

Opis delovnega mesta mladega raziskovalca/ke (*Description of the Young Researcher's position*)

1. Članica UL (*UL member*):

Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo

2. Ime, priimek in elektronski naslov mentorja/ice (*Mentor's name, surname and email*):

Romana Cerc Korošec, romana.cerc-korosec@fkkt.uni-lj.si

3. Raziskovalno področje (*Research field*):

Kemija

4. Opis delovnega mesta mladega raziskovalca/ke (*Description of the Young Researcher's position*):

Vključuje morebitne dodatne pogoje, ki jih mora izpolnjevati kandidat/ka za mladega raziskovalca/ko, ki niso navedeni v razpisu za mlade raziskovalce.

slo: Kandidat/ka bo deloval/a na področju anorganske kemije - sinteze novih materialov za okoljske aplikacije, njihove karakterizacije ter določevanju učinkovitosti le-teh. Kandidat/ka mora obvladati osnovne veščine, znanja in tehnike iz področja kemije.

eng: The candidate will work in the field of inorganic chemistry - synthesis of new materials for environmental applications, their characterization and determination of their efficiency. It is expected that the candidate has basic skills, knowledge and techniques in the field of chemistry.

Opis delovnega mesta mladega raziskovalca/ke (*Description of the Young Researcher's position*)

1. Članica UL (*UL member*):

Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo
University of Ljubljana, Faculty of Chemistry and Chemical Technology

2. Ime, priimek in elektronski naslov mentorja/ice (*Mentor's name, surname and email*):

Prof. dr. Uroš Grošelj; uros.groselj@fkkt.uni-lj.si

3. Raziskovalno področje (*Research field*):

1.04 Kemija (1.04.04 Organska kemija)
1.04 Chemistry (1.04.04 Organic chemistry)

4. Opis delovnega mesta mladega raziskovalca/ke (*Description of the Young Researcher's position*):

Vključuje morebitne dodatne pogoje, ki jih mora izpolnjevati kandidat/ka za mladega raziskovalca/ko, ki niso navedeni v razpisu za mlade raziskovalce.

Uvod:

Asimetrična organokataliza je uporaba majhnih kiralnih organskih molekul (organokatalizatorjev), ki stereoselektivno katalizirajo tvorbo vezi C–C in C–X, vključno s tvorbo kompleksnih organskih molekul iz enostavnih in lahko dostopnih izhodnih spojin. Po drugi strani fotokemija in fotoredoks kataliza predstavljata zeleno rešitev za izvedbo reakcij pri milejših pogojih, z možnostjo nastanka drugačnih produktov, kot bi jih sicer dobili ob termični pretvorbi.

Izhodišče raziskovalne naloge in okvirni program dela:

Sintezna organska kemija bo postavljena v izhodišče raziskovalne naloge mladega raziskovalca s poudarkom na uporabi organokataliziranih in/ali fotoredoks kataliziranih pretvorb ustreznih substratov na osnovi derivatov aminokislin, vključno s heterocikličnimi analogi. V sklop kataliziranih pretvorb sodi optimizacija reakcijskih pogojev, substratni obseg in mehanistične študije. Ker pričakujemo nastanek strukturno različnih tipov produktov, bomo le-te vključili tudi v različna testiranja bioloških aktivnosti in fizikalnih lastnosti.

Umestitev v raziskovalni program oz. projekt:

Raziskovalno delo bo potekalo v okviru programske skupine P1-0179 (Napredna organska sinteza in kataliza; vodja: prof. dr. Jurij Svete).

Delovna hipoteza in metode dela:

Mladi raziskovalec se bo vključil v delo programske skupine z namenom:

- sinteze primernih substratov na osnovi derivatov aminokislin, vključno s heterocikličnimi analogi,
- vključevanje izhodnih substratov v organokataliziranih in/ali fotoredoks kataliziranih pretvorbah,
- določitev optičnih lastnosti izhodnih in sintetiziranih spojin,
- testiranja bioloških aktivnosti sintetiziranih tipov spojin.

Pri svojem delu bo mladi raziskovalec uporabljal vse moderne preparativno-izolacijske metode in tehnike v organski sintezi. Strukture produktov bo ugotavljal s spektroskopskimi metodami (IR,

MS, HRMS; ^1H NMR, ^{13}C NMR, 2D NMR, itd.), analitskimi metodami (CHN analiza, LC-MS) in z rentgensko difrakcijo. Določil bo optične lastnosti izhodnih in sintetiziranih spojin. Stereoselektivnost pretvorb bo ugotavljal z metodo NMR in metodo HPLC na kiralnih kolonah. Mehanizme reakcij bo preučeval z eksperimentalnimi in računskimi metodami.

Cilji in predvideni rezultati

Cilj raziskovanja mladega raziskovalca bo sinteza izhodnih spojin na osnovi derivatov aminokislin, vključno s heterocikličnimi analogi, primernih za vključevanje v stereoselektivne organokatalizirane in fotoredoks katalizirane pretvorbe, študij mehanizma razvitih sinteznih metod in testiranje bioloških aktivnosti in fizikalnih lastnosti v sklopu večje interdisciplinarnosti.

Od kandidata za mladega raziskovalca se pričakuje teoretično in praktično znanje iz področja organske sinteze in analize.

Introduction:

Asymmetric organocatalysis is the use of small chiral organic molecules (organocatalysts) that stereoselectively catalyze the formation of C–C and C–X bonds, including the construction of complex organic molecules from simple and readily available starting compounds. On the other hand, photochemistry and photoredox catalysts provide an environmentally friendly solution for carrying out reactions under milder reaction conditions, which can yield different products than thermal conversions.

Starting point of the research project and framework of the work program:

Synthetic organic chemistry will be the focal point of the young researcher's research task, focusing on the use of organocatalyzed and/or photoredox-catalyzed transformations of substrates based on amino acid derivatives including heterocyclic analogs. This includes the optimization of reaction conditions, substrate scope and mechanistic studies. As we expect the formation of structurally different product types, we will also include these in various tests of biological activities and physical properties.

Placement in the research program or project:

The research work will be carried out within the program group P1-0179 (Advanced organic synthesis and catalysis, leader: Prof. Dr. Jurij Svete).

Work hypothesis and methods of work:

A young researcher will be involved in the work of the program group with the aim of:

- syntheses of suitable substrates based on amino acid derivatives including heterocyclic analogs,
- inclusion of starting substrates in organocatalyzed and/or photoredox-catalyzed transformations,
- determination of the optical properties of the starting compounds and the synthesized compounds,
- testing of biological activity of synthesized types of products.

In his work, the young researcher will apply all modern preparative-isolation methods and techniques of organic synthesis. The structure of the products will be determined using spectroscopic methods (IR, MS, HRMS; ^1H NMR, ^{13}C NMR, 2D NMR, etc.), analytical methods (CHN analysis, LC-MS) and X-ray diffraction. Optical properties of starting and synthesized compounds will be determined/measured. The stereoselectivity of the transformations will be determined using NMR methods and HPLC with chiral columns. The reaction mechanisms will be investigated using both experimental and computational methods.

Objectives and predicted results:

The young researcher's research aim is to synthesize starting compounds based on amino acid derivatives, including heterocyclic analogs suitable for inclusion in stereoselective organocatalyzed and photoredox-catalyzed transformations, to study the mechanism of the developed synthesis methods and to test the biological activities and physical properties within a broader interdisciplinary framework.

An applicant for a young researcher is expected to have theoretical and practical knowledge in the field of organic synthesis and analysis.

Opis delovnega mesta mladega raziskovalca/ke (*Description of the Young Researcher's position*)

1. Članica UL (*UL member*):

Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo

2. Ime, priimek in elektronski naslov mentorja/ice (*Mentor's name, surname and email*):

Prof.dr. Matevž Pompe, matevz.pompe@fkkt.uni-lj.si

3. Raziskovalno področje (*Research field*):

Analizna kemija

4. Opis delovnega mesta mladega raziskovalca/ke (*Description of the Young Researcher's position*):

Vključuje morebitne dodatne pogoje, ki jih mora izpolnjevati kandidat/ka za mladega raziskovalca/ko, ki niso navedeni v razpisu za mlade raziskovalce.

slo: Naravni ekstrakti predstavljajo obetavno področje prehranskih dopolnil za podporo klasičnim metodam zdravljenja in izboljševanju kvalitete življenja v starejšem starostnem obdobju. Njihova pogosta slabost je nizaka biološka razpoložljivost, kar lahko izboljšamo z enkapsulacijo le-teh. Kandidat se bo ukvarjal z razvojem analiznih metod za karakterizacijo enkapsuliranih naravnih ekstraktov. Kandidat bo pr svojem delu razvijal analizne postopke karakterizacije tako samih spojin, ki se uporabljajo za enkapsulacijo (pogosto fosfolipidi), kot tudi postopkov za pravilno določevanje enkapsuliranih aktivnih zvrsti.

eng: Natural extracts represent a promising field of nutritional supplements to support classical treatment methods and improve the quality of life of older population. Their main weakness is low bioavailability, which can be improved by encapsulation. The candidate will develop analytical procedures for the characterization of encapsulated natural extracts. During his work, the candidate will develop analytical procedures for the characterization of the compounds themselves, which are used for encapsulation (often phospholipids), as well as procedures for the correct determination of the encapsulated active species.

Opis delovnega mesta mladega raziskovalca/ke (*Description of the Young Researcher's position*)

1. Članica UL (*UL member*):

Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo

2. Ime, priimek in elektronski naslov mentorja/ice (*Mentor's name, surname and email*):

Matija Tomšič; Matija.Tomsic@fkkt.uni-lj.si

3. Raziskovalno področje (*Research field*):

1.04.01 Fizikalna kemija

4. Opis delovnega mesta mladega raziskovalca/ke (*Description of the Young Researcher's position*):

Vključuje morebitne dodatne pogoje, ki jih mora izpolnjevati kandidat/ka za mladega raziskovalca/ko, ki niso navedeni v razpisu za mlade raziskovalce.

slo:

Usposabljanje mladega raziskovalca na delovnem mestu bo potekalo po bolonjskem študijskem programu 3. stopnje smeri Kemija na Fakulteti za kemijo in kemijsko tehnologijo Univerze v Ljubljani (UL FKKT). Mladi raziskovalec bo pri tem opravil obvezne in izbirne predmete po študijskem programu, predlagal temo doktorske disertacije, jo raziskal in do konca študija tudi pripravil in zagovarjal doktorsko disertacijo.

Tematika raziskovalnega dela v okviru priprave doktorske disertacije bo ustrezala študijskim zahtevam programa 3. stopnje na UL FKKT. Bo s področja eksperimentalnih in teoretičnih raziskav strukturnih in termodinamskih lastnosti nanostrukturiranih sistemov z uporabo metod sipanja svetlobe, kot so: ozkokotno rentgensko sipanje (angl. Small-Angle X-ray Scattering, SAXS) z razširjeno inačico širokokotnega rentgenskega sipanja (angl. Small-Wide-Angle X-ray Scattering, SWAXS), ozkokotno nevtronsko sipanje (angl. Small-Angle Neutron Scattering, SANS), statično sipanje laserske svetlobe (angl. Static Light Scattering, SLS) in dinamično sipanje laserske svetlobe (angl. Dynamic Light Scattering, DLS). Poleg naštetih eksperimentalnih tehnik bo mladi raziskovalec podrobneje spoznal in uporabljal tudi metode računalniških simulacij Monte Carlo (MC) in molekulske dinamike (MD). Raziskovalno delo mladega raziskovalca bo vključeno v raziskave programske skupine Fizikalna kemija na UL FKKT(P1-0201) in skupnega madžarsko-slovenskega projekta Nanoplastika v vodnem okolju: struktura, migracija, transport in sanacija (N1-0308).

Kandidat za mladega raziskovalca mora izpolnjevati pogoje za vpis na Doktorski študijski program Kemijske znanosti na UL FKKT. Večina strokovne literature z opisanega področja tematike usposabljanja bo v angleškem jeziku. Ker bo moral kandidat rezultate svojega dela predstaviti tudi na različnih mednarodnih znanstvenih konferencah, mora funkcionalno obvladati angleški jezik. Zaradi dela z rentgenskim aparatom bo moral kandidat opraviti ustrezni zdravstveni pregled in tečaj iz varstva pred ionizirajočimi sevanji. Pri izbiri bodo imeli prednost kandidati z izkazanim predznanjem fizikalne kemije, izkušnjami za delo v kemijskem laboratoriju in poznavanjem osnov različnih eksperimentalnih sipalnih tehnik ter računalniških simulacij, po možnosti tudi poznavanjem in izkušnjami s strukturnimi raziskavami z uporabo »metode dopoljenega sistema«.

eng:

The training of the employed young researcher will take place within the 3rd Cycle (Doctoral) Study Programme in Chemical Sciences at the Faculty of Chemistry and Chemical Technology of the University of Ljubljana (UL FKKT). The young researcher will attend compulsory and elective courses according to the curriculum, propose the topic of the doctoral thesis, conduct the research, prepare the thesis and defend it at the end of the programme.

The topic of the doctoral research work and thesis will meet the requirements of the 3rd Cycle Study Programme at the UL FKKT. It will be in the field of experimental and theoretical research of the structural and thermodynamic properties of nanostructured systems, using scattering methods such as small-angle X-ray scattering (SAXS) and its extension, small- and wide-angle X-ray scattering (SWAXS), small-angle neutron scattering (SANS), static light scattering (SLS) and dynamic light scattering (DLS). Besides experimental techniques, the young researcher will also familiarise himself with and apply Monte Carlo (MC) and molecular dynamics (MD) computer simulation methods. The research work will be carried out as part of the Physical Chemistry programme group at the FKKT UL (P1-0201) and the Hungarian-Slovenian joint project Nanoplastics in aqueous environments: structure, migration, transport and remediation (N1-0308).

The candidate for the young researcher must fulfil the admission requirements for the Doctoral study programme in chemical sciences at the UL FKKT. The majority of the scientific and technical literature from the field of study and research will be in English. The young researcher will also have to present the research results at several international scientific conferences. Therefore, the candidate needs to be functionally proficient in English. Due to the experimental work with the X-ray generator, the candidate will have to pass the corresponding medical examination. Similarly, the candidate will also have to attend and pass an appropriate radiation protection and safe working training course. Preference will be given to applicants who can demonstrate previous knowledge in physical chemistry, experience in chemical laboratory research and basic knowledge in various experimental scattering techniques and computer simulation methods, preferably also knowledge and experience in structural research using the »complemented system approach« method.

Opis delovnega mesta mladega raziskovalca/ke (*Description of the Young Researcher's position*)

1. Članica UL (*UL member*):

Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo (UL FKKT)

2. Ime, priimek in elektronski naslov mentorja/ice (*Mentor's name, surname and email*):

Iztok Turel, iztok.turel@fkkt.uni-lj.si

3. Raziskovalno področje (*Research field*):

1.04 Kemija; Bioanorganska kemija, Sintezna kemija, Koordinacijska kemija,
1.04 Chemistry; Bioinorganic chemistry, Synthetic chemistry, Coordination chemistry

4. Opis delovnega mesta mladega raziskovalca/ke (*Description of the Young Researcher's position*):

Vključuje morebitne dodatne pogoje, ki jih mora izpolnjevati kandidat/ka za mladega raziskovalca/ko, ki niso navedeni v razpisu za mlade raziskovalce.

slo:

Koordinacijske spojine imajo mnoge uporabne lastnosti. Lahko jih na primer uporabljamo v medicini kot zdravila ali diagnostične snovi, lahko služijo tudi kot raznovrstni katalizatorji industriji. Aktualna možna uporaba je tudi pri recikliranju, saj dragocene kovine z vezavo primerne liganda lahko pretvorimo v topno obliko, ki jo lahko odstranimo iz kompleksnih zmesi. To je le nekaj primerov možnih raziskav na področjih, ki jim velik pomen pripisuje tudi Evropska komisija in jih izvajamo v določeni meri tudi v naših laboratorijih.

V zadnjih letih smo pripravili številne kovinske komplekse z β -diketonatnimi, hidroksikinolinatnimi, kinolonatnimi, piritionskimi in drugimi ligandi. Še posebej zanimive rezultate smo dobili v sistemih s piritioni, zato bomo raziskave predvsem na tem področju še nadgrajevali. Piritionski kompleksi so pokazali odličen protitumorski potencial, prav tako so se izkazali kot zelo dobri zaviralci delovanja (inhibitorji) številnih encimov. Z večjim naborom spojin želimo dobiti boljšo sliko o povezavi strukture z aktivnostjo (SAR) in tudi o njihovih drugih lastnostih.

Mladi raziskovalec bo na osnovi sistematičnega pristopa poskušal sintetizirati nove kovinske komplekse. Poleg kompleksov s kovinskimi ioni s katerimi smo se največ ukvarjali do sedaj (Ru, Zn, Pt, itd) bo preizkusil tudi nekatere druge kovinske ione (npr. Re, Rh, Ir, itd). S sintezami bo pripravil tudi ligande, ki niso komercialno dostopni. Ena pomembnih nalog bo tudi priprava ligandov funkcionaliziranih s ferocenom. Raziskovalno delo, ki je zanimivo in dinamično, bo potekalo v okviru raziskovalnega programa P1-0175 (Napredna anorganska kemija).

Definirane produkte bo doktorand okarakteriziral s standardnimi fizikalno-kemijskimi metodami (elementna analiza, infrardeča, UV-VIS, fluorescenčna, NMR, masna spektroskopija, itd.), ki so na voljo v infrastrukturnem centru na Fakulteti za kemijo in kemijsko tehnologijo Univerze v Ljubljani. V vsakem primeru bo cilj tudi priprava primernih kristalov, ki jim bomo z rentgensko difrakcijo določili kristalne strukture. Za doseg tega cilja bodo uporabljene različne sintezne tehnike in pogoji. Druge lastnosti vzorcev bomo po potrebi nadalje raziskovali tudi v sodelovanju z laboratoriji, s katerimi imamo utečena sodelovanja (tako doma kot tudi v tujini) in kjer so na voljo tudi druge tehnike, ki jih pri nas nimamo. Tovrstne laboratorije bo imel doktorand možnost tudi obiskati, dobil pa bo tudi možnost sodelovanja v domačih in mednarodnih projektih, v katere smo vpeti.

Zaželeno je, da imajo kandidati magisterij s področja kemije, biokemije, farmacije, ali drugih sorodnih področij, ki prinesejo praktične izkušnje iz kemijskega ali biokemijskega eksperimentalnega dela. Glede na to da je zamišljeno delo precej sintetsko obarvano, je zaželeno (ni pa to obvezen pogoj), da ima kandidat čim več takšnih izkušenj. Tudi znanje angleškega jezika na visoki ravni je zaželeno. Doktorand/ka se bo vpisal/a na doktorski študijski program Kemijske znanosti na Fakulteti za kemijo in kemijsko tehnologijo Univerze v Ljubljani.

Več informacij o delu mentorjeve raziskovalne skupine si lahko ogledate na spletni strani <http://ruturel.fkkt.uni-lj.si/>, ali pa preko specializiranih baz (Web of science, Cobiss).

eng:

Coordination compounds have many useful properties. For example, they can be used in medicine as drugs or diagnostic agents, and they can also serve as various catalysts in industry. Another potential application is in recycling, as valuable metals can be converted into soluble forms by binding with appropriate ligands, which can then be removed from complex mixtures. These are just a few examples of possible research areas which the European Commission also attaches great importance to and carried out to some extent in our laboratories.

In recent years, we have prepared numerous metal complexes with β -diketonate, hydroxyquinolate, quinolonate, pyrithione, and other ligands. Particularly interesting results have been obtained in systems with pyrithione, so we will further enhance research primarily in this area. Pyrithione complexes have shown excellent anti-tumor potential and have also proven to be very good inhibitors of various enzymes. With a larger range of compounds, we aim to gain a better understanding of the structure-activity relationship (SAR) and other properties.

Based on a systematic approach, a young researcher will attempt to synthesize new metal complexes. In addition to complexes with metal ions that we have primarily dealt with so far (Ru, Zn, Pt, etc.), they will also test some other metal ions (e.g., Re, Rh, Ir, etc.). Young researcher will also prepare ligands that are not commercially available through organic synthesis. One important task will be the preparation of ferrocene-functionalized ligands. The research work, which is interesting and dynamic, will be carried out within the research program P1-0175 (Advanced Inorganic Chemistry).

The defined products will be characterized by standard physicochemical methods (elemental analysis, infrared, UV-VIS, fluorescence, NMR, mass spectrometry, etc.), available at the infrastructure center at the Faculty of Chemistry and Chemical Technology, University of Ljubljana. In any case, the goal will also be the preparation of suitable crystals, whose crystal structures will be determined by X-ray diffraction. Various synthetic techniques and conditions will be used to achieve this goal. Other properties of the samples will also be further investigated, if necessary, in collaboration with laboratories with which we have established cooperation (both domestically and internationally), and where other techniques that we do not have here are available. The doctoral candidate will have the opportunity to visit such laboratories and also to participate in domestic and international projects in which we are involved.

Candidates with a master's degree in chemistry, biochemistry, pharmacy, or other related fields that bring practical experience in chemical or biochemical experimental work are desirable. Since the envisioned work is quite synthesis-oriented, it is desirable (but not a mandatory requirement) for the candidate to have as much experience in such work as possible. Proficiency in English at a high level is also preferable. The doctoral candidate will enroll in the doctoral study program in Chemical Sciences at the Faculty of Chemistry and Chemical Technology, University of Ljubljana.

More information about the mentor's research group can be found on the website <http://ruturel.fkkt.uni-lj.si/>, or through specialized databases (Web of Science, Cobiss).