

1.

Ime predmeta: IZBRANA POGLAVJA IZ ANORGANSKE KEMIJE				
Nosilec: prof. dr. Iztok Turel				
Izvajalci: prof. dr. Iztok Turel prof. dr. Alojz Demšar prof. dr. Boris Čeh doc. dr. Bojan Kozlevčar doc. dr. Barbara Modec doc. dr. Marija Zupančič doc. dr. Elizabeta Tratar Pirc				
Št. ur: 150	Predavanj: 30	Seminarjev: 45	Lab. vaj:	Drugo: 75
Število KT: 5				
2. Pogoji za vključitev: Znanje splošne in anorganske kemije na ravni drugostopenjskih kemijskih programov.				
3. Izobraževalni cilji in predvideni študijski rezultati (predmetno – specifične kompetence): Študent pridobi poglobljeno znanje o izbranih poglavjih anorganske kemije. Spozna strategije načrtovanja sintez ter se nauči iskati in interpretirati povezave med zgradbo, lastnostmi in potencialno uporabnostjo izbranih vrst spojin. Nauči se uporabljati različne eksperimentalne metode pri razreševanju problemov, povezanih z izbranimi vrstami spojin.				
4. Vsebina predmeta: Študent s soglasjem mentorja med spodaj navedenimi temami izbere tiste, ki so najtesneje povezane z njegovim raziskovalnim delom. Nosilec predmeta in vodja študija poskrbita, da obseg študentovega dela ustreza 5 KT. Če je izvajalcev več, izvajanje koordinira nosilec. Priprava in uporaba spojin kovinskih elementov: <i>Priprava spojin elementov, ki imajo praktične aplikacije.</i> Sistematičen pregled sinteznih principov za pripravo spojin in metod njihove karakterizacije. Poglobljen pregled izbranih primerov sodobnih uporab: modelne koordinacijske spojine, fotosenzitivne rutenijeve spojine v Graetzlovih celicah, fluorescenčne kovinske spojine in uporaba v analitiki, spojine zlata in nanotehnologija. Pregled nekaterih najuspešnejših kovinskih katalizatorjev, ki se uporabljajo tudi v industriji (Noyori, Grubbs, Heck, itd.). Mehanizmi delovanja. <i>Biološko aktivni kompleksi.</i> Pregled nekaterih spojin ki imajo dokazano biološko aktivnost in so že v klinični rabi ali pa v preizkusni fazi. Načrtovanje in sinteza novih biološko aktivnih koordinacijskih spojin, ki temeljijo na poznavanju mehanizma delovanje že obstoječih učinkovin, oziroma na podlagi najnovejših spoznanj o delovanju posameznih bioloških sistemov. Pri tem bodo uporabljene najnovejše strategije in				

metode. Pomembni vidiki tega načrtovanja so oblika/ struktura ter fiziološka dostopnost učinkovin, glede na njeno ciljno uporabo. Pri tem študent pridobi znanje, ki mu omogoča samostojno delo na področju biološko aktivnih spojin.

Kovinski kompleksi z makromolekulami. Kovinski kompleksi z nekaterimi makromolekulami imajo velik aplikativni pomen. V splošnem ločimo dva sintezna pristopa k pripravi teh spojin. Pri prvi metodologiji gre za koordinacijo kovinskega kompleksa na že formiran polimer, pri drugi pa enostaven kovinski kompleks reagira z monomerno enoto in v reakciji polimerizacije nastane makromolekula, ki ima kovinski atom pogosto v osnovni polimerni verigi. Sintezne poti za pripravo kovinskih kompleksov z makromolekulami, strukturne značilnosti in tipične lastnosti teh kompleksov, biomedicinske aplikacije.

Organokovinske spojine. Načrtovanje sinteze organokovinskih spojin, eksperimentalne tehnike pri sintezi, karakterizacija produkta. Dinamična NMR spektroskopija kot metoda za študij fluksionalnih organokovinskih in drugih molekul: osnove, določanje termodinamskih in kinetičnih parametrov in mehanizma dinamičnega procesa. Uporaba dinamične NMR spektroskopije za proučevanja mehanizma reakcij, kataliziranih z organokovinskimi katalizatorji.

Kovine v okolju. Razporeditev kovin in kovinskih spojin v okolju, esencialni in toksični elementi, naravni in antropogeni izvori, pomen kovin za žive organizme. Reakcije in kroženje kovin in kovinskih spojin v okolju (topnost spojin, ligandi v okolju, nastanek koordinacijskih spojin, reakcije koordinacijskih spojin, stabilnost koordinacijskih spojin, obarjanje, adsorpcija, kemisorpcija, ionska izmenjava, redoks reakcije, frakcionacija kovin v tleh). Obremenitev okolja s kovinskimi spojinami (toksičnost, mejne vrednosti, zakonodaja). Povezovanje navedenih vsebine z aktualnimi okoljskimi problemi. Sanacija tal in vode, stabilizacija odpadkov (ocena stanja pri onesnaženju s kovinami, principi sanacije, izbira metode sanacije).

5. Temeljni študijski viri:

Literaturo določijo izvajalci glede na izbrane vsebine, za primeren skupni obseg poskrbi nosilec.

- Macromolecules containing metal and metal-like elements, Vol.3, Biomedical applications (Editors: A.S.Abd-El-Aziz et al.), 208 strani, do 30% vsebine.
- Irgolič K.J., Martell A.E., *Environmental Inorganic Chemistry*, VCH, 1985.
- Vernet J.P., *Heavy metals in the environment*, Elsevier Science, 1991.
- A. Sigel, H. Sigel (Eds.), *Metal ions in biological systems*, vol. 1-44, Marcel Dekker, Inc., New York·Basel 2004.
- Day P., *Molecules into materials*, World Scientific, New Jersey, 2007.
- C. E. Housecroft, A. G. Sharpe, *Inorganic Chemistry*, Third Edition, Pearson Education Limited, Harlow, England, 2008 (1098 strani- izbrana poglavja).
- A. Sakakibara, v *Wood and Cellulosic Chemistry* (Ur.: D. N.-S. Hon, S. Nobuo), Marcel Dekker, New York, **1991**, 113–175.
- M. Connell, v *The Chemistry of Wood Preservation* (Ur.: R. Thompson), The Royal Society of Chemistry, Cambridge, **1991**, 16–33
- R.C. Mehrotra, R. Bohra, *Metal Carboxylates*, Academic Press, London, **1983**, 1-396.

Novejši pregledni članki iz revij.

6. Metode poučevanja in učenja:

Predavanja, seminarji z diskusijo. Samostojno iskanje literaturnih virov ter obdelava in interpretacija podatkov, predstavitev seminarskih tem.

7. Preverjanja znanja - obveznosti študenta (npr. ustni in/ali pisni izpit, seminar, projekt):

Priprava in predstavitev seminarske naloge in njen zagovor; ustni izpit

8. Reference izvajalcev predmeta (3-5 referenc, relevantnih za predmet):

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.

TRATAR-PIRC, Elizabeta, ZIDAR, Jernej, BUKOVEC, Peter, HODOŠČEK, Milan. Molecular modeling of cobalt(II) hyaluronate. *Carbohydr. res.* [Print ed.], 2005, vol. 340, no. 12, str. 2064-2069.

ZIDAR, Jernej, TRATAR-PIRC, Elizabeta, HODOŠČEK, Milan, BUKOVEC, Peter. Copper(II) ion binding to cellular prion protein. *J. chem. inf. mod.*, 2008, vol. 48, no. 2, str. 283-287.

ZUPANČIČ, Marija, ZUPANČIČ JUSTIN, Maja, BUKOVEC, Peter, ŠELIH, Vid Simon. Chromium in soil layers and plants on closed landfill site after landfill leachate application, *Waste manag.*, **29**, 1860-1869 (2009),

LONCENAR, Mojca, ZUPANČIČ, Marija, BUKOVEC, Peter, ZUPANČIČ JUSTIN, Maja. Fate of saline ions in a planted landfill site with leachate recirculation. *Waste manag.*, **30**, 110-118 (2010).

ZUPANČIČ, Marija, LAVRIČ, Simona, BUKOVEC, Peter. Metal immobilization and phosphorus leaching after stabilization of pyrite ash contaminated soil by phosphate amendments. *J. environ. monit.*, **14**, 704-710 (2012).

GRABNER, Sabina, MODEC, Barbara, ČEMAŽAR, Maja, BUKOVEC, Nataša. Crystal structures and cytotoxicity of isopropylamine Pt(II) complexes : a trinuclear squarato-bridged $[Pt_3(\mu_2-C_4O_4)_3(H_2NPr^i)] 3H_2O$ and a mononuclear cis- $[Pt(NO_3)_2(H_2NPr^i)_2]$. *J. inorg. biochem.* [Print ed.], 2005, vol. 99, no. 7, str. 1465-1471.

I. Turel, M. Pečanac, A. Golobič, E. Alessio, B. Serli, A. Bergamo, G. Sava, Solution, solid state and biological characterization of ruthenium(III)-DMSO complexes with purine base derivatives, *J. Inorg. Biochem.*, **98**, 393-401 (2004).

A. Bicek, I. Turel, M. Kanduser, and D. Miklavcic, Combined therapy of the antimetastatic compound NAMI-A and electroporation on B16 F1 tumour cells *in vitro*, *Bioelectrochemistry*, **71**, 113-117 (2007).

S. Seršen, J. Kljun, F. Požgan, B. Štefane, I. Turel, Novel organoruthenium(II) β -diketonates as catalysts for ortho-arylation via C-H activation, *Organometallics*, **32**, 609-616 (2013).

J. Kljun, I. Bratsos, E. Alessio, G. Psomas, U. Repnik, M. Butinar, B. Turk, I. Turel, New uses for old drugs: attempts to convert quinolone antibacterials into potential anticancer agents containing ruthenium, *Inorg. Chem.*, **52**, 9039-9052 (2013).

B. Kozlevčar, D. Odlazek, A. Golobič, A. Pevec, P. Strauch, P. Šegedin, *Polyhedron* **25** (2006) 1161-1166.

B. Kozlevčar, I. Leban, I. Turel, P. Šegedin, M. Petrič, F. Pohleven, A. J. P. White, D. J. Williams, J. Sieler, *Polyhedron* **18** (1999) 755-762.

- B. Kozlevčar, B. Mušič, N. Lah, I. Leban, and P. Šegedin, *Acta Chim. Slov.* **52** (2005) 40–43
- B. Kozlevčar, P. Baškovič, A. Arko, A. Golobič, N. Kitanovski, P. Šegedin Z. *Naturforsch. B* **63** (2008) 481–488.
- B. Kozlevčar, A. Golobič, P. Strauch, *Polyhedron* **25** (2006) 2824–2828.
- B. Modec, D. Dolenc, M. Kasunič. Complexation of molybdenum(V) with glycolic acid: an unusual orientation of glycolato ligand in $\{\text{Mo}_2\text{O}_4\}^{2+}$ complexes. *Inorg. Chem.* **2008**, *47*, 3625.
- B. Modec, D. Dolenc, J. V. Brenčič, J. Koller, J. Zubieta. Dinuclear oxomolybdate(V) species with oxalato and pyridine ligands revisited: cis/trans isomerization of $[\text{Mo}_2\text{O}_4(\eta^2\text{-C}_2\text{O}_4)_2(\text{R-Py})_2]^{2-}$ (R-Py = pyridine, alkyl-substituted pyridine) in water evidenced by NMR spectroscopy. *Eur. J. Inorg. Chem.* **2005**, 3224.
- B. Modec, J. V. Brenčič. Anions of 1,3,5-benzenetricarboxylic and heptanedioic acids serving as bridges between dimolybdenum(V) metal–metal bonded units: preparation and structural characterization of dinuclear and tetranuclear complexes. *Eur. J. Inorg. Chem.* **2005**, 4325.
- DEMŠAR, Alojz, KOŠMRLJ, Janez, PETRIČEK, Saša. Variable-temperature nuclear magnetic resonance spectroscopy allows direct observation of carboxylate shift in zinc carboxylate complexes. *J. Am. Chem. Soc.*, 2002, vol. 124, no. 15, str. 3951-3958.
- PEVEC, Andrej, PERDIH, Franc, KOŠMRLJ, Janez, MODEC, Barbara, ROESKY, Herbert W., DEMŠAR, Alojz. Lithium complexes with a $[\text{Cp}^*]_2\text{Ti}(\text{F})_2$ ligand: ^{19}F NMR probe for lithium solvation. *Dalton trans. (2003. Print)*, 2003, no. 3, str. 420-425.
- NIKIFOROV, Grigori B., ROESKY, Herbert W., MAGULL, Jörg, NOLTEMEYER, Mathias, SCHMIDT, Hans-Georg, ILYIN, Evgeny G., KOKUNOV, Yuri B., DEMŠAR, Alojz. Synthesis and structure of the first non-metallocene Ti(III) fluoride complex $\text{LTiF}_2 \cdot 2\text{Me}_3\text{SnCl}$ supported by a β -diketiminato ligand. *European Journal of Inorganic Chemistry*, 2003, no. 3, str. 437-441.
- PERDIH, Franc, PEVEC, Andrej, PETRIČEK, Saša, PETRIČ, Andrej, LAH, Nina, KOGEJ, Ksenija, DEMŠAR, Alojz. The solution structures and dynamics and the solid-state structures of substituted cyclopentadienyltitanium(IV) trifluorides. *Inorg. chem.*, 2006, vol. 45, no. 19, str. 7915-7921.
- KITANOVSKI, Nives, GOLOBIČ, Amalija, ČEH, Boris. Syntheses and crystal structure of first octahedral d-metal complexes containing three and four isocyanato ligands, mer- $[\text{Mo}(\text{NCO})_3\text{py}]_3$ and trans- $(\text{py})_2\text{H}[\text{Mo}(\text{NCO})_4\text{py}]_2$. *Inorg. chem. commun.* [Print ed.], 2005, vol. 8, no. 4, str. 397-400.
- KITANOVSKI, Nives, GOLOBIČ, Amalija, ČEH, Boris. Syntheses and structural characterization of two novel oxygen bridged dinuclear Mo-complexes containing bdmpza as ligand, trans- $[\text{Mo}_2\text{O}_5(\text{bdmpza})_2]$ and trans- $[\text{Mo}_2\text{O}_3(\text{NCS})_2(\text{bdmpza})_2] \cdot 4\text{CH}_3\text{CN}$. *Inorg. chem. commun.* [Print ed.], 2006, vol. 9, str. 296-299 (article in press).
- KITANOVSKI, Nives, GOLOBIČ, Amalija, ČEH, Boris. Preparation and crystal structures of trans- $\text{K}[\text{Cr}(\text{NCS})_4\text{py}]_2$ and mer- $[\text{Cr}(\text{NCS})_3(\text{pic})]_3$. *Croat. chem. acta*, 2007, vol. 80, no. 1, str. 127-134.

1.

Ime predmeta: SODOBNE METODE SINTEZE V ANORGANSKI KEMIJI				
Nosilec: prof. dr. Alojz Demšar				
Izvajalci: prof. dr. Alojz Demšar prof.dr. Peter Bukovec doc. dr. Saša Petriček doc. dr. Andrej Pevec doc. dr. Romana Cerc-Korošec doc. dr. Franc Perdih				
Št. ur: 150	Predavanj: 30	Seminarjev: 45	Lab. vaj:	Drugo: 75
Število KT: 5				
2. Pogoji za vključitev: Znanje splošne in anorganske kemije na ravni drugostopenjskih kemijskih programov.				
3. Izobraževalni cilji in predvideni študijski rezultati (predmetno – specifične kompetence): Študenti spoznajo zahtevne sintezne poti, reagente in tehnike za pripravo anorganskih, koordinacijskih, organokovinskih in kovinsko-organskih spojin ter za pripravo posebnih oblik teh snovi, kot so nanodelci, tanki filmi, snovi z visoko poroznostjo. Poudarek je na perspektivnih metodah, ki se naglo razvijajo.				
4. Vsebina predmeta: Študent s soglasjem mentorja izbere tiste metode, ki so najtesneje povezane z njegovim raziskovalnim delom. Nosilec predmeta in vodja študija poskrbita, da obseg študentovega dela ustreza 5 KT. Če je nosilec več, izvajanje koordinira nosilec. Reakcije sintez: pregled najpomembnejših reakcij in njihovih mehanizmov ter reagentov za pripravo anorganskih, koordinacijskih, organokovinskih in kovinsko-organskih spojin. Podrobnejša predstavitev nekaterih raziskovalnih dosežkov zadnjih let, ki so odprli nove možnosti na navedenemu področju. Pregled zahtevnejših sinteznih tehnik: sinteze v kontrolirani atmosferi, solvotermalna sinteza, sol-gel sinteza, sonokemične sinteze, termični razpad prekursorjev anorganskih spojin.				
5. Temeljni študijski viri: F. Albert Cotton, Geoffrey Wilkinson, Carlos A.Murillo, Manfred Bochmann, Advanced Inorganic Chemistry, 6.th Edition, Wiley, 1999, 10% od 1356 strani. J. Derek Woollins (urednik), Inorganic Experiments, 2 nd Edition, Wiley, 2003, 25 % od 377 strani. Novejši pregledni članki iz znanstvenih revij.				
6. Metode poučevanja in učenja: Predavanja, seminarji z diskusijo o predstavljeni temi.				
7. Preverjanja znanja - obveznosti študenta (npr. ustni in/ali pisni izpit, seminar, projekt):				

Priprava in predstavitev seminarske naloge ter njen zagovor; ustni izpit

8. Reference izvajalcev predmeta (3-5 referenc, relevantnih za predmet):

- 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.
- TRATAR-PIRC, Elizabeta, ZIDAR, Jernej, BUKOVEC, Peter, HODOŠČEK, Milan. Molecular modeling of cobalt(II) hyaluronate. *Carbohydr. res.* [Print ed.], 2005, vol. 340, no. 12, str. 2064-2069.
- ZIDAR, Jernej, TRATAR-PIRC, Elizabeta, HODOŠČEK, Milan, BUKOVEC, Peter. Copper(II) ion binding to cellular prion protein. *J. chem. inf. mod.*, 2008, vol. 48, no. 2, str. 283-287.
- ZUPANČIČ, M., BUKOVEC, P., MILAČIČ, R., ŠČANČAR, J. Critical evaluation of the use of the hydroxyapatite as a stabilizing agent to reduce the mobility of Zn and Ni in sewage sludge amended soils. *Waste manag.* 2006, vol. 26, str. 1392-1399.
- B. Kozlevčar, D. Odlazek, A. Golobič, A. Pevec, P. Strauch, P. Šegedin, *Polyhedron* **25** (2006) 1161-1166.
- DEMŠAR, Alojz, KOŠMRLJ, Janez, PETRIČEK, Saša. Variable-temperature nuclear magnetic resonance spectroscopy allows direct observation of carboxylate shift in zinc carboxylate complexes. *J. Am. Chem. Soc.*, 2002, vol. 124, no. 15, str. 3951-3958.
- PEVEC, Andrej, PERDIH, Franc, KOŠMRLJ, Janez, MODEC, Barbara, ROESKY, Herbert W., DEMŠAR, Alojz. Lithium complexes with a [Cp^{sup}]₂Ti₂F₇^{sup}- ligand: ^{sup}(19)F NMR probe for lithium solvation. *Dalton trans. (2003. Print)*, 2003, no. 3, str. 420-425.
- PERDIH, Franc, PEVEC, Andrej, PETRIČEK, Saša, PETRIČ, Andrej, LAH, Nina, KOGELJ, Ksenija, DEMŠAR, Alojz. The solution structures and dynamics and the solid-state structures of substituted cyclopentadienyltitanium(IV) trifluorides. *Inorg. chem.*, 2006, vol. 45, no. 19, str. 7915-7921.
- 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.
- FISCHBACH, Andreas, PERDIH, Franc, HERDTWECK, Eberhardt, ANWANDER, Reiner. Structure-reactivity relationships in rare-earth metal carboxylate-based binary Ziegler-type catalysts. *Organometallics*, 2006, vol. 25, no. 7, str. 1626-1642.
- CERC KOROŠEC, Romana, ŠAUTA, Jerneja, DRAŠKOVIČ, Petra, DRAŽIČ, Goran, BUKOVEC, Peter. Electrochromic nickel oxide/hydroxide thin films prepared by alternately dipping deposition. /Thin solid films/. [Print ed.], 2008, vol. 516, no. 23, str. 8264-8271.
- CERC KOROŠEC, Romana, BUKOVEC, Peter. Sol-gel prepared NiO thin films for electrochromic applications. /Acta chim. slov./. [Tiskana izd.], 2006, vol. 53, no. 2, str. 136-147.
- 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.

1.

Ime predmeta: SODOBNE DIFRAKCIJSKE TEHNIKE				
Nosilec: prof. dr. Anton Meden				
Izvajalci: prof. dr. Anton Meden doc. dr. Amalija Golobič doc. dr. Nina Lah				
Št. ur: 150	Predavanj: 30	Seminarjev: 45	Lab. vaj:	Drugo: 75
Število KT: 5				
2. Pogoji za vključitev: Poznavanje osnov difrakcije na monokristalih in prahovih.				
3. Izobraževalni cilji in predvideni študijski rezultati (predmetno – specifične kompetence): Študenti spoznajo teoretične osnove in se naučijo praktično uporabljati nove zahtevne tehnike difrakcijske analize za različne vidike karakterizacije trdnih snovi.				
4. Vsebina predmeta: Študent s soglasjem mentorja med spodaj navedenimi tehnikami v izbere tiste, ki so najtesneje povezane z njegovim raziskovalnim delom. Nosilec predmeta in vodja študija poskrbita, da obseg študentovega dela ustreza 5 KT. Če je izvajalcev več, izvajanje koordinira nosilec. Kratka osvežitev znanja o difrakciji rentgenskih žarkov, nevtronov in elektronov na trdnih snoveh. Uporaba zahtevnejših tehnik na monokristalih (elektronska gostota, anomalna disperzija, absolutna konfiguracija, uporaba več valovnih dolžin v okolici absorpcijskega roba, strukturna analiza dvojčenih kristalov). Uporaba zahtevnejših tehnik na polikristaliničnih in amorfni materialih (določevanje strukture, Rietveldova metoda za strukturno, mikrostrukturno in kvantitativno fazno analizo, kombinacija nevtronske in rentgenske difrakcije, totalno sipanje in porazdelitvena funkcija parov (lokalna urejenost kristaliničnih in amorfni snovi), difrakcija na nano-materialih).				
5. Temeljni študijski viri: Giacovazzo, Carmelo, Fundamentals of Crystallography, International Union of Crystallography, Oxford: Oxford University Press, 2000, cop. 1992. Clegg, William, Crystal Structure Analysis: principles and practice, International Union of Crystallography, Oxford, New York : Oxford University Press, 2001. Christopher Hammond, The Basics of Crystallography and Diffraction International Union of Crystallography, Oxford University Press, 2001. Pecharsky, Vitalij K. Zavalij, Peter Y., Fundamentals of powder diffraction and structural characterization of materials, New York: Springer, 2005 Young, Robert Alan, The rietveld method, Oxford International Union of Crystallography: Oxford University Press, 1995. Novejši metodološki članki iz revij.				

6. Metode poučevanja in učenja:

Predavanja, seminar z diskusijo o predstavljeni temi, praktično delo, po možnosti na lastnih vzorcih iz raziskovalnega dela študenta.

7. Preverjanja znanja - obveznosti študenta (npr. ustni in/ali pisni izpit, seminar, projekt):

Priprava, predstavitev in zagovor seminarske naloge, ustni izpit.

8. Reference izvajalcev predmeta (3-5 referenc, relevantnih za predmet):

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

VRBANIČ, Daniel, REMŠKAR, Maja, JESIH, Adolf, MRZEL, Aleš, UMEK, Polona, PONIČVAR, Maja, JANČAR, Boštjan, MEDEN, Anton, NOVOSEL, Barbara, PEJOVNIK, Stane, VENTURINI, Peter, COLEMAN, Jonathan N., MIHAILOVIĆ, Dragan. Air-stable monodispersed Mo₆S₃I₆ nanowires. *Nanotechnology (Bristol)*, 2004, vol. 15, str. 635-638.

MEDEN, Anton, KODRE, Alojz, PADEŽNIK GOMIŠČEK, Jana, ARČON, Iztok, VILFAN, Igor, VRBANIČ, Daniel, MRZEL, Aleš, MIHAILOVIĆ, Dragan. Atomic and electronic structure of Mo₆S_(9-x)I_x nanowires. *Nanotechnology (Bristol)*, 2005, 16, str. 1578-1583.

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.

KOZLEVČAR, Bojan, GOLOBIČ, Amalija, STRAUCH, Peter. Dynamic pseudo Jahn-Teller distortion in a compressed octahedral CuO₆ complex. *Polyhedron*. [Print ed.], 2006, vol. 25, no. 15, str. 2824-2828.

PIRC, Samo, BEVK, David, GOLOBIČ, Amalija, STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. Transformation of amino acids into nonracemic 1-(heteroaryl)ethanamines by the enamino ketone methodology. *Helv. Chim. Acta*, 2006, vol. 89, no. 1, str. 30-44.

LAH, Nina, LEBAN, Ivan, CLÉRAC, Rodolphe. The assembly of dinuclear alkoxido-bridged Cu^(II) halide complexes of pyridine alcohols to form tetranuclear and polynuclear compounds : synthesis, structure, and magnetic properties. *European Journal of Inorganic Chemistry*, 2006, no. 23, str. 4888-4894.

LEBAN, Ivan, RUDAN TASIČ, Darja, LAH, Nina, KLOFUTAR, Cveto. Structures of artificial sweeteners : cyclamic acid and sodium cyclamate with other cyclamates. *Acta crystallogr., B Struct. sci.*, 2007, vol. B63, no. 3, str. 418-425.

LAH, Nina, LEBAN, Ivan. Polymeric monovalent and divalent copper sulphates with 4,4'-bipyridine: [Cu₂(SO₄)(4,4'-bipy)₂·6H₂O]_n and [Cu(SO₄)(4,4'-bipy)(H₂O)·0.5H₂O]_n. *Inorg. chem. commun.* [Print ed.], 2006, vol. 9, no. 1, str. 42-45.

1.

Ime predmeta: NOVA PODROČJA V ANALIZNI KEMIJI				
Nosilec: izr. prof. dr. Helena Prosen				
Izvajalci: prof. dr. Boris Pihlar prof. dr. Marjan Veber izr. prof. dr. Matevž Pompe izr. prof. dr. Nataša Gros izr. prof. dr. Helena Prosen doc. dr. Drago Kočar doc. dr. Irena Kralj Cigić doc. dr. Polonca Kralj				
Št. ur: 150	Predavanj: 30	Seminarjev: 45	Lab. vaj: -	Drugo: 75
Število KT: 5				
2. Pogoji za vključitev: Uspešno zaključena 2. stopnja bolonjskega študija kemije.				
3. Izobraževalni cilji in predvideni študijski rezultati (predmetno – specifične kompetence): Študenti nadgradijo znanja s področja instrumentalne analize, spoznajo trende razvoja in novejšie tehnike (tako teorijo kot možne praktične aplikacije), ki so jih pridobili na magistrskem študiju. Kompetence s področja sodobne instrumentalne analitike razvijejo do ravni, ki jo terja raziskovalno delo in reševanje kompleksnih strokovnih problemov v praksi.				
4. Vsebina predmeta: Študent s soglasjem mentorja med spodaj navedenimi temami v izbere tiste, ki so najtesneje povezane z njegovim raziskovalnim delom. Nosilec predmeta in vodja študija poskrbita, da obseg študentovega dela ustreza 5 KT. Če je nosilec več, izvajanje koordinira nosilec. <ul style="list-style-type: none"> • Metodologija in aplikacije novejših spektroskopskih metod v analizni kemiji. Problematika uvajanja plinastih, tekočih in trdih vorcev v atomski spektrometriji. Pomen laserske ablacije v elementni masni spektrometriji. Uporaba atomske spektrometrije (ICP-OES, ICP-MS) za karakterizacijo materialov, okoljskih in bioloških vzorcev. • Masna spektrometrija v analizni kemiji; instrumentacija, tehnike ionizacije in interpretacija masnih spektrov. Nove tehnike v masni spektrometriji (MALDI, proton transfer mass spectrometry, desorption electrospray ionization - DESI). • Teorija separacij in principov ločevanja v analizni kemiji, sklopitve GC-MS, HPLC-MS in HPLC-ICP-MS. Teoretski in praktični vidiki več dimenzionalnih kromatografskih tehnik. • Elektroanalizne tehnike (voltometrija in stripping tehnike) in aplikacija v analitiki anorganskih in organskih komponent, v analitiki sledov, študiju interakcij kovina-ligand, bioloških sistemih ter karakterizaciji in analizi materialov in okoljski kemiji. 				

- Elektrokemijski senzorji, aplikacija pri študiju ravnotežij, mikroelektrode, kemijsko modificirane elektrode, pretočne mikroelektrode, ultramikroelektrode. Sestavljene tehnike: spektroelektrokemija (EC-UV-Vis, EC-IR, EC-MS, SEM, EC-STM, EC-AFM).

5. Temeljni študijski viri:

Izbrani pregledni članki iz znanstvene literature.

6. Metode poučevanja in učenja:

Tematska uvodna predavanja nadgrajena s primeri iz znanstvene literature, individualno delo s konzultacijami, seminarsko delo.

7. Preverjanja znanja - obveznosti študenta (npr. ustni in/ali pisni izpit, seminar, projekt):

Pisni pregledni test, priprava pisne seminarske naloge in njen zagovor.

8. Reference izvajalcev predmeta (3-5 referenc, relevantnih za predmet):

B. Pihlar

KOSEC, Tadeja, MILOŠEV, Ingrid, PIHLAR, Boris: Benzotriazole as an inhibitor of brass corrosion in chloride solution, *Appl. Surf. Sci.*, 2007, 253, 8863-8873.

DRGAN, Viktor, NOVIČ, Marjana, PIHLAR, Boris, NOVIČ, Milko: Hard modeling of ion chromatography separations on hydroxide-selective stationary phase, *J. Chromatogr. A*, 2008, 1185, 109-116.

SOPHA, Hanna Ingrid, HOČEVAR, Samo B., PIHLAR, Boris, OGOREVC, Božidar. Bismuth film electrode for stripping voltammetric measurement of sildenafil citrate. *Electrochimica Acta*, 2012, 60, 274-277.

M. Veber

ŠEBEZ, Bine, OGOREVC, Božidar, HOČEVAR, Samo B., VEBER, Marjan.

Functioning of antimony film electrode in acid media under cyclic and anodic stripping voltammetry conditions. *Analytica chimica acta*, 2013, 785, 43-49.

LI, Jinfeng, ZHANG, Yuanhang, VEBER, Marjan, WINE, Paul H., KLASINC, Leo. Bibliometric analysis of research on secondary organic aerosols : a Science Citation Index Expanded-based analysis (IUPAC Technical Report)*. *Pure and applied chemistry*, 2013, 58, 1241-1255.

KITANOVSKI, Zoran, GRGIĆ, Irena, VEBER, Marjan. Characterization of carboxylic acids in atmospheric aerosols using hydrophilic interaction liquid chromatography tandem mass spectrometry. *Journal of chromatography. A*, 2011, 1218, 4417-4425.

N. Gros

GROS, Nataša. Evacuated blood-collection tubes for haematological tests : a quality evaluation prior to their intended use for specimen collection. *Clinical chemistry and laboratory medicine*, 2013, 51, 1043-1051.

GROS, Nataša. Microdiffusion-based UV-LED spectrometric setup for determining low levels of ethanol in fruit juice. *Talanta*, 2011, 87, 174-179.

GROS, Nataša, CAMÕES, Maria Filomena, OLIVEIRA, Cristina, SILVA, M. C. R. Ionic composition of seawaters and derived saline solutions determined by ion chromatography and its relation to other water quality parameters. *J. chromatogr.*, 2008, 1210, 92-98.

H. Prosen

ĆIRIĆ, Andrija, PROSEN, Helena, JELIKIĆ STANKOV, Milena, ĐURĐEVIĆ, Predrag. Evaluation of matrix effect on determination of some bioflavonoids in food samples by

LC-MS/MS method. *Talanta*, 2012, 99, 780-790.

PROSEN, Helena, KOKALJ, Meta, JANEŠ, Damjan, KREFT, Samo. Comparison of isolation methods for the determination of buckwheat volatile compounds. *Food chemistry*, 2010, 121, 298-306.

PROSEN, Helena, FINGLER, Sanja, ZUPANČIČ-KRALJ, Lucija, DREVENKAR, Vlasta. Partitioning of selected environmental pollutants into organic matter as determined by solid-phase microextraction. *Chemosphere (Oxford)* 2007, 66, 1580-1589.

I. Kralj Cigić

MOŽIR, Alenka, GONZALEZ, Lee, KRALJ CIGIĆ, Irena, WESS, Tim J., RABIN, Ira, HAHN, Oliver, STRLIČ, Matija. A study of degradation of historic parchment using small-angle x-ray scattering, synchrotron-IR and multivariate data analysis. *Analytical and bioanalytical chemistry*, 2012, 402, 1559-1566.

RASMUSSEN, K. L., GUNNEWEG, Jan, PLICHT, van der J., KRALJ CIGIĆ, Irena, BOND, A. D., SVENSMARK, B., BALLA, Margit, STRLIČ, Matija, DOUDNA, Gregory L. On the age and content of Jar-35 : a sealed and intact storage jar found on the southern plateau of Qumran. *Archaeometry*, 2011, 53, 791-808.

FENECH, Ann, STRLIČ, Matija, KRALJ CIGIĆ, Irena, LEVART, Alenka, GIBSON, Lorraine, BRUIN, G. de, NTANOS, Kostas, KOLAR, Jana, CASSAR, May. Volatile aldehydes in libraries and archives. *Atmospheric environment*, 2010, 44, 2067-2073.

M. Pompe

ŠČAVNIČAR, Andrej, BALABAN, Alexandru T., POMPE, Matevž. Application of variable anti-connectivity index to active sites. Modelling pK_a values of aliphatic monocarboxylic acids. *SAR and QSAR in environmental research*, 2013, 24, 553-563.

ARH, Gregor, KLASINC, Leo, VEBER, Marjan, POMPE, Matevž. Calibration of mass selective detector in non-target analysis of volatile organic compounds in the air. *Journal of chromatography. A*, 2011, 1218, 1538-1543.

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, p. 399-409.

D. Kočar

KORAL, Serkan, TUFAN, Bekir, ŠČAVNIČAR, Andrej, KOČAR, Drago, POMPE, Matevž, KÖSE, Sevim. Investigation of the contents of biogenic amines and some food safety parameters of various commercially salted fish products. *Food control*, 2013, 32, 597-606.

BAŠKOVČ, Jernej, DAHMANN, Georg, GOLOBIČ, Amalija, GROŠELJ, Uroš, KOČAR, Drago, STANOVNIK, Branko, SVETE, Jurij. Diversity-oriented synthesis of 1-substituted 4-aryl-6-oxo-1,6-dihydropyridine-3-carboxamides. *ACS combinatorial science*, 2012, 14, 513-519.

MALEŠIČ, Jasna, KOČAR, Drago, BALAŽIČ, Aneta. Stabilization of copper- and iron-containing papers in mildly alkaline environment. *Polymer degradation and stability*, 2012, 97, 118-123.

P. Kralj

CAMILLERI, J., KRALJ, Polonca, VEBER, Marjan, SINAGRA, E. Characterization and analyses of acid-extractable and leached trace elements in dental cements. *International endodontic journal*, 2012, 45, 737-743.

LESAR, Boštjan, KRALJ, Polonca, HUMAR, Miha. Montan wax improves performance

of boron-based wood preservatives. *International biodeterioration & biodegradation*, 2009, 63, 306-310.

KRALJ, Polonca, VEBER, Marjan. SEC/ICP-MS studies of heavy metal complexes with humic substances in compost extract. *Chemia Analityczna*, 2007, 52, 67-81

1.

Ime predmeta: PRISTOPI V SODOBNI ANALIZNI KEMIJI				
Nosilec: prof. dr. Marjan Veber				
Izvajalci: prof. dr. Boris Pihlar prof. dr. Marjan Veber prof. dr. Lucija Zupančič-Kralj doc. dr. Matevž Pompe doc. dr. Nataša Gros doc. dr. Helena Prosen prof. dr. Matija Strlič				
Št. ur: 150	Predavanj: 30	Seminarjev: 45	Lab. vaj: -	Drugo: 75
Število KT: 5				
2. Pogoji za vključitev: Uspešno zaključena 2. stopnja bolonjskega študija kemije.				
3. Izobraževalni cilji in predvideni študijski rezultati (predmetno – specifične kompetence): Študenti nadgradijo znanja s področju analizne kemije, ki so jih pridobili na magistrskem študiju. Kompetence s področja poznavanja novih analiznih tehnik in analiznih pristopov razvijejo do ravni, ki jo terja raziskovalno delo in reševanje kompleksnih strokovnih problemov v praksi. Študentje spoznajo možnosti uporabe numeričnih metod v analizni kemiji.				
4. Vsebina predmeta: Študent s soglasjem mentorja med spodaj navedenimi temami v izbere tiste, ki so najtesneje povezane z njegovim raziskovalnim delom. Nosilec predmeta in vodja študija poskrbita, da obseg študentovega dela ustreza 5 KT. Če je nosilec več, izvajanje koordinira nosilec. <ul style="list-style-type: none">• Numerične metode v analizni kemiji.• Speciacijska analitika; načini priprave vzorca in izbira primerne analize tehnike.• Miniaturizacija v analizni kemiji: koncept laboratorija na čipu, celoviti mikroanalizni sistemi (□TAS), izdelovalne tehnike za □TAS in integracijo detekcije v mikropretočne sisteme, makro – mikro vmesniki za mikropretočne sisteme.• Uporaba sodobnih analiznih tehnik za ugotavljanje pretvorbe in vezave antropogenih onesnaževal.• Analizni problemi v atmosferski kemiji; karakterizacija aerosolov in modeliranje.• Reševanje analiznih problemov v kontroli prehrabnih produktov; separacija in karakterizacija sestavin živil.• Reševanje analiznih problemov v biomedicinskih in bioloških vedah, zaščiti okolja, varovanju kulturne dediščine in industriji.				
5. Temeljni študijski viri: Izbrani pregledni članki iz znanstvene literature.				
6. Metode poučevanja in učenja:				

Tematska uvodna predavanja nadgrajena s primeri iz znanstvene literature, individualno delo s konzultacijami, seminarsko delo.

7. Preverjanja znanja - obveznosti študenta (npr. ustni in/ali pisni izpit, seminar, projekt):

Pisni pregledni test, priprava pisne seminarske naloge in njen zagovor.

8. Reference izvajalcev predmeta (3-5 referenc, relevantnih za predmet):

B. Pihlar:

T. Kosec, I. Milošev, B. Pihlar: Benzotriazole as an inhibitor of brass corrosion in chloride solution, *Appl. Surf. Sci.*, 253(2007)8863-8873.

V. Drgan, Ma. Novič, B. Pihlar, Mi. Novič: Hard modeling of ion chromatography separations on hydroxide-selective stationary phase, *J. Chromatogr. A*, 1185(2008)109-116.

T. Zupančič, B. Pihlar: Optimisation of a dialytic set-up for liquid chromatography: automated separation and preconcentration of ciprofloxacin, *J. Chromatogr. A*, 975(2002)199-209.

M. Strlič:

J. Kolar, M. Strlič, B. Pihlar: New colourimetric method for determination of hydroxyl radicals during ageing of cellulose, *Anal. Chim. Acta*, 431(2001)313-319.

T. Trafela, M. Strlič, J. Kolar, D.A. Lichtblau, M. Anders, D. Pucko Mencigar, B. Pihlar: Nondestructive analysis and dating of historical paper based on IR spectroscopy and chemometric data evaluation, *Anal. Chem.*, 79(2007)6319-6323.

M. Strlič, I. Kralj Cigić, J. Kolar, G. de Bruin, B. Pihlar: Non-Destructive Evaluation of Historical Paper Based on pH Estimation from VOC Emissions, *Sensors*, 7(2007) 3136-3145.

M. Veber:

KOVAČEVIČ, Miroslav, GOESSLER, Walter, MIKAC, Nevenka, VEBER, Marjan. Matrix effects during phosphorus determination with quadrupole inductively coupled plasma mass spectrometry. *Anal. bioanal. chem.*, 2005, vol. 383, no. 1, 145-151.

B. Koklič, M. Veber, J. Zupan, Optimization of Lamp Control parameters in Glow Discharge Optical Emission Spectrometry for the Analysis of Copper-titanium-zinc alloy using Simplex Method, *J. Anal. At. Abs. Spectrometry* 18, 1-5, (2003).

P. Razpotnik, B. Budič, M. Veber, Effects of Matrix Elements on the Analyte Emission Signals in Inductively Coupled Plasma Optical Emission Spectrometry using a Thermospray Sample Introduction System. *Appl. spectrosc.*, 2002, vol. 56, no. 8, pages 1000-1005.

N. Gros:

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,

GROS, Nataša. A new type of a spectrometric microtitration set up. *Talanta (Oxford)*. [Print ed.], 2005, vol. 65, no. 4, str. 907-912,

GROS, Nataša, CAMÕES, Maria Filomena, OLIVEIRA, Cristina, SILVA, M. C. R.

Ionic composition of seawaters and derived saline solutions determined by ion chromatography and its relation to other water quality parameters. *J. chromatogr.*, 2008, vol. 1210, no. 1, str. 92-98.

H. Prosen:

H. Prosen, D. Kočar. Different sample preparation methods combined with LC-MS/MS

and LC-UV for determination of some furocoumarin compounds in the products containing citrus. Flavour fragr. j. 2008, 23, 263-271.

D. Janeš, D. Kantar, S. Kreft, H. Prosen. Identification of buckwheat (*Fagopyrum esculentum* Moench) aroma compounds with GC-MS. Food chem. 2009, 112, 120-124.

H. Prosen, S. Fingler, L. Zupančič-Kralj, V. Drevenkar. Partitioning of selected environmental pollutants into organic matter as determined by solid-phase microextraction. Chemosphere (Oxford) 2007, 66, 1580-1589.

L. Zupančič-Kralj:

1. ŠTAJNBAHER, Darinka, ZUPANČIČ-KRALJ, Lucija. Multiresidue method for determination of 90 pesticides in fresh fruits and vegetables using solid-phase extraction and gas chromatography-mass spectrometry. J. chromatogr., 2003, 1015, 1/2, 185-198

2. KOCIJAN, Andrej, GRAHEK, Rok, BASTARDA, Andrej, ZUPANČIČ-KRALJ, Lucija. Fast analysis of pravastatin in production media. Journal of chromatography. B, Analytical technologies in the biomedical and life sciences, 2005, 822, 311-315

3. PROSEN, Helena, FINGLER, Sanja, ZUPANČIČ-KRALJ, Lucija, DREVENKAR, Vlasta. Partitioning of selected environmental pollutants into organic matter as determined by solid-phase microextraction. Chemosphere (Oxford). 2007, . 66, 8, 1580-1589

M. Pompe:

DAVIS, Joe, POMPE, Matevž, SAMUEL, Clint. Justification of statistical overlap theory in programmed temperature gas chromatography: thermodynamic origin of random distribution of retention times. Anal. chem. (Wash.). [Print ed.], 2000, vol. 72, no. 22, 5700-5713,

POMPE, Matevž, VEBER, Marjan. Prediction of rate constants for the reaction of O₃ with different organic compounds. Atmos. environ. (1994). [Print ed.], 2001, vol. 35, str. 3781-3788,

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.

1.

Ime predmeta: IZBRANA POGLAVJA IZ EKSPERIMENTALNE FIZIKALNE KEMIJE				
Nosilec: prof. dr. Marija Bešter-Rogač				
Izvajalci: prof. dr. Marija Bešter-Rogač prof. Ksenija Kogej izr. prof. Jurij Lah doc. dr. Janez Cerar prof. dr. Ciril Pohar doc. dr. Matija Tomšič				
Št. ur: 150	Predavanj:	Seminarjev:	Lab. vaj:	Drugo:
Opomba: Ure se glede na potrebe vsakega študenta smiselno porazdelijo na predavanja, seminarske naloge, laboratorijske vaje in/ali individualno podajanje snovi. To se stori v dogovoru med študentom, nosilcem ter izvajalcem/izvajalci (če jih je več).				
Število KT: 5				
2. Pogoji za vključitev: Predmet zahteva predznanje splošne in fizikalne kemije. Glede na izbrano študijsko snov v okviru tega predmeta se od študenta pričakuje tudi osnovno znanje s področja elektrolitov in polielektrolitov, površinske in koloidne kemije, eksperimentalnih sipalnih tehnik (SAXS in DLS) oziroma biofizikalne kemije.				
3. Izobraževalni cilji in predvideni študijski rezultati (predmetno – specifične kompetence): V okviru tega predmeta študent pridobi specialistična znanja z ožjega področja. Ta znanja zadostujejo za samostojno vodenje znanstvene raziskave na izbranem raziskovalnem področju.				
4. Vsebina predmeta: Študent skupaj z mentorjem izbere vsebine v obsegu 5 KT izmed spodaj navedenih, nosilec predmeta skladno z izbranimi vsebinami kooordinira izvajanje, če je izvajalcev več. <ul style="list-style-type: none"> • Raztopine biološko pomembnih makromolekul Termodinamika in kinetika vodnih raztopin biopolimerov. Modelska analiza termodinamskih in kinetičnih količin merjenih s spektroskopskimi in kalorimetričnimi metodami v povezavi s strukturo in delovanjem bioloških makromolekul. <ul style="list-style-type: none"> • Strukturne raziskave nano-sistemov z metodo ozkokotnega rentgenskega sipanja Splošna teorija rentgenskega sipanja. Modelni izračuni: sferični, paličasti in ploščati delci. Eksperimentalni sistem. Analiza eksperimentalnih podatkov. Primeri uporabe. <ul style="list-style-type: none"> • Raziskava ergodijskih in neergodijskih sistemov z metodo SLS in različnimi inačicami metode DLS Splošna teorija sipanja laserske svetlobe. Specifične lastnosti eksperimentalnih sistemov običajne, 3D, 'echo' in 'multi-speckle' inačice DLS. Analiza eksperimentalnih podatkov. Primeri uporabe. <ul style="list-style-type: none"> • Termodinamske raziskave asociacijskih procesov v raztopinah 				

Asociacija ionov v raztopinah elektrolitov. Termodinamika micelizacije ionskih in neionskih površinsko aktivnih snovi (izotermna titracijska kalorimetija, izotermna titracijska konduktometrija, Philipsov kriterij, psevdofazni separacijski model, ravnotežni model, določanje stopnje ionizacije micel).

- Kompleksni koloidni sistemi

Asociirajoči sistemi: surfaktanti, polimeri in polielektroliti ter mešani sistemi. Medmolekulska asociacija in geliranje. Fazno obnašanje in strukture. Eksperimentalne tehnike za študij asociacije.

- Vodne raztopine polielektrolitov

Sintezni principi in analiza vzorcev polielektrolitov. Osnovna karakterizacija polielektrolitov: določanje topnostnih krivulj, ionizacijske konstante, titracijske krivulje. Modelska analiza izmerjenih termodinamskih in transportnih lastnosti polielektrolitov v povezavi s strukturo polielektrolita.

5. Temeljni študijski viri:

Aktualna klasična in najnovejša literatura (monografije, članki) z izbranega študijskega področja.

6. Metode poučevanja in učenja:

Metode so prilagojene študentu oziroma skupini: predavanja, študij ustrezne strokovne literature, laboratorijsko delo na izbranem področju in razprave v ožji skupini.

7. Preverjanja znanja - obveznosti študenta (npr. ustni in/ali pisni izpit, seminar, projekt):

Način preverjanja znanja se dogovori individualno z vsakim študentom doktorskega študija in se lahko izvaja v obliki ustnega in/ali pisnega izpita, seminarja ali izdelave projekta oziroma pisanja znanstvenega članka.

8. Reference izvajalcev predmeta (3-5 referenc, relevantnih za predmet):

M. Bešter-Rogač:

1. A. Apelblat, M. Bešter-Rogač, J. Barthel, R. Neueder: "An analysis of electrical conductances of aqueous solutions of polybasic organic acids. Benzenhexacarboxylic (mellitic) acid and its neutral and acidic salts" *J. Phys. Chem. B* **2006**, 110, 8893-8906.
2. M. Bešter-Rogač, A. Stoppa, J. Hunger, G. Heftner, R. Buchner: "Association of ionic liquids in solution : a combined dielectric and conductivity study of [bmim][Cl] in water and in acetonitrile" *Phys. Chem. Chem. phys.* **2011**, 13, 17588-17598.
3. A. Kroflič, A. Apelblat, M. Bešter-Rogač: "Dissociation constants of parabens and limiting conductances of their ions in water" *J. Phys. Chem. B* **2012**, 116, 1385-1392.
4. A. Kroflič, B. Šarac, M. Bešter-Rogač: "Thermodynamic characterization of CHAPS micellization using isothermal titration calorimetry: temperature, salt, and pH dependence" *Langmuir* **2012**, 28, 10363-10371.
5. B. Šarac, J. Cerkovnik, B. Ancian, G. Roger, G. Meriguet, G. Roger, S. Durand-vidal. M. Bešter-Rogač: "Thermodynamic and NMR study of aggregation of dodecyltrimethylammonium chloride in aqueous sodium salicylate solution" *Colloid Polym. Sci.* **2011**, 289, 1597-1607.

J. Lah:

1. I. Prislán, J. Lah, G. Vesnaver: "Diverse polymorphism of G-quadruplexes as a kinetic phenomenon." *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, 130, 14161-14169.
2. J. Lah, I. Drobnak, M. Dolinar, G. Vesnaver: "What drives the binding of minor groove-directed ligands to DNA hairpins?" *Nucleic Acids Res.* **2008**, 36, 897-904.

3. L. Buts, J. Lah, M.-H. Dao-Thi, L. Wyns, R. Loris: "Toxin-antitoxin modules as bacterial metabolic stress managers" *Trends Biochem. Sci.*, **2005**, *30*, 672-679.
4. J. Lah, I. Prislán, B. Kržan, M. Salobir, A. Francky, G. Vesnaver: "Erythropoietin unfolding: thermodynamics and its correlation with structural features" *Biochemistry* **2005**, *44*, 13883-13892.
5. J. Lah, G. Vesnaver: "Energetic diversity of DNA minor-groove recognition by small molecules displayed through some model ligand-DNA systems" *J. Mol. Biol.*, **2004**, *342*, 73-89.

K. Kogej:

1. K. Kogej, J. Škerjanc: "Surfactant Binding to Polyelectrolytes", in *Physical Chemistry of Polyelectrolytes*, Ed.: Radeva, Ts., Marcell Decker, **2001**, Chapter 27, pp 793-827.
2. K. Kogej: "Study of the Effect of Polyion Charge Density on Structural Properties of Complexes between Poly(acrylic acid) and Alkylpyridinium Surfactants" *J. Phys. Chem. B* **2003**, *107*, 8003-8010.
3. K. Kogej, H. Berghmans, H. Reynaers, S. Paoletti: "Unusual Behavior of Atactic Poly(methacrylic acid) in Aqueous Solutions Monitored by Wide-Angle Light Scattering" *J. Phys. Chem. B* **2004**, *108*, 18164-18173.
4. B. Jerman, M. Breznik, K. Kogej, S. Paoletti: "Osmotic and Volume Properties of Stereoregular Poly(methacrylic acids) in Aqueous Solution: Role of Intermolecular Association" *J. Phys. Chem. B* **2007**, *111*, 8435-8443.

J. Cerar:

1. J. Cerar, M. Pompe, M. Guček, J. Cerkovnik, J. Škerjanc: "Analysis of sample of highly water-soluble T_h -symmetric fullerenehexamalononic acid $C_{66}(\text{COOH})_{12}$ by ion-chromatography and capillary electrophoresis" *J. Chromatogr. A* **2007**, *1169*, 84-96.
2. J. Cerar, J. Škerjanc: "Electric Transport and Ion Binding in Solutions of Fullerenehexamalononic Acid $T_h-C_{66}(\text{COOH})_{12}$ and Its Alkali and Calcium Salts" *J. Phys. Chem. B* **2008**, *112*, 892-895.
3. J. Cerar, T. Urbic: "Viscosity and Electrophoretic Mobility of Cesium Fullerenehexamalonate in Aqueous Solutions - Comparing Experiments and Theories on Nanometer-Sized Spherical Polyelectrolyte" *J. Phys. Chem. B* **2008**, *112*, 12240-12248.
4. J. Cerar, Č. Podlipnik: "Relationships between aqueous acidities of benzene polycarboxylic acids and computed surface-electrostatic potentials and charges" *Acta Chim. Slov.* **2008**, *55*, 999-1008.

C. Pohar:

LIPAR, Irena, ZALAR, Petra, BEŠTER-ROGAČ, Marija, POHAR, Ciril, VLACHY, Vojko. Electric conductivity of aqueous solutions of poly(anetholesulfonic acid) and its alkaline salts. *J. phys. chem., B Condens. mater. surf. interfaces biophys.*, 2009, vol. 113, no. 9, str. 2705-2711, doi: [10.1021/jp807518h](https://doi.org/10.1021/jp807518h). [COBISS.SI-ID [30227717](#)]

LIPAR, Irena, ZALAR, Petra, POHAR, Ciril, VLACHY, Vojko. Thermodynamic characterization of polyanetholesulfonic acid and its alkaline salts. *J. phys. chem., B Condens. mater. surf. interfaces biophys.*, 2007, vol. 111, no. 34, str. 10130-10136, graf. prikazi. [COBISS.SI-ID [28857093](#)]

LAH, Jurij, POHAR, Ciril, VESNAVER, Gorazd. Calorimetric study of the micellization of alkylpyridinium and alkyltrimethylammonium bromides in water. *J. phys. chem., B Mater. surf. interfaces biophys.*, **2000**, *104*, 2522-2526.

M. Tomšič:

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 Condens. mater. surf. interfaces biophys.*, 2004, vol. 108, no. 22, str. 7021-7032.

TOMŠIČ, Matija, JAMNIK, Andrej, FRITZ, Gerhard, GLATTER, Otto, VLČEK, Lukáš. Structural properties of pure simple alcohols from ethanol, propanol, butanol, pentanol, to hexanol : comparing Monte Carlo simulations with experimental SAXS data. *J. phys. chem., B Condens. mater. surf. interfaces biophys.*, 2007, vol. 111, no. 7, str. 1738-1751.

TOMŠIČ, Matija, GLATTER, Otto. From bulk to dispersed hierarchically organized lipid phase systems. V: IGLIČ, Aleš (ur.). *Advances in planar lipid bilayers and liposomes : volume 12*, (Advances in planar lipid bilayers and liposomes). Amsterdam; Elsevier: Academic Press, cop. 2010, str. 167-200.

1.

Ime predmeta: TEORETIČNE METODE V FIZIKALNI KEMIJI				
Nosilec: prof. dr. Vojko Vlachy				
Izvajalci: prof. dr. Vojko Vlachy prof. dr. Jože Koller izr. prof. dr. Andrej Jamnik doc. dr. Jurij Reščič doc. dr. Barbara Hribar Lee doc. dr. Tomaž Urbič				
Št. ur: 150	Predavanj:	Seminarjev:	Lab. vaj:	Drugo:
Opomba: Ure se glede na potrebe vsakega študenta smiselno porazdelijo na predavanja, seminarske naloge, laboratorijske vaje in/ali individualno podajanje snovi. To se stori v dogovoru med študentom, nosilcem ter izvajalcem/izvajalci (če jih je več).				
Število KT: 5				
2. Pogoji za vključitev: Predmet zahteva predznanje splošne in fizikalne kemije ter strukture atomov in molekul. Glede na izbrano študijsko snov v okviru tega predmeta se od študenta pričakuje tudi znanje s področja numerične matematike, fizike in računalništva.				
3. Izobraževalni cilji in predvideni študijski rezultati (predmetno – specifične kompetence): V okviru predmeta študent pridobi specialistična znanja z ožjega področja. Ta znanja zadostujejo za samostojno vodenje znanstvene raziskave na izbranem raziskovalnem področju.				
4. Vsebina predmeta: Študent skupaj z mentorjem izbere vsebine v obsegu 5 KT izmed spodaj navedenih, nosilec predmeta skladno z izbranimi vsebinami kooordinira izvajanje, če je izvajalcev več. <ul style="list-style-type: none">• Potencialne metode Ponovitev osnovnih pojmov. Poisson–Boltzmannova enačba, modificirana Poisson–Boltzmannova enačba. Robni pogoji in rešitve linearizirane in nelinearizirane oblike v različnih simetrijah.• Termodinamične perturbacijske teorije Osnove, Gibbs–Bogoljubova neenakost. Barker–Hendersonova teorija. Weeks–Chandler–Andersenova teorija. Wertheimova perturbacijska teorija.• Porazdelitvene funkcije Ornstein–Zernikova integralska enačba v različnih približkih. Razvoj po multipolih za molekularne sisteme. Wertheimova integralska enačba za sisteme z močno usmerjenimi silami.• Simulacijske metode Metoda Monte Carlo v generaliziranem ansamblu. Uporaba adhezivnega (impulznega) potenciala za modeliranje privlačnih koloidov. Dinamika molekul. Polje				

sil. Molekulski docking. Simulacije biomolekul.

- Sistemi v polju zunanje sile

Teorija gostotnega funkcionala.

- Kvantno-kemijske metode

Periodični sistemi: Blochove funkcije, Hartree-Fockova metoda za periodične sisteme. Korelirano gibanje elektronov: korelacijska energija, metoda konfiguracijske interakcije, multikonfiguracijska interakcija, metoda sklopljenih skupkov. Teorija gostotnih funkcionalov (DFT): Kohn-Shamove enačbe, Hohenberg-Kohnova teorema, približek lokalne gostote, približek nelokalne gostote. Metode kvantne dinamike in mehanike.

- Kemijska kinetika

Hitrost kemijskih reakcij v raztopinah. Vpliv ionskih reaktantov. Kataliza.

5. Temeljni študijski viri:

Aktualni članki iz področja predmeta.

6. Metode poučevanja in učenja:

Predavanja, samostojni študij relevantnih člankov in diskusija v skupini.

7. Preverjanja znanja - obveznosti študenta (npr. ustni in/ali pisni izpit, seminar, projekt):

Način preverjanja znanja se dogovori individualno z vsakim študentom doktorskega študija in se lahko izvaja v obliki ustnega in/ali pisnega izpita, seminarja ali izdelave projekta oziroma pisanja znanstvenega članka.

8. Reference izvajalcev predmeta (3-5 referenc, relevantnih za predmet):

V. Vlachy:

1. Yu.V. Kalyuzhnyi, V. Vlachy, P.T. Cummings, Modeling solution of flexible polyelectrolyte in explicit solvent, Chem. Phys. Letters 438, 238–243 (2007).
2. M. Druchok, B. Hribar–Lee, H. Krienke, and V. Vlachy, A Molecular Dynamics Study of Short–Chain Polyelectrolytes in Explicit Water: Toward the Origin of Ion–Specific Effects, Chem. Phys. Letters, 450, 281–285 (2008).
3. M. Jardat, B. Hribar–Lee, and V. Vlachy, Self–Diffusion Coefficient of Ions in Presence of Charged Obstacles, Phys. Chem. Chem. Phys., 10, 449 – 457 (2008).
4. Yu. V. Kalyuzhnyi, M. F. Holovko, and V. Vlachy, Highly Asymmetric Electrolytes in the Associative Mean-Spherical Approximation, J. Stat. Phys. 100, 243– 265 (2000).

J. Koller:

1. M. Kertesz, J. Koller and A. Ažman, Calculated forbidden band gap in periodic protein models indicating them to be insulators, Nature 266, 278 (1977).
2. M. Kertesz, J. Koller, and A. Ažman, Bond length alternation and forbidden energy gap in conjugated periodic polymers, Ed. D.W. Dwight, T.J. Fabish, and H.R. Thomas, Photon, Electron, and Ion Probes of Polymer Structure and Properties, ACS Symposium Series, No. 162, 105–111, Washington 1981.
3. J. Koller and B. Plesničar, Mechanism of the participation of water in the decomposition of hydrogen trioxide (HOOOH). A theoretical study. J. Am. Chem. Soc. 118, 2470–2472 (1996).
4. S. Kovačič, J. Koller, J. Cerkovnik, T. Tuttle, and B. Plesničar, Dihydrogen trioxide clusters, (HOOOH)_n (n=2-4), and the hydrogen-bonded complexes of HOOOH with acetone and dimethyl ether: Implications for the decomposition of HOOOH, J. Phys. Chem. A 112, 8129–8135 (2008).

5. J. Dolenc, C. Oostenbrink, J. Koller, W. F. van Gunsteren. 2005. Molecular dynamics simulations and free energy calculations of netropsin and distamycin binding to an AAAAA DNA binding site. *Nucleic Acids Res.* 33: 725-733.

A. Jamnik:

1. A. Jamnik: Suspensions of Adhesive Colloidal Particles in Sedimentation Equilibrium in a Planar Pore. - *J. Chem. Phys.* 1998, 109, 11085-11093.

2. A. Jamnik: Adsorption of a Binary Mixture of Adhesive Fluids in Planar Pores: A Monte Carlo Study. - *J. Phys. Chem. B* 2007, 111, 3674-3684.

3. A. Jamnik: Simulating Asymmetric Colloidal Mixture with Adhesive Hard Sphere Model. - *J. Chem. Phys.* 2008, 128, 234504.

J. Reščič:

1. Rescic J, Linse P, Potential of mean force between charged colloids: Effect of dielectric discontinuities *JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS* Volume: 129 Issue: 11 Article Number: 114505 Published: SEP 21 2008

2. Rescic J, Linse P: Gas-liquid phase separation in charged colloidal systems *JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS* Volume: 114 Issue: 22 Pages: 10131-10136 Published: JUN 8 2001

3. Rescic J, Vlachy V, Bhuiyan LB, Outhwaite CV, Theoretical study of catalytic effects in micellar solutions *LANGMUIR* Volume: 21 Issue: 1 Pages: 481-486 Published: JAN 4 2005

4. Pinero J, Bhuiyan LB, Rescic J, Vlachy V Ionic correlations in the inhomogeneous atmosphere surrounding cylindrical polyions: Catalytic effects of polyions *JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS* Volume: 128 Issue: 21 Article Number: 214904 Published: JUN 7 2008

B. Hribar Lee:

1. HRIBAR, Barbara, SOUTHALL, Noel T., VLACHY, Vojko, DILL, Ken A. How ions affect the structure of water. *J. Am. Chem. Soc.*, 2002, vol. 124, no. 41, str. 12302-12311.

2. VLACHY, Vojko, HRIBAR-LEE, 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.

3. DILL, Ken A., TRUSKETT, Thomas Michael, VLACHY, Vojko, HRIBAR-LEE, Barbara. Modeling water, the hydrophobic effect, and ion solvation. *Annu Rev Biophys Biomol Struct*, 2005, vol. 34, str. 173-199.

4. JARDAT, Marie, HRIBAR-LEE, Barbara, VLACHY, Vojko. Self-diffusion coefficients of ions in the presence of charged obstacles. *PCCP. Phys. chem. chem. phys. (Print)*, 2008, vol. 10, no. 3, str. 449-457.

T. Urbič:

1. URBIČ, Tomaž, VLACHY, Vojko, KALYUZHNYI, Yu. V., SOUTHALL, N. T., DILL, K. A. A two dimensional model of water : theory and computer simulations. *J. chem. phys.*, February 2000, vol. 112, no. 6, str. 2843-2848.

2. 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.

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

4. URBIČ, Tomaž, VLACHY, Vojko, DILL, Ken A. Confined water : a Mercedes-Benz model study. *J. phys. chem., B Condens. mater. surf. interfaces biophys.*, 2006, vol. 110, no. 10, str. 4963-4970.

1.

Ime predmeta: IZBRANA POGLAVJA IZ ORGANSKE KEMIJE				
Nosilec: prof. dr. Marijan Kočevar				
Izvajalci: doc. dr. Marjan Jereb prof. dr. Marijan Kočevar prof. dr. Janez Košmrlj prof. dr. Andrej Petrič prof. dr. Slovenko Polanc doc. dr. Bogdan Štefane				
Št. ur: 150	Predavanj: 30	Seminarjev: 30	Lab. vaj:	Drugo: 90
Število KT: 5				
2. Pogoji za vključitev: Opravljen magistrski študij.				
3. Izobraževalni cilji in predvideni študijski rezultati (predmetno – specifične kompetence): Poglobljeno poznavanje izbranih področij organske kemije. Kandidat se seznani z modernimi metodami organske kemije, kar ga usposobi za samostojno reševanje problemov iz tega področja dejavnosti.				
4. Vsebina predmeta: Študent s soglasjem mentorja med spodaj navedenimi temami v izbere tiste, ki so najtesneje povezane z njegovim raziskovalnim delom. Nosilec predmeta in vodja študija poskrbita, da obseg študentovega dela ustreza 5 KT. Če je nosilec več, izvajanje koordinira nosilec. <ul style="list-style-type: none">• Diazeni v organski sintezi. Sinteze diazenov. Reakcije z alkeni in areni. Migracija halogena. Intramolekularne reakcije. Reakcije s karbonilnimi spojinami. Sinteze imidazolov, 1,2,4-triazolov in 1,3,4-oksadiazolov. Kemoselektivne oksidacije tiolov in selenolov; elektrokemijske lastnosti diazenov. Aplikacije diazenov v 'click' kemiji in v cikloadicijah. Mitsunobijeve reakcije. Biokemijske karakteristike diazenov. (prof. dr. Janez Košmrlj, prof. dr. Slovenko Polanc)• Moderne metode halogeniranja organskih molekul. Vloga halosubstituiranih organskih molekul v (biološki) kemiji, biološko aktivne halosubstituirane molekule, biohalogeniranje, vpliv fluorovega atoma na biološko aktivnost molekul. Trajnostni razvoj in ekološko sprejemljive metode uvedbe halogenov. Razvoj novih tehnik za halogeniranje: brez topil, na vodi, prisotnost par topil, difuzijske membrane, mikroreaktorji, kontinuirni procesi. Novi reagenti za uvedbo halogenov v organske molekule, enantioselektivno halogeniranje, sinteze halosubstituiranih kiralnih sintonov. (izr. prof.dr.Marjan Jereb)• Izbrana poglavja iz selektivne sinteze Selektivna sinteza, zaščitne skupine. Stereoselektivna sinteza, asimetrična indukcija. Uporaba katalize v selektivni sintezi. Selektivna sinteza s pomočjo mikrovalov, reakcije brez uporabe topil. Sinteza pod visokimi pritiski (nad 10 kbar), izbira topil, kemo-, regio-				

in stereoselektivnost, sintezni primeri. Cikloadicijske reakcije in druge pretvorbe 2H-piran-2-onov: sinteza in pretvorbe derivatov biciklo[2.2.2]oktena, α,β -didehidro- α -aminokislin, polisubstituiranih anilinov in sorodnih spojin in indolov. Sinteza in reaktivnost 1,3-diketo-BF₂ kompleksov. Tvorba C-C vezi preko katalizirane aktivacije inertne C-H vezi. Kovinski karbenski kompleksi in tvorba C=C vezi. (prof. dr. Marijan Kočevar, doc. dr. Bogdan Štefane).

- **Molekularne sonde za strukturno in funkcionalno slikanje**

Pregled modernih metod strukturnega in funkcionalnega slikanja (MRI, konfokalna mikroskopija, pozitronska emisijska tomografija (PET)...). Sinteze in karakterizacija fluorescentnih ter z radioizotopi označenih molekularnih sond. Izbrani primeri: sonde za raziskave sprememb v centralnem živčnem sistemu. (prof. dr. Andrej Petrič)

5. Temeljni študijski viri:

- Pregledni članki s področja diazenov.
- (a) Organofluorine Chemistry, K. Uneyama, Blackwell, 2006, Oxford, UK.
(b) Modern Fluoroorganic Chemistry, P. Kirsch, Wiley-VCH, 2004, Weinheim, Germany.
(c) Fluorine in Organic Chemistry, R. D. Chambers, Blackwell, 2004, Oxford, UK.
(č) Green Reaction Media in Organic Synthesis, K. Mikami, Ed., Blackwell, 2005, Oxford, UK.
(d) Organic Reactions in Water, U. M. Lindström, Blackwell, 2007, Oxford, UK.
- (a) Asymmetric Synthesis, ed. R. A. Aitken and S. N. Kilenyi, Blackie Academic and Professional, London, 1994.
(b) B. L. Hayes, Microwave Synthesis: Chemistry at the Speed of Light, CEM Publishing, Matthews 2002.
(c) N. S. Isaacs, The Role of High Pressure Methods in Organic Chemistry, *Tetrahedron* **1991**, *47*, 8463-8497.
(d) F. Benito-Lopez, R. J. M. Egberink, D. N. Reinhoudt, W. Verboom, High pressure in organic chemistry on the way to miniaturization. *Tetrahedron* **2008**, *64*, 10023-10040.
(e) K. Kranjc, M. Kočevar. From conventional reaction conditions to microwave-assisted catalytic transformations of various substrates. State of the art in 2012 (part A: general). *Curr.Org. Chem.* **2013**, *17*, 448-456.
(f) K. Kranjc, M. Kočevar, From conventional reaction conditions to microwave-assisted catalytic transformations of various substrates. State of the art in 2012 (part B: catalysis). *Curr.Org. Chem.* **2013**, *17*, 457-473.
(g) P. J. Kocienski, Protecting groups, Georg Thieme Verlag, Stuttgart, Corr. Ed. 2000.
(h) D. Alberico, M. E. Scott, and Mark Lautens, Aryl-Aryl Bond Formation by Transition-Metal-Catalyzed Direct Arylation, *Chem. Rev.*, **2007**, *107*, 174-238.
(i) T. M. Trnka, R. H. Grubbs. The Development of L2X2RuCHR Olefin Metathesis Catalysts: An Organometallic Success Story. *Acc. Chem. Res.* **2001**, *34*, 18-29.
- Članki iz tekoče lilterature

6. Metode poučevanja in učenja:

Predavanja in seminarji.

7. Preverjanja znanja - obveznosti študenta (npr. ustni in/ali pisni izpit, seminar,

projekt):

Ustni izpit.

8. Reference izvajalcev predmeta (3-5 referenc, relevantnih za predmet):

• **Diazeni v organski sintezi.**

Košmrlj, J.; Kočevar, M.; Polanc, S. *Synlett* **1996**, 652.

Košmrlj, J.; Kočevar, M.; Polanc *J. Chem. Soc., Perkin Trans. 1* **1998**, 3917.

Grabner, S.; Košmrlj, J.; Bukovec, N.; Čemažar, M. *J. Inorg. Biochem.* **2003**, 95, 105.

Bombek, S.; Požgan, F.; Kočevar, M.; Polanc, S. *J. Org. Chem.* **2004**, 69, 2224.

Stropnik, T.; Bombek, S.; Kočevar, M.; Polanc, S. *Tetrahedron Lett.* **2008**, 49, 1729.

Urancar, D. Košmrlj, J. *J. Comb. Chem.* **2008**, 10, 981.

• **Moderne metode halogeniranja organskih molekul.**

M. Jereb, M. Zupan, S. Stavber, *Chem. Commun.* **2004**, 2614.

M. Jereb, M. Zupan, S. Stavber, *Green Chem.* **2005**, 7, 100.

S. Stavber, M. Jereb, M. Zupan, *Synthesis*, **2008**, 1487.

I. Pravst, M. Zupan, S. Stavber, *Tetrahedron*, **2008**, 64, 5191.

S. Stavber, M. Jereb, M. Zupan, *Chem. Commun.* 2002, 488.

• **Izbrana poglavja iz selektivne sinteze**

(1) 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**, 69, 3190-3193.

(2) MARTELANC, Mitja, KRANJC, Krištof, POLANC, Slovenko, **KOČEVAR, Marijan**. An efficient microwave-assisted green transformation of fused succinic anhydrides into N-aminosuccinimide derivatives of bicyclo[2.2.2]octene in water. *Green chem.*, **2005**, 7, 737-741.

(3) KRIVEC, Marko, GAZVODA, Martin, KRANJC, Krištof, POLANC, Slovenko, **KOČEVAR, Marijan**. A way to avoid using precious metals : the application of high-surface activated carbon for the synthesis of isoindoles via the Diels-Alder reaction of 2H-pyran-2-ones. *J. Org. Chem.*, **2012**, 77, 2857-2864.

(4) CIMPEANU, Valentin, **KOČEVAR, Marijan**, PARVULESCU, Vasile I., LEITNER, Walter. Preparation of Rhodium Nanoparticles in Carbon Dioxide Induced Ionic Liquids and their Application to Selective Hydrogenation. *Angew. Chem.*, **2009**, 48, 1085-1088.

(5) ŠTEFANE **Bogdan**, POLANC Slovenko. A New Regio- and Chemoselective Approach to β -Keto Amides and β -Enamino Carboxamides via 1,3,-Dioxaborinanes. *Synlett*, 2004, 698-702.

(6) ŠTEFANE **Bogdan**, POLANC Slovenko. Hydrogenation of BF_2 complexes with 1,3-dicarbonyl ligands. *Tetrahedron*, **2009**, 65, 2339-2343.

• **Molekularne sonde za strukturno in funkcionalno slikanje**

Shoghi-Jadid, Koosh, Small, Gary W., Agdeppa, Eric D., Kepe, Vladimir, Ercoli, Linda M., Siddarth, Prabha, Read, Stephen, Satyamurthy, Nagichettiar, Petrič, Andrej, Cheng-Huang, Sung, Barrio, Jorge R. Localization of neurofibrillary tangles and beta-amyloid plaques in the brains of living patients with Alzheimer disease. *Am.J. Geriatr. Psychiatry*, **2002**, 10, 24-35.

Agdeppa, Eric D., Kepe, Vladimir, Liu, Jie, Small, Gary W., Huang, sung-cheng, Petrič, Andrej, Satyamurthy, Nagichettiar, Barrio, Jorge R. 2-Dialkylamino-6-acylmalononitrile substituted naphthalenes (DDNP analogs): Novel diagnostic and therapeutic tools in

Alzheimer`s disease. *Mol. Imaging Biol.* **2003**, 5, 404-417.

Liu, Jie, Kepe, Vladimir, Žabjek, Alenka, Petrič, Andrej, Padgett, Henry C., Satyamurthy, Nagichettiar, Barrio, Jorge R. High-yield, automated radiosynthesis of 2-(1-{6-(2-[¹⁸F]fluoroethyl)(methyl amino)-2-naphthyl}ethylidene)malononitrile ([¹⁸F]FDDNP) ready for animal or human administration. *Mol. Imaging Biol.* **2007**, 9, 6-16.

1.

Ime predmeta: IZBRANA POGLAVJA IZ HETEROCIKLIČNE KEMIJE				
Nosilec: prof. dr. Jurij Svete				
Izvajalci: Akademik prof. dr. Branko Stanovnik prof. dr. Jurij Svete				
Št. ur: 150	Predavanj: 30	Seminarjev: 30	Lab. vaj:	Drugo: 90
Število KT: 5				
2. Pogoji za vključitev: Opravljen magistrski študij.				
3. Izobraževalni cilji in predvideni študijski rezultati (predmetno – specifične kompetence): Poglobljeno poznavanje izbranih področij organske kemije. Kandidat se seznani z modernimi metodami organske kemije, kar ga usposobi za samostojno reševanje problemov iz tega področja dejavnosti.				
4. Vsebina predmeta: <ul style="list-style-type: none">• Heterociklizacije Ciklosubstitucije, ciklokondenzacije, cikloadicije in ostale periciklične reakcije, transformacije obročev, molekulske premestitve, regio- in stereoselektivne heterociklizacije, Stereoselektivna in asimetrična sinteza (delno) nasičenih sistemov.• Modularni pristop k sintezi obročnih sistemov Sintezni gradniki za pripravo heterociklov, metode heterociklizacije, modularni pristop k načrtovanju sinteze obročev, kontrola kemo-, regio- in stereoselektivnosti.• Sinteze in pretvorbe alkil 3-(dimetilamino)-propenoatov in sorodnih enaminonov; od heterociklov do naravnih spojin Sinteza in struktura substituiranih alkil 3-(dimetilamino)-propenoatov in sorodnih enaminonov iz necikličnih in cikličnih spojin z metilensko ali potencialno metilensko skupino. Tipična reaktivnost 3-(dimetilamino)propenoatov in sorodnih enaminonov: reakcije z nukleofili in elektrofilni, cikloadicije. Transformacije: sinteza heteroaril amino kislin, sinteza monocikličnih heterociklov: aziridinov, pirolov, oksazolov, izoksazolov, pirazolov, imidazolov, 1,2,4-oksadiazolov, 1,2,3-triazolov, piranonov, piridinov, piridazolinov, pirimidinov, pirazinov in kondenziranih sistemov na osnovi omenjenih heterocikličnih sistemov. Sinteza naravnih spojin in njihovih analogov, npr. indolovih alkaloidov kot so aplisinopsini, meridianini, dipodazini, triprostatini in drugi.• Sinteza funkcionaliziranih heterociklov Sinteza s funkcionalizacijo obroča, sinteza s funkcionalizacijo gradnikov.• Kombinatorna sinteza heterociklov				
5. Temeljni študijski viri: <ul style="list-style-type: none">• Pregledni članki s področja uporabe enaminonov v heterociklični kemiji: (a) Stanovnik, B.; Svete, J., Synthesis of Heterocycles from Alkyl 3-(Dimethylamino)propenoates and Related Enaminones. <i>Chemical Reviews (Washington, DC, United States)</i> 2004, 104, (5), 2433-2480.				

(b) Stanovnik, B.; Svete, J., Alkyl 2-substituted 3-(dimethylamino)-propenoates and related compounds - versatile reagents in heterocyclic chemistry. *Synlett* **2000**, (8), 1077-1091.

(c) Stanovnik, B.; Svete, J., The Synthesis of Aplysinopsins, Meridianines, and Related Compounds. *Mini-Reviews in Organic Chemistry*, **2005**, 2, 211-224.

- Izbrana poglavja iz monografij:

(a) T. L. Gilchrist: *Heterocyclic Chemistry*, 2nd Edition, Longman Scientific & Technical, 1992.

(b) A. Padwa, W. H. Pearson: *Synthetic Applications of 1,3-Dipolar Cycloaddition Chemistry Toward Heterocycles and Natural Products*, John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 2003.

(c) *Handbook of Combinatorial Chemistry, Drugs, Catalysts, Materials*. Ed. by K. C. Nicolau, R. Hanco, W. Hartwig, Volume 1 & 2, Wiley-VCH, Weinheim, 2002.

6. Metode poučevanja in učenja:

Predavanja in seminarji.

7. Preverjanja znanja - obveznosti študenta (npr. ustni in/ali pisni izpit, seminar, projekt):

Ustni izpit.

8. Reference izvajalcev predmeta (3-5 referenc, relevantnih za predmet):

(1.) Stanovnik, B.; Svete, J., Synthesis of Heterocycles from Alkyl 3-(Dimethylamino)propenoates and Related Enaminones. *Chem. Rev.* **2004**, 104, (5), 2433.

(2.) Stanovnik, B.; Svete, J., The Synthesis of Aplysinopsins, Meridianines, and Related Compounds. *Mini-Reviews in Organic Chemistry*, **2005**, 2, 211.

(3.) Wagger, J.; Groselj, U.; Meden, A.; Svete, J.; Stanovnik, B., Synthesis of (S,Z)-3-[(1*H*-indol-3-yl)methylidene]hexahydropyrrolo[1,2-*a*]pyrazin-4(1*H*)-one: an alternative, enaminone based, route to unsaturated cyclodipeptides. *Tetrahedron* **2008**, 64, (12), 2801.

(4.) L. Pezdirc, V. Jovanovski, D. Bevk, R. Jakše, S. Pirc, A. Meden, B. Stanovnik, J. Svete. Stereocontrol in cycloadditions of (1*Z*,4*R**,5*R**)-1-arylmethylidene-4-benzoylamino-5-phenylpyrazolidin-3-on-1-azomethine imines. *Tetrahedron*, **2005**, 61 3977.

(5.) U. Grošelj, A. Meden, B. Stanovnik, J. Svete. Stereoselective [4+2] cycloadditions of tetrazines to 3-oxo- and 3-arylimino-4'-methylenedihydro-3'*H*-spiro[bicyclo[2.2.1]heptane-2,2'-furans]. *Tetrahedron: Asymmetry*, **2007**, 18, 2746.

(6.) Č. Malavašič, B. Brulc, P. Čebašek, G. Dahmann, N. Heine, D. Bevk, U. Grošelj, A. Meden, B. Stanovnik, J. Svete. Combinatorial Solution-Phase Synthesis of (2*S*,4*S*)-4-Acylamino-5-oxopyrrolidine-2-carboxamides. *J. Comb. Chem.*, **2007**, 9, 219.

1.

Ime predmeta: ŠTUDIJ MEHANIZMOV TRANSFORMACIJ ORGANSKIH SPOJIN				
Nosilec: prof. dr. Darko Dolenc				
Izvajalci: doc. dr. Janez Cerkovnik prof. dr. Darko Dolenc doc. dr. Franci Kovač prof. dr. Božo Plesničar prof. dr. Boris Šket				
Št. ur: 150	Predavanj: 30	Seminarjev: 30	Lab. vaj:	Drugo: 90
Število KT: 5				
2. Pogoji za vključitev: Opravljen magistrski študij.				
3. Izobraževalni cilji in predvideni študijski rezultati (predmetno – specifične kompetence): Poglobljeno poznavanje izbranih področij organske kemije. Kandidat se seznani z modernimi metodami organske kemije, kar ga usposobi za samostojno reševanje problemov iz tega področja dejavnosti.				
4. Vsebina predmeta: Študent s soglasjem mentorja med spodaj navedenimi temami v izbere tiste, ki so najtesneje povezane z njegovim raziskovalnim delom. Nosilec predmeta in vodja študija poskrbita, da obseg študentovega dela ustreza 5 KT. Če je nosilec več, izvajanje koordinira nosilec. <ul style="list-style-type: none">• Pregled metod študija mehanizmov organskih reakcij Nekinetične metode: identifikacija produktov, reaktivni intermedii, kemijske in fizikalne metode (spektroskopske metode: NMR, ESR, UV/VIS, IR) detekcije in karakterizacije intermediatov, izotopsko zaznamovanje, stereokemija in mehanizem. Kinetične metode: kinetični principi reakcij v raztopini, prehodno stanje, aktivacijski parametri in njihova interpretacija, Hammondov postulat, princip reaktivnost-selektivnost, kinetični izotopski efekti, korelacija strukture in reaktivnosti, linearno prosto energijske zveze in prehodno stanje. Empirične korelacije učinka topil na hitrost reakcij.• Študij mehanizmov oksidacij s posebnim poudarkom na oksidacijah s peroksidi in ozonom Sinteza, fizikalne lastnosti in reaktivnost najpomembnejših razredov peroksidov, t.j. organskih derivatov vodikovega peroksida (HOOH). Mehanizem prenosa kisika pri nekataliziranih in kataliziranih reakcijah oksidacije različnih organskih substratov s peroksidi. Oksidacije organskih substratov s singletnim ($^1\text{O}_2$) in tripletnim ($^3\text{O}_2$) kisikom in ozonom. Peroksidi v bioloških sistemih. Kemija vodikovega trioksida (HOOOH) ter njegovih organskih in organokovinskih hidrotrioksidnih (ROOOH) derivatov.• Organska fotokemija Nastanek in obnašanje vzbujenih stanj molekul je pomembno za razumevanje fotokemičnih reakcij. Te informacije lahko dobimo iz študija kinetike fotofizikalnih in				

kemičnih procesov in jih lahko uporabimo pri načrtovanju struktur molekul, ki bodo vodile do zelenih končnih produktov fotokemičnih procesov. a) Fotofizikalni procesi: absorpcija fotona, singletna in tripletna stanja. Emisija fotona (fluorescenca, fosforescenca, kemiluminiscenca). Izbirna pravila za prehode (medsistemsko križanje, interna konverzija) Franck-Condonovo načelo. b) Eksperimentalne tehnike: "time resolved" spektroskopija, omogoča opazovanje kratkoživilnih vzbujenih stanj in reakcijskih intermediatov, na nano- in femtosekundni skali. Merjenje kvantnega izkoristka emisijskih pojavov in fotokemičnih procesov. Razlikovanje med vrstami vzbujenih stanj s specifičnimi inhibitorji. c) Fotokemični procesi: Značilni kromoforji in njihova reaktivnost. Uporaba fotokemičnih procesov v organski sintezi.

- **Kemija radikalov**

a) Struktura in reaktivnost radikalov. Uporaba eksperimentalnih tehnik za študij reaktivnosti: kinetične in "time resolved" spektroskopske metode (laserska bliskovna fotoliza na nanosekundni skali idr.) elektronska spinska resonanca. Elektronski efekti pri radikalskih reakcijah. Uporaba računskih metod (DFT) za študij energetike radikalskih reakcij.

b) Uporaba radikalskih procesov v organski sintezi. Kemija stananov in sorodnih hidridov, redoks procesi idr. Kataliza z obratom polarnosti. Kemija ozračja.

5. Temeljni študijski viri:

- M. B. Smith, J. A. March, *Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanism, and Structure*, 6th ed., Wiley, New York, 2007.
- H. Maskill, *The Investigation of Organic Reactions and Their Mechanisms*, Blackwell Publishing, Oxford, 2006.
- T. H. Lowry, K. S. Richardson, *Mechanism and Theory in Organic Chemistry*, 3rd ed., Plenum, New York, 1987.
- R. A. Moss, M. S. Platz, M. Jones, Jr. *Reactive Intermediate Chemistry*, Wiley-Interscience, New York, 2004.
- N. J. Turro in soavtorji, *Modern Molecular Photochemistry of Organic Molecules*, University Science Books, 2010.
- A. Gilbert, J. Baggott, *Essentials of Molecular Photochemistry*, Blackwell Scientific Publications, 1991.
- S. Z. Zard, *Radical Reaction in Organic Synthesis*, Oxford University Press, 2003
- J. Fossey in soavtorji, *Free Radicals in Organic Chemistry*, Wiley, 1995

6. Metode poučevanja in učenja:

Predavanja in seminarji.

7. Preverjanja znanja - obveznosti študenta (npr. ustni in/ali pisni izpit, seminar, projekt):

Ustni izpit.

8. Reference izvajalcev predmeta (3-5 referenc, relevantnih za predmet):

(1) PLESNIČAR, Božo. Polar Reaction Mechanisms Involving Peroxides in Solution. V *The Chemistry of Peroxides*, S. Patai, Ed.; Wiley, New York, 1983, 521-584. (Pregledno poglavje v knjigi.)

(2) PLESNIČAR, Božo, CERKOVNIK, Janez, TEKAVEC, Tomaž, KOLLER, Jože.

¹⁷O NMR spectroscopic characterization and the mechanism of formation of alkyl hydrotrioxides (ROOOH) and hydrogen trioxide (HOOOH) in the low-temperature

ozonation of isopropyl alcohol and isopropyl methyl ether: water-assisted decomposition. *Chem.-Eur. J.* **2000**, *6*, 809-819.

(3) PLESNIČAR, Božo, TUTTLE, Tell, CERKOVNIK, Janez, KOLLER, Jože, CREMER, Dieter. Mechanism of formation of hydrogen trioxide (HOOOH) in the ozonation of 1,2-diphenylhydrazine and 1,2-dimethylhydrazine : an experimental and theoretical investigation. *J. Am. Chem. Soc.*, **2003**, *125*, 11553-11564.

(4) CERKOVNIK, Janez, TUTTLE, Tell, KRAKA, Elfi, LENDERO, Nika, PLESNIČAR, Božo, CREMER, Dieter. The ozonation of silanes and germanes: an experimental and theoretical investigation. *J. Am. Chem. Soc.*, **2006**, *128*, 4090-4100.

(5) BERGANT, Ana, CERKOVNIK, Janez, PLESNIČAR, Božo, TUTTLE, Tell. An Efficient Methyltrioxorhenium(VII)-Catalyzed Transformation of Hydrotrioxides (ROOOH) into Dihydrogen Trioxide (HOOOH). *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, *130*, 14086-14087.

(6) KOVAČ, Franci, BAUMSTARK, L. Alfons. Oxidation of α -methylbenzyl alcohols by dimethyldioxirane, *Tetrahedron Lett.* **1994**, *35*, 8751-8754.

(7) KRIŽMAN LAVRIČ, Pavla, KOVAČ, Franci, FORTE-TAVČER, Petra, HAUSER, Peter J., HINKS, David. Enhanced PAA bleaching of cotton by incorporating a cationic bleach activator. *Color. technol.* **2007**, *123*, 230-236.

(8) NOSE, Žiga, KOVAČ, Franci. Oxidation of N-(α -methyl-benzylidene) anilines by dimethyldioxirane, *International Journal of Chemical Kinetics*, **2007**, *39*, 492-497.

(9) BOUDEBOUS, Hassen, KOŠMRLJ, Berta, ŠKET, Boris, WIRZ, Jakob. Primary photoreactions of the 3,5-dimethoxybenzoin cage and determination of the release rate in polar media. *J. phys. chem., A*, **2007**, *111*, 2811-2813.

(10) KOŠMRLJ, Berta, ŠKET, Boris. Photocyclization of 2-chloro-substituted 1,3-diarylpropan-1,3-diones to flavones. *Org. lett.*, **2007**, *9*, 3993-3996.

(11) KOŠMRLJ, Berta, BOUDEBOUS, Hassen, ŠKET, Boris. The effect of fluorine as leaving group in the photolysis of 2-fluoro-1,2-diphenylethanone : preparative and mechanistic investigation. *J. photochem. photobiol., A Chem.* **2008**, *199*, 73-84.

(12) DOLENC, Darko, PLESNIČAR, Božo. Evidence for Divalent Iodine (9-I-2) Radical Intermediates in the Thermolysis of (*tert*-Butylperoxy)iodanes. An Unusually Efficient Deiodination of ortho-Iodocumyl Alcohols by Cyclohexyl Radicals. *J. Am. Chem. Soc.* **1997**, *119*, 2628-2632.

(13) DOLENC, Darko, PLESNIČAR, Božo. Abstraction of iodine from aromatic iodides by alkyl radicals : steric and electronic effects. *J. Org. Chem.*, **2006**, *71*, 8028-8036.

(14) HAREJ, Maja, DOLENC, Darko. Autoxidation of hydrazones. Some new insights. *J. Org. Chem.*, **2007**, *72*, 7214-7221.

(15) LAVTIŽAR, Vesna, GESTEL, Cornelis A. M. van, DOLENC, Darko, TREBŠE, Polonca. Chemical and photochemical degradation of chlorantraniliprole and characterization of its transformation products. *Chemosphere*, **2014**, *95*, 408-414.

1.

Ime predmeta: IZBRANA POGLAVJA IZ BIOKEMIJE				
Nosilec: prof. dr. Brigita Lenarčič				
Izvajalci: prof. dr. Brigita Lenarčič doc. dr. Marko Dolinar				
Št. ur: 150	Predavanj: 15	Seminarjev: 30	Lab. vaj: -	Drugo: 105
Število KT: 5				
2. Pogoji za vključitev: Pogoji za vpis na doktorski študij. 60 ECTS s področja kemije ali biokemije.				
3. Izobraževalni cilji in predvideni študijski rezultati (predmetno – specifične kompetence): Podiplomski študenti bodo dobili pregled nad literaturo, znali bodo kritično ovrednotiti informacije in jih uporabiti za načrtovanje in ovrednotenje lastnega dela, znali poiskati informacije, ki jih bodo potrebovali. Po navodilih razpisne dokumentacije bodo znali pripraviti ustrezen opis ozadja raziskav in predlagati raziskovalno temo znotraj širšega področja biokemije.				
4. Vsebina predmeta: <ul style="list-style-type: none"> • uvodi v vsebinske sklope (predavanja) • seminar iz tekoče literature • poglobljena analiza novic s področja biokemije v medijih (seminarji) • biokemijska obravnava izbrane bolezni • priprava raziskovalnega projekta s področja biokemije 				
5. Temeljni študijski viri: Znanstvena literatura s področja biokemije – zgornja 1/3 revij po indeksu citiranosti – spletne knjižnice oz. posreduje učitelj. Vsebine se menjajo vsako leto.				
6. Metode poučevanja in učenja: Uvodi v vsebinske sklope kot predavanja. Večina kontaktnih ur kot seminar in seminarske vaje. Zahteva tudi veliko dela doma pri pripravi projekta in seminarja. Razprava pri predstavitev seminarjev in projektov – oblikovanje skupine oponentov za vsak projekt posebej. Seminarske teme, obravnavana bolezen in teme projektov so vsako leto nove.				
7. Preverjanja znanja - obveznosti študenta (npr. ustni in/ali pisni izpit, seminar, projekt): Seminar, projekt.				
8. Reference izvajalcev predmeta (3-5 referenc, relevantnih za predmet): Pavšič, M., Turk, V. & Lenarčič, B. Purification and characterization of a recombinant human testican-2 expressed in baculovirus- infected Sf9 insect cells. Protein Expr. Purif., 2008, 58, 132-139. Novinec, M., Grass, R. N., Stark, W.J., Turk, V., Baici, A. & Lenarčič, B. Interaction between human cathepsins K, L, and S, Mechanism of elastinolysis and inhibition by macromolecular inhibitors. J Biol Chem, 2007, 282, 7893- 78902.				

Novinec, M., Kordiš, D., Turk, V. & Lenarčič, B. Diversity and evolution of the thyroglobulin type-1 domain superfamily. *Molecular biology and evolution*, 2006, 744-755.

VASILJEVA, Olga, DOLINAR, Marko, TURK, Vito, TURK, Boris. Recombinant human cathepsin H lacking the mini chain is an endopeptidase. *Biochemistry (Easton)*. [Print ed.], 2003, vol. 42, str. 13522-13528.

VASILJEVA, Olga, DOLINAR, Marko, ROZMAN PUNGERČAR, Jerica, TURK, Vito, TURK, Boris. Recombinant human procathepsin S is capable of autocatalytic processing at neutral pH in the presence of glycosaminoglycans. *FEBS lett.*. [Print ed.], 2005, vol. 579, str. 1285-1290.

KOSEC, Gregor, ALVAREZ, Vanina, AGÜERO, Fernán, SÁNCHEZ, Daniel, DOLINAR, Marko, TURK, Boris, TURK, Vito, CAZZULO, Juan José. Metacaspases of *Trypanosoma cruzi* : possible candidates for programmed cell death mediators. *Mol. biochem. parasitol.*. [Print ed.], 2006, vol. 145, str. 18-28.

1.

Ime predmeta: SODOBNE METODE IN TEHNIKE V BIOKEMIJI				
Nosilec: doc. dr. Marko Dolinar				
Izvajalci: doc. dr. Marko Dolinar prof. dr. Brigita Lenarčič				
Št. ur: 150	Predavanj: 15	Seminarjev: 30	Lab. vaj: -	Drugo: 105
Število KT: 5				
2. Pogoji za vključitev: Pogoji za vpis na doktorski študij. 60 ECTS s področja kemije ali biokemije.				
3. Izobraževalni cilji in predvideni študijski rezultati (predmetno – specifične kompetence): Podiplomski študenti se bodo naučili spremljati razvoj novih metod in tehnik v biokemiji, kritično ocenjevati prednosti in slabosti izboljšav in uporabnost novih metod.				
4. Vsebina predmeta: <ul style="list-style-type: none">• uvodi v vsebinske sklope (predavanja)• tehnološke novosti v biokemiji (seminarji)• uvedba nove metode ali predlog izboljšave ene od metod, ki jih študent uporablja pri svojem raziskovalnem delu				
5. Temeljni študijski viri: Nature Methods in druga znanstvena literatura s področja biokemije – zgornja 1/3 revij po indeksu citiranosti – spletne knjižnice oz. posreduje učitelj. Vsebine se menjajo vsako leto.				
6. Metode poučevanja in učenja: Uvodi v vsebinske sklope kot predavanja. Večina kontaktnih ur kot seminar in seminarske vaje. Zahteva tudi veliko dela doma pri pripravi projekta in seminarja. Razprava pri predstavitev seminarjev in projektov – oblikovanje skupine oponentov za vsak projekt posebej. Seminarske teme so vsako leto nove.				
7. Preverjanja znanja - obveznosti študenta (npr. ustni in/ali pisni izpit, seminar, projekt): Seminar, projekt.				
8. Reference izvajalcev predmeta (3-5 referenc, relevantnih za predmet): BARLIČ-MAGANJA, Darja, DOLINAR, Marko, TURK, Vito. The influence of Ala205 on the specificity of cathepsin L produced by dextran sulfate assisted activation of the recombinant proenzyme. <i>Biol Chem</i> , 1998, vol. 379, str. 1449-1452. DOLINAR, Marko, MEHLE, Andreja, MOZETIČ-FRANCKY, Bojana, SCHWEIGER, Ana, TURK, Vito. Endoproteolytic pattern observed during refolding of a human exopeptidase proenzyme, procathepsin H, produced in Escherichia coli. <i>Food technol. biotechnol.</i> , 2000, vol. 38, str. 5-9 . PUNGERČIČ, Galina, DOLENC, Iztok, DOLINAR, Marko, BEVEC, Tadeja, JENKO, Saša, KOLARIČ, Saša, TURK, Vito. Individual recombinant thyroglobulin type-1 domains are substrates for lysosomal cysteine proteinases. <i>Biol Chem</i> , 2002, vol. 383, str.				

1809-1812.

Novinec, M., Kovačič, L., Škrli, N., Turk, V. & Lenarčič, B. Recombinant human SMOCs produced by in vitro folding: Calcium binding properties and interactions with serum proteins. *Protein Expr. Purif.*, **62**, 75-82, 2008.

Meh, P., Pavšič, M., Turk, V., Baici, A. & Lenarčič, B. Dual concentration-dependent activity of thyroglobulin type-1 domain of testican: specific inhibitor and substrate of cathepsin L. *Biol Chem*, **386**, 75-83, 2005.

Lenarčič, B., & Turk, V. Thyroglobulin type-1 domains in equistatin inhibit both papain-like cysteine proteinases and cathepsin D, *J. Biol. Chem.*, **274**, 563-566, 1999.

1.

Ime predmeta: SODOBNI NMR PRISTOPI V KARAKTERIZACIJI SPOJIN				
Nosilec: izr. prof. dr. Janez Plavec				
Izvajalci: izr. prof. dr. Janez Plavec				
Št. ur: 150	Predavanj: 30	Seminarjev: 45	Lab. vaj:	Drugo: 75
Opomba: Ure bodo lahko glede na interes in predznanje posameznega študenta smiselno drugače porazdeljene na predavanja, seminarske naloge, laboratorijske vaje in/ali individualno podajanje snovi. To bo storjeno v dogovoru med študentom, nosilcem ter izvajalcem/izvajalci.				
Število KT: 5				
2. Pogoji za vključitev: Poznavanje osnov nuklearne magnetne resonance.				
3. Izobraževalni cilji in predvideni študijski rezultati (predmetno – specifične kompetence): Študent teoretično in praktično spozna sodobne tehnike nuklearne magnetne resonance in njihovo uporabnost za reševanje znanstvenih problemov (praviloma) povezanih z njegovim lastnim raziskovalnim delom.				
4. Vsebina predmeta: Jedrski spin, NMR eksperiment, relaksacija, kompozitni pulzi, heteronuklearno razklapljanje, "spin lock", selektivno vzbujanje, gradientni pulzi, difuzija, obdelava NMR spektrov, heteronuklearni eksperimenti, editiranje spektrov, prenos polarizacije, večdimenzionalni NMR eksperimenti, povezave preko vezi in preko prostora, asignacija spektrov, računanje strukture iz NMR podatkov, ravnotežja in dinamične lastnosti molekul, NMR v trdnem agregatnem stanju, polimorfizem in solvatacija. Vsebina oz. program izvajanja predmeta bosta individualno prilagojena raziskovalnim usmeritvam posameznega študenta. Vsebine je mogoče prilagoditi do te mere, da bo študent lahko sodobne NMR pristope po uspešno opravljenem predmetu samostojno uporabljal na organskih, anorganskih, farmacevtskih, biokemijskih in ostalih vzorcih tako v trdnem kot v tekočem agregatnem stanju.				
5. Temeljni študijski viri: <ul style="list-style-type: none">• T.D.W. Claridge, High-resolution NMR techniques in organic chemistry, 1999, Pergamon• N.E. Jacobsen, NMR spectroscopy explained, 2007, Wiley• M. H. Levitt, Spin Dynamics-Basics of Nuclear Magnetic Resonance, 2001, Wiley.• Novejši (pregledni) članki iz primarne znanstvene literature.				
6. Metode poučevanja in učenja: Predavanja, seminar, delo na NMR spektrometru na praktičnih primerih praviloma na študentovih lastnih vzorcih.				
7. Preverjanja znanja - obveznosti študenta (npr. ustni in/ali pisni izpit, seminar, projekt): Izdelava in predstavitev seminarja, ustni izpit ob diskusiji projekta, ki ga je študent				

opravit.

8. Reference izvajalcev predmeta (3-5 referenc, relevantnih za predmet):

J. Plavec, P. Šket:

1. P. Podbevšek, P. Šket, J. Plavec, Stacking and Not Solely Topology of T₃ Loops Controls Rigidity and Ammonium Ion Movement within d(G₄T₃G₄)₂ G-quadruplex, *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, *130*, 14287-14293.
2. M. Cevec, C. Thibaudeau, J. Plavec, Solution structure of a let-7 miRNA:lin-41 mRNA complex from *C. Elegans*, *Nucleic Acids Res.* **2008**, *36*, 2330-2337.
3. P. Šket, J. Plavec, Not all G-quadruplexes Exhibit Ion-Channel-like Properties: NMR Study of Ammonium Ion (Non)movement within the d(G₃T₄G₄)₂ Quadruplex, *J. Am. Chem. Soc.* **2007**, *129*, 8794-8800.
4. P. Podbevšek, N. V. Hud, J. Plavec, NMR Evaluation of Ammonium Ion Movement within a Unimolecular G-quadruplex in Solution, *Nucleic Acids Res.* **2007**, *35*, 2554-2563.
5. M. Cevec, J. Plavec, Role of Loop Residues and Cations on the Formation and Stability of Dimeric DNA G-quadruplexes, *Biochemistry* **2005**, *44*, 15238-15246.

1. Ime predmeta: IZBRANA POGLAVJA IZ KEMIJSKEGA REAKCIJSKEGA INŽENIRSTVA				
Nosilec: Prof. dr. Janez Levec				
Izvajalci: Prof. dr. Janez Levec Prof. dr. Albin Pintar Doc. dr. Ana Lakota				
Št. ur: 150	Predavanj: 30	Seminarjev: 10	Lab. vaj: 0	Drugo: 110
Opomba: 110 ur je individualno delo študenta (priprava seminarjev, konzultacije, priprava na izpit, izpit).				
Število KT: 5				
2. Pogoji za vključitev: Zaključena druga stopnja bolonjskega študija kemijskega inženirstva, dokončan magistrski študij po starem programu.				
3. Izobraževalni cilji in predvideni študijski rezultati (predmetno – specifične kompetence): Študent poglobljeno spoznava interakcije med kinetiko reakcij na površini trdnega katalizatorja in transportnimi pojavi v reakcijskih sistemih z več fazami. Pridobljena znanja mu omogočajo: (i) interpretacijo eksperimentalnih rezultatov o poteku ene in ali več reakcij vodenih v večfaznih reaktorjih in (ii) optimalno načrtovati in upravljati večfazne reaktorje, ki jih pogosto najdemo v farmacevtski in sorodni industriji. Ta znanja študenta kvalificirajo tudi za samo izbiro procesa oziroma tipa reaktorja, ki bo zagotavljal želeno selektivnost in dobiček in pri študentu spodbujajo kritično uporabo osvojenih znanj za reševanje inženirskih problemov pri uvajanju sodobne procesne intenzifikacije.				
4. Vsebina predmeta: Kataliza. Trdni katalizatorji. Karakterizacija katalizatorjev (fizikalne metode, temperaturno programirane tehnike in tranzientne metode). <i>In situ</i> karakterizacija katalitske površine. Teorija reakcijske hitrosti. Reaktivnost površine. Modeli kemisorpcije. Mehanizmi in kinetika heterogeno kataliziranih reakcij. Heterogeno katalizirane reakcije oksidacije in redukcije (hidrogeniranje). Asimetrična kataliza. Heterogene katalitske reakcije v superkritičnih fluidih in ionskih tekočinah. Večfunkcionalni katalizatorji. Deaktivacija katalizatorjev. Kataliza na področju varstva okolja. Aplikacije v petrokemični in farmacevtski industriji. Večfazni reaktorji z eno reakcijo. Vpliv transporta snovi in toplote pri reakcijah na zunanji površini in znotraj poroznega katalizatorja. Modeli reaktorjev za študij snovnega transporta v heterogenih sistemih (plin-kapljevina, kapljevina-kapljevina, fluid-trdno). Določitev transportnih koeficientov v večfaznih reaktorjih. Večfazni reaktorji s kompleksno reakcijsko shemo. Simultani transport dveh				

reaktantov pri neodvisnih in odvisnih paralelnih reakcijah. Snovni transport pri konsekutivnih reakcijah. Snovni transport pri paralelno-konsekutivnih reakcijah.

Toplotni efekti v večfaznih reaktorjih. Reaktorji plin-kapljevina: kolona z mehurčki, reaktorji z mešalom. Reaktorji plin-trdno: katalitski in nekatalitski. Reaktorji plin-kapljevina-trdno.

5. Temeljni študijski viri:

I. Chorkendorff and J.W. Niemantsverdriet: *Concept of Modern Catalysis and Kinetics*, 2. izdaja, Wiley-VCH, Weinheim, 2007.

P.A. Webb and C. Orr: *Analytical Methods in Fine Particle Technology*, Micromeritics, Norcross, 1997.

G.F. Froment and K.B. Bischoff: *Chemical Reactor Analysis and Design*. 2. izdaja. John Wiley & Sons, New York, 1990.

Članki v vodilni kemijsko-inženirski periodiki, npr. *AIChE Journal*, *Chem. Eng. Sci.*, *Ind. Eng. Chem. Res.* in drugih.

6. Metode poučevanja in učenja:

Predavanja, konzultacije, projektno delo, seminarji.

7. Preverjanja znanja - obveznosti študenta (npr. ustni in/ali pisni izpit, seminar, projekt):

Ustni in pisni izpit, ali alternativno izdelava seminarja z javnim zagovorom.

Aktivna udeležba na predavanjih, seminarjih in pri drugih aktivnostih predmeta.

8. Reference izvajalcev predmeta (3-5 referenc, relevantnih za predmet):

J. Levec:

1. BERČIČ, Gorazd, PINTAR, Albin, LEVEC, Janez. Positioning of the reaction zone for gas-liquid reactions in catalytic membrane reactor by coupling results of mass transport and chemical reaction study. *Catal. today*. [Print ed.], 2005, vol. 105, no. 3/4, str. 589-597. [COBISS.SI-ID [3341082](#)]

2. NEMEC, Damjan, LEVEC, Janez. Flow through packed bed reactors. 1 : Single-phase flow. *Chem. eng. sci.*. [Print ed.], 2005, vol. 60, str. 6947-6957. [COBISS.SI-ID [3310874](#)]

3. NEMEC, Damjan, LEVEC, Janez. Flow through packed bed reactors. 2 : Two-phase concurrent downflow. *Chem. eng. sci.*. [Print ed.], 2005, vol. 60, str. 6958-6970. [COBISS.SI-ID [3311130](#)]

A. Pintar:

1. PINTAR, Albin, BERČIČ, Gorazd, BESSON, Michèle, GALLEZOT, Pierre. Catalytic wet-air oxidation of industrial effluents: total mineralization of organics and lumped kinetic modelling. *Appl. catal., B Environ.*. [Print ed.], 2004, vol. 47, no. 3, str. 143-152. [COBISS.SI-ID [2964762](#)]

2. PINTAR, Albin, MALACEA, Raluca, PINEL, Catherine, BESSON, Michèle. Catalytic three-phase diastereoselective hydrogenation of o-toluic and 2-methyl nicotinic acid derivatives: in situ FTIR/ATR investigation. *Vibr. spectrosc.*. [Print ed.], 2007, vol. 45, no. 1, str. 18-26. [COBISS.SI-ID [3807514](#)]

3. DJINOVIĆ, Petar, LEVEC, Janez, PINTAR, Albin. Effect of structural and acidity/basicity changes of CuO-CeO₂ catalysts on their activity for water-gas shift reaction. *Catal. Today*. [Print ed.], 2008, vol. 138, no. 3/4, str. 222-227. [COBISS.SI-ID [4034586](#)]

A. Lakota:

1. LAKOTA, Ana, LEVEC, Janez, CARBONELL, Ruben G. Hydrodynamics of trickling flow in packed beds: relative permeability concept. *AIChE J.*, 2002, vol. 48, no. 4, 731-738. [COBISS.SI-ID [24196613](#)]

2. LAKOTA, Ana. Impact of structured packing on bubble column mass transfer characteristics evaluation. Part 3., Sensitivity of ADM volumetric mass transfer coefficient evaluation. *Acta chim. slov.*, December 2003, vol. 50, no. 4, 771-776. [COBISS.SI-ID [25561861](#)]

3. LAKOTA, Ana. Effect of highly viscous non-Newtonian liquids on gas holdup in a concurrent upflow bubble column. *Acta chim. slov.*, 2007, vol. 54, no. 4, 678-687. [COBISS.SI-ID [29169413](#)].

1.

Ime predmeta: IZBRANA POGLAVJA IZ TRANSPORTNIH POJAVOV				
Nosilec: prof. dr. Igor Plazl				
Izvajalci: prof. dr. Igor Plazl doc. dr. Andreja Zupančič Valant				
Št. ur: 150	Predavanj: 30	Seminarjev: 45	Lab. vaj: -	Drugo: 75
Število KT: 5				
2. Pogoji za vključitev: Osnovno znanje o transportnih pojavih.				
3. Izobraževalni cilji in predvideni študijski rezultati (predmetno – specifične kompetence): Cilj predmeta je, da podiplomski študentje nadgradijo osvojena znanja iz transportnih pojavov, ki predstavljajo temelje kemijsko inženirske znanosti. Študentje si pri predmetu pridobijo naslednje specifične kompetence: poglobljeno razumevanje fluidne dinamike, prenosa toplote in prenosa snovi.				
4. Vsebina predmeta: Vsebina predmeta: - kompleksne tekočine – izvor ne-Newtonskega obnašanja; - konstitutivne enačbe za ne-Newtonske tekočine; - robni pogoji na trdnih stenah in na tekočih mejnih ploskvah (kinematični pogoji, termični robni pogoji, dinamični robni pogoji); - uporaba reoloških podatkov in modelov; - neusmerjen in enodimenzijski tok in problemi prenosa toplote; - uvod v asimptotične aproksimacije (vpliv oddane toplote zaradi viskoznosti na preprost strižni tok, tok tekočine skozi rahlo ukrivljeno cev – »the Dean problem«, difuzija v sferi s hitro reakcijo, dinamika mehurčkov v mirujočem toku – Reyleigh-Plessetova enačba); - filmi s prosto površino; - plazeči tokovi - splošne lastnosti in rešitve za 2D in asimetrične probleme; - plazeči tokovi - 3D problemi; - konvekcija in prenos toplote viskoznih tokov; - teorija mejnega sloja za laminarne tokove; - prenos toplote in snovi pri velikih Reynoldsovih številih.				
5. Temeljni študijski viri: <ul style="list-style-type: none">• L. Gary Leal, Advanced Transport Phenomena: fluid mechanics and convective transport processes, Cambridge University Press, 2007, 899 str.• J. C. Slaterry, Advanced Transport Phenomena, Cambridge University Press, 1999, 703 str.• Članki vodilnih revij s področja klemijskega inženirstva.				
6. Metode poučevanja in učenja: Predavanja, seminar.				

7. Preverjanja znanja - obveznosti študenta (npr. ustni in/ali pisni izpit, seminar, projekt):

Seminar, ustni izpit.

8. Reference izvajalcev predmeta (3-5 referenc, relevantnih za predmet):

- A. Pohar, I. Plazl, Laminar to turbulent transition and heat transfer in a microreactor : mathematical modeling and experiments. *Ind. eng. chem. res.*. [Print ed.], 2008, vol. 47, no. 19, str. 7447-7455.
- M. Lakner, I. Plazl, The finite differences method for solving systems on irregular shapes. *Comput. chem. eng.*. [Print ed.], 2008, vol. 32, no. 12, str. 2891-2896.
- P. Žnidaršič Plazl, I. Plazl, Steroid extraction in a microchannel system : mathematical modelling and experiments. *Lab chip*, 2007, vol. 7, no. 7, 883-889.
- D. Ravnjak, I. Plazl, A. Može, Kinetics of colloidal alkylketene dimer particles deposition on pulp fibers. *Colloid polym. sci.*, 2007, 1-8.
- I. Plazl, M. Lakner, T. Koloini, Modeling of temperature distributions in canned tomato based dip during industrial pasteurization. *J. food eng.*, 2006, vol. 75, no. 3, 400-406.
- ŠEBENIK, Urška, ZUPANČIČ-VALANT, Andreja, KRAJNC, Matjaž. Investigation of rubber-rubber blends miscibility. *Polym. eng. sci.*, 2006, vol. 46, no. 11, str. 1649-1659, Graf. prikazi; JCR IF: 1.414, SE (24/110), engineering, chemical, x: 0.921, SE (26/75), polymer science, x: 1.42
- GUŠTIN, Andrej, ZUPANČIČ-VALANT, Andreja, MITSOULIS, E. Pressure drop estimation for polyamide 6 flow through spinnerets and filters. *J. appl. polym. sci.*, 2006, vol. 100, no. 2, str. 1577-1587, Graf. Prikazi; JCR IF: 1.306, SE (29/75), polymer science, x: 1.42
- ŽAGAR, Ema, HUSKIĆ, Miroslav, GRDADOLNIK, Jože, ŽIGON, Majda, ZUPANČIČ-VALANT, Andreja. The effect of annealing on the rheological and thermal properties of aliphatic hyperbranched polyester based on 2,2-bis (methylol) propionic acid. *Macromolecules*, 2005, vol. 38, no. 9, str. 3933-3942; JCR IF: 4.024, SE (3/77), polymer science, x: 1.376
- 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; JCR IF: 1.558, SE (13/107), mechanics, x: 0.902
- JURKOVIČ, Polona, HOMAR, Miha, ZUPANČIČ-VALANT, Andreja, GAŠPERLIN, Mirjana. Sodium ascorbyl phosphate in topical microemulsions. *Int. j. pharm.*. [Print ed.], 2003, vol. 256, no. 1-2, str. 65-73; JCR IF: 1.539, SE (101/185), pharmacology & pharmacy, x: 2.403

1.

Ime predmeta: IZBRANA POGLAVJA IZ SEPARACIJSKIH PROCESOV				
Nosilec: dr Janvit Golob, redni prof.				
Izvajalci: dr Janvit Golob, redni prof. dr Ciril Pohar, redni prof dr Ljudmila Fele Žilnik, docentka				
Št. ur: 150	Predavanj: 30	Sem. vaj: 45	Lab. vaj: -	Drugo: 75
Število KT: 5				
2. Pogoji za vključitev: Vpis na doktorski program. Osnovno znanje masnih bilanc, termodinamike in prenosa snovi.				
3. Izobraževalni cilji in predvideni študijski rezultati (predmetno – specifične kompetence): Podiplomski študentje bodo nadgradili temeljna inženirska znanja iz prenosa snovi, termodinamike in masno-toplotnih bilanc ter jih povezali v analizo oziroma načrtovanje zahtevnejših separacijskih procesov. Proučili bodo vlogo separacijskih procesov v procesnem, produktnem inženirstvu ter se poglobili v raziskovalno-razvojne naloge pri prenosu separacijskih tehnik iz laboratorija v pilotsko postrojenje in industrijo.				
4. Vsebina predmeta: <ul style="list-style-type: none">- Reakcijski in separacijski procesi v procesnem in produktnem inženirstvu;- masne in toplotne bilance zahtevnejših procesov;- termodinamika neidealnih sistemov;- prenos snovi v dvofaznih kompleksnih sistemih;- metode za izračun časa separacije kot podlage za dimenzioniranje, razvoj modelov za čas separacije in parametrska občutljivost;- razvoj znanj na nivojih produkta, opreme in procesa pri analizi oziroma načrtovanju separatorjev;- vloga laboratorijskih raziskav in načrtovanje pilotskih enot- posebej poudarjena poglavja iz izbranih separacijskih procesov: industrijska kristalizacija po konceptu kot sledi: termodinamske osnove, kinetika kristalizacijskih procesov, model procesa na osnovi populacijske bilance, vodenje kristalizacijskega procesa.				
5. Temeljni študijski viri: <ul style="list-style-type: none">• J. D. Seader, Ernest J. Henley, Separation process principles, 2nd ed., John Wiley & Sons, cop. 2006• Specialni učbeniki za separacijske procese• Članki vodilnih revij s področja kemijskega inženirstva				
6. Metode poučevanja in učenja: Predavanja, seminarji.				
7. Preverjanja znanja - obveznosti študenta (npr. ustni in/ali pisni izpit, seminar, projekt):				

8. Reference izvajalcev predmeta (3-5 referenc, relevantnih za predmet):

Janvit Golob

- FELE ŽILNIK, Ljudmila, GOLOB, Janvit. Analysis of separation of water-methanol-formaldehyde mixture = Analiza separacije zmesi voda-metanol-formaldehid. *Acta chim. slov.* [Tiskana izd.], september 2003, letn. 50, št. 3, str. 451-460, graf. prikazi.
- RECELJ, Tadej, GOLOB, Janvit. Equilibrium and mass transfer in the Ca[^{sup}2+]-SO[_{sub}2]-H[_{sub}2]O system for the analysis of the flue gas desulphurization process. *Process saf. environ. prot.*, 2004, vol. 82, no. B5, str. 371-380, graf. prikazi.
- KNEZ, Sergej, KLINAR, Dušan, GOLOB, Janvit. Stabilization of PCC dispersion prepared directly in the mother-liquid after synthesis through the carbonation of (hydrated) lime. *Chem. eng. sci.* [Print ed.], 2006, vol. 61, no. 5, str. 5867-5880.
- KAJTNA, Jernej, ŠEBENIK, Urška, KRAJNC, Matjaž, GOLOB, Janvit. IR drying of water-based acrylic PSA adhesives. *Dry. technol.*, 2008, vol. 26, no. 3, str. 323-333.
- MARTINČIČ, Vito, GOLOB, Janvit, GREYT, Wim de, VERHÉ, Roland, KNEZ, Sergej, VAN HOED, Vera, FELE ŽILNIK, Ljudmila, POTOČNIK, Klemen, RIŽNER HRAŠ, Andreja, AYALA, José Vila. Optimization of industrial-scale deodorization of high-oleic sunflower oil via response surface methodology. *Eur. j. lipid sci. technol. (Print)*. [Print ed.], 2008, vol. 110, no. 3, str. 245-253.

Ciril Pohar

- LIVK, Iztok, **POHAR, Ciril**, ILIEVSKI, Dean. Estimation of batch precipitation kinetics by a simplified differential method. *AIChE j.*, July **1999**, vol. 45, no. 7, str. 1593-1596
- LUBEJ, Andrej, KOLOINI, Tine, **POHAR, Ciril**. Industrial precipitation of cupric hydroxy-salts. *Acta chim. slov.*, december **2004**, letn. 51, št. 4, str. 751-768
- GOMINŠEK, Tomi, LUBEJ, Andrej, **POHAR, Ciril**. Continuous precipitation of calcium sulfate dihydrate from waste sulfuric acid and lime. *J. chem. technol. biotechnol. (1986)*, **2005**, vol. 80, no. 8, str. 939-947
- TESLIČ, Dušan, **POHAR, Ciril**. Simulation of semibatch precipitation of sodium perborate tetrahydrate in an industrial crystallizer. *Ind. eng. chem. res.*, **2006**, vol. 45, no. 3, str. 1064-1073

Žilnik Fele Ljudmila

- FELE ŽILNIK, Ljudmila, ŽITKO ŠTEMBERGER, Nataša, GRILC, Viktor. Separation of water + ethanol + (o-, m-, p-) xylene systems. *J. chem. eng. data*, 2000, vol. 45, str. 784-791. [COBISS.SI-ID2249754] JCR IF: 0.988; SE, x: 1.544 (42/118), chemistry, multidisciplinary, x: 0.573 (18/117), engineering, chemical
- FELE ŽILNIK, Ljudmila, GRILC, Viktor. Separation of furfural from ternary mixtures. *J. chem. eng. data*, 2003, vol. 48, no. 3, str. 564-570. [COBISS.SI-ID 2821146] JCR IF: 0.95, SE (52/123), chemistry, multidisciplinary, x: 1.633, SE (36/119), engineering, chemical, x: 0.748
- DOHRN, Ralf, LEIBERICH, Ricarda, FELE ŽILNIK, Ljudmila. Solubility related to reaction and process design. V: LETCHER, Trevor Melvyn (ur.). *Developments and applications in solubility*. Cambridge: RSC Publishing, cop. 2007, str. 273-291. [COBISS.SI-ID [3658522](#)].

1.

Ime predmeta: IZBRANA POGLAVJA IZ OKOLJSKEGA INŽENIRSTVA				
Nosilec: doc. dr. Andreja Žgajnar Gotvajn				
Izvajalci: prof. dr. Aleksander Pavko doc. dr. Andreja Žgajnar Gotvajn				
Št. ur: 150	Predavanj: 30	Seminarjev: 10	Lab. vaj: 0	Drugo: 110
Opomba: 110 ur je individualno delo študenta (priprava seminarjev, konzultacije, priprava na izpit, izpit).				
Število KT: 5				
2. Pogoji za vključitev: Zaključena druga stopnja bolonjskega študija tehniške ali naravoslovne smeri, dokončan magistrski študij po starem programu.				
3. Izobraževalni cilji in predvideni študijski rezultati (predmetno – specifične kompetence): Študent nadgradi in poglobi znanja iz okoljskega inženirstva, ki so osnova za uspešno reševanje obstoječih okoljskih problemov. Razvija sposobnost za kritično ovrednotenje možnih prednosti in slabosti uporabe različnih tehnologij in izboljšav v proizvodnih in drugih postopkih. Pridobi znanje za vrednotenje vpliva svojega dela na lokalni in globalni ravni ter zavedanje o družbenem vplivu svojih odločitev. Razvija sposobnost za kritično uporabo osvojenih znanj pri reševanju znanstvenih in družbenih problemov.				
4. Vsebina predmeta: Študent s soglasjem mentorja med spodaj navedenimi temami v izbere tiste, ki so najtesneje povezane z njegovim raziskovalnim delom. Nosilec predmeta in vodja študija poskrbita, da obseg študentovega dela ustreza 5 KT. Če je nosilec več, izvajanje koordinira nosilec. Sodobne tehnike identifikacije in kvantifikacije nevarnih snovi: Mikropolutanti (hormonski motilci, biocidi, PAH, PCB). <i>In vivo</i> in <i>in vitro</i> metode detekcije in kvantifikacije mikropolutantov. Sodobni postopki identifikacije in odstranjevanja nevarnih snovi v odpadnih vodah: TIE - Toxicity Identification Evaluation in TRE - Toxicity Reduction Evaluation. Sodobni trendi na področju omejevanja onesnaženja, ocena življenjskega cikla (LCA), principi in metode industrijske ekologije. Kemijski, membranski in biokemijski procesi v procesih zaščite in remediacije okolja: <ul style="list-style-type: none">▪ Kemijski procesi: Čiščenje odpadnih in pitnih voda s kemijskimi postopki. Sodobni oksidacijski procesi (AOP). Fotokatalitska oksidacija. Fentonova oksidacija. Ozonacija. Elektrokemijski procesi. Termična mokra oksidacija. Oksidacija v superkritični vodi. Heterogeni katalizatorji na področju varstva okolja. Integralne procesne sheme: sklopitev AOP procesov z biološkimi postopki. Aplikacija sodobnih oksidacijskih procesov pri odstranjevanju mikropolutantov iz zraka, odpadnih in pitnih vod.▪ Membranski procesi.• Biokemijski procesi: Sodobni procesi biološkega čiščenja odpadnih vod.				

Mikoremediacija. Bioremediacija z glivami. Bioaugmentacija. Bioremediacija disperznega onesnaženja. Dekolorizacija in degradacija organskih barvil. Faktorji, ki vplivajo na proces. Mehanizmi in metabolne poti ter produkti. Vloga encimov pri degradaciji organskih barvil. Bioreaktorji za mikoremediacijo. Primerjava z alternativnimi tehnologijami. Zaključki in perspektive: mikoremedjacija mikropolutantov z glivami bele trohnobe.

5. Temeljni študijski viri:

- S. Parsons (ur.), *Advanced Oxidation Processes for Water and Wastewater Treatment*, IWA Publishing, London, 2004.
- K. Boodhoo, A. Harvey (Ed.): *Process Intesification for Green Chemistry*, Wiley, UK, 2013.
- Dilip K. Arora: *Fungal Biotechnology in Agricultural, Food and Environmental Application*. Marcel Dekker, New York, 2004.
- Harbhajan Singh: *Mycoremediation: Fungal Bioremediation*. John Wiley and Sons, 2006
- Članki vodilnih revij s področja okoljskega inženirstva (npr. *Journal of Hazardous Materials*, *Waste Management*, *Chemosphere*, *Water Research*...)

6. Metode poučevanja in učenja:

Predavanja, konzultacije, projektno delo, seminarji.

7. Preverjanja znanja - obveznosti študenta (npr. ustni in/ali pisni izpit, seminar, projekt):

Ustni in pisni izpit, izdelava seminarja (projekt) z njegovo predstavitvijo in zagovorom, aktivna udeležba na predavanjih, seminarjih in pri drugih aktivnostih predmeta.

8. Reference izvajalcev predmeta (3-5 referenc, relevantnih za predmet):

A. Žgajnar Gotvajn:

1. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, BISTAN, Mirjana, TIŠLER, Tatjana, ENGLANDE, A. J., ZAGORC-KONČAN, Jana. The relevance of bisphenol A adsorption during Fenton's oxidation. *International journal of environmental science and technology*, ISSN 1735-1472, 2013, vol. 10, no. 6, 1141-1148.
2. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, ZAGORC-KONČAN, Jana, COTMAN, Magda. Fenton's oxidative treatment of municipal landfill leachate as an alternative to biological process. *Desalination*, ISSN 0011-9164. [Print ed.], 2011, vol. 275, no. 1/3, 269-275.
3. ŽGAJNAR GOTVAJN, Andreja, ZAGORC-KONČAN, Jana, DERCO, Ján, ALMÁSIOVÁ, Beáta, KASSAI, Angelika. Oxidative pretreatment of fresh and mature landfill leachate. *Journal of advanced oxidation technologies*, 2009, vol. 12, no. 1, 1-10.

A. Pavko:

1. BABIČ, Janja, PAVKO, Aleksander. Enhanced enzyme production with the pelleted form of *D. squalens* in laboratory bioreactors using added natural lignin inducer. *Journal of industrial microbiology & biotechnology*, ISSN 1367-5435, 2012, vol. 39, no. 3, str. 449-457,
2. NOVOTNÝ, Čeněk, TROŠT, Nina, ŠUŠLA, M., SVOBODOVÁ, Kateřina, MIKESKOVÁ, Hana, VÁLKOVÁ, Hana, MALACHOVÁ, Kateřina, PAVKO, Aleksander. The use of the fungus *Dichomitus squalens* for degradation in rotating biological contactor conditions. *Bioresource technology*, ISSN 0960-8524. [Print ed.],

2012, vol. 114, no. 1, str. 241-246,

3. PAVKO, Aleksander. Fungal decolourization and degradation of synthetic dyes some chemical engineering aspects. V: EINSCHLAG, Fernando S. García (ur.). *Waste water - treatment and reutilization*. Rijeka: Intech, 2011, str. 65-88.

1.

Ime predmeta: IZBRANA POGLAVJA IZ BIOTEHNOLOŠKIH PROCESOV				
Nosilec: prof. dr. Marin Berovič				
Izvajalci: prof. dr. Marin Berovič doc. dr. Polona Žnidaršič Plazl				
Št. ur: 150	Predavanj: 15	Seminarjev: 60	Lab. vaj: -	Drugo: 75
Število KT: 5				
2. Pogoji za vključitev: Zaključen drugostopenjski ali star univerzitetni študij naravoslovne ali tehnične smeri.				
3. Izobraževalni cilji in predvideni študijski rezultati (predmetno – specifične kompetence): Cilj predmeta je poglobitev znanja za samostojno delo na področju načrtovanja in optimizacije bioprocsov in pripadajočih analiz s poudarkom na okolju in človeku sprejemljivejših tehnologijah. Študentje si pri predmetu pridobijo naslednje specifične kompetence: usposobljenost za reševanje inženirskih problemov v bioprocsovih z uporabo osnovnih inženirskih principov in z najnovejšimi tehnologijami in inženirskimi orodji.				
4. Vsebina predmeta: <ul style="list-style-type: none">• Biotransformacije v mikroreaktorjih; biotransformacije v nekonvencionalnih medijih (ionske kapljevine, organska topila); uporaba biotransformacij v papirni industriji.• Miniaturizacija bioprocsov: uporaba mikronaprav v biotehnologiji; prednosti in slabosti biokemijskih procesov v mikroreaktorjih; uporaba mikrosistemov v zaključnih procesih ter integrirane lab-on-chip naprave; analitske naprave v mikrosistemi (micro total analysis systems - μTAS): možnosti uporabe za sleditev bioprocsov; encimski mikroreaktorji.• Morfologija nitastih gliv kot parameter v submerznih bioprocsovih; mehanizmi rasti nitastih gliv v submerznih procesih in vpliv procesnih spremenljivk, karakterizacija morfologije (kvantitativna analiza slike, reološke lastnosti brozge); vpliv morfologije na tvorbo produkta; načrtovanje in vodenje bioprocsov z upoštevanjem morfoloških lastnosti micelija.• Biosinteza farmacevtskih učinkovin Basidiomicet : sodobne metode kultivacije aktivne biomase za proizvodnjo intracelularnih in ekstracelularnih učinkovin (polisaharidov, terpenoidov, proteinov in proteoglikanov), metode izolacije in purifikacije, njihove imunostimulatorne in terapevtske učinkovine na živalskih in človeških tkivnih kulturah in v medicini.• Bioprocsovo inženirstvo v anaerobnih fermentativnih procesih : vodenje in povečevanje procesov z ozirom na mikrobiološke povečevalne faktorje, integrirani vplivi posameznih postopkov, vpliv zunanjih šokov na vodenje postopka (termični šoki, galvansko in magnetno polje, kombinirani vplivi).				
5. Temeljni študijski viri:				

- Geschke O., Klank H., Tellemann P., *Microsystem Engineering of Lab-on-a-Chip Devices*, Wiley-VCH, Weinham, 2004
- Kruthiventi, A.K., Doble, M. *Green Chemistry & Engineering*. Academic Press, Amsterdam. 2007
- Zhi-Bin Lin, *Ganoderma lucidum : Genetics, chemistry, pharmacology and therapeutics* , 2002. Beijing, Medical University Press,
- Chang ST, Miles PG, *Mushrooms : cultivation, nutritional value, medicinal effect and environmental impact*, 2nd Boca Raton; CRC Press, 2004
- Halperin GM, *Healing mushrooms*, Square One Publishers, New York, 2007
- Barnes F. S. , *CRC Handbook of Biological Effects of Electromagnet Fields, Interaction of DC Electric Fields with Living Matter*, CRC Press, 3rd ed. 2002

Dodatni viri :

Znanstvena periodika: Lab on a Chip, Recent Patents on Engineering, Biotechnol. Ann. Rev., Process Biochemistry, Adv. Biochem. Eng. and Biotechnol.; Biotechnol. Bioeng; J. Biotechnol.; Bio/Technology; J. Anal. Chem.; J. Chromatogr. Sci.; Cytometry; Biotechnol. Prog.; Biocatal. Biotransf. itd

6. Metode poučevanja in učenja:

Predavanja, seminar.

7. Preverjanja znanja - obveznosti študenta (npr. ustni in/ali pisni izpit, seminar, projekt):

Seminar, ustni izpit.

8. Reference izvajalcev predmeta (3-5 referenc, relevantnih za predmet):

prof. dr. Marin Berovič

- BEROVIČ, Marin, HABIJANIČ, Jožica, ZORE, Irena, WRABER-HERZOG, Branka, HODŽAR, Damjan, BOH, Bojana, POHLEVEN, Franc. Submerged cultivation of *Ganoderma lucidum* biomass and immunostimulatory effects of fungal polysaccharides. *J. biotechnol.*. [Print ed.], 2003, vol. 103, 77-86.
- BEROVIČ, Marin, HERGA, Marko. Heat shock on *Saccharomyces cerevisiae* inoculum increases glycerol production in wine fermentation. *Biotechnol. lett.*, 2007, vol. 29, no. 6, 891-894.
- BOH, Bojana, BEROVIČ, Marin, ZHANG, Jingsong, ZHI-BIN, Lin. *Ganoderma lucidum* and its pharmaceutically active compounds. V: EL-GEWELY, M. Rafaat (ur.). *Biotechnology Annual Review*, vol. 13. Amsterdam: Elsevier, 2007, 265-301
- ŠVAGELJ, Mirjan, BEROVIČ, Marin, BOH, Bojana, MENARD, Anja, SIMČIČ, Saša, WRABER-HERZOG, Branka. Solid-state cultivation of *Grifola frondosa* (Dicks: Fr) S.F. Gray biomass and immunostimulatory effects of fungal intra- and extracellular [beta]-polysaccharides. *New biotechnology*, 2008, vol. 25, no. 2/3, 150-156.
- BEROVIČ, Marin, POTOČNIK, Mateja, ŠTRUS, Jasna. The influence of galvanic field on *Saccharomyces cerevisiae* in grape must fermentation. *Vitis*, 2008, vol. 47, no. 2, 117-122

doc. dr. Polona Žnidaršič Plazl

- Jovanović G, Žnidaršič Plazl P, Sakrittichai P, Al-Khaldi K. Dechlorination of p-chlorophenol in microreactor with bimetallic Pd/Fe catalyst. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2005, 44, 5099-5106
- Žnidaršič Plazl, P. The influence of some engineering variables upon the morphology

of *Rhizopus nigricans* in a stirred tank bioreactor. *Chem. biochem. eng. q.*, 2006, 20, 275-280

- Žnidaršič Plazl P, Plazl I, Steroid extraction in a microchannel system: mathematical modelling and experiments. *Lab Chip*, 2007, 7, 883-889.
- Roglič, U, Plazl, I, Žnidaršič Plazl, P. Batch and continuous transformation of progesterone by *Rhizopus nigricans* pellets in the presence of β -cyclodextrin. *Biocatal. biotransf.*, 2007, 25, 16-23.
- Tišma M, Žnidaršič Plazl P, Plazl I, Zelić B, Vasić-Rački Đ. Modelling of L-DOPA oxidation catalyzed by laccase. *Chem. biochem. eng. q.*, 2008; 22, 307-313.

1.

Ime predmeta: IZBRANA POGLAVJA IZ POLIMERNEGA INŽENIRSTVA				
Nosilec: prof. dr. Matjaž Krajnc				
Izvajalci: prof. dr. Matjaž Krajnc doc. dr. Urška Šebenik				
Št. ur: 150	Predavanj: 15	Seminarjev: 45	Lab. vaj: -	Drugo: 90
Število KT: 5				
2. Pogoji za vključitev: Vpis na doktorski študij.				
3. Izobraževalni cilji in predvideni študijski rezultati (predmetno – specifične kompetence): Podiplomski študenti bodo osvojili poglobljena znanja iz specifičnega področja polimernega inženirstva. Preučili bodo dostopno strokovno in znanstveno literaturo iz izbranega področja in jo kritično ovrednotili. Na osnovi preučene literature in zbranih dostopnih podatkov bodo sposobni načrtovati vsebino raziskovalnega dela in predvideti metode dela ter postaviti raziskovalne cilje.				
4. Vsebina predmeta: <ul style="list-style-type: none">• pregled vsebinskih področij polimernega inženirstva (predavanja)• seminar iz izbranega področja polimernega inženirstva, ki temelji na pregledu strokovne in znanstvene literature• izdelava predloga raziskovalnega projekta za načrtovanje specifičnega procesa• izdelava predloga raziskovalnega projekta za načrtovanje specifičnega produkta				
5. Temeljni študijski viri: Znanstvena literatura s področja polimernega inženirstva, ki se spreminja v skladu z razvojem stroke. Študenti literaturo zbirajo samostojno med študijskim procesom s pomočjo usmerjanja učitelja.				
6. Metode poučevanja in učenja: Uvodi v vsebinske sklope kot predavanja. Večina kontaktnih ur kot seminar. Zahteva tudi veliko dela doma pri pripravi projekta in seminarja. Razprava pri predstavitvah seminarjev in projektov – oblikovanje skupine oponentov za vsak projekt posebej.				
7. Preverjanja znanja - obveznosti študenta (npr. ustni in/ali pisni izpit, seminar, projekt): Seminar, projekt.				
8. Reference izvajalcev predmeta (3-5 referenc, relevantnih za predmet): ROGELJ, Sašo, KRAJNC, Matjaž. Pressure and temperature behavior of thermoplastic polymer melts during high-pressure expansion injection molding. Polym. eng. sci., 2008, vol. 48, no. 9, str. 1815-1823. LIKOZAR, Blaž, KRAJNC, Matjaž. Kinetic and heat transfer modeling of rubber blends' sulfur vulcanization with N-t-butylbenzothiazole-sulfenamide and N,N-di-t-butylbenzothiazole-sulfenamide. J. appl. polym. sci., 2007, vol. 103, no. 1, str. 293-307. ŠEBENIK, Urška, KRAJNC, Matjaž. Properties of acrylic-polyurethane hybrid				

emulsions synthesized by the semibatch emulsion copolymerization of acrylates using different polyurethane particles. J. polym. sci., Part A, Polym. chem., 2005, vol. 43, no. 18, str. 4050-4069.

ŠEBENIK, Urška, KRAJNC, Matjaž. Semibatch emulsion polymerization of methyl methacrylate using different polyurethane particles. J. polym. sci., Part A, Polym. chem., 2005, vol. 43, no. 4, str. 844-858.

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.

1.

Ime predmeta: MEHANIKA POLIMERNIH MATERIALOV				
Nosilec: prof. dr. Matjaž Krajnc				
Izvajalci: prof. dr. Matjaž Krajnc doc. dr. Urška Šebenik				
Št. ur: 150	Predavanj: 15	Seminarjev: 45	Lab. vaj: -	Drugo: 90
Število KT: 5				
2. Pogoji za vključitev: Vpis na doktorski študij.				
3. Izobraževalni cilji in predvideni študijski rezultati (predmetno – specifične kompetence): Podiplomski študenti bodo osvojili poglobljena znanja iz mehanike polimernih materialov na makroskopskem nivoju in relacije mehanskega obnašanja v odvisnosti od strukture materiala in mehanizma deformacije. Osvojijo sodobne tehnike določanja mehanskih lastnosti polimernih materialov, interpretacijo rezultatov ter modeliranje viskoelastičnega obnašanja.				
4. Vsebina predmeta: Fenomenološka obravnava viskoelastičnosti polimernih materialov s sodobnimi tehnikami določanja (dinamičnih) mehanskih lastnosti polimerov. Molekularni mehanizmi in matematični zapis mehanike kontinuuma. Soodvisnost frekvence in temperature. Prehodi in relaksacije v polimerih. Elastičnost polimernih mrež. Modeliranje mehanskih lastnosti kompozitnih materialov. Obravnava izbranih primerov.				
5. Temeljni študijski viri: Znanstvena literatura s področja, ki se spreminja v skladu z razvojem stroke. Študenti literaturo zbirajo samostojno med študijskim procesom s pomočjo usmerjanja učitelja.				
6. Metode poučevanja in učenja: Uvodi v vsebinske sklope kot predavanja. Večina kontaktnih ur kot seminar. Obravnava izbranih primerov v diskusijskih skupinah.				
7. Preverjanja znanja - obveznosti študenta (npr. ustni in/ali pisni izpit, seminar, projekt): Seminar in ustni izpit.				
8. Reference izvajalcev predmeta (3-5 referenc, relevantnih za predmet): LIKOZAR, Blaž, ŠEBENIK, Urška, KRAJNC, Matjaž. Modeling of dynamic mechanical properties of vulcanized fluoroelastomer. Polym. eng. sci., 2007, vol. 47, no. 12, str. 2085-2094. LIKOZAR, Blaž, KRAJNC, Matjaž. Temperature dependent dynamic mechanical properties of hydrogenated nitrile butadiene rubber and the effect of peroxide cross-linkers. E-polymers. [Online ed., http://www.e-polymers.org], 2007, no. 131, str. 1-20. ŠEBENIK, Urška, KRAJNC, Matjaž. Influence of the soft segment length and content on the synthesis and properties of isocyanate-terminated urethane prepolymers. Int. j. adhes. adhes.. [Print ed.], 2007, vol. 27, no. 7, str. 527-535.				

LIKOZAR, Blaž, KRAJNC, Matjaž. Influence of morphology on the dynamic mechanical properties of hydrogenated acrylonitrile butadiene elastomer/coagent nanodispersions. *J. appl. polym. sci.*, 2008, vol. 110, no. 1, str. 183-195.

<http://www3.interscience.wiley.com/journal/112167949/issue>.

KRAJNC, Matjaž, ŠEBENIK, Urška. Poly(methyl methacrylate)/montmorillonite nanocomposites prepared by bulk polymerization and melt compounding. *Polym. compos.*, 2008, [article in press].

<http://www3.interscience.wiley.com/journal/121415986/abstract>.

1.

Ime predmeta: IZBRANA POGLAVJA IZ INŽENIRSTVA MATERIALOV				
Nosilec: prof. dr. Stane Pejovnik				
Izvajalci: prof. dr. Stane Pejovnik prof. dr. Danilo Suvorov doc. dr. Marjan Marinšek doc. dr. Klementina Zupan				
Št. ur: 150	Predavanj: 30	Seminarjev: 45	Lab. vaj:	Drugo: 75
<i>Opomba:</i> Ure se glede na potrebe vsakega študenta smiselno porazdelijo na predavanja, seminarske naloge, laboratorijske vaje in/ali individualno podajanje snovi. To se stori v dogovoru med študentom, nosilcem ter izvajalcem/izvajalci (če jih je več).				
Število KT: 5				
2. Pogoji za vključitev: Znanje splošnih kemijskih predmetov druge bolonjske stopnje in osnovno znanje s področja materialov.				
3. Izobraževalni cilji in predvideni študijski rezultati (predmetno – specifične kompetence): Razumevanje splošnih odvisnosti med strukturo in lastnostmi materialov. Poleg tega v okviru tega predmeta študent pridobi specialistična znanja z ožjega področja. Ta znanja zadostujejo za samostojno vodenje znanstvene raziskave na izbranem raziskovalnem področju.				
4. Vsebina predmeta: Študent skupaj z mentorjem izbere vsebine v obsegu 5 KT izmed spodaj navedenih glede na področje svojega raziskovalnega dela pa poglobi znanja z izborom ožje teme. Nosilec predmeta skladno z izbranimi vsebinami kooordinira izvajanje, če je izvajalcev več. Razumevanje splošnih odvisnosti med strukturo in lastnostmi materialov Poudarek je dan osnovam teorije mehanske lastnosti materialov, metodam mehanskega utrjevanja, plastičnosti polikristaliničnih materialov, lezenju in kinetiki faznih transformacij. Dodatna izbrana poglavja vključujejo znanja potrebna za razumevanje električnih, magnetnih in optičnih lastnosti materialov, biokeramike ter nanomaterialov in nanotehnologij. Načrtovanje materialov z določenimi lastnostmi Vsi primeri so obdelani na posebnih študijskih primerih. Od materialov so posebej obravnavani: jekla (ogljikova in zlitine), aluminij, keramika, steklo, polimerni kompoziti, keramični kompoziti, kompoziti s kovinsko matrico, napredni keramični materiali (LTCC, FGM..). Načrtovanje in izbor materialov ter procesov za njihovo pripravo. Obravnavane so lastnosti materialov, ki so izrazito pomembne za krojenje (dizajn)				

elementov in sklopov strukture, splošna metodologija izdelave konstrukcij, metodologija izbora materialov in kriteriji ter orodja za izbor materialov s posebnim poudarkom na obravnavi propada-korozije gradiv. Obravnavani so naslednji procesi za pripravo materialov: sinteza in določitev sestave ter lastnosti materialov, metode priprave prahov, načini oblikovanja, sušenje, sintranje; procesi za izboljšanje in krojenje lastnosti: termična, kemijska in mehanska obdelava. Vsi navedeni procesi so obravnavani na mikro in nano skali velikosti gradnikov (delcev, plasti, itd). Karakterizacija strukture in funkcionalnih lastnosti materialov. Študent izbere primere posebnih sodobnih fizikalnih in kemijskih sinteznih metod, ki jih obdelava v seminarski nalogi.

5. Temeljni študijski viri:

R. Askeland, The Science and Engineering of Materials, 4th Edition, 2003 Thompson Learning, ISBN-0-534-95373-5
P.L. Mangonon, The Principles of Materials Selection for Engineering Design, Prentice Hall, 1999, ISBN-0-13-242595-5
J.K.Wessel, Handbook of Advanced Materials Enabling New Designs, Whilley Interscience, 2004, ISBN-471-45475-3
P.R. Roberge, Mac Graw Hill, 2008, ISBN-978-0-07-148243-1

Študent bo poleg navedene literature uporabljal tudi najnovejša literaturo (monografije, članki) z izbranega študijskega področja.

6. Metode poučevanja in učenja:

Metode so prilagojene študentu oziroma skupini: predavanja, študij ustrezne strokovne literature, laboratorijsko delo na izbranem področju, seminar in razprave v ožji skupini.

7. Preverjanja znanja - obveznosti študenta (npr. ustni in/ali pisni izpit, seminar, projekt):

Način preverjanja znanja se dogovori individualno z vsakim študentom doktorskega študija in se lahko izvaja v obliki ustnega in/ali pisnega izpita, seminarja ali izdelave projekta oziroma pisanja znanstvenega članka.

8. Reference izvajalcev predmeta (3-5 referenc, relevantnih za predmet):

Stane Pejovnik

PEJOVNIK, Stane, SMOLEJ, Vito, SUŠNIK, Dimitrij, KOLAR Drago, Statistical Analysis of the Validity of Sintering Equations, Pow. Met. Int., 1979, vol. 11, , str. 22.
JAMNIK, Janez , MAIER, Joachim, PEJOVNIK, Stane, A Powerful Electrical Network Model for the Impedance of Mixed Conductors, Electrochim. Acta, 1999, vol. 44, str. 4139.
PEJOVNIK, Stane, DOMINKO, Robert, BELE, Marjan, GABERŠČEK, Miran, JAMNIK, Janko. Electrochemical binding and wiring in battery materials, J. power sources, 2008, vol. 184, no. 2, str. 593-597.

Danilo Suvorov

SUVOROV, Danilo, VALANT, Matjaž. Bi-based compounds for glass-free LTCC technology. Nippon Seramikkusu Kyäokai gakujutsu rombunshi, 2004, vol. 112, suppl. 112-1, str. S1557-S1562.
JANČAR, Boštjan, SUVOROV, Danilo. The influence of hydrothermal-reaction parameters on the formation of chrysotile nanotubes, Nanotechnology (Bristol), 2006, vol. 17, str. 25-29.
LOGAR, Manca, JANČAR, Boštjan, SUVOROV, Danilo, KOSTANJŠEK, Rok. In situ

synthesis of Ag nanoparticles in polyelectrolyte multilayers, *Nanotechnology* (Bristol), 2007, vol. 18, str. 325601-1-32506-7.

Marjan Marinšek

MARINŠEK, Marjan, ZUPAN, Klementina, MAČEK, Jadran. Ni-YSZ cermet anodes prepared by citrate/nitrate combustion synthesis, *J. power sources.*, 2002, vol. 106, no. 1/2, str. 178-188.

MARINŠEK, Marjan, PEJOVNIK, Stane, MAČEK, Jadran. Modelling of electrical properties of Ni-YSZ composites, *J. Eur. Ceram. Soc.*, 2007, vol. 27, no. 2/3, str. 959-964.

MARINŠEK, Marjan, PADEŽNIK GOMILŠEK, Jana, ARČON, Iztok, ČEH, Miran, KODRE, Alojz, MAČEK, Jadran. Structure development of NiO-YSZ oxide mixtures in simulated citrate-nitrate combustion synthesis, *J. Am. Ceram. Soc.*, 2007, vol. 90, no. 10, str. 3274-3281.

Klementina Zupan

MARINŠEK, Marjan, ZUPAN, Klementina, MAČEK, Jadran. Ni-YSZ cermet anodes prepared by citrate/nitrate combustion synthesis, *J. power sources.*, 2002, vol. 106, no. 1/2, str. 178-188.

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

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.*, 2004, vol. 24, no. 6, str. 1935-1939.

1.

Ime predmeta: IZBRANA POGLAVJA IZ MATERIALOV ZA ENERGETIKO IN VAROVANJE OKOLJA				
Nosilec: prof. dr. Jadran Maček				
Izvajalci: prof. dr. Jadran Maček prof. dr. Miran Gaberšček doc. dr. Marjan Marinšek doc. dr. Klementina Zupan				
Št. ur: 150	Predavanj: 30	Seminarjev: 45	Lab. vaj:	Drugo: 75
Opomba: Ure se glede na potrebe vsakega študenta smiselno porazdelijo na predavanja, seminarske naloge, laboratorijske vaje in/ali individualno podajanje snovi. To se stori v dogovoru med študentom, nosilcem ter izvajalcem/izvajalci (če jih je več).				
Število KT: 5				
2. Pogoji za vključitev: Znanje splošnih kemijskih predmetov druge bolonjske stopnje in osnovno predznanje s področja materialov.				
3. Izobraževalni cilji in predvideni študijski rezultati (predmetno – specifične kompetence): Seznanjanje materiali za sodobne aplikacije v energetiki in okoljevarstvu. V okviru tega predmeta študent pridobi specialistična znanja z ožjega področja. Ta znanja zadostujejo za samostojno vodenje znanstvene raziskave na izbranem raziskovalnem področju.				
4. Vsebina predmeta: Študent s soglasjem mentorja med spodaj navedenimi temami v izbere tiste, ki so najtesneje povezane z njegovim raziskovalnim delom. Nosilec predmeta in vodja študija poskrbita, da obseg študentovega dela ustreza 5 KT. Če je nosilec več, izvajanje koordinira nosilec. Materiali za sodobne energijske pretvornike Vodikova tehnologija: <ul style="list-style-type: none">• Tehnologije za pridobivanje vodika (predelava ogljikovodikov – parni reforming, WGSR, elektrolizni postopki, termokemijska disociacija vode, predelava biomase do vodika)• Shranjevanje in distribucija vodika (tlačni sistemi, kriogeni sistemi, shranjevanje vodika v obliki hidridov, CNT idr.; distribucija vodika, varnost vodikovih tehnologij), Gorivne celice: <ul style="list-style-type: none">• Vrste gorivnih celic in principi njihovega delovanja (specifika glede uporabljenega goriva in zahtev po njegovi čistosti, temperature delovanja, uporabljenih materialov, prenosa naboja v celici)• Materiali za elektrolit, elektrodi in vmesnik (zahtevane karakteristike za materiale v gorivnih celicah, elektrokatalizatorji)• Delovanje gorivnih celic njihov izkoristek in vplivi na okolje (aktivacijske, omske, koncentracijske in druge polarizacijske izgube, sistemi gorivnih celic in potrebna				

infrastruktura, izkoristki gorivnih celic, kogeneracija toplote v gorivnih celicah, vplivi na okolje pri neposredni pretvorbi kemijske energije v električno)

Li ionski in drugi akumulatorji:

- **Princip delovanja izbranih klasičnih in sodobnih insercijskih baterij in akumulatorjev** (shranjevanje naboja na površini oziroma v notranjosti strukture, homogena vgradnja ter vgradnja s faznimi prehodi, vpliv na termodinamske in kinetične lastnosti)
- **Materiali za anodo, elektrolit, in katodo** (grafitni materiali, litijeve zlitine, oksidni materiali, žveplova katoda, katoda z zračno depolarizacijo, tekoči elektroliti, polimerni elektroliti, elektroliti na osnovi ionskih tekočin)
- **Karakteristike najperspektivnejših akumulatorjev** (litijevi insercijski, litij zrak, polimerni, litij žveplo)

Superkondenzatorji:

- **Princip delovanja superkondenzatorja (fazna meja trdno-tekoče, električni dvosloj, termodinamika in kinetika tipičnega superkondenzatorja, vpliv poroznosti, vpliv površinskih skupin, razlika med kemijskim in elektrokemijskim shranjevanjem na površini)**
- **Materiali za anodo, elektrolit, in katodo** (grafitni materiali, tekoči elektroliti, polimerni elektroliti)
- **Karakterizacija, lastnosti in uporaba izbranih superkondenzatorjev**

Materiali in varovanje okolja (materiali za zmanjšanje emisij v okolje, odstranjevanje HOS – hlapnih organskih spojin (VOC – volatile organic compounds), razvoj katalitskih materialov in sistemov, življenska doba in vplivi različnih skupin materialov na okolje).

5. Temeljni študijski viri:

Najnovejša literatura (monografije, članki) z izbranega študijskega področja.

6. Metode poučevanja in učenja:

Metode so prilagojene študentu oziroma skupini: predavanja, študij ustrezne strokovne literature, laboratorijsko delo na izbranem področju, seminar in razprave v ožji skupini.

7. Preverjanja znanja - obveznosti študenta (npr. ustni in/ali pisni izpit, seminar, projekt):

Način preverjanja znanja se dogovori individualno z vsakim študentom doktorskega študija in se lahko izvaja v obliki ustnega in/ali pisnega izpita, seminarja ali izdelave projekta oziroma pisanja znanstvenega članka.

8. Reference izvajalcev predmeta (3-5 referenc, relevantnih za predmet):

J. Maček:

MAČEK, Jadran, NOVOSEL, Barbara, MARINŠEK, Marjan. Ni-YSZ SOFC anodes : minimization of carbon deposition. *J. Eur. Ceram. Soc.*, 2007, vol. 27, no. 2/3, str. 487-491.

MARINŠEK, Marjan, PADEŽNIK GOMILŠEK, Jana, ARČON, Iztok, ČEH, Miran, KODRE, Alojz, MAČEK, Jadran. Structure development of NiO-YSZ oxide mixtures in simulated citrate-nitrate combustion synthesis. *J. Am. Ceram. Soc.*, 2007, vol. 90, no. 10, str. 3274-3281.

RAZPOTNIK, Tanja, MAČEK, Jadran. Synthesis of nickel oxide/zirconia powders via a modified Pechini method. *J. Eur. Ceram. Soc.*, 2007, vol. 27, no. 2/3, str. 1405-1410.

Miran Gaberšček

GABERŠČEK, Miran, MOŠKON, Jože, ERJAVEC, Boštjan, DOMINKO, Robert, JAMNIK, Janko. The importance of interphase contacts in Li ion electrodes : the meaning of the high-frequency impedance arc. *Electrochem. solid-state lett.*, 2008, vol. 11, no. 10, str. A170-A174.

DOMINKO, Robert, CONTE, Donato Ercole, HANŽEL, Darko, GABERŠČEK, Miran, JAMNIK, Janko. Impact of synthesis conditions on the structure and performance of $\text{Li}_2\text{FeSiO}_4$. *J. power sources.*, 2008, vol. 178, no. 2, str. 842-847.

PEJOVNIK, Stane, DOMINKO, Robert, BELE, Marjan, GABERŠČEK, Miran, JAMNIK, Janko. Electrochemical binding and wiring in battery materials. *J. power sources.*, 2008, vol. 184, no. 2, str. 593-597.

Marjan Marinšek

MARINŠEK, Marjan, ZUPAN, Klementina, MAČEK, Jadran. Ni-YSZ cermet anodes prepared by citrate/nitrate combustion synthesis. *J. power sources.*, 2002, vol. 106, no. 1/2, str. 178-188.

MARINŠEK, Marjan, PEJOVNIK, Stane, MAČEK, Jadran. Modelling of electrical properties of Ni-YSZ composites. *J. Eur. Ceram. Soc.*, 2007, vol. 27, no. 2/3, str. 959-964.

MARINŠEK, Marjan, PADEŽNIK GOMILŠEK, Jana, ARČON, Iztok, ČEH, Miran, KODRE, Alojz, MAČEK, Jadran. Structure development of NiO-YSZ oxide mixtures in simulated citrate-nitrate combustion synthesis. *J. Am. Ceram. Soc.*, 2007, vol. 90, no. 10, str. 3274-3281.

Klementina Zupan

MARINŠEK, Marjan, ZUPAN, Klementina, MAČEK, Jadran. Ni-YSZ cermet anodes prepared by citrate/nitrate combustion synthesis. *J. power sources.*, 2002, vol. 106, no. 1/2, str. 178-188.

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

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.*, 2004, vol. 24, no. 6, str. 1935-1939.

1.

Ime predmeta: TVEGANJE PRI PREVOZU KEMIKALIJ				
Nosilec: prof. dr. Stojan Petelin				
Izvajalci: prof. dr. Stojan Petelin				
Št. ur: 150	Predavanj:	Seminarja: 60	Lab. vaj:	Drugo: 90
Število KT: 5				
2. Pogoji za vključitev: Predmet zahteva predznanje o kemijski procesni varnosti in nevarnih snoveh ter poznavanje osnovnih matematičnih orodij verjetnosti in statistike.				
3. Izobraževalni cilji in predvideni študijski rezultati (predmetno – specifične kompetence): Predvideti in nadzorovati tveganja povezana s transportom nevarnih snovi. Razumeti kvantitativno analizo tveganj pri prevozu nevarnih snovi, kako komunicirati cilje analize tveganj izkušenemu analitiku za področje tveganj in kako narediti primerno natančen izračun na osnovi razpoložljivih podatkov o tveganjih.				
4. Vsebina predmeta: <ul style="list-style-type: none">• Definicije osnovnih terminov analiz tveganj• Izvori podatkov specifičnih za nezgode, verjetnostne porazdelitve velikosti energij nezgod in pogojne verjetnosti za odpoved kontejnerja. Baze podatkov za pogostosti in frekvence nezgod tipe in velikosti nezgodnih energij verjetnosti za odpoved kontejnerjev in količine izupustov. Ocenjevanje zmanjšanje tveganja zaradi spremembe projekta kontejnerja• Metodologije za razvoj scenarijev nezgod, analiza frekvenc in posledic ter predstavitev tveganj.• Matematične formulacije za kvantitativno analizo tveganja• Metodologije analize tveganj in negotovosti podatkov.• Drevesa odpovedi za različne tipe analize transportnih tveganj.• Koraki kvalitativne analize tveganj od preliminarne analize do ocene alternativ za zmanjšanje tveganj.• Primer kvantitativne analize za različne transporte. Cevovod, tovornjak, vlak, trajekt, prekooceanka itd.				
5. Temeljni študijski viri: <ul style="list-style-type: none">• OECD/PIARC/EU: Transport of Dangerous Goods through road tunnels Quantitative Risk Assessment Model. Research Report, Reference Manual, INERIS, Paris, 2005.• Pons, P.: Transport of Dangerous Goods through Road Tunnels. Ineris, Paris, 2007.• Vose, D.: Risk analysis. A quantitative guide, John Wiley & Sons, 2004.• William R. Rhyne, Hazardous Materials Transportation Risk Analysis,				

Quantitative Approaches for Truck and Train, VAN NOSTRAND REINHOLD
An International Thomson Publishing Company, 1994.

- Michel Nicolet-Monnier, Adrian V. Gheorghe, Quantitative Risk Assessment of Hazardous Materials Transport Systems, Rail, Road, Pipeline and Ship, Kluwer Academic Publishers, 1996.
- Guidelines for Chemical Transportation Risk Analysis Center for Chemical Process Safety (CCPS), October 2005.
- Ben van den Horn ..., INTEGRATED APPROACH TO ROAD TUNNEL SAFETY, PIARC, 2007.
- Massimo Guarascio ..., RISK ANALYSIS FOR ROAD TUNNELS, PIARC , in print.
- Fuller, R., Santos, A. J.: Human Factors for Highway Engineers. Pergamom, 2002.

6. Metode poučevanja in učenja:

Predmet bo potekal na osnovi seminarskega dela in konzultacij s predavateljem/predavateljici.

7. Preverjanja znanja - obveznosti študenta (npr. ustni in/ali pisni izpit, seminar, projekt):

Študent bo izdelal seminarsko nalogo, ki jo bo javno predstavil in bo potem odgovarjal na vprašanja iz predelane snovi na osnovi katerih bo pokazal, da je osvojil ustrezno znanje iz materije predmeta.

8. Reference izvajalcev predmeta (3-5 referenc, relevantnih za predmet):

- KOŽUH, Mitja, PETELIN, Stojan, PERKOVIČ, Marko. Can classification societies with their rules on redundancy propulsion improve statistics on oil spills and cleaning costs?. *Mar. eng. (Tokyo)*, 2007, vol. 42, no. 3, str. 113-118.
- PETELIN, Stojan, MAVKO, Borut, KONČAR, Boštjan, HASSAN, Yassin A. Scaling of small-scale thermal-hydraulic transient to the real nuclear power plant. *Nucl. technol.*, 2007, vol. 158, no. 1, str. 56-68.
- VIDMAR, Peter, PETELIN, Stojan. Analiza požara pri prometni nezgodi = An analysis of a fire resulting from a traffic accident. *Stroj. vestn.*, 2003, letn. 49, št. 5, str. 254-266.
- VIDMAR, Peter, PETELIN, Stojan, ŠAVNIK, Peter. Prenos toplote in gibanja fluidov med požarom v cestnem predoru = Heat transfer and fluid movement during fire in the road tunnel. *Gradb. vestn.*, 2005, letn. 54, no. feb., str. 34-41.
- VIDMAR, Peter, PETELIN, Stojan. Analysis of the effect of an external fire on the safety operation of a power plant. *Fire saf. j.* [Print ed.], 2006, vol. 41, no. 6, str.486-490.
- VIDMAR, Peter, PETELIN, Stojan. Methodology of using CDF-based risk assessment in road tunnels. *Therm.sci.*, 2007, vol. 11, no. 2, str. 223-250.
- VIDMAR, Peter, PETELIN, Stojan. Possibility of fire accident analysis in road tunnels. *Promet (Zagreb)*, 2004, vol. 16, no. 6, str. 285-295.
- PERKOVIČ, Marko, DELGADO, L., HARSCH, Rick, DAVID, Matej, PETELIN, Stojan. The Lebanon case : toward more accurate oil spill modeling - learning from SAR imagery. *EUR (Luxemb.)*, 2006, december 2006, str. 79-87.
- VIDMAR, Peter, PETELIN, Stojan. Model požara ob prometni nesreči v bližini

jedrske elektrarne = Model of an accident-induced fire around a nuclear power plant.
Stroj. vestn., 2006, letn. 52, št. 6, str. 380-391

- VIDMAR, Peter, PETELIN, Stojan. The effect of tunnel slope in case of fire = Utjecaj nagiba tunela u slučaju požara. *Suvremeni promet*, 2006, vol. 26, no. 6, 11 str.