATMENT PROCESS Nosilec / Principal Researcher: izr. prof. dr. Aleksander Pavko
OVP-04/Tosama	RAZISKAVE NA PODROČJU OMAKANJA VIVAGYPS POVJOEV / WETTING OF VIVAGYPS IMMOBILISING PLASTER BANDAGES Nosilec / Principal Researcher: izr. prof. dr. Aleksander Pavko
541/04/DDC	PROJEKTIRANJE, PROIZVODNJA IN VGRAJEVANJE ASFALTNIH ZMESI TER PRIPRAVA TEHNIČNE REGULATIVE / DESIGN, PRODUCTION AND PLACING OF ASPHALT MIXTURES AND PREPARATION OF TECHNICAL REGULATIVE IN ROAD CONSTRUCTING Nosilec / Principal Researcher: doc. dr. Andreja Zupančič Valant

Mednarodni projekti / International Projects

Bilateralni projekt Slovenija - Grčija GR 21/2003	REOLOŠKO OBNAŠANJE HIDROFILNIH POLIMEROV V MEŠALNIH POSODAH / RHEOLOGICAL BEHAVIOUR OF HYDROPHILIC POLYMERS IN MIXING VESSELS Nosilec / <i>Principal Researcher</i> : doc. dr. Andreja Zupančič Valant (Slovenija) in prof. dr. Evan Mitsoulis (Grčija)
Bilateralni projekt Slovenija - Češka	BIODEGRADACIJA INDUSTRIALSKIH ORGANSKIH BARVIL Z IMOBILIZIRANIMI LIGNINOLITIČNIMI GLIVAMI / BIODEGRADATION OF INDUSTRIAL ORGANIC DYES WITH IMMOBILIZED LIGNINOLYTIC FUNGI Nosilec / <i>Principal Researcher</i> : izr. prof. dr. Aleksander Pavko
Bilateralni projekt Slovenija – Portugalska PT 18/2004	OPTIMIRANJE / IZBOLJŠANJE PREDELAVE KERAMIČNIH MATERIALOV S SPREMINJANJEM POVRŠINSKIH LASTNOSTI DELCEV NANO- IN MIKRO- VELIKOSTI IMPROVED MATERIALS PROCESSING THROUGH TAILORING THE SURFACE CHARACTERISTICS OF NANO- AND MICRO-SIZED POWDERS Nosilec / <i>Principal Researcher</i> : doc. dr. Andreja Zupančič Valant

Bibliografija / References

1.01 Izvirni znanstveni članek / Original Scientific Article

BOH, Bojana, BEROVIČ, Marin, WRABER-HERZOG, Branka, HODŽAR, Damjan, HABIJANIČ, Jožica, POHLEVEN, Franc, ZORE, Irena. Ganoderma lucidum (W.Curt.:Fr.) Lloyd and G. applanatum (Pers.) Pat. (Aphyllophoromycetideae) from Slovenian habitats : cultivation, isolation, and testing of active compounds. *Int. j. medic. mushrooms*, 2004, vol. 6, no. 1, str. 15-32, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25805061]

COTMAN, Magda, ZAGORC-KONČAN, Jana, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. The relationship between composition and toxicity of tannery wastewater. *Water sci. technol.*, 2004, vol. 49, no. 1, str. 39-46, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25665285]

FOJKAR, Andrej, PAVKO, Aleksander. Wetting of immobilising plaster bandages by immersion before application. *Acta chim. slov.*. [Tiskana izd.], junij 2004, letn. 51, št. 2, str. 325-332, graf. prikazi. <http://acta.chem-soc.si/51/51-2-325.pdf>. [COBISS.SI-ID 25993733]

KLENAR, Iztok, BEROVIČ, Marin, WONDRA, Mojmir. Phenolic compounds from the fermentation of cultivars Cabernet Sauvignon and Merlot from the Slovenian coastal region. *Food technol. biotechnol.*, 2004, vol. 42, no. 1, str. 11-17. [COBISS.SI-ID 2869880]

KOGEJ, Adela, PAVKO, Aleksander. Mathematical model of lead bisorption by Rhizopus nigricans pellets in laboratory batch stirred tank. *Chem. biochem. eng. q.*, 2004, vol. 18, no. 1, str. 29-35, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 25774085]

LUBEJ, Andrej, KOLOINI, Tine, POHAR, Ciril. Industrial precipitation of cupric hydroxy-salts. *Acta chim. slov.*. [Tiskana izd.], december 2004, letn. 51, št. 4, str. 751-768, graf. prikazi. <http://acta.chem-soc.si/51/51-4-751.pdf>. [COBISS.SI-ID 26331909]

MOHORČIČ, Martina, FRIEDRICH, Jožica, PAVKO, Aleksander. Decoloration of the diazo dye Reactive Black 5 by immobilised Bjerkandera adusta in a stirred tank bioreactor. *Acta chim. slov.*. [Tiskana izd.], december 2004, letn. 51, št. 4, str. 619-628, graf. prikazi.

NOVAK, Saša, HENRIQUES OLHERO, Susana Maria, FONTE FERREIRA, José Marija, ZUPANČIČ-VALANT, Andreja. Rheological properties of paraffin suspensions of surface modified alumina powder

for low-pressure injection moulding. *Rheol. Acta*, 2004, vol. 43, no. 5, str. 559-566. [COBISS.SI-ID 18605607]

SEDMAK, Gregor, HOČEVAR, Stanko, LEVEC, Janez. Transient kinetic model of CO oxidation over a nanostructured $\text{Cu}_{(0.1)}\text{Ce}_{(0.9)}\text{O}_{(2-y)}$ catalyst. *J. catal.*, 2004, vol. 222, no. 1, str. 87-99. [COBISS.SI-ID 2967322]

SEDMAK, Gregor, HOČEVAR, Stanko, LEVEC, Janez. CO oxidation kinetics over a nanostructured $\text{Cu}_{(0.1)}\text{Ce}_{(0.9)}\text{O}_{(2-y)}$ catalyst : a CO/O₂ concentration cycling study. *Top. catal.*, 2004, vol. 30/31, str. 445-449. [COBISS.SI-ID 3043866]

SLEMENIK PERŠE, Lidija, ŽUMER, Miha. Mixing and viscosity determinations with helical ribbon impeller. *Chem. biochem. eng. q.*, 2004, vol. 18, no. 4, str. 363-371, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 26413829]

TIŠLER, Tatjana, ZAGORC-KONČAN, Jana, COTMAN, Magda, DROLČ, Andreja. Toxicity potential of disinfection agent in tannery wastewater. *Water res. (Oxford)*. [Print ed.], 2004, vol. 38, no. 16, str. 3503-3510, ilustr. [COBISS.SI-ID 3095578]

VOSPERNIK, Matevž, PINTAR, Albin, BERČIČ, Gorazd, LEVEC, Janez, WALMSLEY, John, RAEDER, Henrik, IOJOIU, Eduard, MIACHON, Sylvain, DALMON, Jean-Alain. Performance of catalytic membrane reactor in multiple reactions. *Chem. eng. sci.*. [Print ed.], 2004, vol. 59, no. 22/23, str. 5363-5372. [COBISS.SI-ID 3155994]

VOSPERNIK, Matevž, PINTAR, Albin, BERČIČ, Gorazd, BATISTA, Jurka, LEVEC, Janez. Potentials of ceramic membranes as catalytic three-phase reactors. *Chem. eng. res. des.*, 2004, letn. A 82, št. 5, str. 659-666. [COBISS.SI-ID 3038234]

ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, ZAGORC-KONČAN, Jana. Characterization of textile wastewater : its environmental impact and biotreatability. *Chem. biochem. eng. q.*, 2004, vol. 18, no. 3, str. 309-315, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID 26236421]

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

BEROVIČ, Marin. Upstream processing : sterilization in bioprocess technology. V: *Encyclopedia of life support systems (EOLSS)*. Eolls Publishers: Oxford, 2004, str. 6.58.2.5. [COBISS.SI-ID 25870341]

VOKIĆ, Denis, BEROVIČ, Marin. Konservatorska-restavratorska dela na slikah Hansa Georga Geigerfelda iz zagrebške katedrale = A report on conservation and restoration operations to paintings of Hans Georg Geigerfeld in Zagreb cathedral. V: TRČEK PEČAK, Tamara (ur.), TRČEK PEČAK, Tamara. *Konserviranje in restavriranje umetnin Mojstra HGG : [25. november 2004-27. februar 2005] : [25. November 2004-27. February 2005]*, (Knjižnica Narodne galerije, Študijski zvezki, 11). Ljubljana: Narodna galerija: ZVKD, Restavratorski center Republike Slovenije, 2004, str. 111-120. [COBISS.SI-ID 513124991]

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

PLAZL, Igor, LAKNER, Mitja. *Uvod v modeliranje procesov*. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2004. X, 230 str., ilustr., tabele. ISBN 961-6286-59-5. [COBISS.SI-ID 213438464]

2.05 Drugo učno gradivo / Other Educational Material

SLEMENIK PERŠE, Lidija. *Računalništvo in informatika : osnove programskih orodij Microsoft Word, Excel in Powerpoint*. Ljubljana: Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2004. 64 str., ilustr. ISBN 961-6286-61-7. [COBISS.SI-ID 214638336]

2.12 Končno poročilo o rezultatih raziskav / Final Research Report

ZAGORC-KONČAN, Jana, ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. *Študija biorazgradljivosti poliamidamin-epiklorhidrinske smole (produkta MELAPRET PEA/A-1,20%)*. Ljubljana: Univerza v Ljubljani, Fakulteta

za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za kemijsko, biokemijsko in ekološko inženirstvo, oktober 2004. 8 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 26261509]

ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja. *Metodologija optimizacije delovanja biološke čistilne naprave s spremeljanjem strupenosti in biorazgradljivosti odpadnih vod : zaključno poročilo o rezultatih raziskovalnega projekta v letu 2004.* Ljubljana: Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, julij 2004. 1 zv. (loč. pag.). [COBISS.SI-ID 26034693]

ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, ZAGORC-KONČAN, Jana. *Determination of toxicity and biodegradability of waste mevastatin fermentation broth.* Ljubljana: University of Ljubljana, Faculty of Chemistry and Chemical Technology, Chair of Chemical, Biochemical and Environmental Engineering, January 2004. 8 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 25599493]

ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, ZAGORC-KONČAN, Jana. *Študija sposobnosti biološkega čiščenja farmacevtskih odpadnih voda.* Ljubljana: Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Katedra za kemijsko, biokemijsko in ekološko inženirstvo, junij 2004. ii, 34 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 25964549]

ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, ZAGORC-KONČAN, Jana. *Study on biotreatability of pharmaceutical wastewater.* Ljubljana: University of Ljubljana, Faculty of Chemistry and Chemical Technology, Chair of Chemical, Biochemical and Environmental Engineering, July 2004. 25 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 26034437]

2.23 Patentna prijava / Patent Application

BEROVIČ, Marin, KUKEC, Aleksandra, WONDRA, Mojmir, KOŠMERL, Tatjana, ČELAN, Štefan. Postopek povečanja tvorbe glicerola v fermentaciji vina z uporabo temperturnih šokov ter naprave in instrumenti v zvezi s tem : št. prijave P-200400108. Ljubljana: Urad Republike Slovenije za intelektualno lastnino, 6.4.2004. [COBISS.SI-ID 25825797]

**KATEDRA ZA VARSTVO PRI DELU
CHAIR FOR SAFETY AT WORK**

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

**Sodelavci katedre
Employees**

Učitelji / Faculty

izr. prof.dr. Vladimir Drusany
dr. Mitja Kožuh, viš.pred.
mag. Jože Šrekl, viš.pred.
mag. Aleš Jug, viš.pred.

Asistenti / Assistants

Marjan Lukežič

Tehniki / Technicians

Miran Bamfi
Iztok Košir

Bibliografija / References

1.04 Strokovni članek / Professional Article

KOŽUH, Mitja. Varstvo pri delu, varstvo pred požarom in medicina dela : posvet v Portorožu, 11. in 12. maj 2004. *Delo + varnost*, 2004, letn. 49, št. 3, str. 44-45. [COBISS.SI-ID 7370011]

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

PEČKAJ, Marko, SIMONČIČ, Milan, KOŽUH, Mitja, RIBIČ, Igor. *Energetski pregled Comet Umetni brusi in nekovine*, (IJS delovno poročilo, 8915). Ljubljana: Institut Jožef Stefan, 2004. 7 str. [COBISS.SI-ID 18473255]

PEČKAJ, Marko, SIMONČIČ, Milan, RIBIČ, Igor, KOŽUH, Mitja, AL-MANSOUR, Fouad. *Energetski pregled Instituta RS za rehabilitacijo*, (IJS delovno poročilo, 8921). Ljubljana: Institut Jožef Stefan, 2004. 6 str. [COBISS.SI-ID 18461991]