

**DOKTORSKI ŠTUDIJSKI PROGRAM KEMIJSKE ZNANOSTI,  
UNIVERZA V LJUBLJANI, FAKULTETA ZA KEMIJO IN KEMIJSKO TEHNOLOGIJO**

**Predstavitev študijskega programa:****1. Podatki o študijskem programu:**

- Tretjestopenjski univerzitetni študijski program **KEMIJSKE ZNANOSTI** traja 3 leta (6 semestrov) in obsega skupaj 180 kreditnih točk.
- Študij ima tri smeri: *kemija*, *biokemija* in *kemijsko inženirstvo*.
- Znanstveni naslov, ki ga pridobi doktorand je *doktor/doktorica znanosti*.

**2. Temeljni cilji programa in splošne kompetence**

**Temeljni cilj** doktorskega študijskega programa Kemijske znanosti je usposobiti strokovnjake, ki bodo imeli kompetence, primerne za zaposlitev na raziskovalno usmerjenih, tudi vodilnih, delovnih mestih v kemijski in sorodnih industrijah in javnih službah ali za nadaljevanje raziskovalne kariere v akademskem okolju.

Študenti, ki bodo uspešno končali izobraževanje po predlaganem programu bodo pridobili predvsem naslednje **splošne kompetence** in veščine:

- sposobnost kritične analize, vrednotenja in sinteze novih in kompleksnih idej;
- sposobnost komuniciranja o svojem ekspertnem področju s kolegi, z večjimi strokovnimi skupinami, kot tudi širšo javnostjo;
- sposobnost promocije znanstvenega in tehnološkega napredka na akademski in aplikativni ravni v na znanju temelječi družbi.

**3. Pogoji za vpis in merila za izbiro ob omejitvi vpisa**

Način izvajanja doktorskega študija je izredni.

Pogoji za vpis:

1. Na doktorski študij Kemijskih znanosti se lahko vpiše, kdor je končal:

- a) študijski program 2. stopnje;
  - b) študijski program, ki izobražuje za poklice, urejene z direktivami EU, ali drugi enoviti magistrski študijski program, ki je ovrednoten s 300 kreditnimi točkami po ECTS;
  - c) univerzitetni dodiplomski program, sprejet pred 11. 6. 2004;
  - d) študijski program za pridobitev magisterija znanosti (kandidatom se priznajo študijske obveznosti v obsegu do 60 kreditnih točk po ECTS, o priznavanju odloča senat FKKT oziroma organ, ki ga ta imenuje);
  - e) študijski program za pridobitev specializacije, ki je pred tem končal visokošolski strokovni program, pri čemer se mu lahko določi individualni premostitveni program v obsegu od 10 do 60 kreditnih točk po ECTS, o čemer odloča senat UL FKKT oziroma organ, ki ga ta imenuje;
  - f) študijski program na drugih domačih ali tujih univerzah v skladu s predpisanimi pogoji kot veljajo za študente RS. Enakovrednost predhodno pridobljene izobrazbe v tujini se ugotavlja v postopku priznavanja tujega izobraževanja za nadaljevanje izobraževanja skladno s 121. členom Statuta UL.
- Pogoj za vpis je soglasje mentorja.

Seznam potencialnih mentorjev je objavljen na spletni strani fakultete <http://www.fkkt.uni-lj.si/sl/studij/bolonjski-studijski-program-3-stopnje/>

Podatke o raziskovalnem delu fakultete najdete na spletni strani <http://www.fkkt.uni-lj.si/sl/raziskovalno-delo/>

Izbor kandidatov ob omejitvi vpisa bo temeljil na:

1. povprečni oceni izpitov in vaj (brez diplome) na dosedanjem študijskem programu za pridobitev univerzitetne izobrazbe ali študijskem programu 2. stopnje (75%),
2. oceni diplomske naloge ali magistrske naloge 2. stopnje (25%).

V primeru omejitve vpisa bodo izbrani kandidati z večjim skupnim številom zbranih točk.

#### **4. Merila za priznavanje znanj in spretnosti, pridobljenih pred vpisom v program**

Znanja in spretnosti, pridobljene s formalnim, neformalnim ali izkustvenim učenjem pred vpisom v program, se bodo skladno z 9. členom Meril za akreditacijo študijskih programov, priznavale pri izbiri ob omejitvi vpisa. O priznavanju znanj in spretnosti, ki jih je kandidat pridobil pred vpisom v program, odloča o priznavanju odloča senat FKKT oziroma organ, ki ta ga imenuje.

Pri priznavanju tovrstnih znanj in spretnosti se upoštevajo:

- strokovna specializacija,
- druga diploma visokošolskega zavoda,
- dosedanje znanstveno raziskovalno delo,
- objavljena znanstvena dela in
- strokovna izpopolnjevanja.

#### **5. Pogoji za napredovanje po programu**

Za vpis v drugi letnik mora imeti kandidat zbranih vsaj 45 kreditnih točk med katerimi mora biti 5 KT iz obveznega predmeta in 5 KT iz izbirnih predmetov ter opravljena uspešna predstavitev raziskovalnih izhodišč za doktorsko disertacijo.

V 3. letnik podiplomskega doktorskega študija se lahko vpišejo kandidati, ki so opravili vse študijske obveznosti organiziranih oblik študija iz 1. in 2. letnika in imajo odobreno temo doktorske disertacije..

#### **6. Pogoji za dokončanje študija**

Za dokončanje študija mora študent opraviti vse s programom določene študijske obveznosti in izdelati ter uspešno zagovarjati doktorsko disertacijo skladno z določili Pravilnika o doktorskem delu, ki ga sprejme Senat Fakultete za kemijo in kemijsko tehnologijo Univerze v Ljubljani. Pred sprejetjem ocene na Senatu UL FKKT mora kandidat kot prvi avtor objaviti članek s področja svoje disertacije v mednarodni znanstveni literaturi.

#### **7. Prehodi med študijskimi programi**

S prehodom se razume prenehanje študentovega izobraževanja v študijskem programu, v katerega se je vpisal, ter nadaljevanje izobraževanja v doktorskem študijskem Kemijske znanosti. Za prehod se ne šteje vpis v prvi letnik. O prehodih skladno z določili Statuta UL in Meril za prehode med študijskimi programi individualno odloča Senat UL FKKT oziroma organ, ki ga Senat za to določi.

#### **8. Načini ocenjevanja**

Oblike preverjanja znanja so opredeljene v učnih načrtih predmetov. Postopek preverjanja in ocenjevanja znanja ureja Izpitni pravilnik Fakultete za kemijo in kemijsko tehnologijo Univerze v Ljubljani, ki ga sprejme Senat Fakultete za kemijo in kemijsko tehnologijo Univerze v Ljubljani. Pri ocenjevanju se uporablja ocenjevalna lestvica skladno s Statutom Univerze v Ljubljani.

## 9. Predmetnik študijskega programa s predvidenimi nosilci predmetov

Doktorski študijski program Kemijske znanosti traja tri leta in obsega 180 kreditnih točk. Študijske obveznosti programa so v skladu s 36. in 37. členom Zakona o visokem šolstvu in Merili za akreditacijo visokošolskih zavodov in študijskih programov, ki jih je sprejel Svet RS za visoko šolstvo, ovrednotene po Evropskem prenosnem kreditnem sistemu (ECTS – European Credit Transfer System). S tem je omogočena direktna vključitev v mednarodno izmenjavo študentov v državah, ki sistem ECTS uporabljajo.

Ena KT v programu pomeni 30 ur študentovega dela.

Smer študija in področje doktorata sta določena z vsebino študentovega raziskovalnega dela, ki sta ji prilagojena tudi izbor izbirnih predmetov in vsebina drugih študijskih oblik.

Študijski program je sestavljen iz organiziranih oblik študija v obsegu 60 kreditnih točk, preostalih 120 kreditnih točk pa je namenjenih individualnemu raziskovalnemu delu za doktorsko disertacijo. Razdelitev po letnikih je naslednja:

- v prvem letniku 40 KT organiziranih oblik študija in 20 KT raziskovalnega dela,
- v drugem letniku 15 KT organiziranih oblik študija in 45 KT raziskovalnega dela in
- v tretjem letniku 5 KT organiziranih oblik študija in 55 KT raziskovalnega dela.

Organizirane oblike študija so naslednje:

- **javna predstavitev raziskovalnih izhodišč za doktorsko disertacijo**, ki je ovrednotene s 5 KT in jo mora študent opraviti pred vpisom v drugi letnik;
- **pridobitev soglasja za temo doktorske disertacije**, ki je ovrednoteno s 5 KT, tema pa mora biti odobrena pred vpisom v tretji letnik;
- **priprava in uspešen zagovor doktorske disertacije**, kar je ovrednoteno s 5 KT;
- **obvezna aktivna udeležba na organiziranih vabljenih predavanjih**; študent se mora udeležiti 10 organiziranih predavanj na leto, ki bodo tematsko uravnotežena in vsebinsko izbrana tako, da bodo povezana z raziskovalnimi problemi doktorskih študentov, njihova zahtevnost pa bo na nivoju, ki bo omogočal razumevanje študentom vseh treh smeri; aktivno udeležbo (tudi s postavljanjem vprašanj in razpravljanjem) bodo študenti prvega in drugega letnika za pet od desetih predavanj letno (izbiri bo potrdil mentor) dopolnili s poročilom o predavanju in pregledom literature na obravnavano temo ter povezavo z lastnim raziskovalnim delom; poročila pregleda in odobri mentor; udeležba na 10 predavanjih in izdelava 5 poročil v študijskem letu je v prvem in drugem letniku ovrednotena z 10 KT na letnik (skupno v dveh letnikih 20 KT za aktivno udeležbo na 20 predavanjih in izdelavo 10 poročil s pregledom literature); študent se bo tako seznanil z najnovejšimi raziskavami na različnih poročjih, pri pripravi poročila bo poglobil svoje znanje predvsem na področju problematike svojega raziskovalnega dela in dopolnil znanje na drugih področjih;
- **uvajalni seminar**, ki ga študent opravi v raziskovalni skupini mentorja in obsega 5 KT ter ob aktivni udeležbi mentorja obsega **uvajanje v zahtevno eksperimentalno** delo, posredovanje potrebnih teoretskih osnov in konkretizacijo metod karakterizacije na lastnih vzorcih ter po potrebi druge dejavnosti, ki so potrebne za uspešen začetek raziskovalnega dela na področju disertacije;
- **strokovno izpopolnjevanje**, ki obsega največ 5 KT in se študentu v ustreznem obsegu prizna za delo v tujem raziskovalnem okolju (5 KT ustreza enomesečnemu delu), ki lahko vključuje tudi teoretske podlage za metode in tehnike oz. raziskovalno delo po predhodno individualno pripravljene programu, in/ali udeležbo na poletnih šolah (število KT ustrežno obsegu šole) in/ali pedagoško delo (število KT ustrežno obsegu pedagoškega dela);
- **obvezni predmet Pisanje znanstvenih in strokovnih besedil**, ovrednoten s 5 KT;

- **izbirni predmeti**, ki so opisani v nadaljevanju.

Struktura programa z zgoraj opisanimi oblikami študija in kreditnimi točkami je prikazana v spodnji preglednici.

1. letnik		Kontaktne ure						Samost delo št.	ECTS	Ure skupaj
		P	S	SV	LV	TD	DO			
1	Pisanje znanstvenih in strokovnih besedil	30					90	30	5	150
2	Uvajalni seminar						75	75	5	150
3	Aktivna udeležba na organiziranih vabljenih predavanjih						150	150	10	300
4	Strokovno izpopolnjevanje						75	75	5	150
5	*Izpolnjevanje pogojev (predstavitev raziskovalnih izhodišč)						75	75	5	150
6	Izbirni predmet 1	i	i					75	5	150
7	Izbirni predmet 2	i	i					75	5	150
8	Raziskovalno delo						300	300	20	600
<b>Skupaj 1. letnik</b>		<b>30+i</b>	<b>i</b>				<b>765</b>	<b>855</b>	<b>60</b>	<b>1800</b>

2. letnik		Kontaktne ure						Samost delo št.	ECTS	Ure skupaj
		P	S	SV	LV	TD	DO			
9	Aktivna udeležba na organiziranih vabljenih predavanjih						150	150	10	300
10	*Izpolnjevanje pogojev (odobrena tema doktorske disertacije)						75	75	5	150
11	Raziskovalno delo						675	675	45	1350
<b>Skupaj 2. letnik</b>							<b>900</b>	<b>900</b>	<b>60</b>	<b>1800</b>

3. letnik		Kontaktne ure						Samost delo št.	ECTS	Ure skupaj
		P	S	SV	LV	TD	DO			
12	Raziskovalno delo						825	825	55	1650
13	*Izpolnjevanje pogojev (zagovor doktorske disertacije)						75	75	5	150
<b>Skupaj 3. letnik</b>							<b>900</b>	<b>900</b>	<b>60</b>	<b>1800</b>
<b>Skupaj vsi trije letniki</b>		<b>30+i</b>					<b>2565</b>	<b>2655</b>	<b>180</b>	<b>5400</b>

Izbirnih predmetov je 24. Vsi obsegajo po 5 KT, študenti pa poleg navedenih predmetov lahko v dogovoru z mentorjem izberejo 5 KT izbirnih vsebin iz drugih, praviloma doktorskih programov UL, primerljivih programov tujih univerz in iz predmetov, ki jih razpisuje Univerza v Ljubljani in omogočajo osvajanje posebnih znanj in spretnosti.

Spodaj navedeni izbirni predmeti so zasnovani tako, da vsebinsko omogočajo prilagajanje najnovejšim dosežkom znanosti na določenem področju in prilagoditev potrebam posameznih kandidatov (tudi študentom drugih programov, če bodo te premete vpisali). To je doseženo z modularno zgradbo predmetov in večjim številom izvajalcev, ki se bodo v izvajanje vključili glede na potrebe vpisanih študentov, delo pa bosta koordinirala nosilec, ki bo poskrbel tudi za enoten izpit, in vodja študija.

Izbirni predmeti praviloma obsegajo 15-30 ur predavanj in 45-60 ur seminarskega oziroma projektnega dela, razlika do 150 ur (5 KT) predstavljajo druge oblike študija in individualno delo študenta.

### Seznam predmetov z nosilci:

#### Obvezni predmet

1. Pisanje znanstvenih in strokovnih besedil (prof. dr. Matija Strlič)

#### Izbirni predmeti

1. Izbrana poglavja iz anorganske kemije (prof. dr. Iztok Turel)
2. Sodobne metode sinteze v anorganski kemiji (doc. dr. Barbara Modec)
3. Sodobne difrakcijske tehnike (prof. dr. Anton Meden)
4. Nova področja v analizni kemiji (prof. dr. Helena Prosen)
5. Pristopi v sodobni analizni kemiji (prof. dr. Matevž Pompe)
6. Izbrana poglavja iz eksperimentalne fizikalne kemije (prof. dr. Marija Bešter Rogač)
7. Teoretične metode v fizikalni kemiji (prof. dr. Barbara Hribar Lee)
8. Izbrana poglavja iz organske kemije (prof. dr. Janez Košmrlj)
9. Izbrana poglavja iz heterociklične kemije (prof. dr. Jurij Svete)
10. Študij mehanizmov transformacij organskih spojin (izr. prof. dr. Janez Cerkovnik)
11. Sodobni NMR pristopi v karakterizaciji spojin (prof. dr. Janez Plavec)
12. Izbrana poglavja iz biokemije (prof. dr. Brigita Lenarčič)
13. Moderne metode in tehnike v biokemiji (izr. prof. dr. Marko Dolinar)
14. Sodobne računalniške metode v biokemiji (izr. prof. dr. Marko Novinec)
15. Biološka zdravila (doc. dr. Gregor Gunčar)
16. Izbrana poglavja iz materialov za energetiko (doc. dr. Boštjan Genorio)
17. Izbrana poglavja iz polimernega inženirstva (prof. dr. Urška Šebenik)
18. Izbrana poglavja iz separacijskih procesov (izr. prof. dr. Aleš Podgornik)
19. Izbrana poglavja iz reoloških lastnosti in strukture kompleksnih tekočin (prof. dr. Igor Plazl)
20. Izbrana poglavja iz kemijskega reakcijskega inženirstva (prof. dr. Matjaž Krajnc)
21. Izbrana poglavja iz okoljskega inženirstva (izr. prof. dr. Andreja Žgajnar Gotvajn)
22. Izbrana poglavja iz transportnih pojavov (prof. dr. Igor Plazl)
23. Izbrana poglavja iz bioprocenega inženirstva (prof. dr. Polona Žnidaršič Plazl)
24. Izbrana poglavja iz inženirstva materialov (izr. prof. dr. Marjan Marinšek)

\*Študent v času študija lahko izbere za 10 ECTS izbirnih predmetov.

### 10. Podatki o možnostih izbirnih predmetov in mobilnosti

Zaradi mobilnosti ima študent možnost, da 5 kreditnih točk iz izbirnih enot programa prenese iz enega študijskega programa v drugega (6. čl. Meril za kreditno vrednotenje).

Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo s sklepom senata določi postopke za priznavanje kreditnih točk, pridobljenih v drugih študijskih programih na istem ali drugih visokošolskih zavodih.

**11. Predstavitev posameznih predmetov****Obvezni predmet****PISANJE ZNANSTVENIH IN STROKOVNIH BESEDIL****Cilji**

Predmet uvaja študente v pisanje znanstvenih in strokovnih besedil, s katerimi se srečujejo pri svojem študiju in raziskovalnem delu. Študent se seznani z različnimi načini komuniciranja v znanosti ter razvija znanja potrebna za uspešno izražanje in posredovanje svojih idej.

**Vsebina predmeta**

Značilnosti znanstvenih in strokovnih besedil (preciznost, preglednost, konsistentnost, koherentnost, primernost, verodostojnost). Določitev namena pisanja.

Kako definirati problem, o katerem pišemo. Prilagoditi pisanje ciljnemu bralcu. Struktura znanstvenih in tehničnih besedil. Različni tipi besedil (poročila, znanstveni članki, pregledni članki, predlogi projektov, presentacije, poljudni članki, disertacija, življenjepis, ...). Kako napisati predlog projekta. Ustno podajanje. Elementi tehničnih besedil.

**Izbirni predmeti****IZBRANA POGlavJA IZ ANORGANSKE KEMIJE****Cilji**

Študent pridobi pogolobljeno 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.

**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 izvajalec več, izvajanje koordinira nosilec.

**Priprava in uporaba spojin kovinskih elementov:**

*Priprava spojin elementov, ki imajo praktične aplikacije.* Sistematičen pregled sinteznih principov za pripravo spojin in metod njihove karakterizacije.

Poglobljen pregled izbranih primerov sodobnih uporab: modelne koordinacijske spojine (zaščita lesa; modeli encimov, ipd.), fotosenzitivne rutenijeve spojine v Graetzlovih celicah, fluorescenčne kovinske spojine in uporaba v analitiki, spojine zlata in nanotehnologija, elektrodni materiali.

Pregled nekaterih najuspešnejših kovinskih katalizatorjev, ki se uporabljajo tudi v industriji (Noyori, Grubbs, Heck, itd.). Mehanizmi delovanja.

*Biološko aktivni kompleksi.* 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 delovanja 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).

## **SODOBNE METODE SINTEZE V ANORGANSKI KEMIJI**

### **Cilji**

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.

### **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. 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.

## **SODOBNE DIFRAKCIJSKE TEHNIKE**

### **Cilji**

Študenti spoznajo teoretične osnove in se naučijo praktično uporabljati nove zahtevne tehnike difrakcijske analize za različne vidike karakterizacije trdnih snovi.

### **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.

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

## **NOVA PODROČJA V ANALIZNI KEMIJI**

### **Cilji**

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.

### **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.

- *Metodologija in aplikacije najnovjših spektroskopskih metod v analizni kemiji*. Problematika uvajanja plinastih, tekočih in trdih vzorcev 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).

- *Sklopitve GC-MS, HPLC-MS in HPLC-ICP-MS*.

- *Elektroanalizne tehnike* (voltametrij 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*: principi, 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).

## **PRISTOPI V SODOBNI ANALIZNI KEMIJI**

### **Cilji**

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.

### **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 nosilec več, izvajanje koordinira nosilec.

- Napredne kemometrične metode v analizni kemiji.

- Specijacijska analitika; načini priprave vzorca in izbira primerne analize tehnike.

- Miniaturizacija v analizni kemiji: koncept laboratorija na čipu, celoviti mikroanalizni sistemi (mTAS), izdelovalne tehnike za mTAS 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 prehrabnenih produktov; separacija in karakterizacija sestavin živil.

- Reševanje analiznih problemov v biomedicinskih in bioloških vedah, zaščiti okolja, varovanju kulturne dediščine in industriji.

## **IZBRANA POGlavJA IZ EKSPERIMENTALNE FIZIKALNE KEMIJE**

### **Cilji**

V okviru tega predmeta študent pridobi specialistična znanja z ožjega področja. Ta znanja zadostujejo za samostojno vodenje znanstvene raziskave na izbranem raziskovalnem področju.

### **Vsebina predmeta**

Študent skupaj z mentorjem izbere vsebine v obsegu 5 KT izmed spodaj navedenih, nosilec predmeta skladno z izbranimi vsebinami koordinira izvajanje, če je izvajalcev več.

- *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.

- *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.



- *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.
- *Termodinamske raziskave asociacijskih procesov v raztopinah.* Asociacija ionov v raztopinah elektrolitov. Termodinamika micelizacije ionskih in neionskih površinsko aktivnih snovi (izotermna titracijska kalorimetrija, 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.

## TEORETIČNE METODE V FIZIKALNI KEMIJI

### Cilji

Naloga statistične termodinamike je, da iz podatkov o lastnostih atomov in molekul ter sil med njimi izpelje makroskopske lastnosti snovi. Drugače povedano, veda omogoča interpretacijo merskih rezultatov na molekularnem nivoju.

### Vsebina predmeta

Študent skupaj z mentorjem, izmed spodaj navedenih, izbere vsebine v obsegu 5 KT. Če je izvajalec več, nosilec predmeta skladno z izbranimi vsebinami kooordinira izvajanje.

- *Potencialne teorije.* Osnove, 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 integralna enačba v različnih približkih. Razvoj po multipolih za molekularne sisteme. Wertheimova integralna enačba za sisteme z usmerjenimi silami.
- *Simulacijske metode.* Metoda Monte Carlo v generaliziranem ansamblu. Uporaba adhezivnega (impulznega) potenciala za modeliranje privlačnih koloidov. Dinamika molekul. Polje sil. Molekulska prileganje (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, multi-konfiguracijska interakcija, metoda sklopljenih skupkov. Teorija gostotnih funkcionalov (DFT): Kohn-Shamove enačbe, Hohenberg-Kohnova teorema, lokalni približek, globalni približek. Metode kvantne dinamike in mehanike.
- *Kemijska kinetika.* Hitrost kemijskih reakcij v raztopinah. Vpliv ionskih reaktantov. Kataliza.

## IZBRANA POGlavJA IZ ORGANSKE KEMIJE

### Cilji

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.

### 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.

- *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.

Mitsunobijeve reakcije. Biokemijske karakteristike diazenov. 'Klik' kemija: 1,2,3-triazol, triazolijeve soli, triazolilidni, ligandi in kataliza. (prof. dr. Janez Košmrlj)

- *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*. Uporaba katalize s kovinami prehoda v organski sintezi. Načrtovanje kovinskih katalizatorjev. Katalizirane kaskadne reakcije. Selektivna tvorba enojne in dvojne C-C vezi katalizirana s kovinami prehoda. Reakcije spajanja: Heck, Suzuki, Negishi, Still, Sonogashira. Aktivacija inertnih C-H vezi. Selektivna funkcionalizacija C-H vezi s pomočjo uporabe usmerjajočih skupin. Uporaba rutenijevih katalizatorjev v selektivni tvorbi enojne C(sp<sup>2</sup>)-C(sp<sup>2</sup>) in C(sp<sup>2</sup>)-C(sp<sup>3</sup>) vezi. Kovinski alkilidenski (karbenski) kompleksi in tvorba C=C dvojne vezi. Križna metateza in metateza z zapiranjem obroča na alkenih in alkinih. Tvorba C-H vezi. Asimetrična redukcija ketonov. Sinteza in selektivnost 1,3-diketo-BF<sub>2</sub> kompleksov. (doc. dr. Franc Požgan, doc. dr. Bogdan Štefane).

## IZBRANA POGlavJA IZ HETEROCIKLIČNE KEMIJE

### Cilji

Poglobljeno poznavanje izbranih področij organske kemije. Kandidat se seznanja z modernimi metodami organske in heterociklične kemije, kar ga usposobi za samostojno reševanje problemov iz tega področja dejavnosti.

### Vsebina predmeta

Študent s soglasjem mentorja med spodaj navedenimi temami v izbere tiste, ki so najrelevantnejše za njegovo raziskovalno delo. Nosilec predmeta in vodja študija poskrbita, da obseg študentovega dela ustreza 5 KT. Če je izvajalec več, izvajanje koordinira nosilec.

- *Sinteza in uporaba heterociklov v stereoselektivni organokatalizi*. 5- in 6-členski heterocikli in njihovi kondenzirani analogi kot pomembna skupina katalizatorjev v asimetrični organokatalizi. Sinteze N-heterocikličnih karbenov (NHC-jev), derivatov prolina in imidazolidinonov ter njihova uporaba v stereoselektivnih pretvorbah z ustreznimi katalitski cikli/načini aktivacije substrata. (U. Grošelj)

- *Diels–Alderjeva reakcija kot temeljna metoda tvorbe novih C–C vezi v heterociklični kemiji*. Uporaba alkenov (maleimidi, maleinanhidrid itd.) in alkinov kot dienofilov ter heterocikličnih sistemov (furani, tiofeni, 2H-piran-2-oni, 2-piridoni, kumarini itd.) kot dienov v Diels–Alderjevih reakcijah. Sinteze heterocikličnih sistemov s pomočjo cikloadicij: (benzo)izindoli, indoli, oksabicyclo[2.2.2]okteni, dianhidridi bicyclo[2.2.2]okt-7-en tetrakarboksilnih kislin itd. in s tem povezana vprašanja regio- ter stereoselektivnosti. Priprava pomembnih spojin: derivati taksola, boskalida, talidomida itd.

Izboljšanje tovrstnih sintez z uporabo sodobnih pristopov: uporaba mikrovalov, visokih tlakov (do 18 kbar), vode idr. neškodljivih topil itd. (K. Kranjc)

- *Moderni pristopi v sintezi heterocikličnih spojin*. Heterociklizacije, transformacije obročev, molekulske premestitve, regio- in stereoselektivne ciklizacije, sinteza nasičenih sistemov. Modularni pristop k sintezi obročnih sistemov. Sintezni gradniki za pripravo heterociklov, modularni pristop k načrtovanju sinteze obročev, kontrola kemo-, regio- in stereoselektivnosti. Sinteza funkcionaliziranih heterociklov: sinteza s funkcionalizacijo obroča, sinteza s funkcionalizacijo gradnikov. Kombinatorna sinteza heterociklov. Sinteze in pretvorbe alkil 3-(dimetilamino)propenoatov in sorodnih enamionov; od heterociklov do naravnih spojin. Reakcije z nukleofili in elektrofilni, cikloadicije. Aplikacije v sintezi heterocikličnih sistemov, funkcionaliziranih heterociklov, in sintezi naravnih spojin in njihovih analogov. (J. Svete)

**ŠTUDIJ MEHANIZMOV TRANSFORMACIJ ORGANSKIH SPOJIN****Cilji**

Poglabljeno poznavanje izbranih področij organske kemije. Kandidat se seznani z modernimi metodami organske kemije, kar ga usposobi za samostojno reševanje problemov iz tega področja dejavnosti.

**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 izvajalcev več, izvajanje koordinira nosilec.

- *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 zaznavanje, 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 ( $^1O_2$ ) in tripletnim ( $^3O_2$ ) 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.

**SODOBNI NMR PRISTOPI V KARAKTERIZACIJI SPOJIN****Cilji**

Študent teoretično in praktično spozna sodobne tehnike nuklearne magnetne resonance in njihovo uporabnost za reševanje znanstvenih problemov (praviloma) povezanih z njegovim lastnim raziskovalnim delom.

**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.

## **IZBRANA POGlavJA IZ BIOKEMIJE**

### **Cilji**

Podiplomski študenti bodo dobili pregled nad literaturo, znali bodo kritično ovrednotiti informacije in jih uporabiti za načrtovanje in ovrednotenje lastnega dela.

Po navodilih projektne razpisne dokumentacije bodo znali napisati ustrezen projekt. Znali bodo opisati ozadje raziskave, precizno formulirati hipoteze oz. namen dela, vključiti najbolj napredne tehnike in metode dela ter vse oblikovati v smiseln projekt.

### **Vsebina predmeta**

Uvod v vsebinske sklope (predavanja). Preostali del predmeta se bo osredotočal na pripravo raziskovalnega projekta, ki bo obravnaval temo, relevantno za raziskovalno delo študenta in bo iz področja biokemije. Iskanje ustreznih razpisov.

## **MODERNE METODE IN TEHNIKE V BIOKEMIJI**

### **Cilji**

Podiplomski študenti se bodo naučili spremljati razvoj novih metod in tehnik v biokemiji, kritično ocenjevati prednosti in slabosti izboljšav in uporabnost novih metod.

### **Vsebina predmeta**

- 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 (individualno delo in seminar)

## **SODOBNE RAČUNALNIŠKE METODE V BIOKEMIJI**

### **Cilji**

Študenti bodo spoznali sodobne računalniške metode za analizo biokemijskih podatkov in bodo znali te metode uporabiti pri svojem raziskovalnem delu.

### **Vsebina predmeta**

Predmet obravnava sodobne metode in pristope za računalniško analizo proteinov, nukleinskih kislin, molekularne evolucije in interakcij med biološkimi molekulami. Vključene so tako metode za bioinformatično analizo baz podatkov kot metode za analizo eksperimentalnih podatkov. Poudarek je zlasti na najsodobnejših in naprednih metodah, ki so bile razvite v zadnjih letih oz. se še intenzivno razvijajo in zato še niso vključene v učbenike ali v predmetnike nižjih stopenj. Študenti bodo spoznali teoretične podlage metod, preko individualnega projektne dela pa tudi njihovo uporabo.

## **BIOLOŠKA ZDRAVILA**

### **Cilji**

Študenti dobijo pregled področja bioloških zdravil, njihove identifikacije, razvoja, proizvodnje, delovanja, optimizacije in uporabe.

### **Vsebina predmeta**

- Uvod v biološka zdravila
- Razvoj bioloških zdravil
- Identifikacija tarčnih proteinov in genov in bioinformatične metode za njihovo analizo. Vloga genomike, proteomike in metabolomike.
- Biotehnološke metode za proizvodnjo rekombinantnih proteinov v velikih količinah
- Terapevtske in klinične aplikacije bioloških zdravil
- Protitelesa, rastni faktorji, koagulacijski faktorji, citokini, interferoni, hormoni, encimi, DNK, RNK, vakcine in druga biološka zdravila.
- 3D strukture bioloških zdravil

- Biološko podobna zdravila
- Napredni načini dostave zdravil
- Genska in celična terapija
- Klinična evalvacija in regulacija
- Prihodnost bioloških zdravil

Projektni seminar: Moje doktorsko raziskovalno delo v kontekstu bioloških zdravil.

## IZBRANA POGlavJA IZ MATERIALOV ZA ENERGETIKO

### Cilji

Seznanjanje z materiali za sodobne aplikacije v energetiki in okoljevarstvu. Podiplomski študenti bodo preučili dostopno strokovno in znanstveno literaturo iz izbranega področja in jo kritično ovrednotili. V okviru tega predmeta študent pridobi specialistična znanja z ožjega področja. Ta znanja zadostujejo za samostojno vodenje znanstvene raziskave na izbranem raziskovalnem področju.

### 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:*

- Tehnologije za pridobivanje vodika (predelava ogljikovodikov – parni reforming, WGS, 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:*

- 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, žveplove 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).

Seminar iz izbranega področja materialov za energetiko, ki temelji na pregledu strokovne in znanstvene literature.

Izdelava predloga raziskovalnega projekta za inženirstvo specifičnega materiala za energetiko.

### **IZBRANA POGLAVJA IZ POLIMERNEGA INŽENIRSTVA**

#### **Cilji**

Podiplomski študenti bodo osvojili poglobljena znanja iz specifičnega področja polimerne 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.

#### **Vsebina predmeta**

- pregled vsebinskih področij polimerne inženirstva s poudarkom na polimernem reakcijskem inženirstvu ter fenomenološki obravnavi viskoelastičnosti polimernih materialov (predavanja);
- seminar iz izbranega področja polimerne 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.

### **IZBRANA POGLAVJA IZ SEPARACIJSKIH PROCESOV**

#### **Cilji**

Podiplomski študentje bodo nadgradili temeljna inženirska znanja iz prenosa snovi, termodinamike, masno-toplotnih bilanc in separacijskih operacij ter jih povezali v analizo oziroma načrtovanje zahtevnejših separacijskih procesov, ki vključujejo več korakov. Poseben poudarek bo na farmacevtskih in biotehnoških procesih, zato bodo spoznali specifične te sistemov ter njihov prenos v laboratorijskega v industrijsko merilo ter iz šaržnega na kontinuirni način.

#### **Vsebina predmeta**

- Separacijske operacije v kemijskih, farmacevtskih in biotehnoških procesih;
- Masne in toplotne bilance zahtevnejših procesov s poudarkom na metabolizmu;
- Termodinamika neidealnih sistemov tekoče-tekoče ter tekoče-trdno;
- Vloga laboratorijskih raziskav in načrtovanje pilotskih enot – povečevalni kriteriji;
- Poglavja iz izbranih separacijskih procesov farmacevtskih in biotehnoških učinkovin:
  - kristalizacija in precipitacija
  - dvofazna vodna ekstrakcija
  - gradientna kromatografija
  - preparativna kromatografija
  - kontinuirni separacijski procesi - simuliran gibljivi sloj (SMB)
  - Membranski procesi
- Optimizacija separacijskih procesov z več koraki;

### **IZBRANA POGLAVJA IZ REOLOŠKIH LASTNOSTI IN STRUKTURE KOMPLEKSNIH TEKOČIN**

#### **Cilji**

Cilj predmeta je nadgraditi obstoječe znanje na področju dinamike kompleksnih tekočin, mikrofluidike večfaznih tokov, koncept večnivojskega modeliranja in poglobiti poznavanja eksperimentalnih pristopov reološke karakterizacije strukturiranih tekočin. Pridobljena znanja študentu omogočajo samostojno raziskovalno delo na področju preučevanja toka kompleksnih sistemov in reoloških lastnosti kompleksnih tekočin in poltrdnih snovi. Študent pri predmetu pridobi specifične kompetence za razumevanje, načrtovanje in optimizacijo kompleksnih tokovnih sistemov.

#### **Vsebina predmeta**

- Sistemi kompleksnih tekočin: ne-Newtonske tekočine, večfazni in/ali kemijsko reakcijski tokovi pri različnih dimenzijskih in časovnih skalah.
- Mikrofluidika: prednosti uporabe mikrosistemov. Problemi modeliranja mikrosistemov dvo-faznih sistemov: določitev strižnih napetosti, »slip« na steni, površinska napetost.

- Koncept, razvoj in uporaba večnivojskega modeliranja. Dinamika posamezne kapljice/mehurčka, Pojavi večnivojskega prenosa.
- Nekonvencionalna topila: ionske tekočine (IL), vodni dvo-fazni sistemi (ATPS), eutektične mešanice.
- Eksperimentalni pristopi k reometriji: zakonitosti merjenja, merilne tehnike in postopki za karakterizacijo reološko kompleksnih tekočin in pol-trdnih materialov.

## **IZBRANA POGlavJA IZ KEMIJSKEGA REAKCIJSKEGA INŽENIRSTVA**

### **Cilji**

Študent poglobljeno spozna 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.

### **Vsebina predmeta**

Kataliza. Trdni katalizatorji. 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 konsektivnih reakcijah. Snovni transport pri paralelno-konsektivnih 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.

## **IZBRANA POGlavJA IZ OKOLJSKEGA INŽENIRSTVA**

### **Cilji**

Študent nadgradi in poglobi znanja iz okoljskega inženirstva. Razvije sposobnost za kritično primerjavo, izbiro in optimizacijo procesov, 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 v ustreznih ekonomskih, družbenih in zakonskih okvirjih.

### **Vsebina predmeta**

Študent s soglasjem mentorja med spodaj navedenimi temami v izbere tiste, ki so najtesneje povezane z njegovim raziskovalnim delom.

Sodobne tehnike identifikacije in kvantifikacije nevarnih snovi: Mikropolutanti (hormonski motilci, biocidi, PAH, PCB). In vivo in in vitro 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, sodovni koncepti ravnanja s trdnimi odpadki, ocena življenjskega cikla (LCA), principi in metode industrijske ekologije.

Kemijski, membranski in biokemijski procesi v procesih zaščite, remediacije in bioremediacije okolja (voda, zrak, tla):

- Kemijski procesi: Čiščenje odpadnih in pitnih voda s kemijskimi postopki. Elektrokoagulacija. Sodobni oksidacijski procesi (AOP). Fotokatalitska oksidacija. Fentonova oksidacija. Ozonacija. Elektrokemijski procesi. Termična mokra oksidacija. Oksidacija v superkritični vodi. Akustična in

hidrodinamska kavitacija. Heterogeni katalizatorji na področju varstva okolja. Katalitska mokra oksidacija. Kinetika in mehanizmi reakcij. Procesi in reaktorji. Aplikacija sodobnih oksidacijskih procesov pri odstranjevanju mikropolutantov iz zraka, tal, odpadnih in pitnih vod.

- Membranski procesi.

- Biokemijski procesi: Sodobni procesi biološkega čiščenja odpadnih vod, bioremediacija.

Integralne procesne sheme: sklopitev AOP procesov z biološkimi postopki.

Sodobna slovenska in mednarodna zakonodaja s področja okolja.

## **IZBRANA POGlavJA IZ TRANSPORTNIH POJAVOV**

### **Cilji**

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.

### **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);
- 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.

## **IZBRANA POGlavJA IZ BIOPROCESNEGA INŽENIRSTVA**

### **Cilji**

Cilj predmeta je poglobitev znanja za načrtovanje, vodenje in optimizacijo bioprocsov in tehnologij. Kompetence: spoznavanje izbranih biotehnoloških procesov in njihova inženirska analiza, razumevanje pomena kontinuirnega delovanja procesov in vpeljave miniaturiziranih naprav v biotehnologijo.

### **Vsebina predmeta**

Izbrana poglavja iz biotehnoloških procesov:

- specifičnosti submerznih bioprocsov z nitastimi mikroorganizmi,
- biotehnološko pridobivanje encimov in njihova uporaba
- kontinuirno vodenje bioprocsov.

Izbrana poglavja iz biotransformacij:

- kinetični opis biokatalitskih procesov
- biotransformacije v nekonvencionalnih topilih
- sodobne tehnike imobilizacije biokatalizatorjev.

Miniaturizacija naprav v biotehnologiji:

- mikrobioreaktorji
- encimski mikrobioreaktorji
- uporaba mikrostrukturiranih sistemov v zaključnih procesih
- matematični opis izbranega biokatalitskega procesa/separacije v mikrofluidni napravi.

Integracija bioprocsov z zaključnimi procesi.



**IZBRANA POGlavJA IZ INŽENIRSTVA MATERIALOV****Cilji**

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.

**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, metode 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 obdela v seminarski nalogi.