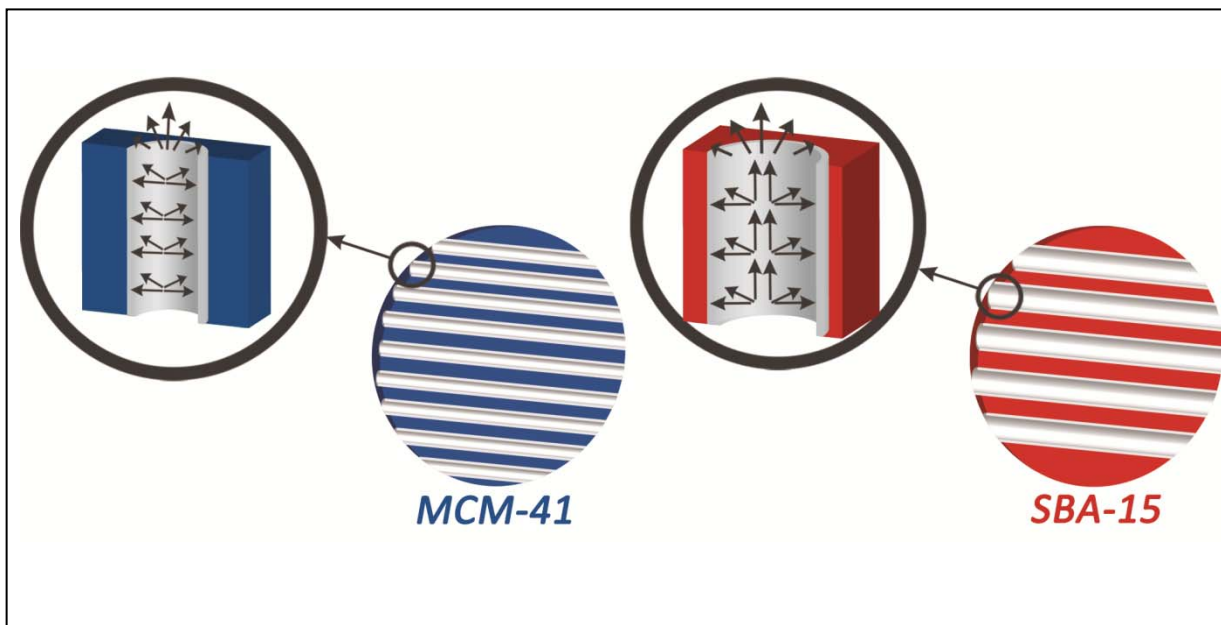


KEMIJA

Področje: 1.04 – Naziv področja

Dosežek 1: 1.01, Vir: UKMAR, Tina, MAVER, Uroš, PLANINŠEK, Odon, KAUČIČ, Venčeslav, GABERŠČEK, Miran, GODEC, Aljaž. Understanding controlled drug release from mesoporous silicates : theory and experiment. J. Control. Release, 2011, vol. 155, issue 3, str. 409-417, ilustr. [COBISS.SI-ID 4727578]

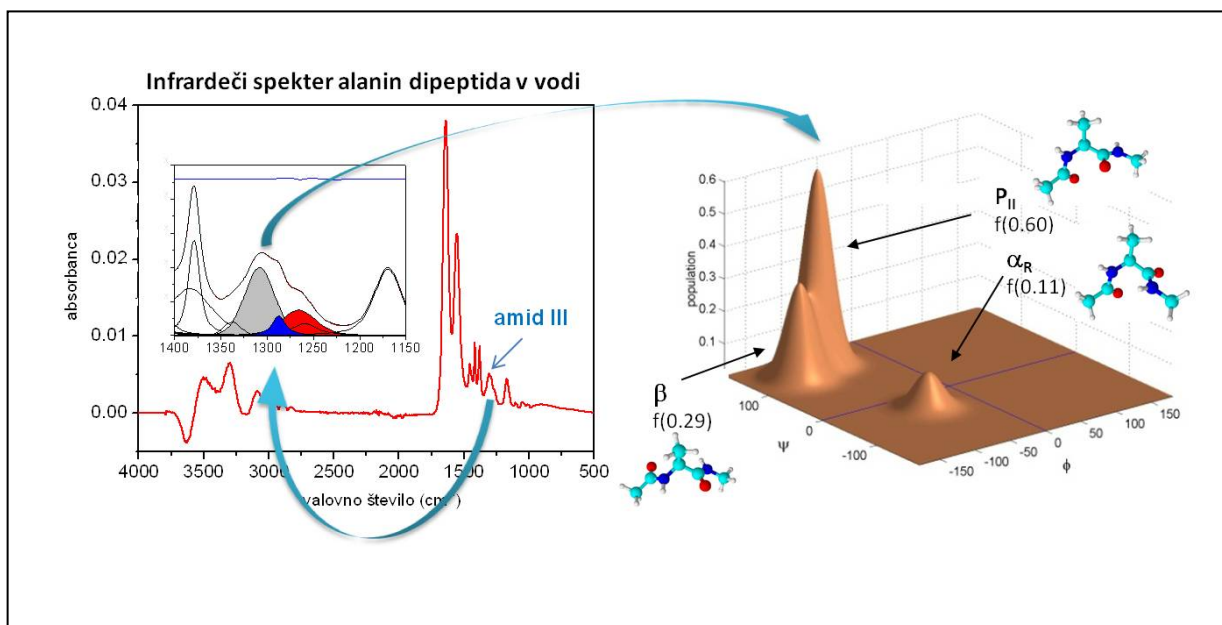


Avtorji so v članku predstavili jasen dokaz, da interakcije učinkovina-ogrodje pomembno vplivajo na profil sproščanja učinkovine iz mezoporoznih materialov. Te interakcije so bile doslej popolnoma zanemarjene. V članku smo jih teoretično napovedali z uporabo 2D Fokker-Planckove enačbe. Eksperimentalno dobljene krivulje sproščanja modelne učinkovine iz mezoporoznih silikatov SBA-15 in MCM-41 se izjemno dobro ujemajo s teoretičnimi napovedmi, če so interakcije učinkovina-ogrodje dovolj močno privlačne. Privlačne interakcije učinkovine s steno vplivajo na relativni presek por, kjer je lokalni pretok vzdolž por različen od nič, in tako določajo efektivni prenos učinkovine v okoliško raztopino. Posledično se iz ogrodja z manjšimi porami učinkovina sprošča počasneje, pri daljših časih pa delež sproščene učinkovine nikoli ne doseže vrednosti, izmerjene pri sproščanju učinkovine iz ogrodja z večjimi porami. Z modelom identificiramo kritične parametre, ki določajo odvisnost hitrosti sproščanja od velikosti por in sestavimo dinamični fazni diagram različnih režimov efektivnega transporta.

KEMIJA

Področje: 1.04 – Naziv področja

Dosežek 1: 1.01, Vir: GRDADOLNIK, Jože, MOHAČEK-GROŠEV, Vlasta, BALDWIN, Robert Lesh, AVBELJ, Franc. Populations of the three major backbone conformations in 19 amino acid dipeptides. Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A., 2011, vol. 108, no. 5, str. 1794-1798. [COBISS.SI-ID 4611098]

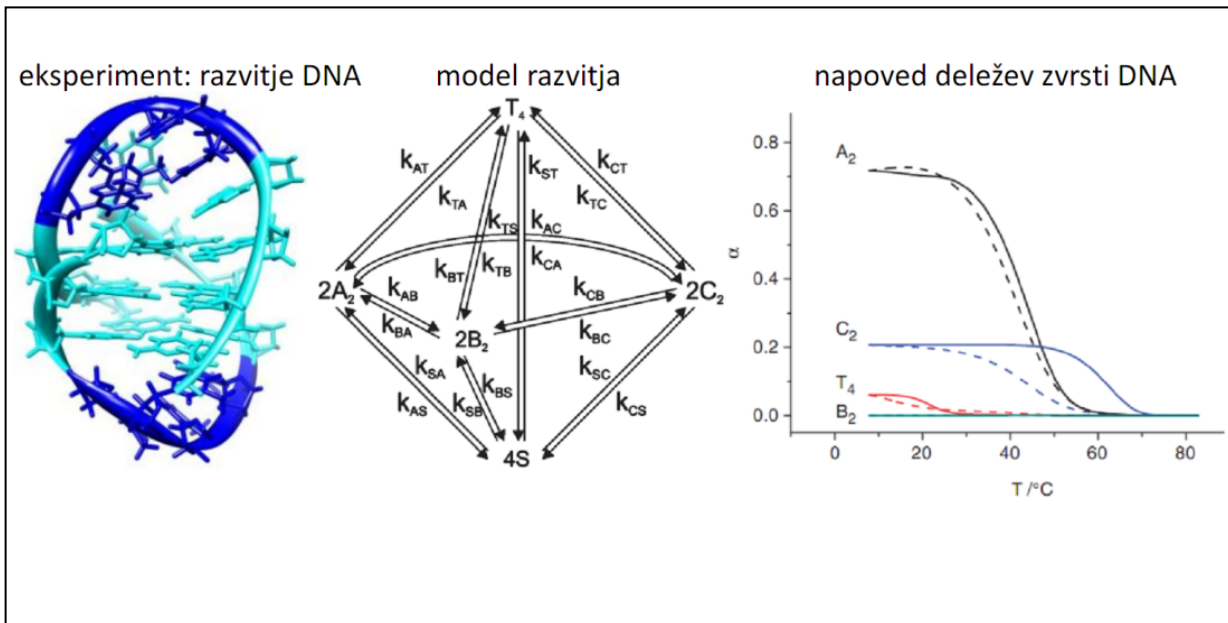


Aminokisliline so osnovni gradniki proteinov. Dipeptidi so molekule z eno aminokislino, ki so blokirane z acetilno in N-metilno skupino. Aminokisliline v dipeptidih imajo podobne strukturne lastnosti kot jih imajo aminokislinski ostanki v proteinih, zato se dipeptidi uporabljajo kot modelne molekule v številnih študijah proteinov. Strukture dipeptidov v vodni raztopini do sedaj niso bile poznane. Raziskovalci Laboratorija za strukturo biomolekul Kemijskega inštituta so z dekompozicijo infrardečega in ramanskega amidnega III območja določili strukture dipeptidov 19 osnovnih aminokislin v vodni raztopini. V skladu z napovedmi Ramachandrana so dokazali obstoj treh konformacij dipeptidov v vodi: P_{II} , β , in α_R . Jan Hermans (eden vodilnih raziskovalcev zvitja proteinov) je v vabljenem komentarju članka poudaril, da so objavljeni rezultati pomemben nov prispevek k razumevanju zvitja proteinov (*»The amino acid dipeptide: small but still influential after 50 years«*, PNAS, 2011, 108, 3095-3096).

KEMIJA

Področje: 1.04 – Naziv področja

Dosežek 1: 1.01, Vir: PRISLAN, Iztok, LAH, Jurij, MILANIČ, Matija, VESNAVER, Gorazd. Kinetically governed polymorphism of d(G4T4G3) quadruplexes in K⁺ solutions. *Nucleic Acids Res.*, 2011, vol. 39, no. 5, str. 1933-1942.

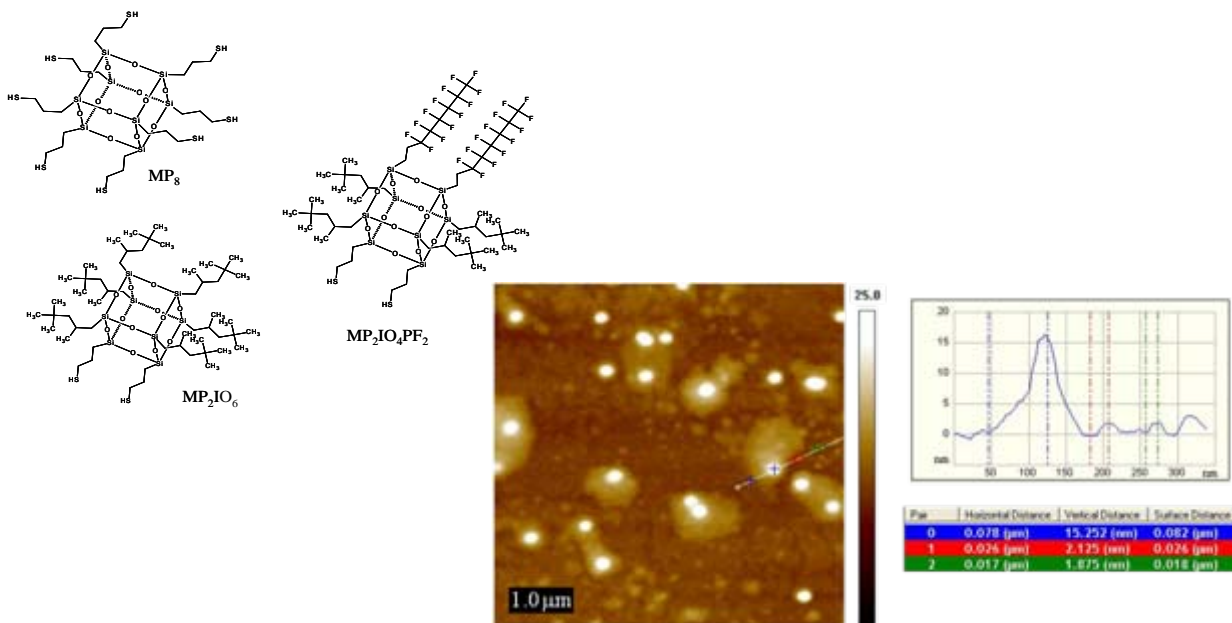


Določeno zaporedje DNA se lahko zvije v več različnih struktur (polimorfizem). Kaj vodi do tega pojava in kakšen je njegov fiziološki pomen, je eno temeljnih vprašanj biokemije in molekularne biologije. Polimorfizem je posebej značilen za zaporedja DNA, bogata z gvanini, ki tvorijo strukture imenovane G-kvadrupleksi. Eksperimentalne podatke o zvitju in razvitju G-kvadrupleksov smo opisali s kinetičnim modelom pretvorb in napovedali deleže različnih zvrsti G-kvadrupleksov kot funkcijo temperature in časa. Naš pristop predstavlja nov način razumevanja polimorfizma DNA.

KEMIJA

Področje: 1.04 – Naziv področja

Dosežek 1: 1.01, Vir: KRAUS-OPHIR, Shlomit, JERMAN, Ivan, OREL, Boris, MANDLER, Daniel. Symmetrical thiol functionalized polyhedral oligomeric silsesquioxanes as building blocks for LB films. *Soft matter*, 2011, vol. 7, iss. 19, str. 8862-8869, ilustr., doi: 10.1039/c1sm05443k. [COBISS.SI-ID 4783642]

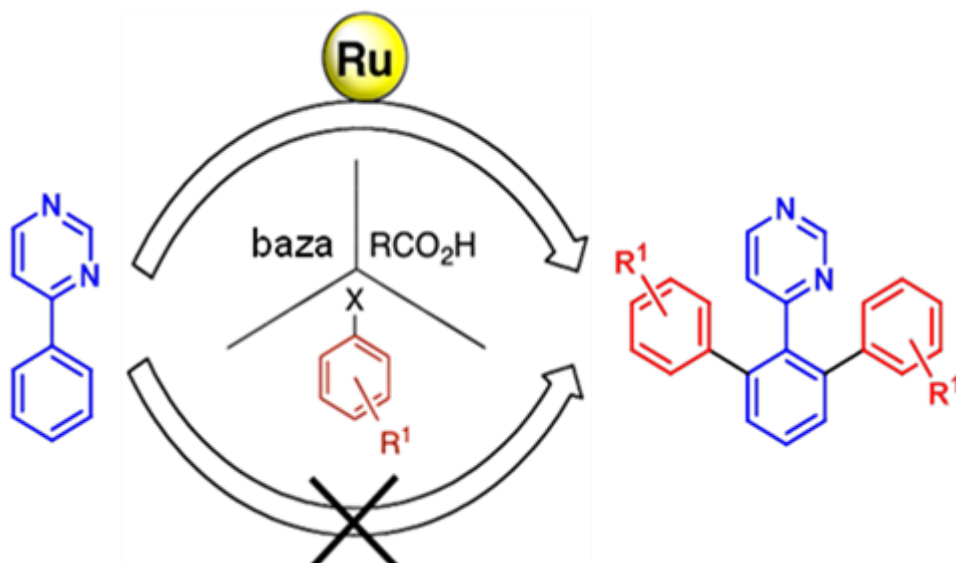


Tanke plasti z debelino od nekaj nm do nekaj 10 nm, je težko narediti s ponovljivimi lastnostmi, vendar Langmuir Blodgettove (LB) tanke plasti omogočajo prav to, zaradi tendence molekul po samourejanju. Metoda deluje odlično z amfifilnimi molekulami, ki se uredijo na kovinskih podlagi v tesno plast, katere zunanji del služi kot podlaga za nanos dodatnih (debelejših) plasti. Veliko gostoto in urejenost pridobijo LB plasti zaradi tendence amfifilnih molekul po urejanju na meji med vodo in zrakom, kar je termodinamsko bolj ugodna ureditev, kot v primeru urejanja molekul v raztopinah. Raziskovalci so kot prvi pokazali, da LB tanke plasti tvorijo tudi poliedrični oligomerni silseskvioksani (POSS), ki so jih sintetizirali v laboratoriju po hidrotermalnih postopkih. POSS se odlikujejo po majhnem volumnu in polifunkcionalnosti, ki jo pridobijo vsled prisotnih organskih skupin nameščenih na ogliščih silseskvioksanske kocke (T_8 POSS). Za tri izbrane POSS molekule- dve z amfifilnimi lastnostmi in eno simetrično- so pokazali, da simetrične merkaptofunkcionalizirane MP_8 POSS molekule (na levi sliki) tvorijo izredno stabilne, elektronsko prevodne in robustne LB plasti, ki omogočajo vezavo Au nanodelcev (Au-Nanoparticles, Au-NPs) na podlago, pri čemer razdaljo vezave Au nanodelcev uravnavamo z izbranimi merkapto MP_8 POSS molekulami. S tem je omogočena priprava večplastnih LB slojev, uporabnih za izdelavo elektrokemijskih senzorjev (na desni sliki).

KEMIJA

Področje: 1.04 – Naziv področja

Dosežek 1: 1.01, Vir: ŠTEFANE, Bogdan, FABRIS, Jan, POŽGAN, Franc. C-H bond functionalization of arylpyrimidines catalyzed by an in situ generated ruthenium(II) carboxylate system and the construction of tris(heteroaryl)-substituted benzenes. European journal of organic chemistry, 2011, no. 19, str. 3474-3481. [COBISS.SI-ID 35023109.



Klasični pristop za funkcionalizacijo organskih molekul zajema pretvorbe že obstoječih funkcionalnih skupin, kar velikokrat zahteva uporabo ostrih reakcijskih pogojev, večstopenjskih reakcij in velike količine reagentov. Po drugi strani pa direktna funkcionalizacija C–H vezi, katalizirana s kovinami prehoda, predstavlja enostavno, atomsko učinkovito in okolju prijaznejšo metodologijo za pripravo kompleksnih organskih molekul. V objavi smo opisali *in situ* tvorbo in uporabo novega rutenij(II)-karboksilata kot učinkovitega katalizatorja za direktno ariliranje arilpirimidinov. Ta katalizator v prisotnosti šibke baze aktivira C–H vezi na benzenovem obroču fenilpirimidinov. Pri tem nastanejo reaktivni organokovinski intermediati, ki nadalje enostavno reagirajo z različnimi aril in heteroaril halidi, pri čemer nastanejo multiarilni sistemi.