

Oznaka poročila: ARRS-RPROG-ZP-2015/162



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	P1-0153
Naslov programa	Raziskave in razvoj analiznih metod in postopkov Research and Development of Analytical Methods and Procedures
Vodja programa	6117 Marjan Veber
Obseg raziskovalnih ur (vključno s povečanjem financiranja v letu 2014)	33558
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

Raziskave v letih 2009-2014 so obsegale razvoj novih metod in pristopkov v analizni kemiji ter

njihovo uporabo v analizi in karakterizaciji anorganskih in organskih materialov ter industrijskih produktov in zagotavljanju in kontroli kakovosti živil in okolja.

V skladu z zastavljenimi cilji smo obravnavali aktualne probleme na področjih spektroskopije (AAS, ETAAS, UV-VIS, NIR, ICP-MS, LA-ICP-MS), elektroanaliznih (CV, DPP, ASV) in separacijskih metod (HPLC, CZE, GC, MS, SPME; IC; SEC). Pri tem smo raziskovali tako osnovne zakonitosti, analizne metode, ki smo jih razvili, pa so bile usmerjene v analitiko in karakterizacijo različnih materialov, med katerimi so osrednji del predstavljale raziskave, ki so pomembne pri ohranjanju kulturne dediščine in razvoj postopkov za karakterizacijo prehrabnenih izdelkov z vidika določevanja različnih potencialno škodljivih (pesticidi, toksini, biogeni amini...) in koristnih (antioksidanti) snovi. Pri teh raziskavah smo bili vključeni v evropski projekt Truefood (6.OP). Raziskave povezane z okoljem so bile usmerjene v razvoj metodologije za določevanje hlapnih organskih spojin v zraku in raziskave njihovih oksidacijskih procesov v atmosferi. Pomemben del raziskav pa je posegal v področje modeliranja in uporabe kemometričnih pristopov v sodobni analitiki.

Rezultate raziskav smo objavili v 127 recenziranih člankih, ki so bili objavljeni v uglednih mednarodnih revijah.

ANG

The research which has been performed within our research group during 2009 to 2014 was oriented to the development of new methods and approaches in analytical chemistry and their application in the analysis and characterization of inorganic and organic materials and industrial products. According to our objectives we investigated the current problems in the fields of spectroscopy (AAS, ETAAS, UV-VIS, NIR, ICP-MS, LA-ICP-MS), electroanalytical methods (CV, DPP, ASV) and separation methods (HPLC, CZE, GC, MS, SPME; IC; SEC). Besides performing basic studies in the field of analytical chemistry newly developed analytical methods were used for the characterization of various materials. Special attention was paid to the materials important in the preservation of cultural heritage and food products. We developed methods for the determination of various potentially harmful (pesticides, toxins, biogenic amines) and useful (antioxidants) substances. This research was a part of the European project TRUEFOOD (FP6). Research related to the environmental problems was oriented to the development of a methodology for the determination of volatile organic compounds in the air and to study their oxidation processes in the atmosphere. An important part of the research was related to modeling and the application of chemometric approaches in modern analytical chemistry. The research resulted in 127 publications in the international peer-reviewed journals.

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 od leta 2009 do 2014 smo v okviru raziskovalnega programa "Raziskave in razvoj analiznih metod in postopkov" opravljali raziskave na treh glavnih področjih: a) temeljne raziskave analiznih metod in pristopov; b) raziskave in razvoj metod za analizo in karakterizacijo materialov; c) razvoj metod in postopkov za kontrolo kakovosti v industriji, varnosti živil in okolja.

V omenjenem obdobju smo objavili 127 znanstvenih člankov in 8 preglednih člankov, predstavili raziskovalne dosežke na številnih konferencah, napisali 5 poglavij v znanstvenih monografijah,

prijavili mednarodni patent ter bili mentorji 14 doktorandom, 17 magistrantom, somentorji 20 doktorandom, mentorji pri 88 diplomah na univerzitetnem študiju, pri 46 diplomah 1. bolonjske stopnje in 59 diplomah visokošolskih študijskih programov. Z raziskavami smo pomembno prispevali k varovanju zdravja in okolja ter ohranjanju kulturne dediščine. Vpetost naše programske skupine v mednarodne raziskave se kaže tudi v sodelovanju v mednarodnih projektih ter neformalnem sodelovanju s številnimi univerzami in raziskovalnimi inštituti v tujini, kar je razvidno iz naših skupnih publikacij. Podrobnejši opis raziskav v omenjenem obdobju je razdeljen glede na raziskovalna področja. V opisu so navedene le izbrane raziskave z referencami.

Raziskave novih analiznih postopkov smo izvajali na področjih kjer smo že uveljavljeni in imamo na voljo ustrezno instrumentacijo. To so predvsem področja atomske spektrometrije, elektrokemije, separacijskih tehnik in priprave vzorcev za analizo. Atomske spektroskopske tehnike smo uporabili za proučevanje kovin v bioloških sistemih ter okolju. Pri tovrstnih raziskavah smo se soočili z zahtevnimi matričnimi efekti kot tudi problemov določevanja nizkih koncentracij iskanih elementov. Tako smo raziskovali vsebnost elementov v sledovih v ekstraktu zobnega cementa [COBISS.SI-ID [36005893](#)] ter interakcije kovin s farmacevtskimi učinkovinami [COBISS.SI-ID [34749701](#)], [COBISS.SI-ID [33810437](#)], [COBISS.SI-ID [2854257](#)]. V raziskavah okolja smo razvili atomsko spektroskopsko analizo metodo za opazovanje spiranja nekaterih elementov iz zemlje [COBISS.SI-ID [4448538](#)] in za določevanje težkih kovin v rečnem sedimentu [COBISS.SI-ID [23362599](#)]. Razvili smo tudi priročne spektrofotometrične metode in nizkocenovno instrumentacijo, ki se lahko uporablja tudi v šoli [COBISS 35545605], [COBISS 9165897]

Elektrokemijske raziskave so potekale v smeri razvoja elektrokemijskih senzorjev za detekcijo glukoze [COBISS.SI-ID [4345370](#)], vodikovega peroksida [COBISS.SI-ID [24239655](#)], [COBISS.SI-ID [26051111](#)] in sildenafil citrata [COBISS.SI-ID [4863770](#)] in delovnih elektrod za voltametrično uporabo [COBISS.SI-ID [36731141](#)], [COBISS.SI-ID [27452967](#)]. Raziskali smo sočasno elektrokemijsko depozicijo Pd(II) in Fe(II) na Au substratu. Proučevali smo kinetične in hitrodinamske parametre, ki vplivajo na sestavo izločene Fe-Pd zlitine, ki je zaradi svojih magnetnih lastnosti zanimiva za številne industrijske aplikacije [COBISS.SI-ID [27452967](#)].

Raziskave separacijskih tehnik so vključevale razlage separacijskih mehanizmov, razvoj novih stacionarnih faz ozirano izdelavo novih detekcijskih sistemov. Predlagali smo predlagali nov retencijski mehanizem za razlago ločbe pri ionski izključitveni kromatografiji [COBISS.SI-ID [1609007](#)]. Sodelovali smo pri razvoju monolitnih stacionarnih faz in preverili njihovo uporabnost na realnih sistemih [COBISS.SI-ID [3614328](#)], [COBISS.SI-ID [30266117](#)], [COBISS.SI-ID [35012101](#)], [COBISS.SI-ID [35012613](#)]. Prav tako smo razvili nov amperometrični detekcijski sistem pri ionski kromatografiji [COBISS.SI-ID [4824090](#)] ter originalni kalibracijski sistem pri GC/MS tehniki, ki nam omogoča natančno analizo [COBISS.SI-ID [1448796](#)], [COBISS.SI-ID [34555141](#)]. Raziskave masne spektrometrije smo ostredotočili na raziskavah povezave masnega spektrometra pripojenih ionov z infrardečo pečico. Razvito tehniko smo uporabljali za spremljanje pirolize vzorcev [COBISS.SI-ID [30312965](#)]. Razvili in validirali smo metodo tekočinske kromatografije sklopljene s tandemskim masnim spektrometrom za določevanje atropine in skopolamina v majhnem volumnu človeške plazme [COBISS.SI-ID [1712431](#)].

Poleg razvoja analiznih tehnik smo se ukvarjali z inovativno predpripravo vzorcev, ki je potrebna za odstranitev zelo zahtevnih matriksov. Raziskali smo nov način predkoncentriranja monoterpenov za določitev geografskega porekla sirov [COBISS.SI-ID [3267464](#)], ovrednotili vpliv matriksa pri določevanju bioflavonoidov [COBISS.SI-ID [36369157](#)] ter razvili postopke karakterizacije arome v živilih [COBISS.SI-ID [2763121](#)], [COBISS.SI-ID [33728005](#)] in knjigah, ki se je uporabljal kot indikator njihove razgradnje [COBISS.SI-ID [33296901](#)], [COBISS.SI-ID [33984261](#)], [COBISS.SI-ID [34838277](#)]. Posebno poglavje raziskav je predstavljala raziskava raztapljanja vzorca prsti za pravilno določevanje urana z instrumentalno aktivacijsko analizo [COBISS.SI-ID [27495207](#)]. Zaradi dobrega poznavanja področja priprave vzorcev smo pripravili pregledni članek o uporabi mikroekstrakcije s toplili pri pripravi trdnih okoljskih vzorcev [COBISS.SI-ID [1712175](#)]. Posebno področje analize kemije predstavljalo nedestruktivne tehnike, ki so zelo primerne za proučevanje dragocenih vzorcev kulturne dediščine. Del programa se je ukvarjal z uporabo mikrodestruktivnih tehnik za spremljanje razgradnje zgodovinskih pergamentov [COBISS.SI-ID [5314586](#)].

Pomembno področje analize kemije predstavlja ugotavljanje in opredeljevanje merske negotovosti, ki smo ga obravnavali na primeru hematoloških meritev [COBISS.SI-ID [36397061](#)] in meritev ionskih zvrsti [COBISS.SI-ID [33467909](#)].

Na področju raziskav materialov, predstavljajo predmeti kulturne dediščine posebej pomembno in z analiznega vidika zelo zahtevno področje. Nadaljevali smo z raziskavami korozivnih lastnosti črnih [COBISS.SI-ID [36309253](#)], [COBISS.SI-ID [33743365](#)], [COBISS.SI-ID [33496837](#)], [COBISS.SI-ID [36890629](#)], [COBISS.SI-ID [36976133](#)] ter preučevanjem lastnosti polimerov in njihovih razgradnih procesov [COBISS.SI-ID [30426117](#)], [COBISS.SI-ID [4104218](#)], [COBISS.SI-ID [34621957](#)], [COBISS.SI-ID [34622469](#)], [COBISS.SI-ID [34458629](#)], [COBISS.SI-ID [34838533](#)], [COBISS.SI-ID [35488773](#)], [COBISS.SI-ID [35930373](#)], [COBISS.SI-ID [35750405](#)], [COBISS.SI-ID [36602629](#)], [COBISS.SI-ID [3086449](#)], [COBISS.SI-ID [36573957](#)], [COBISS.SI-ID [259804928](#)]. Pomemben del raziskav kulturne dediščine so predstavljale nedestruktivne študije arheoloških ali dragocenih kulturnih izdelkov, kot je analiza platen [COBISS.SI-ID [5314842](#)], [COBISS.SI-ID [35749381](#)], fotografij [COBISS.SI-ID [35749893](#)], [COBISS.SI-ID [35799813](#)], [COBISS.SI-ID [36663813](#)] in arheoloških posod [COBISS.SI-ID [34839045](#)].

Razen tega smo se ukvarjali z raziskavami procesov korozije različnih materialov kot so nerjavno jeklo [COBISS.SI-ID [707498](#)], [COBISS.SI-ID [720042](#)], ortopedske zlitine [COBISS.SI-ID [25686567](#)] in baker [COBISS.SI-ID [4152858](#)] ter z analitsko karakterizacijo novih materialov [COBISS.SI-ID [34710021](#)], [COBISS.SI-ID [23550759](#)], [COBISS.SI-ID [4384794](#)], [COBISS.SI-ID [34723589](#)], [COBISS.SI-ID [35935493](#)], [COBISS.SI-ID [1687945](#)]. Na področju zaščite materialov pred korozijo smo preučevali inhibicijo korozije bakra v prisotnosti klorida s fitinsko kislino [COBISS.SI-ID [27970087](#)] ter zaščito starih rokopisov pred korozijo papirja zaradi uporabe galnih črnih [COBISS.SI-ID [5504026](#)].

Pomembno področje uprabe analizi pristopov pri karakterizaciji materialov, ki ga bomo razvijali tudi v prihodnosti, je povezano z ravnanjem in predelave lesne biomase in odpadkov [COBISS.SI-ID [5457690](#)], [COBISS.SI-ID [1703049](#)], [COBISS.SI-ID [1809801](#)] ter študij biofilmov. Rezultate TG analize zmesi biomase in plastike smo uporabili pri kinetičnih izračunih v vrtničastem 100kW pilotnem reaktorju, pri čemer smo za izračun uporabili izpopolnjeno izokonverzijsko neizotermno metodo [COBISS.SI-ID [5528090](#)]. Pri raziskavi biofilmov smo določili strukturne in dinamične lastnosti vodnih raztopin levana različnega izvora [COBISS.SI-ID [4381304](#)].

Nenazadnje je potrebno omeniti razvoj analiznih metod za identifikacijo ter določevanje novo sintetiziranih spojin [COBISS.SI-ID [1695535](#)], [COBISS.SI-ID [1608495](#)], [COBISS.SI-ID [36122373](#)], [COBISS.SI-ID [35944709](#)], [COBISS.SI-ID [35308549](#)], [COBISS.SI-ID [1666351](#)] kot tudi parametrov za spremljanje sinteznega postopka. Primera tovrstnih raziskav sta spremljanje vsebnosti vode pri sintezi kromovih koordinacijskih spojin [COBISS.SI-ID [1666351](#)] in optimizacija procesa utrjevanja elektrokromnih nanosov [COBISS.SI-ID [5528090](#)].

V zadnje področje raziskav sodijo študije procesov v okolju, kot so fotokemijski procesi [COBISS.SI-ID [34920197](#)] in študije nastanka sekundarnih organskih aerosolov [COBISS.SI-ID [36692741](#)], [COBISS.SI-ID [4657946](#)] ter raziskave vpliva okolja na kulturno dediščino [COBISS.SI-ID [35749125](#)], [COBISS.SI-ID [36663301](#)]. Pri raziskavah živil smo se posvetili razvoju analiznih tehnik za določevanje bio-aktivnih snovi [COBISS.SI-ID [36618757](#)], [COBISS.SI-ID [30810373](#)], [COBISS.SI-ID [3097900](#)], [COBISS.SI-ID [3461745](#)] oziroma različnim alergenim ali toksičnim spojinam [COBISS.SI-ID [36720645](#)], [COBISS.SI-ID [36261637](#)], [COBISS.SI-ID [30096389](#)]. Na tem področju smo vzpostavili močno mednarodno sodelovanje z raziskovalnimi inštitucijami v Evropi, saj smo bili vključeni v FP6 integrirani evropski projekt »Truefood.« V okviru projekta smo izvajali prepletene interdisciplinarne in internacionalne študije, ki smo jih na koncu povezali v končne zaključke projekta.

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

SLO

Raziskave smo izvedli v skladu z načrtovanim programom za obdobje 2009 - 2014. Menimo, da so bili zastavljeni raziskovalni cilji doseženi, raziskovalni dosežki skupine ustrezni, kar potrjuje tudi soavtorsvo članov programske skupine pri več kot 100 objavljenih znanstvenih člankih v revijah z IF ter številna mentorstva pri doktoratih, magisterijih in diplomah.

Program je bil realiziran na vseh treh ključnih raziskovalnih področjih, ki so obsegali temeljne raziskave analiznih metod in postopkov, raziskave in razvoj metod za analizo in karakterizacijo materialov ter razvoj metod in postopkov za kontrolo kakovosti v industriji, varnost živil in okolja. Omenjene raziskave niso dosegle le znanstvene odličnosti, kar izkazujemo z najpomembnejšimi znanstvenimi dosežki, temveč je vrsta temeljnih raziskav vodila v načrtovano in nenačrtovano sodelovanje z industrijo v Sloveniji in širše. Posebej pomembne so bile temeljne raziskave novih analiznih postopkov ter raziskave biološko pomembnih snovi, ki jih v okviru slovensko turškega sodelovanja poskušamo uporabiti v živilski industriji za izboljšanje prehranske vrednosti živil in podaljšanje roka trajanja le teh.

Pridobljeno znanje smo prav tako preko diplomantov, magistrantov in doktorandov uspešno prenesli v prakso.

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

SLO

V letu 2014 je bil izveden program v skladu z načrtom in ni bilo povišanja raziskovalnih ur.

6. Najpomembnejši znanstveni rezultati programske skupine⁵

	Znanstveni dosežek			
1.	COBISS ID		33296901	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Degradomika materialov	
		ANG	Material degradomics	
	Opis	SLO	Članek z naslovom »Material degradomics: on the smell of old books«, obravnava nov inovativen pristop, ki smo ga poimenovali degradomika in je primeren za študij razgradnje materialov, še posebej papirjev zgodovinskega pomena. Osnova študije so bile hlapne spojine, ki izhajajo iz papirja, katerih prisotnost in vsebnost je bila s pomočjo multivariantne analize korelirana z vsebnostjo najpomembnejših komponent papirja. Pokazali smo, da z določanjem hlapnih spojin, ki izhajajo iz papirja lahko na nedestruktiven način in hitro identificiramo uničene oziroma ogrožene zgodovinske objekte.	
		ANG	We successfully transferred and applied -omics concepts to the study of material degradation, in particular historic paper. The main volatile degradation products of paper, constituting the particular "smell of old books", were determined using headspace analysis after a 24 h predegradation procedure. Using methods of multivariate data analysis, we were able to quantitatively correlate volatile degradation products with properties important for the preservation of historic paper.	
	Objavljeno v		American Chemical Society; Analytical chemistry; 2009; Vol. 81, no. 20; str. 8617-8622; Impact Factor: 5.214;Srednja vrednost revije / Medium	

		Category Impact Factor: 1.915; A': 1; WoS: EA; Avtorji / Authors: Strlič Matija, Thomas Jacob, Trafela Tanja, Csefalvayova Linda, Kralj Cigić Irena, Kolar Jana, Cassar May	
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	
2.	COBISS ID	33728005	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Primerjava izolacijskih metod pri določanju hlapnih spojin v ajdi
		ANG	Comparison of isolation methods for the determination of buckwheat volatile compounds
	Opis	SLO	Pri določanju spojin arome ajde smo kombinirali pet različnih izolacijskih tehnik s plinsko kromatografijo - masno spektrometrijo: dinamična »headspace« tehnika (DHS), mikroekstrakcija na trdno fazo (SPME), dinamična ekstrakcija s sorbentom (HSSE), ekstrakcija s topili (SE) in destilacija s hkratno ekstrakcijo (SDE). Pokazalo se je, da je samo SPME z vlaknom DVB/CAR/PDMS primerna za izolacijo zelo hlapnih spojin v širokem območju polarnosti. Uporabljene izolacijske tehnike se dopolnjujejo glede možnosti ekstrakcije reprezentativnega profila arome ajde.
		ANG	Five different isolation techniques were combined with gas chromatographic-mass spectrometric determination of aroma compounds from buckwheat: dynamic headspace (DHS) with cryotrapping or sorbent trapping, solid-phase microextraction (SPME), headspace sorptive extraction (HSSE), solvent extraction (SE) and simultaneous distillation-extraction (SDE). Only SPME with DVB/CAR/PDMS fibre was suitable for the isolation of highly volatile compounds in a wider polarity range. The applied isolation techniques are complementary in their ability to extract a representative aroma profile of buckwheat.
	Objavljeno v	Applied Science Publishers; Food chemistry; 2010; Vol. 121, no. 1; str. 298-306; Impact Factor: 3.458; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 1.269; A': 1; WoS: DW, JY, SA; Avtorji / Authors: Prosen Helena, Kokalj Meta, Janeš Damjan, Kreft Samo	
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	
3.	COBISS ID	1448796	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Umerjanje masno selektivnega detektorja v netarčni analizi hlapnih organskih spojin v zraku
		ANG	Calibration of mass selective detector in non-target analysis of volatile organic compounds in the air
	Opis	SLO	Hlapne organske snovi igrajo pomembno vlogo v atmosferski fiziki in kemiji ter biogeokemiji. Prispevajo k oksidativni kapaciteti atmosfere, tvorjenju prašnih delcev in drugih atmosferskih onesnaževal, kot so primer plini tople grede (ozon). Za njihovo določevanje najpogosteje uporabljamo plinsko kromatografijo v povezavi z masnim spektrometrom. Za pravilno kvantifikacijo posameznih organskih spojin je potrebno dolgotrajno umerjanje s posameznimi standardnimi mešanici. Za pospešitev postopka kalibracije instrumenta smo razvili teoretični model napovedovanja faktorjev občutljivosti masnega spektrometra na osnovi kemijske strukture. Uporabili smo večfaktorski linearni model s sedmimi parametri. Povprečno napako napovedi faktorjev občutljivosti smo izračunali z navzkrižnim validacijskim testom in je znašala okoli 20%. Dobljena napaka modela je ustrezna za določevanje hlapnih organskih spojin v zraku pri neciljani analizi. Celoten postopek kalibracije masnega spektrometra je časovno zamuden in ga priporočamo v primerih, ko nimamo na voljo ustreznih kalibracijskih standardnih mešanic.
			Volatile organic compounds (VOCs) play an important role in the chemistry of the atmosphere and in biogeochemistry. They contribute to the oxidative

		ANG	capacity of the atmosphere, particle and air pollutants, as well as to the production of greenhouse gasses (for instance ozone). Among analytical techniques for their determination in the atmosphere gas chromatography coupled with mass spectrometry (GC-MS) offers several advantages. However, for an accurate quantification calibration with standard substances is necessary. A quantitative structure– property relationship (QSPR) model for the prediction of MS response factors was developed on basis of our experimental measurements for the quantification of ozone precursors present in the atmosphere. A linear correlation between chemical structures and response factors was established by using a 7 parameter MLR model. The average error in the prediction of response factors was calculated by crossvalidation procedure and was below 20%, which is sufficient for the determination of VOCs in the air. The proposed procedure is time consuming so it is more suited for the quantification of tentatively identified organic compounds during the reprocessing of MS chromatograms in cases when the original sample is no longer available.
	Objavljeno v		Elsevier; Journal of chromatography. A; 2011; Vol. 1218, issue 11; str. 1538-1543; Impact Factor: 4.531; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.215; A': 1; WoS: CO, EA; Avtorji / Authors: Arh Gregor, Klasinc Leo, Veber Marjan, Pompe Matevž
	Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek
4.	COBISS ID	1609007	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Mehanizem nastanka sistemskih vrhov v ionski izključitveni kromatografiji
		ANG	Mechanism of formation of system peaks in ion-exclusion chromatography
	Opis	SLO	V ionski izključitveni kromatografiji je pogost pojav sistemskih vrhov. Eksperimentalno smo potrdili, da je število sistemskih vrhov enako ali manjše od števila aktivnih komponent eluenta (število se zmanjša v primeru koelucije sistemskih vrhov). Opazimo lahko pozitivne ali negativne vrhove. Negativne lahko pričakujemo, če je koncentracija komponente eluenta v vzorcu manjša, kot je v eluentu. V nasprotnem primeru se pojavijo pozitivni vrhovi. Različni retencijskih časi sistemskih vrhov so posledica različne kapacitete stacionarne faze glede na posamezno aktivno komponento eluenta. Variabilno kapaciteto stacionarne faze lahko uporabimo za določanje absolutnega časovnega okna, v katerem lahko pričakujemo posamezni sistemski vrh.
		ANG	Single or multiple system peaks can be observed in ionexclusion chromatography (IEC) based on whether the eluent is composed of single or multiple active eluent constituents. It was confirmed experimentally that the number of system peaks is always equal to or lower than (when coelution occurs) the number of active eluent components. Positive and negative system peaks can be recorded in the IEC systems. Negative system peaks can be expected for each eluent component that is also present in the injected sample plug at a lower concentration than in the eluent. In the opposite case, where the eluent components in the injected sample plug are present at a higher concentration than in the eluent, positive system peaks will be recorded. The appearance of the system peaks in IEC is based on the column capacity which is analyte–depending. Variable column capacity was used to determine the absolute time window in which an individual system peak can be expected.
	Objavljeno v		Elsevier; Journal of chromatography. A; 2013; Vol. 1305; str. 188-192; Impact Factor: 4.258; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.155; A': 1; WoS: CO, EA; Avtorji / Authors: Novič Milko, Haddad Paul R.
	Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek
5.	COBISS ID	4152858	Vir: COBISS.SI

	Naslov	SLO	Mehanizem raztapljanja bakra v močno amoniakalnih raztopinah
		ANG	Copper dissolution in ammonia solutions
	Opis	SLO	V članku smo opisali raziskavo mehanizma raztapljanja bakra v močno amoniakalnem mediju. Ugotovili smo, da na korozijo bakra v amoniakalnih raztopinah vpliva vrsta parametrov. Raziskovali smo korozijo bakra v širokem območju potencialov in koncentracij reaktantov 0,2–3,5 mol/L NH ₃ , 0–0,1 mol/L Cu ²⁺ , pH 10–12,5). Z uporabo elektrokemijskih in optičnih metod (SEM) smo ugotovili, da je najverjetnejši mehanizem pasivizacije dvostopenjski EC proces tvorbe Cu ₂ O. To domnevo smo potrdili z impedančno analizo pri različnih eksperimentalnih pogojih.
		ANG	The mechanism of corrosion of copper was investigated in a wide potential window and in a broad range of concentrations of various species (0.2–3.5 mol/L NH ₃ , 0–0.1 mol/L Cu ²⁺ , pH 10–12.5). Using conventional electrochemical methods in combination with an optical SEM method, we show that a two-step EC reaction yielding Cu ₂ O proceeds. Finally, we confirm proposed mechanism by performing impedance analysis at various experimental conditions.
	Objavljeno v	Electrochemical Society; Journal of the Electrochemical Society; 2009; Vol. 156, no. 7; str. C222–C229; Impact Factor: 2.241; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 1.184; A': 1; A': 1; WoS: HQ, QG; Avtorji / Authors: Strmčnik Dušan, Gaberšček Miran, Pihlar Boris, Kočar Drago, Jamnik Janko	
	Tipologija	1.01 Izvirni znanstveni članek	

7. Najpomembnejši družbeno-ekonomski rezultati programske skupine⁶

	Družbeno-ekonomski dosežek		
1.	COBISS ID	707498	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Oksidacija dupleksnih nerjavnih jekel
		ANG	XPS study of duplex stainless steel oxidized by oxygen atoms
	Opis	SLO	Dupleksna nerjavna jekla sodijo zaradi svojih mehanskih in kemijskih lastnosti med strateško pomembne materiale. V sodelovanju z IMT in deloma jeklaro Acroni, je bila izvedena raziskava mehanizma in kinetike nastanka oksidnih plasti na površini FeCrNiMoN zlitin. Oksidacija je bila raziskana s pomočjo rentgenske fotoelektronske spektroskopije (XPS) in elektronske mikroskopije (SEM). Rezultati analiz so omogočili vpogled v sestavo Fe/Cr/Mn oksidnih plasti, ugotovljena pa je bila tudi korelacija s temperaturo. Tematika pa je tudi predmet doktorske disertacije.
		ANG	Surface oxidation of the duplex stainless steel DSS alloy 2205 was studied by X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) and SEM imaging. The experiments were performed on the alloy after controlled oxidation with oxygen atoms created in an inductively coupled plasma. Experiments were performed at temperatures from room temperature up to 700 [compositum]C. Compositions of the modified oxidized surfaces were obtained from XPS survey scans, and the chemistries of selected elements from higher energy resolution scans of appropriate peaks. The morphologies of the surfaces were obtained using field emission scanning electron microscopy at different magnifications, up to 20,000x. Different Fe/Cr/Mn oxidized layers and different oxide thicknesses were observed and correlated with temperature.
	Šifra	F.09 Razvoj novega tehnološkega procesa oz. tehnologije	
		Pergamon Press; Corrosion science; 2009; Vol. 51, no. 4; Impact Factor:	

	Objavljeno v		2.316; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 0.699; A': 1; WoS: PM, PZ; Avtorji / Authors: Donik Črtomir, Kocijan Aleksandra, Jenko Monika, Drenik Aleksander, Pihlar Boris
	Tipologija		1.01 Izvirni znanstveni članek
2.	COBISS ID		33715461 Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Sodobne ekstrakcijske tehnike za eterična olja
		ANG	Modern extraction techniques for essential oils
	Opis	SLO	V monografiji smo objavili prispevek v katerem so opisane sodobne ekstrakcijske tehnike za eterična olja. Za bolj občutljiva eterična olja se uporablja ekstrakcija s topili (SE). Pomanjkljivosti teh standardnih tehnik so dobro poznane: izguba hidrofilnih in termično labilnih spojin pri HD/SD, okoljsko problematična in draga topila, precejšnja poraba časa in energije. Sodobne uveljavljene in nove ekstrakcijske tehnike stremijo k preseganju teh težav. V pregledu, ki povzema pretežno znanstvene prispevke zadnjega desetletja, je podana razprava o njihovih prednostih, slabostih in uporabnosti.
		ANG	Essential oils are in the pharmacopoeas defined as volatile constituents of plants separated by hydrodistillation (HD), steam distillation (SD) or pressing. Solvent extraction (SE) is used for more delicate essential oils. Modern established and emerging extraction techniques for essential oils aim to overcome these problems. Their advantages, disadvantages and applicability are discussed in this review, which covers mainly the scientific literature published in the last decade.
	Šifra		F.01 Pridobitev novih praktičnih znanj, informacij in veščin
	Objavljeno v		Har Krishan Bhalla & Sons; Essential oils and aromas green extraction and applications; 2009; Str. 147-167; Avtorji / Authors: Prosen Helena
	Tipologija		1.16 Samostojni znanstveni sestavek ali poglavje v monografski publikaciji
3.	COBISS ID		35488773 Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Kvantitativno kemijsko oslikovanje predmetov kulturne dediščine z NIR spektroskopijo
		ANG	Quantitative NIR chemical imaging in heritage science
	Opis	SLO	Spektralno oslikovanje predmetov kulturne dediščine je bilo doslej usmerjeno le na kvalitativno karakterizacijo umetnin in predmetov kulturne dediščine. Z uvedbo naprednih spektrometrov, ki segajo v bližnje infrardeče področje (NIR) od 1000–2500 nm pa so se pojavile možnosti za pridobivanje kvantitativnih informacij za neporušno kemijsko analizo umetnin. V delu je obravnavan razvoj 2D NIR oslikave in kemijskega mapiranja predmetov kulturne dediščine. Metoda je bila razvita na osnovi NIR posnetkov 256 prostorsko različnih spektrov v celotnem NIR območju, podatki pa analizirani v tridimenzionalnem prostoru s pomočjo multivariatne analize. S kombinacijo kemometrične obdelave podatkov in kemijske analize referenčnih vzorcev, je bilo možno izdelati prostorske mape z opredelitvijo kemijskega sestava predmetov. Takšno kvantitativno oslikovanje predmetov je neprecenljivega pomena za umetnine in zgodovinske predmete ali objekte, ki so poškodovani. Raziskava je bila objavljena v ugledni ameriški reviji Analytical Chemistry, vodilna avtorja (L.C. in M.S.) pa sta raziskovalca, ki sta si to znanje pridobila v okviru naše programske skupine, zdaj pa raziskave na tem področju nadaljujeta v centru za trajnostno dediščino na ugledni Bartlett School of Graduate Studies, University College London. To lahko štejemo kot pomembno priznanje in dokaz o kvaliteti raziskav in dosežkov ter družbenoekonomskirelevanci rezultatov programske skupine.

		ANG	Until recently, applications of spectral imaging in heritage science mostly focused on qualitative examination of artworks. This is partly due to the complexity of artworks and partly due to the lack of appropriate standard materials. With the recent advance of NIR imaging spectrometers, the interval 1000–2500 nm became available for exploration, enabling us to extract quantitative chemical information from artworks. In this contribution, the development of 2D NIR quantitative chemical maps of heritage objects is discussed along with presentation of the first quantitative image. Further case studies include semiquantitative mapping of plasticiser distribution in a plastic object and identification of historic plastic materials. In the NIR imaging studies discussed, sets of 256 spatially registered images were collected at different wavelengths in the NIR region of 1000–2500 nm. The data was analyzed as a spectral cube, both as a stack of wavelength-resolved images and as a series of spectra, one per each sample pixel, using multivariate analysis. This approach is only possible using well-characterized reference sample collections, as quantitative imaging applications need to be developed, thus enabling spatial maps of damaged and degraded areas to be visualized to a level of chemical detail previously not possible. Such quantitative chemical mapping of vulnerable areas of heritage objects is invaluable, as it enables damage to historic objects to be quantitatively visualized. The results of this work was published in the distinguished journal Analytical Chemistry (Washington), and two of the authors (L.C. and M.S.) acquired basic knowledge on the paper chemistry in our research group. They perform now the research on this subject in the Centre of Sustainable Heritage, The Bartlett School of Graduate Studies, University College London.
	Šifra	F.02	Pridobitev novih znanstvenih spoznanj
	Objavljeno v	American Chemical Society; Analytical chemistry; 2011; Vol. 83, no. 13; str. 5101-5106; Impact Factor: 5.856; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.215; A': 1; WoS: EA; Avtorji / Authors: Csefalvayova Linda, Strlič Matija, Karjalainen Harri	
	Tipologija	1.01	Izvirni znanstveni članek
4.	COBISS ID	35545605	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	UV-LED spektrometer za določanje nizkih koncentracij etanola v sadnih sokovih na osnovi mikrodifuzije
		ANG	Microdiffusion-based UV-LED spectrometric setup for determining low levels of ethanol in fruit juice
	Opis	SLO	Opisan je nov analizni pripomoček, ki združuje separacijo hlapnih substanc iz vzorca s kompleksnim matriksom na osnovi mikrodifuzije in kinetično zvezno spektrometrično spremljane reakcije v sprejemnem mediju pri 365 nm. Zmožnosti in uporabnost sistema za realne aplikacije smo potrdili na primeru sadnih sokov.
		ANG	A novel setup is described in which we combined the separation of a volatile substance from a sample with a complex matrix on the basis of a microdiffusion process with a kinetic online spectrometric monitoring of the reaction in the receptive medium at 365 nm. The fruit juice was selected as a model for testing the performance of the setup in real-life applications.
	Šifra	F.06	Razvoj novega izdelka
	Objavljeno v	Pergamon Press; Talanta; 2011; Vol. 87, no. 1; str. 174-179; Impact Factor: 3.794; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.215; A': 1; WoS: EA; Avtorji / Authors: Gros Nataša	
	Tipologija	1.01	Izvirni znanstveni članek

5.	COBISS ID	24239655	Vir: COBISS.SI
	Naslov	SLO	Nov nanostrukturiran katalizator za elektrokemijsko redukcijo vodikovega peroksida
		ANG	Prussian blue-modified titanate nanotubes
	Opis	SLO	Titanatne nanocevkke (TiNT) smo modificirali z »Berlinsko modrim« (BM), ki smo ga sintetizirali z reakcijo med heksacianoferatom(III) nanešenim na TiNT in Fe(II) ioni. BM-TiNT modificirane nanocevkke katalizirajo redukcijo vodikovega peroksida, konstanta hitrosti pa je za red velikosti višja od klasično elektrokemijsko pripravljenih tankih plasti BM. Ugotovili smo, da modifikacija z manj kot nanomolarno plastjo BM, zagotavlja stabilen in ponovljiv odziv na H ₂ O ₂ v območju med 0,02 in 0,4 mM in omogoča določanje peroksida pri nizkih napetostih (-0,15 V).
		ANG	Prussian blue (PB) modified titanate nanotubes (PB-TiNT) have been synthesized by the reaction of Fe ²⁺ modified TiNT with hexacyanoferrate (III) ions. The rate constant for heterogeneous catalytic reaction between PB-TiNT and H ₂ O ₂ was found to be an order of magnitude higher than the values reported for conventionally prepared, electrochemically deposited PB films. On the PB-TiNT modified electrode with subnanomolar surface concentration of PB a stable, reproducible and linear response towards H ₂ O ₂ was obtained in the concentration range 0.02–4 mM at -150 mV.
	Šifra	F.02	Pridobitev novih znanstvenih spoznanj
	Objavljeno v	VCH; Electroanalysis; 2010; Vol. 22, no. 19; str. 2202-2210; Impact Factor: 2.721; Srednja vrednost revije / Medium Category Impact Factor: 2.148; WoS: EA, HQ; Avtorji / Authors: Iveković Damir, Gajović Andreja, Čeh Miran, Pihlar Boris	
	Tipologija	1.01	Izvirni znanstveni članek

8. Drugi pomembni rezultati programske skupine²

Patent COBISS.SI-ID 26939909 M. Anders, D.A. Lichtblau, J. Kolar, J. Malešič, M. Strlič, M. Šala, M. Kočevár. Antioxidant for an organic material and method for treating the same: patent: EP 1664431 (B1), 2010-08-04. [S. l.]: European Patent Office, 2010. 21 str. Antioksidant in metoda za stabilizacijo organske snovi V zvezi s staranjem in razgradnjo papirja in s tem pisne kulturne dediščine, je bil izdelan postopek in metoda za kemijsko stabilizacijo papirja. Patent se nanaša na sintezo antioksidanta in metodo za njegovo aplikacijo za zaščito pisnih gradiv na papirju. Antioksidant ima lastnost preprečevanja, upočasnitve ali poprave poškodb zaradi oksidacije in/ali kislinske hidrolize in ne kaže slabosti prej uporabljenih formulacij. V okviru programa je bila razvita programska oprema za napovedovanje reakcijskih hitrosti organskih spojin z različnimi oksidanti v atmosferi. Poglavitni cilj tega projekta je bil razviti postopke za napovedovanje omenjenih reakcijskih hitrosti na osnovi kemijske strukture. Izračun mora biti enostaven in hiter ter sočasno omogočati točne napovedi. Navedeni pogoji so potrebni, da ga lahko uporabimo za globalno modeliranje fotokemijskih procesov v atmosferi. Program z imenom MACI, je zasnovan širše in smo ga že testirali tudi za napovedovanje drugih atmosfersko pomembnih procesov, kot tudi za splošno QSPR modeliranje v kemiji.

9. Pomen raziskovalnih rezultatov programske skupine⁸

9.1.Pomen za razvoj znanosti⁹

SLO

Znanstveni prispevek opravljenih raziskav v okviru programske skupine je v razvoju novih analiznih metod, postopkov in spoznanj, ki smo jih objavili v mednarodni znanstveni periodiki. V letih 2009 do 2014 smo objavili 127 člankov pretežno v revijah, ki jih indeksira SCI. Več kot polovico člankov je bilo objavljenih v revijah, ki so pomembna za področje analize kemije, kemije okolja in kemije materialov. Rezultati raziskav so se odrazili tudi v poglobljanju znanja sodelavcev katedre, ki so nujni pogoj za kvalitetno pedagoško delo ter v prenosu znanja na diplomante, magistrante in doktorante. Mednarodno vpetost skupine dokazujejo številne mednarodne povezave. Poleg povezav preko projektov smo imeli tudi veliko neformalnih stikov s številnimi univerzami in raziskovalnimi inštitucijami. Menimo, da so naše raziskave prispevale k znanosti tako v domačem, kot tudi mednarodnem okviru.

ANG

The main scientific contribution of our research program is the development of new analytical methods, processes and knowledge, which are published in the international scientific journals. In the years 2009 to 2014, our research group has published 127 articles mainly in the SCI journals. More than half of the articles were published in journals that are important in the field of analytical, environmental and material chemistry. The research results were reflected in the deepening of knowledge of employees of the Department, which is a necessary prerequisite for quality teaching and knowledge transfer to the graduates, masters and doctoral students. Our research group has numerous international connections. In addition to the collaborations within the international projects we had a lot of informal contacts with many universities and research institutions. We believe that our research will contribute to science, both domestically as well as internationally.

9.2.Pomen za razvoj Slovenije¹⁰

SLO

Večina sodelavcev programske skupine aktivno sodeluje v dodiplomskih in podiplomskih izobraževalnih programih na UL FKKT, kar pomeni, da so s tem neposredno prispevali k izobraževanju in usposabljanju specializiranih kadrov, prav tako pa so razvijali osnovna in aplikativna znanja, ki so nujna za razvoj in napredek stroke- analize kemije v našem prostoru. Večina naših diplomantov, magistrantov in doktorandov, ki je v okviru naše programske skupine zaključila izobraževanje, je uspešno prenesla svoje znanje v industrijo ali v raziskovalne institucije.

Prenos znanja na področju analize kemije poteka tudi neposredno, saj so člani projektne skupine aktivno sodelovali predvsem s farmacevtsko industrijo v Sloveniji pri izdelavi in validaciji nekaterih analiznih postopkov za njihove potrebe. Omenjeno sodelovanje se v zadnjem času krepi in s tem prispevamo k tehnološkemu napredku Slovenije.

Pomemben delež naših raziskav je bil usmerjen v reševanje problematike okolja in varne in zdrave hrane. Z raziskavami o prenosu in nalaganju onesnažil v zemljo in sedimente, v rečne vodotoke in zrak smo pridobili potrebna znanja, ki jih potrebuje zakonodajalec za sprejemanje odločitev glede varovanja našega bivanjskega okolja. Ob tem bi poudarili predvsem naše raziskave na področju aerosolnih delcev, ki predstavljajo trenutno enega od pomembnejših ekoloških problemov tako v Sloveniji kot tudi širše.

Pomemben vidik za vsako državo je ohranjanje njene kulturne dediščine. Tako so raziskave, povezane s preiskavami materialov kulturne dediščine, močno doprinesle k prepoznavnosti slovenskih raziskovalcev v mednarodnem prostoru, predlagane raziskave neporušnih analiznih postopkov pa so neposredno usmerjene v ohranjanje kulturne dediščine. Prav tako se izsledke raziskav že uporablja v slovenskem prostoru za stabilizacijo/konzervacijo nekaterih neprecenljivih del naše kulturne dediščine.

ANG

The majority of researchers of the program group are actively involved in undergraduate and graduate education programs at UL FKKT, which means that they directly contribute to the education and training of specialized personnel as well as develop basic and applied knowledge, which is essential for the development and progress of the analytical chemistry in our environment. Most of our graduates, master and doctoral students who completed their education within our group have successfully transferred their knowledge and expertise to the industry or research institutions.

Direct transfer of knowledge in the field of analytical chemistry took place as well since some members of our program group actively participated with Slovenian pharmaceutical industry in the elaboration and validation of the analytical procedures for some of their needs. This cooperation has recently strengthened and has contributed to the technological progress of Slovenia.

A significant part of our research has been focused on solving the problems of the environment and safe and healthy food. Our research has been focused on the transfer and accumulation of pollutants in soil, sediments, rivers and in the air. We acquired the necessary knowledge needed by the legislator to make decisions concerning the protection of our living environment. We emphasize in particular our research in the field of aerosol particles, which currently represents one of the major environmental problems in Slovenia and beyond.

An important aspect of any country is protection of its cultural heritage. Thus, the research related to the investigation of materials related to cultural heritage greatly contributes to the international recognition of Slovenian researchers. The proposed nondestructive analytical procedures are directly oriented to the preservation of cultural heritage and many of them are already used for stabilization and conservation of valuable documents of our cultural heritage.

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	46
bolonjski program - II. stopnja	3
univerzitetni (stari) program	88

10.2. Magisterij znanosti in doktorat znanosti¹³

Šifra raziskovalca	Ime in priimek	Mag.	Dr.	MR	
28336	Tanja Trafela	☐	☒	☒	
0	Giovanna Piantanida	☐	☒	☐	
30693	Alenka Možir	☐	☒	☒	
29403	Andrej Ščavničar	☐	☒	☒	
29488	Alen Albreht	☐	☒	☐	
34714	Zoran Bubnič	☐	☒	☐	
15068	Vesna Weingerl	☐	☒	☐	
27804	Gregor Arh	☐	☒	☒	
24898	Petra Igličar	☐	☒	☐	
27687	Edita Jasiukaityte	☐	☒	☐	
11102	Rok Grahek	☐	☒	☐	
20083	Andrej Kocijan	☐	☒	☐	
28555	Darja Kotnik	☐	☒	☒	
0	Tomaž Gostič	☐	☒	☐	
0	Vojko Zupančič	☒	☐	☐	
0	Martina Rozman	☒	☐	☐	
0	Saša Kostevc	☒	☐	☐	
0	Mateja Lisac-Gorjup	☒	☐	☐	

0	Anita Grandovec	☒	☐	☐	
30308	Andrej Klobčar	☒	☐	☐	
30358	Tanja Žibert	☒	☐	☐	
34634	Jerica Ivanoš	☒	☐	☐	
30347	Ana Trkovnik Klun	☒	☐	☐	
34448	Kelly Peeters	☒	☐	☐	
20636	Petra Potočnik	☒	☐	☐	
36527	Gordan Jančan	☒	☐	☐	
20859	Anuška Bole	☒	☐	☐	
31480	Vanja Fabjan Velikanje	☒	☐	☐	
19899	Klara Orešnik	☒	☐	☐	
0	Margita Gal	☒	☐	☐	
0	Blaž Vidmar	☒	☐	☐	

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	
28336	Tanja Trafela	☐	☒	C - Gospodarstvo	
30693	Alenka Možir	☐	☒	A - raziskovalni zavodi	
29403	Andrej Ščavničar	☐	☒	C - Gospodarstvo	
27804	Gregor Arh	☐	☒	C - Gospodarstvo	
28555	Darja Kotnik	☐	☒	C - Gospodarstvo	

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	

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

PAPERVOC - L1-9710—0103-06: Volatile organic compounds in paper-based cultural heritage collections – source of information or health risk?

Nosilca: Strlič, I.Kralj Cigić

FOOD-CT-2006 -016264 (EU 6. OP); Traditional Europe Food (TRUEFOOD),

Nosilec: M. Pompe

CHRESP – Cultural Heritage Research Meets Practice, 7th FW EU,

Nosilca: M. Strlič, I. K. Cigić

LEONARDO AnalChemVoc II LLP-LDV-TOI-2008-SI-15: Hands-on Approach to Analytical Chemistry for Vocational Schools;

nosilec: N. Gros

BI-HR; Nastanek, transport in razgradnja fotooksidantov na področju Mediterana / *Formation, transport and degradation of photooxidants in the Mediterranean*

nosilec: M. Pompe

BI-ZDA; Kvantitativna ocena tveganja pri tradicionalnih izdelkih živil/ *Quantitative risk*

assessment of traditional food products

nosilec: M. Veber

BI-TR: Sistem nadzora in sledljivosti biogenih aminov in nitrozamina v tradicionalnih ribjih

produktih/ *Systems of control and traceability of biogenic amines and nitrosamines in*

traditional fish products

nosilec: M. Pompe

BI-RO Razvoj spektroskopskih metod za kontrolo kvalitet proteinskih materialov /*Development of spectroscopic methods for quality control of proteinaceous materials*

nosilec M. Strlič

Bi-Kitajska: Onesnaževala povezana s prometom: ocena virov emisij in tvorbenih mehanizmov/ *Transportation-related pollutants: Estimation of emission sources and formation pathways of aerosols*

nosilec: M. Pompe

BI Srbija

Spektroskopska in LCMS/ MS določitev bioflavonoidov v živilih in farmacevtskih pripravkih /*Spectroscopic and LCMS/MS Determination of Bioflavonoids in Food and Pharmaceutical Forms*

nosilec: H. Prosen

Bi Turčija

Investigating effects of fortified fish soup with natural antioxidants and antimicrobial compounds to improve its shelf life

nosilec: M. Veber

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

SLO

Analitika pomožnih substanc Krka d.d. Novo mesto – UL, FKKT- I/6-106259, Nosilec: D. Kočar

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

Znanja, ki se generirajo v okviru raziskovalnega programa, so prenosljiva v industrijo. Prav tako bi se lahko uporabila za ustanovitev storitvene družbe, ki nudi družbam v branži kemijske in farmacevtske industrije razvoj novih analiznih postopkov, ki so potrebni za nadzor kvalitete njihovih produktov. Povpraševanje po tem segmentu storitvene dejavnosti je veliko in presega ponudbo, zato slovenske družbe pogosto iščejo opisano storitveno dejavnost tudi v tujini. Tovrstna storitvena dejavnost je zelo kompleksna, saj je potrebno zaradi hitrega razvoja instrumentalnih analiznih tehnik, neprestana nadgradnja znanja kot tudi opreme. Ocenjeni prihodki opisanega segmenta storitvene dejavnosti v Sloveniji so med nekaj milijonov do 10 milijonov € na leto. Ocenjeni prihodki na zaposlenega v tej storitveni dejavnosti znašajo med 70 do 100 tisoč € letno, pri čemer so stroški nabave opreme in reagentov med 20 in 40 tisoč € letno.

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

možnost ustanovitve spin-off podjetja	☒ DA ☐ NE
potrebni finančni vložek	200.000 EUR
ocena potrebne infrastrukture in opreme ¹⁸	laboratorij HPLC sistem Ionski kromatograf plinski kromatograf

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

Vrednotenje metode za zmanjšanje korozije papirja, ki jo povzročajo galna črnila
J. Malešič, M. Šala, V. Šelih in D. Kočar, Cellulose, 2014, vol. 21, 2925-2936, [COBISS-5504026]

Najbolj uporabljana črnila od srednjega veka do dvajsetega stoletja so bila galna črnila, ki vsebujejo korozivne elemente in kisline. Razvili smo novo metodo konzerviranja za stabilizacijo papirja z omenjenimi črnili. Ovrednotili smo stabilizacijske postopke, uporabljene pri nizki relativni vlagi na modelnih in historičnih papirjih. Papirje smo umetno starali in spremljali spremembe ter določali razgradnjo celuloze. Migracijo železovih in bakrovih ionov iz nanosa črnila smo spremljali z LA-ICP-MS. Papir je uspešno stabiliziran ob impregnaciji z tetrabutilamonijevim bromidom v alkalnem pufru. Negativne posledice stabilizacije, kot so

migracija železovih in bakrovih ionov iz nanosa črnila in obarvanje papirja in tinte, so bile minimalne. Predlagana metoda je primerna za konzerviranje historičnih dokumentov.

17.2. Izjemni družbeno-ekonomski dosežek

Pregledni članek:

Applications of liquid-phase microextraction in the sample preparation of environmental solid samples

Uporaba mikroekstrakcije s topili pri pripravi trdnih okoljskih vzorcev

Helena Prosen

Molecules 2014, 19, 6776-6808

Pregledni članek zajema raziskave s področja uporabe mikro ekstrakcije za pripravo trdnih okoljskih vzorcev (tla, sedimenti, komunalno blato, prah ipd.), objavljene v zadnjem desetletju. Poudarek je na inovativnih mikro ekstrakcijskih tehnik v tekoči fazi (LPME) in sicer ekstrakcija v kapljico, ekstrakcija s topilom v votlem vlaknu in disperzivna mikroekstrakcija s topili. Metode so razvrščene v tri skupine in sicer LPME v kombinaciji s konvencionalno solventno ekstrakcijo, LPME v kombinaciji z okoljsko prijazno ekstrakcijo in LPME brez predhodne ekstrakcije. V člankih je prikazana je uporabnost teh pristopov za pripravo okoljskih vzorcev pri določevanju onesnaževal.

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

Marjan Veber

ŽIG

Kraj in datum:

Ljubljana

16.3.2015

Oznaka poročila: ARRS-RPROG-ZP-2015/162

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](#)

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

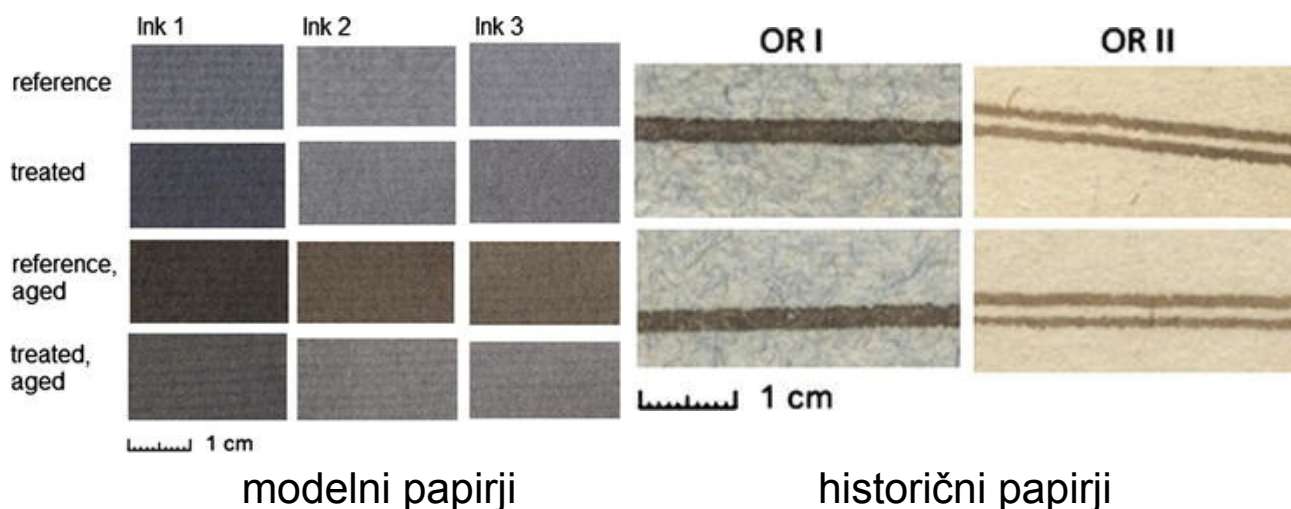
45-C8-CC-4F-B3-AD-C6-12-75-3B-A2-07-21-51-63-49-B6-D6-90-9C

Priloga 1

NARAVOSLOVJE/KEMIJA

Področje: Analizna kemija 1.04.05

Dosežek: J. Malešič, M. Šala, V. S. Šelih, D. Kočar, Evaluation of a method for treatment of iron gall ink corrosion on paper. Vir: Cellulose, 21 (2014), 2925-2936.



Najbolj uporabljana črnila od srednjega veka do dvajsetega stoletja so bila železo galna črnila. Ta črnila vsebujejo korozivne elemente prehoda in kisline, ki povzročajo razpad papirja. Razvili smo novo metodo konzerviranja za stabilizacijo papirja z omenjenimi črnili. Namen dela je bil ovrednotiti stabilizacijske postopke, uporabljene pri nizki relativni vlagi, tako na modelnih kot na historyčnih papirjih popisanih s črnilom. Papirje smo umetno starali in spremljali spremembe s kolorimetrijo ter določali razgradnjo celuloze z velikostno izključitveno kromatografijo. Migracijo železovih in bakrovih ionov iz nanosa črnila smo spremljali z lasersko ablacijo povezano z induktivno sklopljeno plazmo in masnim spektrometrom. Ugotovili smo, da je papir uspešno stabiliziran ob impregnaciji z antioksidantom tetrabutylamonijevim bromidom v alkalnem pufru. Negativne posledice stabilizacije, kot so migracija železovih in bakrovih ionov iz nanosa črnila in obarvanje papirja in tinte, so bile minimalne, kar je razvidno tudi iz gornjih slik. Predlagana metoda, ki je enostavna in hitra, je zato primerna za konzerviranje historyčnih dokumentov napisanih na papirju z železagalnim črnilom.

Predlagana je metoda za stabilizacijo papirja, popisaneega z železagalnim črnilom., ki povzroča razpad papirja. Metoda je bila preverjena na modelnih in historyčnih papirjih. Preverili smo spremembo barve, razpad papirja in razlivanje črnila. Opazne so bile le minimalne spremembe, zato je metoda primerna za uporabo v konzervatorstvu.