



## Teme za doktorsko štipendijo Janka Jamnika za perspektivno mlado raziskovalko ali raziskovalca s področja kemije in sorodnih ved za leto 2020

Naslov teme	Kratka vsebina	Mentor	Odsek
Pretvorba ogljikovega dioksida v monomere	Dandanes se glavni gradniki plastike ali gume (eten, propen, butadien...) pridobivajo iz nafte. Vsebina doktorskega dela bi zajemala pretvorbo CO <sub>2</sub> do monomerov, in sicer s pomočjo razvoja katalizatorjev, kemijskega reakcijskega inženirstva in modeliranja.	Blaž Likozar	D13/D09
Foto-katalitska priprava bio-osnovanih zelenih spojin	Danes se večina snovi proizvede iz surovin fosilnega izvora z uporabo potratnih postopkov, foto-kataliza pa temelji na rabi sončne energije, ki bi jo uporabili za pretvorbo bio-osnovanih spojin iz biomase.	Blaž Likozar	D13/D09
Postopki elektro-katalitske pretvorbe CO <sub>2</sub>	CO <sub>2</sub> poleg biomase predstavlja edini trajen vir ogljikovih surovin, danes pa se ga pretvarja do npr. metanola, sečnine..., za kar potrebujemo vodik, ki se ga pridobiva z elektrolizo - neposredna elektro-katalitska pretvorba omogoča znatno izboljšavo.	Blaž Likozar	D13/D10
Kombinirani termo-foto katalitski procesi za valorizacijo C1 spojin (CO, CO <sub>2</sub> in CH <sub>4</sub> )	Kombinirani termo-foto katalitski procesi predstavljajo obetajoč način za valorizacijo C1 spojin (CO, CO <sub>2</sub> in CH <sub>4</sub> ) v reakcijah (R)WGS, reforming (parni in suhi) in hidrogenacija pri milih reakcijskih pogojih - Sinteza in karakterizacija ustreznih katalizatorjev z aktivnimi mesti ki omogočajo planirane kemijske pretvorbe in učinkovito absorpcijo vidne svetlobe. - Izgradnja ustreznega fotokatalitskega reaktorja in opis njegovega delovanja. - Fotokatalitski testi in povezava strukturnih/kemijskih lastnosti s katalitskimi.	Petar Djinović	D09/D13



Naslov teme	Kratka vsebina	Mentor	Odsek
Razvoj in študij aktivnosti in stabilnosti elektrokatalizatorjev za reakcijo oksidacije vode	Elektrokemija bo imela v prihodnosti pomembno vlogo pri izkoriščanju obnovljivih virov energije, predvsem pri pretvorbi in shranjevanju električne v kemično energijo in kasnejšo pretvorbo kemične energije nazaj v električno. Za razvoj tovrstne tehnologije so potrebni učinkoviti elektrokatalizatorji. Cilj dela bo razumevanje aktivnosti in stabilnosti elektrokatalizatorjev za reakcijo oksidacije vode.	Nejc Hodnik	D10/D13
Sinteza in napredna študija aktivnosti, stabilnosti in selektivnosti elektrokatalizatorjev za pretvorbo atmosferskega dušika (elektrokemijska fiksacija N <sub>2</sub> ) in sorodnih reakcij v kemikalije z dodano vrednostjo	Globalna energetska kriza in posledične podnebne spremembe bodo prisilile svetovne voditelje, da ustavijo porabo fosilnih goriv. Očitna dolgoročna rešitev je izbrati nekaj, kar ne povzroča škode za okolje in je na voljo brezplačno; kot je recimo sončna energija. Tako bo veliki izziv prihodnosti, kjer bo vse elektrificirano, konverzija oziroma shranjevanje presežne sončne energije (veteran energija je posledica sonca). Poleg elektrolize vode in elektroredukcije CO <sub>2</sub> se tu ponuja še elektrokemijska pretvorba atmosferskega dušika, ki predstavlja 78 % zraka, v spojine z dodano vrednostjo ter s tem potencialno nadomesti Haber–Bosch proces.	Nejc Hodnik	D10/D13
Elektrokemično recikliranje plemenitih kovin na okolju prijazen način	Plemenite kovine (zlato, platina, paladij, rodij, itd.) so velikega pomena za proizvodnjo naprednih tehnologij kot so električna, elektronska in medicinska oprema ter katalizatorji. Deklarirane so kot kritične surovine saj jih je v naravi izjemno malo (prihajajo iz vesolja). V prihodnosti bo potrebno najti okolju prijazen način za vzpostavitev krožnega gospodarstva. Z razvojem naprednih elektrokemijskih metod (sklopitev ICP-MS, kromatografije, spektroskopija, elektronska mikroskopija, itd.) se bo pridobilo novo fundamentalno znanje o raztapljanju teh kovin.	Nejc Hodnik	D13/D10/D04



Naslov teme	Kratka vsebina	Mentor	Odsek
Načrtovanje in napredna karakterizacija potoelektrokemičnih katalizatorjev za produkcijo goriv	Čista, trajnostna in okolju prijazna energija predstavlja globalni znanstveni izziv. Neposredno izkoriščanje sončne svetlobe, največjega obnovljivega vira, ponuja obetavno smer, saj lahko sončno energijo pretvori direktno v vodik in CO <sub>2</sub> v koristne ogljikovodike. V tem projektu se bodo že znani in na novo oblikovani katalizatorji testirali z naprednimi karakterizacijskimi tehnikami. Pridobljeno znanje bo vodilo v poglobljeno fundamentalno razumevanje ter s tem v izboljšavo katalizatorjev.	Nejc Hodnik	D13/D10/ D04
Dizajniranje novih materialov za čiščenje zraka	Delci v ozračju (PM) so nevarni predvsem za naše zdravje, škodujejo pa tudi kulturni dediščini in povzročajo podnebne spremembe. Natančno bomo proučili interakcije PM delcev iz ozračja z različnimi površinami in načrtovali nove, cenovno dostopne materiale z izrazitimi lastnostmi za čiščenje zraka na energetsko učinkovit način.	Ana Kroflič	D04/D10
Onesnaženje ozračja: PM, NO <sub>x</sub> in rjavi ogljik	Delci v ozračju (PM) so trenutno okoljski problem številka ena. Rjavi ogljik – absorbirajoči del atmosfernih aerosolov med drugim vpliva na absorpcijske lastnosti ozračja in s tem na vidljivost, ekosistem in najpomembneje, podnebne spremembe (efekt tople grede). Zanimajo nas identiteta, izvori ter sekundarni nastanek in staranje delcev v ozračju, ter seveda njihovi vplivi na lokalni in globalni ravni.	Ana Kroflič	D04/D13
Sinteza funkcionalnih polimerov za biomedicinske aplikacije	S polimerizacijo z odpiranjem obroča različnih heterocikličnih monomerov v kombinaciji s polimerizacijskimi modifikacijami bomo pripravili funkcionalne polimere, ki bodo primerni za uporabo v biomedicinskih aplikacijah.	David Pahovnik	D07/D11
Metoda dvojne pasivacije z galvansko izmenjavo za elektrokatalizatorje iz platinskih zlitin visoke zmogljivosti	PEM gorivne celice ponujajo čisto alternativo motorjem z notranjim izgorevanjem, tako da vodik in kisik pretvarjajo v čisto elektriko. V tem okviru igra najpomembnejšo vlogo elektrokatalizator, ki temelji na platinskih zlitinah. Z uporabo v našem laboratoriju razvite metode dvojne pasivacije z galvansko izmenjavo se bo raziskovalna tema osredotočila na inženiring procesa dvojne pasivacije in razvoj reaktorja za doseganje visoko zmogljivih elektrokatalizatorjev iz platinskih zlitin na visoki skali	Matija Gatalo	D10/D13



Naslov teme	Kratka vsebina	Mentor	Odsek
Dinamični model človeške dna topoizomeraze I $\alpha$ in razvoj novih katalitičnih inhibitorjev kot protirakavih učinkovin	V sklopu raziskav doktorske disertacije bomo najprej uporabili metode molekularnih simulacij v kombinaciji z biokemijskimi eksperimenti in študirali mehanistično delovanje molekularnega motorja človeške DNA topoizomeraze II $\alpha$ . Nadalje bomo načrtovali in okarakterizirali nove katalitične inhibitorje topo II $\alpha$ , ki bi se vezali ATP vezavno mesto na ATPazni domeni in bili primerni za nadaljnji predklinični razvoj. Tak pristop predstavlja novo alternativno paradigmo inhibicije topo II $\alpha$ , ki lahko vodi do varnejših protirakavih terapij.	Andrej Perdih	D01/D11
Študij prostorskih struktur DNK zaporedij v območjih s pogostejšim kolapsom replikacijskih vilic	Podvojevanje DNK se na regijah s ponavljajočimi zaporedji bogatimi s purinskimi preostanki ustavi pogosteje, kar je pomembno v kontekstu osnovnih celičnih mehanizmov in za razvoj bolezenskih stanj. Razpisana tema odgovarja na potrebo po strukturni karakterizaciji nenavadnih struktur DNK, kot poglavito orodje pa je predvidena NMR spektroskopija, ene najpomembnejši metod za vpogled v biomolekule z atomsko ločljivostjo.	Marko Trajkovski	D15/D11/ D12
Iskanje boljših katalizatorjev z modeliranjem: epoksidacija alkenov.	Modeliranje kemijski reakcij in reaktorjev je v zadnjem desetletju izredno napredovalo in omogoča teoretično napovedovanje reakcijskih mehanizmov. S tem pristopom bomo računalniško prečesali periodni sistem in predlagali boljši katalizator za reakcijo epoksidacije alkenov, potem pa ga tudi eksperimentalno ovrednotili.	Matej Huš	D13/D09
Izvor entropije	Pri okoljsko pomembnih reakcijah v atmosferi entropija igra odločilno vlogo. Teoretično (kvantna molekularna dinamika, statistična termodinamika) in eksperimentalno (fotoliza z laserskim žarkom) bomo proučili termodinamiko reakcij v atmosferskih aerosolih, ki so največji onesnaževalci okolja.	Matej Huš	D13/D04
Valorizacija lignina v ciljne aromatske produkte	Lignin je sestavni del lignocelulozne biomase, predstavlja edini tranžen vir za različne aromatske spojine, ki so lahko tudi gradniki za bio-osnovane polimere. Pri razvoju prilagojene metode za izolacijo in frakcionacijo lignina je ključno kvantitativno NMR vrednotenje različnih funkcionalnih skupin in glavnih motivov v strukturi biopolimera. Kombinacija prilagojene izolacije, frakcionacije ter katalitske depolimerizacije predstavlja način za pridobivanje aromatskih spojin s ciljnim lastnostmi.	Edita Jasiukaityte Grojzdek	D13/D15



Naslov teme	Kratka vsebina	Mentor	Odsek
Razvoj katalitskih procesov v bio-rafineriji	Razvoj in optimizacija katalizatorjev ter procesov za učinkovito pretvorbo biomase v kemikalije z visoko dodano vrednostjo so izjemnega pomena pri načrtovanju bio-rafinerije, katere postavitev se obeta tudi v Sloveniji.	Miha Grilc	D13/D10/D04
Opredelitev na STAU1-vezanih ribosomskih podkompleksih s pomočjo transkriptomike in krioelektronske mikroskopije	V človeških celicah obstaja več podtipov ribosomov, ki se razlikujejo po svoji sestavi in lahko izvajajo specilizirane funkcije pri uravnavanju sinteze proteinov. Pripravili bomo ribosome v kompleksu s proteinom STAU1 in mRNA, kar bo omogočilo določitev strukture s krioelektronsko mikroskopijo in odkritje principov vezave STAU1 na ribosom. S tehniko merjenja odtisov ribosomov (»ribosome footprinting«), ki so vezani na STAU1, bomo izmerili zasedenost kodonov v mRNA. Pridobljeno znanje bo omogočilo vpogled v mehanizme uravnavanja translacije preko STAU1, ki je povezan z nevrodegenerativnimi obolenji. Več: <a href="http://www.ulelab.info">www.ulelab.info</a>	Miha Milek	D11/D13
Študija tvorbe trdnega elektrolitskega filma (SEI) v post-Li-ion anodnih (Na, Mg, Ca) akumulatorskih materialih	Z elektrokemijo (v simetričnih in klasičnih celicah), spektroskopijo (operando, in-situ ex-situ) in mikroskopijo se bo raziskoval nastanek trdnih elektrolitskih filmov (SEI) na površinah različnih post Li-ion anodnih materialov (Na, Mg, Ca). Za akumulatorje naslednje generacije je ključnega pomena poznavanje reakcijskega mehanizma nastanka in kemijske sestave SEI, saj se bo preko tega izboljšala stabilnost in varnost na novo razvitih sistemov.	Alen Vižintin	D10/D01/D09
Senzorji za diagnostiko v Li-ion akumulatorjih	Raziskovalo se bo senzorje na osnovi tiskanega vezja (na osnovi črnih iz ogljikovih materialov: CNT, grafen) na separatorju za določanje elektrolitskih degradacijskih spojin (npr. CO <sub>2</sub> ) ali senzorjev v ali na zunanosti akumulatorja na osnovi optičnih vlaken preko katerih bi se sledilo segrevanje ali povečanje tlaka celic, povečanje notranje upornosti in lastnosti SEI-ja v Li-ionskih akumulatorjih. Pripravljene senzorje se bo testiralo v akumulatorjih (npr. NMC katoda, grafit anoda) pri različnih tokovnih gostotah v realnem načinu časa.	Alen Vižintin	D10/D04/D13



Naslov teme	Kratka vsebina	Mentor	Odsek
Organska elektrosinteza	Raziskovalna tematika se bo spoprijela s področjem organske elektrosinteze. Z uporabo elektrokatalizatorjev bomo poizkušali selektivno sintetizirati relevantne organske spojine. Naš cilj bo ponuditi alternativo konvencionalnim, dragim in okolju nevarnim redoks sistemom, ki se sicer trenutno uporabljajo pri klasični organski sintezi.	Primož Jovanovič	D13/D10/D04
Baterije na osnovi organskih redoks materialov	Raziskovalec/-ka bo sintetiziral nove organske in polimerne redoks aktivne materiale z visokimi teoretičnimi energijskimi gostotami. Te materiale se bo najprej testiralo v trielektrodni celici, najbolj perspektivne pa še v Li-, Na- in Mg baterijskih sistemih. Pri tem bomo uporabljali metode kot so ciklična voltometrija, galvanostatske meritve ter ostale napredne tehnike, kot so operando IR spektroskopija, elektrokemijska impedanca, itd.	Klemen Pirnat	D10/D07/D01
Modeliranje in simulacije v farmacevtski industriji	S slovensko farmacevtsko industrijo se že vrsto let spopadamo z realnimi izzivi v njihovem razvoju in proizvodnji. Kandidat bi se vključil na področjih: Matematično modeliranje fizikalno-kemijsko pojavov in snovnih ter energijskih bilanc za načrtovanje in optimizacijo v (bio)farmacevtskih raziskavah. Modeliranje sinteze aktivnih snovi in pripadajočih mehanizmov z vključevanjem ravnotežja in transportnih pojavov (z D11). Modeliranje kristalizacije z metodo populacijskih bilanc. Načrtovanje obratovanja reaktorjev z uporabo računske dinamike tekočin (CFD) z odprtokodnim programom OpenFOAM in z lastnimi programi.	Andrej Pohar	D13/D11
Fotokatalitska oksidacija organskih onesnažil v odpadni vodi z uporabo plazmonekega efekta v naprednih oksidacijskih postopkih	Cilji doktorskega dela so: sinteza novih naprednih katalizatorjev na osnovi TiO <sub>2</sub> in plazmoneke kovine (PK) namenjenih za čiščenja odpadnih voda z naprednimi oksidacijskimi postopki z uporabo vidne svetlobe; preučiti vpliv različnih dejavnikov (npr. velikosti delcev PK, itn.) na fotokatalitične lastnosti TiO <sub>2</sub> +PK; karakterizacija TiO <sub>2</sub> +PK ter določevanje kvantitativnih strukturno-aktivnostnih in strukturno-selektivnostnih odvisnosti (QSAR); razvoj postopka za imobilizacijo TiO <sub>2</sub> +PK za uporabo v pretočnih reaktorskih sistemih; določitev učinkovitosti oksidacijskega postopka z določanjem konverzij onesnažila in koncentracij reakcijskih intermediatov.	Gregor Žerjav	D09/D06



Naslov teme	Kratka vsebina	Mentor	Odsek
Od proizvodnje do uporabe trajnostnih bioosnovanih evtektičnih topil iz bioplastike	Polihidroksialkanoati (PHA) predstavljajo bioosnovano bioplastiko, ki jo zlahka proizvajajo bakterije in nedavno so odkrili, da se lahko uporabljajo kot naravna sestavina za pripravo evtektičnih topil (DES), to so alternativna in biokompatibilna topila z izboljšanimi lastnostmi za katalizo in čiščenje, in jih je mogoče prilagoditi za posebne namene. Tema je namenjena razvoju trajnostne platforme za proizvodnjo in uporabo naravnih DES iz bioplastike za čiščenje izdelkov z visoko dodano vrednostjo. Delo in mentoriranje bo potekalo v angleščini.	Filipa A. Vicente	D13/D10
Kemijsko katalitska pretvorba celuloze in sladkorjev v industrijsko pomembne monomere	Zaradi vse večjih okoljskih regulativ tudi kemijska industrija išče rešitve v alternativnih surovinah. Predlagana tematika obsega kemijsko pretvorbo celuloze ter sladkorjev v industrijsko pomembne monomere, npr. bifunkcionalne alifatske alkohole in kisline. Delo bo obsegalo razvoj katalizatorjev, trajnostnih procesov ter analitskih metod za kvalitativno in kvantitativno vrednotenje procesov.	Brigita Hočevar	D13/D04/ D10
Razvoj tankoplastnih solarnih celic za reševanje globalnega energetskega problema	Zaradi naraščajočih energetskih potreb in vedno večje želje po zeleni družbi, današnji svet nujno potrebuje razviti in implementirati učinkovite solarne tehnologije. Tankoplastne solarne celice, med katere uvrščamo tudi perovskitne in organske solarne celice, so tehnologije prihodnosti, ki na zelen in cenovno ugoden način generirajo energijo. Namen doktorskega dela bo razvoj materialov in tehnologij za pripravo tankoplastnih perovskitnih in organskih solarnih celic. Cilj je poiskati optimalni set materialov in tehnologij za izgradnjo solarnih celic, ki izpolnjujejo kriterije kot so cenovna sprejemljivost, visoka učinkovitost in stabilnost.	Žiga Štirn	D10/D01



Naslov teme	Kratka vsebina	Mentor	Odsek
Arhitektura in mehanizem nastanka celičnih RNA kondenzatov in njihov pomen v celični diferenciaciji	Celična kompartmentalizacija RNA določa njihovo funkcionalnost v celici in večkrat so te strnjene v fazno-ločenih predelih, kjer kondenzirajo RNA vezavne proteine. Z združevanjem tehnik sintezne biologije (Jerala) in omskih tehnologij (Ule) v zarodnih matičnih celicah bo kandidat/ka razjasnil/a arhitekturo RNA kondenzatov in njihovo vlogo v celičnih procesih in razvoju. Kandidat/ka bo razvil/a in uporabil/a CRISPR-dCas13 kompleks kot molekularno orodje za uravnavanje proteinske vezave na lncRNA ter ciljan vpogled v sestavo biomolekularnih kondenzatov, v nadaljevanju pa bo ob njihovem tarčnem moduliranju uravnaval/a potek celične diferenciacije.	Miha Modic	D11/D12
Elektrokemijska redukcija ogljikovega dioksida na enoatomskih katalizatorjih	Ogljikov dioksid (CO <sub>2</sub> ) velja za najbolj razvpit toplogredni plin, ki ga sproščajo naravni in industrijski procesi. Elektrokemijska reakcija redukcije CO <sub>2</sub> (CO <sub>2</sub> -RR) je elegantna pot za pretvorbo presežka atmosferskega CO <sub>2</sub> v koristne kemikalije in goriva. Kljub velikemu zanimanju raziskovalne skupnosti je zrelost te tehnologije še vedno daleč od komercialnih aplikacij, predvsem zaradi slabe učinkovitosti in stabilnosti razpoložljivih elektrokatalizatorjev. Jedro tega projekta je razviti naslednjo generacijo učinkovitih in stabilnih enoatomskih katalizatorjev za CO <sub>2</sub> -RR.	Milutin Smiljanić	D10/D13
Razvoj analitike za določevanje bilirubina in biliverdina	Bilirubin in biliverdin sta katabolična razpadna produkta hema, vendar v človeškem organizmu igrata pomembno vlogo, saj sta verjetno dva najpomembnejša mediatorja pri odgovoru na celični oksidativni stres. Razvili bomo analizo platformo na podlagi separacijskih in spektroskopskih tehnik za natančno merjenje prostega bilirubina, biliverdina in njunih oksidacijskih produktov znotraj različnih bioloških matric (serum, slina, idr.). S pomočjo teoretičnih računskih pristopov bomo določili nekatere še nedefinirane fizikalno-kemijske lastnosti teh prostih pigmentov, ki bodo v pomoč pri razvoju analiznih metod ter pri bioloških interpretacijah.	Alen Albreht	D06/D01





Naslov teme	Kratka vsebina	Mentor	Odsek
Razumevanje adsorpcije toplogrednih plinov v nanoporoznih kompozitih	Nekateri kovinsko-organski porozni materiali (MOFi) imajo sposobnost vezave velikih količin toplogrednih plinov in so velik industrijski potencial za zniževanje ogljičnega odtisa. Omejitve MOFov, kot so počasna kinetika molekul plina skozi mikropore, nižja hidrotermalna stabilnost in majhne dimenzije kristalov, bomo v predlaganem projektu poskusili odpraviti s pripravo hibridnih materialov, tj. vgradnjo MOFov v makroporozna organska ogrodja. Za študije interakcij med vgrajenimi MOFi in organskim ogrodjem ter za študije vezavnih mest plinov v notranjosti hibrida bomo razvili in uporabili napredne metode jedrske magnetne resonance v trdnem.	Andraž Krajnc	D09/D07