



Katedra za anorgansko kemijo FKKT



Število učiteljev: 7; asistentov: 12 (9 docentov); + tehnični sodelavci.

Glavna raziskovalna področja (ključne besede):

Sinteza,

Koordinacijske spojine; Organokovinske spojine,

Rentgenska strukturna analiza,

Fizikalno-kemijska karakterizacija z različnimi tehnikami,

Modelne spojine v bioloških sistemih; Biološko aktivne spojine,

Nanotehnologija,

Sol-gel kemija; Termična analiza tankih filmov; Kataliza,

Kovine v okolju; Anaerobna razgradnja.

Sklopi, ki so tematsko ali organizacijsko povezani:

Programska skupina P. Bukovec:

R. Cerc-Korošec; I. Kozjek-Škofic; E. Tratar-Pirc; B. Modec,

Programska skupina A. Meden:

A. Demšar; S. Petriček; A. Pevec; F. Perdih,

A. Meden; A. Golobič,

N. Lah,

B. Čeh; B. Kozlevčar; N. Kitanovski,

I. Turel

Primeri uporabe nanomaterialov: samočistilne površine in pametna okna

doc. dr. Romana
Cerc Korošec

EXPOSURE TEST RESULTS



Titanium dioxide
photocatalytic membrane



laminated with polyvinyl
fluoride (PVF)



Without any treatment

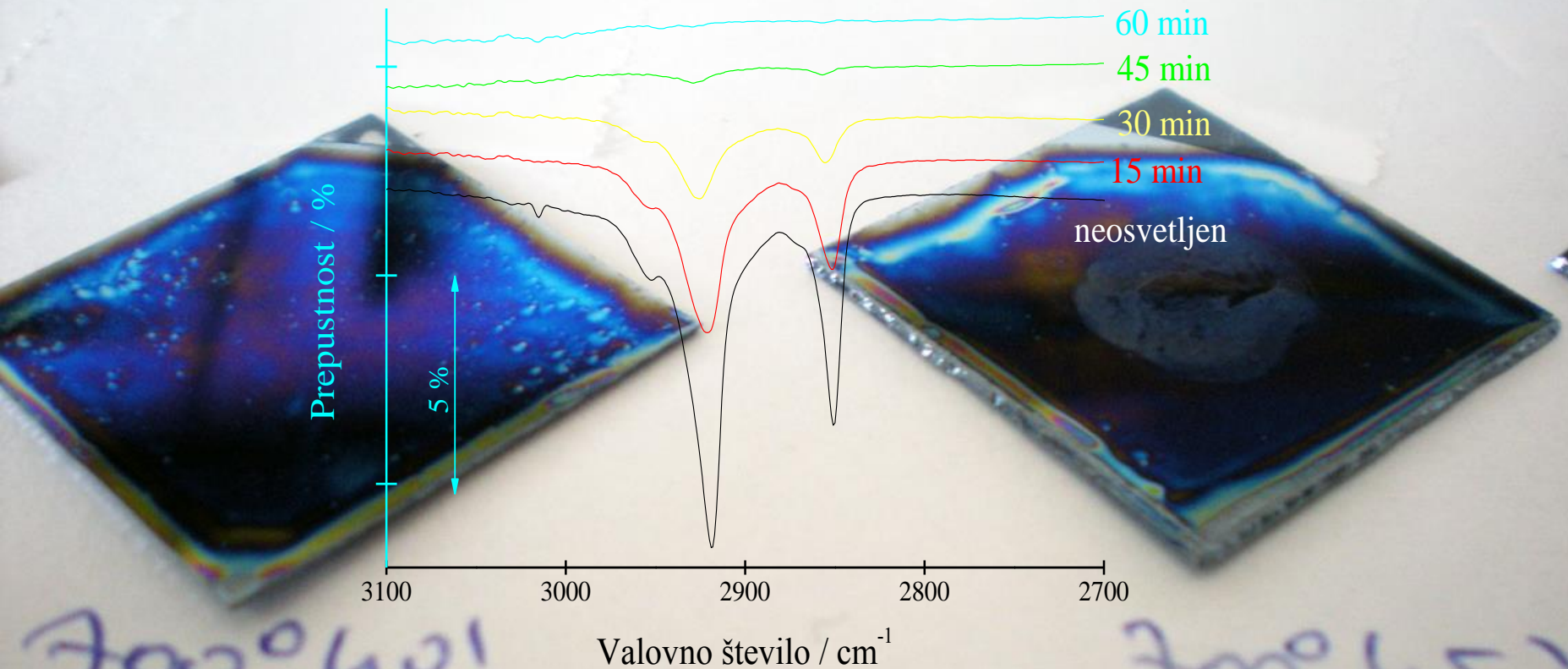
Šotori iz tekstila, prevlečenega s PVC. Na zgornjo plast je bil naknadno nanešen TiO_2 (slika levo), polivinil fluorid (v sredini); brez naknadne obdelave je bilo šotorsko platno na sliki desno. Vsi so bili izpostavljeni zunanjim dejavnikom 5 mesecev.



4.4.2002 13:26

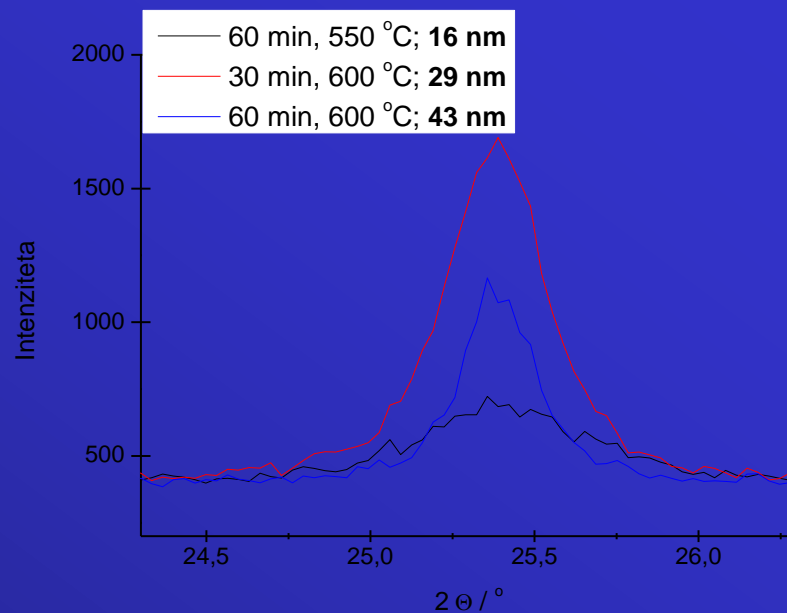
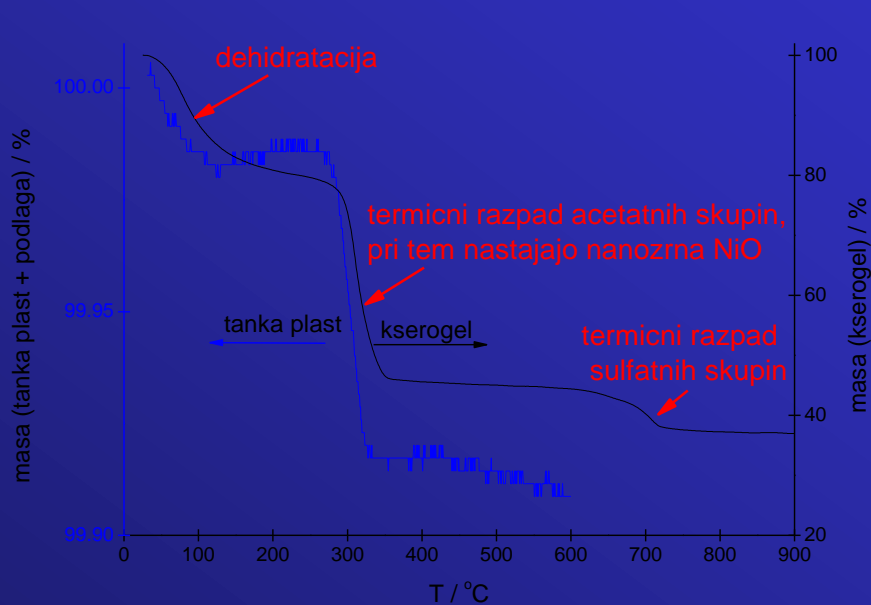
Soba, opremljena z elektrokromnimi okni
– Flabeg, Nemčija.

Priprava in določevanje fotokatalitske učinkovitosti tankih plasti in prahov TiO_2



- sinteza sola (sol-gel postopek)
- nanos tankih plasti na podlago oz. priprava kserogelov
- določitev temperature termične obdelave tankih plasti in prahov (TG, DSC)
- določevanje fotokatalitske učinkovitosti pripravljenih plasti (prahov) za razgradnjo različnih onesnaževal
- karakterizacija plasti in prahov (XRD, SEM)

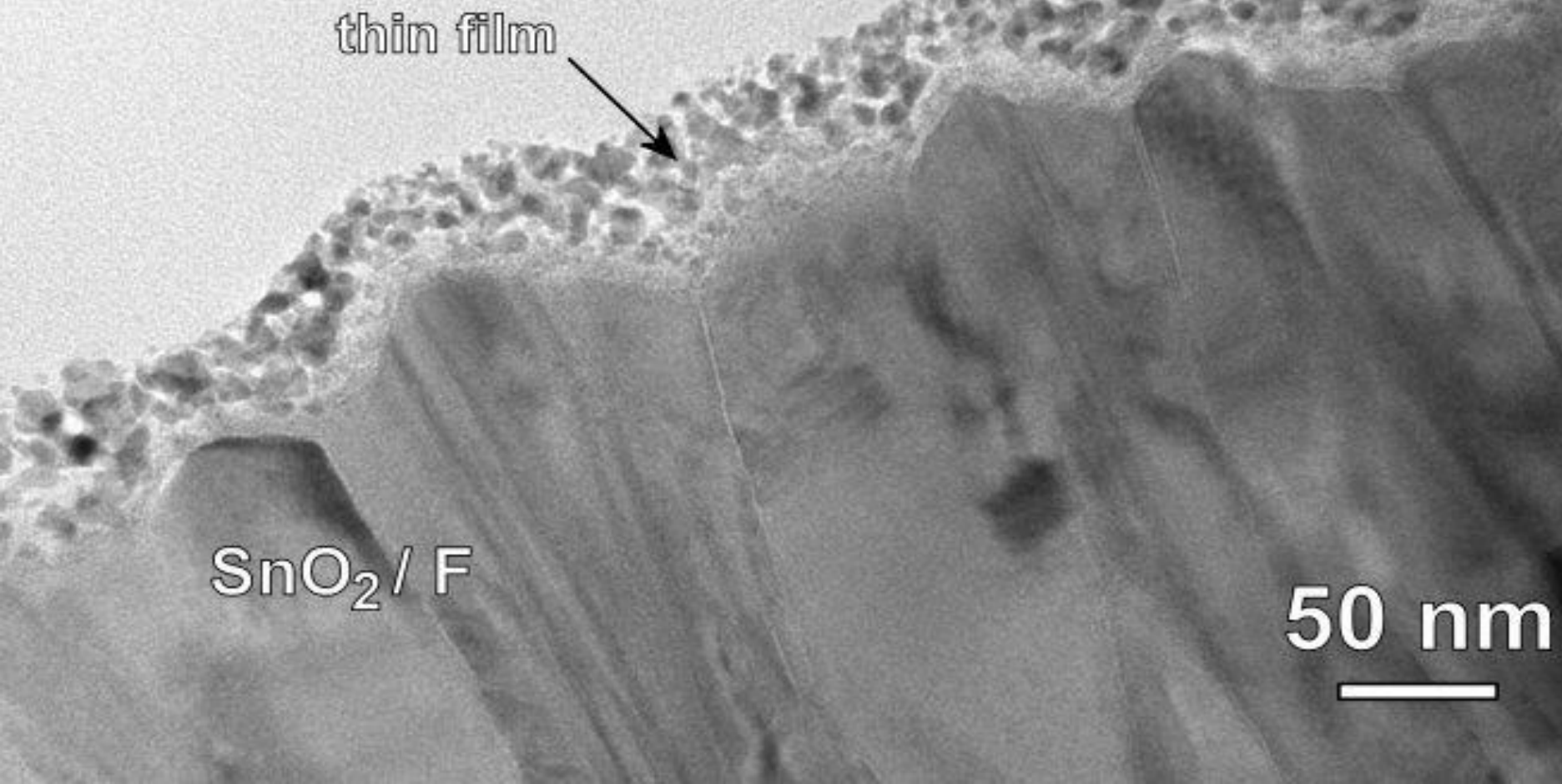
Tehnike termične analize: določevanje temperature in časa toplotne obdelave



Termoanalizator Mettler Toledo TGA/SDTA 851^e in avtomatski vzorčevalnik.

Elektrokromne tanke plasti

- sinteza sola (sol-gel postopek)
- nanos tankih plasti na podlago
- določitev temperature termične obdelave tankih plasti in prahov (TG, DSC)
- določevanje stopnje obarvanja in razbarvanja in reverzibilnosti tega procesa
- karakterizacija plasti (SEM, TEM, AFM)



PRIPRAVA IN KARAKTERIZACIJA MATERIALOV

doc.dr. Irena Kozjek Škofic

Vrste sinteze:

- Sol – gel
- Hidrotermalna
- Termični razpad



Reaktor za hidrotermalno sintezo na Katedri za anorgansko kemijo

Karakterizacija:

- Vrstična elektronska mikroskopija
- Termična analiza
- Rentgenska praškovna difrakcija



Vrstični elektronski mikroskop

<http://www.fkkt.uni-lj.si/sl/raziskovalna-infrastruktura/enota-za-elektronsko-mikroskopijo/>

PRIPRAVA IN KARAKTERIZACIJA MATERIALOV

doc.dr. Irena Kozjek Škofic

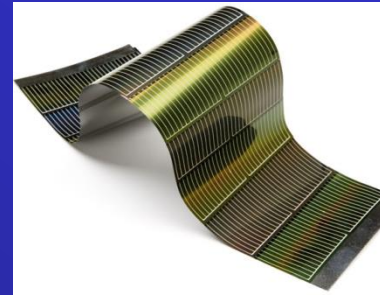
Materiali, ki jih na tak način pripravimo, imajo uporabno vrednost.

Ionski hranilniki v pametnih
oknih



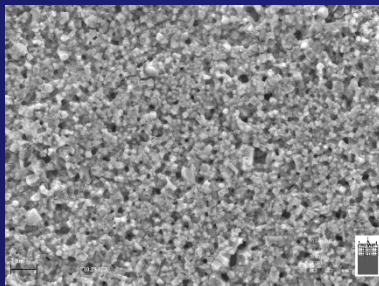
http://ceramics.org/wp-content/uploads/2010/03/rwa_sbs_comparison.jpg

Fotoelektrokemične sončne celice

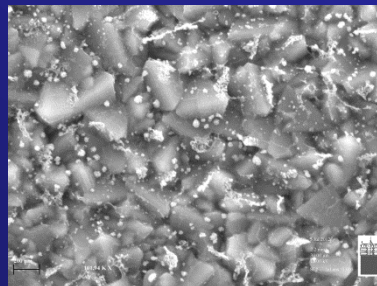


<http://www.21stcentech.com/wp-content/uploads/2012/05/Gratzel-Cells-are-flexible.jpg>

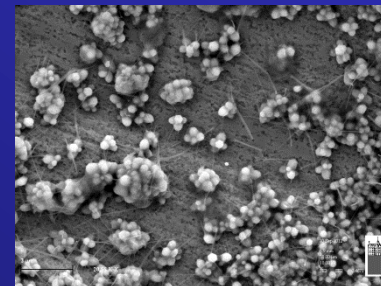
Katalizatorji, namenjeni boljšemu izgorevanju v dizelskih
motorjih, termoelektrarnah – sodelovanje z industrijo



CoS



Pt/SnO₂

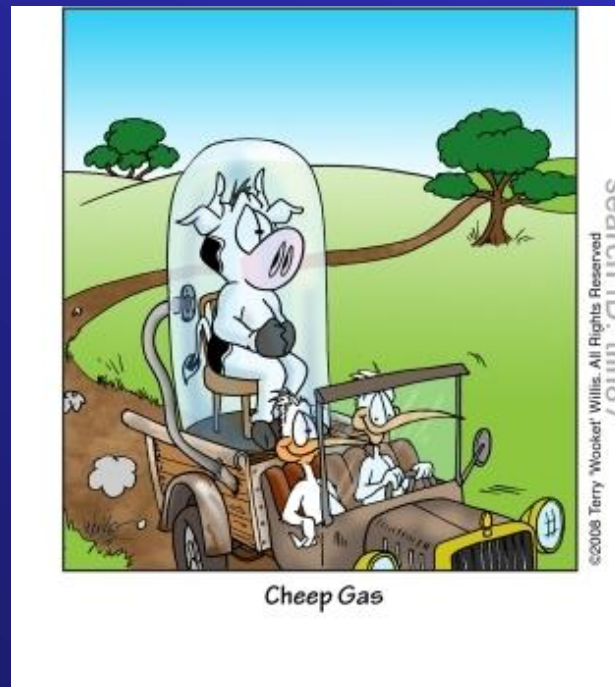


Cu/ZnO

ANAEROBNA RAZGRADNJA

doc. dr. Elizabeta Tratar Pirc

- Anaerobna razgradnja je biološki proces, pri katerem organska snov s pomočjo različnih mikroorganizmov fermentira brez prisotnosti kisika.
- Nastane bioplin – glavna sestavina metan (obnovljiv vir energije).



ANAEROBNA RAZGRADNJA

doc. dr. Elizabeta Tratar Pirc

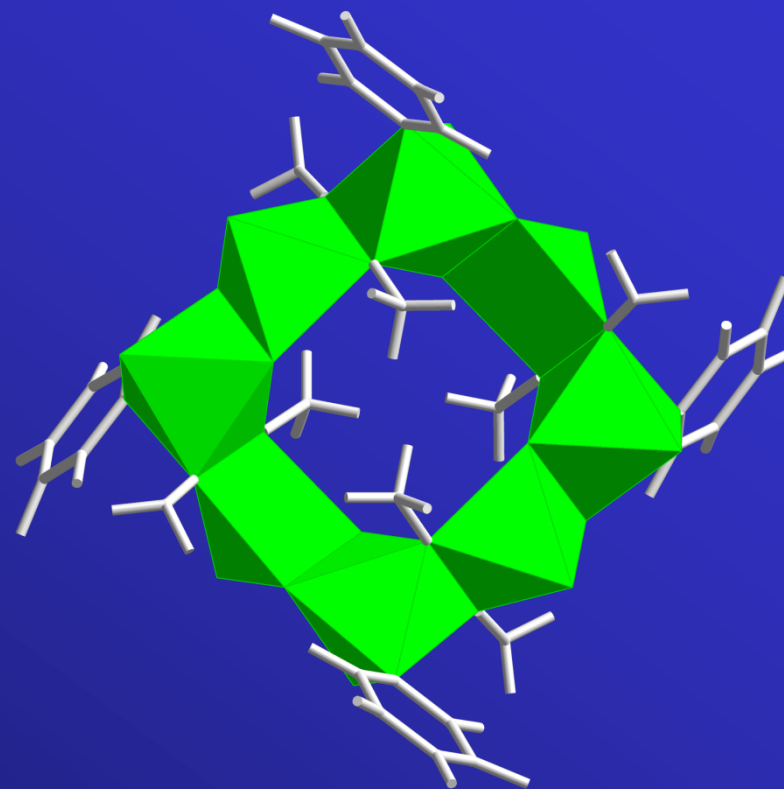
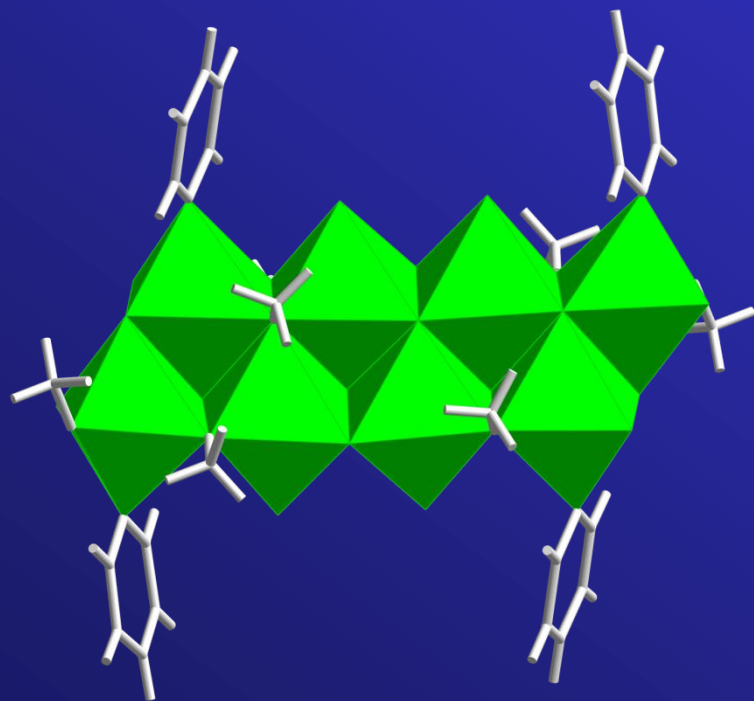
- Študij vpliva različnih onesnažil na anaerobno razgradnjo.
- Kako je razgradljiva bioplastika pod anaerobnimi pogoji??



OxiTop merilni sistem

Sinteza koordinacijskih spojin molibdena in volframa

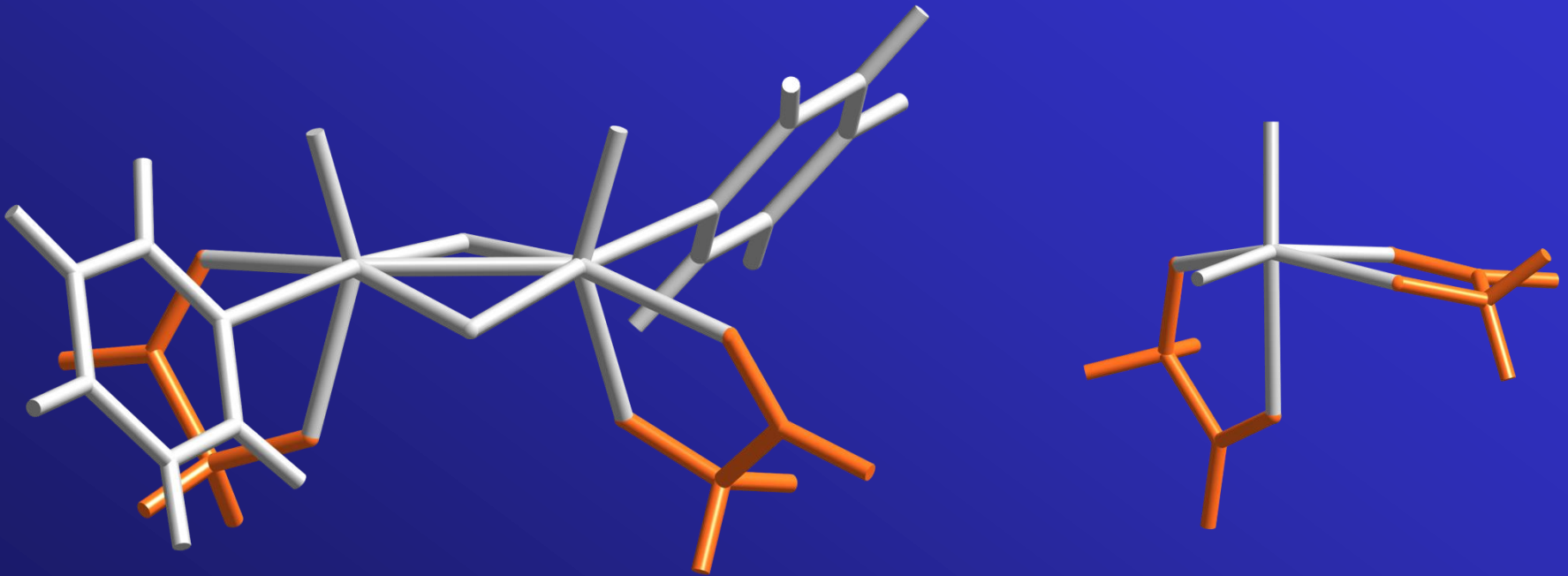
Karakterizacija produktov z rentgensko strukturno analizo in izbranimi spektroskopskimi metodami



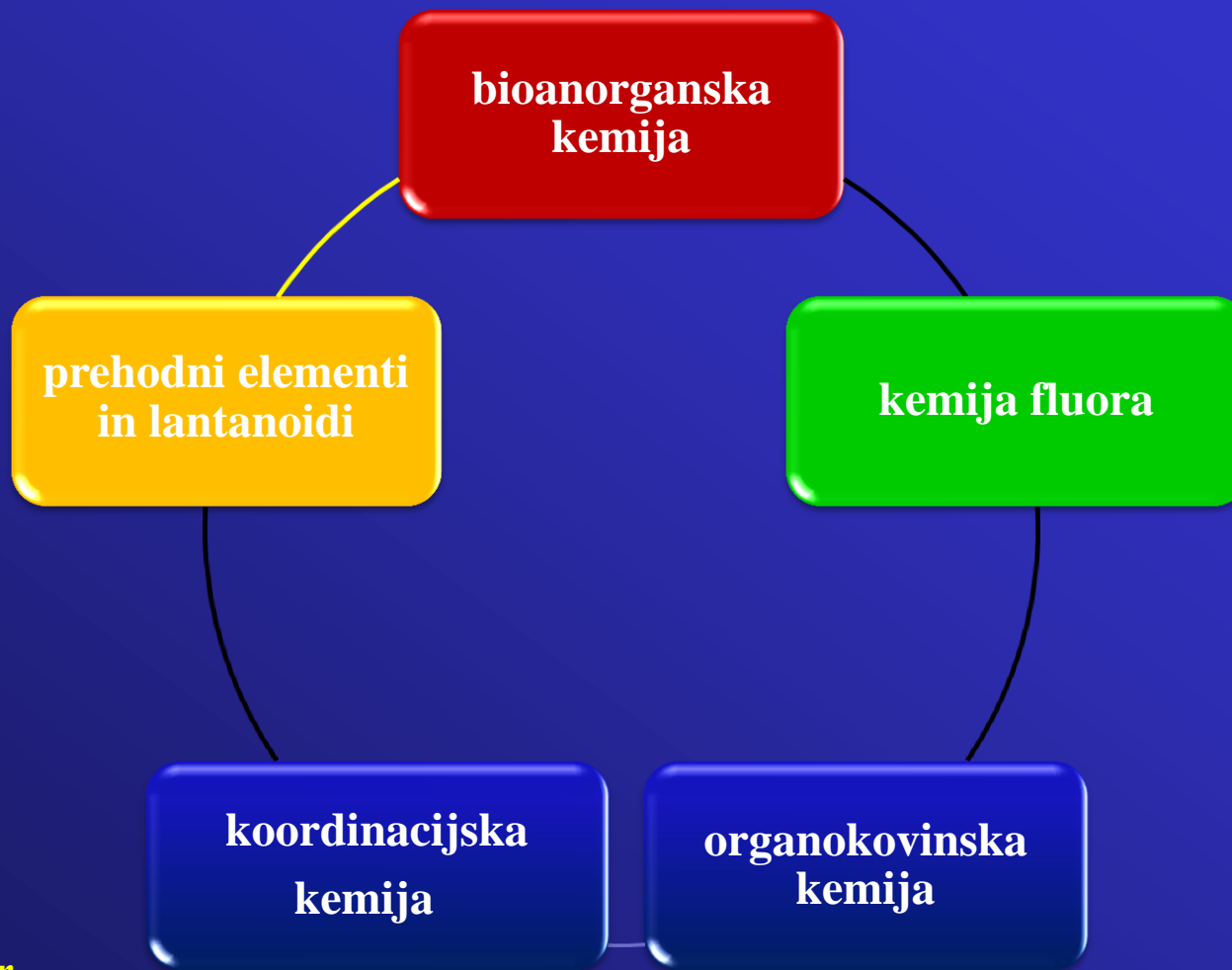
Polioksomolibdati z $\{\text{Mo}_2\text{O}_4\}^{2+}$ gradbeno enoto
Strukturna izomera $[\text{Mo}_8\text{O}_{16}(\text{OMe})_{16}(\text{Py})_4]$

Kompleksi molibdena(V) z biološko zanimivimi ligandi

Nenavadna vezava glikolata v $\{\text{Mo}_2\text{O}_4\}^{2+}$ kompleksih



Sintezna koordinacijska in organokovinska kemija

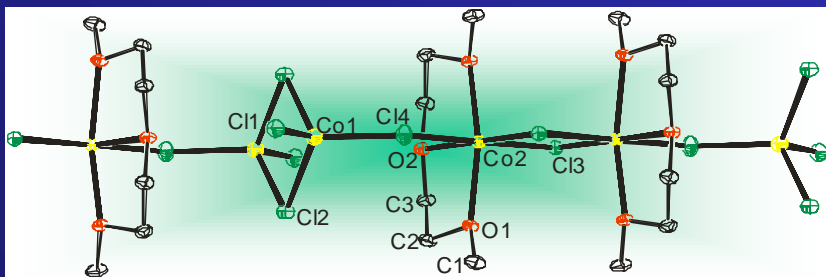


prof. dr. Alojz Demšar
doc. dr. Saša Petriček
doc. dr. Andrej Pevec
doc. dr. Franc Perdih

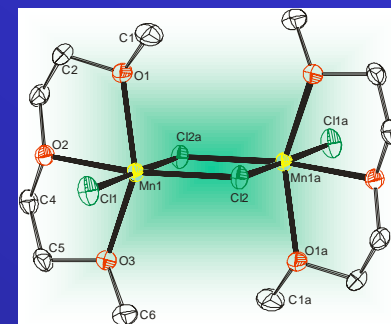
Sinteza halogenidnih kompleksov kovin prehoda z O- in N-donorskimi ligandi

Številni kompleksi halogenidov prehodnih kovin z O-donorskimi ligandi (polietri) so bili v preteklosti sintetizirani v okviru diplomskih del, npr.

polimerni kompleksi



dvojedni kompleksi



Raziskave enostavnejših magnetnih interakcij v dimernih in 1D polimernih kompleksih prispevajo k razumevanju kompleksnejših procesov v zanimivih sistemih (SMM).

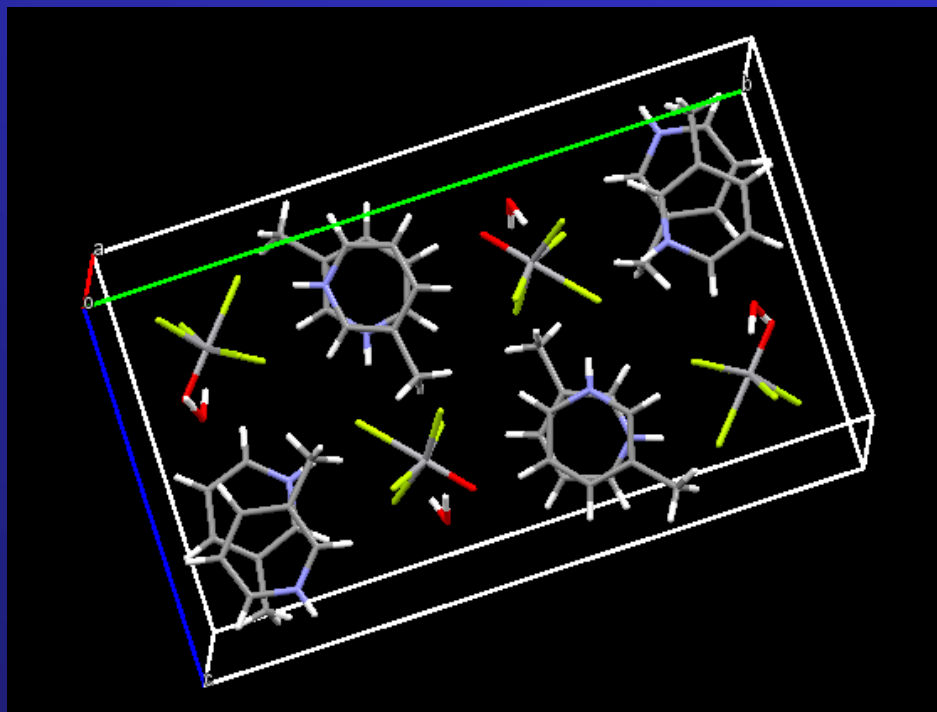


Halogenidni kompleksi kovin prehoda z O- in N-donorskimi ligandi v letu 2013/14

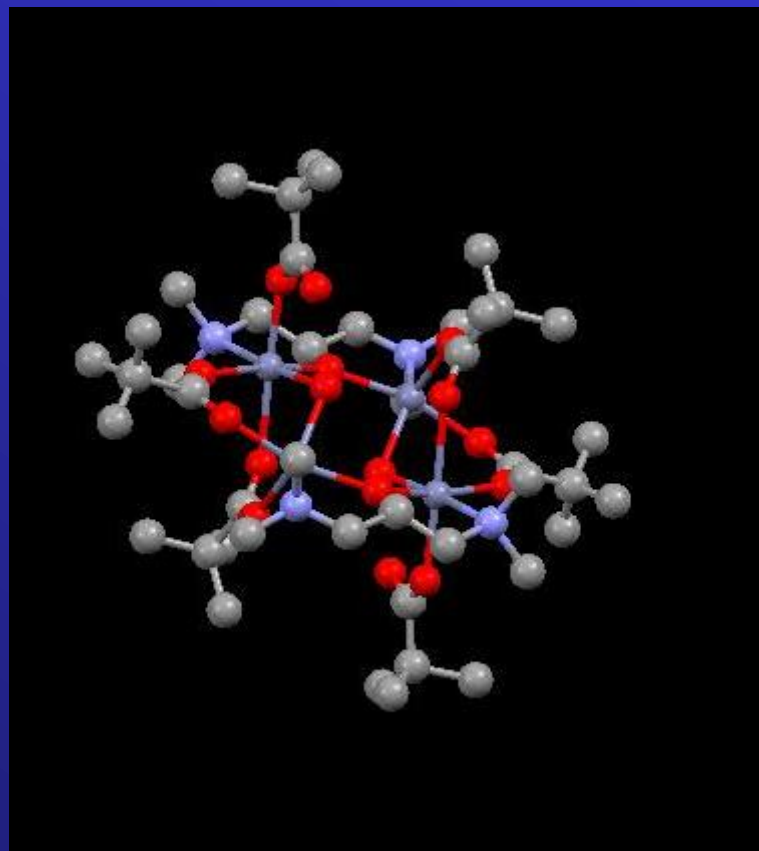
Zanima nas
sinteza,
kristalne strukture in
magnetne lastnosti dimernih spojin in koordinacijskih polimerov.

O- in N-donorskimi ligandi v prihodnjih eksperimentih:
derivati piridina in
heterocikličnih O- in N-donorski ligandi, ki se vežejo
mostovno.

Fluoridooksidovanadati(V) - iskanje piezoelektrikov z ne-centrosimetričnim $[\text{VOF}_5]^{2-}$ anionom

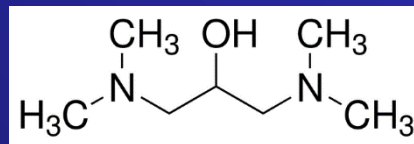


Študij molekulske dinamike z NMR spektroskopijo



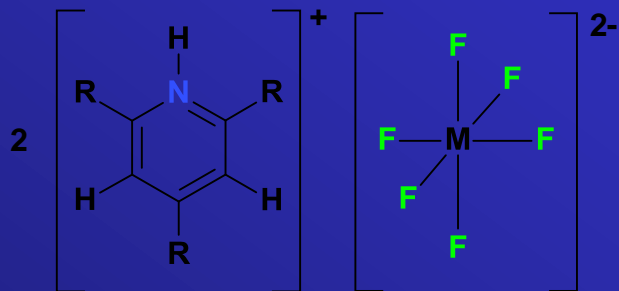
Dinamična – fleksibilna molekula $[\text{Zn}_4(\text{piv})_6(\text{bdmap})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$

Piv = $(\text{CH}_3)_3\text{CCOO}^-$, Hbdmap =

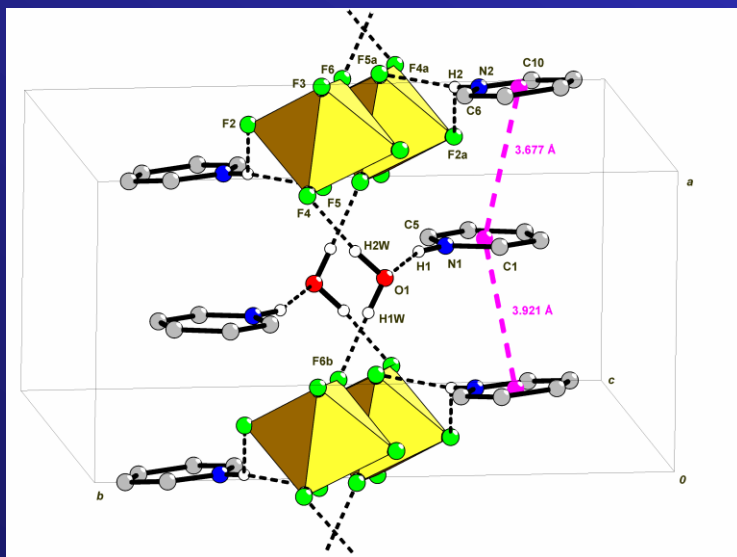


• Fluoridotitanati in fluoridosilikati

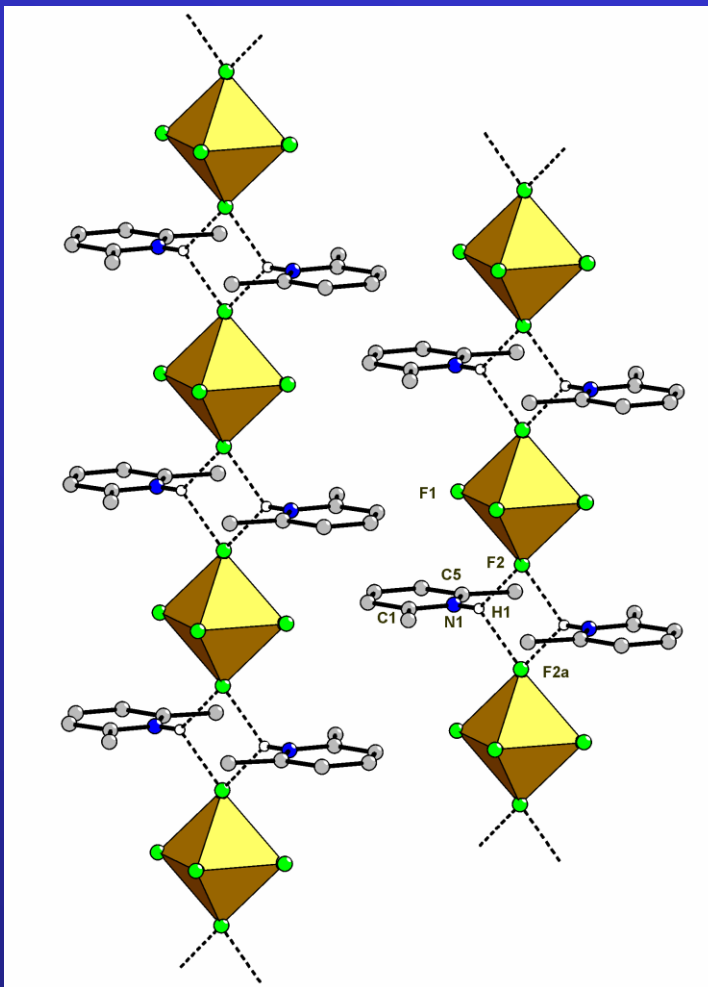
doc. dr. Andrej Pevec



M = Ti, Si



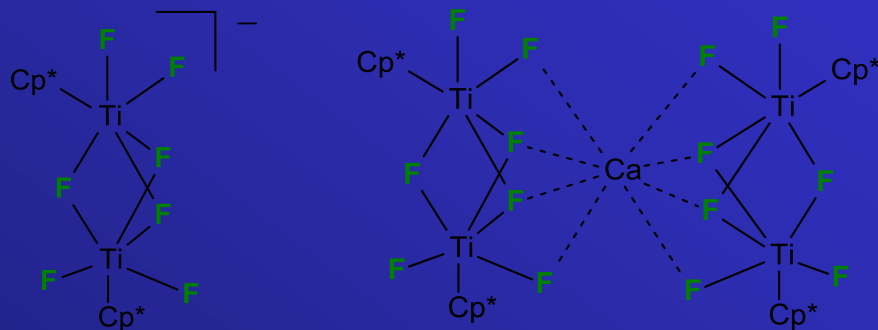
$(\text{RH})_2[\text{TiF}_6] \cdot \text{H}_2\text{O}$
R = **piridin**



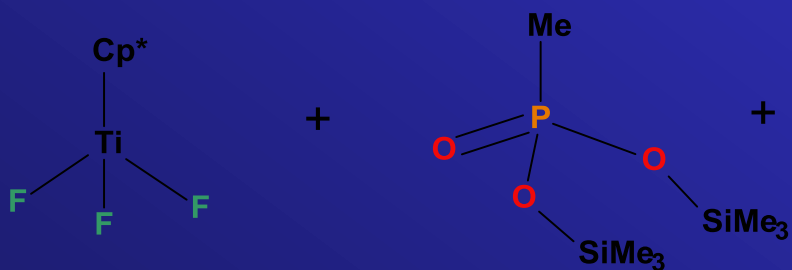
$(\text{RH})_2[\text{TiF}_6]$
R = **2,6-lutidin**

vodikove vezi, C–H⋯O, C–H⋯π, π–π interakcije, halogen⋯π interakcije

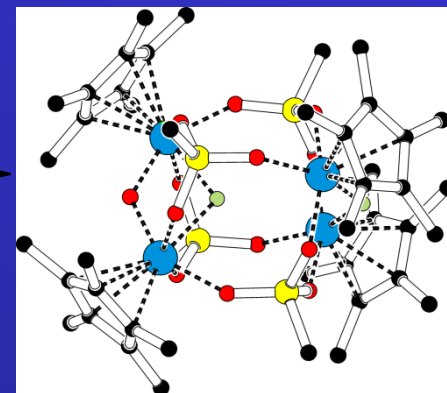
- Organotitanovi fluoridi in interakcije s kationi**



- Organotitanovi fosfonati**

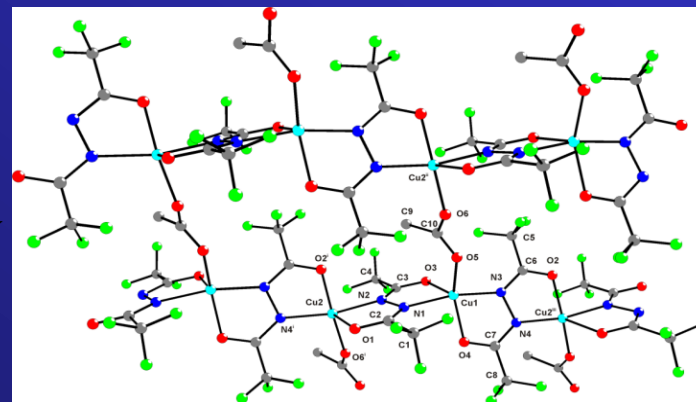


baza



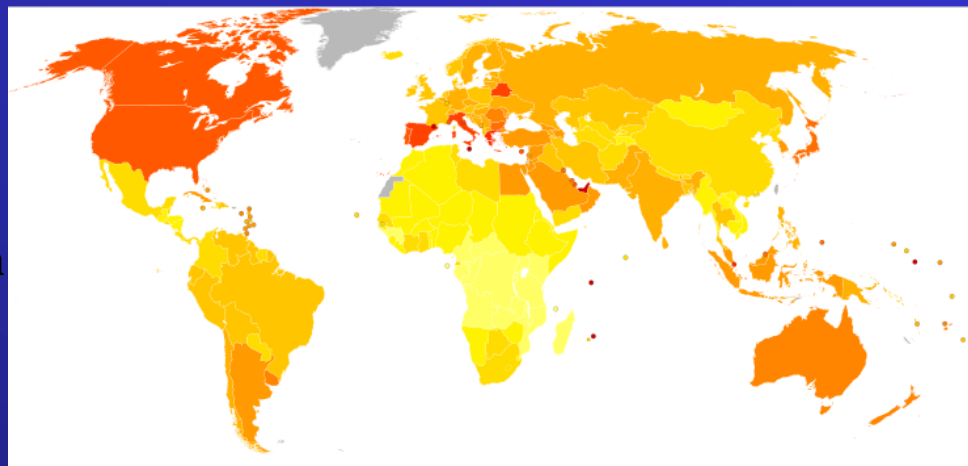
- Sinteza koordinacijskih spojin**

Sinteza koordinacijskih polimerov





1. Razvoj vanadijevih in cinkovih spojin z antidiabetičnim delovanjem

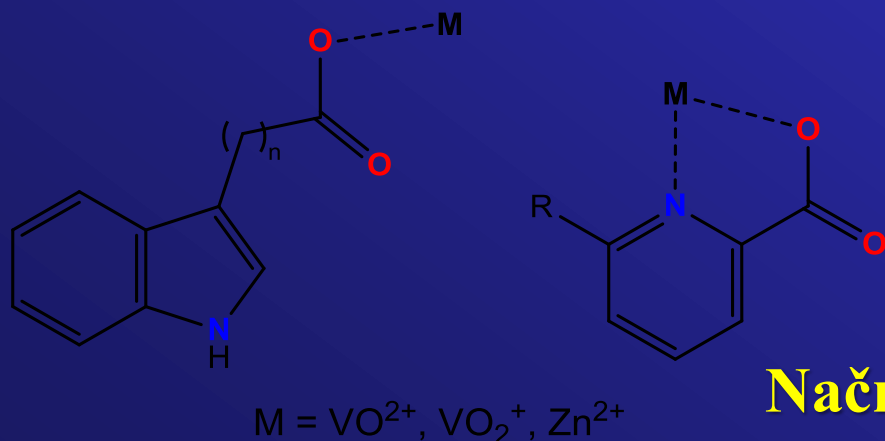


delež obolelih za sladkorno boleznijo (na 1000 prebivalcev)



doc. dr. Franc Perdih

velik zdravstveni problem:
v letu 2013 na svetu več kot 300 milijonov ljudi s sladkorno boleznijo!



vanadijeve in cinkove spojine so ojačevalci delovanja inzulina

Načrt dela: sinteza novih ligandov in koordinacijskih spojin

sodelovanje:

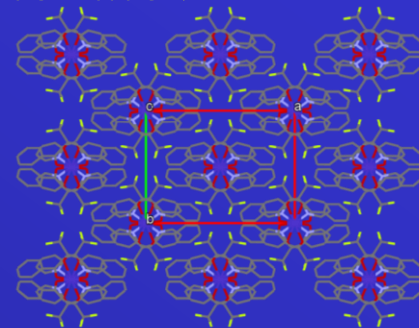
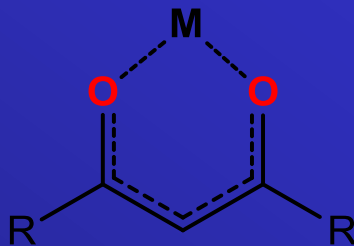
Kyoto Pharmaceutical University – biološka testiranja V in Zn spojin

University of Sassari – študij interakcij V in Zn spojin s transportnimi proteini



2. Supramolekularna kemija in kristalna arhitektura

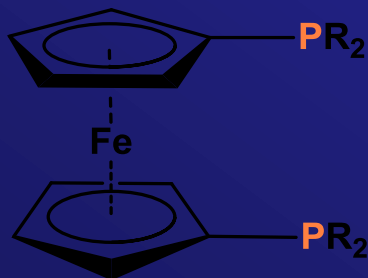
spremljanje zakonitosti pri zlaganju molekul v kristale na primeru kovinskih β -diketonatov



prisotnost klasičnih in neklasičnih vodikovih vezi, π - π interakcij, argentofilnih interakcij, vpliv zamenjave $-\text{CH}_3$ skupine s $-\text{CF}_3$

3. Derivati ferocena s fosfinskimi skupinami

povečajo aktivnost paladija pri reakcijah pripajanja (Sonogashira, Heckova, Suzukijeva, Neghisijeva reakcija)



Načrt dela: sinteza novih derivatov, kjer je R heterociklični substituent

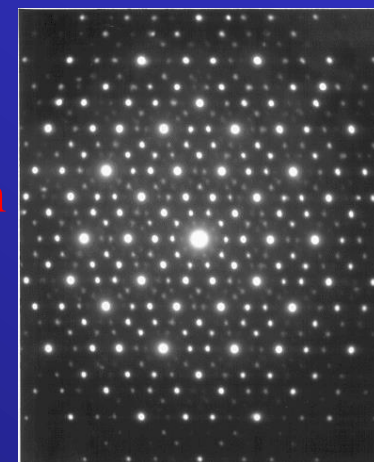
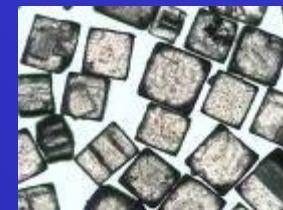
sodelovanje:

East China Normal University



prof. dr. Anton Meden in doc. dr. Amalija Golobič

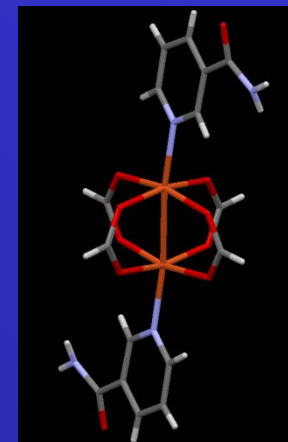
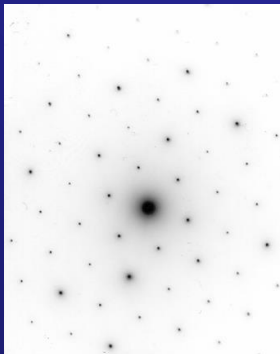
- Sta mentorja pri diplomskih delih, ki so osredotočena na **trdno snov** oziroma na **kristale**.
- Preučevane snovi sodijo med **tehnološko pomembne materiale** kot so mikrovalovna keramika, zeoliti, zdravilne učinkovine ali pa so to **nove spojine** s področja temeljnih raziskav oziroma preučevanj novih kemijskih reakcij.
- Glavna metoda dela je **računalniška analiza uklonskih podatkov** rentgenskih žarkov na **polikristaliničnem ali monokristalnem vzorcu**.



TEMATIKA – DOLOČEVANJE STRUKTURE TRDNINE

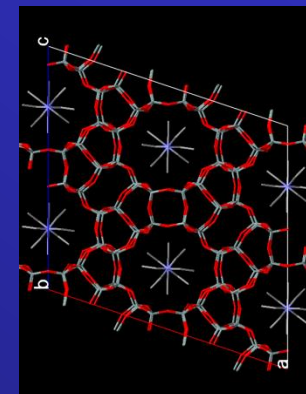
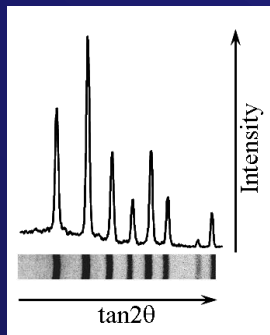
1. DOLOČEVANJE STRUKTURE NA OSNOVI MONOKRISTALA

- Diplomant(ka) se nauči določiti strukturo nove organske, koordinacijske ali anorganske spojine z utečeno metodo analize na osnovi monokristala.
- Nauči se interpretirati (opisati in narisati) strukturo trdnine ter jo povezati z njenimi lastnostmi.



2. DOLOČEVANJE STRUKTURE S PRAŠKOVNO DIFRAKCIJO

- Diplomant(ka) določi strukturo trdnine s praškovno difrakcijo (običajno zahtevnejša metoda; izziv v primeru, ko nimamo monokristalov)
- Nauči se interpretirati (opisati in narisati) strukturo trdnine ter jo povezati z njenimi lastnostmi.





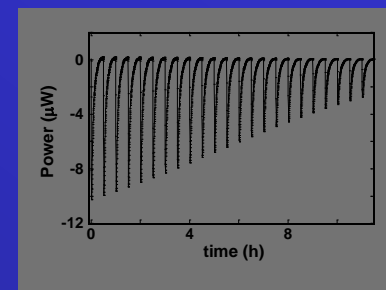
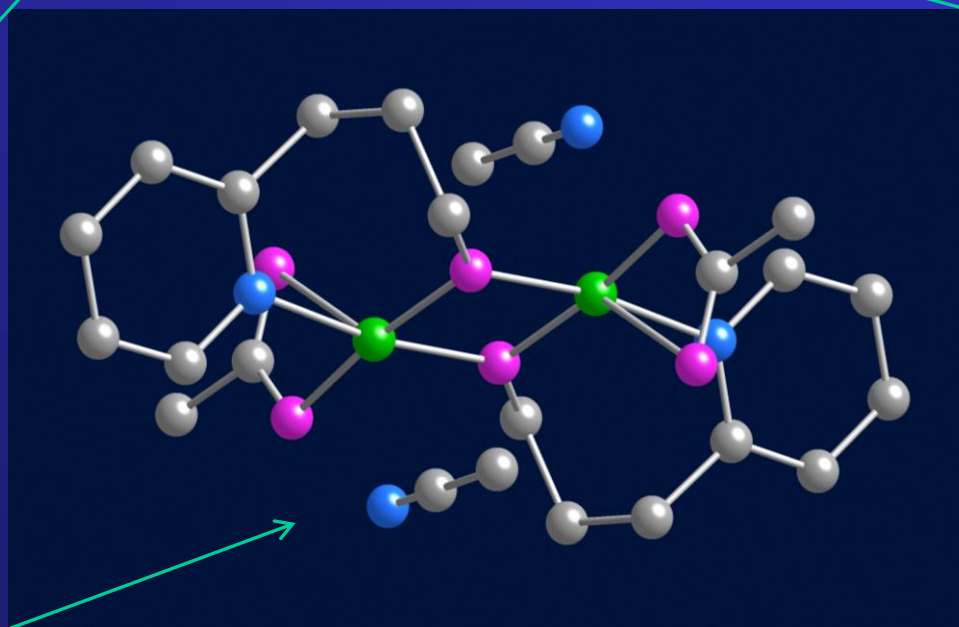
3. APLIKATIVNE DIPLOME – Reševanje praktičnih problemov iz industrije s pomočjo PRAŠKOVNE difrakcije

(različna področja in podjetja: farmacija (Krka, Lek), elektro (Eti), Cinkarana, Salonit....)

- Kvalitativna in kvantitativna rentgenska praškovna analiza trdnih vzorcev
- Študij polimorfizma
- Obravnavanje amorfne faze
- Obravnavanje mikrostrukture
-

Na pedagoško-raziskovalnih inštitucijah kakor tudi v industriji so v zadnjih letih kupili precej rentgenskih difraktometrov in to zaradi pomembnih in koristnih informacij, ki jih dobimo z njihovo pomočjo. Tako, da je v tovrstnih podjetjih kader, ki zna kemijo in hkrati razume uklonsko sliko, zaželen.

Bakrove koordinacijske spojine: sinteza, struktura in lastnosti



Reakcijski mehanizem
Energetika procesa



KOORDINACIJSKE SPOJINE - SINTEZA IN KARAKTERIZACIJA

MODELNE SPOJINE ZA ENCIME ter BAKER NA LIGNINSKIH MODELIH - ZAŠČITA LESA

Boris Čeh, Nives Kitanovski, Bojan Kozlevčar

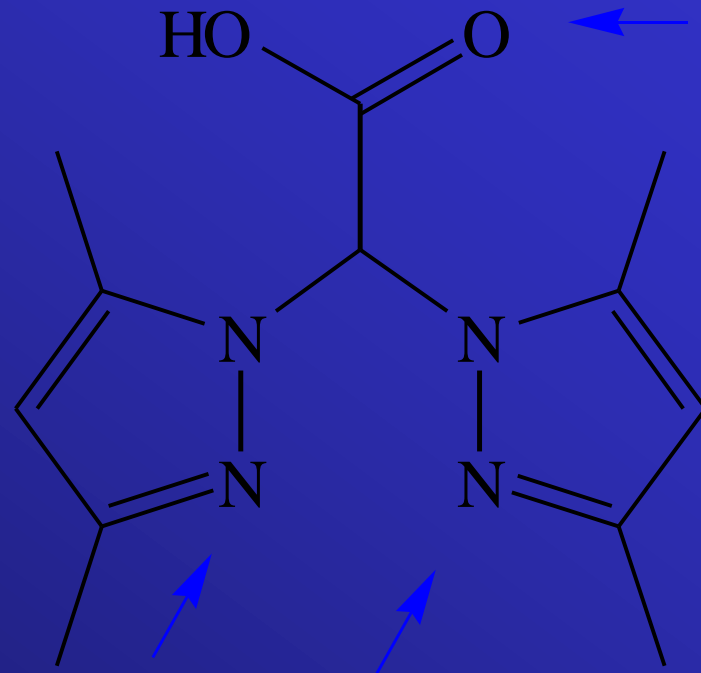
Sinteza v raztopini z ligandom in kovinsko izhodno snovjo

Izolacija trdne snovi

Metode s katerimi ste se večinoma že srečali: IR, UV-Vis, Magnetna
tehnika, mikroskop, elementna analiza, praškovni difraktogram

bis(3,5-dimetilpirazol-1-il) očetna kislina

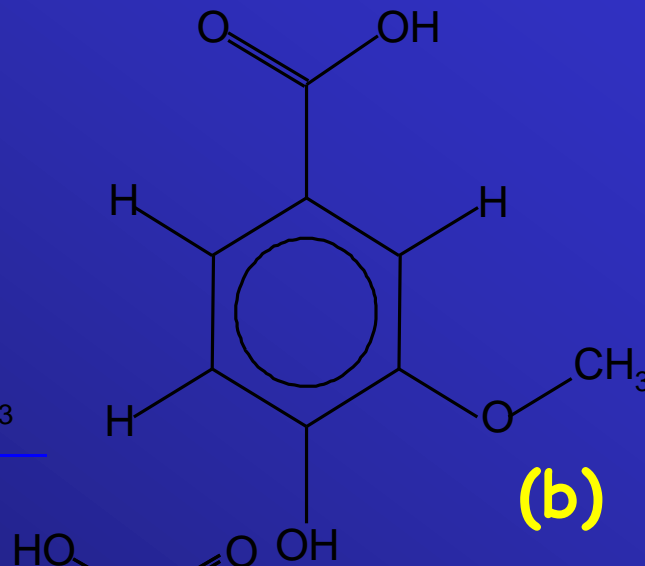
podobnost z okolico aktivnega mesta v nekaterih encimih
(atomi za koordinacijo s kovinskim ionom)



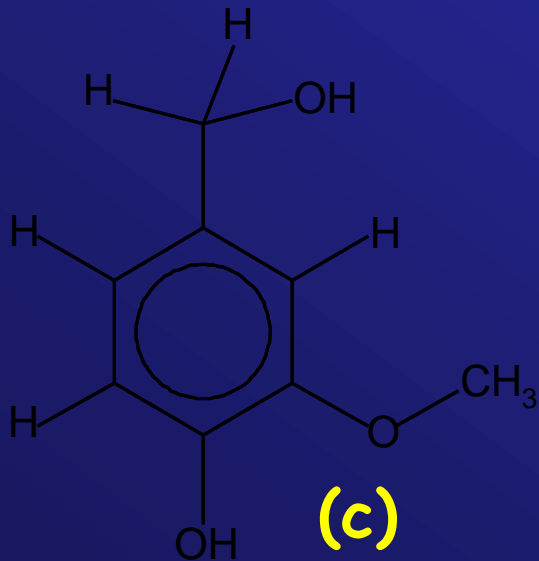
Gvajacilni ligninski modeli (atomi za koordinacijo s kovinskim ionom)



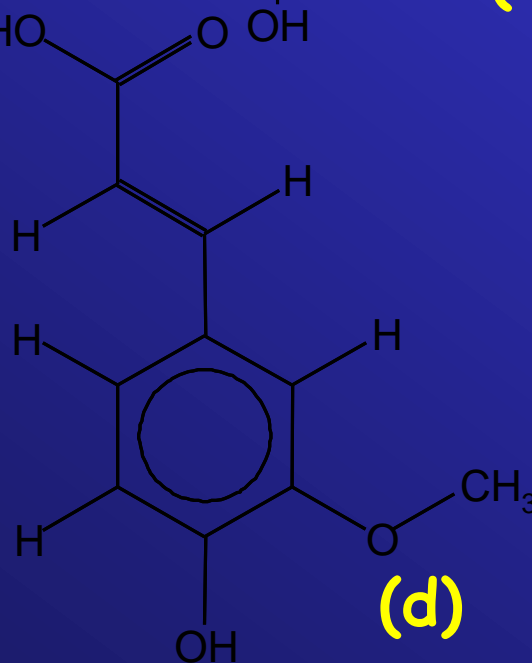
vanilin (a),



(b) vanilinska kislina (b),



4-hidroksi-3-metoksi-
benzil alkohol (c),



ferulna kislina (d).

Iztok Turel

„Kovinski kompleksi z zanimivimi biološkimi, katalitskimi in foto-fizikalnimi lastnostmi“

Ključne besede:

Kovinski ioni; rutenij.

Ligandi (kinoloni; N,N; O,O; N,O).

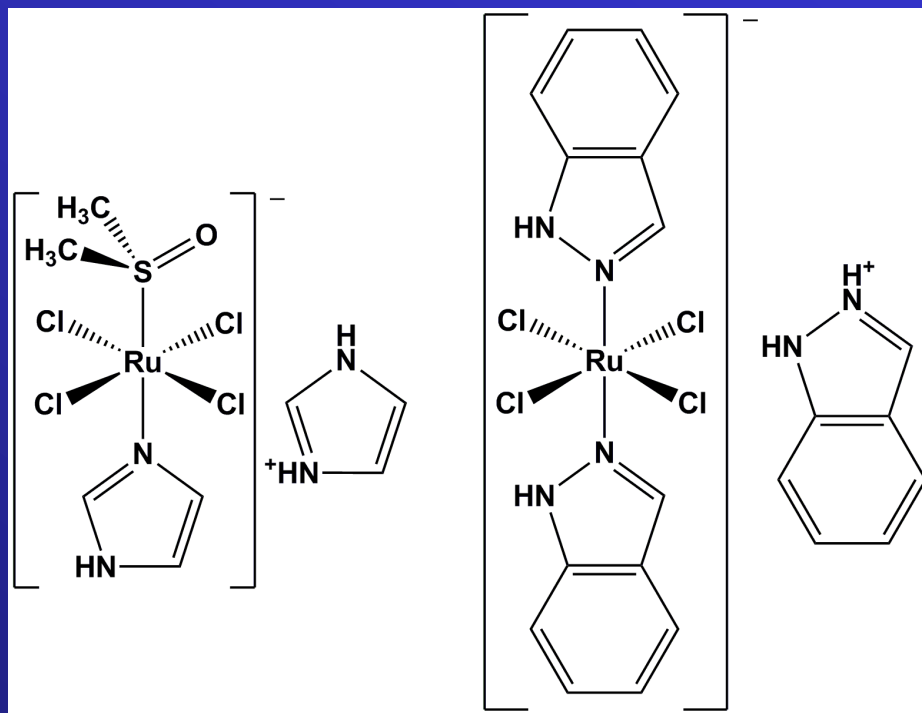
Biološke lastnosti (citotoksičnost; inhibicija...).

Kovinski ioni kot katalizatorji.

Foto-fizikalne lastnosti (barvila za sončne celice; senzorji).

Zakaj je rutenij zanimiv?

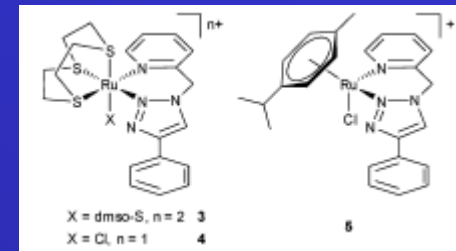
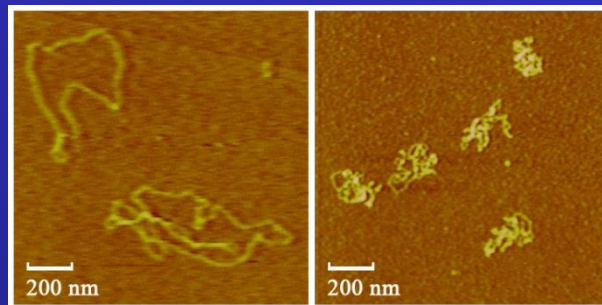
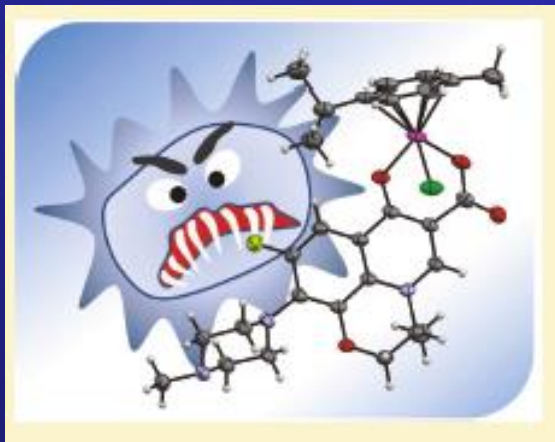
Kovinske spojine s protirakavim učinkom



Trenutno najuspešnejše rutenijeve spojine so NAMI-A (levo) in KP1019 (desno). Spojini sta že v fazi kliničnega preizkušanja (Faza II). Razvijajo in testirajo pa se tudi mnoge nove rutenijeve spojine.

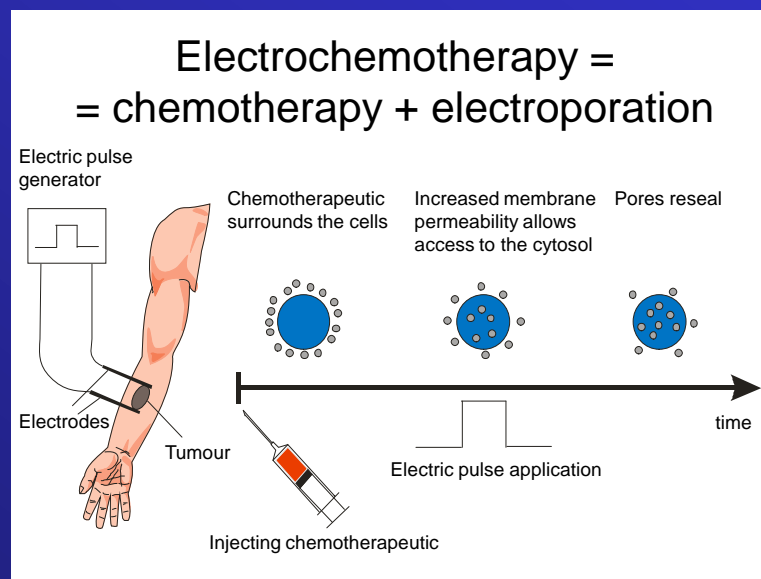


Tudi pri nas smo v zadnjem času pripravili več rutenijevih kompleksov s **potencialno biološko aktivnostjo** in rezultate objavili v uglednih revijah.



Primeri člankov:

- Inorg. Chem., 49, 10750-10752 (2010).
- Organometallics, 30, 2506-2512 (2011).
- Dalton Transactions, 40, 5188-5199 (2011).
- Organometallics, 31, 5867-5874 (2012).
- Inorg. Chem., 52, 9039-9052 (2013).
- Organometallics, 33, 1594-1601 (2014).
- Dalton Transactions, 43, 9045 - 9051 (2014).



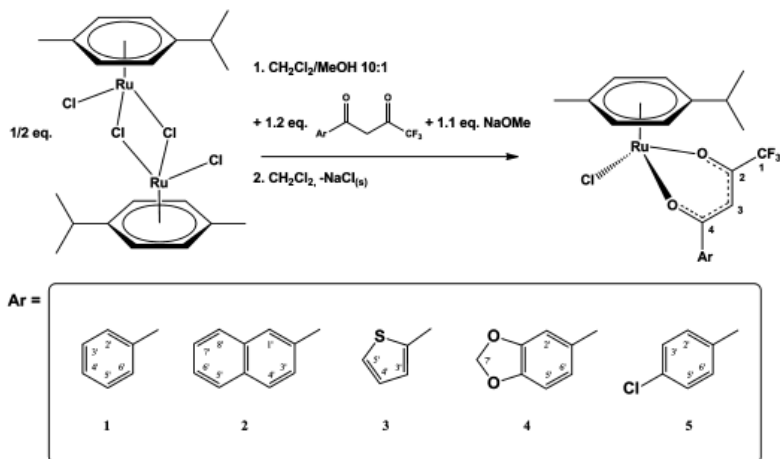
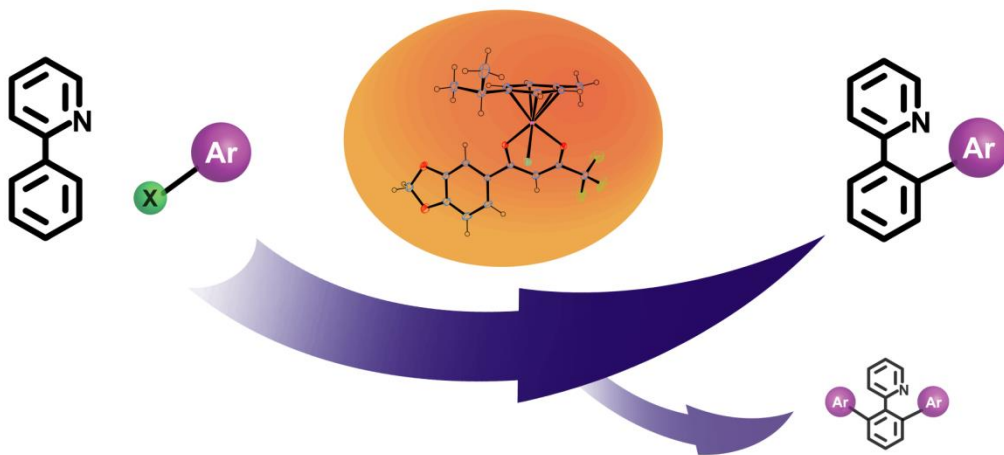


Figure 1. Synthetic procedure for preparation of compounds 1–5. Abbreviations of Ar groups from left to right: Ph, Np, thienyl, dioxo, PhCl.

S. Seršen, B. Štefane I. Turel, et al, *Organometallics*, 32, 609–616 (2013).

Pripravili smo več novih organorutenijevih kompleksov z diketonati in ugotovili, da imajo zanimive katalitične lastnosti.



Lahko se oglasite na pogovoru in možnosti vam bomo podrobneje razložili! Vesel bom vsakega vašega zanimanja:
iztok.turel@fkkt.uni-lj.si (Soba 510, Aškerčeva 5)