

Oznaka poročila: ARRS-RPROG-ZP-2014/66



ZAKLJUČNO POROČILO O REZULTATIH RAZISKOVALNEGA PROGRAMA

A. PODATKI O RAZISKOVALNEM PROGRAMU

1. Osnovni podatki o raziskovalnem programu

Šifra programa	P1-0134
Naslov programa	Kemija za trajnostni razvoj
Vodja programa	3439 Peter Bukovec
Obseg raziskovalnih ur	32368
Cenovni razred	C
Trajanje programa	01.2009 - 12.2013
Izvajalci raziskovalnega programa (javne raziskovalne organizacije - JRO in/ali RO s koncesijo)	103 Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo 106 Institut "Jožef Stefan"
Raziskovalno področje po šifrantu ARRS	1 NARAVOSLOVJE 1.04 Kemija
Družbeno-ekonomski cilj	13.01 Naravoslovne vede - RiR financiran iz drugih virov (ne iz SUF)
Raziskovalno področje po šifrantu FOS	1 Naravoslovne vede 1.04 Kemija

B. REZULTATI IN DOSEŽKI RAZISKOVALNEGA PROGRAMA

2. Povzetek raziskovalnega programa¹

SLO

Realizacijo raziskovalne hipoteze, programa dela in zastavljenih ciljev smo dosegli po vseh točkah navedenih v Predlogu programa za obdobje 2009-2014.

- *Halogeniranje organskih molekul v ali na vodi.* Cilji doseženi ali celo preseženi, saj smo odkrili in razvili številne nove metode selektivnega halogeniranja organskih spojin v vodnem mediju.
- *Transformacije organskih spojin pod reakcijskimi pogoji brez uporabe topil.* Cilji doseženi, razen v primeru študij z uporabo tehnik visokofrekvenčnih krogljčnih mlinov. Instrument smo sicer nabavili, toda materialni stroški za njegovo uporabo so presegali naše finančne možnosti.
- *Transformacije organskih spojin v ionskih tekočinah* Cilji doseženi, saj smo razvili

številne nove metode pot takimi reakcijskimi pogoji, nekatere v sodelovanju z University North Florida.

- *Aerobne oksidacije in druge biomimetske transformacije organskih spojin.* Cilji so doseženi in preseženi, nekatera odkritja v tem sklopu so prvenstvena v svetovnem merilu. Prav nadaljevanje raziskav na tem področju so najbolj perspektivne.
- *Elementarni jod kot katalizator transformacij organskih molekul* Cilji so doseženi, saj smo pokazali, da je molekularni jod odličen katalizator za številne transformacije alkoholov in etrov.
- *Pripravili smo nove zvrsti z več $\{Mo_2O_2(\mu_2-O)_2\}^{2+}$ strukturnimi enotami* kovalentno povezanimi prek večveznih ligandov kot je npr. pirazin. Z identifikacijo intermediatov smo vse bližje mehanizmu dimerizacije in njegovi kontroli.
- *S pripravo mešanih oksidov Ce/V z množinskim razmerjem 1* smo povečali količino izmenjanega naboja. Tako pripravljene plasti so primerne za uporabo v pametnih oknih na mestu ionskega hranilnika.
- *Razvili smo znanje na področju fotokatalitsko učinkovitih prevlek in praškastih vzorcev,* kjer se bazične kemijske znanosti povezujejo z aplikativnimi. S pridobljenim znanjem smo na dobri poti, da po enostavni in cenovno ugodno poti take plasti v prihodnje tudi pripravimo za aplikacijo.
- *Program sintez ter karakterizacije biološko pomembnih koordinacijskih spojin z* antioksidativnimi in drugimi terapevtsko zanimivimi lastnostmi je bil izveden v celoti.
- *Rezultati in obseg raziskav mobilnosti in stabilizacije toksičnih kovin* so celo presegli prvotno zastavljene raziskovalne cilje. Na osnovi naših bazičnih raziskav na področju stabilizacije PTE smo prišli do spodbudnih rezultatov in novih znanj, ki omogočajo prehod v aplikativno fazo raziskav.

ANG

The realization of scientific hypothesis, work program and goals were achieved over all subjects listened in the proposal for 2009-2014.

- *Halogenation of organic compounds in aqueous media:* The goals were completely achieved since we developed several new methods of selective halogenation of organic compounds in aqueous media
- *Transformation of organic compounds under solvent-free conditions:* Goals achieved, many new related protocols were developed
- *Transformations of organic compounds in ionic liquids:* Goals achieved, many new related protocols were developed
- *Aerobic and other biomimetics transformation of organic compound:* Goals achieved, many new related protocols were developed. Some achievements in this framework got primacy in scientific community. This research has priority in our future scientific activity.
- *We have successfully prepared novel species which consist of $\{Mo_2O_2(\mu_2-O)_2\}^{2+}$ cores* covalently linked with multidentate ligands such as pyrazine. Identification of intermediate species is of use in recognizing mechanism of dimerization and its control.
- *By preparing mixed Ce/V oxides with a molar ratio of 1* we increased the exchange rate. Layers prepared this way are suitable for use in smart windows as counter electrodes.
- *The knowledge on photocatalytically active thin films and powders has been developed,* where basic chemical knowledge links with an applicative one. With the new know-how we are on course to prepare films for application by simple and cheap synthesis route.

- *The programme of syntheses and characterizations of biologically important coordination compounds with antioxidative and other therapeutic interesting properties has been completely realized.*
- *The results and the extent of our research on mobility and fixation of toxic metals exceeded our primary research aims. Our basic studies on the field of stabilization of PTE led us to promising results and new knowledge that enables the applicative stage of research.*

3. Poročilo o realizaciji predloženega programa dela na raziskovalnem programu²

SLO

Študirali smo komplekse molibdena z organskimi ligandi, kot modelne spojine pri preučevanju mehanizma prenosa kisikovega atoma z/na organski substrat. Spojine z dvojedrnimi $[(\text{MoOX}_4)_2(\text{Pyz})]^{2-}$ ioni kažejo zanimivo temperaturno odvisnost magnetnih lastnosti. Le-ta je pogojena z intermolekularnimi interakcijami, ki so odvisne od narave kationov. Zaključili smo tudi raziskave vloge molibdenovih kompleksov pri oksidativni cepitvi 3-fenilmlečne kisline. Raziskovali smo tanke plasti CeO_2 , pripravljenih po sol-gel postopku, ki so namenjene uporabi v pametnih oknih na mestu ionskega hranilnika. Z dodajanjem bakra in vanadija cerijevemu solu v različnih razmerjih smo povečali količino izmenjanega naboja v plasti. Pripravili smo elektro-aktiven platinski katalizator pri nizki temperaturi (100 °C), ki je namenjen uporabi v fleksibilni Grätzlovi sončni celici. Celica s katalizatorjem, pripravljenim pri 100 °C je imela boljši izkoristek. Razvili smo metodo nanosa prevodne plasti platine na steklene in fleksibilne substrate. Stabilen sol TiO_2 smo s tehniko potapljanja nanесли na podlago, ga termično obdelali in določili fotokatalitsko učinkovitost. Fotokatalitsko učinkovitost smo še izboljšali z dodatkom organskega polimera, ki je povečal debelino in poroznost tanke plasti. Končali smo računske študije vezave kovinskih ionov na hialuronatno makromolekulo, ter pričeli z raziskavami kovinskih kompleksov s ksanturinsko kislino. Pripravili smo dve bakrovi koordinacijski spojini s sestavo $[\text{Cu}(\text{Xan})(\text{H}_2\text{O})_2]$ in $[\text{Cu}(\text{Xan})(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$ in dva različna kompleksa s paladijem, $[\text{PdXan}(\text{H}_2\text{O})]$ in $[\text{Pd}_2(\text{Xan})_2(\text{DMSO})_2] \cdot 2\text{DMSO}$. Pri vseh smo določili kristalne strukture. Določili smo tudi kristalno strukturo dvojedrne kadmijeve spojine $[\text{Cd}_2(\text{Xan})_2(\text{H}_2\text{O})_4]$. Raziskave so nas pripeljale do odkritja nove polimorfne modifikacije ksanturinske kisline, ter raziskav samih izhodnih soli ksanturenatov (kalijeve, natrijeve, amonijeve, tetrabutil amonijeve soli) in solvatov ksanturinske kisline (DMSO, voda). Vpeljali smo različne metode za določevanje antioksidativnih lastnosti: metoda ABTS, metoda DPPH in metoda lipidne peroksidacije. Preučevali smo antioksidativne lastnosti raztopin same izhodne ksanturinske kisline in z njo pripravljenih kompleksov. Iz dobljenih rezultatov lahko sklepamo, da antioksidativna kapaciteta poveča vezava bakrovih oziroma paladijevih ionov na ksanturenatni anion. Preučevali smo koordinacijske spojine kurkumina s Cu(II), Pt(II), Mn(III) in s Zn(II) ter v nekaterih primerih določili njihovo kristalno strukturo. Proučevali smo mobilnost potencialno toksičnih elementov (PTE), njihove poti v okolju in kemijsko stabilizacijo PTE v onesnaženih tleh in trdnih odpadkih. Izvedli smo obširno raziskavo z umetno onesnaženimi tlemi, katerih koncentracije Pb in Zn so dosegale povprečne vrednosti, ki so jih našli v Mežici. Proučevali smo mobilnost PTE v tleh ter izvedli njihovo stabilizacijo z dodatkom fosfatov. Razvili smo selektivno in učinkovito metodo za direktno fluoriranje ketonov in 1,3-diketonov v vodnem mediju z reagentom F-TEDA- BF_4 ob prisotnosti anionskega surfaktanta ali pod pogoji brez uporabe topil. Opravili smo obsežne raziskave vpliva substituentov vezanih v 1,3-diketonski del molekule na konformacijske ter fotofizikalne lastnosti ter študirali možnost selektivne uvedbe halogenskih atomov. Proučili smo tudi transformacije organskih spojin z F-TEDA- BF_4 v ionskih tekočinah in razvili novo metodo za pretvorbo terciarnih alkoholov v vicinalne fluorohidrine v vodnem mediju. Razvili smo novo metodo oksidativnega halogeniranja organskih spojin v ionskih tekočinah, ki vsebujejo nitrat kot anionsko komponento, HBr ali HCl pa kot vir halogenov. Razvili smo metodo halogeniranja z NXS reagenti v ionskih tekočinah s kislinsko funkcijo. Prvim na svetu nam je uspelo razviti neencimatsko metodo aerobnega oksidativnega halogeniranja organskih molekul v vodnem mediju. Ketone smo selektivno in učinkovito jodirali v vodnem mediju z uporabo joda, zraka kot oksidanta, NaNO_2 kot katalizatorja in H_2SO_4 kot aktivatorja celotnega sistema. Razvili smo okolju prijazno metodo za dibromiranje alkenov po načinu aerobnega oksidativnega bromiranja z 48% vodnim HBr in NaNO_2 kot katalizatorjem. Odkrili in razvili smo novo metodo za aerobno oksidativno halogeniranje organskih spojin, osnovano na katalitskem ciklusu dušikovih oksidov, ki imajo izvor v kislinsko in termično podprti transformaciji nitratnega aniona, kot vir halogenskih atomov pa jod ali halogenidne anione. Podoben katalitski sistem smo uporabili pri razvoju nove metode aerobne oksidacije alkoholov selektivno do aldehydov ali ketonov. Razvili smo okolju

prijazno metodo za elektrofilno in radikalsko bromiranje organskih spojin v vodnem mediju z uporabo reakcijskega sistema $\text{HBr}/\text{H}_2\text{O}_2$ ali NBS. Razvili smo metodo oksidacije sulfidov do sulfonov z 30% vodnim H_2O_2 . Razvili smo metodo benzilnega bromiranja alkil aromatov z NBS pod pogoji brez uporabe topila aktivirano z vidno svetlobo. Sintetizirali smo vrsto alkil in aril jod (III) dikloridov, ki vsebujejo perfluoroalkilne verige in jih uporabili kot obnovljive reagente za kloriranje organskih spojin. Odkrili in razvili smo novo metodo za sintezo jod(I) dikloridov po oksidativnem postopku z H_2O_2 in jih uporabili za obnovljive reagente za jodiranje organskih spojin. Jod smo uporabili kot katalizator za transformacije alkoholov v etre ali estre, ter disproporcionacijo arilnih etrov pod pogoji brez topila. Rezultate raziskav smo v obdobju 2009-2013 objavili v 70 originalnih znanstvenih člankih in 8 preglednih člankih od tega 5 v vodilnih revijah SCI področja (ASCat., Angew., J. Power Sources, J. Eur. Ceram. Soc.), 20 v revijah v prvi četrtini kvalitete (Green Chem., Org. Lett., OBC, JOC, Cryst. Eng. Comm., Waste manag., Europ. Jour. Inor. Chem., New J. Chem., Inorg. Chem., Sol. Energ. Mat. Sol. Cells, Mater. Res. Bull., J. Chem. Technol. Biotechnol., Desalination).

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

SLO

Realizacijo raziskovalne hipoteze, programa dela in zastavljenih ciljev smo dosegli po vseh točkah navedenih v Predlogu programa za obdobje 2009-2014.

- *Halogeniranje organskih molekul v ali na vodi.* Cilji doseženi ali celo preseženi, saj smo odkrili in razvili številne nove metode selektivnega halogeniranja organskih spojin v vodnem mediju.
- *Transformacije organskih spojin pod reakcijskimi pogoji brez uporabe topil.* Cilji doseženi, razen v primeru študij z uporabo tehnik visokofrekvenčnih krogličnih mlinov. Instrument smo sicer nabavili, toda materialni stroški za njegovo uporabo so presegali naše finančne možnosti.
- *Transformacije organskih spojin v ionskih tekočinah* Cilji doseženi, saj smo razvili številne nove metode pot takimi reakcijskimi pogoji, nekatere v sodelovanju z University North Florida.
- *Aerobne oksidacije in druge biomimetske transformacije organskih spojin.* Cilji so doseženi in preseženi, nekatera odkritja v tem sklopu so prvenstvena v svetovnem merilu. Prav nadaljevanje raziskav na tem področju so najbolj perspektivne.
- *Elementarni jod kot katalizator transformacij organskih molekul* Cilji so doseženi, saj smo pokazali, da je molekularni jod odličen katalizator za številne transformacije alkoholov in etrov.
- *Pripravili smo nove zvrsti z več $\{\text{Mo}_2\text{O}_2(\mu_2\text{-O})_2\}^{2+}$ strukturnimi enotami* kovalentno povezanimi prek večveznih ligandov kot je npr. pirazin. Z identifikacijo intermediatov smo vse bližje mehanizmu dimerizacije in njegovi kontroli.
- *S pripravo mešanih oksidov Ce/V z množinskim razmerjem 1* smo povečali količino izmenjanega naboja. Tako pripravljene plasti so primerne za uporabo v pametnih oknih na mestu ionskega hranilnika.
- *Razvili smo znanje na področju fotokatalitsko učinkovitih prevlek in praškastih vzorcev,* kjer se bazične kemijske znanosti povezujejo z aplikativnimi. S pridobljenim znanjem smo na dobri poti, da po enostavni in cenovno ugodno poti take plasti v prihodnje tudi pripravimo za aplikacijo.
- *Program sintez ter karakterizacije biološko pomembnih koordinacijskih spojin z antioksidativnimi in drugimi terapevtsko zanimivimi lastnostmi* je bil izveden v

celoti.

- *Rezultati in obseg raziskav mobilnosti in stabilizacije toksičnih kovin so celo presegli prvotno zastavljene raziskovalne cilje. Na osnovi naših bazičnih raziskav na področju stabilizacije PTE smo prišli do spodbudnih rezultatov in novih znanj, ki omogočajo prehod v aplikativno fazo raziskav.*

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

/

6. Najpomembnejši znanstveni rezultati programske skupine⁵

	Znanstveni dosežek		
1.	COBISS ID	36212485	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Računalniško modeliranje vezave kalcija(II) in bakra(II) na molekulo hialuronske kisline
		ANG	A computational study of calcium(II) and copper(II) ion binding to the hyaluronate molecule
	Opis	SLO	Hialuronatna molekula je negativno nabit polisaharid, ki ima, odvisno od njene konformacije, vrsto fizioloških funkcij v različnih tkivnih celicah. V tem prispevku je predstavljeno molekularno modeliranje na treh teoretskih nivojih in dveh baznih setih, ki omogoča globlji vpogled v kompleksno molekularno strukturo kalcijevega(II) in bakrovega(II) hialuronata. Rezultati simulacije so primerjani z eksperimentalnimi podatki (EXAFS ali X-žarki). Ugotovljeno je bilo, da B3LYP ne reproducira primerno eksperimentalnih podatkov, medtem ko HF in M06 metoda to omogočata. Podatki simulacije potrjujejo, da N-acetil skupina N-acetilglukozamina ne sodeluje v koordinacijski vezavi na kalcijev(II) ali bakrov(II) ion, kar je evidentno tudi iz eksperimentalnih podatkov.
		ANG	The hyaluronate molecule is a negatively charged polysaccharide that performs a plethora of physiological functions in many cell tissues depending on its conformation. In the present paper, molecular modeling at three levels of theory and two basis sets was used to gain a deeper insight in the complex molecular structure of calcium(II) and copper(II) hyaluronate. Simulation results were compared with the experimental data (EXAFS or X-ray). It was found that B3LYP does not properly reproduce the experimental data while the HF and M06 methods do. Simulation data confirm that the N-acetyl group of the N-acetylglucosamine residue does not participate in the coordination bonding to the calcium(II) or copper(II) ion, as evident from the experimental data.
	Objavljeno v	Molecular Diversity Preservation International MDPI; International journal of molecular sciences; 2012; Vol. 13, no. 9; str. 12036-12045; Impact Factor: 2.464;Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 3.175; Avtorji / Authors: Tratar-Pirc Elizabeta, Zidar Jernej, Bukovec Peter	
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	
2.	COBISS ID	33263365	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Mobilnost soli v zasajeni deponiji z recirkulacijo izcedne vode
		ANG	Fate of saline ions in a planted landfill site with leachate recirculation
			Recirkulacija izcedne vode pokrite komunalne deponije z nasajenimi vrbami ali drugimi evapotranspirativnimi olesenelimi rastlinami predstavlja poceni rešitev pri upravljanju izcednih vod. V študiji sanirane zaprte deponije, z zasajeno prekrivno plastjo, je bil vzpostavljen sistem recirkulacije izcedne vode. Glavni namen študije je bil določiti trajnostno naravnost sistema z

	Opis	SLO	ozirom na hidravlične obremenitve izcedne vode v prekrivni plasti in visokih koncentracij soli, posebno kalija (K+), natrija (Na+) in klorida (Cl-) v izcedni vodi. Rezultati intenzivnega štiriletnega monitoringa, ki je vključeval izcedno vodo, ter vzorce zemlje in rastlin, je pokazal visoko trajnostno naravnost sistema z ozirom na koncentracije soli in režim padavin v regiji.	
		ANG	Recirculation of leachate on a covered landfill site planted with willows or other highly evapotranspirative woody plants is an inexpensive option for leachate management. In our study, a closed landfill leachate recirculation system was established on a rehabilitated municipal solid waste landfill site with planted landfill cover. The main objective of the study was to evaluate the sustainability of the system with regard to high hydraulic loads of the landfill leachate on the landfill cover and high concentrations of saline ions, especially potassium (K+), sodium (Na+) and chloride (Cl-), in leachate. The results of intensive four years monitoring, including leachate, soil and plant samples, showed a high sustainability of the system regarding saline ions with the precipitation regime of the studied region.	
	Objavljeno v	Pergamon; Waste management; 2010; Vol. 30, no. 1; str. 110-118; Impact Factor: 2.358;Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 1.886; A': 1; WoS: IH, JA; Avtorji / Authors: Lončnar Mojca, Zupančič Marija, Bukovec Peter, Zupančič Justin Maja		
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek		
3.	COBISS ID	35850757		Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Vpliv staranja odlagališč odpadkov na spreminjanje fitotoksičnosti izcednih voda	
		ANG	Variation of landfill leachate phytotoxicity due to landfill ageing	
	Opis	SLO	V objavljeni študiji smo proučevali sestavo in fitotoksičnost dveh vrst izcednih voda. Izcedne vode, ki so nastajale v aktivnem delu odlagališča, so bile precej bolj onesnažene in bolj toksične kot izcedne vode iz zaprtega dela odlagališča, ki niso pokazale zaviralnih učinkov na rast korenin testnih rastlin. V primeru obeh vrst izcednih voda smo opazili najvišjo toksičnost v prvih dneh kalitve. Rezultati raziskave so pokazali, da verjetno pride v zaprtem delu odlagališča do razgradnje toksičnih onesnažil v rastlinam manj toksične oblike in da je fitoremediacija ustrezna metoda čiščenja izcednih voda iz zaprtega dela odlagališča.	
		ANG	Phytotoxicity and composition of two landfill leachates were studied. Phytotoxicity testing and physico-chemical parameters showed that the leachate generated in the active part of the landfill was significantly polluted and more toxic to plants than the leachate generated in the closed part of the landfill, which did not cause any significant adverse effects on root growth of plants tested in soil. However, the highest toxic effect of both leachates has been observed in the first days of plant germination. Phytotoxic pollutants have probably been degraded in the closed part of the landfill and leachates from such landfills are not significantly toxic to plants. Therefore phytoremediation appeared to be an appropriate	

			restoration and treatment method.
	Objavljeno v	John Wiley & Sons; Journal of chemical technology and biotechnology; 2012; Vol. 87, no. 9; str. 1349-1353; Impact Factor: 2.504; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 1.598; A': 1; WoS: DB, DY, II; Avtorji / Authors: Kalčíková Gabriela, Zagorc-Končan Jana, Zupančič Marija, Žgajnar Gotvajn Andreja	
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	
4.	COBISS ID	24083239	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Prispevek k bolj zeleni organski kemiji fluora
		ANG	Towards greener fluorine organic chemistry
	Opis	SLO	Na povabilo urednika smo v posebni izdaji vodilne revije na področju aplikativne kemije Advanced Synthesis & Catalysis posvečene fluoroorganski kemiji s povdankom na okolju prijaznih pristopih, objavili članek s katerim smo pokazali, da je mogoče organske spojine selektivno in učinkovito fluorirati tako v vodnem mediju kot pod reakcijskimi pogoji brez porabe topil (RPBUT). Celo vrsto 1,3diketonovin beta keto estrov smo z reagentom FTEDA BF ₄ pretvorili v alfa fluoro derivate tako v vodi kot pod RPBUT, prav tako pa smo prvi pokazali, da je mogoče pod RPBUT tudi direktno fluorirati ketone. Publikacija pomeni največji uspeh laboratorija v zadnjih letih.
		ANG	On the basis of editorial invitation we published the article in the special issue of the leading journal for applied chemistry Advanced Synthesis & Catalysis dedicated to the environmentally friendly organofluorine chemistry. We showed that organic compounds could be selectively and efficiently fluorinated in water medium or under solvenfree reaction conditions (SFRC). A serie of 1,3diketones and beta keto esters were transformed to their alpha fluoro derivatives in water and under SFRC, while we first succeeded in the direct fluorination of ketones under SFRC. The present publication represents the greatest achievement of our laboratory in the last five years.
	Objavljeno v	Wiley-VCH Verlag GmbH; Advanced Synthesis & Catalysis; 2010; Vol. 352, no. 16; str. 2838-3846; Impact Factor: 5.250; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 1.385; A'': 1; A': 1; WoS: DW, EE; Avtorji / Authors: Stavber Gaj, Stavber Stojan	
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	

7. Najpomembnejši družbeno-ekonomski rezultati programske skupine⁶

	Družbeno-ekonomski dosežek		
1.	COBISS ID	256764416	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Serija učbenikov: Kemija za gimnazije 1
		ANG	A serious of textbooks on chemistry for gymnasium

	Opis	SLO	BUKOVEC, Nataša. Kemija za gimnazije 1, Zbirka nalog za 1. letnik gimnazij. 1. izd. Ljubljana: DZS, 2011. 64 str., ilustr. ISBN 978-961-02-0254-7. [COBISS.SI-ID 256764416] BUKOVEC, Nataša. Kemija za gimnazije : učbenik za 2. letnik gimnazij. 1. izd. Ljubljana: DZS, 2010. 152 str., ilustr. ISBN 978-961-02-0078-9. [COBISS.SI-ID 250484480] BUKOVEC, Nataša. Kemija za gimnazije 1, Učbenik za 1. letnik gimnazij. 1. izd. Ljubljana: DZS, 2009. 144 str., ilustr. ISBN 978-961-02-0076-5. [COBISS.SI-ID 245837824] BUKOVEC, Nataša, DOLENC, Darko, ŠKET, Boris. Chimica 2 per il ginnasio, Libro di testo. 1a ed. Ljubljana: Zavod Republike Slovenije za šolstvo; Lubiana: = Istituto dell'educazione della Repubblica di Slovenia, 2008. 272 str., ilustr. ISBN 978-961-234-673-7. [COBISS.SI-ID 240947456] BUKOVEC, Nataša, BRENČIČ, Jurij. Kemija za gimnazije 1, Učbenik. 1. izd. Ljubljana: DZS, 2008. 160 str., ilustr. ISBN 978-86-341-2497-2. [COBISS.SI-ID 241194752] BUKOVEC, Nataša, DOLENC, Darko, ŠKET, Boris. Kemija za gimnazije 2, Učbenik. 2. izd. Ljubljana: DZS, 2008. 272 str., ilustr. ISBN 978-86-341-4018-7. [COBISS.SI-ID 237255936]	
			BUKOVEC, Nataša. Kemija za gimnazije 1, Zbirka nalog za 1. letnik gimnazij. 1. izd. Ljubljana: DZS, 2011. 64 str., ilustr. ISBN 978-961-02-0254-7. [COBISS.SI-ID 256764416] BUKOVEC, Nataša. Kemija za gimnazije : učbenik za 2. letnik gimnazij. 1. izd. Ljubljana: DZS, 2010. 152 str., ilustr. ISBN 978-961-02-0078-9. [COBISS.SI-ID 250484480] BUKOVEC, Nataša. Kemija za gimnazije 1, Učbenik za 1. letnik gimnazij. 1. izd. Ljubljana: DZS, 2009. 144 str., ilustr. ISBN 978-961-02-0076-5. [COBISS.SI-ID 245837824] BUKOVEC, Nataša, DOLENC, Darko, ŠKET, Boris. Chimica 2 per il ginnasio, Libro di testo. 1a ed. Ljubljana: Zavod Republike Slovenije za šolstvo; Lubiana: = Istituto dell'educazione della Repubblica di Slovenia, 2008. 272 str., ilustr. ISBN 978-961-234-673-7. [COBISS.SI-ID 240947456] BUKOVEC, Nataša, BRENČIČ, Jurij. Kemija za gimnazije 1, Učbenik. 1. izd. Ljubljana: DZS, 2008. 160 str., ilustr. ISBN 978-86-341-2497-2. [COBISS.SI-ID 241194752] BUKOVEC, Nataša, DOLENC, Darko, ŠKET, Boris. Kemija za gimnazije 2, Učbenik. 2. izd. Ljubljana: DZS, 2008. 272 str., ilustr. ISBN 978-86-341-4018-7. [COBISS.SI-ID 237255936]	
			Šifra D.10 Pedagoško delo	
			Objavljeno v DZS; 2011; 64 str.; Avtorji / Authors: Bukovec Nataša	
			Tipologija 2.04 Srednješolski, osnovnošolski ali drugi učbenik z recenzijo	
2.	COBISS ID	266902784		Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Mentorstva pri doktorskih disertacijah	
		ANG	Mentors of PhD theses	
			ŠAUTA OGOREVC, Jerneja. Karakterizacija in fotokatalitska aktivnost po sol-gel postopku pripravljenih tankih plasti TiO [sub] 2 : doktorska disertacija. Ljubljana: [J. Š. Ogorevc], 2013. [IX], 97 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 266902784] CER KERČMAR, Ksenija. Koordinacijske spojine s ksanturinsko kislino in drugimi biološko zanimivimi ligandi : doktorska disertacija. Ljubljana: [K. Cer-Kerčmar], 2013. X, 199 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 267004160] FRANCETIČ, Vojmir. Vpliv samourejanja aluminijevih koordinacijskih spojin pri sol-gel pripravi Al [spodaj] 2 O [spodaj] 3 : doktorska disertacija. Ljubljana: [V. Francetič], 2009. 100 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 248294400] ČELAN KOROŠIN, Nataša. Priprava in karakterizacija luminiscentnih aluminatov : doktorska disertacija. Ljubljana: [N. Čelan Korošin], 2012.	

	Opis	100 f., ilustr., preglednice. [COBISS.SI-ID 263395328] KOZJEK-ŠKOFIC, Irena. Lastnosti tankih plasti cerijevega dioksida in mešanih oksidov cerija z vanadijem in bakrom : doktorska disertacija. Ljubljana: [I. Kozjek Škofic], 2008. 124 f., graf. prikazi, tabele. [COBISS.SI-ID 242923776] ŠAUTA OGOREVC, Jerneja. Characterization and photocatalytic activity of sol-gel prepared thin layers of TiO [sub] 2 : doktorska disertacija. Ljubljana: [J. Š. Ogorevc], 2013. [IX], 97 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 266902784] CER KERČMAR, Ksenija. Coordination compounds of xanturenic acid other biologically interesting ligands: doktorska disertacija. Ljubljana: [K. Cer-Kerčmar], 2013. X, 199 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 267004160] FRANCETIČ, Vojmir. Influence of aluminium coordination compounds selfarrangement on sol-gel preparation of Al [spodaj] 2 O [spodaj] 3 : doktorska disertacija. Ljubljana: [V. Francetič], 2009. 100 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 248294400] STAVBER, Gaj. Vpliv reakcijskih pogojev na transformacije fenil substituiranih alkoholov, alkenov in ketonov z X-L reagenti : doktorska disertacija. Ljubljana: [G. Stavber], 2009. 211 str., [30] str. pril., ilustr. [COBISS.SI-ID 30329093] PAVLINAC, Jasminka. Raziskave reakcijskih pogojev za jodo- in fluorotransformacije organskih molekul : doktorska disertacija. Ljubljana: [J. Pavlinac], 2009. IX, 204 str., [44] str. pril., ilustr., tabele. [COBISS.SI-ID 22548263] PODGORŠEK, Ajda. Študij halogeniranja organskih molekul v vodi in fluoriranih topilih : doktorska disertacija. Ljubljana: [A. Podgoršek], 2009. 239 str., [41] str. pril., ilustr., tabele. [COBISS.SI-ID 22549287] ŠAUTA OGOREVC, Jerneja. Karakterizacija in fotokatalitska aktivnost po sol-gel postopku pripravljenih tankih plasti TiO [sub] 2 : doktorska disertacija. Ljubljana: [J. Š. Ogorevc], 2013. [IX], 97 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 266902784] CER KERČMAR, Ksenija. Koordinacijske spojine s ksanturinsko kislino in drugimi biološko zanimivimi ligandi : doktorska disertacija. Ljubljana: [K. Cer-Kerčmar], 2013. X, 199 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 267004160] FRANCETIČ, Vojmir. Vpliv samourejanja aluminijevih koordinacijskih spojin pri sol-gel pripravi Al [spodaj] 2 O [spodaj] 3 : doktorska disertacija. Ljubljana: [V. Francetič], 2009. 100 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 248294400] ČELAN KOROŠIN, Nataša. Priprava in karakterizacija luminiscentnih aluminatov : doktorska disertacija. Ljubljana: [N. Čelan Korošin], 2012. 100 f., ilustr., preglednice. [COBISS.SI-ID 263395328] KOZJEK-ŠKOFIC, Irena. Lastnosti tankih plasti cerijevega dioksida in mešanih oksidov cerija z vanadijem in bakrom : doktorska disertacija. Ljubljana: [I. Kozjek Škofic], 2008. 124 f., graf. prikazi, tabele. [COBISS.SI-ID 242923776] ŠAUTA OGOREVC, Jerneja. Characterization and photocatalytic activity of sol-gel prepared thin layers of TiO [sub] 2 : doktorska disertacija. Ljubljana: [J. Š. Ogorevc], 2013. [IX], 97 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 266902784] CER KERČMAR, Ksenija. Coordination compounds of xanturenic acid other biologically interesting ligands: doktorska disertacija. Ljubljana: [K. Cer-Kerčmar], 2013. X, 199 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 267004160] FRANCETIČ, Vojmir. Influence of aluminium coordination compounds selfarrangement on sol-gel preparation of Al [spodaj] 2 O [spodaj] 3 : doktorska disertacija. Ljubljana: [V. Francetič], 2009. 100 f., ilustr. [COBISS.SI-ID 248294400] STAVBER, Gaj. Vpliv reakcijskih pogojev na transformacije fenil substituiranih alkoholov, alkenov in ketonov z X-L reagenti : doktorska disertacija. Ljubljana: [G. Stavber], 2009. 211 str., [30] str. pril., ilustr. [COBISS.SI-ID 30329093]
--	------	---

		PAVLINAC, Jasminka. Raziskave reakcijskih pogojev za jodo- in fluorotransformacije organskih molekul : doktorska disertacija. Ljubljana: [J. Pavlinac], 2009. IX, 204 str., [44] str. pril., ilustr., tabele. [COBISS.SI-ID 22548263] PODGORŠEK, Ajda. Študij halogeniranj organskih molekul v vodi in fluoriranih topilih : doktorska disertacija. Ljubljana: [A. Podgoršek], 2009. 239 str., [41] str. pril., ilustr., tabele. [COBISS.SI-ID 22549287]
	Šifra	D.09 Mentorstvo doktorandom
	Objavljeno v	[J. Š. Ogorevc]; 2013; [IX], 97 f.; Avtorji / Authors: Šauta Ogorevc Jerneja
	Tipologija	2.08 Doktorska disertacija
3.	COBISS ID	23722791 Vir: COBISS.SI
	Naslov	<i>SLO</i> Postopek za preparacijo marbofloxacin in njegovih derivatov <i>ANG</i> A process for a preparation of marbofloxacin and intermediate thereof
	Opis	<i>SLO</i> V sodelovanju s podjetjem Krka d.d. smo razvili nov postopek za antibiotik marboflaxacin, ki ga bo po tem postopku podjetje tudi proizvajalo in nato tržilo. <i>ANG</i> In the cooperation with the company Krka, we developed a new procedure for preparation of antibiotic API product marboflaxacin, which will be produced following our original protocol and offered in the market.
	Šifra	F.06 Razvoj novega izdelka
	Objavljeno v	World Intellectual Property Organization, International Bureau; 2011; Avtorji / Authors: Zupet Rok, Pečavar Anica, Iskra Jernej, Ružič Miloš, Kolenc Ivanka
	Tipologija	2.23 Patentna prijava

8. Drugi pomembni rezultati programske skupine⁷

Ciklus vabljenih predavanj na tujih univerzah 36656645

TRATAR-PIRC, Elizabeta. [Bioplastics - what is it? : Beuth Hochschule für Technik Berlin, University of Applied Sciences, Berlin, March 25th, 2013]. [2013]. [COBISS.SI-ID 36656645]

TRATAR-PIRC, Elizabeta. [Preparation of plastic films based on starch : Beuth Hochschule für Technik Berlin, University of Applied Sciences, Berlin, March 25th, 2013]. [2013]. [COBISS.SI-ID 36656901]

TRATAR-PIRC, Elizabeta. Determination of anaerobic biodegradability : [Slovak University of Technology in Bratislava, Faculty of Chemical and Food Technology, Bratislava, December 19th, 2011]. Bratislava, 2011. [COBISS.SI-ID 35656453]

9. Pomen raziskovalnih rezultatov programske skupine⁸

9.1. Pomen za razvoj znanosti⁹

SLO

Materiali, ki kažejo intenzivno fluorescenco v trdnem stanju, so potencialne spojine, ki se lahko uporabijo tako za organska elektroluminiscenčna sredstva, za fluorescenčne senzorje kot tudi za fotodinamično terapijo.

Pretvorbe pod reakcijskimi pogoji brez topil pomembno prispevajo k manjši porabi topil in s tem k pocenitvi procesa. V več primerih smo pretvorbe izvedli z visoko stopnjo atomske ekonomije, kar odpira potencialne možnosti za izvedbo procesov v večjem merilu.

Obširni rezultati in znanja, ki smo jih pridobili, so dovolj zreli za naslednjo stopnjo – demonstracijski projekt stabilizacije PTE na samem mestu onesnaženja.

ANG

Materials that exhibit intensive fluorescence in solid state can be potentially used as organic electroluminescence devices, fluorescent sensors, and in photodynamic therapy.

Transformation under the solvent-free reaction conditions contribute importantly to the reduction of use of solvents and enhance the cost efficiency. Reactions with high degree of the atomic economy were demonstrated in several cases, thus opening the potential feasibility of processes on a larger scale.

Extensive results gave us sufficient knowledge to perform second research step – demonstration project of in situ stabilization of PTE.

9.2. Pomen za razvoj Slovenije¹⁰

SLO

Rezultati osnovnih raziskav v okviru programa imajo znatno potencialno aplikativno vrednost, saj so nove tehnologije, ki temeljijo na principih zelene kemije prioriteta kemijske in farmacevtske industrije. Posebno potencialno aplikativno vrednost imajo naša odkritja na področju aerobnih oksidativnih transformacij organskih molekul in oksidativnih transformacij z uporabo vodikovega peroksida. Znanje pridobljeno v okviru programa smo že dejansko uporabili pri sodelovanju s podjetjem sledečimi podjetji:

Krka d.d.: novi postopki za sintezo aktivnih farmacevtskih učinkovin. Produkti so v redni proizvodnji, dodana vrednost se meri v MIO euro

ACIES BIO: novi postopki za sintezo malih molekul, prekursorjev v biosintezi aktivnih farmacevtskih učinkovin. Postopki so sicer šele v testiranju na laboratorijske in polpilotnem nivoju, rezultati so obetavni, dodana vrednost se bo merila v MIO evrih

Ecot d.o.o.: Za podjetje smo razvili več deset novih izdelkov iz področja nehumane kozmetike (čistila, avtokozmetika...), ki so okolju bolj prijazni. Dosedanje dodana vrednost ocenjujemo na več 10 tisoč Euro

Semenarna d.d. : Nov gametocid, ki smo ga v sodelovanju razvili in patentno zaščitili je preliminarно pokazal primerljivo, oz. boljšo aktivnost kot pri do sedaj znani selekcijski pridelavi pšenice. Potencialna dodana vrednost bo znatna, v kolikor bo Semenarni uspelo trženje.

ANG

The results of the basic research achieved in the framework of the programme have considerable applicative impact since the application of the principles of green chemistry in new technologies is an essential priority in chemical and pharmaceutical industry. The most relevant importance of our inventions is those dealing with aerobic oxidative transformations of organic compounds accompanied with use of aqueous hydrogen peroxide as the oxidant in chemical synthesis. The knowledge get in the programme have already been used in the following cooperation with Slovene companies:

- Krka Pharmaceuticals: Commercialisation of new protocols for APIs production developed in our laboratories should bring incomes measured in MIO euros

- ACIES BIO; hightec Biotechnology Company. New protocols for synthesis of small molecules syntnones for biosynthesis of APIs developed in our laboratories are actually in preliminarily tested on laboratory and semi-pilot scale. When commercialized should result in MIO euros incomes.

- Ecot; non human cosmetics productions; The regarding environmentally friendly new products (auto cosmetics, cleaning products..) developed in our laboratories have been already commercialized with cca 100.000 euros income.

- Semenarna agrochemicals: The new gametocide developed and on laboratory scale prepared in our laboratories has demonstrated even better activity than those actually used in agrochemical treatment of wheat. If commercialized, its production should bring considerable income

10. Zaključena mentorstva članov programske skupine pri vzgoji kadrov v obdobju 1.1.2009-31.12.2013¹¹

10.1. Diplome¹²

vrsta usposabljanja	število diplom

bolonjski program - I. stopnja	10
bolonjski program - II. stopnja	3
univerzitetni (stari) program	46

10.2. Magisterij znanosti in doktorat znanosti¹³

Šifra raziskovalca	Ime in priimek	Mag.	Dr.	MR	
		☐	☐	☐	

Legenda:

Mag. - Znanstveni magisterij**Dr.** - Doktorat znanosti**MR** - mladi raziskovalec**11. Pretok mladih raziskovalcev – zaposlitev po zaključenem usposabljanju¹⁴**

Šifra raziskovalca	Ime in priimek	Mag.	Dr.	Zaposlitev	
21628	Nataša Čelan Korošin	☐	☒	D - Javni zavod	
18194	Vojmir Francetič	☐	☒	D - Javni zavod	
27823	Jerneja Šauta Ogorevc	☐	☒	C - Gospodarstvo	
29927	Ksenija Cer Kerčmar	☐	☒	C - Gospodarstvo	
30890	Dejan Vražič	☐	☒	A - raziskovalni zavodi	
17991	Primož Pavšič	☐	☒	A - raziskovalni zavodi	
25633	Ajda Podgoršek Berke	☐	☒	C - Gospodarstvo	
25654	Jasminka Pavlinac	☐	☒	A - raziskovalni zavodi	
26547	Gaj Stavber	☐	☒	A - raziskovalni zavodi	
32145	Leon Bedrač	☐	☒	A - raziskovalni zavodi	

Legenda zaposlitev:

A - visokošolski in javni raziskovalni zavodi**B** - gospodarstvo**C** - javna uprava**D** - družbene dejavnosti**E** - tujina**F** - drugo**12. Vključenost raziskovalcev iz podjetij in gostovanje raziskovalcev, podoktorandov ter študentov iz tujine, daljše od enega meseca, v obdobju 1.1.2009-31.12.2013**

Šifra raziskovalca	Ime in priimek	Sodelovanje v programski skupini	Število mesecev	

Legenda sodelovanja v programski skupini:

A - raziskovalec/strokovnjak iz podjetja

B - uveljavljeni raziskovalec iz tujine
C - študent – doktorand iz tujine
D - poddoktorand iz tujine

13. Vključevanje v raziskovalne programe Evropske unije in v druge mednarodne raziskovalne in razvojne programe ter drugo mednarodno sodelovanje v obdobju 1.1.2009-31.12.2013 z vsebinsko obrazložitvijo porabe dodeljenih sredstev iz naslova dodatnega letnega sofinanciranja mednarodnega sodelovanja na podlagi pozivov za EU vpetost.¹⁵

SLO

Vključenost članov programske skupine v centre odličnosti:

Center odličnosti CIPKeBiP: S. Stavber; J. Iskra; pridobljena oprema v višini 230.000 euro

Center odličnosti CO ENFIST: Peter Bukovec, Elizabeta Tratar Pirc, pridobljena oprema v višini 400.000 euro

Center odličnosti CO NOT: Peter Bukovec, Nataša Bukovec, Irena Kozjek Škofic, Damjan Erčulj, pridobljena oprema v višini 250.000 euro

Članica (Romana Cerc Korošec) upravnega odbora COST 540: *Fotokatalitske tehnologije in novi nanopovršinski materiali – bistveneazprave* - od maja 2007 do januarja 2010.

Sodelovali smo v evropskem projektu *COST D39 (Metallo-drug design and action, Working Group 6: Platinum-based metallo-drugs; beyond cisplatin and its analogs)* v obdobju od 19.7.2006 do 18.7.2011.

CMST COST Action CM1205: Catalytic Routines for Small Molecule Activation (CARISMA), 21. 11. 2012, Jernej Iskra, Upravni odbor

CMST COST Action D29: Sustainable/Green Chemistry and Chemical Technology, 21/06/2002-20/06/2007; Jernej Iskra

Znanstveno tehnološko sodelovanje z Republiko Francijo, program Proteus 2007-2008: Fluorna faza kot zamenjava za organska topila. Študija topnosti in molekularnega transporta, nosilec Jernej Iskra

USA-SI bilateralni projekt: Transformacije organskih spojih pod zelenimi reakcijskimi pogoji (IJS / UNF); 2012-2013, nosilec Stojan Stavber

14. Vključenost v projekte za uporabnike, ki v so obdobju trajanja raziskovalnega programa (1. 1. 2009 – 31. 12. 2013), potekali izven financiranja ARRS¹⁶

SLO

Priprava in proizvodnja kompozitnih mehkih tesnilnih materialov – Boris Šket (Donit Tesnit d.o.o., Medvode)

Kompoziti akrilnih polimerov in anorganskih nanodelcev – Boris Šket (Helios d.d., Domžale)

Krka d.d. Novo Mesto: Alternativne sinteze farmacevtskih učinkovin, 2009-2013, nosilec: Jernej Iskra

Semenarna d.d., Ljubljana: Sinteza vzorcev gametocidov, 2010-2012, nosilec: Jernej Iskra
ACIES BIO d.o.o. Sinteza malih molekul, prekursorjev za biosintezo aktivnih farmacevtskih učinkovin; 2011-2013; nosilec Stojan Stavber

ECOT d.o.o., Ljubljana: Razvoj novih, okolju prijaznejših, izdelkov za nehumano kozmetiko; 2009-2013; nosilec: Stojan Stavber

15. Ocena tehnološke zrelosti rezultatov programa in možnosti za njihovo implementacijo v praksi (točka ni namenjena raziskovalnim programom s področij humanističnih ved)¹⁷

SLO

Materiali, ki kažejo intenzivno fluorescenco v trdnem stanju, so potencialne spojine, ki se lahko uporabijo tako za organska elektroluminiscenčna sredstva, za fluorescenčne senzorje kot tudi za fotodinamično terapijo.

Pretvorbe pod reakcijskimi pogoji brez topil pomembno prispevajo k manjši porabi topil in s tem k pocenitvi procesa. V več primerih smo pretvorbe izvedli z visoko stopnjo atomske ekonomije, kar odpira potencialne možnosti za izvedbo procesov v večjem merilu.

Obširni rezultati in znanja, ki smo jih pridobili, so dovolj zreli za naslednjo stopnjo – demonstracijski projekt stabilizacije PTE na samem mestu onesnaženja.

Rezultati osnovnih raziskav v okviru programa imajo znatno potencialno aplikativno vrednost, saj so nove tehnologije, ki temeljijo na principih zelene kemije prioriteta kemijske in farmacevtske industrije. Posebno potencialno aplikativno vrednost imajo naša odkritja na področju aerobnih oksidativnih transformacij organskih molekul in oksidativnih transformacij z uporabo vodikovega peroksida. Znanje pridobljeno v okviru programa smo že dejansko uporabili pri sodelovanju s podjetjem sledečimi podjetji:

Krka d.d.: novi postopki za sintezo aktivnih farmacevtskih učinkovin. Produkti so v redni proizvodnji, dodana vrednost se meri v MIO euro

ACIES BIO: novi postopki za sintezo malih molekul, prekursorjev v biosintezi aktivnih farmacevtskih učinkovin. Postopki so sicer šele v testiranju na laboratorijske in polpilotnem nivoju, rezultati so obetavni, dodana vrednost se bo merila v MIO evrih

Ecot d.o.o.: Za podjetje smo razvili več deset novih izdelkov iz področja nehumane kozmetike (čistila, avtokozmetika...), ki so okolju bolj prijazni. Dosedanje dodana vrednost ocenjujemo na več 10 tisoč Euro

Semenarna d.d. : Nov gametocid, ki smo ga v sodelovanju razvili in patentno zaščitili je preliminarno pokazal primerljivo, oz. boljšo aktivnost kot pri do sedaj znani selekcijski pridelavi pšenice. Potencialna dodana vrednost bo znatna, v kolikor bo Semenarni uspelo trženje.

16. Ocenite, ali bi doseženi rezultati v okviru programa lahko vodili do ustanovitve spin-off podjetja, kolikšen finančni vložek bi zahteval ta korak ter kakšno infrastrukturo in opremo bi potrebovali

možnost ustanovitve spin-off podjetja	☒ DA ☐ NE
potrebni finančni vložek	nekaj 100.000 euro
ocena potrebne infrastrukture in opreme ¹⁸	Spin-off podjetje na področju agrokemije je že v fazi nastajanja. Večja infrastruktura (analitska podpora) je na razpolago, medtem ko bi za manjšo (laboratorijski prostori, oprema za kemijsko sintezo na 1 kg skali) bilo potrebno cca 100.000 euro.

17. Izjemni dosežek v 2013¹⁹

17.1. Izjemni znanstveni dosežek

COBISS.SI-ID 22334247

Aerobno oksidativno jodiranje organskih spojin z jodidom katalizirano z natrijevim nitritom

Aerobic oxidative iodination of organic compounds with iodide catalyzed by sodium nitrite

V vodilni reviji na področju aplikativne kemije Advanced Synthesis & Catalysis smo objavili novo metodo aerobnega oksidativnega jodiranja organskih spojin z natrijevim jodidom katalizirano z natrijevim nitritom v kislem mediju. Metodo, ki sledi principom zelene kemije, saj zagotavlja uporabo naravnega vira jodovih atomov (NaI), naravnega oksidanta

(zračni kisik) in maksimalno atomsko ekonomijo joda, smo aplicirali za selektivno in učinkovito jodiranje aromatskih spojin, ketonov, alkenov in alkinov, regioselektivnost jodiranja aril alkyl ketonov pa je mogoče usmerjati z reakcijskim medijem: v vodnem etanolu poteče jodiranje stranske verige, v suhem acetonitrilu pa aktiviranega aromatskega jedra.

17.2. Izjemni družbeno-ekonomski dosežek

Zoisova nagrada za vrhunske znanstvene dosežke s področja organske kemije (Stojan Stavber , Marko Zupan)

Zois Award for the outstanding scientific achievements in organic chemistry (Stojan Stavber, Marko Zupan)

Leta 2000 sta bila člana programske skupine Stojan Stavber in Marko Zupan nagrajena s Zoisovo nagrado za vrhunske znanstvene dosežke na področju organske kemije fluorovih spojin ter polimernih nosilcev kot katalizatorjev in reagentov v organski kemiji.

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 in obdelavo teh podatkov za evidence ARRS
- so vsi podatki v obrazcu v elektronski obliki identični podatkom v obrazcu v papirnati obliki
- so z vsebino poročila seznanjeni in se strinjajo vsi izvajalci raziskovalnega programa

Podpisi:

*zastopnik oz. pooblaščen oseba JRO
in/ali RO s koncesijo:*

in

vodja raziskovalnega programa:

Univerza v Ljubljani, Fakulteta za
kemijo in kemijsko tehnologijo

Peter Bukovec

ŽIG

Kraj in datum:

Ljubljana, 22.4.2014	22.4.2014
----------------------	-----------

Oznaka prijave: ARRS-RPROG-ZP-2014/66

¹ Napišite povzetek raziskovalnega programa v slovenskem jeziku (največ 3.000 znakov vključno s presledki – približno pol strani, velikost pisave 11) in angleškem jeziku (največ 3.000 znakov vključno s presledki – približno pol strani, velikost pisave 11). [Nazaj](#)

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

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

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

⁵ Navedite znanstvene dosežke (največ pet), ki so nastali v okviru tega programa. Raziskovalni dosežek iz obdobja izvajanja programa (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 (največ pet), ki so nastali v okviru tega programa. Družbeno-ekonomski dosežek iz obdobja izvajanja programa (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 programa ... - v obeh primerih ni COBISS ID). [Nazaj](#)

⁷ Navedite rezultate raziskovalnega programa iz obdobja izvajanja programa (do oddaje zaključnega poročila) v primeru, da katerega od rezultatov ni mogoče navesti v točkah 6 in 7 (npr. ker se ga v sistemu COBISS ne vodi). Največ 2.000 znakov vključno s presledki (približno 1/3 strani, velikost pisave 11). [Nazaj](#)

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

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

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

¹¹ Upoštevajo se le tiste diplome, magisteriji znanosti in doktorati znanosti (zaključene/i v obdobju 1. 1. 2009 – 31. 12. 2013), pri katerih so kot mentorji sodelovali člani programske skupine. [Nazaj](#)

¹² Vpišite število opravljenih diplom v času trajanja raziskovalnega programa glede na vrsto usposabljanja. [Nazaj](#)

¹³ Vpišite šifro raziskovalca in/ali ime in priimek osebe, ki je v času trajanja raziskovalnega programa pridobila naziv magister znanosti in/ali doktor znanosti ter označite doseženo izobrazbo. V primeru, da se je oseba usposabljala po programu Mladi raziskovalci, označite MR. [Nazaj](#)

¹⁴ Za mlade raziskovalce, ki ste jih navedli v tabeli 11.2. točke (usposabljanje so uspešno zaključili v obdobju od 1. 1. 2009 do 31. 12. 2013), ustrezno označite, kje so se zaposlili po zaključenem usposabljanju. [Nazaj](#)

¹⁵ Navedite naslove projektov in ime člana programske skupine, ki je bil vodja/koordinator navedenega projekta. Točko izpolnijo tudi izvajalci raziskovalnega programa, prejemniki sredstev iz naslova dodatnega letnega sofinanciranja raziskovalnega programa zaradi mednarodnega sodelovanja (sodelovanja v projektih okvirnih programov Evropske unije). Izvajalec, ki je na podlagi pogodbe prejel sredstva iz navedenega naslova, vsebinsko opiše porabo prejetih sredstev za financiranje stroškov blaga in storitev ter amortizacije, nastalih pri izvajanju tega raziskovalnega programa. V primeru, da so bili v okviru raziskovalnega programa prejemniki sredstev različni izvajalci, vsak pripravi vsebinsko poročilo za svoj delež pogodbenih sredstev. Vodja raziskovalnega programa poskrbi, da je vsebinsko poročilo, ločeno za vsakega izvajalca, vključeno v navedeno točko poročila. Največ 6.000 znakov vključno s presledki (približno ena stran, velikosti pisave 11). [Nazaj](#)

¹⁶ Navedite naslove projektov, ki ne sodijo v okvir financiranja ARRS (npr: industrijski projekti, projekti za druge naročnike, državno upravo, občine idr.) in ime člana programske skupine, ki je bil vodja/koordinator navedenega projekta. Največ 3.000 znakov vključno s presledki (približno pol strani, velikosti pisave 11). [Nazaj](#)

¹⁷ Opišite možnosti za uporabo rezultatov v praksi. Opišite izdelke oziroma tehnologijo in potencialne trge oziroma tržne niše, v katere sodijo. Ocenite dodano vrednost izdelkov, katerih osnova je znanje, razvito v okviru programa oziroma dodano vrednost na zaposlenega, če jo je mogoče oceniti (npr. v primerih, ko je rezultat izboljšava obstoječih tehnologij oziroma izdelkov). Največ 3.000 znakov vključno s presledki (približno pol strani, velikosti pisave 11). [Nazaj](#)

¹⁸ Največ 1.000 znakov vključno s presledki (približno 1/6 strani, velikost pisave 11) [Nazaj](#)

¹⁹ Navedite en izjemni znanstveni dosežek in/ali en izjemni družbeno-ekonomski dosežek raziskovalnega programa v letu 2013 (največ 1000 znakov, vključno s presledki, velikost pisave 11). 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-RPROG-ZP/2014 v1.00a

94-99-F1-86-40-88-73-0B-E5-11-85-B2-A3-C3-80-CC-8E-C1-75-DC