

Oznaka poročila: ARRS-RPROG-ZP-2015/80



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	P1-0034
Naslov programa	Analitika in kemijska karakterizacija materialov ter procesov Analytics and Chemical Characterization of Materials and Processes
Vodja programa	18555 Samo Hočevar
Obseg raziskovalnih ur (vključno s povečanjem financiranja v letu 2014)	71400
Cenovni razred	C
Trajanje programa	01.2009 - 12.2014
Izvajalci raziskovalnega programa (javne raziskovalne organizacije - JRO in/ali RO s koncesijo)	104 Kemijski inštitut 1540 Univerza v Novi Gorici
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

V obdobju 2009-2014 je programska skupina P1-0034 objavila 138 izvirnih znanstvenih člankov v mednarodnih recenziranih revijah. Povprečni faktor vpliva (IF) revij je 2,9, od tega 1

članek v reviji z IF 9,91, 1 članek z IF 8,53, 1 članek z IF 8,24, 1 članek z IF 6,72, 6 člankov z IF nad 5, 15 člankov z IF nad 4 in 42 člankov z IF nad 3. Skoraj dve tretjini člankov (63,0 %) je bilo objavljenih v revijah uvrščenih v prvi kvartil na področju.

Na področju elektrokemijskih senzorjev je bil poudarek na razvoju, študijah in uporabi bizmutovih (Bi) in antimonovih (Sb) elektrod za merjenje sledov ionov (težkih) kovin ter izbranih organskih spojin (sildenafil citrat (Viagra), sulfasalazin, olsalazin, pantoprazol). Razvili smo nove tipe Bi- in Sb-elektrod pripravljenih na različnih osnovnih elektrodnih materialih (steklast ogljik, ogljikova pasta, ogljikovo mikrovlakno); pripravili smo npr. izvedbi Sb-elektrod z dodatkom Sb-prahu in Sb-oksida v ogljikovo pasto, razvili smo tankoslojno Bi-elektrodo na sestavu zlatih nanoelektrod in Bi-elektrodo z modifikacijo ogljikove paste z amonijevim tetrafluorobizmutatom. S tem smo znatno prispevali na področju razvoja sodobne elektroanalizne kemije, poleg temeljnih študij, predvsem z uvedbo odličnih nadomestkov za do sedaj najpogosteje uporabljeno živosrebreno elektrodo.

Na področju atmosfere kemije smo študirali in razvijali analizne metode za identifikacijo in kvantifikacijo pomembnih skupin organskih spojin, kot so karboksilne kisline in nitroaromske spojine, ki predstavljajo pomemben delež sekundarnih organskih aerosolov (SOA). Za nitrokatehole smo pokazali, da so pomembni markerji SOA, ki nastajajo pri izgorevanju lesne biomase. Razvili smo sistem, ki nam omogoča študij kemijskih procesov pri pogojih podobnih atmosferskim in simulirali reakcije na trdnih delcih (heterogene) in v vodni fazi (homogene); pričeli smo z meritvami in karakterizacijo (atmosferskih) nanodelcev.

Na področju sklopitve laserske ablacije in elementne masne spektrometrije z ionizacijo v induktivno sklopljeni plazmi (LA-ICP-MS), za (mikro)analitiko in karakterizacijo trdnih vzorcev (bioloških, arheoloških, geoloških, industrijskih), smo dosegli izreden uspeh in napredek, predvsem pri razvoju metodologij za 2D in 3D elementno oslikovanje in pri povezavi eksperimentalnih rezultatov s teoretičnimi modeli.

Na področju mikroskopske spektrometrije s termični lečami (TLM) smo razvili teoretični model pojava mikroskopske termične leče v troslojnim vzorcu. S tem inovativnim pristopom postaja TLM z nekoherentnim vzbujanjem uporabna tudi za rutinske kemijske analize.

Raziskave kinetike vezave mikrocistina na kompozitne materiale so bile ključne za razvoj biokompatibilnega materiala za odstranjevanje mikrocistina in podobnih toksinov iz vode.

ANG

In the period 2009-2014 the programme group P1-0034 published 138 original research articles in international peer-reviewed journals. The average impact factor (IF) of the journals is 2.9, of which 1 article was published in a journal with IF 9.91, 1 article with IF 8.53, 1 article with IF 8.24, 1 article with IF 6.72, 6 articles with IF above 5, 15 articles with IF above 4 and 42 articles with IF above 3. Nearly two thirds of the articles (63.0 %) were published in journals ranked in the first quartile in the field.

In the field of electrochemical sensors the emphasis was on the development, study and application of bismuth (Bi) and antimony (Sb) electrodes for measuring trace (heavy) metal ions and selected organic compounds (sildenafil citrate (Viagra), sulfasalazine, olsalazine, pantoprazole). We developed new configurations of Bi- and Sb-electrodes prepared on various supporting electrode materials (glassy carbon, carbon paste, carbon microfiber); among others we prepared two types of Sb-electrodes by adding Sb-powder and Sb-oxide into the carbon paste, we developed a bismuth film electrode on a gold nanoelectrode array and Bi-electrode by modifying carbon paste with ammonium tetrafluorobismuthate. With these achievements we significantly contributed to the field of advanced electroanalytical chemistry development, in particular regarding the introduction of excellent substitutes for so far the most commonly used mercury electrode.

In the field of atmospheric chemistry we studied and developed analytical methods for identification and quantification of important groups of organic compounds, such as carboxylic acids and nitroaromatic compounds, which represent a significant share of secondary organic aerosols (SOA). We showed that nitrocatechols are important markers of SOA, which form

during biomass (wood) burning. We developed a system which enables us to study chemical processes under conditions similar to atmospheric and we simulated reactions on solid particles (heterogeneous) and in aqueous phase (homogeneous); we commenced with the measurements and characterization of (atmospheric) nanoparticles.

In the field of coupling laser ablation and inductively coupled plasma-elemental mass spectrometry (LA-ICP-MS) for (micro)analysis and characterization of solid samples (biological, archaeological, geological, industrial) we achieved remarkable success and progress, particularly in developing methodologies for 2D and 3D elemental imaging and in connecting experimental results with theoretical models.

In the field of microscopic thermal lens spectrometry (TLM) we developed a theoretical model of the microscopic thermal lens phenomenon in a three-layer sample. With this innovative approach the incoherent excitation TLM is becoming useful also for routine chemical analysis.

Investigations of adsorption kinetics of microcystine on composite materials were crucial for the development of a biocompatible material for removal of microcystine and similar toxins from water.

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

V obdobju 2009-2014 je programska skupina (PS) P1-0034 objavila 138 izvornih znanstvenih člankov v mednarodnih recenziranih revijah. Povprečni faktor vpliva (IF) revij je 2,9 (od tega 1 članek v reviji z IF 9,91, 1 članek z IF 8,53, 1 članek z IF 8,24, 1 članek z IF 6,72, 6 člankov z IF nad 5, 15 člankov z IF nad 4 in 42 člankov z IF nad 3). 87 (63,0 %) člankov je bilo objavljenih v revijah uvrščenih v prvi kvartil na področju, 24 (17,4 %) v drugi kvartil, 26 (18,8 %) v tretji kvartil in 1 (0,7 %) v četrti kvartil. Člani PS so se udeležili 110 mednarodnih in 15 domačih konferenc - predstavili so 207 govornih in poster prispevkov ter imeli 9 vabljenih predavanj. Del raziskovalnega dela je potekal v okviru mednarodnih sodelovanj: 9 mednarodnih (EU) projektov, 16 bilateralnih projektov (Izrael, 2 x Češka, Makedonija, Hrvaška, Avstrija, 2 x Belgija, 2 x ZDA, Srbija, 2 x Rusija, Francija, Argentina, Kitajska) in mnogih neformalnih sodelovanj s partnerji iz EU, Norveške, ZDA in držav JV Evrope.

Na področju elektroanalizne kemije in senzorjev smo razvijali in preučevali različne tipe antimonovih (Sb) in bizmutovih (Bi) elektrod za merjenje sledov ionov težkih kovin in izbranih organskih spojin. Študirali smo izvedbe Sb- in Bi-elektrod, pripravljenih na različnih osnovnih elektrodah, kot so elektroda iz steklastega ogljika ali ogljikove paste, mikroelektroda iz ogljikovega vlakna, pripravili smo izvedbi Sb-elektrod z dodatkom Sb-prahu in Sb-oksida v ogljikovo pasto. Razvijali smo tankoslojne Bi-elektrode pripravljene na osnovni zlati elektrodi, na osnovni elektrodi iz sestava zlatih nanoelektrod in osnovali nov tip Bi-elektrode z modifikacijo ogljikove paste z amonijevim tetrafluorobizmutatom. Poleg merjenja ionov težkih kovin (Pb, Cd, In, Tl, Zn, Cu, Hg) smo z Sb- in Bi-elektrodami razvili metode za merjenje organskih spojin/farmacevtskih učinkovin, kot so sulfasalazin, olsalazin, pantoprazol in sildenafil citrat (Viagra).

S pomočjo nedavno predlaganega teoretskega pristopa smo študirali mehanizme in kinetiko elektrodnih procesov na tankoslojni Sb- in Bi-elektrodi in med njima ugotovili pomembne razlike.

Pričeli smo s preliminarnimi študijami razvoja dveh novih tipov bizmutovih elektrod. V prvem primeru smo modificirali površino osnovne elektrode iz steklastega ogljika z modifikacijskim slojem iz prekursorskega materiala z vključenim (koordiniranim) bizmutom. Takšen pristop bi lahko omogočal enostavno modifikacijo in uporabo bizmutove elektrode, kjer bi se bizmutov sloj formiral ex-situ v ločeni raztopini ali "kvazi" in-situ med korakom elektrokemijske akumulacije analitov pri npr. anodni stripping voltometriji. V drugem primeru smo modificirali površino osnovne elektrode iz steklastega ogljika z bizmutovim slojem, ki smo ga pripravili ex-

situ z različnimi tokovnimi (redukcijskimi) pulzi (pulzna galvanostatska depozicija). Preiskovali smo vpliv različnih programov/zaporedij tokovnih pulzov na elektroanalitske karakteristike tako pripravljenih tankoslojnih bizmutovih elektrod. Obstojnost bizmutovega sloja smo dodatno izboljšali z dodatkom bromidnih ionov v modifikacijsko raztopino.

V sodelovanju z Laboratorijem za kemijo materialov smo z zanimivo sklopitvijo elektrokemije (ciklične voltometrije) in elementne masne spektrometrije z vzbujanjem v induktivno sklopljeni plazmi (ICP-MS) preučevali procese elektrokemijskega raztapljanja/korozije platine iz elektrokatalizatorja. Raziskave so rezultirale v skupnih objavah v ChemCatChem (IF=5,04) in Chemical Communications (IF=6,72).

Razvili smo elektrokemijski mikrosenzor za amperometrično merjenje askorbinske kisline v kislem mediju (pH 2), na področju miniaturizacije pa smo pričeli z razvojem inovativnega protokola za pripravo mikroelektrod z uporabo komercialnega inštrumenta za lasersko ablacijo.

Na področju atmosfere kemije smo med vulkanskim izbruhom Eyjafjallajökulla izvedli meritve aerosolov na Krvavcu. Na osnovi kemijske in morfološke karakterizacije delcev po velikosti smo potrdili prisotnost delcev vulkanskega izvora, ki so prepotovali ca. 3000 km od izvora do Slovenije.

V sodelovanju z ZVD, Ljubljana in Reg. parkom Škocjanske jame smo izvedli meritve (nano) aerosolov v Škocjanskih jamah, ki so prve tako obsežne meritve v jamah nasploh.

Razvili smo specifično in občutljivo metodo (HILIC-ESI-MS/MS) za določevanje serije karboksilnih kislin, ki so v kompleksnih atmosferskih aerosolih prisotne v nizkih koncentracijah.

Prvič do sedaj smo kvantificirali nitrokatehole in njihove homologe z novo metodo, ki temelji na LC-ESI-MS/MS; po optimizaciji in validaciji metode smo analizirali PM₁₀ vzorce iz Ljubljane in v zimskih vzorcih določili do 500x višje koncentracije nitrokatehola in metil-nitrokateholov kot v poletnih vzorcih. Visoka korelacija z levoglukozanom je potrdila njihov izvor - izgorevanje lesa.

V okviru raziskav atmosferskih procesov smo pokazali, da piruvična kislina v prisotnosti svetlobe vpliva na atmosferske večfazne reakcije O₃ z oksalno kislino, pri čemer nastajajo višje-molekularni in zelo nepolarni produkti.

Študirali smo kinetiko večfazne reakcije fotooksidacije in nitracije gvajakola (G), ki se emitira v ozračje med gorenjem lesa. Poleg usode G so nas zanimali še trije glavni produkti njegove (foto)nitracije (4-nitroG, 6-nitroG in 4,6-dinitroG), ki smo jih predhodno kemijsko okarakterizirali z MS, UV/Vis in NMR.

Razvili smo eksperimentalni sistem za študij interakcij nizko in visoko reaktivnih spojin z O₃; študirali smo kinetiko heterogene reakcije pesticidov (trifluralina-TRI, isoproturona-ISO), adsorbiranih na kremenovih delcih, z O₃ pri atmosferskih pogojih. Ugotovili smo, da je življenjska doba TRI v zraku tudi več mesecev, ISO pa nekaj dni.

Tehniko laserska ablacija-ICP-MS smo razvijali v več smereh: (i) novi kalibracijski protokoli za analizo stekla, (ii) računalniške rutine za virtualno oslikovanje za optimizacijo instrumentalnih pogojev, (iii) 2D in 3D elementno oslikovanje - procesiranje elementnih slik:

- Elementno mikroanalizno oslikovanje smo uporabili na področjih: (a) arheologija; analiza polikromnih steklenih posod - 2D in 3D oslikovanje korodiranega stekla, (b) biologija; 2D oslikovanje Hg v koreninah koruze, Zn in Cd v listih, porazdelitev Zn v delih rastlin.

- Z metodami selektivne ekstrakcije, elementne speciacije in modeliranja smo preiskovali kroženje elementov in onesnaževal v okolju in pridobili vpogled v: (i) transportne faktorje zemlja-rastlina (kontaminacija z As), (ii) onesnaževanje zaradi prometa (prenos Ce, La, Zr v cestni prah), (iii) izluževanje iz nevarnih odpadkov (Pb iz ekranov), (iv) stopnje migracije v zemlji (model za izlitje snovi z As).

- Na področjih zdravja in hrane smo preučevali uporabo sklopljenih tehnik za študij: (i) obnašanja mineralov v hranilih (Zn v jedilnih rastlinah) in v prebavnem traktu, (ii) biološke dostopnosti aerosolov v dihalih (delci PbS proizvedeni z laserjem) in (iii) uporabe določenih

elementnih zvrsti za zdravljenje (As_2O_3 in levkemija).

- LA-ICP-MS smo uporabili kot orodje v nano-znanosti za sočasno depozicijo in diagnostiko tvorbe tankih (nano)filmov.

- Razvili smo instrumentalne in programske pristope za zmanjševanje časa analize, izboljšanje elementne kvantifikacije in prostorske ločljivosti za LA-ICP-MS 2D in 3D oslikovanje. V sodelovanju z Univerzo v Gentu, Belgija, smo razvili in testirali najnaprednejšo (state-of-the-art) ablacijsko celico izredno majhnih dimenzij (prostornina 1 μ l), ki jo odlikuje super hitro izpiranje z lasersko ablacijo proizvedenih aerosolskih delcev iz celice in omogoča s tem časovno razločene laserske pulze do hitrosti 300 pulzov v sekundi, kar je na področju oslikovanja z LA-ICP-MS trenutni rekord. Razvili smo tudi inovativne protokole za izboljšanje lateralne ločljivosti elementnega oslikovanja z LA-ICP-MS, ki temeljijo na naknadni obdelavi podatkov z metodami spektralne in slikovne dekonvolucije; uporaba prekrivanja LA pulzov v x- in y-smeri v kombinaciji z omenjenimi metodami omogočajo povečanje lateralne ločljivosti pod premer laserskega žarka (t.j. 0.2 μ m).

Razvili smo metodo pretočne injekcijske analize s TLS (spektrometrija s toplotnimi lečami) detekcijo za določevanje ionskega in koloidnega srebra v vodi, ki je osnovana na tvorbi nano-Ag po redukciji z borohidridom. Pomembne dosežke beležimo na področju teorije in razvoja instrumentacije mikroskopske TLS ter njene uporabe v mikrofluidnih sistemih, tako za detekcijo toksičnih snovi v vzorcih okolja, kot tudi za detekcijo biomarkerjev v bioloških tekočinah.

Naše raziskave kinetike vezave mikrocistina na kompozitne materiale so bile ključne za razvoj biokompatibilnega materiala za odstranjevanje mikrocistina in podobnih toksinov iz vode.

Pomemben je razvoj tehnike optotermičnega odklona za optično in termično karakterizacijo nanostrukturiranih materialov in njihovo uporabo za fotokatalitsko čiščenje vode.

Za možnost izkoriščanja bioaktivnih snovi v odpadkih živilske industrije je pomembna nova metoda UPLC za detekcijo fenolnih spojin v oljčnih oljih, oljkah in tropinah iz oljk.

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

SLO

Program dela, načrtovanega v okviru programa P1-0034, smo v celoti realizirali in celo presegli zastavljene raziskovalne in bibliografske cilje (statistika dosežkov je predstavljena v točki 3).

Nekaj primerov:

- Na področju razvoja sodobnih elektrokemijskih senzorjev smo dosegli preboj, predvsem z razvojem tankoslojne bizmutove elektrode (skupaj z našim ameriškim partnerjem), kot odličnim nadomestkom za do sedaj najpogosteje uporabljano živosrebrovo elektrodo, za merjenje sledov kovinskih ionov in nekaterih organskih spojin. Bizmutova elektroda je pritegnila veliko pozornost ter se uveljavila oz. postala predmet raziskav v mnogih elektroanaliznih laboratorijih praktično po vsem svetu; o tem priča tudi število citacij (546) samo prvega našega članka o bizmutovi elektrodi (Analytical Chemistry, 2000).

Podoben uspeh se pričakuje tudi za pri nas razvito tankoslojno antimonovo elektrodo.

- Na področju atmosfere kemije smo dosegli velik uspeh, saj smo razvili analizne metode za identifikacijo in kvantifikacijo pomembnih skupin organskih spojin (karboksilne kisline, nitroaromatke spojine), ki predstavljajo pomemben delež sekundarnih organskih aerosolov (SOA). Za nitrokatehole se je tudi izkazalo, da so pomembni markerji SOA, ki nastajajo pri izgorevanju lesne biomase. Razvili pa smo tudi sistem, ki nam omogoča študij kemijskih procesov pri pogojih podobnim atmosferskim in simulirali reakcije na trdnih delcih (heterogene) in v vodni fazi (homogene).

- Na področju sklopitve laserske ablacije z elementno masno spektrometrijo z ionizacijo v induktivno sklopljeni plazmi (LA-ICP-MS), za (mikro)analitiko in karakterizacijo trdnih vzorcev

(bioloških, arheoloških, geoloških, industrijskih), smo dosegli izreden uspeh in napredek nad pričakovanji, predvsem na polju razvoja metodologij za 2D in 3D elementno oslikovanje in na polju povezave eksperimentalnih rezultatov z matematičnim/teoretičnim modelom.

- Na področju mikroskopske spektrometrije s termični lečami (TLM) smo razvili teoretični model pojava mikroskopske termične leče v trislojnim vzorcu. Numerične simulacije so pokazale, da lahko v primeru, ko sta spodnji in zgornji sloj topili z visokim temperaturnim koeficientom lomnega količnika in nizko toplotno prevodnostjo, signal TL ojačamo tudi do 10-krat, glede na signal vzorca vodne raztopine, v srednjem sloju 100 μm . Z vzbujanjem z nekoherentnimi svetlobnimi izvori smo na TLM spektrometru dosegli do 7-kratno izboljšanje občutljivosti. S tem inovativnim pristopom postaja TLM z nekoherentnim vzbujanjem uporabna tudi za rutinske kemijske analize.

- Uspeh, relevantnost področja in mesto programske skupine so bili izkazani tudi v sklopu uspešne organizacije pomembne mednarodne konference "The 14th International Conference on Electroanalysis, ESEAC 2012" v Portorožu (ca. 220 udeležencev).

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

SLO

Ni bilo sprememb.

(Kadrovske spremembe v 2014 so razvidne iz oddanih NRU in PRU obrazcev)

6. Najpomembnejši znanstveni rezultati programske skupine⁵

		Znanstveni dosežek	
1.	COBISS ID	4863258	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Elektrolit na osnovi sulfidne/polisulfidne ionske tekočine za sončne celice na osnovi kvantnih pik
		ANG	A sulfide/polysulfide-based ionic liquid electrolyte for quantum dot-sensitized solar cells
	Opis	SLO	Sončne celice na osnovi kvantnih pik (QDSC) so hitro razvijajoče področje razvoja sončnih celic, ki uporablja kvantne pike kot fotovoltaični material, v nasprotju z bolj znanimi polprevodniškimi materiali, kot je npr. silicij. S spreminjanjem velikosti imajo kvantne pike spremenljive kvantne reže (band-gaps) po širokem spektru energijskih nivojev. Ta lastnost kvantnih pik je zelo zanimiva za več-stične (multi-junction) sončne celice, kjer sodeluje več različnih energetskih nivojev, da ekstrahirajo več energije iz sončnega spektra. Pripravili smo robusten S ₂ -/S(n) ²⁻ elektrolit, ki smo ga prirojili tako, da je bil združljiv s kvantnimi pikami CdSe v sončnih celicah. Nova pirolidinijska ionska tekočina je omogočila 1,86 % izkoristek in tok kratkega stika 14 mA cm ⁻² pri osvetljevanju s simulirano 1,5-kratno močjo sonca. Pri teh pogojih je fotoanoda izkazovala dobro dolgoročno vzdržljivost več kot 240 ur. Fotovoltaična karakterizacija je pokazala, da so omejitve take celice slaba kataliza regeneracije na protielektrodi in visoka stopnja rekombinacije. Nadaljnje izboljšave teh parametrov v robustnem elektrolitu imajo lahko tako pomemben vpliv pri nadaljnjem razvoju QDSC. Tak elektrolit je lahko osnova za pripravo tudi drugih, npr. kemijskih senzorskih materialov.
			Quantum dot solar cells (QDSC) are an emerging field in solar cell research that uses quantum dots as the photovoltaic material, as opposed to better-known bulk semi-conductive materials such as silicon. Quantum dots have tunable band-gaps across a wide range of energy levels by changing the quantum dot size. This property makes quantum dots attractive for multi-junction solar cells, where a variety of different energy levels are used to

		ANG	extract more energy from the solar spectrum. A robust S ₂ -/S(n) ² -electrolyte was specifically designed for compatibility with CdSe quantum dots in solar cells. The new pyrrolidinium ionic liquid reaches 1.86 % efficiency and short-circuit current close to 14 mA cm ⁻² under air-mass 1.5 global illumination, and improves the device lifetime with good photoanode stability over 240 hours. Photovoltaic characterization shows that the solar cell limitations relate to poor catalysis of regeneration at the counter electrode and high recombination. Further improvement of these factors in the robust electrolyte configuration may thus have a significant impact for advancing the state-of-art of QDSCs. Such an electrolyte may also be used in developing some other, for example, chemical sensing materials.
	Objavljeno v		American Chemical Society; Journal of the American Chemical Society; 2011; Vol. 133, no. 50; str. 20156-20159; Impact Factor: 9.907; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 3.001; A'': 1; A': 1; WoS: DY; Avtorji / Authors: Jovanovski Vasko, Gonzáles-Pedro Victoria, Gimenez Sixto, Azaceta Eneko, Cabanero German, Grande Hans, Tena-Zaera Ramon, Bisquert Juan
	Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek
2.	COBISS ID	4942874	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Diagnostika anodnih stripping mehanizmov z uporabo square-wave voltametrije in tankoslojne bizmutove elektrode
		ANG	Diagnostics of anodic stripping mechanisms under square-wave voltammetry conditions using bismuth film substrates
	Opis	SLO	Predstavljena je bila študija, ki omogoča diagnosticiranje anodnih stripping elektrodnih procesov na tankoslojnih bizmutovih elektrodah, iz teoretičnega in praktičnega vidika. Predlagali smo teoretične modele za tri tipe elektrodnih mehanizmov pod pogoji square-wave voltametrije. Privzeli smo, da se med korakom depozicije oz. akumulacije tvori trden/enakomeren sloj kovinskega analita na površini bizmutovega filma, ki je nanešen na in-situ način na osnovno elektrodo iz steklastega ogljika, brez upoštevanja masnega prenosa v sloju bizmuta in v sloju kovinskega analita. Teoretični podatki so analizirani s pomočjo brezdimenzijskih parametrov povezanih z elektrodno kinetiko, masnim prenosom, adsorpcijskim ravnotežjem in možnimi interakcijami med akumuliranimi kovinskimi delci. Teoretična analiza omogoča definicijo enostavnih kriterijev za razlikovanje in karakterizacijo preiskovanih elektrodnih procesov; s primerjavo teoretičnih in eksperimentalnih podatkov smo uspešno okarakterizirali anodne stripping procese Zn(II), Cd(II) ter Pb(II) in pri tem ugotovili pomembne razlike med njihovimi reakcijskimi mehanizmi. Predlagan enostaven diagnostičen protokol se lahko smatra kot splošno uporaben, bizmutov film pa je bil v tem delu uporabljen kot primeren nadomestek za živosrebrov analog.
		ANG	A mechanistic study to provide diagnostics of anodic stripping electrode processes at bismuth-film electrodes is presented from both theoretical and experimental points of view. Theoretical models for three types of electrode mechanisms are developed under conditions of square-wave voltammetry. In the course of the deposition step, it has been assumed that a uniform film of the metal analyte is formed on the bismuth substrate, in-situ deposited onto a glassy carbon electrode surface, without considering mass transfer within either the bismuth or the metal analyte film. Theoretical data are analyzed in terms of dimensionless critical parameters related with electrode kinetics, mass transfer, adsorption equilibria, and possible lateral interactions within the deposited metal particles. Theoretical analysis enables definition of simple criteria for differentiation and characterization of electrode processes. Comparing theoretical and experimental data, anodic stripping processes of zinc(II), cadmium(II), and lead(II) are

		successfully characterized, revealing significant differences in their reaction pathways. The proposed easy-to-perform diagnostic route is considered to be of a general use while the bismuth-film exploited in this study served as a convenient non-mercury model substrate surface.
	Objavljeno v	American Chemical Society; Analytical chemistry; 2012; Vol. 84, issue 10; str. 4429-4436; Impact Factor: 5.695; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.187; A': 1; WoS: EA; Avtorji / Authors: Mirceski Valentin, Hočevsar Samo B., Ogorevc Božidar, Gulaboski Rubin, Drangov Ivan
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek
3.	COBISS ID	4547610 Vir: COBISS.SI
	Naslov	<i>SLO</i> Osnovni pristop modeliranja za optimizacijo elementnega oslikovanja z uporabo laserske ablacije sklopljene z ICP-MS
		<i>ANG</i> Basic modeling approach to optimize elemental imaging by laser ablation ICP-MS
	Opis	<i>SLO</i> V tem delu smo razvili matematični model in spremljajoči računalniški program za simulacijo procesa elementnega oslikovanja s sklopljeno tehniko laserska ablacija - elementna masna spektrometrija (LA-ICP-MS), ki temelji na virtualnem oslikovanju digitalne slike vzorca. To omogoča optimizacijo vseh pomembnejših instrumentalnih nastavitvev za izdelavo visoko kakovostnih elementnih slik. Na ta način se lahko izognemo uničenju velikokrat enkratnih in dragocenih vzorcev, obenem pa znatno zmanjšamo čas analize in stroške dela. Ta dosežek nas uvršča med vodilne skupine v svetu na tem področju.
		<i>ANG</i> We developed a mathematical model, and ensuing software, for process simulation of the elemental imaging using hyphenated technique laser ablation - elemental mass spectrometry (LA-ICP-MS) based on virtual imaging of a digital image of the sample. This allows optimization of all major instrumental settings for generation of high-quality element maps prior to the actual experiment. In this way damage to often unique and precious samples is avoided, whereas the analysis time and costs are significantly minimized. The achievement places us among leading groups in this field.
	Objavljeno v	American Chemical Society; Analytical chemistry; 2010; Vol. 82, no. 19; str. 8153-8160; Impact Factor: 5.874; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.148; A': 1; WoS: EA; Avtorji / Authors: Triglav Jure, Elteren Johannes Teun van, Šelih Vid Simon
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek
4.	COBISS ID	4448538 Vir: COBISS.SI
	Naslov	<i>SLO</i> Študij in modeliranje kontinuiranega izluževanja nekaterih elementov iz zemljin v simulirani raztopini želodčnega soka
		<i>ANG</i> Assessment of physical leaching processes of some elements in soil upon ingestion by continuous leaching and modeling
	Opis	<i>SLO</i> V tej študiji smo izvedli matematično modeliranje profila izluževanja nekaterih elementov (bor, kadmij, kobalt, mangan, nikelj, in stroncij) iz zemljin (Cornwall, VB), po njihovi izpostavitvi simulirani raztopini želodčnega soka. Modeliranje omogoča kvantifikacijo vpliva difuzije v tekoči fazi in difuzije v trdni fazi na dostopnost elementov ob zaužitju.
		<i>ANG</i> The article outlines the mathematical modelling of the leaching profiles of some elements (B, Cd, Co, Mn, Ni, and Sr) from soils from Cornwall, UK, when exposed to an artificial gastric solution. The modelling allowed the quantification of the influence of liquid film diffusion and apparent solid phase diffusion on the liability of the elements upon ingestion.

	Objavljeno v	American Chemical Society; Environmental science & technology; 2010; Vol. 44, issue 16; str. 6242-6248; Impact Factor: 4.825; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 1.886; A'': 1; A': 1; WoS: IH, JA; Avtorji / Authors: Beeston Michael Philip, Pohar Andrej, Elteren Johannes Teun van, Plazl Igor, Šlejkovec Zdenka, Veber Marjan, Glass Hylke J.	
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	
5.	COBISS ID	2702075	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Hitosan-celulozni kompozitni materiali: Priprava, karakterizacija in uporaba za odstranjevanje mikrocistina
		ANG	Chitosan-cellulose composite materials: preparation, characterization and application for removal of microcystin
	Opis	SLO	Z uporabo ionske tekočine kot zelenega topila smo razvili novo sintezno metodo za pripravo eko-kompozitnih materialov na osnovi celuloze in hitosana, ki omogoča enostavno recikliranje materiala po njegovi uporabi. Dodatek celuloze v hitosan bistveno izboljša trdnost kompozita, medtem ko v celoti ohrani adsorpcijske lastnosti hitosana. Kompozit bolje adsorbira mikrocistin kot ostali materiali, ki jih uporabljajo za odstranjevanje cianotoksinov iz vode. Lahko adsorbira do štirikrat več mikrocistina kot najboljši poznani adsorbent. Material lahko ponovno uporabimo, saj lahko mikrocistin kvantitativno desorbiramo.
		ANG	A novel and recyclable synthetic method using an ionic liquid as a green solvent was developed for synthesis of eco-composite materials from cellulose (CEL) and chitosan (CS). Adding CEL into CS substantially increases tensile strength of the composite while entirely retaining the adsorbing properties of CS. The composite is much better adsorbent for microcystin than other materials used for removal of cyanotoxins from water. It can adsorb four times more microcystin compared to the best known adsorbent. The composite can be reused because adsorbed microcystin can be desorbed quantitatively.
	Objavljeno v	Elsevier Scientific Publ. Co.; Journal of hazardous materials; 2013; Vol. 252/253; str. 355-366; Impact Factor: 4.331; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 1.11; A'': 1; A': 1; WoS: IH, IM, JA; Avtorji / Authors: Tran Chieu D., Duri Simon, Delneri Ambra, Franko Mladen	
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	

7. Najpomembnejši družbeno-ekonomski rezultati programske skupine

	Družbeno-ekonomski dosežek		
1.	COBISS ID	4436250	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Bizmutove in antimonove elektrode v sodobni elektroanalizi
		ANG	Bismuth and antimony electrodes in modern electroanalysis
	Opis	SLO	Predstavili smo zadnja spoznanja naših raziskav na področju študije, vpeljave in uporabe bizmutovih in antimonovih elektrod razvitih v našem laboratoriju. Obe vrsti elektrod se v svetu že močno uveljavljata kot praktično najboljši nadomestek za do sedaj splošno uporabljeno toksično živosrebreno elektrodo za določevanje težkih kovin v sledovih in nekaterih organskih zvrsti. Predvsem bizmutova elektroda, ki smo jo leta 2000 prvokrat predstavili, je do sedaj našla mesto v mnogih elektroanaliznih laboratorijih po celem svetu, podobno pa lahko pričakujemo tudi za antimonovo elektrodo.
			We presented some of our recent findings in the studies, development, and

		ANG	application of bismuth- and antimony-based electrodes introduced in our laboratory. Both electrodes have been widely recognized as practically the most efficient alternative to the toxic mercury electrode which in the past decades dominated for measuring trace heavy metals and some organic species. In particular, the bismuth electrode which we introduced for the first time in 2000 has found its place in numerous electroanalytical laboratories worldwide, and we can anticipate the same for the antimony electrode.
	Šifra	B.04	Vabljeno predavanje
	Objavljeno v	ISEAC; ELAC - 2010; 2010; Str. 35-41; Avtorji / Authors: Hočevar Samo B., Ogorevc Božidar	
	Tipologija	1.06 Objavljeni znanstveni prispevek na konferenci (vabljeno predavanje)	
2.	COBISS ID	5219098	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Analiza materialov iz proizvodnje cementa Salonita Anhovo
		ANG	Analysis of materials from concrete production in Salonit Anhovo
	Opis	SLO	Razvijali in optimizirali smo metodo za določevanje 24 kemijskih elementov v materialih, kot so klinker, cement, laporna moka, odpadna plastika, ki se uporabljajo pri proizvodnji cementa v podjetju Salonit Anhovo, s katerim imamo dolgoletno pogodbeno sodelovanje, ki je hkrati tudi primer uspešnega prenosa znaja direktno v industrijo.
		ANG	We developed and optimized the method for measuring 24 chemical elements in materials, such as clinker, cement, marl-flour, waste plastic, which are used in cement production in Salonit Anhovo. With this company, we have a contract-based collaboration of many years, which is, at the same time, an example of successful know-how transfer direct to the industrial production.
	Šifra	F.17	Prenos obstoječih tehnologij, znanj, metod in postopkov v prakso
	Objavljeno v	Kemijski inštitut; 2013; 20 f.; Avtorji / Authors: Budič Bojan, Novak Breda, Hočevar Samo B., Lazar Silvana, Pešič Tatjana, Vuk Tomaž	
	Tipologija	2.12 Končno poročilo o rezultatih raziskav	
3.	COBISS ID	2927867	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Mikroskopija s termičnimi lečami za mikrofluidno pretočno injekcijsko analizo
		ANG	Thermal lens microscopy for microfluidic flow injection analysis
	Opis	SLO	M. Franko je kot vabljeni predavatelj sodeloval na 17th International Conference on Photoacoustic and Photothermal Phenomena, October 20-24, 2013, Suzhou, Kitajska. V predavanju so bile predstavljene osnovne značilnosti mikroskopske TLS (TLM) ter najnovejši prispevki avtorjeve skupine k razvoju instrumentacije in teorije TLM. Predstavljeni so bili tudi primeri uporabe TLM v kombinaciji z mikrofluidno FIA za detekcijo kromata v vodi in NGAL (biomarkerja akutne poškodbe ledvic) v krvni plazmi. Povabilo predavatelju potrjuje njegov mednarodni ugled in pomen dosežkov njegove skupine na področju mikroskopske TLS in njene uporabe za kemijsko analizo v biomedicini in analizo vzorcev iz okolja.
		ANG	M. Franko participated as invited lecturer at the 17th International Conference on Photoacoustic and Photothermal Phenomena, October 20-24, 2013, Suzhou, China. In his lecture the basic concepts of TLS microscopy (TLM) were introduced and recent improvements of theory and instrumentation made for TLM detection in microfluidic systems in author's lab were presented. Examples of application of TLM in combination with

		microfluidic flow injection analysis for detection of chromate in water and NGAL biomarker of acute kidney injury in blood plasma were also presented. This invitation confirms author's international affirmation and relevance of his contribution in the field of TLS microscopy and its applications in microfluidic systems for environmental and biomedical analysis.
	Šifra	B.04 Vabljeno predavanje
	Objavljeno v	s. n.]; Book of abstracts; 2013; Str. 89; Avtorji / Authors: Franko Mladen, Liu Mingqiang, Radovanović Tatjana
	Tipologija	1.10 Objavljeni povzetek znanstvenega prispevka na konferenci (vabljeno predavanje)
4.	COBISS ID	4268058 Vir: COBISS.SI
	Naslov	<i>SLO</i> Kovine v sledovih v aerosolskih delcih in njihova vloga v atmosferski kemiji
		<i>ANG</i> Trace metals in aerosols and their role in atmospheric chemistry
	Opis	<i>SLO</i> Atmosferski aerosoli imajo pomembno vlogo v biogeokemiji in transportu kovin v atmosferi. Kovine v sledovih predstavljajo relativno majhen delež mase aerosola (običajno pod 1 %). Med njimi so prehodne kovine, ki imajo več oksidacijskih stanj in zato lahko sodelujejo v mnogih pomembnih atmosferskih redoks reakcijah in vplivajo na množino prostih radikalov v atmosferski vodni fazi. Izvor kovin v atmosferski vodni fazi je raztapljanje aerosolov. Njihova topnost je odvisna od številnih faktorjev, kot so pH vodne faze, vrste in velikosti aerosola, foto-redukcije, prisotnosti organskih spojin itd.
		<i>ANG</i> Atmospheric aerosols have important role in the biogeochemistry and transportation of metals in the atmosphere. On a mass basis, trace metals represent relatively small proportion of the aerosol (generally less than 1 %). Among them are transition metals, which have several oxidation states, and thus can participate in many important atmospheric redox reactions and so influence free radical budget in atmospheric liquid phase. The source of trace metals in atmospheric water is the dissolution of aerosols. The solubility of metal aerosols is influenced by many factors, e.g. liquid phase pH, aerosol type and size, foto-reduction, presence of organic species, etc.
	Šifra	B.04 Vabljeno predavanje
	Objavljeno v	FKKT; Slovenski kemijski dnevi 2009, Maribor, 24. in 25. september 2009; 2009; 6 str.; Avtorji / Authors: Grgić Irena
	Tipologija	1.06 Objavljeni znanstveni prispevek na konferenci (vabljeno predavanje)
5.	COBISS ID	1601019 Vir: COBISS.SI
	Naslov	<i>SLO</i> Spektrometrija s termičnimi lečami kot orodje za fizikalno-kemijsko karakterizacijo tekočin in raztopin
		<i>ANG</i> Thermal lens spectrometry as a tool for physico-chemical characterisation of liquids and solutions
	Opis	<i>SLO</i> M. Franko je bil povabljen kot plenarni predavatelj na 10th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry. V predavanju so bile predstavljene osnovne značilnosti spektrometrije TLS, ki dokazujejo sposobnost tehnike za visoko občutljive meritve v kemijski analizi, kot tudi določevanje optičnih in termičnih lastnosti tekočin. Povabilo predavatelju potrjuje njegov mednarodni ugled in pomen njegovih dosežkov na področju optotermične spektroskopije, ki bistveno presegajo okvire analizne kemije.
		M. Franko was invited as plenary lecturer at the 10th International

	ANG	Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry. In his lecture the basic concepts of TLS spectrometry were introduced to elucidate the capability of TLS of highly sensitive chemical analysis as well as the determination of optical and thermal properties of liquids. This invitation confirms author's international reputation and relevance of his contribution in the field of photothermal spectroscopy which goes far beyond the analytical applications.
Šifra	B.04	Vabljeni predavanja
Objavljeno v	Society of Physical Chemistry of Serbia; Physical chemistry 2010; 2010; Str. 25-33; Avtorji / Authors: Franko Mladen	
Tipologija	1.06	Objavljeni znanstveni prispevek na konferenci (vabljeni predavanja)

8. Drugi pomembni rezultati programske skupine²

- Člani programske skupine iz Kemijskega inštituta so organizirali pomembno mednarodno konferenco o elektroanalizni kemiji ESEAC 2012 - 14th Int. Conf. on Electroanalysis, 03.-07.06.2012, Portorož.
- Serena Panighello (gostujoča doktorandka na Kemijskem inštitutu) je prejela 1. nagrado na:
 - 21st Young Investigators' Seminar on Analytical Chemistry, 25.-28.06, 2014, Pardubice, Češka Republika, "Application of laser ablation ICP-MS depth profiling methods for the study of ancient glass artefacts".
 - Glass Science in Art and Conversation, University of Durham, 10.-12.09.2014 with the SGT Living Glass Conference, "Application of laser ablation-ICP-MS for the study of ancient glass", <http://www.students.sgthome.co.uk/pages/PaulAward.html>.
- Člani programske skupine iz UNG so organizirali:
 - 19th Young Investigators' Seminar on Analytical Chemistry, 27-30.06.2012 na UNG.
 - Thematic Workshop on Instrumental Analytical Methods for Environmental Monitoring, 22-23.6.2012 na UNG. Delavnica je bila financirana v okviru "SUNGREEN" Regpot projekta 7. OP.
 - Mednarodno poletno šolo: Advanced Instrumental Techniques for the Monitoring of Aquatic Environments, 14-27.06.2012 na UNG.
 - Mednarodno delavnico: "BIOMARKERS IN CARDIOLOGY", 19.12.2013, UNG.
- Vodenje Visoke šole za vinogradništvo in vinarstvo na UNG: B. Mozetič Vodopivec je kot dekanja visoke šole odgovorna za izvedbo pedagoškega procesa, razvoj šole in upravljanje s financami.
- Funkcija prorektorja UNG: M. Franko je prorektor, odgovoren za izobraževalno dejavnost na UNG.
- Mlada raziskovalka Tina Jerman Klen je v okviru doktorske disertacije prejela nacionalno Lorealovo nagrado za ženske v znanosti 2013. Nagrado je prejela za razvoj ekstrakcijskih in identifikacijskih metod za fenole oljk, oljčne pogače, odpadne vode in olja, ki jih je uporabila za spremljanje prenosa in pretvorb fenolov v procesu pridelave oljčnega olja.

9. Pomen raziskovalnih rezultatov programske skupine⁸

9.1. Pomen za razvoj znanosti⁹

SLO

Usmeritve raziskovalnega programa P1-0034 "Analitika in kemijska karakterizacija materialov ter procesov" k aktualnim tematikam in področjem v okviru razvoja sodobnih analiznih metodologij in orodij/senzorjev ter študija fizikalno-kemijskih procesov pomenijo, skupaj z rezultati in spoznanji znanstveno-raziskovalnih aktivnosti, znaten prispevek k globalni znanosti. Ta trditev je podprta z dosedanjjo intenzivno vpetostjo programske skupine v mnoga domača in mednarodna sodelovanja, tudi z eminentnimi znanstveniki, številne objave (138 od leta 2009), predstavitve in veliko število citacij (preko 5000 v obdobju 2009-2014, vir Wos/Scopus).

Na področjih varstva okolja, (bio)medicine, razvoja materialov in industrijske kontrole so vse večje zahteve in potrebe po občutljivih, selektivnih, zanesljivih, robustnih in hitrih analiznih metodah in orodjih, po miniaturizaciji senzorskih sestavov in razumevanju mnogih fizikalno-kemijskih (naravnih) procesov. Pomemben prispevek na teh področjih predstavljajo naši izsledki v okviru študij in razvoja naprednih (mikro)analiznih protokolov, metodologij in kemijskih senzorjev ter biosenzorjev in njihova miniaturizacija, skupaj z inovativno uporabo novih in obstoječih (nanostrukturiranih) materialov in tehnologij.

Ocenjujemo, da je bil na področju sodobne elektroanalizne kemije narejen pomemben napredek in doprinos z intenzivnimi študijami razvoja in možnosti širše uporabe bizmutove in antimonove elektrode, ki smo ju razvili v okviru naše skupine in v sodelovanju s partnerji iz tujine. Obe elektrodi, predvsem pa bizmutova, sta in še postajata predmet številnih raziskav v mnogih elektrokemijskih laboratorijih in se uveljavljata na področjih raziskav merjenja ionov (težkih) kovin v sledovih in nekaterih elektrokemijsko aktivnih organskih zvrsti. Najpomembnejši pa je njun pomen kot odlični nadomestek za do sedaj najpogosteje uporabljeno problematično/strupeno živosrebreno elektrodo; dokaz za to je tudi že preko 540 citatov našega prvega članka o tankoslojni bizmutovi elektrodi.

Področje elementne in molekularne analitike kompleksnih (bio)vzorcev ter izboljšanje predvsem občutljivosti in selektivnosti analiznih metod in orodij zahtevajo temeljit študij in sklopitev sodobnih separacijskih in detekcijskih tehnik. Določevanje in študij pojavljanja kemijskih zvrsti je aktualen znanstveni izziv, zato so pomembne raziskave uporabe kombiniranih nedestruktivnih in destruktivnih analiznih metod. Dosegli smo pomemben praktičen in fundamentalen napredek in prispevali doprinos na področjih raziskav (bio)materialov ter elementne in molekularne mikroanalize in elementnega kemijskega oslikovanja, predvsem v okviru sklopitve laserske ablacije (LA) in elementne masne spektrometrije, kjer smo se izkazali z odličnimi dosežki pri razvoju 2D in 3D oslikovanja, tako pri odpiranju novih možnosti uporabe, kakor tudi pri bazičnih študijah interakcije laserja s snovjo.

Na področju atmosfere kemije smo zabeležili pomembne dosežke pri kemijski karakterizaciji aerosolov, razvoju za to namenjenih inovativnih metodologij in študiju procesov nastajanja sekundarnih aerosolov, kar bo lahko uporabno tudi pri modelih za napovedovanje nastajanja/porazdelitve atmosferskih delcev, odkritja pa pomenijo znaten prispevek k nadaljnjim študijam in razumevanju kompleksnih atmosferskih reakcijskih mehanizmov.

Izjemen napredek je bil izkazan na področju spektrometrije s termičnimi lečami (TLS), kot orodju za fizikalno-kemijsko karakterizacijo tekočin in raztopin. Pomemben je doprinos na področju teorije in razvoja instrumentacije mikroskopske TLS ter njene uporabe v mikrofluidnih sistemih za na primer detekcijo toksičnih snovi v vzorcih okolja in za detekcijo biomarkerjev v bioloških tekočinah.

ANG

The focus of the research programme P1-0034 towards current topics and areas in the frame of the development of advanced analytical methodologies and tools/sensors and the study of physico-chemical processes, represent, together with results and findings of our research activities, a significant contribution to the global science. This is supported by intensive involvement of the programme group in various national and international collaborations, also with eminent scientists, numerous publications (138 since 2009), presentations and large number of citations (over 5000 in 2009-2014, source Wos/Scopus).

In the fields of environmental protection, (bio)medicine, materials development and industrial control, there are increasing demands and needs for sensitive, selective, reliable, robust and rapid analytical methods and tools, miniaturization of sensor assemblies and understanding of various physico-chemical (natural) processes. Our findings in the frame of research and development of advanced (micro)analytical protocols, methodologies, chemical sensors and biosensors, and their miniaturization, together with the innovative use of novel and existing (nanostructured) materials and technologies represent an important contribution to these fields.

We estimate that in the field of modern electroanalytical chemistry an important progress and contribution have been made within the intensive studies of development and possibilities of wider application of bismuth and antimony electrodes, which were developed within our group and in collaboration with international partners. Both electrodes, and particularly bismuth electrode, are and are still developing into the subject of numerous investigations in various electrochemical laboratories and are becoming well established in the field of measuring trace (heavy) metal ions and selected electrochemically active organic compounds. But the most important is their role as an excellent replacement for so far the most commonly used but problematic/toxic mercury electrode; this is also evidenced by over 540 citations of our first article on a bismuth film electrode.

The field of elemental and molecular analysis of complex (bio)samples and improving particularly sensitivity and selectivity of analytical methods and tools certainly demand thorough study and coupling of advanced separation and detection techniques. Determination and study of chemical species occurrence is a topical scientific challenge, therefore research into the use of combined non-destructive and destructive analytical methods is very important. We achieved essential practical and fundamental progress and contributed significantly in the areas of (bio)material research, elemental and molecular microanalysis, and elemental chemical imaging, particularly in the frame of hyphenating laser ablation (LA) and elemental mass spectrometry, where we have demonstrated excellent achievements in the development of 2D and 3D imaging, both in opening new application possibilities and in fundamental studies on laser-material interactions.

In the field of atmospheric chemistry we demonstrated important achievements in chemical characterization of aerosols, development of innovative methodologies for this purpose, and study of processes of secondary aerosol formation, which can also be used in models for predicting the formation/distribution of atmospheric particles; these findings represent a significant contribution to further studies and understanding of complex atmospheric reaction mechanisms.

Remarkable progress has been shown in the field of thermal lens spectrometry (TLS), as a tool for physico-chemical characterization of liquids and solutions. Very important is the contribution in terms of theory and instrumental development of microscopic TLS and its application in microfluidic systems for, e.g. detection of toxic compounds in environmental samples and detection of biomarkers in biological fluids.

9.2. Pomen za razvoj Slovenije¹⁰

SLO

Pridobljena spoznanja in izkušnje v okviru izvajanja raziskovalnega programa P1-0034 omogočajo posreden in/ali neposreden prenos in uporabo znanj ter širšo korist na aktualnih področjih družbeno-ekonomskega razvoja Republike Slovenije, tako v smislu tehnološkega kot trajnostni razvoja. Program raziskav je bil načrtovan v sozvočju z globalnimi in lokalnimi trendi in potrebami na področjih (i) varstva okolja (preučevanje aerosolov in atmosferskih procesov, analiza sledov ionov (težkih) kovin ter drugih onesnaževal), (ii) zdravja in varne hrane (analiza kompleksnih (bio)vzorcev, razvoj senzorjev in mikrosenzorjev, razvoj mikroanaliznih metod potencialno uporabnih v diagnostiki, bioanalitika toksičnih in esencialnih komponent), (iii) industrijskega monitoringa in razvoja materialov (analize končnih in medfaznih vzorcev v tehnoloških procesih) ter (iv) na področju ohranjanja naravne in kulturne dediščine (nedestruktivna kemijska analiza in mikroanaliza (trdnih) materialov in predmetov zgodovinskega pomena).

Med izvajanjem programa smo se posvečali tudi pedagoškemu delu z dodiplomskimi in podiplomskimi študenti/mladimi raziskovalci ter s podoktoranti z namenom kvalitetnega prenosa znanja, izobraževanja in ustvarjanja vrhunskih kadrov, ki bodo lahko konkurenčni na mednarodnem trgu dela. Člani programske skupine so bili v zadnjih letih vpeti v številna mentorstva in somentorstva ter skrbništva pri diplomah, magisterijih, doktorskih disertacijah in podoktorskih obiskih. Intenzivno smo bili vpeti v slovenski znanstveno-raziskovalni prostor v okviru formalnih in neformalnih sodelovanj z na primer Fakulteto za kemijo in kemijsko

tehnologijo, Biotehniško fakulteto, Medicinsko fakulteto, Veterinarsko fakulteto, Univerzo v Mariboru, Univerzo v Novi Gorici, Institutom Jožef Stefan, pri koriščenju instrumentalnih kapacitet in izmenjavi znanj, tudi v okviru sodelovanja v infrastrukturnem programu.

Aktivnosti članov programske skupine so vključevale tudi podporo in sodelovanje z zunanjimi akademskimi in neakademskim/industrijskim partnerji pri reševanju zahtevnejših analiznih/razvojnih problemov ter organizacijo znanstvenih srečanj in delavnic. Dokaz za koristen in kvaliteten prenos znanja je na primer dosedanje uspešno sodelovanje z več deset industrijskimi partnerji, med drugim tudi v okviru pogodb (Lek, Krka, Wire, Calcit, Salonit Anhovo, Zavod za gradbeništvo Slovenije, Inštitut za hmeljarstvo in pivovarstvo Slovenije). Predstavitve naših dosežkov na številnih domačih in mednarodnih seminarjih, tudi v okviru vabljenih predavanj ter organizacije mednarodnih seminarjev in delavnic so prispevali k promociji in prepoznavnosti naše države ter posledično lažjemu dostopu do novih tehnologij, ustvarjanju pogojev za vključevanje v mednarodne projekte in v mednarodno delitev dela.

Na področju varstva okolja (in zdravja) je nujno zavedanje, da samo podatki o celokupni vsebnosti elementov v okoljskih in drugih vzorcih ne zadoščajo pri sprejemanju odločitev glede sledenja politike trajnostnega razvoja in ukrepov za zaščito okolja ter zdravja, kar daje področju razvoja kemijske karakterizacije velik pomen, nova spoznanja pa bi lahko koristila pri pripravi nacionalnih strategij glede okoljskih in sorodnih predpisov.

ANG

The knowledge and experience acquired in the framework of the research programme P1-0034 assure direct and/or indirect transfer and application of knowledge and wider benefit in current fields of socio-economic development of the Republic of Slovenia, both in terms of technological and sustainable development. The research programme was planned in agreement with global and local trends and needs in the areas of (i) environmental protection (study of aerosols and atmospheric processes, trace (heavy) metal ion and other pollutant analysis), (ii) health and food safety (analysis of complex (bio)samples, development of sensors and microsensors, development of microanalytical methods for potential use in diagnostics, bioanalysis of toxic and essential components), (iii) industrial monitoring and materials development (analysis of final and interphase samples in technological processes) and (iv) natural and cultural heritage preservation (non-destructive chemical analysis and microanalysis of (solid) materials and objects of historic significance).

Throughout the programme we devote our attention to pedagogic activities through working with undergraduate and postgraduate students/young investigators and postdoctoral fellows aimed at establishing high-quality knowledge transfer, education and creating top-level experts who will be able to compete in the international labor-market. In the last few years the members of the programme group have been involved in numerous mentorships and co-mentorships in bachelor, master and doctoral dissertations and postdoctoral visits. We were intensively integrated into the Slovenian research community through various formal or informal collaborations with, e.g. Faculty of Chemistry and Chemical Technology, Biotechnical Faculty, Faculty of Medicine, Veterinary Faculty, University of Maribor, University of Nova Gorica, Jožef Stefan Institute, in sharing the instrumental capacities and knowledge exchange, also in the frame of our collaboration in the infrastructure programme.

Activities of the programme group members encompassed also support and collaboration with other academic and non-academic/industrial partners in solving complex analytical/development issues and the organization of scientific meetings and workshops. Expedient and high-quality knowledge transfer can be evidenced in successful collaboration with tens of industrial partners, also in the frame of contracts (Lek, Krka, Wire, Calcit, Salonit Anhovo, Slovenian National Building and Civil Engineering Institute, Slovenian Institute of Hop Research and Brewing). Presentations of our achievements in numerous national and international seminars, including invited lectures and organization of international seminars and workshops, have contributed to the promotion and recognition/visibility of our country and consequently facilitated access to novel technologies, creating conditions for participation in international projects and international labor division.

In the field of environmental (and health) protection it is crucial to realize that information on

the total content of elements in environmental and other samples is insufficient for decision making concerning sustainable development policies and environmental and health protection actions, which highlights the great importance of chemical characterization development; consequently, new findings and knowledge could benefit the preparation of national strategies concerning environmental and related regulations.

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	6
bolonjski program - II. stopnja	1
univerzitetni (stari) program	2

10.2. Magisterij znanosti in doktorat znanosti¹³

Šifra raziskovalca	Ime in priimek	Mag.	Dr.	MR	
30841	Hanna Ingrid Sopha	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
32101	Bine Šebez	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
32117	Zoran Kitanovski	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
29481	Sara Budal	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
32052	Mingqiang Liu	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
28225	Kristina Brataševc	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input type="checkbox"/>	
31617	Andrej Ovca	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="checkbox"/>	
28567	Mersida Janeva Azdejkov	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
34448	Kelly Peeters	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="checkbox"/>	
20734	Alenka Petrovec	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="checkbox"/>	
27536	Ana Čevdek	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
29483	Tina Jerman Klen	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
33314	Sebastiano Dal Borgo	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
0	Ambra Delneri	<input type="radio"/>	<input checked="" 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	
30841	Hanna Ingrid Sopha	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	E - Tujina	
32101	Bine Šebez	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	A - raziskovalni zavodi	
32117	Zoran Kitanovski	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	A - raziskovalni zavodi	
29481	Sara Budal	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	E - Tujina	

32052	Mingqiang Liu	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	A - raziskovalni zavodi	
28225	Kristina Brataševac	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	F - Drugo	
31617	Andrej Ovca	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	A - raziskovalni zavodi	
28567	Mersida Janeva Azdejkovič	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	C - Gospodarstvo	
34448	Kelly Peeters	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	A - raziskovalni zavodi	
20734	Alenka Petrovec	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	D - Javni zavod	
27536	Ana Čevdek	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	F - Drugo	
29483	Tina Jerman Klen	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	C - Gospodarstvo	
33314	Sebastiano Dal Borgo	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	E - Tujina	

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	Serena Panighello	C - študent - doktorand	15	
0	Olga Vajdle	C - študent - doktorand	1	
0	Jasmina Zbiljić	C - študent - doktorand	1	
0	Andrea Mardegan	C - študent - doktorand	1	
33872	Marilyne Pflieger	D - podoktorand	15	
0	Milagros Santacatalina	C - študent - doktorand	3	
0	Dragana Šunjka	C - študent - doktorand	1	
0	Nadia Berreiro	C - študent - doktorand	1	
0	Prof. Chie D. Tran	B - uveljavljeni raziskovalec	3	
0	Stijn van Malderen	C - študent - doktorand	1	
0	Sanja Frka Milosavljević	B - uveljavljeni raziskovalec	3	

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

- DEFISHGEAR - Derelict Fishing Management System in the Adriatic Region, IPA Adriatic Cross-border Cooperation programme. 2013-2016, vodilni partner: Kemijski inštitut (KI), nosilec na Univerzi v Novi Gorici (UNG): prof. dr. Mladen Franko.
- TRANS2CARE - Transregionalno omrežje za inovacijo in prenos tehnološkega znanja za izboljšanje zdravstva, INTERREG program čezmejnega sodelovanja Slovenija-Italija 2007-2013 - CB-101. 2011-2014, vodilni partner: Univerza v Trstu, nosilec na UNG: prof. dr. Mladen Franko.
- INNOVAQUA - Omrežje za tehnološko inovacijo v ribogojstvu, INTERREG program čezmejnega sodelovanja Slovenija-Italija 2007-2013 - CB-137. 2011-2014, vodilni partner: Univerza v Trstu, nosilec na UNG: prof. dr. Mladen Franko.
- UELIJE II - Oljčno olje: simbol kakovosti v čezmejnem prostoru, INTERREG program čezmejnega sodelovanja Slovenija-Italija 2007-2013 - CB131. 2011-2014, vodilni partner: Občina Brda, nosilec na UNG: doc. dr. Branka Mozetič Vodopivec.
- AGRI-KNOWS - Prenos znanja v kmetijstvu kot dodana vrednost pri zaščiti okolja, INTERREG program čezmejnega sodelovanja Slovenija-Italija 2007-2013. 2012-2014, vodilni partner: UNG, sodelujči na UNG: prof. dr. Mladen Franko.
- AGROTUR - Kraški agroturizem, INTERREG program čezmejnega sodelovanja Slovenija-Italija 2000-2006. 2011-2014, vodilni partner: Kmetijski inštitut Slovenije, sodelujči na UNG: prof. dr. Mladen Franko, doc. dr. Branka Mozetič, dr. Mitja Martelanc, Mojca Žorž.
- SILMAS - Sustainable Instruments for Lakes Management in the Alpine Space, EU Teritorial Cooperation - Alpine Space Program - 7-2-3-FR. 2009-2012, vodilni partner: Rhoe Alpes regional authority, nosilec na UNG: prof. dr. Mladen Franko.
- SOLBIOPOLYSY - Biofuel polygeneration system integrating MSW landfill gas and solar energy (6. OP, Project No.: 038696), nosilec na UNG: prof. dr. Mladen Franko.
- Marie Curie postdoctoral fellowship, FP7-PEOPLE-IEF-2008 N° 235775 - PIL-4-E-S&P; "Novel polymeric ionic liquids for environmental sensing and purification". Institucija: Nanotechnology Unit, New Materials Departement, CIDETEC, San Sebastian, Španija, koordinator: D. Mecerreyes, nosilec: dr. Vasko. Jovanovski.
- Research Networking Programme INTROP (Interdisciplinary Tropospheric Research from the Laboratory to Global Change), www.esf.org, 2004-2009, nacionalna koordinatorka in članica vodstvenega odbora ESF (European Science Foundation): I. Grgić.
- Bioanalytical methods for life sciences (LLP-ERASMUS-IP, EIP-09-RO-BRASOV01-Contract Nr. 67/31.08.2009), nosilec na UNG: M. Franko.
- Program Kreativna jedra (AHA-MOMENT), št. 3330-13-500031, sofinanciran MIZS RS in Evropski Regionalni Sklad, sodelujejo B. Mozetič Vodopivec, D. Korte, M. Franko.
- NEWFELPRO - sofinanciran preko Marie Curie FP7-PEOPLE-2011-COFUND, "Chemical nature of size segregated water soluble organic aerosols and their nitro-aromatic constituents/AERONAR", vodja projekta: dr. Sanja Frka Milosavljević, Ruđer Bošković Institute, Zagreb, Hrvaška, odgovorna na KI: dr. Irena Grgić, 01.10.2014-30.09.2017, od tega na KI do 30.09.2016.

Bilateralna sodelovanja:

- Kitajska, BI-CN/11-13-011, Nove anorganske in organske nanostrukturne elektrodne prevleke za sodobno elektrokemijsko detekcijo spojin biomedicinskega in okoljskega pomena, nosilec: B. Ogorevc.
- ZDA, BI-US/12-13-015, Polisaharidni ekokompozitni materiali: sinteza z recikliranjem, karakterizacija in okoljske aplikacije, nosilec: M. Franko.
- Avstrija, BI-AT/11-12-019, Ovrednotenje tehnik za molekularno mapiranje v naravoslovnih znanostih z uporabo laserske ablacije/desorpcije v kombinaciji z masno spektrometrijo, nosilec: J. Van Eltetren.
- Flamska regija, BI-BE/11-12-F-006, Elementna in izotopska analiza s kombinacijo tehnik na osnovi induktivno sklopljene plazme z masno spektrometrijo v okoljskih in arheometričnih študijah, nosilec: J. Van Eltetren.
- Flamska regija, BI-BE/11-12-F-012, Razvoj novih analiznih LC/MS (tekočinska kromatografija/masna spektrometrija) metodologij za določevanje markerjev izgorevanja biomase v drobnih atmosferskih aerosolskih delcih, nosilec: I. Grgić.
- Makedonija, BI-MK/10-11-005, Razvoj bizmutove in antimonske tankoslojne elektrode za analizo kovin v sledovih: elektrodni mehanizmi, kinetika in analitska uporaba, nosilec: S. Hočevar.

- Argentina, BI-AR/09-11-004, Razvoj in uporaba optotermičnih spektroskopskih metod za analizo okoljskih in kmetijskih vzorcev, nosilec: M. Franko.
- Hrvaška, BI-HR/09-10-016, Naravni antioksidanti v hrani: razvoj in uporaba novih analiznih metod, nosilec: M. Franko.
- Izrael, BI-IL, št. 1000-07-380012, Priprava in uporaba nanokompozitnih sol-gel tankih filmov, 2007-2009, nosilec: B. Ogorevc.
- Češka Republika, BI-CZ/09-10-004, Razvoj in inovacije modernih detekcijskih sistemov in materialov za elektroanalizne meritve, nosilec: S. Hočevnar.
- Češka Republika, BI-CZ/11-12-008, Študij in nadaljnji razvoj antimonov in bizmutovih elektrod za njihovo uporabo v sodobni elektroanalizi, nosilec: S. Hočevnar.
- Srbija, BI-RS/10-11-011, Uporaba različnih optotermičnih detekcijskih sistemov za raziskave v okolju, nosilec: M. Franko.
- Rusija, BI-RU/14-15-048, Razvoj občutljivih in selektivnih metod ter instrumentacije za ločbo in določevanje sledov vrednosti pomembnih snovi, nosilec: D. Korte.
- Rusija, BI-RU/14-15-017, Novi načini detekcije v kapilarni elektroforezi in mikrofluidnih sistemih, nosilec: M. Franko.
- ZDA, BI-US/14-15-021, Okolju prijazna sinteza polisaharidnih nanokompozitov in njihova uporaba za odstranjevanje onesnažil, proti-bakterijsko ter proti-virusno delovanje, nosilec: M. Franko.
- Francija, BI-FR/14-15-PROTEUS-005, Novi pristopi pri raziskavah kemije oblakov in submikroliterskih vzorcev vode iz oblakov, nosilec: M. Franko.

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

SLO

V okviru programske skupine P1-0034 že vrsto let uspešno sodelujemo z mnogimi zunanjimi akademskimi in neakademskimi/industrijskimi partnerji, ki jim nudimo razvojne in podporne storitve na področju analize kemije. Intenzivna vpetost programa v gospodarstvo je izkazana s sodelovanjem z več deset subjekti, z nekaterimi tudi v okviru pogodb o sodelovanju, npr.:

- WIRE d.o.o., Pogodba o medsebojnem sodelovanju, nosilec: Bojan Budič, Samo Hočevnar.
- Krka, tovarna zdravil, d.d., Novo mesto, Aneks 6 k Pogodbi št. II/23106 259/2007 (75/07L04), "Študije in analize farmacevtskih materialov", nosilec: Samo Hočevnar.
- Salonit Anhovo gradbeni materiali, d.d., Pogodba o medsebojnem sodelovanju, št. pog. 231/11-L04/L09, nosilec: Samo Hočevnar, Bojan Budič, Irena Grgić.
- Lek farmacevtska družba, d.d., Pogodba št. 2012-443, "Študije in analize ionskih zvrsti in elementov v farmacevtskih substancah", nosilec: Samo Hočevnar, Bojan Budič.
- Zavod za gradbeništvo Slovenije, Pogodba št. 25/08L-04, "Študije in analize elementov in ionskih zvrsti v vzorcih različnega izvora", nosilec: Božidar Ogorevc.
- Sodelovanje s Strojno fakulteto Univerze v Mariboru, Aneks 2 k pogodbi št. P-45-ITM-7/08RR ŠT. 30/08-L04/BIO-SMA E!3791 in NANO-FOIL E!4213, "Analize elementov in ionskih zvrsti v vzorcih različnega izvora v okviru medn. Eureka raziskovalnih projektov BIO-SMA E!3791 in MET-STRI E!3863, nosilec: Božidar Ogorevc.
- Sodelovanje z Inštitutom za hmeljarstvo in pivovarstvo Slovenije, Žalec, št. permanentne pogodbe 01-140/1-2008, "Študije in analize elementov v vzorcih različnega izvora", nosilec: Božidar Ogorevc.
- Sodelovanje z družbo Sandoz GmbH, Kundl, Avstrija, pogodba Individual Agreement 2010 (For the Supply of Analytical Services and Studies), nosilec: dr. Božidar Ogorevc.
- Branka Mozetič Vodopivec in Kajetan Trošt (oba UNG) sodelujoča v CRP projektu V4-1079, "Fitofenoli za izboljšanje varnosti in obstojnosti živil, 2010-2012, koordinator projekta: Biotehniška fakulteta, Univerze v Ljubljani. Projekt je delno sofinanciran s strani MKGP.
- Calcit d.o.o., Pogodba o sodelovanju na področju kemijske analize suspenzije CaCO₃, veljavnost: 02.01.2014 do preklica, nosilec: Bojan Budič.

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

Programska skupina P1-0034 poseduje širok nabor znanj in izkušenj na področju sodobne analitike in karakterizacije materialov ter procesov, kamor sodijo ekspertize od pravilnega vzorčevanja, priprave vzorca, izbora in/ali razvoja ustrezne analizne metode/orodja in nadaljnje optimizacije, do pravilne interpretacije rezultatov. Izsledki znanstveno-raziskovalnih aktivnosti so mnogokrat direktno ali indirektno uporabni v industriji v obliki analiz (novih) materialov, procesne kontrole, monitoringov itd., kot sledi iz naslednjih primerov:

- Razvoj antimonovih in bizmutovih elektrod, ki predstavljajo preboj v sodobni elektrokemijski detekciji sledov kovinskih ionov in nekaterih organskih spojin, bi po naši oceni lahko privedel do njihove komercialne uporabnosti, kar se že nakazuje na primeru npr. španskega podjetja DropSens, ki proizvaja z bizmutom modificirane tiskane elektrode potencialno uporabne pri merjenju omenjenih analitov v npr. okoljevarstvu, industrijskem monitoringu ali v sodobni diagnostiki.

- Ocenjujemo, da je izdelava modela in spremljajočega računalniškega programa za simulacijo procesa elementnega oslikovanja površin različnih (bio) materialov s sklopljeno tehniko laserska ablacija - elementna masna spektrometrija (LA-ICP-MS), ki temelji na virtualnem oslikovanju digitalne slike vzorca, kar omogoča optimizacijo vseh pomembnejših instrumentalnih nastavitvev za izdelavo visoko kakovostnih elementnih slik, potencialno komercialno zanimiva za ta sektor akademske in industrijske uporabe LA-ICP-MS, ker se na ta način lahko izognemo uničenju velikokrat enkratnih in dragocenih vzorcev, obenem pa znatno zmanjšamo čas analize in stroške dela.

- Med tehnološko zrele rezultate uvrščamo tudi metode razvite za detekcijo alergenov (betalaktoglobulin, ovalbumin in proteinov jajčnega beljaka) v živilih. Te omogočajo hitro preverjanje prisotnosti alergenov v velikem številu vzorcev hrane in s tem možnost učinkovitega nadzora kakovosti in varnosti živil. Konkretno smo uporabnost razvitih metod prikazali za vzorce pomarančnega soka, sojinlega mleka in vina; zato so potencialno uporabne za kontrolne laboratorije v živilski industriji ter za ustrezne inšpekcijske službe oz. laboratorije, ki podpirajo njihovo dejavnost.

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 checked="" type="radio"/> DA <input type="radio"/> NE
potrebni finančni vložek	280.000 EUR
ocena potrebne infrastrukture in opreme ¹⁸	Zaradi aktualne raziskovalne usmeritve in rezultatov izvajanja programa P1-0034 obstaja teoretična možnost za razširitev razvojnih in podpornih analiznih storitev v okviru spin-off podjetja. Predviden vložek je ocenjen na ca. 280.000 EUR, kar obsega ustanovitev podjetja, računovodstvo, pripravo prostora, nabavo dodatne inštrumentacije, kemikalij/standardov, po potrebi akreditacijo postopkov, dva tehnika in dva raziskovalca.

17. Izjemni dosežek v letu 2014¹⁹

17.1. Izjemni znanstveni dosežek

Na osnovi razvoja na področju sklopitve laserske ablacije in masne spektrometrije z ionizacijo v induktivno sklopljeni plazmi (LA-ICP-MS) so v porastu študije antičnih in zgodovinskih stekel in keramičnih glazur, tako v smislu tehnične umetnostne zgodovine kot ohranjanja kulturne dediščine, s pomočjo vizualizacije 2D porazdelitve izbranih elementov. Za ta namen se uporablja oslikovanje (skeniranje) z laserskim žarkom vzdolž vzporednih linij, tako pridobljeni podatki pa se obdelajo na način, da se pridobi "zemljevid" elementne porazdelitve. Primer

oslikovanja modro-bele keramične ploščice je prikazan na sliki, ki prikazuje ploščico pred lasersko ablacijo (LA) v LA-komori in reprezentativen izbor od sicer skupaj 53 elementnih slik/zemljevidov prikazanih z logaritemsko koncentracijsko skalo od 0,0001 do 100 %. Ilustrirane korelacije predelov površine se lahko interpretira v smislu sestavin stekla in glazure, njihovih izvorov in tehnologij ter kreativnih procesov same priprave.

17.2. Izjemni družbeno-ekonomski dosežek

Dosežki in bodoče možnosti uporabe optotermičnih tehnik za nadzor kakovosti in varnosti hrane: Prof. dr. Mladen Franko je bil povabljen kot predavatelj na 55. Mednarodno šolo kvantne elektronike, ki je potekala v Erice, Sicilija (Italija), od 5. do 12. oktobra 2014, kjer je v okviru posebne sekcije posvečene Expo2015 v Milanu predstavil najnovejše dosežke raziskav s področja uporabe optotermične spektrometrije za nadzor kakovosti in varnosti hrane. Povabilo predavatelju potrjuje njegov mednarodni ugled in pomen njegovih dosežkov na področju razvoja spektrometrije s termičnimi lečami za kemijsko analizo živil.

Avtor: Mladen Franko

Šifra: B.04. Vabljen predavanje

Tipologija: 3.16. Vabljen predavanje na konferenci brez natisa

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:

Kemijski inštitut

Samo Hočevar

ŽIG

Kraj in datum:

Ljubljana

16.3.2015

Oznaka poročila: ARRS-RPROG-ZP-2015/80

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 priložko/-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](#)

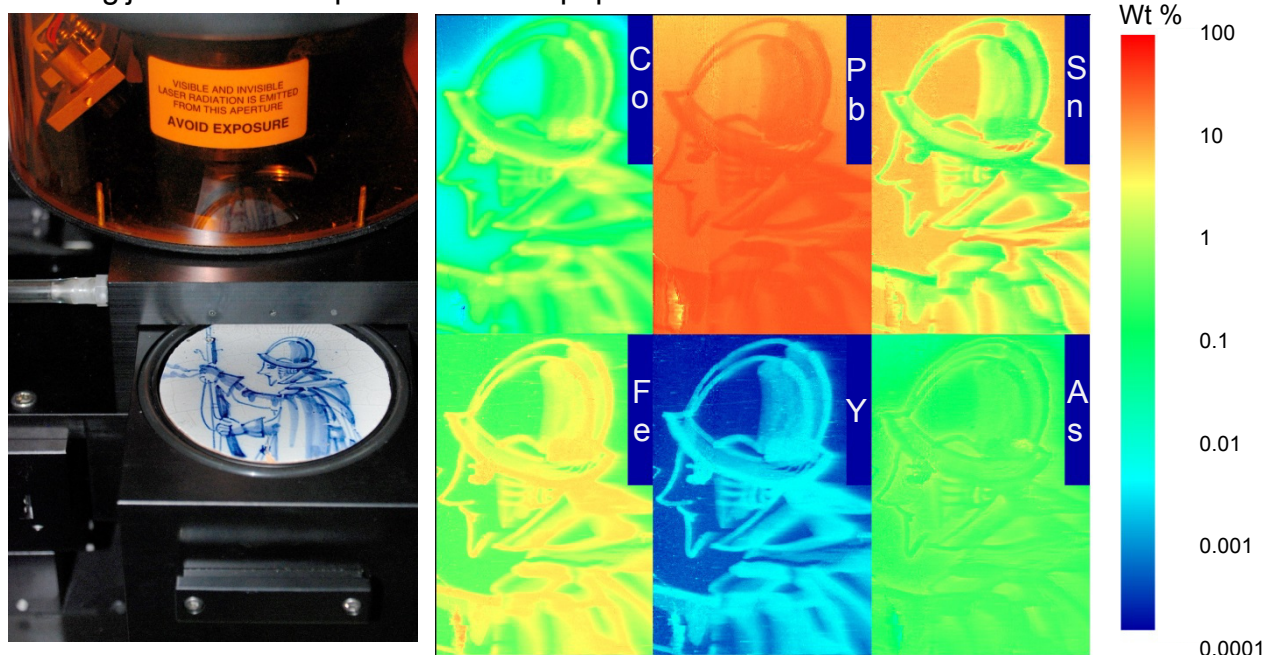
Obrazec: ARRS-RPROG-ZP/2015 v1.00b
A2-1E-D1-3F-FA-A6-75-90-1C-10-90-6D-77-BF-A3-17-4E-5B-C7-8F

Priloga 1

Področje: NARAVOSLOVJE - KEMIJA

Dosežek 1: Uporaba sklopitve laserske ablacije in elementne masne spektrometrije z ionizacijo v induktivno sklopljeni plazmi (LA-ICP-MS) za študije na področju kulturne dediščine

Na osnovi nedavnega metodološkega razvoja na področju sklopitve laserske ablacije in masne spektrometrije z ionizacijo v induktivno sklopljeni plazmi (LA-ICP-MS) so v porastu študije antičnih in zgodovinskih stekel ter keramičnih glazur, tako v smislu tehnične umetnostne zgodovine kot ohranjanja kulturne dediščine, s pomočjo vizualizacije 2D porazdelitve ciljnih/izbranih elementov. Za ta namen se uporablja oslikovanje (skeniranje) z laserskim žarkom vzdolž vzporednih linij, tako pridobljeni podatki pa se obdelajo na način, da se pridobi "zemljevid" porazdelitve izbranih kemijskih elementov. Primer oslikovanja modro-bele keramične ploščice je prikazan na sliki, ki prikazuje ploščico pred lasersko ablacijo (LA) v LA komori in reprezentativen izbor od sicer skupaj 53 elementnih slik/zemljevidov pridobljenih in prikazanih z logaritemsko koncentracijsko skalo od 0,0001 do 100 %. Ilustrirane korelacije predelov površine se lahko interpretira v smislu sestavin stekla in glazure, njihovih izvorov in tehnologij ter kreativnih procesov same priprave.



LA-ICP-MS je izredno občutljiva multi-elementna analizna tehnika z velikim potencialom za elementno oslikovanje (z visoko resolucijo) artefaktov kulturne dediščine, za pomoč pri tolmačenju izvora njihovih surovin, za pridobitev vpogleda v proizvodnje tehnologije in pomoč arheologom, umetnostnim zgodovinarjem, konservatorjem in restavradorjem pri njihovih študijah in ohranjanju zgodovinskih artefaktov.