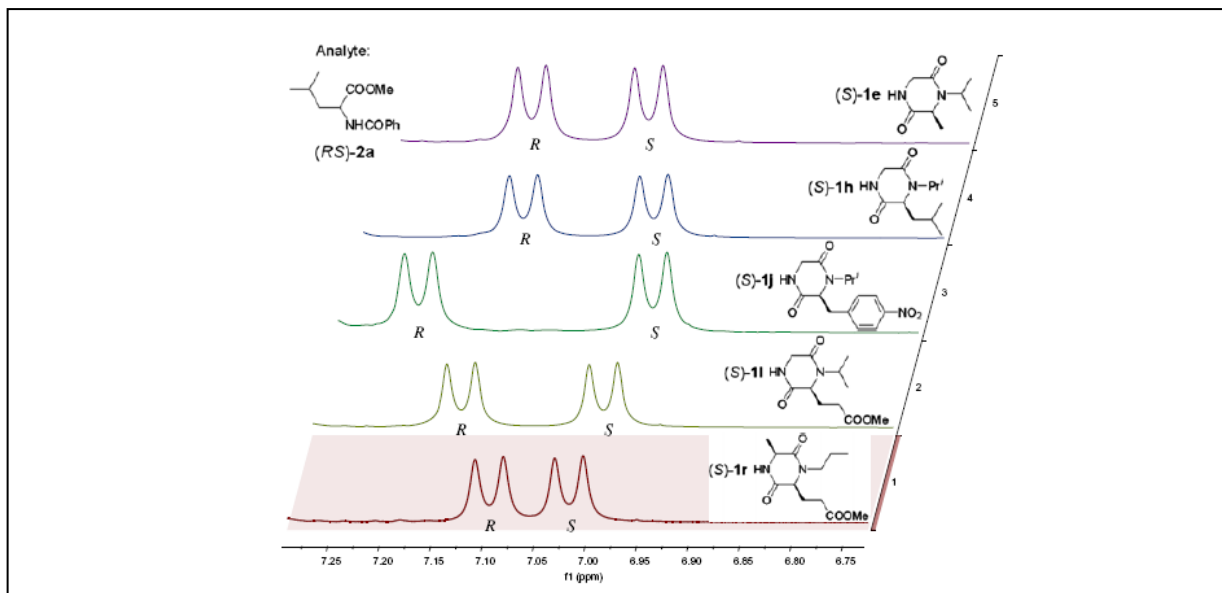


NARAVOSLOVJE

Področje: 1.04 – Kemija



Raziskovalno delo na področju Kemije ima v Sloveniji lepo tradicijo. Rezultati teh naporov so vidni v visoko kvalitetnih in mednarodno odmevnih znanstvenih publikacijah, patentih, visoko izobraženih kadrih, ki predstavljajo kadrovskega potencial za lokalno kemijsko industrijo, na katero je država Slovenija lahko upravičeno ponosna. Poudariti velja zgledno sodelovanje med akademskimi institucijami in raziskovalci v industriji, ki se realizira v številnih RR projektih in v Centrih odličnosti.

Raziskave tečejo na mnogih področjih Kemije in dosegajo odlične rezultate.

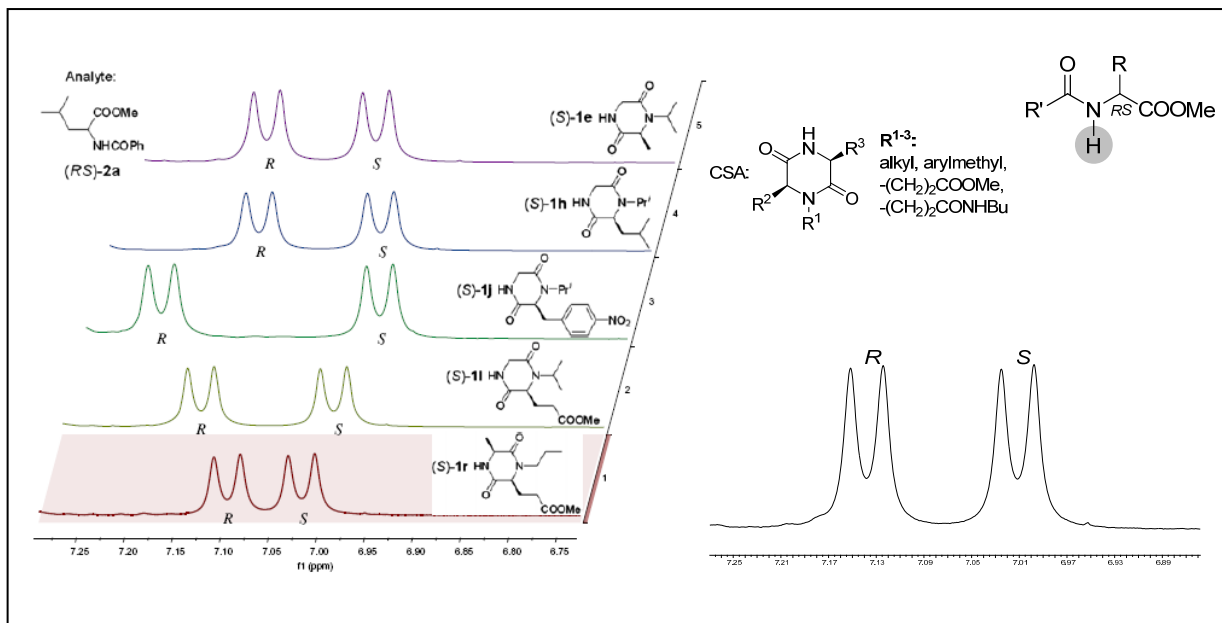
Mednarodna odmevnost raziskav je vsako leto boljša.

Kemiki se vključujemo v interdisciplinarne in mednarodne projekte.

KEMIJA

Področje: 1.04 – Naziv področja

Dosežek 1: 1.01, Vir: Črt Malavašič, Uroš Grošelj, Amalija Golobič, Jure Bezenšek, Branko Stanovnik, Katarina Stare, Jernej Wagger, Jurij Svete, Effect of substituents on chiral solvating properties of (S)-1,6-dialkylpiperazine-2,5-diones. Tetrahedron: Asymmetry 2011, 22, 1364-1371.

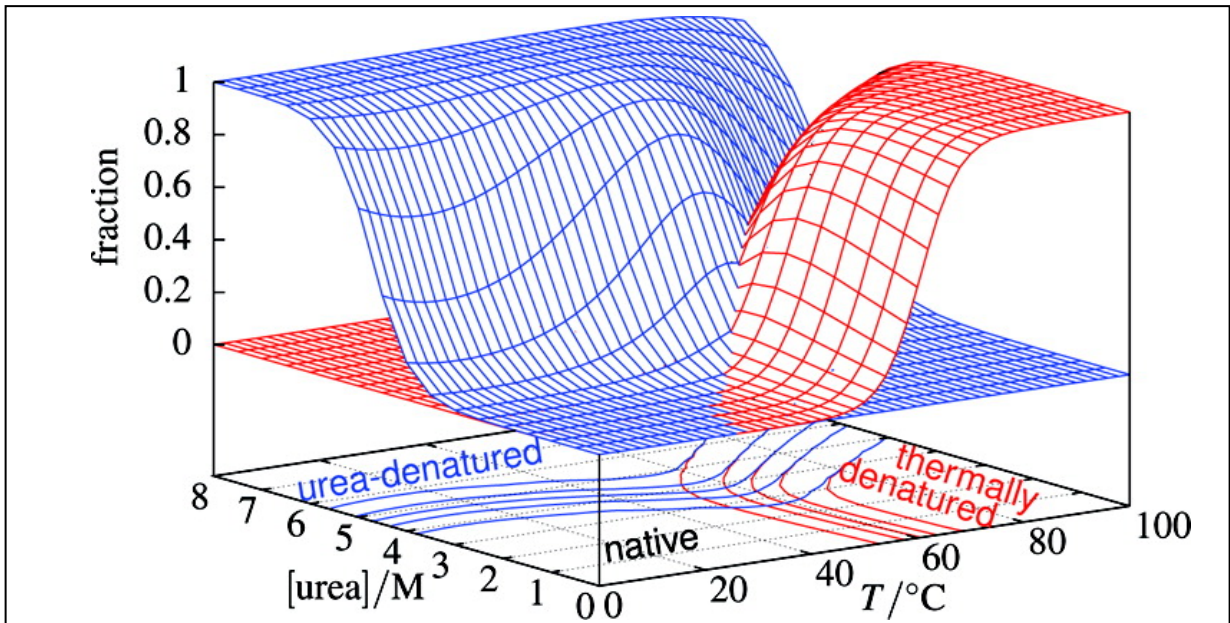


N-Alkylpiperazin-2,5-dioni kot kiralni solvatacijski reagenti v NMR omogočajo določanje razmerja enantiomerov in absolutne konfiguracije pri derivatih α -amino kislin.

KEMIJA

Področje: 1.04 – Naziv področja

Dosežek 1: 1.01, Vir: DROBNAK, Igor, VESNAVER, Gorazd, LAH, Jurij. Model-based thermodynamic analysis of reversible unfolding processes. J. Phys. Chem., B, 2010, vol. 114, no. 26, str. 8713-8722.

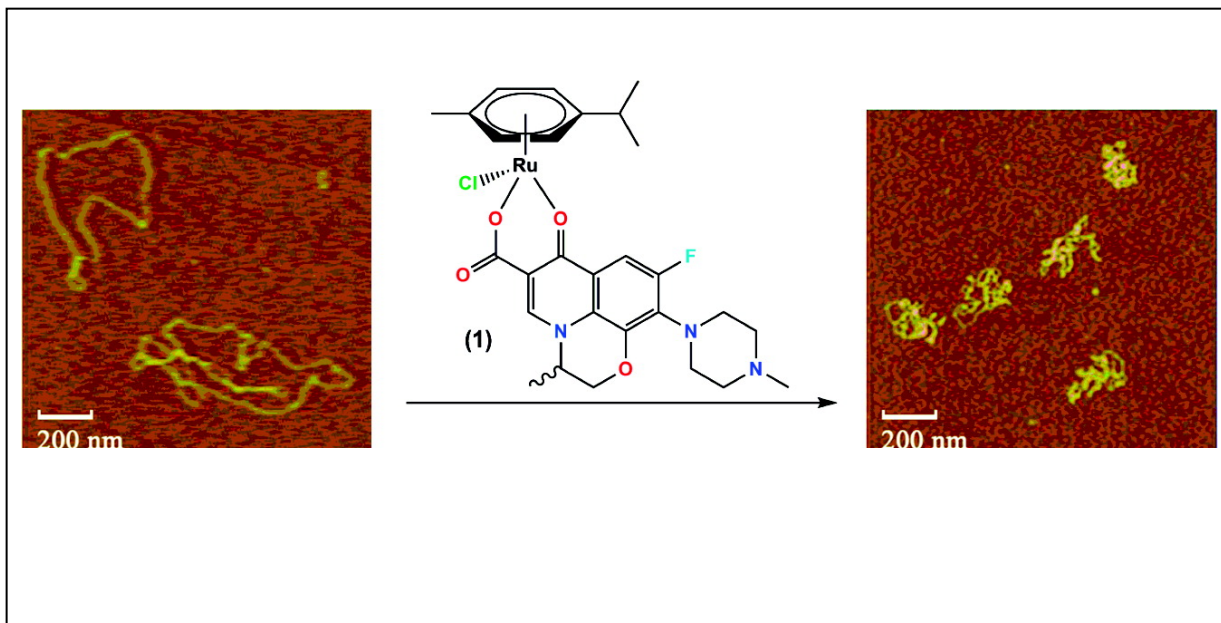


Problem zvitja proteinov in nukleinskih kislin je temeljno vprašanje moderne biokemije in molekularne biologije, ki ga skušamo rešiti tudi s pomočjo fizikalne teorije kot je termodinamika. V tej luči smo v članku prvič splošno pokazali, kako lahko s pomočjo termodinamike ustrezno analiziramo eksperimentalne podatke razvitja oz. zvitja proteinov in nukleinskih kislin ter napovemo obnašanje teh bioloških makromolekul pri različnih pogojih (temperatura, koncentracija makromolekule, koncentracija denaturanta). Izkaže se, da dobimo fizikalno smiselne termodinamske količine razvitja oz. zvitja in s tem napovedi obnašanja molekul, le z istočasno analizo eksperimentalnih podatkov dobljenih pri različnih pogojih z različnim merilnimi tehnikami.

KEMIJA

Področje: 1.04 – Naziv področja

Dosežek 1: 1.01, Vir: TUREL, Iztok, KLJUN, Jakob, PERDIH, Franc, MOROZOVA, Elena, BAKULEV, Vladimir, KASYANENKO, Nina, BYL, Jo Ann W., OSHEROFF, Neil. First ruthenium organometallic complex of antibacterial agent ofloxacin. Crystal structure and interactions with DNA. *Inorg. Chem.*, 2010, vol. 49, no. 23, str. 10750-10752.

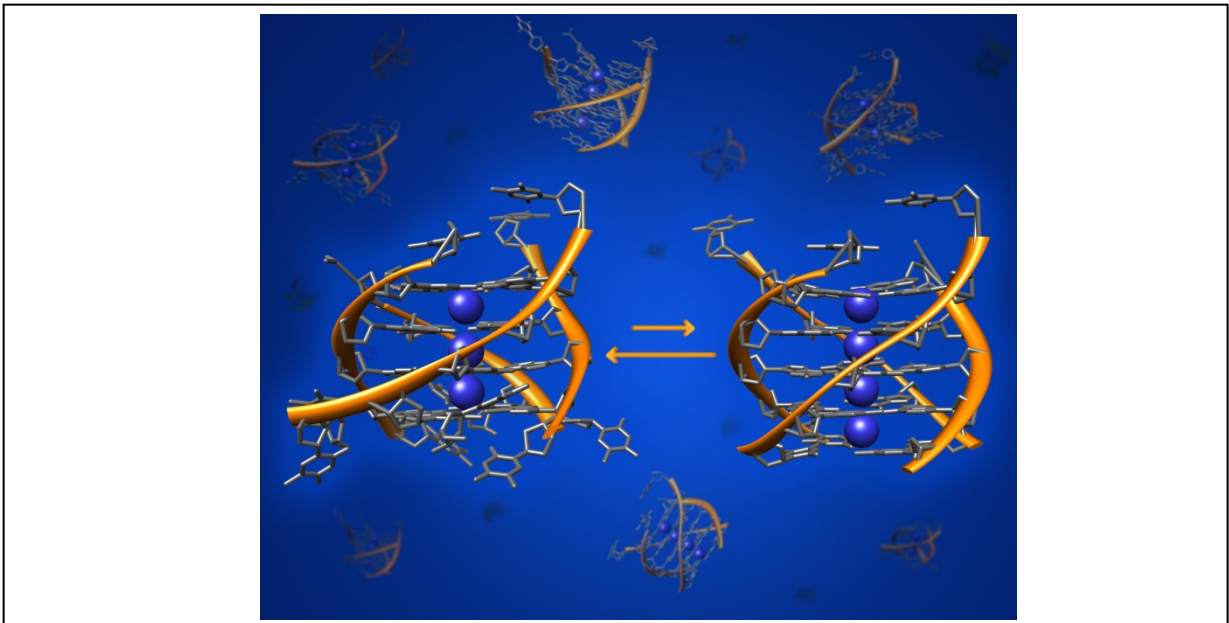


Pripravili in okarakterizirali smo nov organokovinski rutenijev(II) kompleks s protibakterijskim ligandom ofloksacinom. Z različnimi metodami smo potrdili, da kompleks v vodni raztopini hidrolizira, kar omogoči vezavo na biološke makromolekule. Pri vezavi kompleksa na DNK se slednja skrči. Spojina je izkazala zmerno aktivnost v preliminarnih testih biološke aktivnosti.

KEMIJA

Področje: 1.04 – Naziv področja

Dosežek 1: 1.01, Vir: ŠKET, Primož, PLAVEC, Janez. Tetramolecular DNA quadruplexes in solution : insights into structural diversity and cation movement. J. Am. Chem. Soc., 2010, vol. 132, no. 36, str. 12724-12732.



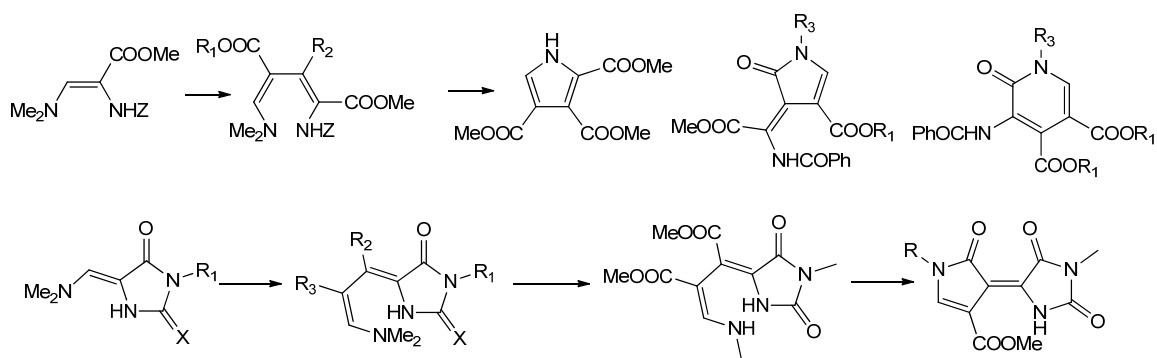
Vedno več eksperimentalnih opažanj kaže, da molekula DNA za opravljanje svojih funkcij poleg splošno znane dvojne vijačnice privzame tudi strukture iz več vijačnic. S pomočjo NMR spektroskopije v raztopini smo pokazali, da oligonukleotid d(TG4T) v nasprotju s splošno privzetim vedenjem, ne tvori ene same strukture v obliki tetramernega G-kvadrupleksa s štirimi paralelnimi verigami. Naša študija je dokazala soobstoj dveh G-kvadrupleksnih struktur, ki sta udeleženi v ravnotežju. Ena od njiju poleg štirih G-kvartetov vsebuje še T-kvartet, ki prej ni bila poznana. Z NMR smo pokazali, da se amonijevi ioni znotraj centralne votline tetramolekularnih G-kvadrupleksov gibljejo cca. 10-krat hitreje kot v dimernih in monomernih G-kvadrupleksih.

Kemija

Področje 1.04: P1-0179:

Termična regiospecifična [2+2] cikloadicija enaminonov na elektronsko revne acetilene. Sinteza polisubstituiranih 1,3-butadienov intermediatov v sintezi heterociklov brez kovinskih katalizatorjev

Pri termični regiospecifični [2+2] cikloadiciji substituiranih 2-amino-3-(dimetilamino)propenatov in drugih enaminonov z elektronsko revnimi acetileni nastanejo polifunkcionalizirani 1-amino-4-(dimetilamino)buta-1,3-dieni kot intermediati pri sintezi polisubstituiranih pirola, azapentalena, triazafulvalena, 2-heteroarilpiridina in njihovih N-oksidov



Uršič, U.; Grošelj, U.; Meden, A.; Svete, J.; Stanovnik B. *Tetrahedron Lett.* 2008, 49, 3775.

Uršič, U.; Svete, J.; Stanovnik, B.; *Tetrahedron* 2008, 64, 9937.

Uršič, U.; Grošelj, U.; Meden, A.; Svete, J.; Stanovnik B. *Helv. Chim. Acta* 2009, 92, 481.

Uršič, U.; Svete, J.; Stanovnik, B.; *Tetrahedron* 2010, 66, 4346.

Bezenšek, J.; Koleša, T.; Grošelj, U.; Waggener, J.; Stare, K.; Meden, A.; Svete, J.; Stanovnik, B. *Tetrahedron Lett.* 2010, 51, 3397.

Bezenšek, J.; Koleša, T.; Grošelj, U.; Meden, A.; Stare, K.; Svete, J.; Stanovnik, B. *Curr. Org. Chem.* 2011, 15, 2530

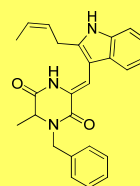
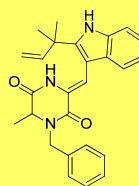
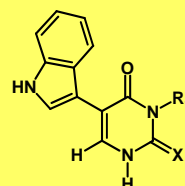
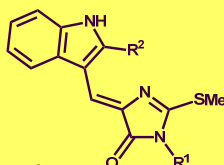
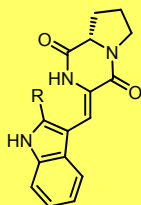
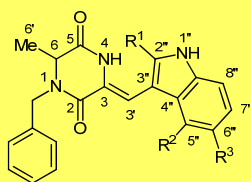
Kemija

1.04: P1-0179

Aplikacija enaminonske metodologije v totalni sintezi indolovih alkaloidov z biološkimi in farmakološkimi delovanji

Kemija 1.04: P1-0179 Aplikacija enaminonske metodologije v totalni sintezi indolovih alkaloidov z biološkimi in farmakološkimi delovanji

- Aplisinopsini in sorodni alkaloidi
- Meridianini in sorodne naravne spojine
- Dipodazini
- Triprostatini, spirotriprostatini A, B
- Neoehinulin in izoneoehinulin

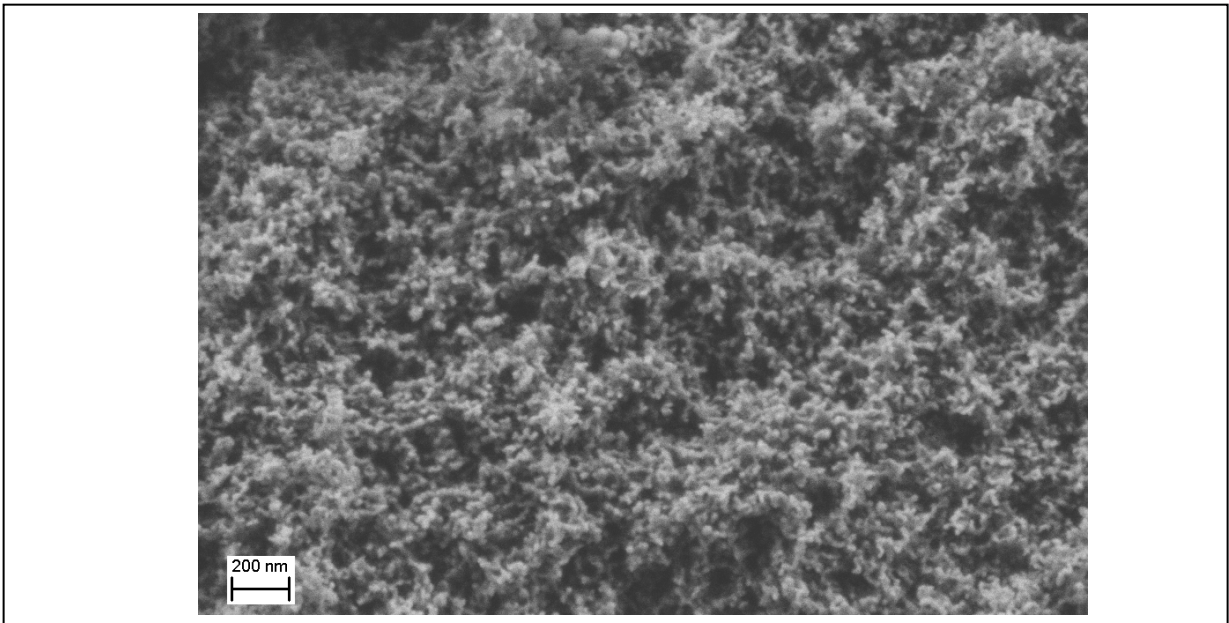


- L. Selič, R. Jakše, K. Lampič, L. Golič, S. Golič-Grdadolnik, B. Stanovnik, *Helv. Chim. Acta*, 2000, 83, 2802
- R. Jakše, S. Rečnik, J. Svete, A. Golobič, L. Golič, B. Stanovnik, *Tetrahedron*, 2001, 57, 8395.
- Z. Časar, D. Bevk, J. Svete, B. Stanovnik, *Tetrahedron* 61, 7508-7519 (2005)
- J. Wagger, D. Bevk, A. Meden, J. Svete, B. Stanovnik, *Helv. Chim. Acta*, 2006, 89, 240.
- J. Wagger, D. Bevk, A. Meden, J. Svete, B. Stanovnik, *Helv. Chim. Acta*, 2006, 89, 240.
- J. Wagger, S. Golič Grdadolnik, U. Grošelj, A. Meden, B. Stanovnik, J. Svete, *Tetrahedron: Asymmetry* 2007, 18, 464-475.
- J. Wagger, U. Grošelj, A. Meden, J. Svete, B. Stanovnik, *Tetrahedron*, 2008, 64, 2801-2815
- J. Wagger, J. Svete, B. Stanovnik, *Synthesis*, 2008, 1436-1442.
- J. Wagger, U. Grošelj, J. Svete, B. Stanovnik, *Synlett* 2010, 1197-1200.

KEMIJA

Področje: 1.04 – Naziv področja

Dosežek 1: 1.01, Vir: NOVAK TUŠAR, Nataša, RISTIĆ, Alenka, MALI, Gregor, MAZAJ, Matjaž, ARČON, Iztok, ARČON, Denis, KAUČIČ, Venčeslav, ZABUKOVEC LOGAR, Nataša. MnO_x nanoparticles supported on a new mesostructured silicate with textural porosity. Chem. Eur. J. 2010, vol. 16, iss. 19, str. 5783-5793



Raziskovanju homogene porazdelitve kovinskih nanodelcev s katalitskimi lastnostmi na inertnih nosilcih se v zadnjem času posveča veliko pozornosti predvsem zaradi njihovega enostavnega recikliranja. V objavi smo opisali v silikatno ogrodje vgrajeni mangan in homogeno imobilizirane MnO_x nanodelce na novem silikatnem poroznem nosilcu. Pri karakterizaciji smo uporabili metode rentgenske absorpcijske spektroskopije na sinhrotronu, NMR in elektronske paramagnetne resonance (EPR). Glede na strukturne značilnosti pripravljenega kompozita, njegove hidrotermalne stabilnosti, netoksičnosti in cenovne ugodnosti, je produkt potencialni katalizator za okolju prijazne aplikacije (npr. razgradnja ozona, katalitska oksidacija organskih onesnaževal, redukcija dušikovega oksida, oksidacija CO).