

Oznaka poročila: ARRS-RPROJ-ZP-2014/117



ZAKLJUČNO POROČILO RAZISKOVALNEGA PROJEKTA

A. PODATKI O RAZISKOVALNEM PROJEKTU

1. Osnovni podatki o raziskovalnem projektu

Šifra projekta	Z1-4202
Naslov projekta	Novi porozni kovinsko-organski adsorbenti kot nosilci za pline in zdravilne učinkovine
Vodja projekta	25023 Matjaž Mazaj
Tip projekta	Z Podoktorski projekt
Obseg raziskovalnih ur	3400
Cenovni razred	A
Trajanje projekta	07.2011 - 06.2013
Nosilna raziskovalna organizacija	104 Kemijski inštitut
Raziskovalne organizacije - soizvajalke	
Raziskovalno področje po šifrantu ARRS	1 NARAVOSLOVJE 1.04 Kemija 1.04.03 Anorganska kemija
Družbeno-ekonomski cilj	02. Okolje
Raziskovalno področje po šifrantu FOS	1 Naravoslovne vede 1.04 Kemija

B. REZULTATI IN DOSEŽKI RAZISKOVALNEGA PROJEKTA

2. Povzetek raziskovalnega projekta¹

SLO

Kovinsko-organski porozni materiali so nova vrsta kristaliničnih materialov, kjer ogrodje sestavljajo kovinske enote, ki so preko organskih ligandov povezane z močnimi kovalentnimi vezmi v tridimenzionalno porozno strukturo. Zaradi visoke specifične površine (do 6000 m²/g) imajo ti materiali izjemne adsorptivne lastnosti, ki jim omogočajo uporabnost pri shranjevanju in selektivnem ločevanju plinov (odstranjevanje škodljivih plinov iz atmosfere). Zaradi preprostosti sintetskih postopkov in možnost načrtovanja

nastanka kristalinične porozne ogrodne strukture z neškodljivimi kovinskimi gradniki pa predstavljajo kovinsko-organski porozni materiali tudi velik potencial za uporabnost v bioloških procesih.

Raziskave so zavemale razvoj novih poroznih magnezijevih in kalcijevih polikarboksilatov za shranjevanje plinov ter bioaplikacij. Poudarek je bil na bazičnih raziskavah kristalizacijskih procesov in strukturne dinamike pri spreminjanju zunanjih fizikalnih parametrov. Razvoj teh materialov je potekal s hidrotermalno sintezo z uporabo magnezijevih in kalcijevih soli ter polikarboksilnih aromatskih ali alifatskih kislin. S sistematskim optimiziranjem sinteznih parametrov ter analiziranju produktov s pomočjo difrakcijskih (XRD) in spektroskopskih tehnik (NMR) smo za sistem novih magnezijevih polikarboksilatov pojasnili vpliv topila na dimenzionalnost nastalih struktur in pojasnili kristalizacijske mehanizme. Za sistem kalcijevih polikarboksilatov pa smo prav tako z uporabo komplementarnih tehnik difrakcije (XRD) in različnih spektroskopskih tehnik (NMR, IR, XAS) raziskovali vpliv temperature in hidratacije na spremembe kristalnih struktur ter uspeli pojasniti mehanizem strukturne dinamike pri spreminjanju teh fizikalnih parametrov. Pri vseh novih materialih, ki smo jim določili kristalne strukture z rentgensko praškovo difrakcijo ali rentgensko difrakcijo na monokristalu smo prav tako testirali adsorptivne lastnosti materialov z dušikovo sorpcijsko analizo in z adsorpcijo drugih plinov (CO_2 , CH_4 , H_2) v nizkotlačnem (do 1 bar) in visokotlačnem območju (do 100 bar) pri različnih temperaturah. Sintetizirali smo tudi nove magnezijevi in kalcijeve kovinsko-organske materiali na osnovi biokompatibilnih, alifatskih dikarboksilnih kislin (sukcinska, glutarna in pimelna kislina). Na teh materialih smo testirali dinamiko razgradnje pri različnih pH vrednostih.

Kljub prednostim, kot so cenovna dostopnost ter neškodljivost za okolje in organizme, so magnezijevi in kalcijevi kovinsko-organski porozni materiali v svetovnem merilu relativno slabo raziskani. Rezultati iz tematike projekta so prispevali k razumevanju nastanka in strukturne dinamike pri spreminjanju zunanjih fizikalnih parametrov kovinsko-organskih poroznih materialov na osnovi zemeljsko-alkalijskih kovin. Prav tako smo raziskali možnosti njihove uporabnosti kot virov biokompatibilnih učinkovin. Raziskav za to vrsto aplikacij v svetovnem merilu relativno malo.

ANG

Metal-organic framework materials (MOFs) are new class of crystalline materials, where their frameworks consist of metal units connected through organic ligands with strong covalent bonds into three-dimensional porous structure. Because of high specific areas (up to $6000 \text{ m}^2/\text{g}$) these materials possess exceptional adsorptive properties, which enable them applications in the fields of storage and selective separation of gases (removal of harmful gases from the atmosphere). Due to their simple synthetic procedures and possibilities of designing crystalline porous structure with non-toxic metal precursors, MOFs represent a large potential for the use in biological processes.

Investigations included the development of new porous polycarboxylates based on magnesium and calcium for gas storage and bio-applications. Focus was on the basic research of crystallization processes and structural dynamics upon changing external physical parameters. The development of these materials was performed by hydrothermal synthesis with the use of magnesium and calcium salts and polycarboxylate aromatic and aliphatic acids. With systematical optimization of synthesis parameters and analysis of products by diffraction (XRD) and spectroscopic (NMR) methods we explained

the influence of solvent on dimensionality of the formed structures and discussed on crystallization mechanisms. For the system of calcium polycarboxylates we investigated the impact of the temperature and hydration on the crystal structure changes by using complementary techniques of diffraction (XRD) and various spectroscopy methods (NMR, IR, XAS) and succeed to explain the mechanisms of structural dynamics upon changing external stimuli. For all new materials, where structure were determined by powder or single-crystal X-ray diffraction, we tested their adsorptive properties by N_2 sorption analysis and adsorption of other gases (CO_2 , H_2) in low-pressure (up to 1 bar) and high-pressure (up to 100 bars) ranges at different temperatures. We also synthesized new magnesium and calcium metal-organic materials based on biocompatible, aliphatic dicarboxylic acids (succinic, glutaric and pimelic acid). The dynamic of degradation at different pH conditions were tested on these materials. In spite of advantages, such as low-cost and non-toxicity for environment and organisms, magnesium- and calcium-based metal-organic porous materials are still poorly investigated within the world MOF community. The results from the scope of this project contribute to understanding of formation and structural dynamics upon changing external stimuli of earth-alkali metal-organic framework materials. The possibilities of their implementation as the sources of biocompatible substances were also investigated. The researches for such type of MOF applications are rare as well.

3. Poročilo o realizaciji predloženega programa dela na raziskovalnem projektu²

Raziskovalno delo v sklopu projekta je bil razdeljeno v tri tematske sklope. Prvi sklop je zavzemal raziskave kristalizacijskih mehanizmov kovinsko-organskih poroznih materialov ter vplivov izbranih sinteznih parametrov (čas in temperatura kristalizacije, izbira topila) na mehanizme kristalizacije. Osredotočili smo se na sistem magnezijevih benzen-1,3,5-trikarboksilatov. Nove magnezijeve-1,3,5-benzentrikarboksilate (NICS-n, National Institute of Chemistry Slovenia; $n = 3 - 6$) smo solvotermalno sintetizirali v prisotnosti mešanic topil EtOH/ H_2O z različnimi molskimi razmerji. Pokazali smo da je kristalizacijski proces Mg-1,3,5-benzentrikarboksilatov močno odvisen od sestave topila in da lahko dimenzionalnost struktur kontroliramo s spreminjanjem EtOH/ H_2O razmerja v sinteznem postopku. Pri uporabi čiste vode kot topila kristalizira 0-dimenzionalna molekulska struktura $Mg(H_2BTC)_2(H_2O)_4$ (NICS-3). 1-dimenzionalna verižna struktura $Mg_3(BTC)_2(H_2O)_{12}$ (NICS-4) in 2-dimenzionalna plastovita struktura $Mg_2(BTC)(OH)(H_2O)_4 \cdot 2H_2O$ (NICS-5) kristalizirata pri uporabi EtOH/ H_2O mešanic z molskima razmerjema 0,3 oz. 0,4-0,7. Kristalizacija v čistem etanolu pa vodi do nastanka 3-dimenzionalne strukture $Mg_3(BTC)_2$ (NICS-6). Z NMR raziskavami smo dokazali, da se večje gradbene enote Mg-prekurzorjev formirajo v topilih z večjo vsebnostjo etanola tudi v odsotnosti BTC liganda. Ti prekurzorji s povezujejo z BTC ligandi v kristalne strukture že pri sobni temperaturi, ki pa ne predstavljajo končnih struktur dobljenih po hidrotermalnih sintezah. NICS-4 in NICS-5 kristalizirata iz podobnih začetnih struktur. Manjše razlike v EtOH/ H_2O razmerju pa povzročijo bistvene spremembe v kristalizacijskem procesu pri solvotermalnih pogojih. Z DFT računskimi metodami in sistematskim spreminjanjem razmerja EtOH/ H_2O , časov in temperatur kristalizacij smo potrdili da je 2-dimenzionalna NICS-5 struktura termodinamsko stabilnejša od 1-dimenzionalne NICS-4 strukture. Pokazali smo da reakcija Mg prekurzorjev z BTC ligandom v sistemu EtOH/ H_2O predstavlja kompleksen in občutljiv

termodinamski proces. Ta raziskava prispeva k razumevanju kristalizacijskih mehanizmov kovinsko-organskih struktur in s tem k lažjemu načrtovanju in optimizaciji njihovih sintetskih postopkov ter je bila objavljena v reviji *Crystal Growth & Design* (M. Mazaj, T. Birsa Čelič, G. Mali, M. Rangus, V. Kaučič, N. Zabukovec Logar. Control of the crystallization process and structure dimensionality of Mg-benzene-1,3,5-tricarboxylates by tuning solvent composition. *Cryst. Growth Design* 2013, 13, 3825-3834).

Drugi sklop raziskav je temeljil na raziskavah strukturne dinamike kovinskoorganskih materialov. S pomočjo komplementarnih metod difrakcije (XRD) in spektroskopije (FTIR, MAS NMR, EXAFS, XANES) smo med procesi segrevanja in hidratacije raziskovali strukturno dinamiko kalcijevega tereftalata s formulo $\text{Ca}(\text{BDC})(\text{DMF})(\text{H}_2\text{O})$ z rombičnimi kanali in 44 mrežno topologijo. Med segrevanjem se ogrodna struktura $\text{Ca}(\text{BDC})(\text{DMF})(\text{H}_2\text{O})$ spremeni v dveh stopnjah. Pri prvi spremembi, ki se pojavi pri 150 °C, pride do prekinitve Ca-O vezi, ki pripadajo koordiniranim molekulam H_2O in DMF. V tej stopnji pride do odstranitve DMF le na površini ali blizu površine kristalov. Tu pride do lokalnih strukturnih sprememb in prekristalizacije v neporozni kalcijev tereftalat ($\text{CaBDC}(400)$). Ta faza prepreči difuzijo DMF molekul iz notranjosti kristala. V drugi stopnji pri 400 °C pride do popolne prekristalizacije v $\text{CaBDC}(400)$. Pri hidrataciji ta faza reverzibilno preide v pseudo 3-dimenzionalno strukturo $\text{Ca}(\text{BDC})(\text{H}_2\text{O})_3$. Predlagali smo mehanizem strukturnih transformacij $\text{CaBDC}(\text{RT}) \rightarrow \text{CaBDC}(400)$ in $\text{CaBDC}(400) \rightarrow \text{Ca}(\text{BDC})(\text{H}_2\text{O})_3$. Ta mehanizem vključuje cepitev vezi med Ca^{2+} in karboksilatnimi skupinami, rotacijo BDC liganda in ponovno koordinacijo karboksilatnih kisikovih atomov s Ca^{2+} kationi. Vzrok take transformacije je v težnji po spremembi načina vezave karboksilatnih skupin s Ca kationi, če se spremeni koordinacijsko število Ca^{2+} . Znižanje koordinacijskega števila zato vodi do bistvenih strukturnih preureditev, ki vodi do neporoznih CaMOFstruktur pri aktivacijah (segrevanju) materialov. Ta raziskava prav tako prispeva k boljšemu razumevanju strukturne dinamike kalcijevih kovinskoorganskih vmaterialov, ki je do sedaj še relativno neraziskana in je bila objavljena v reviji *The Journal of Physical Chemistry C* (M. Mazaj, G. Mali, M. Rangus, E. Žunkovič, V. Kaučič, N. Zabukovec Logar, Spectroscopic studies of structural dynamics induced by heating and hydration : a case of calcium-terephthalate metal-organic framework. *J. Phys. Chem. C* 2013, 117, 7552-7564).

Tretji sklop je zavzemal odkrivanje novih biokompatibilnih kalcijevih in magnezijevih kovinskoorganskih materialov z uporabo alifatskih ligandov. S sistematskimi sintetskimi pristopi smo sintetizirali 3 nove strukture: magnezijev sukcinat ter magnezijev in kalcijev pimelat. Pri teh materialih smo vključno z nekaterimi že znanimi strukturami (kalcijev sukcinat ter magnezijev in kalcijev glutarat) raziskovali kontrolirano razgradljivost v vodnih raztopinah pri različnih pH vrednostih (od 1 do 7) v časovni odvisnosti. S tem smo preiskovali možnost uporabe teh materialov kot kontrolirane dostavne sisteme za biološko aktivne snovi (Mg^{2+} , Ca^{2+} , sukcinna kislina, glutarna kislina, pimelna kislina). Koncentracije sproščenih kationov v vodnih raztopinah smo merili z induktivno sklopljeno plazmo (ICP). Ugotovili smo, da so kalcijevi alifatski karboksilati hitreje razgradljivi od magnezijevih, kontrola sproščanja biološko aktivnih snovi pa je s tem slabša. Na hitrost razgradljivosti pa vpliva tudi vrsta liganda. Pimelati, ki imajo bolj hidrofobne lastnosti, kot glutarati ali sukcinati, se razgrajujejo počasneje. Opisana raziskava je v procesu objave v reviji *Dalton Transactions*.

4. Ocena stopnje realizacije programa dela na raziskovalnem projektu in zastavljenih raziskovalnih ciljev³

V času trajanja projekta (2011 – 2013) so bili zastavljeni raziskovalni cilji v veliki

meri doseženi. Prvi cilj je vključeval sintezo novih magnezijevih in kalcijevih alifatskih ter aromatskih polikarboksilatov ter reševanje njihovih struktur. Na podlagi podrobnih študij kristalizacijskih mehanizmov in optimizacijah sinteznih parametrov smo uspeli sintetizirati štiri nove magnezijeve- 1,3,5-benzotrikarboksilate, kalcijev-1,4-dikarboksilat, kalcijev sukcinat ter magnezijeva in kalcijeva pimelata. Vse nove strukture so bile uspešno rešene z rentgensko praškovo difrakcijo ali difrakcijo na monokristalu ob podpori bazičnih karakterizacijskih tehnik (SEM, EDAX, TG, NMR, XANES). Poleg tega smo z namenom povečanja por uspeli sintetizirati tudi serijo novih kalcijevih in magnezijevih kovinsko-organskih materialov z večjimi ligandi (4,4'-bifenildikarboksilna kislina, azodibenzojska kislina in benzen trisbenzojska kislina). Ti materiali so še v fazi reševanja strukture. Drugi cilj je vključeval poglobljeno karakterizacijo izbranih. Raziskavo fleksibilnosti ogrodne strukture med procesi hidracije in dehidracije ter med segrevanjem smo izvedli na novem kalcijevem-1,4-benzendikarboksilatu, pri katerem smo razložili strukturno dinamiko materiala in mehanizem prekristalizacijskih procesov med procesom praznjenja por (aktivacije). Na tem primeru smo pojasnili vzroke za pogost nastanek neporoznih struktur kalcijevih kovinsko-organskih materialov. Tretji cilj v projektu pa je bilo aplikativno testiranje izbranih materialov. Na tem področju smo zaključili teste stabilnosti biokompatibilnih magnezijevih in kalcijevih polikarboksilatov na osnovi alifatskih karboksilnih kislin pri fizioloških pogojih (37 °C, pH = 3 – 7). Prav tako so bili izvedeni vsi testi adsorpcije H₂ in CO₂ pri različnih temperaturah na izbranih novih magnezijevih in kalcijevih kovinsko-organskih materialih z večjimi ligandi (4,4'-bifenildikarboksilna kislina, azodibenzojska kislina in benzen trisbenzojska kislina). Adsorpcijske kapacitete so predvsem pri magnezijevih sistemih zelo obetavne, njihova strukturna karakterizacija (reševanje strukture) pa še ni zaključena.

5.Utemeljitev morebitnih sprememb programa raziskovalnega projekta oziroma sprememb, povečanja ali zmanjšanja sestave projektne skupine⁴

Raziskovalno delo v času trajanja projekta (2011-2013) je bilo v okviru predlaganega programa in ni bistveno odstopalo od načrtov.

6.Najpomembnejši znanstveni rezultati projektne skupine⁵

Znanstveni dosežek			
1.	COBISS ID	5290522	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Kontrola kristalizacijskega procesa in dimenzionalnosti struktur Mg benzen-1,3,5-trikarboksilatov s spreminjanjem sestave topila
		ANG	Control of the crystallization process and structure dimensionality of Mg-benzene-1,3,5-tricarboxylates by tuning solvent composition
	Opis	SLO	V prispevku smo opisali kristalne strukture štirih novih Mg benzen-1,3,5-trikarboksilatov, NICS-n (National Institute of Chemistry, n = 3 – 6) z različnimi dimenzionalnostmi. NIS-3 je 0-dimenzionalni molekulski kompleks s formulo Mg(H ₂ BTC) ₂ (H ₂ O) ₄ , NICS-4 (Mg ₃ (BTC) ₂ (H ₂ O) ₁₂) predstavlja 1-dimenzionalno verižno strukturo, NICS-5 (Mg ₂ (BTC)(OH)(H ₂ O) ₄ .2H ₂ O) 2 – dimenzionalno plastovito strukturo in NICS-6 3-dimenzionalno strukturo s formulo Mg ₃ (BTC) ₂ . Pokazali smo da lahko pri solvotermalnih pogojih kontroliramo kristalizacijo teh faz s spreminjanjem razmerja mešanice topila etanol/voda. Pri uporabi čiste vode kristalizira NICS-3. NICS-4 nastane pri uporabi mešanice topil z EtOH/H ₂ O molskim razmerjem 0.3, NICS-5 pa pri mešanicah z molskim razmerjem med 0.4 in 0.7.

			Kristalizacija v čistem etanolu vodi do nastanka NICS-6. Z NMR spektroskopijo smo dokazali, da se večje kovinske gradbene enote formirajo v odsotnosti organskega liganda pri uporabi topila z večjim deležem etanola. Te enote se povezujejo z BTC ligandom že na samem začetku solvotermalnega procesa, v kovinsko-organske metastabilne faze, ki pa ne predstavljajo končnih struktur.
		ANG	In this contribution we described the structures of four new Mg-benzene-1,3,5-tricarboxylates, NICS-n (National Institute of Chemistry, n = 3 – 6) with different dimensionalities. NICS-3 is 0-dimensional molecular complex with formula Mg(H2BTC)2(H2O)4, NICS-4 (Mg3(BTC)2(H2O)12) represents 1-dimensional chain-like structure, NICS-5 (Mg2(BTC)(OH)(H2O)4.2H2O) 2-dimensioan layered structure and NICS-6 3-dimensional structure with formula Mg3(BTC)2. We showed that at solvothermal conditions, crystallization of these phases can be tuned by changing ethanol/water solvent composition. When using pure water, NICS-3 is crystallized. NICS-4 and NICS-5 are formed using mixture of solvents with EtOH/H2O molar ratio of 0.3 and 0.4-0.7, respectively. Crystallization in pure ethanol leads to the formation of NICS-6. By NMR spectroscopy we proved that larger metal-based units are formed in the absence of ligand in ethanol-rich solvent. These units are connected to BTC ligand already at the very beginning of solvothermal process into metal-organic metastable phases, which do not resemble the final structures.
	Objavljeno v		American Chemical Society; Crystal growth & design; 2013; Vol. 13, iss. 8; str. 3825-3834; Impact Factor: 4.689;Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.402; A'': 1;A': 1; WoS: DY, FI, PM; Avtorji / Authors: Mazaj Matjaž, Birska Čelič Tadeja, Mali Gregor, Rangus Mojca, Kaučič Venčeslav, Zabukovec Logar Nataša
	Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek
2.	COBISS ID	36628485	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Spektroskopske raziskave strukturne dinamike pri segrevanju in hidrataciji: primer kalcijevega tereftalata
		ANG	Spectroscopic studies of structural dynamics induced by heating and hydration
	Opis	SLO	V prispevku smo opisali raziskave strukturne dinamike kalcijevega benzen-1,4-dikarboksilata (BDC) s formulo Ca(BDC)(DMF)(H2O) pri termični obdelavi do 500 °C. S pomočjo spektroskopskih tehnik (IR, NMR, XAS) smo ugotovili, da pri segrevanju poteka izhajanje molekul DMF iz materiala v dveh stopnjah in da le-ta narekuje strukturne spremembe kalcijevega tereftalata do 400 °C. S pomočjo praškovne rentgenske difrakcije (XRD) smo uspeli rešiti strukturo visokotemperaturne faze, ki nastane pri 400 °C, kar nam je omogočilo določitev mehanizma transformacije strukture. Ugotovili smo, da odstranitev koordinacijsko vezanih molekul DMF-a, ki se nahajajo v kanalih, ne vodi le do praznitve kanalov temveč, do popolne strukturne transfomacije v neporozno strukturo. Prav tako smo raziskovali proces hidratacije visokotemperaturne faze. Hidratacija vodi do nastanka nove verižne strukture s formulo Ca(BDC)(H2O)3, ki pa se pri vakuumiranju pri 50 °C reverzibilno prekristalizira nazaj v tri-dimenzionalno visokotemperaturno fazo po predlaganem mehanizmu. Ta raziskava predstavlja edinstven vpogled v strukturno dinamiko kalcijevih MOF-ov in pojasni vzroke za kristalizacijo v neporozne strukture, kar je splošen problem pri tej vrsti kovinsko organskih materialov.
			In this contribution we described the investigations on structure dynamics of calcium-1,4-dicarboxylate (BDC) with the formula Ca(BDC)(DMF)(H2O) upon thermal treatment up to 500 °C. With the use of spectroscopic techniques (IR, NMR, XAS) we determined that during the heating process, the removal of DMF molecules from the material occurs in two steps and

		ANG	that this process governs structural changes of calcium terephthalate up to 400 °C. By powder X-ray diffraction (XRD) we determined the structure of high-temperature phase which is formed at 400 °C, enabling us to determine the mechanism of the structure transformation. The removal of the coordinated DMF molecules, which fill the channels of the structure, does not cause only the emptying of the channels, but also leads to the complete structural transformation into non-porous structure. On the high-temperature phase e also investigated the process of hydration, leading to the formation of chain-like structure with the formula $\text{Ca}(\text{BDC})(\text{H}_2\text{O})_3$. This structure is reversibly transformed back to the 3-dimensional high-temperature phase. This investigation represents an unique insight into the structural dynamics of calcium-based MOFs and clarifies the reasons for crystallization into non-porous structures, which represents general drawback of Ca-MOFs.
	Objavljeno v		American Chemical Society; The journal of physical chemistry; 2013; Vol. 117, issue 15; str. 7552-7564; Impact Factor: 4.814; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.402; A': 1; WoS: EI, NS, PM; Avtorji / Authors: Mazaj Matjaž, Mali Gregor, Rangus Mojca, Žunkovič Emanuela, Kaučič Venčeslav, Zabukovec Logar Nataša
	Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek
3.	COBISS ID	4875034	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Novi plastoviti koordinacijski polimer Ca-sukcinat
		ANG	A new layered Ca-succinate coordination polymer
	Opis	SLO	Novi plastoviti koordinacijski polimer, Ca-sukcinat ($[\text{Ca}(\mu_3\text{-sukcinato-kalcij}(\text{II}))_n]$), $[\text{Ca}(\text{C}_4\text{H}_5\text{O}_4)]_n$ smo sintetizirali z reakcijo med $\text{CaCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ in sukcijsko kislino v vodnem mediju pri hidrotermalnih pogojih s segrevanjem v mikrovalovni peči. Strukturo sestavljajo plasti Ca-O pentagonalnih-bipiramidalnih poliedrov s skupnimi robovi, ki tvorijo šest-členske obročne povezanih preko sukcijskih ligandov. Taka razporeditev anorganskih strukturnih podenot je edinstvena za kalcijeve kovinsko-organske strukture. Sosednje plasti so urejene v pseudo-tridimenzionalno strukturo preko šibkih C-H...O vodikovih vezi.
		ANG	A new layered Ca-succinate coordination polymer, $\text{poly}[[\mu_3\text{-succinato-calcium}(\text{II})]_n]$, $[\text{Ca}(\text{C}_4\text{H}_5\text{O}_4)]_n$, was synthesized by reaction of $\text{CaCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ and succinic acid in an aqueous medium under hydrothermal microwave conditions. The structure contains infinite layers of edge-sharing calcium pentagonal-bipyramidal polyhedra forming six-membered rings connected through succinate ligands. Such an assembly of inorganic building units is unique for calcium metal-organic framework-type structures. Adjacent layers are packed into a final pseudo-three-dimensional structure through weak C-H...O hydrogen bonds
	Objavljeno v		Munksgaard; Acta crystallographica; 2012; Vol. 68, part 1; m4-m6; Impact Factor: 0.492; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.179; WoS: FI; Avtorji / Authors: Mazaj Matjaž, Kaučič Venčeslav, Golobič Amalija, Zabukovec Logar Nataša
	Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek

7. Najpomembnejši družbeno-ekonomski rezultati projektne skupine⁶

		Družbeno-ekonomski dosežek	
1.	COBISS ID	5269530	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	MOF materiali od razvoja do aplikacij
		ANG	MOF materials from design to applications

	Opis	SLO	Predavanje na 5. Srbsko-hrvaško-slovenskem zeolitnem simoziju, Zlatibor, Serbia
		ANG	Lecture on 5th Serbian-Croatian-Slovenian Symposium on Zeolites, Zlatibor, Serbia
	Šifra	B.03 Referat na mednarodni znanstveni konferenci	
	Objavljeno v	Serbian Zeolite Association; Faculty of Physical Chemistry; Proceedings of the 5th Serbian-Croatian-Slovenian Symposium on Zeolites, May, 30 - June, 2, 2013, Zlatibor, Serbia; 2013; Str. 60-63; Avtorji / Authors: Mazaj Matjaž, Birska Čelič Tadeja, Rangus Mojca, Mali Gregor, Žunkovič Emanuela, Kaučič Venčeslav, Palčič Ana, Bronić Josip, Zabukovec Logar Nataša	
	Tipologija	1.08 Objavljeni znanstveni prispevek na konferenci	
2.	COBISS ID	4750618	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Raziskave vpliv topila na dimenzionalnost Mg-MOF struktur z NMR spektroskopijo
		ANG	The role of the solvent on the dimensionality of the Mg-MOF investigated by NMR spectroscopy
	Opis	SLO	Predavanje na 5. Evropski zeolitni konferenci (FEZA), Valencia, Španija.
		ANG	Lecture on 5th European Zeolite Conference (FEZA), Valencia, Spain.
	Šifra	B.03 Referat na mednarodni znanstveni konferenci	
	Objavljeno v	[s. n.]; Innovations in zeolites and ordered porous solids; 2011; Str. 101-102; Avtorji / Authors: Rangus Mojca, Mazaj Matjaž, Mali Gregor, Birska Čelič Tadeja, Kaučič Venčeslav	
	Tipologija	1.08 Objavljeni znanstveni prispevek na konferenci	
3.	COBISS ID	4643354	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Termične in sorpcijske lastnosti novega kalcijevega tereftalata
		ANG	Thermal and sorption properties of new open framework calcium terephthalate
	Opis	SLO	Predavanje na 34. simpoziju Britanske zeolitne zveze (BZA), Edinburgh, Velika Britanija
		ANG	Lecture on 34th symposium of British Zeolite Association (BZA), Edinburgh, Great Britain
	Šifra	B.03 Referat na mednarodni znanstveni konferenci	
	Objavljeno v	British Zeolite Association; Programme and abstracts; 2011; str. 46; Avtorji / Authors: Mazaj Matjaž, Zabukovec Logar Nataša, Mali Gregor, Kaučič Venčeslav	
	Tipologija	1.08 Objavljeni znanstveni prispevek na konferenci	
4.	COBISS ID	5115930	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Zemeljsko-alkalijski konsko-organski koordinacijski polimeri: od razvoja do aplikacije
		ANG	Alkaline earth metal-based coordination polymers: from design to applications
	Opis	SLO	Predavanje na konferenci SLONANO, Ljubljana, Slovenija
		ANG	Lecture on SLONANO conference, Ljubljana, Slovenia
	Šifra	B.03 Referat na mednarodni znanstveni konferenci	
	Objavljeno v	Institut Jožef Stefan; Book of abstracts; 2012; Str. 38; Avtorji / Authors: Mazaj Matjaž, Birska Čelič Tadeja, Rangus Mojca, Mali Gregor, Zabukovec Logar Nataša, Kaučič Venčeslav	

Tipologija	1.12 Objavljeni povzetek znanstvenega prispevka na konferenci
------------	---

8. Drugi pomembni rezultati projektne skupine²

V času projekta (2011-2013) je bila na tematiki projekta opravljena diplomska naloga na področju razvoja novih kovinsko-organskih poroznih materialov za shranjevanje vodika in ogljikovega dioksida. Prav tako smo na področju sinteze teh materialov priučili tri študente, ki so opravljali raziskovalno delo na tematiki projekta v sklopu študentske prakse.

9. Pomen raziskovalnih rezultatov projektne skupine⁸

9.1. Pomen za razvoj znanosti⁹

SLO

Hitro rastoči svetovni industrijski razvoj je v zadnjih šestdesetih letih povzročil močno povečano porabo fosilnih goriv in emisijo plinov, ki nastajajo tako v industrijskih procesih, kot tudi v gospodinjstvu. Po splošnem prepričanju so ti plini glavni vzrok za klimatske spremembe. Vse večja ozaveščenost svetovne družbe in poznavanje problematike globalnega segrevanja vodi k trendom zmanjševanja emisij toplogrednih plinov. Poleg iskanja alternativnih virov energij, ki bi zadovoljivo nadomestila vsesplošno uporabo fosilnih goriv (npr. vodik), je učinkovita adsorpcija toplogrednih plinov na mestu emisije drug pristop, ki lahko prispeva k dosegu Kiotskih ciljev 20% zmanjšanja emisij škodljivih plinov do leta 2020. Poleg tega se z razvojem materialov, ki lahko selektivno adsorbirajo CO₂ iz mešanic plinov, odpirajo možnosti izkoriščanja tega plina. Iz izpušnih plinov bi lahko pridobili čisti CO₂ za nadaljnjo katalitsko obdelavo v metanol, ki je eden izmed možnih alternativnih ekološko neoporečnih virov energije v prihodnosti.

Poleg izzivov okoljske tehnologije je pomemben tudi razvoj v farmaceutiki. Velik izziv še vedno predstavlja razvoj netoksičnih materialov, ki bi učinkovito absorbirali zdravilne učinkovine in jih kontrolirano ciljno sproščali v organizmu. S kontroliranim sproščanjem zdravil se izognemo takojšnjemu doziranju, ki lahko povzroča stranske učinke na organizme. Večina do sedaj znanih nosilcev imajo majhne kapacitete absorpcije zdravilnih količin (običajno pod 5 ut.% absorbiranega zdravila na maso nosilca). Le-te so v večini primerov adsorbirane le na površino nosilca, kar ne omogoča pravega kontroliranega sproščanja. Netoksično kovinsko-organski porozni materiali z možnostjo načrtne izgradnje njihovih struktur in poroznosti za boljšo interakcijo in bolj učinkovito absorpcijo zdravilnih učinkovin pa predstavljajo velik potencial za aplikacijo na tem področju.

Z zaključenim projektom, kjer smo se osredotočili na razvoj novih adsorpcijskih materialov, smo s pridobljenimi bazičnimi znanji o pripravi in lastnosti teh materialov prispevali k razvoju znanosti na področjih okoljskih in farmacevtskih tehnologij. Obsežne študije novih adsorbentov prispevajo k razjasnitvi in optimizaciji parametrov, ki odločilno vplivajo na adsorpcijske lastnosti ter prispevajo k lažjemu načrtovanju priprav materialov s točno določenimi fizikalno-kemijskimi lastnostmi.

ANG

Rapid global industrial development in last sixty years caused increased emission of gases which are produced in industrial processes and also in domestic work. General opinion is that these gases are the main reason for the global warming problem induced the efforts to decrease the emission of greenhouse gases. Beside the efforts to find the alternative sources which could replace the use of fossil fuels (eg. Hydrogen), the effective adsorption of greenhouse gases on the spot of emission represents the other approach that can contribute to the process of achieving Kyoto goals (decreasing emission of greenhouse gases for 20% until the year 2020). The Development of the materials which are able to selectively adsorb CO₂ from the mixture of gases also opens new possibilities of CO₂ exploitation. Pure CO₂ could be extracted from emission gases for further catalytic conversion to methanol, which represents one of the alternative, environmental friendly energy sources for the future.

Beside the challenges in the environmental technologies, the progress in pharmaceutical industry is also important. Big challenge still represents the development of non-toxic materials for the effective absorption and controlled release of drugs. By the controlled drug release, the instant dosing, which can cause side effects, is avoided. Most of the today known drug carriers

possess low absorption capacities (usually less than 5 wt.% of the transported drug in respect to the mass of the carrier material). Drugs are usually absorbed on the external surface which does not insure the controlled release of the drug inside the body. However, non-toxic metal-organic porous materials with the ability of tuning their structures and porosity for better interactions and more effective drug absorption have great potential for application in this field. Concluded project was focused on the development of new adsorption materials and gaining new basic knowledge of preparation and properties of these materials and contributed to the development of science in the fields of environmental and pharmaceutical technologies. The extensive studies of new adsorbents contributed to the explanation and optimization the parameters which crucially impact the adsorption properties and contributed to the easier engineering of the materials preparation with the specific physical-chemical properties.

9.2. Pomen za razvoj Slovenije¹⁰

SLO

Razvoj novih poroznih materialov, ki imajo velik pomen pri adsorpcijskih aplikacijah je izrednega pomena za slovensko industrijo in ekonomijo. Razvoj novih učinkovitih adsorbentov za shranjevanje in selektivno ločevanje toplogrednih plinov je namreč v skladu s trendi zmanjševanja količin izpustov škodljivih plinov v Sloveniji. Prav tako je razvoj netoksičnih adsorbentov pomemben na področju farmacije in lahko prispeva k učinkovitejšemu delovanju posameznih zdravilnih učinkovin z manj stranskimi učinki. Temeljitših raziskav na področju kovinsko-organski poroznih materialov v Sloveniji do sedaj še ni bilo, zato je iz tega vidika tematika projekta edinstvena na tem prostoru.

S povečanje povpraševanja po novih adsorpcijskih tehnologijah bi lahko imela finančne in razvojne koristi tovarna Silkem iz Kidričevega, ki je naš dolgoletni partner pri razvoju poroznih materialov. Pri razvoju zdravil pa bi lahko imeli razvojne koristi tudi podjetje Krka iz Novega Mesta, s katerim imamo prav tako izpostavljeno dolgoletno sodelovanje.

Razvoj sintetskih postopkov in pridobljena nova znanja o vplivu specifičnih strukturnih karakteristik adsorbentov ima prav tako pozitiven učinek na akademsko sfero.

ANG

The development of new porous materials with a great potential in adsorption applications has exceptional value for Slovenian industry and economy. The development of new efficient adsorbents for storage and selective separation of greenhouse gases is in accordance with the trends for decreasing harmful gases emissions in Slovenia. The development of non-toxic adsorbents is also important for pharmacy and it can contribute to the more efficient drug-to-organism impact with less side effects.

The scope of this project was the first thorough investigation on metal-organic frameworks in Slovenia. From this point of view this investigation is unique in Slovenian environment.

With the increased interest for new adsorption technologies, Silkem factory from Kidričevo, our long-term partner on porous materials development, could have financial and development benefits. The other long-term partner, pharmaceutical company Krka from Novo Mesto could also have benefits in the development of drugs.

The development of synthetic procedures and gained new knowledge concerning specific structural characteristics (adsorbent-to-adsorbate interactions) have positive impact on academic sphere as well.

10. Samo za aplikativne projekte in doktorske projekte iz gospodarstva!

Označite, katerega od navedenih ciljev ste si zastavili pri projektu, katere konkretne rezultate ste dosegli in v kakšni meri so doseženi rezultati uporabljeni

Cilj		
F.01	Pridobitev novih praktičnih znanj, informacij in veščin	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☐ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.02	Pridobitev novih znanstvenih spoznanj	

	Zastavljen cilj	☐ DA ☐ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.03	Večja usposobljenost raziskovalno-razvojnega osebja	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☐ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.04	Dvig tehnološke ravni	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☐ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.05	Sposobnost za začetek novega tehnološkega razvoja	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☐ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.06	Razvoj novega izdelka	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☐ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.07	Izboljšanje obstoječega izdelka	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☐ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.08	Razvoj in izdelava prototipa	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☐ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.09	Razvoj novega tehnološkega procesa oz. tehnologije	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☐ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.10	Izboljšanje obstoječega tehnološkega procesa oz. tehnologije	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☐ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	

F.11	Razvoj nove storitve	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☐ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.12	Izboljšanje obstoječe storitve	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☐ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.13	Razvoj novih proizvodnih metod in instrumentov oz. proizvodnih procesov	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☐ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.14	Izboljšanje obstoječih proizvodnih metod in instrumentov oz. proizvodnih procesov	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☐ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.15	Razvoj novega informacijskega sistema/podatkovnih baz	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☐ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.16	Izboljšanje obstoječega informacijskega sistema/podatkovnih baz	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☐ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.17	Prenos obstoječih tehnologij, znanj, metod in postopkov v prakso	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☐ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.18	Posredovanje novih znanj neposrednim uporabnikom (seminarji, forumi, konference)	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☐ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.19	Znanje, ki vodi k ustanovitvi novega podjetja ("spin off")	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☐ NE

	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.20	Ustanovitev novega podjetja ("spin off")	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☐ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.21	Razvoj novih zdravstvenih/diagnostičnih metod/postopkov	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☐ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.22	Izboljšanje obstoječih zdravstvenih/diagnostičnih metod/postopkov	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☐ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.23	Razvoj novih sistemskih, normativnih, programskih in metodoloških rešitev	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☐ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.24	Izboljšanje obstoječih sistemskih, normativnih, programskih in metodoloških rešitev	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☐ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.25	Razvoj novih organizacijskih in upravljavskih rešitev	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☐ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.26	Izboljšanje obstoječih organizacijskih in upravljavskih rešitev	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☐ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.27	Prispevek k ohranjanju/varovanju naravne in kulturne dediščine	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☐ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	

F.28	Priprava/organizacija razstave	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☐ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.29	Prispevek k razvoju nacionalne kulturne identitete	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☐ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.30	Strokovna ocena stanja	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☐ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.31	Razvoj standardov	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☐ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.32	Mednarodni patent	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☐ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.33	Patent v Sloveniji	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☐ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.34	Svetovalna dejavnost	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☐ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	
F.35	Drugo	
	Zastavljen cilj	☐ DA ☐ NE
	Rezultat	
	Uporaba rezultatov	

Komentar

--

11.Samo za aplikativne projekte in podoktorske projekte iz gospodarstva!**Označite potencialne vplive oziroma učinke vaših rezultatov na navedena področja**

	Vpliv	Ni vpliva	Majhen vpliv	Srednji vpliv	Velik vpliv	
G.01	Razvoj visokošolskega izobraževanja					
G.01.01.	Razvoj dodiplomskega izobraževanja	☐	☐	☐	☐	
G.01.02.	Razvoj podiplomskega izobraževanja	☐	☐	☐	☐	
G.01.03.	Drugo:	☐	☐	☐	☐	
G.02	Gospodarski razvoj					
G.02.01	Razširitev ponudbe novih izdelkov/storitev na trgu	☐	☐	☐	☐	
G.02.02.	Širitev obstoječih trgov	☐	☐	☐	☐	
G.02.03.	Znižanje stroškov proizvodnje	☐	☐	☐	☐	
G.02.04.	Zmanjšanje porabe materialov in energije	☐	☐	☐	☐	
G.02.05.	Razširitev področja dejavnosti	☐	☐	☐	☐	
G.02.06.	Večja konkurenčna sposobnost	☐	☐	☐	☐	
G.02.07.	Večji delež izvoza	☐	☐	☐	☐	
G.02.08.	Povečanje dobička	☐	☐	☐	☐	
G.02.09.	Nova delovna mesta	☐	☐	☐	☐	
G.02.10.	Dvig izobrazbene strukture zaposlenih	☐	☐	☐	☐	
G.02.11.	Nov investicijski zagon	☐	☐	☐	☐	
G.02.12.	Drugo:	☐	☐	☐	☐	
G.03	Tehnološki razvoj					
G.03.01.	Tehnološka razširitev/posodobitev dejavnosti	☐	☐	☐	☐	
G.03.02.	Tehnološko prestrukturiranje dejavnosti	☐	☐	☐	☐	
G.03.03.	Uvajanje novih tehnologij	☐	☐	☐	☐	
G.03.04.	Drugo:	☐	☐	☐	☐	
G.04	Družbeni razvoj					
G.04.01	Dvig kvalitete življenja	☐	☐	☐	☐	
G.04.02.	Izboljšanje vodenja in upravljanja	☐	☐	☐	☐	
G.04.03.	Izboljšanje delovanja administracije in javne uprave	☐	☐	☐	☐	
G.04.04.	Razvoj socialnih dejavnosti	☐	☐	☐	☐	
G.04.05.	Razvoj civilne družbe	☐	☐	☐	☐	
G.04.06.	Drugo:	☐	☐	☐	☐	
G.05.	Ohranjanje in razvoj nacionalne naravne in kulturne dediščine in identitete					
G.06.	Varovanje okolja in trajnostni razvoj					
G.07	Razvoj družbene infrastrukture					

G.07.01.	Informacijsko-komunikacijska infrastruktura	☐	☐	☐	☐	
G.07.02.	Prometna infrastruktura	☐	☐	☐	☐	
G.07.03.	Energetska infrastruktura	☐	☐	☐	☐	
G.07.04.	Drugo:	☐	☐	☐	☐	
G.08.	Varovanje zdravja in razvoj zdravstvenega varstva	☐	☐	☐	☐	
G.09.	Drugo:	☐	☐	☐	☐	

Komentar

--

12. Pomen raziskovanja za sofinancerje¹¹

	Sofinancer		
1.	Naziv		
	Naslov		
	Vrednost sofinanciranja za celotno obdobje trajanja projekta je znašala:		EUR
	Odstotek od utemeljenih stroškov projekta:		%
	Najpomembnejši rezultati raziskovanja za sofinancerja		Šifra
	1.		
	2.		
	3.		
	4.		
	5.		
	Komentar		
	Ocena		

13. Izjemni dosežek v letu 2013¹²**13.1. Izjemni znanstveni dosežek**

Sintetizirali smo štirih novih Mg benzen-1,3,5-trikarboksilatov, NICS-n (National Institute of Chemistry, n = 3 – 6) z različnimi dimenzionalnostmi. NIS-3 je 0-D molekulski kompleks s, NICS-4 predstavlja 1-D verižno strukturo, NICS-5 2 -D plastovito strukturo in NICS-6 3-D strukturo. Pokazali smo da lahko pri solvotermalnih pogojih kontroliramo kristalizacijo teh faz s spreminjanjem razmerja mešanice topila etanol/voda. Pri uporabi čiste vode kristalizira NICS-3. NICS-4 nastane pri uporabi mešanice topil z EtOH/H₂O molskim razmerjem 0.3, NICS-5 pa pri mešanicah z molskim razmerjem med 0.4 in 0.7. Kristalizacija v čistem etanolu vodi do nastanka NICS-6. Z NMR spektroskopijo smo dokazali, da se večje kovinske gradbene enote formirajo v odsotnosti organskega liganda pri uporabi topila z večjim deležem etanola. Te enote se povezujejo z BTC ligandom že na samem začetku solvotermalnega procesa, v kovinsko-organske metastabilne faze, ki pa ne predstavljajo končnih struktur.

13.2. Izjemni družbeno-ekonomski dosežek

--

C. IZJAVE

Podpisani izjavljam/o, da:

- so vsi podatki, ki jih navajamo v poročilu, resnični in točni
- se strinjamo z obdelavo podatkov v skladu z zakonodajo o varstvu osebnih podatkov za potrebe ocenjevanja ter obdelavo teh podatkov za evidence ARRS
- so vsi podatki v obrazcu v elektronski obliki identični podatkom v obrazcu v pisni obliki
- so z vsebino zaključnega poročila seznanjeni in se strinjajo vsi soizvajalci projekta

Podpisi:

*zastopnik oz. pooblaščen oseba
raziskovalne organizacije:*

in

vodja raziskovalnega projekta:

Kemijski inštitut

Matjaž Mazaj

ŽIG

Kraj in datum:

Ljubljana	14.4.2014
-----------	-----------

Oznaka prijave: ARRS-RPROJ-ZP-2014/117

¹ Napišite povzetek raziskovalnega projekta (največ 3.000 znakov v slovenskem in angleškem jeziku) [Nazaj](#)

² Napišite kratko vsebinsko poročilo, kjer boste predstavili raziskovalno hipotezo in opis raziskovanja. Navedite ključne ugotovitve, znanstvena spoznanja, rezultate in učinke raziskovalnega projekta in njihovo uporabo ter sodelovanje s tujimi partnerji. Največ 12.000 znakov vključno s presledki (približno dve strani, velikost pisave 11). [Nazaj](#)

³ Realizacija raziskovalne hipoteze. Največ 3.000 znakov vključno s presledki (približno pol strani, velikost pisave 11) [Nazaj](#)

⁴ V primeru bistvenih odstopanj in sprememb od predvidenega programa raziskovalnega projekta, kot je bil zapisan v predlogu raziskovalnega projekta oziroma v primeru sprememb, povečanja ali zmanjšanja sestave projektne skupine v zadnjem letu izvajanja projekta, napišite obrazložitev. V primeru, da sprememb ni bilo, to navedite. Največ 6.000 znakov vključno s presledki (približno ena stran, velikost pisave 11). [Nazaj](#)

⁵ Navedite znanstvene dosežke, ki so nastali v okviru tega projekta. Raziskovalni dosežek iz obdobja izvajanja projekta (do oddaje zaključnega poročila) vpišete tako, da izpolnite COBISS kodo dosežka – sistem nato sam izpolni naslov objave, naziv, IF in srednjo vrednost revije, naziv FOS področja ter podatek, ali je dosežek uvrščen v A'' ali A'. [Nazaj](#)

⁶ Navedite družbeno-ekonomske dosežke, ki so nastali v okviru tega projekta. Družbeno-ekonomski rezultat iz obdobja izvajanja projekta (do oddaje zaključnega poročila) vpišete tako, da izpolnite COBISS kodo dosežka – sistem nato sam izpolni naslov objave, naziv, IF in srednjo vrednost revije, naziv FOS področja ter podatek, ali je dosežek uvrščen v A'' ali A'.

Družbeno-ekonomski dosežek je po svoji strukturi drugačen kot znanstveni dosežek. Povzetek znanstvenega dosežka je praviloma povzetek bibliografske enote (članka, knjige), v kateri je dosežek objavljen.

Povzetek družbeno-ekonomskega dosežka praviloma ni povzetek bibliografske enote, ki ta dosežek dokumentira, ker je dosežek sklop več rezultatov raziskovanja, ki je lahko dokumentiran v različnih bibliografskih enotah. COBISS ID zato ni enoznačen, izjemoma pa ga lahko tudi ni (npr. prehod mlajših sodelavcev v gospodarstvo na pomembnih raziskovalnih nalogah, ali ustanovitev podjetja kot rezultat projekta ... - v obeh primerih ni COBISS ID). [Nazaj](#)

⁷ Navedite rezultate raziskovalnega projekta iz obdobja izvajanja projekta (do oddaje zaključnega poročila) v primeru, da katerega od rezultatov ni mogoče navesti v točkah 6 in 7 (npr. ni voden v sistemu COBISS). Največ 2.000 znakov, vključno s presledki. [Nazaj](#)

⁸ Pomen raziskovalnih rezultatov za razvoj znanosti in za razvoj Slovenije bo objavljen na spletni strani: <http://sicris.izum.si/> za posamezen projekt, ki je predmet poročanja [Nazaj](#)

⁹ Največ 4.000 znakov, vključno s presledki [Nazaj](#)

¹⁰ Največ 4.000 znakov, vključno s presledki [Nazaj](#)

¹¹ Rubrike izpolnite / prepišite skladno z obrazcem "izjava sofinancerja" <http://www.arrs.gov.si/sl/progproj/rproj/gradivo/>, ki ga mora izpolniti sofinancer. Podpisan obrazec "Izjava sofinancerja" pridobi in hrani nosilna raziskovalna organizacija – izvajalka projekta. [Nazaj](#)

¹² Navedite en izjemni znanstveni dosežek in/ali en izjemni družbeno-ekonomski dosežek raziskovalnega projekta v letu 2013 (največ 1000 znakov, vključno s presledki). Za dosežek pripravite diapozitiv, ki vsebuje sliko ali drugo slikovno gradivo v zvezi z izjemnim dosežkom (velikost pisave najmanj 16, približno pol strani) in opis izjemnega dosežka (velikost pisave 12, približno pol strani). Diapozitiv/-a priložite kot priponko/-i k temu poročilu. Vzorec diapozitiva je objavljen na spletni strani ARRS <http://www.arrs.gov.si/sl/gradivo/>, predstavitev dosežkov za pretekla leta pa so objavljena na spletni strani <http://www.arrs.gov.si/sl/analize/dosez/>. [Nazaj](#)

Obrazec: ARRS-RPROJ-ZP/2014 v1.03

C7-AF-3B-58-30-FD-C7-AA-79-BE-C3-6F-E7-26-29-61-DE-88-94-D6

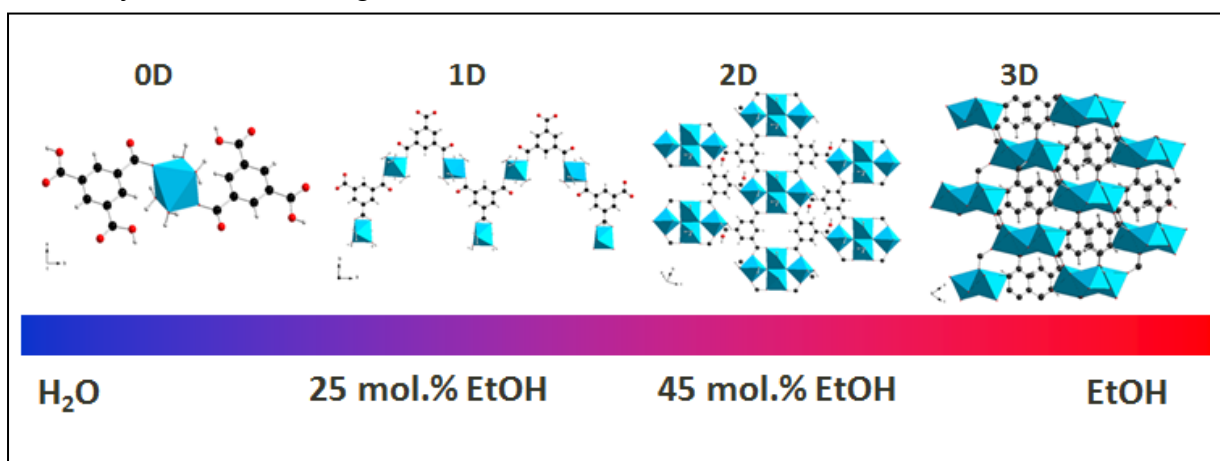
Priloga 1

NARAVOSLOVNE VEDE

Področje: 1.04 Kemija

Dosežek 1: Kontrola kristalizacijskega procesa in dimenzionalnosti struktur Mg benzen-1,3,5-trikarboksilatov s spreminjanjem sestave topila,

Vir: Cryst. Growth Design., 2013, vol. 13, issue 8, str. 3825-3834.



Sintetizirali smo štiri novih Mg benzen-1,3,5-trikarboksilatov, NICS-n (National Institute of Chemistry, n = 3 – 6) z različnimi dimenzionalnostmi. NICS-3 je 0-D molekulski kompleks, NICS-4 predstavlja 1-D veržno strukturo, NICS-5 2-D plastovito strukturo in NICS-6 3-D strukturo. Pokazali smo, da lahko pri solvotermalnih pogojih kontroliramo kristalizacijo teh faz s spreminjanjem razmerja mešanice topila etanol/voda. Pri uporabi čiste vode kristalizira NICS-3. NICS-4 nastane pri uporabi mešanice topil z EtOH/H₂O molskim razmerjem 0.3, NICS-5 pa pri mešanicah z molskim razmerjem med 0.4 in 0.7. Kristalizacija v čistem etanolu vodi do nastanka NICS-6. Z NMR spektroskopijo smo dokazali, da se večje kovinske gradbene enote formirajo v odsotnosti organskega liganda pri uporabi topila z večjim deležem etanola. Te enote se povezujejo z BTC ligandom že na samem začetku solvotermalnega procesa, v kovinsko-organske metastabilne faze, ki pa ne predstavljajo končnih struktur.