

Oznaka poročila: ARRS-RPROG-ZP-2015/152



ZAKLJUČNO POROČILO O REZULTATIH RAZISKOVALNEGA PROGRAMA

(za obdobje 1. 1. 2009 - 31. 12. 2014)

A. PODATKI O RAZISKOVALNEM PROGRAMU

1. Osnovni podatki o raziskovalnem programu

Šifra programa	P1-0175
Naslov programa	Sinteza, struktura, lastnosti snovi in materialov Synthesis, structure, properties of matters and materials
Vodja programa	8790 Anton Meden
Obseg raziskovalnih ur (vključno s povečanjem financiranja v letu 2014)	26847
Cenovni razred	C
Trajanje programa	01.2009 - 12.2014
Izvajalci raziskovalnega programa (javne raziskovalne organizacije - JRO in/ali RO s koncesijo)	103 Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo
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

Raziskovalno delo programske skupine temelji na dveh osnovnih področjih

sinteze oziroma priprave novih spojin in materialov. To sta koordinacijska kemija, kjer se usmerjamo v različne biološko aktivne koordinacijske spojine in priprava različnih materialov, namenjenih za uporabo v elektrokemijskih sistemih in katalizatorjih. Obe področji povezuje dolgoletna ekspertiza in močna raziskovana oprema za strukturno analizo trdnih snovi. S tem omogočamo vpogled v povezavo med strukturo in lastnostmi snovi in omogočamo ciljno spreminjanje strukturnih parametrov za izboljšanje zelenih lastnosti.

Na področju koordinacijske kemije nadaljujemo doslej uspešne raziskave koordinacijskih spojin rutenija, ki kažejo protirakave učinke, spojin vanadija, cinka in kobalta, ki so obetavni podporniki delovanja insulina, bakrove koordinacijske spojine za zaščito lesa ter druge sorodne spojine, ki lahko služijo kot modelni sistemi za študij delovanja encimov.

Tudi na področju materialov že imamo nekaj dobrih rezultatov in v obetavnih smereh nadaljujemo raziskave. To pomeni usmerjenost v materiale za visokotemperaturne gorivne celice, katalizatorje za nizkotemperaturne gorivne celice in za suhi reforming metana ter funkcionalizirane grafenske materiale za separatorje v elektrokemijskih celicah.

Strukturna analiza sintetiziranih materialov služi za njihove učinkovitejše izboljšave, samo poznavanje zgradbe snovi pa povečuje bazo znanja in omogoča razvoj tudi na drugih področjih.

ANG

Research work of the programme group is built on two basic fields of synthesis or preparation of novel compounds and materials. These are coordination chemistry, where we are directed into biologically active coordination compounds and preparation of various materials, applicable in electrochemical systems and catalysts. Both areas are linked by a long lasting expertise and strong research equipment for structural analysis of solids. This enables an insight into the structure-properties relationship and makes possible the targeted variation of structural parameters for improvement of the desired properties.

In the area of coordination compounds the so far successful studies of ruthenium coordination compounds that show anti-cancer activity, will be continued as well as the compounds of vanadium, zinc and cobalt that support the action of insulin, so as the copper compounds for protection of wood, and other coordination compounds that can be used as model substances for the function of enzymes.

We also have some good results in the area of materials, so that the research is being continued in the promising directions. This means the materials for solid oxide fuel cells, catalysts for low temperature fuel cells and dry reforming of methane as well as the functionalized graphenes for separators in the electrochemical cells.

The structural analysis of the prepared materials serves for their efficient improvement, the knowledge of the structures themselves, on the other hand, enlarges the knowledge base and enables the development also in other fields.

3.Poročilo o realizaciji predloženega programa dela na raziskovalnem programu, (vključno s predloženim dopolnjenim programom dela v primeru povečanja financiranja raziskovalnega programa v letu 2014)²

SLO

Programska skupina ima dve težišči delovanja in sicer koordinacijsko kemijo in nove materiale za različne aplikacije. Oboje pa povezuje ekspertiza in oprema za strukturno analizo, ki omogoča razumevanje povezav med zgradbo in funkcijo sintetiziranih spojin in materialov.

Na področju koordinacijske kemije smo pridobili in objavili rezultate na več področjih: V sodelovanju s skupino prof. G. Psomasa (Aristotlova univerza, Solun, GR) smo raziskovali strukturne, fizikalno-kemijske in biološke lastnosti koordinacijskih spojin cinka, niklja, mangana in bakra s protibakterijskimi sredstvi iz družine kinolonov oz.

nesteroidnimi protivnetnimi sredstvi. V sodelovanju s prof. E. Alessiem (Univerza v Trstu, ITA) smo raziskovali strukturne in biološke lastnosti protirakavih rutenijevih kompleksov s terpiridinskimi in triazolnimi ligandi. Uspešno smo tudi začeli sodelovanje s prof. K. Andjelković z Univerze v Beogradu na področju bakrovih in cinkovih koordinacijskih spojin biološko aktivnih derivatov 3-acetilpiridina.

Sintetizirali smo vanadijeve, kobaltove, bakrove in cinkove spojine z derivati diketonov in pikolinske kisline. V sodelovanju s prof. Liujem (East China Normal University, Šanghaj, CN) smo razvili s Pd katalizirane reakcije pripajanja substratov na heterociklične sisteme. S pomočjo kvantno-mehanskih metod smo ugotovili pomemben vpliv porazdelitve elektronske gostote po molekuli barvila na selektivnost vezave na celulozna vlakna. V sodelovanju s prof. Kočevarjem in prof. Obrezo (Univerza v Ljubljani) smo raziskovali strukturne lastnosti različnih organskih spojin.

Po uspešni sintezi in karakterizaciji kompleksov lantanoidnih halogenidov z nekaterimi enostavnimi O- in N-donorskimi ligandi smo princip sinteze in istovrstne ligande uporabili še pri sintezi kompleksov kloridov oziroma bromidov prehodnih kovin z enostavnejšimi polietri. Dokazali smo, da je strukturna pestrost tovrstnih kompleksov zaradi lastnosti elementov d-bloka še večja kot v primeru lantanoidov; tako smo izolirali različne eno- in dvojedrne komplekse ter polimerne 1-D komplekse. V primeru kromovih kompleksov smo izolirali izomerni strukturi.

Uspeli smo izolirati nove modelne spojine za encime z različnimi kovinskimi ioni (s pirazol-karboksilatnimi ligandi) ter spojine z modeli za lignin (guaiacilne enote) za oceno načina vezave bakrovih(II) ionov na zaščitenih lesenih površinah. Magnetne interakcije teh spojin smo preverjali z magnetno odzivnostjo vzorcev, ter s teoretsko povezavo s praktičnimi podatki, kar smo našli v magnetno gostih snoveh, kot tudi nepričakovano preko šibkejših nekovalentnih povezavah.

Na področju materialov smo dosegli naslednje rezultate:

Sintetizirali in karakterizirali smo materiale za različne elektrokemijske sisteme, med njimi katodni material lantanov manganit substituiran s stroncijem (LSM) z visoko elektronsko prevodnostjo in visoko katalitsko aktivnostjo za redukcijo kisika. Električne lastnosti sintranih vzorcev smo pojasnili s teoretičnim modelom vrtenine za opis električne prevodnosti porozne keramike.

Materiale na osnovi NiO-YSZ (nikelj oksid in cirkonijev dioksid stabiliziran z itrijevim oksidom), ki jih uporabljamo za anode, smo sintetizirali z zgorevalno sintezo. Največja prednost te metode je, da sta obe fazi NiO in YSZ v kompozitu naključno porazdeljeni na nanometrskem nivoju.

V sklopu študijev materialov za visokotemperaturne gorivne celice (SOFC) smo se posvetili tudi problemu deaktivacije v primeru, da gorivna celica uporablja za gorivo metan ali višje ogljikovodike in ugotovili, da pri tem nastajajo različne ogljikove oblike.

Druga skupina materialov so bili katalizatorji. Katalizator na osnovi Cu/ZnO smo pripravili v dvostopenjskem postopku z ureo iz vodne raztopine pri temperaturi 90°C. Nastali delci so tudi po termični obdelavi ohranili tako velikost kot obliko. Cu/ZnO produkti so pokazali katalitsko aktivnost za reakcijo parnega reforminga metana.

Pripravili smo tudi Pd-CNT katalizatorje za oksidacijo mravljinčne kisline. uporabili smo različne impregnacijske metode v različnih reakcijskih medijih (EtOH, MeOH, THF, H₂O) in z različnimi redukcijskimi reagenti (hidrokinon ali SDS). Povprečna velikost precipitiranih Pd nanodelcev na CNT nosilcu je bila med 2,6 nm in 18,0 nm, lahko pa jo kontroliramo z izbiro različnih reakcijskih medijev oziroma eksperimentalnih pogojev. Kot učinkoviti katalizatorji za oksidacijo vodika in redukcijo kisika so se pokazali platinski materiali, na površini dekorirani z molekulami calix[4] arenov, o katerih smo poročali v najprestižnejši mednarodni reviji Nature materials.

Tretja skupina materialov so bili polimerni funkcionalizirani grafenski nanotrakovi (PF-GNR-ji). Pripravili smo jih s sintezo v eni posodi. Med plasti večstenskih ogljikovih nanocev (MWCNTs) so vrinjeni kalijeve atomi v plinasti ali tekoči fazi, čemur sledi dodajanje vinilnih ali epoksidnih monomerov, kar se odraža na PF-GNR-jih. Polimerni funkcionalizirani nanotrakovi (PF-GNR) imajo potencialne uporabe v prevodnih kompozitih, prozornih elektrodah, toplotnih vezjih in superkondenzatorjih.

Strukturna analiza v programski skupini je pomembno prispevala h kakovosti objavljenih rezultatov, na področju strukturne analize pa smo sodelovali tudi s številnimi drugimi raziskovalnimi skupinami v Sloveniji in svetu.



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

SLO

Predvideni program dela smo uspešno realizirali in marsikje presegli tako na področju koordinacijske kemije kot na področju materialov. Sintetizirali in podrobno (tudi strukturno) karakterizirali smo več deset novih koordinacijskih spojin prav tako materialov. Podatke smo vključili v globalno bazo podatkov CSD in tako prispevali k splošnemu razvoju temeljne znanosti. Skupno so bili rezultati raziskav članov programske skupine v petih letih objavljeni v 215 izvirnih znanstvenih člankih v mednarodno priznanih revijah, od teh 22 najvišjega ranga po metodologiji ARRS (oznaka A"). V skupini se uspešno usposabljuje mladi raziskovalci, del raziskav pa je tudi aplikativne narave in so bile zanje vložene patentne prijave.

5. Utemeljitev morebitnih sprememb programa raziskovalnega programa oziroma sprememb, povečanja ali zmanjšanja sestave programske skupine v letu 2014⁴

SLO

Sprememb programa v letu 2014 ni bilo, Kadrovska sesava pa se e spremenila samo zaradi odhoda mlade raziskovalke tine Prinčič in raziskovalke Katarina Stare, ki ni več zaposlena na FKKT.

6. Najpomembnejši znanstveni rezultati programske skupine⁵

		Znanstveni dosežek	
1.	COBISS ID	34569477	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Selektivni katalizatorji za reakcije oksidacije vodika in redukcije kisika z nanosom molekul calix[4]arenov na platino
		ANG	Selective catalysts for the hydrogen oxidation and oxygen reduction reactions by patterning of platinum with calix[4]arene molecules
	Opis	SLO	Priprava novih katalizatorjev za gorivne celice s polimernimi membranami mora upoštevati dva enako pomembna temeljna principa: optimiziranje katalitskega delovanja in dolgoročno stabilnost katalizatorja in nosilca. Metode za izboljšanje aktivnosti so različne, od legiranja platine do sinteze platinskih jedro-ovoj katalizatorjev. Metode za izboljšanje stabilnosti ogljikovih nosilcev katalitskih nanodelcev pa so omejene. Še posebej ob izklopu (ko se vodik izpihuje z anode z zrakom) in vklopu (ko se z anode z vodikom izpihuje zrak), ko lahko katodni potencial doseže 1.5 V. Pri teh pogojih je stabilnost katode (oksidacija ogljika) močno odvisna od neželenih procesov redukcije kisika na anodni strani. To poudari pomen priprave selektivnih katalizatorjev, ki zavrejo redukcijo kisika, medtem, ko popolnoma ohranijo Pt-podobno aktivnost za oksidacijo vodika. Pokazali smo, da kemijsko modificirana platina s samourejeno monoplastjo calix[4]arenskih molekul ustreza temu zahtevnemu kriteriju.
		ANG	The design of new catalysts for polymer electrolyte membrane fuel cells must be guided by two equally important fundamental principles: optimization of their catalytic behaviour as well as the long-term stability of the metal catalysts and supports in hostile electrochemical. The methods used to improve catalytic activity are diverse, ranging from the alloying and dealloying of platinum to the synthesis of platinum core-shell catalysts. However, methods to improve the stability of the carbon supports and

			<p>catalyst nanoparticles are limited, especially during shutdown (when hydrogen is purged from the anode by air) and startup (when air is purged from the anode by hydrogen) conditions when the cathode potential can be pushed up to 1.5 V. Under the latter conditions, stability of the cathode materials is strongly affected (carbon oxidation reaction) by the undesired oxygen reduction reaction (ORR) on the anode side. This emphasizes the importance of designing selective anode catalysts that can efficiently suppress the ORR while fully preserving the Pt-like activity for the hydrogen oxidation reaction. Here, we demonstrate that chemically modified platinum with a self-assembled monolayer of calix[4]arene molecules meets this challenging requirement.</p>
	Objavljeno v	Nature Pub. Group; Nature materials; 2010; Vol. 9, no. 12; str. 998-1003; Impact Factor: 29.897; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.13; A'': 1; A': 1; WoS: EI, PM, UB, UK; Avtorji / Authors: Genorio Boštjan, Strmčnik Dušan, Subbaraman Ram, Tripkovic Dusan, Karapetrov Goran, Stamenkovic Vojislav, Pejovnik Stane, Markovic Nenad M.	
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	
2.	COBISS ID	36426757	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Novi organorutenijevi (II) β -diketonati kot katalizatorji za orto ariliranje s C-H aktivacijo
		ANG	Novel organoruthenium(II) β -diketonates as catalysts for ortho arylation via C-H activation
	Opis	SLO	<p>Poleg kinolonov, ki so O,O ligandi, smo pripravili tudi rutenijeve komplekse z β-diketonati. Takšni ligandi se koordinirajo podobno kot kinoloni, znano pa je, da imajo zanimive fizikalno-kemijske ter biološke lastnosti. Pripravili smo pet organorutenijevih kompleksov, ki imajo značilno strukturo pianističnega stolčka. Spojine smo izolirali iz organokovinskega rutenijevega prekursorja, fluoriranih β-diketonatov v prisotnosti natrijevega metoksida. Vse spojine smo okarakterizirali s standardnimi fizikalno-kemijskimi tehnikami (NMR, rentgenska strukturna analiza, itd). Ugotovljeno je bilo, da so te spojine uporabni katalizatorji za direktno arilacijo 2-fenilpiridina. Literaturni podatki kažejo, da so spojine, ki izražajo katalitske lastnosti, pogosto biološko aktivne. Zato v prihodnje nameravamo testirati tudi biološke lastnosti teh spojin.</p>
		ANG	<p>In addition to quinolones, which are O,O ligands, we have also decided to prepare ruthenium complexes of various β-diketonates. Such ligands coordinate similarly as quinolones and it is known that their metal complexes exert interesting physico-chemical and biological properties. Five different fluorinated β-diketone ligands in the presence of sodium methoxide easily react with the organoruthenium precursor generating neutral complexes 1-5 with typical "piano-stool" geometry. All synthesized compounds were characterized by multinuclear NMR, X-ray diffraction and other standard physico-chemical methods. It was found that these compounds are ready-to-use catalysts, which are efficient for direct arylation of 2-phenylpyridine. Literature data revealed that frequently, compounds with catalytic properties exert also biological activity and we plan to test biological activity of isolated compounds in the future.</p>
		American Chemical Society; Organometallics; 2013; Vol. 32, issue 2; str. 609-616; Impact Factor: 4.253; Srednja vrednost revije / Medium Category	

	Objavljeno v	Impact Factor: 2.31; A': 1; WoS: EC, EE; Avtorji / Authors: Seršen Sara, Kljun Jakob, Požgan Franc, Štefane Bogdan, Turel Iztok	
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	
3.	COBISS ID	36573189	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Študija izboljšanih katalizatorjev za elektrooksidacijo mravljinčne kisline na osnovi Pd-CNT disperzij: priprava, lastnosti, karakterizacija
		ANG	A study towards superior carbon nanotubes-supported Pd-based catalysts for formic acid electro-oxidation
	Opis	SLO	V delu je opisana priprava in karakterizacija Pd-CNT katalizatorjev za oksidacijo mravljinčne kisline. Karakterizacija katalizatorjev je predstavljena s primerjavo med elektrokemijskimi karakteristikami vzorcev in njihovo morfologijo. Pd.CNT katalizatorji so bili pripravljene z različni impregnacijskimi metodami, v različnih reakcijskih medijih (EtOH, MeOH, THF, H ₂ O) in z različnimi redukcijskimi reagenti (hidrokinon ali SDS). Povprečna velikost precipitiranih Pd nanodelcev na CNT nosilcu je bila med 2,6 nm in 18,0 nm. V delu je bilo pokazano, da lahko velikost precipitiranih Pd nanodelcev uspešno kontroliramo z izbiro različnih reakcijskih medijev oziroma eksperimentalnih pogojev priprave katalizatorja. Karakterizacija katalizatorjev z metodo ciklovoltometrije je pokazala, da je maksimalna gostota anodnega toka močno odvisna od velikosti Pd nanodelcev. Elektrooksidacija mravljinčne kisline je lahko kinetično ali difuzijsko kontrolirana elektrodna reakcija, odvisno od morfoloških karakteristik Pd nanodelcev.
		ANG	This study investigates several CNT-supported Pd-based catalysts and compares their morphological as well as electrochemical characteristics for formic acid electro-oxidation. Pd/C catalysts were prepared via various impregnation methods, using different reaction media (EtOH, MeOH, THF, H ₂ O) or reducing agents (hydroquinone or SDS). The average mean particle sizes of the precipitated Pd varied from 2.6 nm to 18.0 nm. It was further shown that the particle size of Pd/C dispersions can be easily controlled by changing the solvent and experimental conditions during the preparation procedure. Measurements of catalytic activity by using cyclic voltammetry revealed strong particle size dependence of the anodic peak current density. The electro-oxidation of formic acid may be kinetically-controlled or diffusion-controlled regarding the Pd morphological characteristics.
	Objavljeno v	Elsevier Sequoia; Journal of power sources; 2013; Vol. 235, no. 1; str. 111-116; Impact Factor: 5.211; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.367; A'': 1; A': 1; WoS: HQ, ID; Avtorji / Authors: Marinšek Marjan, Šala Martin, Jančar Boštjan	
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	
4.	COBISS ID	36526597	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Funkcionalizirani grafenski nanotrakovi preko anionske polimerizacije, sprožene z ogljikovimi nanocevkami, interkaliranimi z alkalijskimi kovinami
		ANG	Functionalized graphene nanoribbons via anionic polymerization initiated by alkali metal-intercalated carbon nanotubes
		SLO	Opisana je priprava polimernih funkcionaliziranih graphene nanotrakov (PFGNR-ji) s sintezo v eni posodi. Med plasti večstenskih ogljikovih nanocevk (MWCNTs) so vrinjeni kalijeve atomi v plinasti ali tekoči fazi, čemur sledi dodajanje vinilnih ali epoksidnih monomerov, kar se odraža na PF-GNR-jih. Vrstečna elektronska mikroskopija, termogravimetrična masna

	Opis	spektrometrija in X-ray fotoelektronski spekter smo uporabili za označevanje PF-GNRs. Pojasnjene so tudi povezave med delitvijo MWCNTs, intrinzične lastnosti interkalantov in stopnjo okvar grafitnih izhodnih MWCNTs. Polimerni funkcionalizirani nanotrakovi (PF-GNR) bi bili lahko uporabni v prevodnih kompozitov, prozorne elektrode, toplotnih vezij in superkondenzatorjih.	
		ANG	The preparation of polymer-functionalized graphene nanoribbons (PF-GNRs) in a one-pot synthesis is described. Multiwalled carbon nanotubes (MWCNTs) were intercalated by potassium under vapor- or liquid-phase conditions, followed by the addition of vinyl or epoxide monomers, resulting in PF-GNRs. Scanning electron microscopy, thermogravimetric mass spectrometry, and X-ray photoelectron spectroscopy were used to characterize the PF-GNRs. Also explored here is the correlation between the splitting of MWCNTs, the intrinsic properties of the intercalants and the degree of defects and graphitization of the starting MWCNTs. The PF-GNRs could have applications in conductive composites, transparent electrodes, heat circuits, and supercapacitors.
	Objavljeno v	American Chemical Society; ACS nano; 2013; Vol. 7, no. 3; str. 2669-2675; Impact Factor: 12.033; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.554; A': 1; A': 1; WoS: DY, EI, NS, PM; Avtorji / Authors: Lu Wei, Ruan Gedeng, Genorio Boštjan, Zhu Yu, Novosel Barbara, Peng Zhiwei, Tour James M.	
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	
5.	COBISS ID	516331545	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	[pi]-zlaganje kinoidnih obročev v kristalih diakva vodikovih kloranilatov
		ANG	[pi]-Stacking of quinoid rings in crystals of alkali diaqua hydrogen chloranilates
	Opis	SLO	Alkalijski diakva kompleksi vodikove kloranilne kisline [KHCA(H ₂ O) ₂], [RbHCA(H ₂ O) ₂] and [CsHCA(H ₂ O) ₂], in solif NH ₄ HCA·2H ₂ O so bili sintetizirani in strukturno analizirani. Homologi litija in natrija niso stabilni, dobili smo njuna analoga [LiHCAEtOH] in [Na ₅ HCA(CA) ₂ (H ₂ O) ₁₀]. Vse strukture razen [LiHCAEtOH] kažejo 3-D z vodikovo povezana ogrodjas poudarjenimi ππ interakcijami med anioni, ki jih ojačujejo privlačne polarne interakcije. Najkraša razdalja med centriidi kloranilatnih obročev [3.229(2) Å] je bila opažena v strukturi [KHCA(H ₂ O) ₂]. Analiza je osredotočena na nekovalentne interakcije ki usmerjajo samourejanje, kar je pomembno za razumevanje le tega tudi v bioloških sistemih.
		ANG	The alkali diaqua complexes of hydrogen chloranilic acid of [KHCA(H ₂ O) ₂], [RbHCA(H ₂ O) ₂] and [CsHCA(H ₂ O) ₂], and the salt of NH ₄ HCA·2H ₂ O were prepared and their crystal structures determined. The homologues of lithium and sodium are not stable, but their analogues [LiHCAEtOH] and [Na ₅ HCA(CA) ₂ (H ₂ O) ₁₀] were obtained. All crystal structures studied, with exception of [LiHCAEtOH], reveal 3D-hydrogen bond networks with pronounced ππ interactions between anions supported by attractive polar interactions; the shortest separation distance between the centroids [3.229(2) Å] of the hydrogen chloranilate rings in a face-to-face stack is observed in the structure of [KHCA(H ₂ O) ₂]. The analysis presented is focused on noncovalent interactions that direct self-assembly of molecules, which is important also for biological systems.
	Objavljeno v	Royal Society of Chemistry; CrystEngComm; 2009; Vol. 11, iss. 7; str. 1407-1415; Impact Factor: 4.183; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 3.755; A': 1; WoS: DY, FI; Avtorji / Authors:	

	Molčanov Krešimir, Kojić-Prodić Biserka, Meden Anton
Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek

7. Najpomembnejši družbeno-ekonomski rezultati programske skupine⁶

	Družbeno-ekonomski dosežek		
1.	COBISS ID	36814085	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Kompleksi kobaltovega (I) bromida z O-donorskimi ligandi
		ANG	Complexes of cobalt(II) bromide with O-donor ligands
	Opis	SLO	Vabljen predavanje na Mednarodnem kristalografskem srečanju. Podan je bil pregled večletnega dela na tem področju.
		ANG	Invited plenary lecture at international crystallographic meeting. A survey of several-years' work in this area was given.
	Šifra	B.04 Vabljen predavanje	
	Objavljeno v	Croatian Academy of Sciences and Arts, Croatian Crystallographic Association, Croatian Association of Crystallographers; Book of abstracts and program; 2013; Str. 48; Avtorji / Authors: Petriček Saša	
Tipologija	1.12 Objavljeni povzetek znanstvenega prispevka na konferenci		
2.	COBISS ID	1636143	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Metode na osnovi topil za proizvodnjo grafenskih nanotrakov
		ANG	Solvent-based methods for production of graphene nanoribbons
	Opis	SLO	Rezultat mednarodnega sodelovanja. Prijavljen je nov način proizvodnje grafenskih nanotrakov.
		ANG	Result of international collaboration. Novel method of production of nanoribbons is claimed.
	Šifra	B.06 Drugo	
	Objavljeno v	European Patent Office; 2013; Str. 1-103; Avtorji / Authors: Tour James M., Lu Wei, Genorio Boštjan	
Tipologija	2.23 Patentna prijava		
3.	COBISS ID	35916037	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Kristalne oblike ksanturinske kisline in postopki za njihovo pripravo
		ANG	Crystal forms of Xanturenic acid and procedures of preparation thereof
	Opis	SLO	Ksanturinska kislina je znan antioksidant in v patentu so zaščitene novo odkrite polimorfne oblike, ki bi lahko imele še ugodnejšo biodostopnost od doslej znane oblike.
		ANG	Xanturenic acid is a known antioxidant and in the patent its new polymorphic forms are claimed. They could have a better bioavailability than the form known so far.
	Šifra	F.33 Patent v Sloveniji	
	Objavljeno v	Urad Republike Slovenije za intelektualno lastnino; 2013; 19 str.; Avtorji / Authors: Tratar-Pirc Elizabeta, Cer Kerčmar Ksenija, Bukovec Peter, Modec Barbara, Stare Katarina, Meden Anton	
Tipologija	2.24 Patent		
4.	COBISS ID	6534753	Vir: COBISS.SI

Naslov	SLO	Reakcija med alkalijami in karbonatom v betonu - je neekspanzivna reakcija res neškodljiva?	
	ANG	Alkali - carbonate reaction in concrete - is non-expansive reaction really harmless?	
Opis	SLO	Podani so bili rezultati interdisciplinarne študije o degradaciji betona zaradi reakcije med alkalijami in karbonatom v betonu.	
	ANG	Results of an interdisciplinary study of concrete degradation due to reaction of alkalis with carbonate.	
Šifra	B.04 Vabljen predavanje		
Objavljeno v	Association Science of Materials and Construction Technology; CMSS 2013 - Building up Sustainable Materials and Constructions; 2013; Str. 1-2; Avtorji / Authors: Bokan-Bosiljkov Violeta, Štukovnik Petra, Marinšek Marjan		
Tipologija	1.10 Objavljeni povzetek znanstvenega prispevka na konferenci (vabljen predavanje)		
5.	COBISS ID	36690949	Vir: COBISS.SI
Naslov	SLO	[Podobe znanja: dr. Iztok Turel	
	ANG	Forms of knowledge: d. Iztok Turel	
Opis	SLO	Intervju o znanstvenih dosežkih na nacionalnem radiu.	
	ANG	Interview about scientific achievements on a national radio programme.	
Šifra	E.03 Drugo		
Objavljeno v	2013; Avtorji / Authors: Turel Iztok		
Tipologija	3.11 Radijski ali TV dogodek		

8. Drugi pomembni rezultati programske skupine^z

Raziskovalca Jakob Kljun in Sara Seršen sta bila člana organizacijskega odbora dogodka Znanstveni inkubator (organizatorja dogodka sta DMRS – Društvo mladih raziskovalcev Slovenije in FKKT), ki se ga je udeležilo preko 250 mladih znanstvenikov in je potekalo 30.9.2014 na novi lokaciji FKKT. Dogodek je bil namenjen posredovanju informacij o javnih razpisih za temeljne znanstvene raziskave med in po doktorskem študiju ter predstavitvi izkušenj uspešnih mladih slovenskih znanstvenikov. (<http://www.dmrs.eu/dejavnosti/znanstveni-inkubator/>)

Na 11. nanotehnološkem dnevu, ki je potekal v okviru 4. Ljubljanskega obrtno-podjetniškega sejma, smo v sklopu vabljenega predavanja oz. diseminacije, predstavili dosežke naše raziskovalne skupine s področja grafena. Poljudno-znanstveno predavanje je med poslušalci, ki so bili pretežno slovenski podjetniki in obrtniki, vzbudilo izredno zanimanje. Po predavanju so se vzpostavila tudi neformalna sodelovanja med našo raziskovalno skupino ter posameznimi podjetniki oz. obrtniki.

Karakterizirali smo depozite, odvzete iz dimovodnih naprav, ki so priključene na peči za zgorevanje lesne biomase (drva, peleti, sekanci). Vzorce so odvzeli zaposleni v Dimnikarstvu Dovrtel v dimovodnih napravah eno- ali večstanovanjskih stavb. Odvzeti vzorci so bili že na pogled zelo različni, kar so potrdili tudi rezultati termične analize. V okviru enega zaključenega diplomskega dela, ki se nadaljuje v magisterij in dveh diplomskih del, ki sta v teku, smo opravili termično analizo (TG/MS in DSC).

V termoanalizatorju smo v izbranih temperaturnih intervalih:

- merili zmanjšanje mase,
- merili količino sproščene toplote med segrevanjem vzorcev,
- analizirali produkte razpada (sklopitev TG/MS).

Zaključili smo, da se po gorenju sekancev v sodobnejših kurilnih napravah, kjer je optimalna

regulacija goriva in zraka, v dimniku odlagajo predvsem saje in ne katrani, ki predstavljajo večjo nevarnost za vžig v dimniku.

9. Pomen raziskovalnih rezultatov programske skupine⁸

9.1. Pomen za razvoj znanosti²

SLO

Koordinacijske spojine s svojimi raznolikimi in mnogimi uporabnimi lastnostmi postajajo stičišče anorganske, organske (sinteza ligandov) in biokemije (kovine v bioloških sistemih) in znanosti o materialih. Koordinacijske spojine zelo uporabnih kovinskih halogenidov, ki smo jih sintetizirali, širijo možnosti za njihovo uporabo na vseh naštetih področjih, ki je pogosto omejena s slabo topnostjo.

Študije bioloških lastnosti kovinskih zvrsti so zelo aktualna tematika raziskav, o čemer priča tudi dejstvo, da je veliko pomembnih strokovnih revij temu posvetilo posebne izdaje. Rutenijijski kompleksi kažejo zelo obetavne rezultate v in vitro in in vivo študijah kot potencialne protirakave učinkovine, veliko pa obetajo tudi spojine na osnovi rodija. Kljub visoki učinkovitosti pa mehanizmi delovanja teh spojin še vedno niso znani in v znanstveni skupnosti zaenkrat velja predpostavka, da spojine sočasno delujejo na več tarč, končna učinkovitost in selektivnost pa je rezultat sinergističnega učinka. Da bi lahko predvideli (ali vsaj tehtno predlagali) odnos med strukturo spojine in njenimi biološkimi lastnostmi potrebujemo širši nabor strukturnih podatkov v kombinaciji s široko paleto raziskav bioloških lastnosti (inhibicija encimov, interakcije z DNK, toksičnost in vitro,...) ter podrobne študije bioloških lastnosti in mehanizmov delovanja skrbno izbranih modelnih spojin.

Srednjeevropska regija je vodilna svetovna regija tako na področju bioanorganske kemije kot koordinacijske kemije rutenija, ki vključuje tudi področji homogene katalize in barvil za DSSC sončne celice. Med raziskovalnimi skupinami na teh področjih so vzpostavljena dolgoletna sodelovanja in tudi v tem primeru želimo preko skupne prijave, ki jo omogoča sporazum o vodilni agenciji z avstrijsko FWF, nadaljevati in okrepiti sodelovanje s skupino prof. Bergerja ter tako prispevati k vodilnemu položaju Evrope na področju bioanorganske medicinske kemije. V sodelovanju s podpornimi službami UL (UL inkubator, IRI UL,...) bomo redno preučevali možnosti zaščite intelektualne lastnine, možnosti trženja novih spojin in novorazvitih postopkov.

ANG

Coordination compounds with various properties, of which many are applicable, are becoming a connecting point between inorganic, organic (synthesis of ligands) and biochemistry (metals in biological systems) and material science. Coordination compounds, of metal halogenides, prepared in the frame of the program group are broadening the possibility of their application in all listed fields.

Biological studies involving metal-containing species are a hot topic in current research and many high-impact journals recently dedicated issues to this topic. Ruthenium complexes have repeatedly proven to be very effective in in vitro and in vivo studies as potential anticancer agents and Rh-based drugs show promise as well. However, the mechanisms of action still remain unclear and the action through multiple targets is currently proposed and the final effectivity and selectivity is the result of the synergistic effect. In order to predict (or at least soundly propose) the relationship between structure and activity more structural data must be obtained and coupled with screenings of biological activity (enzyme inhibition, DNA interactions, in vitro toxicity,...) as well as detailed biological evaluations on carefully selected and effective compounds.

The central European region is the world's leading region in both bioinorganic chemistry and ruthenium chemistry which also comprises the fields of homogeneous catalysis and dyes for dye-sensitized solar cells. There are long-time collaborations between many of the most prominent teams and this project, as a co-application through the leading-agency agreement with FWF would continue and strengthen the collaboration between some of those teams as well as reinforce the European position in the field of bioinorganic medicinal chemistry.

The defense of intellectual property, economic exploitation, spin-off creation and related topics will be discussed and addressed with supporting services within the University of Ljubljana (Unilj Incubator, Institute for Innovation and Development, etc.).

9.2.Pomen za razvoj Slovenije¹⁰

SLO

Ker je razvoj znanosti in tehnologije globalen, so znanstveni dosežki, navedeni v prejšnji točki relevantni tudi za slovenski prostor.

Za razvoj Slovenije je posebej pomembno, da se raziskave, ki jih izvajamo v okviru programske skupine vključujejo tudi v pedagoško delo. Te raziskave sodijo v okvir študija na prvi stopnji, magistrskem in doktorskem študiju in sooblikujejo strokovni profil diplomantov in jih usmerjajo v raziskovalni pristop pri njihovem bodočem delu.

Del raziskav v programski skupini pa posega tudi na področje zaščite in reševanja. Po podatkih o požarih, ki jih zbira in obdeluje Uprava Republike Slovenije za zaščito in reševanje, so od leta 2005 do 2012 zabeležili skupno 3596 dimniških požarov. Po naraščanju števila dimniških požarov v letih od 2005 do 2009 (do 573 požarov letno), je bilo v letih 2010 in 2011 požarov manj (382 letno), v letu 2012 pa je bilo število teh požarov spet večje od 500. Tovrstni požari prevladujejo v stanovanjskih objektih. Z opravljenimi raziskavami želimo pojasniti in strokovno preveriti, kako pomembna je uporaba ustreznega goriva (vlaga, sestava) in skrb za optimalno izgorevanje lesne biomase v kurilni napravi, ki vodi do popolnejšega izgorevanja in tvorbe manjše količine manj nevarnih depozitov v dimnikih. Z rezultati želimo prispevati tudi k osveščenosti prebivalcev in opustitvi sežiga neustreznih kuriv (polimerov) v pečeh na trda goriva.

ANG

Scientific and technological developemnt is global, so that the scientific achievements, listed in the previous point are relevant also for Slovenia.

For the development of Slovenia it is especially important that the reasearch, being performed in the frame of the program group, are also implemented into the teaching process at the faculty. The research are included into the study process of teh 1st, 2nd and 3rd cycle of studies and thus help in formation of young chemists and supports their further research and development activity.

A part of the research is also connected with protection and rescue. In the years 2005 to 2012 there were 3596 chimney fires, the number of chimney fires was growing from 2005 to 2009 (up to 573 fires yearly). In 2010 and 2011 there were less fires (382 yearly), while in 2012 the number rose again (over 500). Such fires occur mainly in living objects. The research is directed into analysis of the importance of using right fuel (humidity, composition) and assure optimal burning conditions to achieve less abundant and less dangerous chimney deposits. The results also aim to education of population to abandon burning inappropriate fuels (polymers) in the ovens for solid fuels.

10.Zaključena mentorstva članov programske skupine pri vzgoji kadrov v obdobju 1.1.2009-31.12.2014¹¹**10.1. Diplome¹²**

vrsta usposabljanja	število diplom
bolonjski program - I. stopnja	71
bolonjski program - II. stopnja	14
univerzitetni (stari) program	253

10.2. Magisterij znanosti in doktorat znanosti¹³

Šifra raziskovalca	Ime in priimek	Mag.	Dr.	MR	
30698	Jakob Kljun	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
30700					

	Rosana Hudej	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
8353	Barbara Novosel	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input type="checkbox"/>	
29397	Marta Počkaj	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
23648	Simona Medvešček	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
28564	Boštjan Erjavec	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
28339	Katarina Stare	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
28704	Jana Kemperl	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
28561	Jože Moškon	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
30740	Tina Skalar	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
20239	Anamarija Vajs	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="checkbox"/>	
35141	Razboršek Tina	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="checkbox"/>	

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
30698	Jakob Kljun	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	D - Javni zavod
30700	Rosana Hudej	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	C - Gospodarstvo
29397	Marta Počkaj	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	D - Javni zavod
23648	Simona Medvešček	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	C - Gospodarstvo
28339	Katarina Stare	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	C - Gospodarstvo
28704	Jana Kemperl	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	C - Gospodarstvo
28561	Jože Moškon	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	A - raziskovalni zavodi
30740	Tina Skalar	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	D - Javni zavod

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 1.1.2009-31.12.2014

Šifra raziskovalca	Ime in priimek	Sodelovanje v programski skupini	Število mesecev
0	Ioannis Brastos	B - uveljavljeni raziskovalec	1
0	Anita Blagus Garin	D - podoktorand	8
0	Iva Kollhamerova	D - podoktorand	6

0	Anthony James Scott	C - študent – doktorand	9	
0	Elisa Esteve Codina	C - študent – doktorand	9	

Legenda sodelovanja v programski skupini:

- A** - raziskovalec/strokovnjak iz podjetja
- B** - uveljavljeni raziskovalec iz tujine
- C** - študent – doktorand iz tujine
- D** - podoktorand iz tujine

13. Vključevanje v raziskovalne programe Evropske unije in v druge mednarodne raziskovalne in razvojne programe ter drugo mednarodno sodelovanje v obdobju 1.1.2009-31.12.2014¹⁵

SLO

V EU programih in projektih člani programske skupine nismo bili vključeni.

Večstransko mednarodno sodelovanje

COST CM1105

Functional metal complexes that bind to biomolecules. I. Turel.

COST D39

Ruthenium Anticancer Compounds. I. Turel.

Bilateralno mednarodno sodelovanje

Slovenija – Češka republika / Slovenia – Czech Republic

Struktura in lastnosti aktivnih organorutenijevih protirakavih kompleksov / Structure and Properties of Organoruthenium

Complexes Active in Anticancer Treatment, I. Turel

Slovenija – Češka republika / Slovenia – Czech Republic

Reakcije fosfatov in fosfonatov z organotitanovimi(IV) fluoridi in alkoksidi / Reactions of Phosphates and Phosphonates

with Organotitanium(IV) Fluorides and Alkoxides, A. Pevec

Slovenija – LR Kitajska / Slovenia – PR of China

Študij katalitskih in bioloških aktivnosti raznih rutenijevih kompleksov / Study of Catalytic and Biological Activity of Various Ruthenium Complexes, I. Turel

Slovenija – LR Kitajska / Slovenia – PR of China

Pd/Fe katalizirana aktivacija C–H vezi / Pd/Fe Catalyzed C–H Bond Activation, F. Perdih

Slovenija – Avstrija / Slovenia – Austria

Rutenijeve spojine in njihova možna uporaba v elektrokemoterapiji / Ruthenium Compounds and their Possible Applications in Electrochemotherapy, I. Turel

Slovenija – Srbija / Slovenia - Serbia

Struktura in mikrostruktura oksidnih nanomaterialov / Structure and Microstructure of Oxide Nanomaterials, A. Meden

Slovenija – Avstrija / Slovenia / Austria

Koordinacijski polimeri: od načrtovanja zgradbe do uporabnih materialov / Coordination Polymers: From Crystallization

to the Possible Application, I. Leban

Slovenija – Hrvaška / Slovenia – Croatia

Enscimska kataliza – modelni sistemi: prenos protona v vodikovih vezeh z nizko energijsko bariero / Enzyme Catalysis –

Model Systems: Proton Transfer in Low Barrier Hydrogen Bonds, A. Meden

Slovenija – Češka republika / Slovenia – Czech Republic

Novi mešani organokovinski aluminijevi-titanovi(IV) fosfati, fosfonati, fosfinati in fluoridi / New Mixed Organometallic

Aluminium-Titanium(IV) Phosphates, Phosphonates, Phosphinates and Fluorides, A. Demšar

SCIEX projekt (Švicarska znanstvena fondacija), 2012-2013, Katarina stare Anton Meden.

SCOPES projekt (Švicarska znanstvena fondacija) 2014-2017) Anton Meden, Aaliya Golobič, Marta Počkaj.

Slovenija – Hrvaška (2014-2015)

Nekonvencionalni multiferroiki / Nonconventional multiferroics

B. Kozlevcar

14. Vključenost v projekte za uporabnike, ki so v obdobju trajanja raziskovalnega programa (1.1.2009–31.12.2014) potekali izven financiranja ARRS¹⁶

SLO

Sodelovanje z industrijskimi in drugimi partnerji v RS
 Krka d.d.
 Ekspertne storitve (letna pogodba) / Expert Services (Annual Contract), A. Meden
 Salonit d.d.
 Kvantitativne fazne analize (letna pogodba) / Quantitative Phase Analysis (Annual Contract), A. Meden
 UNICHEM d.o.o.
 Razvoj biocidnih sredstev in gnojil (pogodba KPIOT) / Development of Biocidal Agents and Fertilizer, B. Kozlevčar

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

SLO

Patenti in patentne prijave se nanašajo na dosežke v zgodnji fazi razvoje - na laboratorijski ravni. Pomenijo predvsem odkrite nove materiale, ki majo potencialno tehnološko uporabnost, razvoj postopkov za proizvodnjo večjih količin materialov pa se še ni začel.

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	<input type="radio"/> DA <input checked="" type="radio"/> NE
potrebni finančni vložek	EUR
ocena potrebne infrastrukture in opreme ¹⁸	

17. Izjemni dosežek v letu 2014¹⁹**17.1. Izjemni znanstveni dosežek**

GOBEC, M., KLJUN, J., SOSIČ, I., MLINARIČ-RAŠČAN, I., URŠIČ, M., GOBEC, S., TUREL, I.
 Structural characterization and biological evaluation of a clioquinol-ruthenium complex with copper-independent antileukaemic activity. Dalton trans., 2014, 43, 9045-9051.

Predstavili smo sintezo, biološko karakterizacijo in prvo kristalno strukturo organokovinskega kliokinolnega kompleksa. Kombinacija rutenija z uveljavljenim apoptotičnim sredstvom in 8-hidroksikinolinskim derivatom je vodila do kompleksa, ki povzroči kaspazno-odvisno celično smrt v levkemičnih celicah. Ta aktivnost je neodvisna od bakra in je boljša kot pri samem kliokinolu. Študija načina delovanja je pokazala, da se kompleks ne interkalira med bazne pare

DNK. Poleg tega sintetizirani kliokinolni rutenijev kompleks izkazuje od proteasomov neodvisno inhibicijo NF κ B signalne poti brez učinka na distribucijo celičnega cikla. To kaže na mehanizem delovanja, ki vključuje drugačen tarčni profil kot pri samem kliokinolu.

17.2. Izjemni družbeno-ekonomski dosežek

COBISS: 2.12 Končno poročilo o rezultatih raziskav

BITENC, Jan, PIRNAT, Klemen, GENORIO, Boštjan, DOMINKO, Robert. Results from Honda initiation grant Europe : full report from the project Honda Initiation Grant Europe. Ljubljana: Kemijski inštitut, Mar. 2014. 18 str., ilustr. [COBISS.SI-ID 5450010]

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
matične RO (JRO in/ali RO s
koncesijo):*

in

vodja raziskovalnega programa:

Univerza v Ljubljani, Fakulteta za
kemijo in kemijsko tehnologijo

Anton Meden

ŽIG

Kraj in datum:

Ljubljana

14.3.2015

Oznaka poročila: ARRS-RPROG-ZP-2015/152

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. V primeru odobrenega povečanja obsega financiranja raziskovalnega programa v letu 2014 mora poročilo o realizaciji programa dela zajemati predložen program dela ob prijavi in predložen dopolnjen program dela v letu 2014. 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, navedite: "Ni bilo sprememb.". 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 izvajanja raziskovalnega programa. Raziskovalni dosežek iz obdobja izvajanja programa 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 izvajanja raziskovalnega programa.

Družbeno-ekonomski dosežek iz obdobja izvajanja programa 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 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://www.sicris.si/> za posamezen program, ki je predmet poročanja. [Nazaj](#)

⁹ Največ 4.000 znakov vključno s presledki (približno 2/3 strani, velikost pisave 11). [Nazaj](#)

¹⁰ Največ 4.000 znakov vključno s presledki (približno 2/3 strani, velikost pisave 11). [Nazaj](#)

¹¹ Upoštevajo se le tiste diplome, magisteriji znanosti in doktorati znanosti (zaključene/i v obdobju 1.1.2009–31.12.2014), pri katerih so kot mentorji sodelovali člani programske skupine. [Nazaj](#)

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

¹³ Vpišite šifro raziskovalca in/ali ime in priimek osebe, ki je v času izvajanja 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 31.12.2014), izberite oz. 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. 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 6.000 znakov vključno s presledki (približno ena stran, 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 2014 (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/analyze/dosez/>. [Nazaj](#)

Obrazec: ARRS-RPROG-ZP/2015 v1.00b

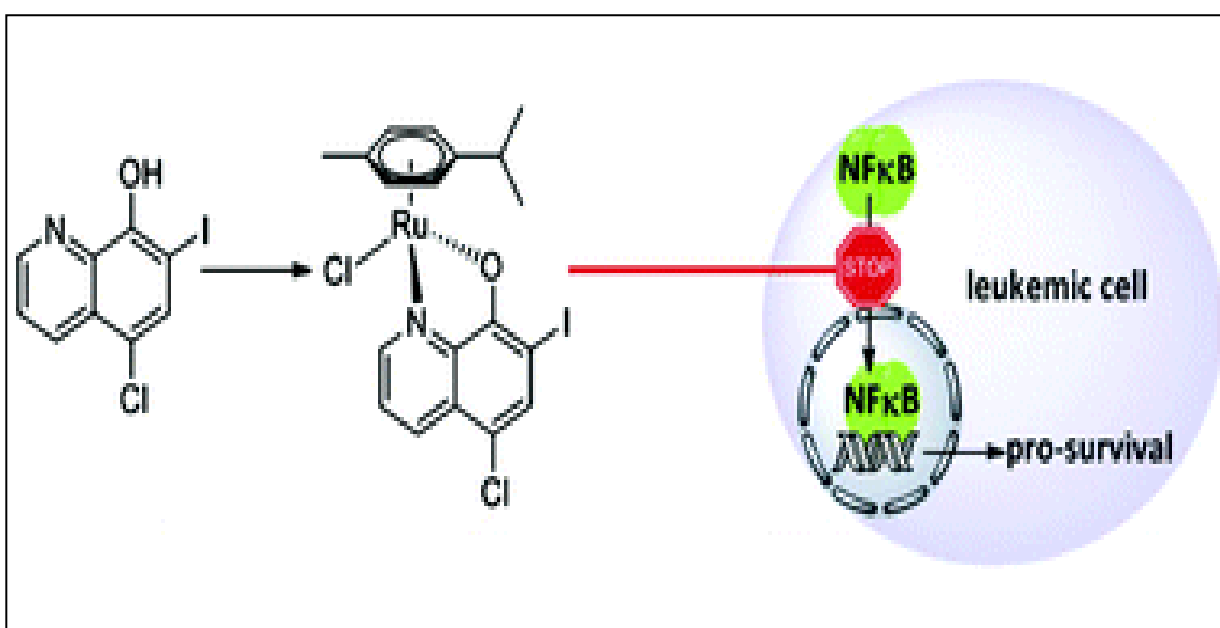
22-DC-18-66-8D-3E-0D-F3-36-F5-F3-6D-DF-A7-B1-E4-BB-8F-50-BD

Priloga 1

NARAVOSLOVJE

Področje: 1.04 – Kemija

Dosežek 1: 1.01, Vir: GOBEC, Martina, KLJUN, Jakob, SOSIČ, Izidor, MLINARIČ-RAŠČAN, Irena, URŠIČ, Matija, GOBEC, Stanislav, TUREL, Iztok. Structural characterization and biological evaluation of a clioquinol-ruthenium complex with copper- independent antileukaemic activity. Dalton transactions, 2014, vol. 43, no. 24, str. 9045-9051.



V študiji smo predstavili sintezo, biološko karakterizacijo in prvo kristalno strukturo organokovinskega cliokinolnega kompleksa. Kombinacija rutenija z uveljavljenim apoptotičnim sredstvom in 8-hidroksikinolinskim derivatom je vodila do kompleksa, ki povzroči kaspazno-odvisno celično smrt v levkemičnih celicah. Ta aktivnost je neodvisna od bakra in je boljša kot izhoda spojina cliokinol. Študija načina delovanja je pokazala, da se ta cliokinolni rutenijev kompleks ne interkalira med bazne pare DNK. Poleg tega sintetizirani cliokinolni rutenijev kompleks izkazuje od proteasomov neodvisno inhibicijo NFκB signalne poti brez učinka na distribucijo celičnega cikla. Ti podatki kažejo na drugačen mehanizem delovanja, ki vključuje tarčni profil, kije drugačen kot pri samem cliokinolu.