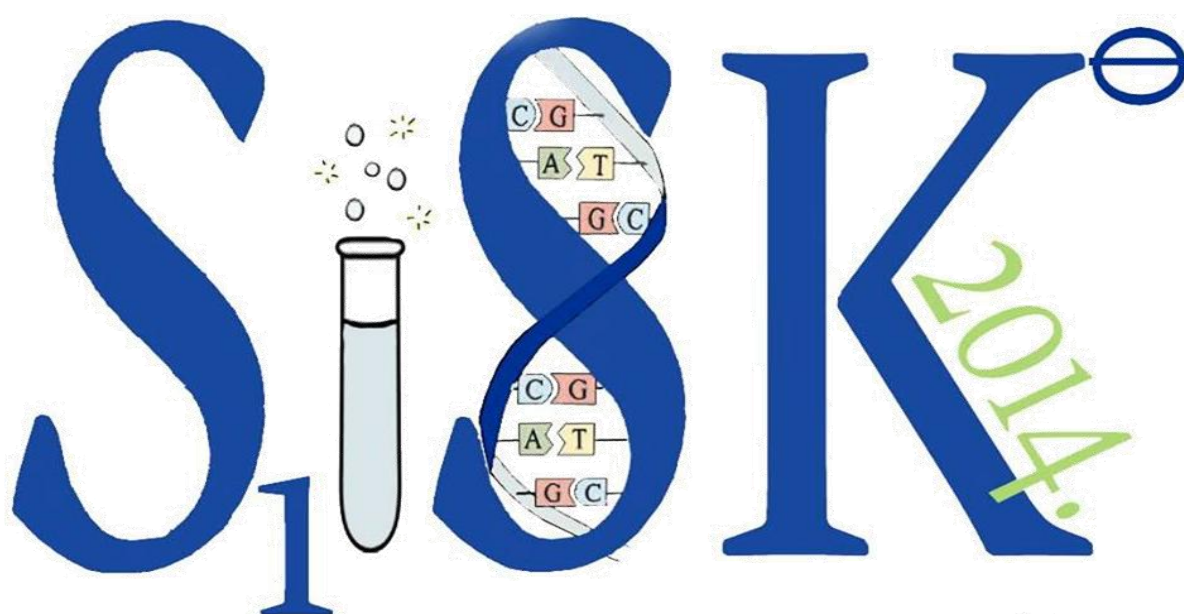


# 1. SIMPOZIJ STUDENATA KEMIČARA



## Knjiga sažetaka

---

25. listopada 2014

Sveučilište u Zagrebu

Prirodoslovno-matematički fakultet

Kemijski odsjek



## **ORGANIZACIJSKI ODBOR**

Tomislav Begušić, predsjednik

Kristina Smokrović, tajnica

Nikola Bedeković, tajnik

Loren Ban, član

Nea Baus, članica

Ingrid Gregorović, članica

Ivan Ilić, član

Karolina Kolarić, članica

Ana Mikelić, članica

Ana Milas, članica

Tomislav Piteša, član

Edi Topić, član

Ana Vlašić, članica

## **SURADNICI**

Dr. sc. Dominik Cinčić, doc.

Dr. sc. Vladimir Stilinović, doc.

Danijel Namjesnik, dipl. ing.

Dr. sc. Srđanka Tomić-Pisarović, red. prof.

## ORGANIZATOR



Studentska sekcija Hrvatskog kemijskog društva

## POKROVITELJI



Hrvatsko kemijsko društvo



Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek

## **UREDNICI**

Ana Milas  
Nikola Bedeković  
Tomislav Piteša

## **TEKST PRIPREMILI**

AUTORI, koji su odgovorni za tekst sažetaka

## **IZDAVAČI**

Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek  
Hrvatsko kemijsko društvo

## **SPONZOR**

PLIVA Hrvatska d.o.o., Zagreb

## **DONATORI**

BASF Hrvatska d.o.o., Zagreb  
Otvoreni dan Kemijskog odsjeka PMF-a  
POS d.o.o., Split



## TABLICA SADRŽAJA

|   |    |
|---|----|
| Riječ predsjednika Organizacijskog odbora ..... | 8  |
| Riječ pročelnice SSHKD-a .....                  | 9  |
| Program .....                                   | 10 |
| Sažeci.....                                     | 13 |
| Predavanja .....                                | 15 |
| Usmena izlaganja .....                          | 20 |
| Glavni sponzor .....                            | 44 |
| Donatori .....                                  | 45 |



## RIJEČ PREDSJEDNIKA ORGANIZACIJSKOG ODBORA

Simpozij studenata kemičara događaj je na kojem studenti imaju priliku prezentirati kolegama svoj znanstveni rad. Cilj Simpozija prije svega je povezivanje hrvatskih studenata kemičara kako bi izmjenili svoja iskustva, znanja i ideje. Naime, ostvarivanje bolje komunikacije među studentima u Hrvatskoj dovodi do veće konkurentnosti u globaliziranom svijetu.

Tvorac same ideje o organiziranju ovakvog događaja je docent Cinčić, a moji prijatelji iz Studentske sekcije i ja bili smo dovoljno energični i entuzijastični da tu ideju provedemo u djelo. Pri osmišljavanju imena, htio sam da bude jasno da su pozvani svi studenti koji se bave kemijom, a ne samo studenti kemije. Upravo pojam studenta kemičara predstavlja sve one koji su usko povezani s kemijom. Kada smo sredili naziv, uslijedilo je nekoliko mjeseci intenzivnog rada kako bismo postigli konačni cilj – jedan dan SiSK-a. Ovakva organizacija zahtjeva dobar timski rad, usklađenost i međusobno uvažavanje među članovima Organizacijskog odbora. Osim cijelom svom timu, zahvalan sam i našim suradnicima i svim ostalim pomagačima koji su nas kao mentori upozoravali i upućivali na sve detalje, a često i na naše greške.

Iako se Simpozij organizira prvi put, već je privukao veliki broj sudionika, studente s kvalitetnim radovima izrađenima na domaćim i inozemnim institucijama, kao i izvrsne predavače s društvenim i znanstvenim temama. Osim samih studenata, ovaj događaj su prepoznali i mnogi drugi, naši cijenjeni pokrovitelji (Hrvatsko kemijsko društvo i Kemijski odsjek PMF-a), sponzori (PLIVA, BASF), asistenti i profesori s naših fakulteta. Upravo takva svestrana podrška obećava uspjeh u organizaciji idućih Simpozija i stvaranje tradicije okupljanja hrvatskih studenata kemičara.

Tomislav Begušić

Predsjednik Organizacijskog odbora





## RIJEČ PROČELNICE SSHKD-a

Studentska sekcija djeluje u sklopu Hrvatskog kemijskog društva od 1997. godine. Od tada studenti aktivno sudjeluju u radu Hrvatskog kemijskog društva s brojnim uspješnim projektima. Organiziramo tribine, predavanja i radionice na kojima studenti mogu raspravljati o zajedničkim interesima te izmjenjivati ideje. Hrvatsko kemijsko društvo podupire nove ideje i projekte članova sekcije te pruža podršku u njihovom ostvarivanju.

Cilj djelovanja Studentske sekcije je povezivanje studenata te njihovo uključivanje u akademsku zajednicu putem novih poznanstava. Želimo povezati studente kemije i srodnih studija unutar zemlje kao i u inozemstvu. U procesu smo priključenja Europskoj mreži mladih kemičara (European Young Chemists' Network) koja povezuje sve kemičare mlađe od 35 godina unutar Europske asocijacije za kemijske i molekularne znanosti (European Association for Chemical and Molecular Sciences). Povezivanjem s predstavnicima kemičara u inozemstvu omogućit će bolju mobilnost studenata te razvijanje zajedničkih projekata u budućnosti.

Sekcija se bavi i popularizacijom znanosti među djecom vrtićke dobi putem projekta Znanstvena čarolije. Studenti posjećuju vrtiće i izvode zanimljive pokuse kako bi zainteresirali najmlađe generacije za znanost. Projekt je započeo 2010. godine, a danas ga vodi kolegica Dajana Barišić. Znanstvene čarolije su jedan od najuspješnijih i najpopularnijih projekata Studentske sekcije.

Drugi veliki projekt Studentske sekcije je upravo Simpozij studenta kemičara, koji predstavlja važan korak u povezivanju studenata zainteresiranih za teorijsku i primijenjenu kemiju. Ovom prilikom se zahvaljujem doc. dr. sc. Dominiku Cinčiću i Tomislavu Begušiću na pruženoj inicijativi, kolegama iz organizacijskog odbora na uloženom radu i vremenu te Hrvatskom kemijskom društvu, Kemijskom odsjeku Prirodoslovno-matematičkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu, Plivi, BASF-u i svim profesorima, docentima, asistentima i tehničkom osoblju na podršci i savjetima u realizaciji ovog projekta. Također zahvaljujem svim sudionicima Simpozija i nadam se da će se neki od vas uključiti u rad studentske sekcije i sudjelovati u budućim projektima.

Kristina Smokrović

Pročelnica Studentske sekcije Hrvatskog kemijskog društva

## PROGRAM

|             |   |
|-------------|---|
| 9:30-10:00  | <b>Registracija</b>   |
| 10:00-10:20 | <b>OTVARANJE SIMPOZIJA:</b><br>- riječ predsjednika Organizacijskog odbora: <b>Tomislav Begušić</b><br>- riječ pročelnice Studentske sekcije Hrvatskog kemijskog društva: <b>Kristina Smokrović</b> |

|   |   |
|---|---|
| <b>PREDAVANJA:</b>                            |   |
| <b>A2 (predsjedavajući: Tomislav Begušić)</b> |   |
| 10:20-10:50                                   | <b>Antonija Burčul</b> (ETH, Zürich) i <b>Lucija Šilić:</b><br><i>TINK - Technology InnovatioN Knowledge</i>                  |
| 10:50-11:05                                   | <b>Zrinka Banić Tomišić</b> (Državni zavod za intelektualno vlasništvo):<br><i>Intelektualno vlasništvo</i>                   |
| 11:05-11:15                                   | <b>KRATKA PAUZA</b>   |
| 11:15-11:40                                   | <b>Marko Hanževački</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Primjena ONIOM metode u modeliranju međumolekulskih interakcija u kristalima</i> |
| 11:40-12:05                                   | <b>Kristina Kučanda</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Ciklička kinetika termičkog uravnotežavanja osno kiralnog bis-spiropirana</i>    |
| 12:05-12:30                                   | „COFFEE BREAK“  |

|                          |  |   |
|--------------------------|--|---|
| <b>USMENA IZLAGANJA:</b> |  |   |
|                          | <b>A1 (predsjedavajuća: Ana Milas)</b>   | <b>A2 (predsjedavajući: Tomislav Piteša)</b>  |
| 12:30-12:45              | <b>Nina Fekonja i Helena Goričanec</b> (FBF, Zagreb):<br><i>Izolacija membranskih proteina pomoću detergenta Tritona X-114 u svrhu analize njihove N-glikozilacije</i>                   | <b>Tin Klačić</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Ovisnost temperature zraka o koncentraciji ugljikovog(IV) oksida</i>   |
| 12:45-13:00              | <b>Nikolina Šoštarić i Petar Šutalo</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Dvojni karakter domene arginil-tRNA-sintetaze u vezi s prijenosom informacija prema udaljenom katalitičkom mjestu</i>       | <b>Sanja Novak</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Priprema i spektroelegkrokemijska karakterizacija tankog filma jednozidnih ugljikovih nanocijevi</i>  |
| 13:00-13:15              | <b>Danijel Glavač</b> (FKIT, Zagreb):<br><i>Sinteza, kristalografska analiza i citostatska djelovanja C-5 heteroarilnih i alkinilnih N-acikličkih pirimidinskih nukleozidnih analoga</i> | <b>Dario Dabić</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Interakcije TiO<sub>2</sub> nanožica s dimernom površinski aktivnom tvari</i>   |
| 13:15-13:30              | <b>Maja Beus, Tomislav Ubrekić i Josipa Vidović</b> (FBF, Zagreb):<br><i>Sinteza pirazinskih analoga antitumorskog lijeka sorafeniba</i>   | <b>Milenko Korica</b> (Odjel za kemiju, Osijek):<br><i>Poboljšano uklanjanje fosfata iz vode pravilno strukturiranim mezoporoznim silicijevim dioksidom koji je dopiran samarijevim oksidom</i> |

|   |  |   |
|---|--|---|
| 13:30-15:00                                   | „LUNCH BREAK“  |   |
|   | <b>A1 (predsjedavajući: Loren Ban)</b>   | <b>A2 (predsjedavajući: Edi Topić)</b>  |
| 15:00-15:15                                   | <b>Tomislav Gregorić</b> (FKIT, Zagreb):<br><i>Sinteza 1,4-disupstituiranih 1,2,3- triazola na položaju N-1 i N-3 5- bromuracila</i>   | <b>Alen Bjelopetrović</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Mononuklearni kompleksi molibdena(VI): trans-utjecaj kisikovih atoma</i>   |
| 15:15-15:30                                   | <b>Saša Opačak</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Sinteza i karakterizacija karbazolnih gvanidina, novih anionskih receptora</i>   | <b>Luka Bilić</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Sinteza i karakterizacija kompleksa molibdena (VI): reakcije u otopini i čvrstom stanju</i>  |
| 15:30-15:45                                   | <b>Petar Štrbac</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Priprava supstituiranih difenil-oksalata i fluorescentnih boja te njihova primjena u kemiluminiscenciji</i>   | <b>Tomislav Stolar i Stipe Lukin</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Mehanokemijska sinteza poroznih metaloorganskih mreža</i>   |
| 15:45-16:00                                   | <b>Pavica Šonjić i Tana Tandarić</b> (FBF, Zagreb):<br><i>Utjecaj supstituenata na N3 i C5 položaju na reaktivnost derivata barbiturne kiseline s hipoklornom kiselinom. Kvantno-kemijska studija.</i> | <b>Nikola Bedeković</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Preferencija piridinskog dušika prema alifatskoj karboksilnoj skupini u binarnim krutinama izvedenim iz derivata piridina i N-(2-karboksifenil)glicina</i> |
| 16:00-16:15                                   | <b>Jana Volarić</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Utjecaj topokemije na kinetiku dimerizacije p-halogennitrozobenzena u čvrstom stanju</i>  | <b>Ivan Ilić, Neven Golenić i Tomislav Piteša</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Sinteza i karakterizacija polimorfnih oblika 2-amino-4-metilpiridinijeva salicilata</i>  |
| 16:15-16:35                                   | „COFFEE BREAK“   |   |
| <b>A2 (predsjedavajući: Nikola Bedeković)</b> |  |   |
| 16:35-16:50                                   | <b>Darko Vušak</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Kvantitativni odnos strukturnih svojstava i antitumorske aktivnosti derivata benzimidazola</i>   |   |
| 16:50-17:05                                   | <b>Marko Racar</b> (FKIT, Zagreb):<br><i>Djelotvornost novih gvanidinskih katalizatora i optimiranje procesa dobivanja biodizela metodom odzivnih površina</i>   |   |
| 17:05-17:20                                   | <b>Tea Crnković</b> (FBF, Zagreb):<br><i>Primjenjivost in vitro testova citotoksičnosti za procjenu bioloških učinaka srebrnih nanočestica</i>   |   |

Uživajte u pirotehničkoj idili!

|                              |  |
|------------------------------|--|
| <b>ZATVARANJE SIMPOZIJA:</b> |  |
| 17:30                        | <b>Edi Topić</b> (PMF, Zagreb):<br><i>SiSK na piromanski način</i> |



# **SAŽECI**



# **PREDAVANJA**

**Marko Hanževački** (PMF, Zagreb): *Primjena ONIOM metode u modeliranju međumolekulskih interakcija u kristalima.....* 16

**Kristina Kučanda** (PMF, Zagreb): *Ciklička kinetika termičkog uravnotežavanja osno kiralnog bis-spiropirana.....* 18

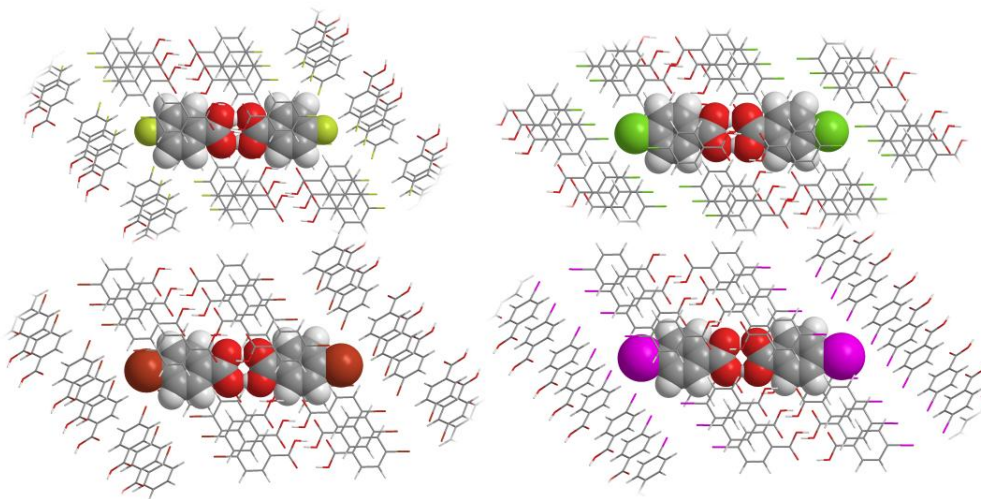
## Primjena ONIOM metode u modeliranju međumolekulskih interakcija u kristalima

Marko Hanževački, Zlatko Mihalić

Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet,  
 Kemijski odsjek, Zavod za organsku kemiju  
 marko.hanzevacki@hotmail.com

U posljednjih nekoliko godina sve više se nastoji povezati kristalna struktura novih materijala s njihovim fizikalnim i kemijskim svojstvima. Razumijevanje odnosa između kemijske strukture i svojstava materijala jedno je od temeljnih područja istraživanja u prirodnim znanostima. Uz klasične eksperimentalne tehnike sve veću pažnju privlači računalna kemija. Razvojem računala i novih računalnih metoda moguće je proučavanje sve većih i većih kemijskih sustava. Osim biološki zanimljivih molekula, kao složeni sustavi mogu se promatrati i kristali. Njihovo modeliranje rezultira boljim razumijevanjem međumolekulskih interakcija i omogućava dizajniranje novih kristalnih struktura organskih molekula i anorganskih kompleksa. Zanimljivo je istraživanje polimorfizma u kristalima što je važno npr. u farmaceutskoj industriji.

U ovom radu korišten je višerazinski pristup u modeliranju složenih sustava (modificirani QM/MM pristup). Slične ideje su već primijenjene na velikim biološkim sustavima. Naime, ONIOM (engl. *Our own N-layered Integrated molecular Orbital and molecular Mechanics*) pristup pokazao se uspješnim u proučavanju aktivnog mjesta enzima u kojem je cijeli sustav moguće podijeliti na nekoliko razina prema važnosti koje se onda modeliraju na različitim razinama teorije. Samo aktivno mjesto od najvećeg je interesa i modelira se na najvišoj razini teorije. Na taj način postiže se odgovarajući kompromis između točnosti rezultata i utrošenog računalnog vremena. Osnovni cilj ovog istraživanja je pronalazak računalnog modela kojim bi se pomoću relativno malog broja molekula moglo opisati ponašanje molekula u cijelom kristalu. Dobiveni model mogao bi biti koristan za strukturnu analizu sličnih kristalnih sustava, u daljnjim istraživanjima kristalnih struktura koje su podložne polimorfizmu, kao i u istraživanju kemijskih reakcija u čvrstoj fazi.





Istražene su međumolekulske interakcije u kristalnim sustavima *para*-halogenbenzojeve kiseline (F, Cl, Br i I). Analizom Hirshfeldove površine utvrđeno je kako su vodikove veze,  $\pi \cdots \pi$  kontakti, halogen-halogen interakcije uglavnom odgovorne za pakiranje molekula. Modeliranje ovih interakcija na izoliranom paru molekula pokazalo se uspješnim samo u slučaju jakih vodikovih veza. Dvorazinska ONIOM metoda uspješno je reproducirala i geometrije parova molekula povezanih halogen-halogen interakcijama,  $\pi \cdots \pi$  kontaktima i slabim vodikovim C–H $\cdots$ X interakcijama. U računima više razine teorije korištena su četiri DFT funkcionala s uključenim Grimmeovom disperznim interakcijama treće generacije (B2PLYP, B97, B3LYP i M06-2X) u kombinaciji s tri osnovna skupa (6-311G, 6-311G(d) i 6-311G(d,p)). Okolni realni sustav modeliran je na semiempirijskoj razini teorije PM6 metodom s uključenim disperzijskim korekcijama. Modelirani su hipotetski sustavi zamjenom atoma halogena. Pokazalo se da je kod derivata *para*-halogenbenzojevih kiselina povoljniji tip II nego tip I halogen-halogen interakcije, iako eksperimentalni podaci sugeriraju da je kod *para*-klorbenzojeve kiseline povoljniji tip I interakcije. U ovom slučaju QTAIM analiza pokazala je postojanje dodatne C–H $\cdots$ X interakcije. ONIOM metoda daje geometrije usporedive s onima u kristalu. Izračunate energije interakcija pokazuju trendove u skladu s eksperimentalnim podacima. Pokazalo se da je odabir prikladnog modelnog sustava od iznimne važnosti za proučavanje međumolekulskih interakcija

## Ciklička kinetika termičkog uravnotežavanja osno kiralnog bis-spiropirana

Kristina Kučanda<sup>1</sup>, Pintu K. Kundu<sup>2</sup>, Avishai Lerner<sup>2</sup>, Gregory Leitus<sup>2</sup>,  
Rafal Klajn<sup>2</sup>

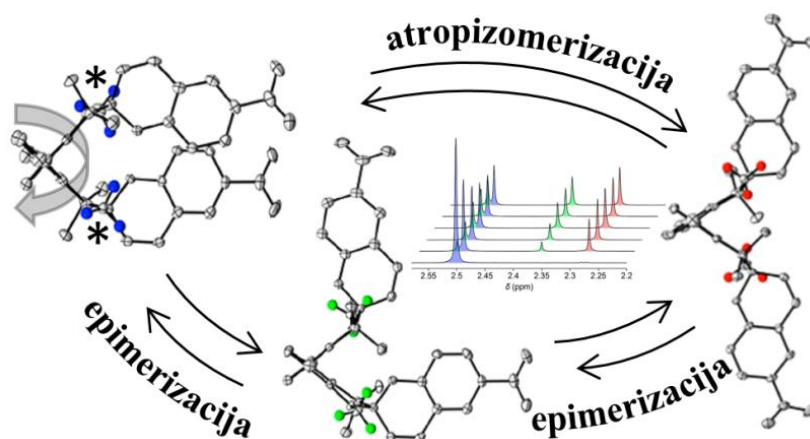
<sup>1</sup>Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek

<sup>2</sup>Weizmann Institute of Science, Rehovot

kristina.kucanda@gmail.com

Molekulski prekidači molekule su koje reverzibilno mijenjaju strukturu pa time i svojstva pod vanjskim utjecajima, kao što je pH, metalni ioni ili svjetlost. Od velikog su interesa za primjene u složenim sustavima, osobito u elektronici i medicini. Glavni izazov u razvoju naprednih primjena molekulskih prekidača očuvanje je željene promjenjivosti u prostorno ograničenim okruženjima, kao što su makromolekule i materijali u čvrstom stanju. Osno kiralni bis-spiropiran spoj je koji sadržimolekulski rotor i fotoprekidač. Sintetiziran je kao ishodna podjedinica za nanoporozne mreže osjetljive na više podražaja<sup>[1]</sup> i model sterički ometenog prekidača. Izoliran je svaki od njegova tri dijastereomera te su im rentgenskom difrakcijom na monokristalu određene kristalne strukture. Kinetika uravnotežavanja dijastereomera u otopinama praćena je <sup>1</sup>H NMR spektroskopijom. Ustanovljeno je da dijastereomeri prelaze jedan u drugi reverzibilnom cikličkom reakcijskom shemom te su određene energije aktivacije i njihova ovisnost o polarosti otapala. Rezultati pokazuju da svojstva molekulskih prekidača jako ovise o njihovom neposrednom kemijskom okruženju. To je bitno za dizajn novih molekulskih prekidača i materijala.<sup>[2]</sup>

Rad je napravljen na Department of Organic Chemistry, Weizmann Institute of Science.



[1] Kundu, P. K., Olsen, G. L., Kiss, V., Klajn, R., Nat. Commun. 5 (2014) 3588.

[2] Kundu, P. K., Lerner, A., Kučanda, K., Leitus, G., Klajn, R., J. Am. Chem. Soc. 136 (2014) 11276.



# USMENA IZLAGANJA

- Nina Fekonja i Helena Goričanec** (FBF, Zagreb): *Izolacija membranskih proteina pomoću detergenta Tritona X-114 u svrhu analize njihove N-glikozilacije* ..... 22
- Nikolina Šoštarčić i Petar Šutalo** (PMF, Zagreb): *Dvojni karakter domene arginil-tRNA-sintetaze u vezanju tRNA i prijenosu informacija prema udaljenom katalitičkom mjestu* ..... 23
- Danijel Glavač** (FKIT, Zagreb): *Sinteza, kristalografska analiza i citostatska djelovanja C-5 heteroarilnih i alkinilnih N-acikličkih pirimidinskih nukleozidnih analoga*..... 24
- Maja Beus, Tomislav Ubrekić i Josipa Vidović** (FBF, Zagreb): *Sinteza pirazinskih analoga antitumorskog lijeka sorafeniba*..... 25
- Tin Klačić** (PMF, Zagreb): *Ovisnost temperature zraka o koncentraciji ugljikovog(IV) oksida* ..... 26
- Sanja Novak** (PMF, Zagreb): *Priprema i spektroelektrokemijska karakterizacija tankog filma jednozidnih ugljikovih nanocijevi* ..... 27
- Dario Dabić** (PMF, Zagreb): *Interakcije TiO<sub>2</sub> nanožica s dimernom površinski aktivnom tvari* ..... 28
- Milenko Korica** (Odjel za kemiju, Osijek): *Poboljšano uklanjanje fosfata iz vode pravilno strukturiranim mezoporoznim silicijevim dioksidom koji je dopiran samarijevim oksidom*..... 29

- Tomislav Gregorić** (FKIT, Zagreb): *Sinteza 1,4-disupstituiranih 1,2,3- triazola na položaju N-1 i N-3 5- bromuracila .....* 30
- Saša Opačak** (PMF, Zagreb): *Sinteza i karakterizacija karbazolnih gvanidina, novih anionskih receptora.....* 31
- Petar Štrbac** (PMF, Zagreb): *Priprava supstituiranih difenil-oksalata i fluorescentnih boja te njihova primjena u kemiluminiscenciji.....* 32
- Pavica Šonjić i Tana Tandarić** (FBF, Zagreb): *Utjecaj supstituenata na N<sub>3</sub> i C<sub>5</sub> položaju na reaktivnost derivata barbiturne kiseline s hipoklornom kiselinom. Kvantno-kemijska studija.....* 33
- Jana Volarić** (PMF, Zagreb): *Utjecaj topokemije na kinetiku dimerizacije p-halogenitrozobenzena u čvrstom stanju.....* 34
- Alen Bjelopetrović** (PMF, Zagreb): *Mononuklearni kompleksi molibdena(VI): trans-utjecaj kisikovih atoma .....* 35
- Luka Bilić** (PMF, Zagreb): *Sinteza i karakterizacija kompleksa molibdena (VI): reakcije u otopini i čvrstom stanju.....* 36
- Tomislav Stolar i Stipe Lukin** (PMF, Zagreb): *Mehanokemijska sinteza poroznih metaloorganskih mreža.....* 37
- Nikola Bedeković** (PMF, Zagreb): *Preferencija piridinskog dušika prema alifatskoj karboksilnoj skupini u binarnim krutinama izvedenim iz derivata piridina i N-(2-karboksifenil) glicina.....* 38
- Ivan Ilić, Neven Golenić i Tomislav Piteša** (PMF, Zagreb): *Sinteza i karakterizacija polimorfnih oblika 2-amino-4-metilpiridinijeva salicilata ...* 39
- Darko Vušak** (PMF, Zagreb): *Kvantitativni odnos strukturnih svojstava i antitumorske aktivnosti derivata benzimidazola .....* 40
- Marko Racar** (FKIT, Zagreb): *Djelotvornost novih gvanidinskih katalizatora i optimiranje procesa dobivanja biodizela metodom odzivnih površina .....* 41
- Tea Crnković** (FBF, Zagreb): *Primjenjivost in vitro testova citotoksičnosti za procjenu bioloških učinaka srebrnih nanočestica .....* 42

## Izolacija membranskih proteina pomoću detergenta Tritona X-114 u svrhu analize njihove N-glikozilacije

Nina Fekonja, Helena Goričanec, Olga Gornik

Farmaceutsko-biokemijski fakultet, Zagreb

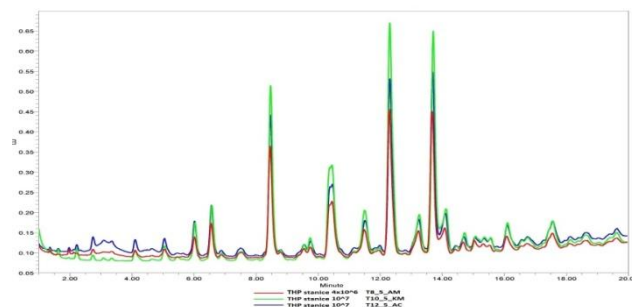
ninaa.fekonja@gmail.com; helena.goricanec@gmail.com

Glikozilacija membranskih proteina važna je za mnoge njihove funkcije, kako međustanično prepoznavanje, tako i interakcije pojedinih molekula s receptorima na staničnoj površini [1]. Kako bi se bolje razumjeli ovi procesi u mnogim fiziološkim i patofiziološkim stanjima, važno je posjedovati pouzdanu analitičku metodu koja bi omogućila istraživanje glikozilacije membranskih proteina. Dosadašnje metode izolacije i analize glikozilacije ovih proteina pokazale su se nedovoljno reproducibilnima zbog prisustva unutarstaničnih proteina koji često nose nedovršene glikanske strukture. Stoga je cilj ovog rada bio optimirati metodu izolacije i glikozilacije isključivo membranskih proteina pomoću detergenta Triton X-114 te analizirati njihovu N-glikozilaciju tekućinskom kromatografijom ultravisoke djelotvornosti koja se bazira na hidrofилnim interakcijama. U tu svrhu korištene su stanice iz THP stanične linije. Ključni korak bio je pročišćavanje izoliranih proteina od suviška detergenta te je isprobano nekoliko metoda kako bi se ustanovilo koja od njih daje najbolje rezultate. Izolirani membranski proteini pročišćavani su pomoću 3 kDa centrifugalnih filtera (koji propuštaju male čestice detergenta, a zadržavaju proteinske molekule) ili upotrebom različitih organskih otapala koja su precipitirala proteine. Organska otapala koja su bila korištena su aceton, kombinacija aceton/metanol i kloroform/metanol.

Rezultati koji su dobiveni nakon pročišćavanja pomoću spin-filtera nisu bili zadovoljavajući jer, iako je uzorak bio pročišćen od detergenta, intenziteti pikova na kromatogramu glikozilacijskog profila bili su praktički u razini šuma samog instrumenta. Kao takvi ne mogu se koristiti za pouzdanu interpretaciju. Bolje rezultate pokazale su metode s organskim otapalima. One su dale jače intenzitete pikova i kromatograme bolje razlučivosti. Ovaj pristup pokazao je dobru ponovljivost te da je količina stanica uzetih u analizu u konačnici proporcionalna intenzitetu kromatografskih pikova.

Ovim radom dizajnirana je metoda izolacije membranskih proteina te analize njihove N-glikozilacije. Postojanje ove metode važno je u studiranju razumijevanja mnogih fizioloških i patofizioloških procesa u organizmu u kojima stanična glikozilacija igra važnu ulogu.

Ovaj rad izrađen je na Zavodu za biokemiju i molekularnu biologiju Farmaceutsko-biokemijskog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu.



Slika 1: Kromatogrami N-glikana otpuštenih s membranskih proteina THP stanica nakon različitih metoda precipitacije proteina: aceton (plavo), kloroform/metanol (zeleno), aceton/metanol (crveno)

- [1] Varki, A. et al., (1999), *Essentials of Glycobiology*, New York, Cold Spring Harbor Laboratory Press

## Dvojni karakter domene arginil-tRNA-sintetaze u vezanju tRNA i prijenosu informacija prema udaljenom katalitičkom mjestu

Nikolina Šoštarić, Petar Šutalo, Ivana Weygand-Đurašević

Prirodoslovno-matematički fakultet, Zagreb

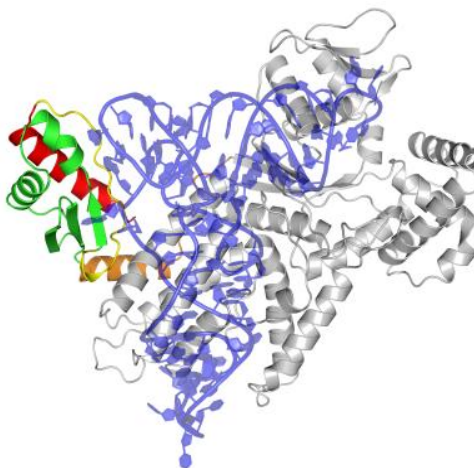
nsostaric1@chem.pmf.hr, psutalo@chem.pmf.hr

Stanični proteini nastaju radom ribosoma koji genetičku informaciju, sadržanu u obliku molekula mRNA, prevode u slijed aminokiselina rastućeg polipeptidnog lanca. Aminokiseline dolaze na ribosom esterificirane na 3'-kraj pripadnih molekula tRNA čiji antikodon mora biti komplementaran kodonu mRNA kako bi donesena aminokiselina bila ugrađena u nastajući protein. Stvaranje kovalentne veze između aminokiseline i odgovarajuće tRNA (reakciju aminoacilacije) kataliziraju aminoacil-tRNA-sintetaze. Radom ovih enzima osiguran je vjeran prijenos genetičke informacije, zbog čega je detaljno istraživanje njihovih svojstava od iznimne važnosti.

U ovom radu ispitana je uloga N-terminalne domene arginil-tRNA-sintetaze iz arheje *Methanothermobacter thermoautotrophicus* (MtArgRS) u vezanju pripadne tRNA i reakciji aminoaciliranja. Korišteni su divlji tip i četiri krnja oblika enzima skraćena s N-kraja. Rekombinantni enzimi su izolirani iz stanica domaćina i pročišćeni afinitetnom kromatografijom te gel-filtracijom. Pripadni je supstrat, tRNA<sup>Arg</sup> iz istog arhejskog izvora (MttRNA<sup>Arg</sup>), dobiven transkripcijom u domaćinu *Escherichia coli* te pročišćen kromatografijom ionske izmjene. Dodatno je optimiran daljnji korak pročišćavanja MttRNA<sup>Arg</sup> kromatografijom obrnutih faza pri čemu su izdvojene tri populacije MttRNA<sup>Arg</sup>, različite prema količini nadodanih posttranskripcijskih modifikacija.

Nativnom elektroforezom na poliakrilamidnom gelu određene su ravnotežne konstante disocijacije kompleksa divljeg oblika i deletanata MtArgRS s MttRNA<sup>Arg</sup>. Ove su vrijednosti pokazatelji uloge N-terminalne domene u vezanju pripadne tRNA. S ciljem proučavanja uloge N-terminalne domene u katalitičkoj reakciji, određeni su kinetički parametri većine rekombinantnih enzima u uvjetima ustaljenog stanja. Ravnotežne konstante disocijacije usporedivih su vrijednosti za sve ispitane komplekse, dok je utjecaj delecija na katalitičku efikasnost enzima drastičan. Ovakvi rezultati ukazuju na postojanje dvojne uloge ispitane domene MtArgRS u odnosu na interakciju s tRNA. Iako ova domena nema presudnu ulogu u vezanju tRNA, vrlo je važna u prijenosu informacija o njenom vezanju prema udaljenom katalitičkom mjestu.

Ovaj rad je izrađen na Zavodu za biokemiju Kemijskog odsjeka Prirodoslovno-matematičkog fakulteta u Zagrebu.



## Sinteza, kristalografska analiza i citostatska djelovanja C-5 heteroarilnih i alkinilnih N-acikličkih pirimidinskih nukleozidnih analoga

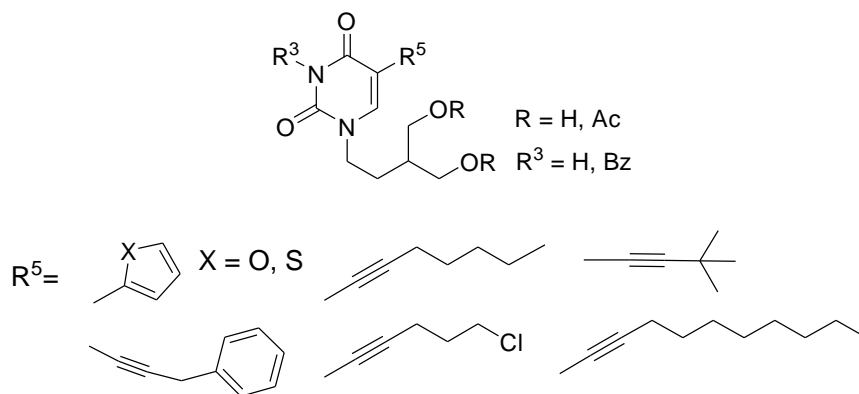
Danijel Glavač, Silvana Raić-Malić

Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Zagreb

glavac.danijel@gmail.com

Strukturni analozi prirodnih nukleozida u kojima je purinski, pirimidinski ili šećerni prsten zamijenjen strukturno srodnom heterocikličkom bazom ili acikličkim lancem imaju izraženu citostatsku i antivirusnu aktivnost [1]. Istraživanje je usmjereno na sintezu novih pirimidinskih analoga, koji svojom strukturom oponašaju prirodne spojeve, pirimidinske nukleozide. Derivati pirimidina s heteroarilnim supstutentom u položaju C-5 pirimidina **8a** i **8b** pripremljeni su Stille-ovom reakcijom povezivanja organokositrovih intermedijara s nezasićenim organskim elektrofilima pomoću paladijevog katalizatora. C-5 alkinilni derivati pirimidina **14a-e** priređeni su Sonogashira-inom reakcijom acikličkog 5-joduracilnog derivata s odgovarajućim terminalnim alkinima pomoću paladijevog(0) katalizatora, bakrovog (I) jodida (CuI) i baze, terciarnog amina. Novopriređeni spojevi su okarakterizirani spektroskopskim metodama  $^1\text{H}$  i  $^{13}\text{C}$  NMR, te masenom spektrometrijom. Rentgenskom strukturnom analizom određena je kristalna i molekulska struktura spojeva **8a**, **11** i **14c**. N-aciklički pirimidinski derivat s 5-furilnim supstutentom **8a** i 5-jod N-aciklički derivat **12** pokazali su snažno i selektivno antiproliferativno djelovanje na karcinom dojke (MCF-7) te na normalne fibroblaste porijeklom iz čovjeka (BJ).

Ovaj rad izrađen je na Zavodu za organsku kemiju Fakulteta kemijskog inženjerstva i tehnologije Sveučilišta u Zagrebu.



Shema 1. Pregled sintetiziranih spojeva

[1] A. Mešćić, S. Krištafor, I. Novaković, A. Osmanović, U. Muller, D. Završnik, S.M. Ametamey, L. Scapozza, S. Raić-Malić, *Molecules* **18** (2013) 5104-24; A. Mešćić, D. Glavač, A. Osmanović, D. Završnik, M. Cetina, D. Makuc, J. Plavec, S. M. Ametamey, S. Raić-Malić, *J. Mol. Struct.* **1039** (2013) 160-6.





## Ovisnost temperature zraka o koncentraciji ugljikovog(IV) oksida

Tin Klačić, Marko Filip Horvat, Jan Radanović i Darko Vušak

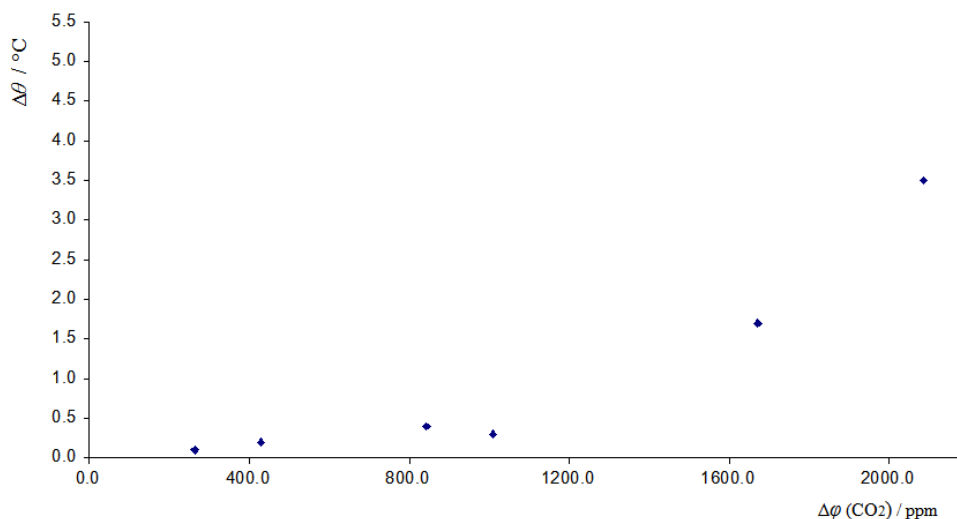
Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu,

Horvatovac 102 A, Zagreb

tin.klacic@gmail.com

Ovaj je istraživački rad zamišljen kao modifikacija i proširenje demonstracijskog pokusa naslovljenog Ugljikov dioksid i globalno zatopljenje [1]. Provedenim istraživanjem ustanovljena je matematička funkcija ovisnosti promjene temperature zraka o promjeni volumne koncentracije ugljikovog dioksida u rasponu od 0,0 ppm do 2100,0 ppm. U svrhe istraživanja konstruirana je plinska komora za kontrolirane promjene volumne koncentracije plinovite faze i za mjerenje temperature digitalnim termometrom s dugačkom sondom. Sustav sastavljen od plinske komore u kojoj se nalazi aproksimativno crno tijelo simulirao je Zemljinu površinu i njezinu atmosferu, a lampa usmjerenog snopa svjetlosti je predstavljala izvor zračenja sličan solarnom. Takav sustav simulacija je efekta staklenika u kojoj je moguće kontrolirati promjene volumne koncentracije CO<sub>2</sub> dok su ostali parametri konstantni. Zaključujemo da promjena koncentracije CO<sub>2</sub> u istraženom području utječe na promjenu temperature zraka. Također u području promjene koncentracije od 0,0 ppm do otprilike 900,0 ppm funkcija se ponaša gotovo linearno čime se predviđa slab doprinos ugljikovog dioksida na povišenje globalne temperature u narednim godinama. Primijetili smo da se u području otprilike nakon 900,0 ppm zbivaju za sada nepoznate pojave na molekularnoj razini koje uzrokuju značajan utjecaj na porast temperature.

Rad je napravljen na Zavodu za fizikalnu kemiju Kemijskog odsjeka PMF-a uz potporu Saveza za energetiku Hrvatske i u suradnji s udrugom Prelog.



[1] M. Sikirica, *Zbirka kemijskih pokusa*, Školska knjiga, Zagreb, 2011, p. 547.

## Priprema i spektroelektrokemijska karakterizacija tankog filma jednozidnih ugljikovih nanocijevi

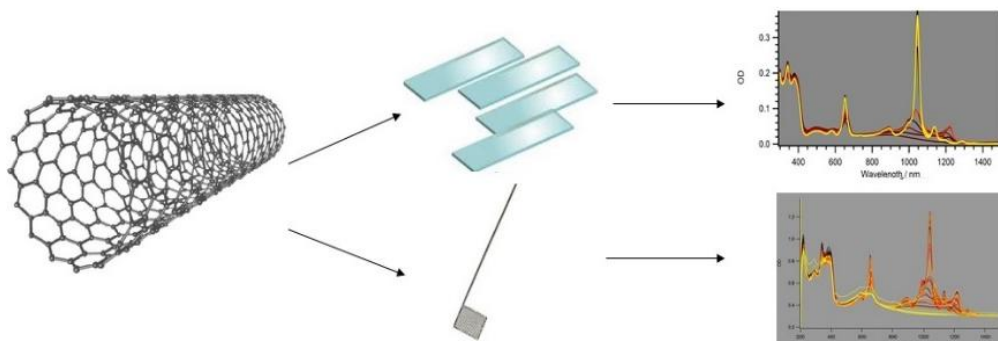
Sanja Novak<sup>1</sup>, Tobias Hertel<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu,  
Zagreb

<sup>2</sup>Julius-MaximiliansUniversität, Würzburg, Njemačka  
e-mail: snovak90@gmail.com

Ugljikove nanocijevi su cilindrične strukture izgrađene od ugljikovih atoma čija duljina doseže vrijednosti na mikrometarskoj skali dok je dijametar nanometarskih dimenzija, a odlikuju se izuzetnim svojstvima; velikom čvrstoćom i tvrdoćom, toplinskom vodljivošću, temperaturnom stabilnošću i vodljivošću električne struje.<sup>1</sup> Tanki film jednozidnih ugljikovih nanocijevi pripremljen je iz CoMoCAT materijala na stakalcu sa slojem indijevog oksida dopiranog kositrom (ITO) i na elektrodi od platinske mrežice filtracijskom tehnikom uz polifluoren (PFO) kao ekstrakcijsko sredstvo.<sup>2</sup> Spektroelektrokemijskom metodom istraživani su filmovi različitih debljina. Nakon primjene potencijala mjerena je apsorpcija filmova kako bi se detektirale promjene u optičkim prijelazima ugljikovih nanocijevi i odredila širina energetske procjepa. Dobiveni rezultati ukazuju na to da se pripremom filma na elektrodi od platinske mrežice dobiva spektar s manje šuma iz kojeg se jednoznačnije i preciznije može odrediti širina energetske procjepa u usporedbi s filmom pripremljenim na ITO stakalcu.

Rad je izrađen na Institutu za Fizikalnu i Teorijsku kemiju, Julius-MaximiliansUniversität, Würzburg, u Njemačkoj.



[1] M. Kumar, Y. Ando, Journal of Nanoscience and Nanotechnology, Vol 10. (2010) 3739-3758

[2] H. Ozawa, N. Ide, T. Fujigaya, Y. Niidome, N. Nakashima, Chem. Lett. 40 (2011) 239-241

## Interakcije TiO<sub>2</sub> nanožica s dimernom površinski aktivnom tvari

Dario Dabić, Kristina Kučanda, Atiđa Selmani

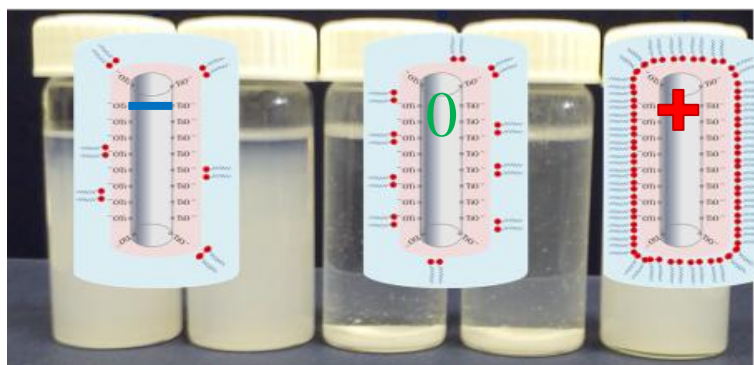
Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek  
dariottp@gmail.com, kristina.kucanda@gmail.com

Uspješna primjena nanomaterijala za pročišćavanje otpadnih voda mora zadovoljiti određene kriterije, počevši od dizajna i sinteze pa do ispitivanja parametara koji uvjetuju njihovu primjenu u različitim medijima.<sup>1</sup> Na stabilnost nanomaterijala utječu različiti čimbenici poput koncentracije nanočestica, sastava medija, ionske jakosti i pH medija. Otpadne vode kompleksan su sustav koji se sastoji od različitih organskih molekula, iona teških metala i radioaktivnih iona koji mogu promijeniti svojstva nanomaterijala te u konačnici i njihovu efikasnost.<sup>2</sup> Iz tog razloga iznimno je bitno ispitati čimbenike koji uvjetuju stabilnost i interakciju nanomaterijala s različitim spojevima koji se mogu naći u otpadnim vodama. Površinske aktivne tvari (PAT, surfaktanti, tenzidi, detergentsi) klasa su spojeva koji su sve prisutniji u svakodnevnom životu, pa se intenzivno istražuju i sintetiziraju nove PAT poboljšanih svojstava.

Cilj je ovog rada istražiti interakciju TiO<sub>2</sub> nanožica (NW) s kationskom dimernom površinski aktivnom tvari, bis(*N,N*-dimetil-*N*-dodecil)etilen-1,2-diamonijevim dibromidom (DimBr<sub>2</sub>), u vodenim otopinama pri sobnoj temperaturi.

Interakcija TiO<sub>2</sub> NW i DimBr<sub>2</sub> ispitana je mjerenjem elektroforetske pokretljivosti, veličine čestica (dinamičkim raspršenjem svjetlosti) i vizualnim opažanjem u vremenskom periodu od 24 h, pri odabranim koncentracijama TiO<sub>2</sub> i DimBr<sub>2</sub>. Konduktometrijom je određena kritična micelizacijska koncentracija DimBr<sub>2</sub>, dok je morfologija TiO<sub>2</sub> NW određena pretražnim elektronskim mikroskopom, a njihova specifična površina višeslojnom adsorpcijom plinovitog dušika BET metodom. Porastom koncentracije PAT, elektroforetska pokretljivost raste od jako negativnih do jako pozitivnih vrijednosti, što upućuje na adsorpciju PAT na TiO<sub>2</sub> NW. Pri vrijednostima pokretljivosti blizu nule opažena je ubrzana agregacija TiO<sub>2</sub> NW, što rezultira porastom veličine čestica i taloženjem, dok je pri najvećoj koncentraciji surfaktanta opažena usporena agregacija. Predložen je model kojim se mogu objasniti dobiveni rezultati.

Rad je napravljen na Zavodu za fizikalnu kemiju Kemijskog odsjeka PMF-a.



[1] G. R. Patzke, Y. Zhou, R. Kontic, F. Conrad, *Angew. Chem. Int. Ed.* **50** (2011) 826.

[2] W. Liu, T. Wang, A. G. L. Borthwick, Y. Wang, X. Yin, X. Li, J. Ni, *Science of the Total Environment* **456** (2013) 171.

## Poboljšano uklanjanje fosfata iz vode pravilno strukturiranim mezoporoznim silicijevim dioksidom koji je dopiran samarijevim oksidom

Milenko Korica<sup>1</sup>, Igor Đerđ<sup>2</sup>, Marko Nusko<sup>2</sup>, međunarodni suradnici (Shaojuan Deng<sup>3</sup>, Fei Zhang<sup>3</sup>, Yan Wang<sup>3</sup>, Bingqian Han<sup>3</sup>, Yude Wang<sup>3</sup>)

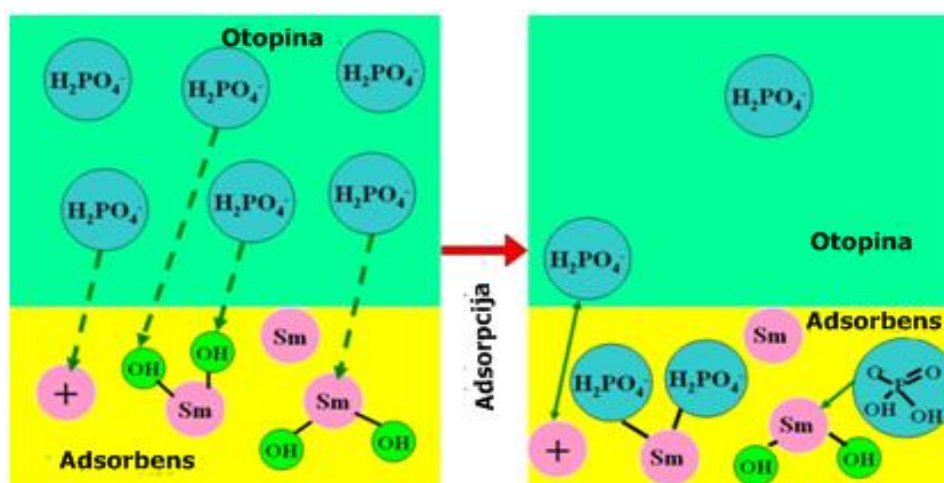
<sup>1</sup>Odjel za kemiju, Cara Hadrijana 8/A, 31000 Osijek, Hrvatska

<sup>2</sup>Institut Ruđer Bošković, Biljanička 54, 10000 Zagreb, Hrvatska

<sup>3</sup>Department of Materials Science and Engineering, Yunnan University, 650091 Kunming, NR Kina  
mile91k@gmail.com

Sintetizirane su serije pravilno strukturiranog mezoporoznog silicijevog dioksida tretiranog samarijevim oksidom (Sm-MCM-41) laganim sol-gel postupkom u jednom koraku koristeći cetiltrimetilamonijev bromid (CTAB) kao predložak, tetraetilortosilikat (TEOS) kao izvor silicijevog dioksida i samarijev klorid heksahidrat kao prekursor. Sintetizirani materijali sa Sm/Si molarnim omjerom od 0.2 do 0.8 su okarakterizirani difrakcijom X-zraka (XRD), transmisijском elektronskom mikroskopijom (TEM) i N<sub>2</sub> adsorpcijsko-desorpcijskim mjerenjem (BET metoda). Svi promatrani spojevi posjeduju pravilnu heksagonalnu strukturu s velikom površinom, velikim volumenom pora i jednolikom veličinom pora. Mezoporozni sastojci su korišteni kao novi adsorbens za uklanjanje fosfata iz sintetske vodene otopine. Kapacitet uklanjanja fosfata koristeći Sm-MCM-41 u molarnom omjeru 0.6 je dosegao čak do 20 mg P/g. Sm-MCM-41 materijali, u usporedbi s MCM-41 i Sm<sub>2</sub>O<sub>3</sub> česticama, imaju veliki kapacitet za uklanjanje fosfata, što ih čini obećavajućim kandidatima za kontrolu i zaštitu vode.

Rad je napravljen na Odjelu za kemiju i na Institutu Ruđer Bošković u suradnji sa sveučilištem Yunnan.



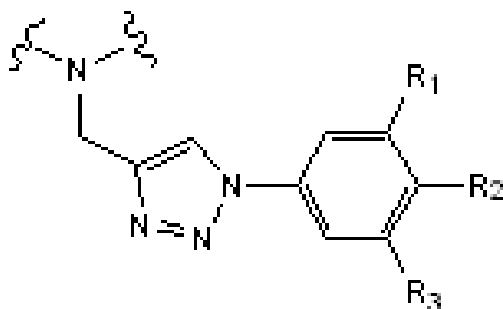
## Sinteza 1,4-disupstituiranih 1,2,3- triazola na položaju N-1 i N-3 5-bromuracila

Tomislav Gregorić, Silvana Raić-Malić

Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije,  
tgregoric@fkit.hr

Triazolni prsten, kao bioizoster amidne veze, ubraja se među važne biološki aktivne spojeve odgovorne za protutumorske i protumikrobne učinke. Najuspješnija metoda za sintezu 1,4-disupstituiranog 1,2,3-triazola je Huisgenova cikloadicija terminalnih alkina i azida s bakrom (I), kao katalizatorima. Reakcija se, prema zadanim uvjetima i dobivenim iskorištenjima, može svrstati u 'klik' reakcije. Pored toga, potvrđeno je da hibridi 1,2,3-triazola i odgovarajućih heterocikla, poput pirimidina, kinolina, kumarina, izatina, povećavaju biološku učinkovitost molekula [1].

U ovom su radu prikazani sintetizirani mono (N-1) i disupstituirani (N-1, N-3) derivati 5-bromuracila, odnosno njihovi konjugati s 1,2,3-triazolom. Ciljani spojevi sintetizirani su regioselektivnom reakcijom 1,3-dipolarne cikloadicije N-propargilnih derivata 5-bromuracila i odgovarajućih aromatskih azida, uz bakar kao katalizator. Za pripravu N-1 monosupstituiranih derivata 5-bromuracila provedene su okolišu prihvatljive sinteze potpomognutom mikrovalovima, dok su N-1, N-3 disupstituirani pirimidinski derivati sintetizirani pri sobnoj temperaturi preko noći.



1. R<sub>1</sub>= H R<sub>2</sub>= F R<sub>3</sub>= H
2. R<sub>1</sub>= H R<sub>2</sub>= Cl R<sub>3</sub>= H
3. R<sub>1</sub>= H R<sub>2</sub>= H R<sub>3</sub>= F
4. R<sub>1</sub>= Cl R<sub>2</sub>= H R<sub>3</sub>= Cl

Slika 1. Prikaz sintetiziranih spojeva.

1. S. Korunda, S. Krištafor, M. Cetina, S. Raić-Malić, *Curr. Org. Chem.* 17 (2013) 1114.

## Sinteza i karakterizacija karbazolnih gvanidina, novih anionskih receptora

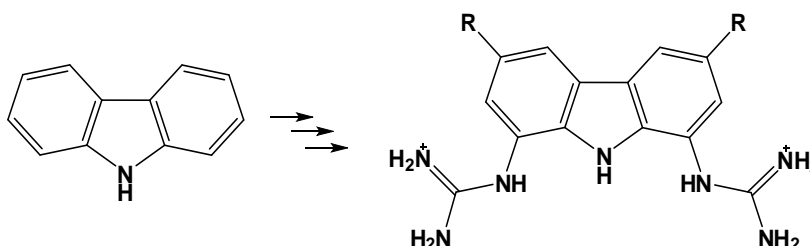
Saša Opačak<sup>1</sup>, Marina Šekutor<sup>2</sup>, Kata Mlinarić-Majerski<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek

<sup>2</sup>Zavod za organsku kemiju i biokemiju, Institut Ruđer Bošković  
sasaopacak@gmail.com

Sinteza anionskih receptora je atraktivno područje supramolekulske kemije zbog sveopće prisutnosti aniona u okolišu i organizmima.[1] Naročito zanimljivi receptori su supstituirani karbazoli koji mogu stvarati različito obojene komplekse s pojedinim anionima što omogućava lakšu analizu i razlikovanje aniona. U literaturi su primjerice poznati ureidni derivati karbazola koji kompleksiraju anione putem stvaranja vodikovih veza između aniona i NH skupina karbazola odnosno uree.[2]

Cilj ovoga rada je sinteza 1,8-bisgvanidinskih karbazola s različitim supstituentima na položajima 3 i 6 (R = Cl, Br, I, CN, OMe, alkil, itd.). Variranjem supstituenata na aromatskim prstenovima mijenja se kiselost protona NH skupina karbazola i gvanidina čime se utječe na sposobnost stvaranja vodikovih veza.



Prva ciljna molekula je 1,8-bisgvanidin-3,6-diklorokarbazol, sinteza kojeg počinje kloriranjem karbazola. Nitriranjem 3,6-diklorokarbazola dobiven je 1,8-dinitro-3,6-diklorokarbazol koji je zatim reduciran katalitičkim hidrogeniranjem u 1,8-diamino-3,6-diklorokarbazol [3], ciljni prekursor za pripremu 1,8-bisgvanidin-3,6-diklorokarbazola. Idući korak sinteze bit će kondenzacija Boc-zaštićene tiouree [4] s 1,8-diamino-3,6-diklorokarbazolom te uklanjanje Boc zaštitne skupine kiselom hidrolizom, a u svrhu dobivanja ciljnog 1,8-bisgvanidin-3,6-diklorokarbazola. Strukture svih pripremljenih produkata potvrđene su <sup>1</sup>H NMR spektrima.

Nakon sinteze navedenog anionskog receptora na analogan način bit će pripremljeni i drugi gvanidinski derivati karbazola.

[1] Sessler, J. L., Gale, P. A., Cho, W.-S., Anion Receptor Chemistry, RSC, Cambridge, 2006.

[2] Thangadurai, T. D., Singh, N. J., Hwang, I., Lee, J. W., Chandran, R. P., Kim, K. S., J. Org. Chem. 72 (2007), 14.

[3] Chmielewski M. J., Charon, M., Jurczak, J., Org. Lett., 6, (2004), 20.

[4] Rether, C., Sicking, E., Boese, R., Schmuck, C., Beilstein J. Org. Chem. 6 (2010), 3.

## Priprava supstituiranih difenil-okсалата i fluorescentnih boja te njihova primjena u kemiluminiscenciji

Petar Štrbac<sup>1</sup>, Tomislav Portada<sup>2</sup>

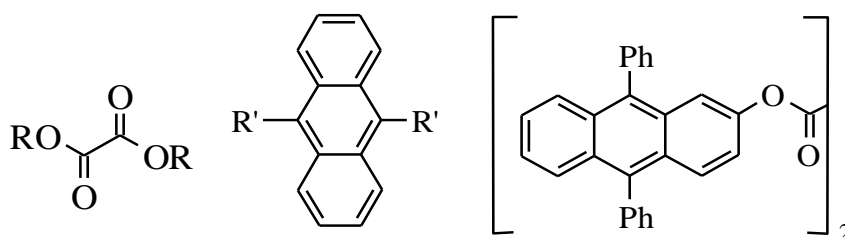
<sup>1</sup>Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu

<sup>2</sup>Zavod za organsku kemiju i biokemiju, Institut Ruđer Bošković  
petar.strbac@mail.ru

Reakcija estera oksalne kiseline s vodikovim peroksidom u prisutnosti fluorescentne boje praćena je intenzivnom kemiluminiscencijom koja ima i komercijalnu primjenu [1]. U ovom su radu literaturno opisanim postupcima pripravljena dva aktivirana estera oksalne kiseline, bis(2,4-dinitrofenil)-okсалat **1a** i bis(2,4,6-triklorfenil)-okсалat **1b** [2,3], te dvije fluorescentne boje, 9,10-difenilantracen **2a** [4] i 9,10-bis(feniletinil)antracen **2b** [5]. Optimizacijom postupka pripreve estera **1b** postignuto je iskorištenje od 95% što je značajno bolje od literaturno opisanih 50–60% [2,3].

Osmišljen je i pripremljen spoj **3** koji je u isto vrijeme i ester oksalne kiseline, i fluorescentna boja. Očekivanje da će se dodatkom spoja **3** u reakcijsku smjesu boja i (li) intenzitet svjetlosti značajnije mijenjati tijekom reakcije nažalost se nije ostvarilo.

U tijeku je optimizacija sinteze spojeva **2a** i **2b**.



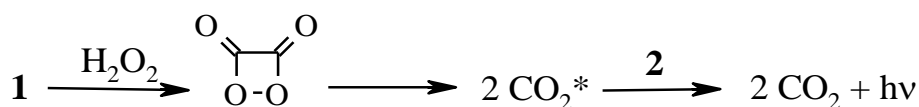
**1a** R = 2,4-dinitrofenil

**2a** R' = fenil

**3**

**1b** R = 2,4,6-triklorfenil

**2b** R' = feniletinil



Rad je izrađen na Institutu Ruđer Bošković u Laboratoriju za supramolekularnu i nukleozidnu kemiju.

[1] Ciscato, L. F. M. L. et al., ARKIVOC 2012 (iii) 391–430.

[2] McCapra, F., Methods in Enzymology, Bioluminescence and Chemiluminescence Part C, 305 (2000), 633–659.

[3] Mohan, A. G., Turro, N. J., J. Chem. Ed., 51 (1974) 528–529.

[4] Zhi, Z., Yang, X., Lu, L., Wang, X., The Chemical Educator 5 (2000) 42, 187–189.

[5] US Patent 3911038A.

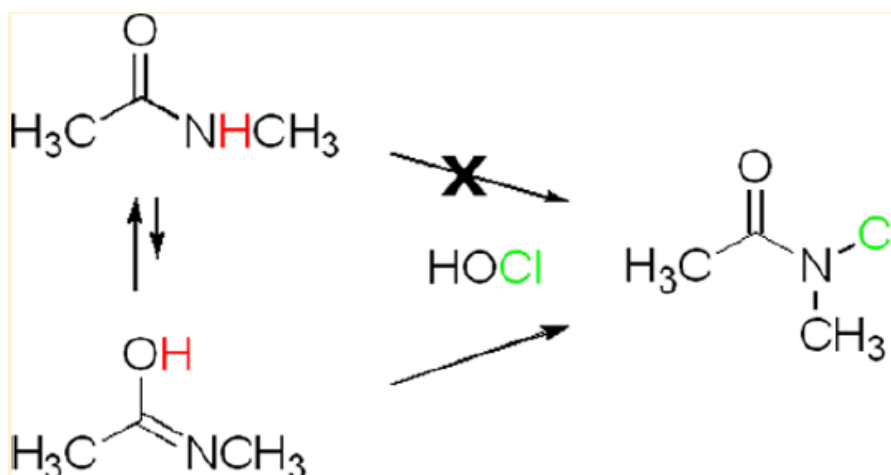


## Utjecaj supstituenata na N3 i C5 položaju na reaktivnost derivata barbiturne kiseline s hipoklornom kiselinom. Kvantno-kemijska studija.

Pavica Šonjić, Tana Tandarić, Davor Šakić, Valerije Vrčec  
 Farmaceutsko-biokemijski fakultet, Zagreb  
 pavica.sonjic@gmail.com, tana.tandarić@gmail.com

Pojava lijekova u okolišu u posljednjih je dvadesetak godina postala goruća ekološka tema. Poseban problem predstavljaju perzistentni lijekovi koji su otporni na razgradnju, biološku i kemijsku, pa se nakupljaju u okolišu zadržavajući svoja farmakološka svojstva. U skupini perzistentnih spojeva nalaze se barbiturati, antikonvulzivi čije koncentracije u vodama iznose i do 6 µg/L. Pokazano je da se tijekom kloriranja, odnosno kemijske obrade otpadnih voda, struktura barbiturata ne mijenja. Kako bismo objasnili kemijsku inertnost barbiturata prema kloriranju upotrijebili smo standardne kvantno-kemijske metode za opis reakcija odabranih barbiturata s hipoklornom kiselinom (HOCl). Na B3LYP teorijskoj razini detaljno je prikazan mehanizam reakcije kloriranja barbiturata koji su supstituirani različitim skupinama (alkili, cikloalkenili ili fenili vezani na C5 položaju). Izračunate energije barijera za kloriranje iznose preko 150 kJ/mol, što ukazuje na kinetičku stabilnost barbiturata. Energije barijera za kloriranje barbiturata supstituiranih elektronegativnim skupinama (-F, -Cl, -CN, -NO<sub>2</sub>) na C5 položaju niže su i do 30 kJ/mol. Računi su provedeni i s drugim elektron- odvlačecim skupinama. Ti rezultati pokazuju da kemijska sudbina barbiturata, npr. u postrojenjima za obradu voda, ovisi o vrsti supstituenata na C5-položaju. Provedeni su izračuni i za derivate barbiturne kiseline različito supstituirane na N3-položaju, što ne pokazuje znatan utjecaj na reakciju kloriranja, ali tumači slabu reaktivnost ovakvih derivata s hipoklornom kiselinom. Ova studija otvara mogućnost dizajna novih barbiturata koji su lakše razgradivi u okolišu i, prema tome, imaju povoljniji ekotoksikološki profil.

Rad je izrađen u Zavodu za organsku kemiju Farmaceutsko-biokemijskog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu.

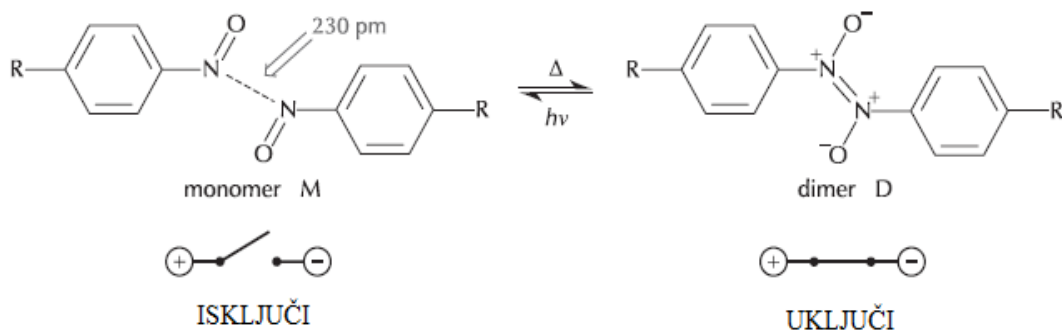


## Utjecaj topokemije na kinetiku dimerizacije *p*-halogennitrozobenzena u čvrstom stanju

Jana Volarić, Hrvoj Vančik

Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek  
janavolaric@gmail.com

Kao model za kinetičko istraživanje reakcija u čvrstom stanju uzeta je reakcija dimerizacije nitrozo spojeva prvenstveno zbog svoje jednostavnosti, pošto uključuje kidanje i nastajanje jedne veze, te mogućnosti praćenja procesa koristeći IR spektroskopiju. U ovom radu promatrane su kinetike dimerizacije *p*-halogennitrozobenzena u čvrstom stanju. Određena je ovisnost konstante brzine reakcije dimerizacije monomera 4-bromnitrozobenzena u KBr pastili o temperaturi, te je iz nje izračunata energija aktivacije. Unatoč načinu pakiranja 4-jodnitrozobenzena, gdje su sve molekule orijentirane tako da ne može doći do dimerizacije bez značajne promjene orijentacije, ipak zbog nesavršenosti kristala dolazi do dimerizacije molekula pri 60°C na kojoj je izračunata konstanta brzine reakcije. U nizu eksperimenata s 4-bromnitrozobenzenom promatrana je ovisnost konstante brzine reakcije dimerizacije o uređenosti sustava. Topokemijski utjecaj istraživao je na tri načina: pri kriogenim temperaturama nakon fotolize dimera, direktnom sublimacijom uzorka monomera i epitaksijom monomera na ohlađenu pločicu CsI pri kriogenim temperaturama kako bi se dobila različita uređenost sustava, od molekula monomera koji se nalaze u rešetci dimera nakon fotolize, molekula monomera u vlastitoj kristalnoj rešetci do nasumično orijentiranih molekula monomera u tankom sloju.



## Mononuklearni kompleksi molibdena(VI):

### *trans*-utjecaj kisikovih atoma

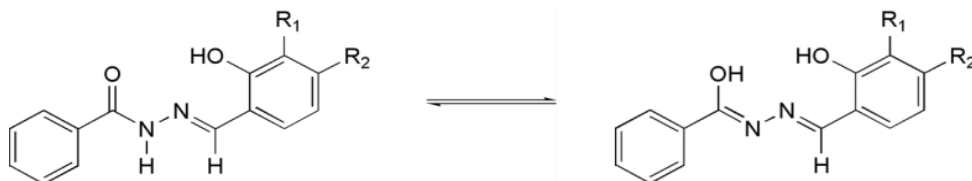
Alen Bjelopetrović<sup>1</sup>, Višnja Vrdoljak<sup>1</sup>, Gordana Pavlović<sup>2</sup>,  
Marina Cindrić<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek,  
Zavod za opću i anorgansku kemiju,

<sup>2</sup>Sveučilište u Zagrebu, Tekstilno-tehnološki fakultet, Zavod za primjenjenu kemiju  
abjelopetrovic@chem.pmf.hr

Mononuklearni kompleksi molibdena(VI) priređeni su reakcijom  $[\text{MoO}_2(\text{acac})_2]$  i hidrazona, tridentatnih liganada koji uz C=N dvostruku vezu imaju i N-N jednostruku vezu. Hidrazoni se stabiliziraju kroz ketoamino-enolimino tautomeriju, a strukturna su istraživanja pokazala postojanje obje forme u kompleksnim spojevima.

Ispitivanja su također pokazala da kompleksi inhibiraju transkripciju DNA i zaustavljaju rast stanica, a opaženi efekt je i do 100 puta jači od efekta samog liganda.<sup>1</sup> U okviru istraživanja kemije kompleksnih spojeva molibdena priređeni su kompleksi opće formule  $[\text{MoO}_2(\text{L})\text{D}]$ , gdje je L hidrazonato ligand (L<sup>1</sup>: R<sub>1</sub>=H; R<sub>2</sub>=H, L<sup>2</sup>: R<sub>1</sub>=OCH<sub>3</sub>, R<sub>2</sub>=H; L<sup>3</sup>: R<sub>1</sub>=H, R<sub>2</sub>=OCH<sub>3</sub>). Reakcije pripreme kompleksa provedene su u različitim alkoholima (CH<sub>3</sub>OH, C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OH, C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>OH ili (CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>COH) te acetonitrilu, CH<sub>3</sub>CN i uz dodatak Lewisovih baza, piridina,  $\alpha$ -pikolina i  $\gamma$ -pikolina.



Rentgenska strukturna analiza izoliranih kompleksa pokazala je da je na  $\text{MoO}_2^{2+}$  skupinu hidrazonski ligand vezan tridentatno, preko deprotonirane hidroksilne skupine, dušika i kisika, dok je oktaedarska koordinacija molibdena postignuta vezanjem alkohola ili baze kao monodentatnih O- odnosno N- donorskih liganada. Nastala koordinativna veza molibden-O ili -N znatno je slabija od preostalih veza što omogućuje lakšu zamjenu liganda na šestom koordinacijskom mjestu. Svi izolirani kompleksi identificirani su na temelju podataka iz infracrvenih spektara, termogravimetrijske analize i difrakcije rentgenskog zračenja na polikristalnom uzorku, a u pojedinim slučajevima i difrakcijom rentgenskog zračenja na monokristalnom uzorku.

Ovaj rad je izrađen na Zavodu za opću i anorgansku kemiju Kemijskog odsjeka Prirodoslovno-matematikog fakulteta u Zagrebu.

<sup>[1]</sup> E. W. Ainscough, A. M. Brodie, W. A. Denny, G. J. Finlay, S. A. Gothe, J. D. Ranford, *J. Inorg. Biochem.* **77** (1999), 125-133

## Sinteza i karakterizacija kompleksa molibdena (VI): reakcije u otopini i čvrstom stanju

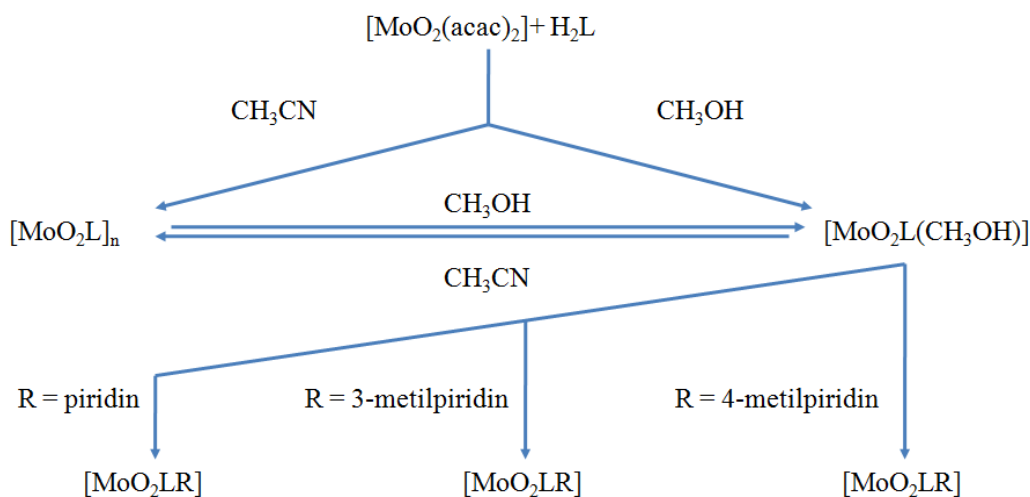
Luka Bilić, Marina Cindrić, Jana Pisk, Mirta Rubčić, Marijana Đaković

Prirodoslovno-matematički fakultet, Zavod za opću i anorgansku kemiju, Kemijski odsjek, Horvatovac 102a

lbilic@chem.pmf.hr

Priređeni su kompleksni spojevi molibdena(VI),  $[\text{MoO}_2\text{L}(\text{CH}_3\text{OH})]$  (L = ONO-ligand), sa svrhom proučavanja izmjena liganada u *trans* položaju u odnosu na okso kisik  $\text{MoO}_2^{2+}$  skupine. U okviru ovog istraživanja priređeni su i indentificirani kompleksi molibdena(VI) s 3-(2-hidroksi-5-metilfenil-amino)- i 3-(2-hidroksi-4-metilfenil-amino)-1-fenilbut-2-en-1-onom, ligandima dobivenim reakcijama 2-amino-4-metilfenola odnosno 2-amino-5-metilfenola i 1-benzil-1,3-butadiona u etanolu ( $\text{L}^1 = \text{Bzac-4Me}$  odnosno  $\text{L}^2 = \text{Bzac-5Me}$ ). Kompleksi molibdena(VI) su priređeni reakcijom *bis*(2,4-pentandionato)dioksomolibdena(VI) i odgovarajućeg liganda u metanolu. Molekulska i kristalna struktura kompleksa  $[\text{MoO}_2\text{L}^1(\text{CH}_3\text{OH})]$  i  $[\text{MoO}_2\text{L}^2(\text{CH}_3\text{OH})]$  te njihovih derivata  $[\text{MoO}_2\text{L}^1\text{R}]$  i  $[\text{MoO}_2\text{L}^2\text{R}]$  (R = piridin, 3-metilpiridin i 4-metilpiridin) je određena na temelju podataka rentgenske strukturne analize, infracrvene spektroskopije, elementne i termogravimetrijske analize. Ispitivanja svojstava priređenih kompleksa su pokazala da je moguća izmjena koordiniranog metanola s drugim ligandima kao što su piridin, 3-metilpiridin i 4-metilpiridin u otopini i u čvrstom stanju. Ustanovljeno je također da u odsutnosti koordinirajućeg liganda kao što je alkohol ili neka N-baza dolazi do polimerizacije i nastanka  $[\text{MoO}_2\text{L}]_n$  kompleksa. Izmjena O- i N-donorskih liganada kao i polimerizacija su popraćene promjenom boje.

Ovo istraživanje je napravljeno na Zavodu za opću i anorgansku kemiju, Kemijskog odsjeka Prirodoslovno-Matematičkog fakulteta.





## Mehanokemijska sinteza poroznih metaloorganskih mreža

Tomislav Stolar<sup>1</sup>, Stipe Lukin<sup>1</sup>, Ivan Halasz<sup>2</sup>, Ivica Đilović<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek

<sup>2</sup>Zavod za fizičku kemiju, Institut Ruđer Bošković

tstolar@chem.pmf.hr, slukin@chem.pmf.hr

Metaloorganske mreže su metalne koordinacijske sfere koje su povezane organskim poveznicama. Zajedno tvore 3D poroznu strukturu mreža zbog koje imaju važnu industrijsku primjenu. Mehanokemijskom sintezom u čvrstom stanju priređene su metaloorganske mreže MOF-74 i HKUST-1. Kao izvor metala korišteni su njihovi oksidi koji daju vodu kao nusprodukt. Pokusi su izvođeni u uvjetima LAG i ILAG, a ishodi pojedinih reakcija s odgovarajućim oksidima analizirani su difrakcijskim metodama, infracrvenom spektroskopijom, te vremenski razlučenom *in situ* Ramanovom spektroskopijom. Utvrđeno je da MOF-74 nastaje isključivo pod ILAG uvjetima sinteze koji uključuju dodatak tekućeg DMF-a te amonijevog nitrata kao ionskog aditiva. Vrijeme reakcije utvrđeno je optimizacijom metode *in situ* Ramanovom spektroskopijom. Izravna mehanosinteza HKUST-1 nije dala trenutnih rezultata, ali on je nastao starenjem reakcijske smjese kroz nekoliko tjedana.

Rad je izrađen u Laboratoriju za sintezu novih materijala na Zavodu za kemiju materijala Instituta Ruđer Bošković i na Zavodu za opću i anorgansku kemiju Kemijskog odsjeka Prirodoslovno-matematičkog fakulteta.

## Preferencija piridinskog dušika prema alifatskoj karboksilnoj skupini u binarnim krutinama izvedenim iz derivata piridina i *N*-(2-karboksifenil) glicina

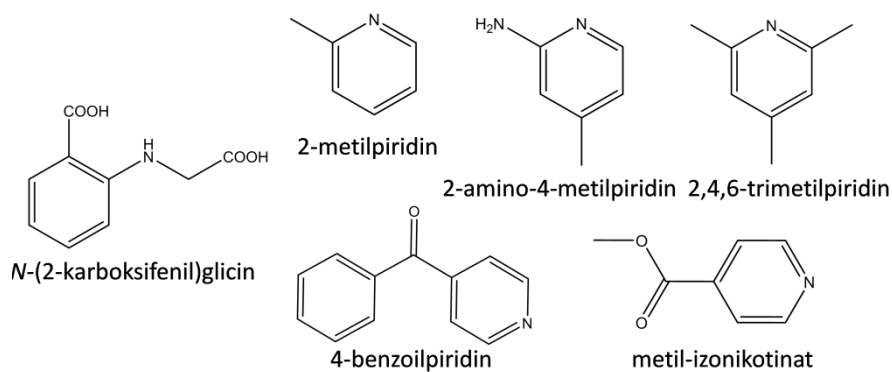
Nikola Bedeković, Vladimir Stilinović

Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek, Zagreb

nbedeko2@gmail.com

Piridin i njegovi derivati stupaju u interakcije s karboksilnim kiselinama, kako u otopini tako i u čvrstom stanju. Karboksilne kiseline sadrže karboksilnu skupinu koja u protoniranom obliku može poslužiti kao donor vodikove veze prema piridinskom dušiku pa se interakcija među tim jedinkama uspostavlja uglavnom vodikovim vezama. Moguća je i deprotonacija karboksilne skupine, odnosno protonacija dušikovog atoma na piridinu ili neke bočne skupine na piridinskom prstenu te stvaranje ionskog para. Ovisno koja od tih interakcija prevlada, kristalizacijom iz otopine mogu nastati soli ili kokristali kiseline i piridinskog derivata. U ovome radu korištena je aromatsko-alifatska dikiselina *N*-(2-karboksifenil)glicin, koja ima mogućnost vezanja piridinâ na obje karboksilne skupine. Sklonost vezivanja piridinâ na pojedinu karboksilnu skupinu proučavana je sintezom dvokomponentnih krutina koje se sastoje od spomenute dikiseline i piridinâ stehiometrije 1:1, te proučavanjem kristalnih struktura nastalih spojeva. Rezultati dobiveni proučavanjem struktura dvokomponentnih kristala ukazuju na preferencijalno vezanje piridinâ na alifatsku karboksilnu skupinu dikiseline.

Rad je izrađen na Zavodu za opću i anorgansku kemiju, Kemijskog odsjeka Prirodoslovno-matematičkog fakulteta u Zagrebu.



Shema 1. Prikaz spojeva korištenih u sintezi dvokomponentnih krutina.

## Sinteza i karakterizacija polimorfnih oblika

### 2-amino-4-metilpiridinijeva salicilata

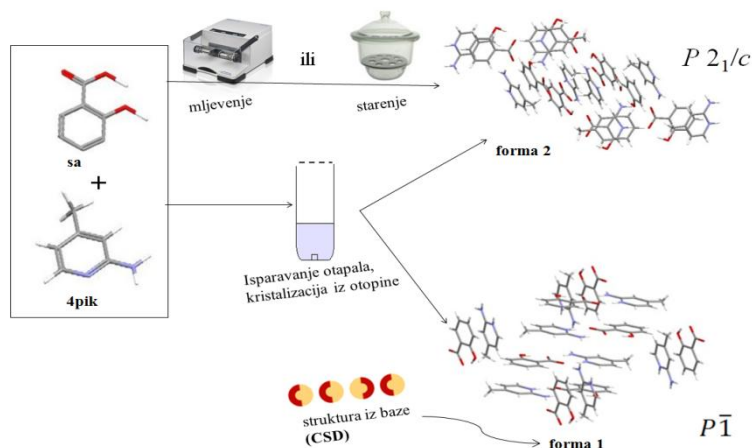
Neven Golenić, Ivan Ilić, Tomislav Piteša, Dominik Cinčić

Prirodoslovno matematički fakultet, Kemijski odsjek

neven.golenic@gmail.com; iilic25693@gmail.com; tpitesa@gmail.com

Jedno od važnijih područja kristalnog inženjerstva jest predviđanje i razumijevanje faktora koji utječu na kontrolu polimorfije, odnosno na usmjeravanje supramolekulskog povezivanja molekula prema željenom supramolekulskom ishodu [1]. U ovome radu pripravljena je sol salicilne kiseline (**sa**) s 2-amino-4-pikolinom (**4pik**). Tradicionalnom metodom kristalizacije iz otopine dobivena su dva polimorfna oblika soli, triklinski (Forma I) i monoklinski (Forma II). Triklinski oblik prethodno je već opisan u literaturi te su njegovi strukturni podatci iznađeni u bazi strukturnih podataka *Cambridge Structural Database (CSD)* [2], [3]. Metodom mljevenja potpomognutim kapljevinom te metodom starenja izučavana je mogućnost nastajanja oba polimorfna oblika. Pokazalo se da je Formu I moguće izolirati samo kristalizacijom iz otopine i to u smjesi s Formom II dok su svi mehanokemijski pokusi rezultirali fazno čistim produktom, Formom II. Pripravljene polimorfi te reaktanti, **sa** i **4pik**, izučavani su metodom difrakcije rentgenskih zraka na praškastom uzorku i diferencijalnom pretražnom kalorimetrijom. Za monoklinski oblik metodom difrakcije rentgenskog zračenja na jediničnom kristalu iznađena je molekulska i kristalna struktura. Za oba polimorfa računane su elektrostatske energije jediničnih ćelija metodom Hartree-Fock (Gaussian 09W, osnovni skup: 3-21G, neperiodički račun).

Istraživanje je napravljeno na Kemijskom odsjeku Prirodoslovno-matematičkog fakulteta u Zagrebu.



[1] J. Bernstein, *Polymorphism in Molecular Crystals*, Clarendon Press, Oxford, 2002.

[2] Hemamalini, M., Fun, H.-K., *Acta Crystallogr.*, **E66** (2010) o2151.

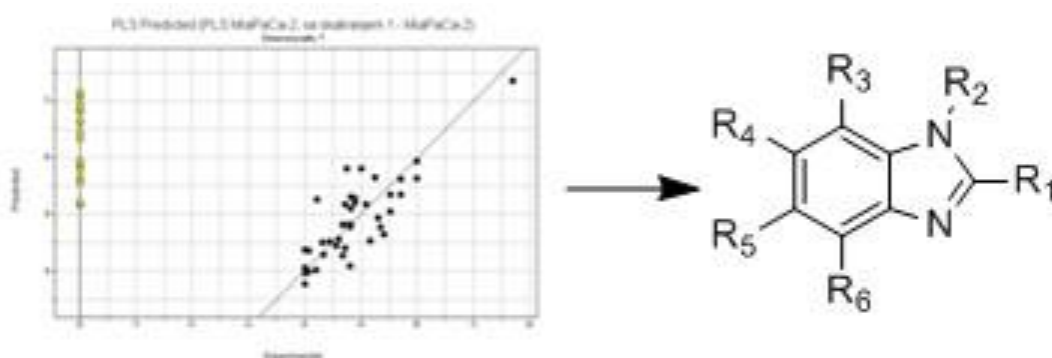
[3] F. H. Allen, *Acta Crystallogr.*, **B58** (2002) 380.

## Kvantitativni odnos strukturnih svojstava i antitumorske aktivnosti derivata benzimidazola

Darko Vušak, Branimir Bertoša

Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu,  
Zagreb  
darko.vusak@yahoo.com

Derivati benzimidazola vrlo su važni spojevi u farmakologiji te se koriste u raznim područjima medicine zbog antimikrobiološke aktivnosti, a između ostalog imaju i velik potencijal kao antitumorski lijekovi. Mehanizmi antitumorskog djelovanja derivata benzimidazola se razlikuju s obzirom na strukturu molekule, a nekad nisu u potpunosti poznati. Kemometrijske metode su se pokazale veoma korisnima budući da pronalaženje pogodnih lijekova može biti vremenski i ekonomski zahtjevno. Poznavanjem strukture spojeva te njihove biološke aktivnosti moguće je kreirati kemometrijski model koji kvantificira utjecaj strukture na djelovanje spoja na tumorske stanice. U istraživanju su korištene multivarijantne tehnike analiza glavnih komponenta – PCA i parcijalna projekcija najmanjih kvadrata – PLS. PCA metodom grupirane su strukturno slične molekule, a pomoću PLS su kreirani statistički modeli te su pomoću njih dizajnirani novi spojevi poboljšane aktivnosti. Istraživanje je provedeno na Zavodu za fizikalnu kemiju na Kemijskom odsjeku Prirodoslovno-matematičkog fakulteta u Zagrebu u sklopu Višeg praktikuma fizikalne kemije.



[1] M. Hranjec et al., *Eur. J. Med. Chem.* **43**(2008) 2877.



## **Djelotvornost novih gvanidinskih katalizatora i optimiranje procesa dobivanja biodizela metodom odzivnih površina**

Marko Racar<sup>1</sup>, Ivana Šoljić Jerbić<sup>1</sup>, Zoran Glasovac<sup>2</sup>, Mirjana Eckert-Maksić<sup>2</sup>,  
Zrinka Kauzlarić<sup>3</sup>, Olivera Platiša<sup>3</sup>, Ante Jukić<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Zavod za tehnologiju nafte i petrokemiju, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb

<sup>2</sup> Zavod za organsku kemiju i biokemiju, Institut Ruđer Bošković, Zagreb

<sup>3</sup> Kontrolni laboratorij RN Sisak, Ina Industrija nafte d.d., Sisak  
mracar@fkit.hr

Biodizel predstavlja alternativno gorivo koje sa sobom donosi brojne prednosti kao što su: smanjenje emisija stakleničkih plinova, obnovljivost, biorazgradivost, netoksičnost, ne sadrži sumpor te omogućava smanjenje ovisnosti o fosilnim gorivima. Kako bi se omogućila šira primjena biodizela potrebno je ekonomski i ekološki poboljšati proces njegove proizvodnje. Drugim riječima, kako je proizvodnja biodizela katalitički proces, javlja se potreba za razvojem novih i boljih katalizatora uz optimiranje procesa. Današnji procesi proizvodnje biodizela primjenjuju uglavnom NaOH i KOH kao katalizatore za proces transesterifikacije, no njihova primjena pokazuje brojne poteškoće ukoliko se u reakcijskoj smjesi nalaze veći udjeli vode ili slobodnih masnih kiselina zbog nepoželjne sporedne reakcije saponifikacije, što može dovesti do nastanka emulzija te otežanog izdvajanja glicerola. U ovom radu ispitana je primjena novih derivata gvanidina (organskih superbaza) kod kojih nema poteškoća s reakcijama saponifikacije. Osim ispitivanja različitih gvanidinskih katalizatora u ovom radu provedeno je i optimiranje procesa transesterifikacije repičinog ulja s najdjelotvornijim ispitanim gvanidinskim katalizatorom primjenom metode odzivnih površina (RSM). Pri tome su u planiranju pokusa varirana tri parametra (maseni udio katalizatora, vrijeme provedbe reakcije te omjer metanola i repičinog ulja) na tri razine. Kao rezultat metode odzivnih površina dobiven je empirijski matematički model procesa transesterifikacije pomoću kojeg su određeni optimalni uvjeti: maseni udio katalizatora od 1,75 mas. %, molarni omjer metanola i repičinog ulja od 6,21:1 te vrijeme provedbe reakcije od 80 minuta. Optimalni uvjeti provedbe procesa transesterifikacije repičinog ulja potvrđeni su u uvećanom mjerilu, a dobivenom biodizelu određena su glavna fizikalno-kemijska i primjenska svojstva koja su potvrdila visoku razinu kvalitete na komercijalnoj razini.

## Primjenjivost *in vitro* testova citotoksičnosti za procjenu bioloških učinaka srebrnih nanočestica

Tea Crnković<sup>1</sup>, Ivana Vinković Vrček<sup>2</sup>

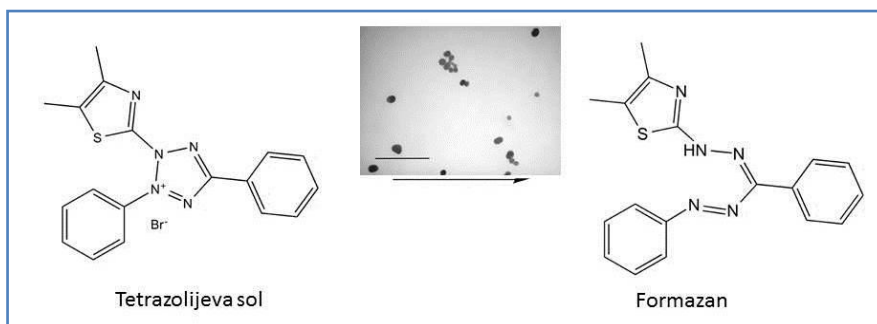
<sup>1</sup>Farmaceutsko-biokemijski fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb

<sup>2</sup>Jedinica za analitičku toksikologiju i mineralni metabolizam, Institut za medicinska istraživanja i medicinu rada, Zagreb

tcrnkovic@student.pharma.hr

*In vitro* testovi citotoksičnosti, zbog lake dostupnosti i izvedivosti, često se koriste kao moćan instrument u procjeni rizika novih kemikalija. Međutim, nedavna istraživanja su pokazala da primjena klasičnih *in vitro* testova u ispitivanju bioloških učinaka nanočestica može dovesti do lažno negativnih ili lažno pozitivnih rezultata [1]. Razlog tome jest reaktivnost i nepredvidivo ponašanje nanočestica koje se od „tradicionalnih“ kemikalija razlikuju po iznimno velikom udjelu površine obzirom na volumen. Tako se mogu očekivati interakcije s reagensima koji se rabe u tim testovima, adheriranje nanočestica na staničnu površinu i interferencije optičke prirode [2].

U ovom je istraživanju ispitana primjenjivost *in vitro* testova koji rabe derivate tetrazolijevih soli (MTT, MTS i WST) za određivanje toksičnosti srebrnih nanočestica. Testiran je ionski oblik srebra (u obliku AgNO<sub>3</sub>), te nekoliko vrsta srebrnih nanočestica koji su se razlikovali obzirom na veličinu čestica i njihovu površinsku strukturu. Za svaki od ovih uzoraka ispitali smo učinak različitih koncentracija ionskog i nano oblika srebra na stupanj redukcije tetrazolijeve soli do formazana. Rezultati su prikazani kao % nastalog formazana u odnosu na kontrolne uzorke u kojima je tetrazolijeva sol inkubirana u biološkom mediju bez dodatka srebra. Utvrđeno je da ionski oblik srebra ne uzrokuje nikakav učinak u ispitivanom koncentracijskom rasponu, dok su svi uzorci srebrnih nanočestica inducirali redukciju svih vrsta tetrazolijevih soli u formazan u primjenjenim koncentracijama. Prema tome, ove *in vitro* metode primjenjive su samo za testiranja učinaka nanočestica srebra pri onim koncentracijama koje nemaju utjecaj na reagens. Istraživanje je provedeno na Institutu za medicinska istraživanja i medicinu rada u Zagrebu.



[1] In Vitro Evaluation of Cellular Response Induced by Manufactured Nanoparticles, M., Horie, Chem. Res. Toxicol., 25 (2012) 605–619

[2] Particle-Induced Artifacts in the MTT and LDH Viability Assays, L., Holder, Chem. Res. Toxicol., 25 (2012) 1885–1892.





**GLAVNI SPONZOR**

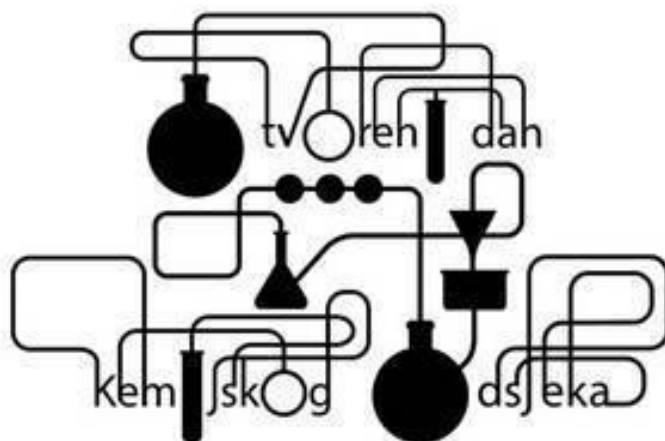


**PLIVA**

## DONATORI



The Chemical Company



**POS** d.o.o.

INFORMATIČKE USLUGE – SPLIT

# Knjiga sažetaka

2. Simpozij studenata kemičara

24. listopada 2015.

Zagreb



## **ORGANIZACIJSKI ODBOR**

Nikola Bedeković, predsjednik

Kristina Smokrović

Nea Baus

Mihael Eraković

Ingrid Gregorović

Karolina Kolarić

Milenko Korica

Ana Mikelić

Ana Milas

Tomislav Piteša

Petar Štrbac

Tana Tandarić

Edi Topić

Ana Vlašić

## **SURADNICI**

Dr. sc. Dominik Cinčić, doc.

Dr. sc. Vladimir Stilinović, doc.

Danijel Namjesnik, dipl. ing.

Dr. sc. Srđanka Tomić-Pisarović, red. prof.

## ORGANIZATOR



Studentska sekcija Hrvatskog kemijskog društva

## POKROVITELJI



Hrvatsko kemijsko društvo



Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek



## **UREDNICI**

Ana Milas

Tomislav Piteša

## **TEKST PRIPREMILI**

AUTORI, koji su odgovorni za tekst sažetaka

## **IZDAVAČI**

Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek

Hrvatsko kemijsko društvo

## **SPONZORI**

PLIVA Hrvatska d.o.o., Zagreb

Hrvatska akademija znanosti i umjetnosti



## TABLICA SADRŽAJA

|  |    |
|--|----|
| RIJEČ PREDSEDNIKA ORGANIZACIJSKOG ODBORA ..... | 6  |
| RIJEČ PROČELNICE SSHKD-a .....                 | 7  |
| PROGRAM .....                                  | 8  |
| SAŽECI .....                                   | 11 |
| PREDAVANJA .....                               | 13 |
| USMENA IZLAGANJA .....                         | 18 |
| SPONZORI .....                                 | 43 |

## RIJEČ PREDSEDNIKA ORGANIZACIJSKOG ODBORA

Nakon vrlo uspješne prošlogodišnje organizacije i provedbe prvog Simpozija studenata kemičara (SiSK) i ove se godine grupa mladih entuzijasta prihvatila organizacije, drugoga po redu, SiSK-a. Brojke vezane uz prošlogodišnji događaj su zbilja imponantne; po prvi puta smo uspjeli okupiti stotinjak studenata koji su uključeni u znanstveni rad na polju čiste i primijenjene kemije ili se pak žele uključiti u isti. U sklopu toga, održana su četiri velika predavanja te dvadeset kratkih izlaganja, naravno, uz upoznavanje, druženje te razmjenu iskustava među kolegama studentima.

I ove godine imamo isti cilj – na akademskoj razini povezati studente kemije i srodnih studija koji su uključeni u znanstveni rad, a ostale uvjeriti i ohrabriti da se u njega uključe. Siguran sam da će ovogodišnji velik broj predavanja i izlaganja iz različitih područja kemije rezultirati upravo time te da će SiSK ubuduće utjecati na uključivanje studenata u znanost, čime se osigurava i daljnje održavanje tradicije okupljanja studenata kemičara i narednih godina.

Važnost i značaj naše inicijative prepoznali su naši cijenjeni pokrovitelji (Hrvatsko kemijsko društvo, Kemijski odsjek, Hrvatska akademija znanosti i umjetnosti), sponzori (PLIVA) te profesori i asistenti naših fakulteta koji su nas usmjevali i poticali na daljnji rad. Zahvalan sam i cijelom Organizacijskom odboru na predanom radu, volji i vremenu utrošenom na organizaciju skupa. Ovakvom predanošću radu, podrškom starijih kolega, sponzora i pokrovitelja, daljnji uspjesi u organizaciji i provedbi idućih Simpozija studenata kemičara su zagwarantirani.

Nikola Bedeković

Predsjednik organizacijskog odbora

## RIJEČ PROČELNICE SSHKD-a

Dragi studenti, profesori i ostali sudionici,

godina je proletjela u trenu i već je došlo vrijeme da se održi drugi po redu Simpozij studenata kemičara. Studenti koji su se bavili istraživačkim radom tijekom godine imaju priliku prezentirati svoje rezultate, a nadam se i da će motivirati neke od studenata koji se još nisu uključili u znanstveni rad. Simpozij ima važnu ulogu u samoostvarenju mladih znanstvenika jer im daje priliku da usmeno prezentiraju svoj istraživački rad pred širom publikom od one na koju su naviknuti unutar svoje istraživačke grupe i smjera na odabranom fakultetu. Takav način izlaganja predstavlja priliku za diskusiju i suradnju na zajedničkim projektima.

Ove godine će se na simpoziju predstaviti i popularizacijski odred *Entropija* čiji je glavni cilj popularizacija znanosti među srednjoškolcima i višim razredima osnovne škole. *Entropija* djeluje unutar studentske sekcije Hrvatskog kemijskog društva kao dio projekta *Znanstvene čarolije* koji se bavi popularizacijom znanosti među djecom predškolske dobi i učenika nižih razreda osnovne škole. Studenti posjećuju vrtiće i izvode zanimljive pokuse kako bi zainteresirali najmlađe generacije za znanost. Projekt je započeo 2010. godine, a danas ga vodi kolegica Dajana Barišić. *Znanstvene čarolije* su jedan od najuspješnijih i najpopularnijih projekata Studentske sekcije.

Ovom prilikom zahvaljujem se kolegama iz organizacijskog odbora na uloženom radu i vremenu te Hrvatskom kemijskom društvu, Kemijskom odsjeku Prirodoslovno-matematičkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu, Plivi i Hrvatskoj akademiji znanosti i umjetnosti na financijskoj potpori. Također se zahvaljujem svim profesorima, docentima, asistentima i tehničkom osoblju na podršci i savjetima u realizaciji ovog projekta, te svim sudionicima Simpozija. Nadam se da će se neki od vas uključiti u rad studentske sekcije i sudjelovati u budućim projektima.

pročelnica Studentske sekcije Hrvatskog kemijskog društva

Kristina Smokrović

## PROGRAM

|             |   |
|-------------|---|
| 9:30-10:00  | <b>Registracija</b>   |
| 10:00-10:20 | <b>OTVARANJE SIMPOZIJA:</b><br>- riječ predsjednika Organizacijskog odbora: <b>Nikola Bedeković</b><br>- riječ pročelnika Kemijskog odsjeka PMF-a: prof. dr. sc. <b>Vladislav Tomišić</b><br>- riječ pročelnice Studentske sekcije Hrvatskog kemijskog društva: <b>Kristina Smokrović</b> |

|   |   |
|---|---|
| <b>PREDAVANJA:</b>                            |   |
| <b>A2 (predsjedavajući: Nikola Bedeković)</b> |   |
| 10:20-10:50                                   | <b>Juraj Nikolić i Tomislav Friganović</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Utjecaj aminskih kompleksa kobalta(III) na nastajanje polioksomolibdata</i>                                       |
| 10:50-11:20                                   | <b>Mario Špadina</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Ekperimentalni i teorijski pristup razumijevanju površinskih svojstava TiO<sub>2</sub> nanomaterijala u vodenoj otopini elektrolita</i> |
| 11:20-11:30                                   | <b>KRATKA PAUZA</b>   |
| 11:30-12:00                                   | <b>Dajana Barišić</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Sinteza i kompleksacijska svojstva aromatskih diurea</i>   |
| 12:00-12:30                                   | <b>Mihael Eraković, Demian Kalebić, Edi Topić i Petar Štrbac</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Kemiluminiscencija i kinetika pirotehnike</i>   |
| 12:30-13:00                                   | „COFFEE BREAK“  |

|                          |  |  |
|--------------------------|--|--|
| <b>USMENA IZLAGANJA:</b> |  |  |
|                          | <b>A1 (predsjedavajući: Tomislav Piteša)</b>   | <b>A2 (predsjedavajuća: Ana Milas)</b>   |
| 13:00-13:15              | <b>Nea Baus i Tamara Rinkovec</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Izgradnja anorganskih supramolekulskih arhitektura uz pomoć načela posuđenih iz organskih sustava</i>                             | <b>Lucija Krišto i Ivana Križić</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Sinteza novih kinuklidinijevih spojeva kao mogućih površinski aktivnih tvari</i>  |
| 13:15-13:30              | <b>Kristina Smokrović</b> (PMF, Zagreb): <i>Soli 2,4,6-trinitrobenzen-1,3,5-triola s donorima i akceptorima vodikove veze</i>  | <b>Dario Dugandžija</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Sinteza i karakterizacija novih heterocikličkih a-D-manokonjugata</i>   |
| 13:30-13:45              | <b>Luka Fotović</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Utjecaj reakcijskih uvjeta na supramolekulski ishod sinteze koordinacijskog spoja bakra(II) s iminom izvedenim iz 2-hidroksi-1-naftaldehida</i> | <b>Marina Marinović i Natalija Pantalon Juraj</b> (FKIT, Zagreb):<br><i>Dizajn, sinteza i imobilizacija novih fluorescentnih 1,2,3-triazolnih derivata kumarina za primjenu u (bio)kemijskim senzorskim materijalima</i>   |
| 13:45-14:00              | <b>Nives Matijaković i Nikolina Penić</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Polimerizacija halogenidnih i pseudohalogenidnih kompleksa kadmija(II) s izoniazidom i niazidom</i>                       | <b>Iva Trtanj i Dunja Velagić</b> (PBF, Zagreb):<br><i>Procjena autentičnosti bučinog ulja primjenom plinske kromatografije s masenom spektrometrijom, kolorimetrije i spektroskopijom u bliskom infracrvenom području</i> |
| 14:00-15:30              | „LUNCH BREAK“  |  |

|             | <b>A1 (predsjedavajući: Mihael Eraković)</b>  | <b>A2 (predsjedavajuća: Tana Tandarić)</b>  |
|-------------|---|---|
| 15:30-15:45 | <b>Neven Golenić, Ivan Ilić i Tomislav Piteša</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Tetramorfni sustav 2-amino-4-metilpiridinijeva salicilata</i>  | <b>Mirna Jovičić i Lela Pintarić</b> (FKIT, Zagreb):<br><i>Modeliranje biokatalitičke sinteze nanočestica CaCO<sub>3</sub></i>  |
| 15:45-16:00 | <b>Ivana Nogalo</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Polimorfija Schiffove baze izvedene iz o-vanilina i 3-aminoacetofenona: sinteza, struktura i svojstva</i>  | <b>Valentina Havaić</b> (FBF, Zagreb):<br><i>Ferocenoilni derivati pirimidinskih nukleobaza</i>   |
| 16:00-16:15 | <b>Nikola Bedeković</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Binarni sustavi N-(2-karboksifenil)glicina i derivata piridina – vodikove veze i prijenos protona</i>  | <b>Karlo Skube i Ingrid Tomljanović</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Ekspresija i identifikacija nativno neuređenih proteina (IDP) iz Arabidopsis thaliana nakon izlaganja abiotičkom stresu</i>                                    |
| 16:30-16:45 | <b>Edi Topić i Nikola Bedeković</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Kobaloksimi i halogenska veza</i>  | <b>Vedran Vuković i Mislav Acman</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Razvoj testova za analizu metilacije DNA regulatornih regija gena GMNN i EZH2 i njihova primjena u istraživanju podtipova difuznog B-velikostaničnoga limfoma</i> |
| 16:45-17:00 | „COFFEE BREAK“  |   |
|             | <b>A1 (predsjedavajući: Petar Štrbac)</b>   | <b>A2 (predsjedavajuća: Ingrid Gregorović)</b>  |
| 17:00-17:15 | <b>Robert Mićanović</b> (FSB, Zagreb):<br><i>Drveno plastični kompoziti</i>   | <b>Tomislav Gregorić</b> (FKIT, Zagreb):<br><i>Sinteza i molekulsko modeliranje novih hibrida 1,2,3-triazola i pirimidina s potencijalnim protutumorskim djelovanjem</i>  |
| 17:15-17:30 | <b>Andrej Kukučka</b> (PMF, Novi Sad) i <b>Milenko Korica</b> (Odjel za kemiju, Osijek):<br><i>Ispitivanje mogućnosti uklanjanja amonijaka iz podzemne vode umjetnim zeolitom u protočnom sustavu</i> | <b>Petra Gilija i Ana Palajsa</b> (FBF, Zagreb):<br><i>Sinteza i karakterizacija novih urea i semikarbazidnih derivata primakina</i>  |
| 17:30-17:45 | <b>Jelena Mirković</b> (PMF, Novi Sad):<br><i>Uspoređivanje efikasnosti Fenton i foto-Fenton procesa obezbojavanja sintetičke otopine Reactive Red 120</i>  | <b>Bernarda Resman i Ivana Šustić</b> (PBF, Zagreb):<br><i>Ekstrakcija fenolnih spojeva iz organskog otpada pokožice grožđa sorte Teran potpomognuta visokim hidrostatskim tlakom</i>                                       |

„The only reason why someone decides to go into chemistry is because they want to blow stuff up.“

Christer B. Aakeröy

| <b>ZATVARANJE SIMPOZIJA:</b> |  |
|------------------------------|--|
| 17:59-18:00                  | <b>Popularizacijski odred Entropija</b> (PMF, Zagreb):<br>$\Delta_r H < 0$ |





**SAŽECI**



# PREDAVANJA

**Juraj Nikolić i Tomislav Friganović** (PMF, Zagreb): *Utjecaj aaminskih kompleksa kobalta(III) na nastajanje polioksomolibdata*..... 14

**Mario Špadina** (PMF, Zagreb): *Eksperimentalni i teorijski pristup razumijevanju površinskih svojstava TiO<sub>2</sub> nanomaterijala u vodenoj otopini elektrolita* .....15

**Dajana Barišić** (PMF, Zagreb): *Sinteza i kompleksacijska svojstva aromatskih diurea*.....16

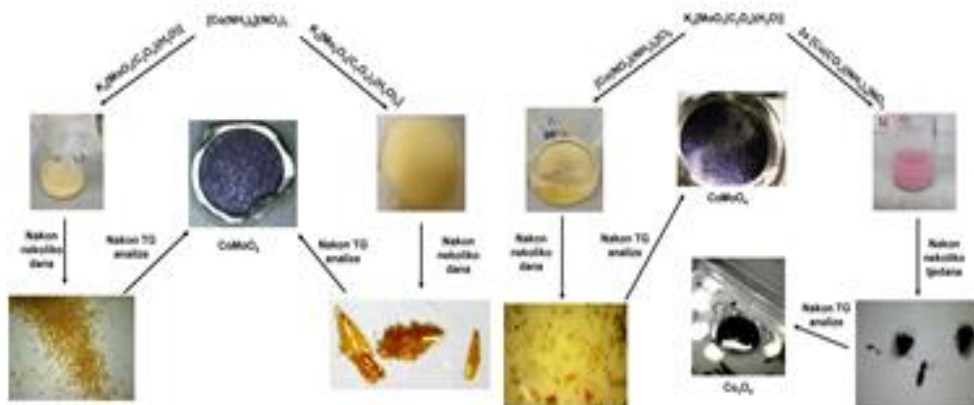
**Mihael Eraković, Demian Kalebić, Edi Topić i Petar Štrbac** (PMF, Zagreb): *Kemiluminiscencija i kinetika pirotehnike* .....17

## Utjecaj aaminskih kompleksa kobalta(III) na nastajanje polioksomolibdata

Juraj Nikolić, Tomislav Friganović

Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek, Sveučilište u Zagrebu  
jnikolic@chem.pmf.hr, t.frganovich@gmail.com

U sklopu ovog istraživanja ispitivan je utjecaj različitih kompleksnih protu-iona kobalta(III) na nastajanje polioksomolibdatnih kompleksa. Ishodne supstancije sadržavale su protu-ione kobalta(III),  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$ ,  $[\text{Co}(\text{NO}_2)(\text{NH}_3)_5]^{2+}$ ,  $[\text{Co}(\text{CO}_3)(\text{NH}_3)_4]^+$  i kompleksne anione molibdena(VI),  $[\text{MoO}_3(\text{C}_2\text{O}_4)(\text{H}_2\text{O})]^{2-}$  i  $[\text{Mo}_2\text{O}_5(\text{C}_2\text{O}_4)_2(\text{H}_2\text{O})_2]^{2-}$ . Izolirano je pet novih kompleksnih spojeva, a molekulska i strukturna formula određena je kompleksim  $[\text{Co}(\text{NO}_2)(\text{NH}_3)_5][\text{MoO}_3(\text{C}_2\text{O}_4)(\text{H}_2\text{O})] \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]_2[\text{Mo}_3\text{O}_9(\text{C}_2\text{O}_4)_3] \cdot 5\text{H}_2\text{O}$  i  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]_2[\text{Mo}_4\text{O}_{11}(\text{C}_2\text{O}_4)_4(\text{H}_2\text{O})] \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ . Ustanovljeno je da kompleksni kationi kobalta(III) imaju važnu ulogu u nastajanju odgovarajuće polioksomolibdatne vrste. Kada je kao kobaltov kation korišten  $[\text{Co}(\text{CO}_3)(\text{NH}_3)_4]^+$  došlo je do reakcije dekarboksilacije karbonatnog aniona i nastajanja dinuklearnog nesimetrično supstituiranog kompleksa kobalta(III),  $[\text{Co}_2(\mu\text{-OH})_2(\text{C}_2\text{O}_4)_2(\text{NH}_3)_4] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ , kojem je također određena molekulska i kristalna struktura. Ovaj rad izrađen je na Zavodu za opću i anorgansku kemiju Kemijskog odsjeka Prirodoslovno-matematičkog fakulteta u Zagrebu pod vodstvom prof. dr. sc. Marine Cindrić.

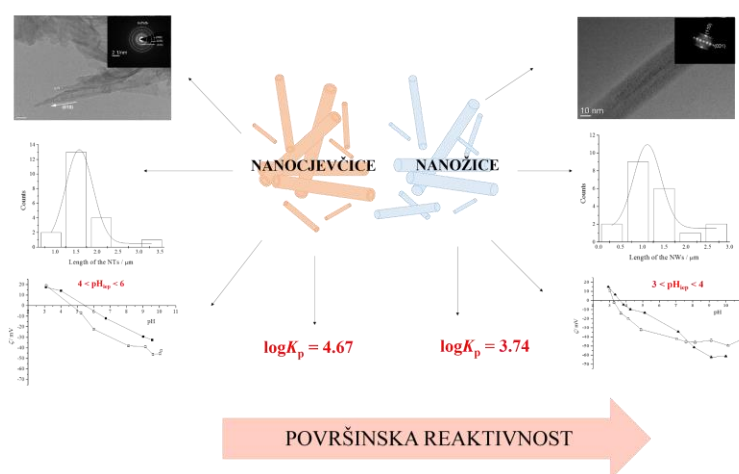


## Eksperimentalni i teorijski pristup za razumijevanje površinskih svojstava i „reaktivnosti” 1-D TiO<sub>2</sub> nanomaterijala

Mario Špadina, *Atiđa Selmani*  
 Prirodoslovno-matematički fakultet  
 mario.spadina@gmail.com

Brojni procesi poput katalize, transporta i adsorpcije iona odvijaju se na međupovršini TiO<sub>2</sub>/vodena otopina elektrolita. TiO<sub>2</sub> nanomaterijali privlače veliku pozornost zbog svoji poboljšanih fizikalno-kemijskih svojstava u odnosu na dosad primjenjivane metalne okside. Većina se nanomaterijala primjenjuje u vodenim otopinama, gdje se variranjem pH i ionske jakosti manipulira površinskim svojstvima te se na taj način kontrolira primjena nanomaterijala. Cilj ovog rada bio je istražiti utjecaj pojedinih iona, kristalne faze, morfologije i veličine čestica na površinska svojstva TiO<sub>2</sub> nanožica i nanocjevčica (točka nul-naboja i izoelektrična točka). MUSIC modelom potvrđeni su eksperimentalno dobiveni rezultati i određene konstante protonacije,  $\log K_p$  kao i konstante asocijacije protuiona. Pokazano je da kationi imaju veći afinitet za međupovršinu TiO<sub>2</sub> NWs (NTs) / vodena otopina elektrolita u odnosu na anione. Dobivene konstante protonacije mogu objasniti poboljšanu „reaktivnost“ TiO<sub>2</sub> nanožica u odnosu na nanocjevčice [1].

Rad je izrađen na Zavodu za fizikalnu kemiju Kemijskog odsjeka Prirodoslovno-matematičkog fakulteta pod vodstvom dr. A. Selmani.



[1] Selmani, A., Špadina, M., Plodinec, M., Delač Marion, I., Willinger, M. G., Lutzenkirchen, J., Gafney, H. D., Redel, E., J. Phys. Chem. C 119 (2015) 19729.

## Sinteza i kompleksacijska svojstva aromatskih diurea

Dajana Barišić<sup>a</sup>, Nikola Cindro<sup>a</sup>, Nikola Bregović<sup>a</sup>, Leo Frkanec<sup>b</sup>,  
Krunoslav Užarević<sup>c</sup>, Vladislav Tomišić<sup>a</sup>

a) Zavod za fizikalnu kemiju, Prirodoslovno-matematički fakultet,  
Horvatovac 102a, 10 000 Zagreb

b) Laboratorij za supramolekularnu i nukleozidnu kemiju, Institut Ruđer Bošković,  
Bijenička cesta 54, 10 000 Zagreb

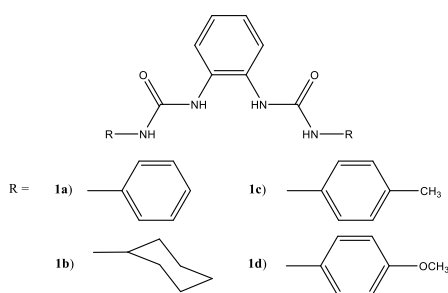
c) Laboratorij za kemijsku kinetiku i atmosfersku kemiju, Institut Ruđer Bošković,  
Bijenička cesta 54, 10 000 Zagreb

dbarisic@chem.pmf.hr

Dizajn molekula koje mogu prepoznati i vezati određene anionske vrste je predmet brojnih modernih istraživanja. Sustavno proučavanje koordinacije aniona u zadnjih par desetljeća dovelo je do otkrića brojnih receptora anionskih vrsta kod kojih vezno mjesto receptora uglavnom čine funkcionalne skupine koje su donori vodikove veze.

Ureidna skupina se često koristi u takvim receptorima zbog svoje stabilnosti u kiselom okruženju kao i sposobnosti da tvori snažne vodikove veze s određenim anionima. Međutim, postalo je jasno da spojevima koji sadrže samo jednu ureidnu podjedinicu nedostaje selektivnost te rijetko specifično prepoznaju anionske vrste. Povezivanjem dviju ureidnih podjedinica preko benzenskog prstena povećava se rigidnost veznog mjesta što omogućuje selektivnost prema određenim anionima te povećava stabilnost nastalih kompleksa.

U okviru ovog rada sintetizirani su aromatski diureidni receptori 1a-d te su uz pomoć spektrofotometrije te spektroskopije <sup>1</sup>H NMR detaljno okarakterizirali procesi koji se odvijaju u otopinama tih spojeva i acetatnog te dihidrogenfosfatnog aniona u DMSO. Utvrđeno je da dolazi do deprotonacije ureidnih skupina te su te reakcije kvantitativno okarakterizirane spektrofotometrijskim titracijama. Prilikom određivanja konstanti stabilnosti anionskih kompleksa s diureidnim receptorima uz deprotonaciju receptora odnosno prijenos protona na dodani anion uračunate su i reakcije dimerizacije aniona te njegove homokonjugacije. Dobiveni rezultati interpretirani su uzimanjem u obzir utjecaja steričkih i rezonantnih efekata supstituenata na kompleksacijska i protonacijska svojstva spojeva 1a-d.



Ovaj rad je izrađen u Zavodu za fizikalnu kemiju Kemijskog odsjeka Prirodoslovno-matematičkog fakulteta u Zagrebu u okviru HRZZ projekta SupraCAR (IP-2014-09-7309).

## Kemiluminiscencija i kinetika pirotehnike

Mihael Eraković, Demian Kalebić, Edi Topić, Petar Štrbac  
 Prirodoslovno-matematički fakultet, Zagreb  
 edi.topic@chem.pmf.hr

Popularizacija znanosti postoji vjerojatno od kada postoji i znanost. Popularizacija upoznaje širi skup ljudi s konceptima znanosti na jednostavan i zabavan način, a time znanosti donosi veoma važne resurse: nove članove i sredstva za rad. Iznimno je važno da se znanost predstavi djeci već u predškolskoj dobi, dok bi učenici i studenti trebali biti u stalnom doticaju sa znanostima. Svaki student kemije ima nepisanu misiju širiti znanje o kemiji, no relativno malo studenata zbilja sudjeluje u tome, što zbog zatrpanosti nastavnim obvezama, što zbog nedostatka iskustva u izvođenju pokusa.

Mihael Eraković, Demian Kalebić, Edi Topić i Petar Štrbac iz Studentske sekcije Hrvatskog kemijskog društva demonstrirat će vam niz jednostavnih i zanimljivih pokusa koji će pokazati kako se s nekoliko kemikalija i dobrom pričom predstavlja kemija. Preko dvadeset intrigantnih pokusa naučit će vas o svojstvima plinova, nastanku svjetla i brzini nekih neobičnih kemijskih reakcija. Nadamo se da će ovo poučno predavanje potaknuti studente kemije da sudjeluju u popularizaciji i time postave znanstvene temelje mnogim mladim kemičarima i znanstvenicima.



# USMENA

# IZLAGANJA

- Nea Baus i Tamara Rinkovec** (PMF, Zagreb): *Izgradnja anorganskih supramolekulskih arhitektura uz pomoć načela posuđenih iz organskih sustava* . 20
- Kristina Smokrović** (PMF, Zagreb): *Soli 2,4,6-trinitrobenzen-1,3,5-triola s donorima i akceptorima vodikove veze*..... 21
- Luka Fotović** (PMF, Zagreb): *Utjecaj reakcijskih uvjeta na supramolekulski ishod sinteze koordinacijskog spoja bakra(II) s iminom izvedenim iz 2-hidroksi-1-naftaldehida*..... 22
- Nives Matijaković i Nikolina Penić** (PMF, Zagreb): *Polimerizacija halogenidnih i pseudohalogenidnih kompleksa kadmija(II) s izoniazidom i niazidom* ..... 23
- Lucija Krišto i Ivana Križić** (PMF, Zagreb): *Sinteza novih kinuklidinijevih spojeva kao mogućih površinski aktivnih tvari*..... 24
- Dario Dugandžija** (PMF, Zagreb): *Sinteza i karakterizacija novih heterocikličkih  $\alpha$ -D-manokonjugata* ..... 25
- Marina Marinović i Natalija Pantalon Juraj** (FKIT, Zagreb): *Dizajn, sinteza i imobilizacija novih fluorescentnih 1,2,3-triazolnih derivata kumarina za primjenu u (bio)kemijskim senzorskim materijalima* ..... 26
- Iva Trtanj i Dunja Velagić** (PBF, Zagreb): *Procjena autentičnosti bučinog ulja primjenom plinske kromatografije s masenom spektrometrijom, kolorimetrije i spektroskopijom u bliskom infracrvenom području* ..... 27



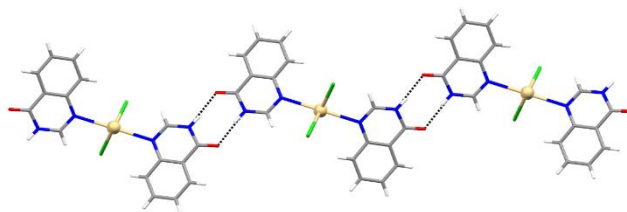
|  |                                     |
|--|-------------------------------------|
| <b>Neven Golenić, Ivan Ilić i Tomislav Piteša</b> (PMF, Zagreb): Tetramorfni sustav 2-amino-4-metilpiridinijeva salicilata .....   | <b>Error! Bookmark not defined.</b> |
| <b>Ivana Nogalo</b> (PMF, Zagreb): Polimorfija Schiffove baze izvedene iz ovanilina i 3-aminoacetofenona: sinteza, struktura i svojstva .....  | 29                                  |
| <b>Nikola Bedeković</b> (PMF, Zagreb): Binarni sustavi N-(2-karboksifenil)glicina i derivata piridina – vodikove veze i prijenos protona .....   | 30                                  |
| <b>Edi Topić i Nikola Bedeković</b> (PMF, Zagreb): Kobaloksimi i halogenska veza .....   | 31                                  |
| <b>Mirna Jovičić i Lela Pintarić</b> (FKIT, Zagreb): Modeliranje biokatalitičke sinteze nanočestica CaCO <sub>3</sub> .....  | 32                                  |
| <b>Valentina Havaić</b> (FBF, Zagreb): Ferocenoilni derivati pirimidinskih nukleobaza  | 34                                  |
| <b>Karlo Skube i Ingrid Tomljanović</b> (PMF, Zagreb): Ekspresija i identifikacija nativno neuređenih proteina (IDP) iz Arabidopsisthaliana nakon izlaganja abiotičkom stresu .....  | 35                                  |
| <b>Vedran Vuković, Mislav Acman i Marija Klasić</b> (PMF, Zagreb): Razvoj testova za analizu metilacije DNA regulatornih regija gena GMNN i EZH <sub>2</sub> i njihova primjena u istraživanju podtipova difuznog B-velikostaničnoga limfoma ..... | 36                                  |
| <b>Robert Mićanović</b> (FSB, Zagreb): Drvno plastični kompoziti .....   | 37                                  |
| <b>Andrej Kukučka</b> (PMF, Novi Sad) i <b>Milenko Korica</b> (Odjel za kemiju, Osijek): Ispitivanje mogućnosti uklanjanja amonijaka iz podzemne vode umjetnim zeolitom u protočnom sustavu.....   | 38                                  |
| <b>Jelena Mirković</b> (PMF, Novi Sad): Uspoređivanje efikasnosti Fenton i fotoFenton procesa obezbojavanja sintetičke otopine Reactive Red 120 .....  | 39                                  |
| <b>Tomislav Gregorić</b> (FKIT, Zagreb): Sinteza i molekulska modeliranje novih hibrida 1,2,3-triazola i pirimidina s potencijalnim protutumorskim djelovanjem.....  | 40                                  |
| <b>Petra Gilija i Ana Palajsa</b> (FBF, Zagreb): Sinteza i karakterizacija novih urea i semikarbazidnih derivata primakina .....   | 41                                  |
| <b>Bernarda Resman i Ivana Šustić</b> (PBF, Zagreb): Ekstrakcija fenolnih spojeva iz organskog otpada pokožice grožđa sorte Teran potpomognuta visokim hidrostatskim tlakom .....  | 42                                  |

## Izgradnja anorganskih supramolekulskih arhitektura uz pomoć načela posuđenih iz organskih sustava

Nea Baus, Tamara Rinkovec, Marijana Đaković  
 Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek, Zagreb  
 nea.baus@gmail.com, tamara.rinkovec@gmail.com

Jedan od izazova kristalnog inženjerstva je ustanoviti pouzdane sintetske putove izgradnje supramolekulskih arhitektura. Supramolekulska tvorevine organskih krutina do sada su temeljitije istražene od metalo-organskih. Ustanovljeno je da se određeni supramolekulski motivi često ponavljaju u različitim molekulskim sustavima organskih krutina te da su uglavnom ovisni samo o prisutnim funkcionalnim skupinama koje sudjeluju u njihovoj izgradnji, a ne o građi cijele molekulske vrste. U ovom istraživanju želimo ispitati mogu li se takvi supramolekulski motivi jednako uspješno prenijeti u sustave metalnih kompleksa.

Za ovo istraživanje odabrani su N-heterociklički ligandi s keto funkcionalnim skupinama u *ortho* položaju (2-hidroksipirazin, 4(3H)-pirimidinon, 4(3H)-kinozalinon) koji mogu stvarati vrlo pouzdane osmeročlane prstenaste supramolekulske motive,  $R^2_2(8)$ , u organskim krutinama. Radi jednostavnosti istraživnog sustava izabrani su halogenidni kompleksi kadmija(II) s navedenim ligandima jer je za kadmij poznato da s halogenidnim ionima tvori polimerne kompleksa te tako cijela polimerna vrsta čini jednu gradivnu jedinicu. Strukture svih devet priređenih kadmijevih(II) kompleksa određuje N-H...O vodikova veza. Niti u jednom kompleksnom spoju halogenidni ion ne narušava nastajanje supramolekulskog motiva. No, samo je u dvije strukture prisutan očekivani motiv dok je u šest od devet dobivenih struktura prisutan tetramerni supramolekulski motiv. Rezultati istraživanja ukazuju da je supramolekulske motive moguće prenijeti iz organskih u metalo-organske sustave no u manjoj mjeri nego što bi to bilo poželjno te da je za prenosivost navedenih motiva nužno pažljivo dizajniranje molekulske strukture kompleksnih spojeva



Slika 1. Prikaz povezivanja molekula diiodo di-4(3H)kinozalinonkadmija(II).

## Soli 2,4,6-trinitrobenzen-1,3,5-triola s donorima i akceptorima vodikove veze

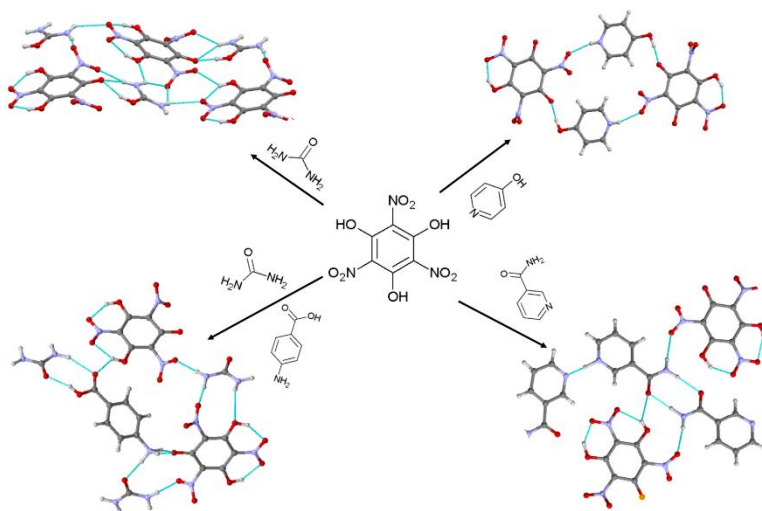
Kristina Smokrović

Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek, Horvatovac 102a, 10 000 Zagreb  
kristina.smokrovic@chem.pmf.hr

2,4,6-trinitrobenzen-1,3,5-triol (trinitrofluoroglucinol) kao i ostali polinitroarileni su sekundarni eksplozivni i kao takvi su našli svoju primjenu u industriji. Sukladno s time, dosad su istraživane soli trinitrofluoroglucinola s triazolima, tetrazolima i sličnim spojevima potencijalno eksplozivne naravi. Trinitrofluoroglucinol sadrži nitro skupine koje su dobri akceptori vodikove veze, a hidroksilne skupine dobri donori.

U sklopu istraživanja motiva međumolekulskog povezivanja polinitroarilena, priređene su soli trinitrofluoroglucinola s ureom, nikotinamidom (**nam**), 4-hidroksipiridinom (**4-hpy**) i 4-aminobenzojevom kiselinom (**4-aba**) u stehiometrijskom omjeru 1:1 i 1:2. Trinitrofluoroglucinol priređen je iz benzen-1,3,5-triola (fluoroglucinola) i izoliran u obliku oksonijevе soli  $[H_3O^+][C_6H_2N_3O_9^-]$ , a soli s odabranim spojevima dobivene su iz smjese vode i etanola(1:1). Jake  $OH \cdots O$  i  $NH \cdots O$  međumolekulske vodikove veze koje na motiv povezivanja molekula u kristalu. U svim slučajevima su protonirane hidroksilne skupine trinitrofluoroglucinola u unutarmolekulskoj vodikovoj vezi, dok su nitro skupine povezane međumolekulskim vodikovim vezama s kationima u dvodimenzionalne (**4-hpy**, urea) i trodimenzionalne (**4-aba**, **nam**) mreže.

Rad je izrađen na Zavodu za opću i anorgansku kemiju Prirodoslovno-matematičkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu pod vodstvom doc. dr. sc. Vladimira Stilinovića.



## Utjecaj reakcijskih uvjeta na supramolekulski ishod sinteze koordinacijskog spoja bakra(II) s iminom izvedenim iz 2-hidroksi-1-naftaldehida

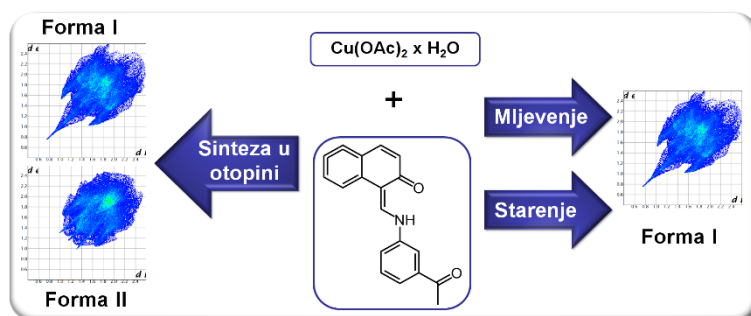
Luka Fotović, Vinko Nemeć i Dominik Cinčić

Kemijski odsjek, Prirodoslovno matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu  
fotovic.luka@gmail.com

Interes za kemijom čvrstog stanja *bis*-bidentatnih koordinacijskih spojeva imina izvedenih iz salicil- i naftaldehida s bakrovim(II) i niklovim(II) ionima započeo je još sedamdesetih godina prošlog stoljeća [1], a ponajviše zbog velike raznolikosti geometrije koordinacije liganada na metalni ion. Prema literaturnim podacima istraživani su i zabilježeni koordinacijski spojevi od kvadratno planarne do deformirane tetaredarske geometrije.

U ovome radu izučavan je koordinacijski spoj bakra(II) i imina, dobivenog kondenzacijom 2-hidroksi-1-naftaldehida i 3-aminoacetofenona, koji kristalizira u dva polimorfna oblika. Pri sintezi bio je stavljen naglasak na mehanokemijsku i tradicionalnu otopinsku metodu kao poznate načine dobivanja koordinacijskih spojeva, te metodu ubrzanog starenja. Oba polimorfa moguće je pripremiti metodom zagrijavanja otopine reaktanata uz povratno hlađenje. Promjenom reakcijskih uvjeta pokazana je mogućnost usmjeravanja supramolekulskog povezivanja molekula prema željenom kristalnom obliku. Pripremljeni polimorfi opisani su FTIR spektroskopijom, diferencijalnom pretražnom kalorimetrijom, termogravimetrijom te difrakcijom rentgenskih zraka na praškastom uzorku. Izučavana je i mogućnost sinteze oba polimorfa metodom mljevenja potpomognutog kapljevnom te metodom ubrzanog starenja. Pokazalo se da je formu II moguće izolirati samo kristalizacijom iz otopine, dok su mehanokemijskim pokusima i metodom ubrzanog starenja dobiveni kristali forme I. Molekulska i kristalna struktura polimorfa određena je difrakcijom rentgenskih zraka na jediničnom kristalu. U kristalima oba polimorfa, molekule kompleksa konformacijski su različite te se međusobno povezuju u lance vodikovim vezama vrste C–H···O.

Rad je izrađen na Kemijskom odsjeku Prirodoslovno-matematičkog fakulteta u Zagrebu pod vodstvom doc. dr. sc. Dominika Cinčića.

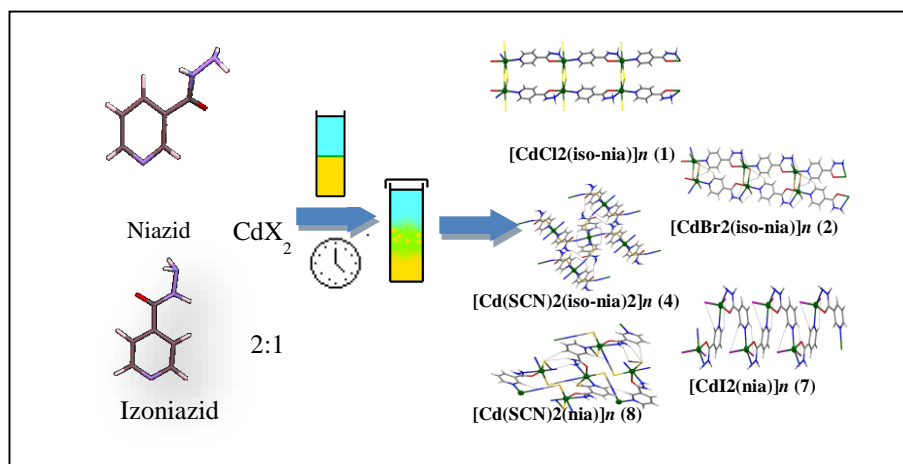


[1] A. Blagus, D. Cinčić, T. Friščić, B. Kaitner, V. Stilinović, *Maced. J. Chem. Chem. Eng.* 29 (2010) 117.

## Polimerizacija halogenidnih i pseudohalogenidnih kompleksa kadmija(II) s izoniazidom i niazidom

Nives Matijaković, Nikolina Penić  
 Sveučilište u Zagrebu  
 Prirodoslovno-matematički fakultet  
 Kemijski odsjek  
 nivesmatijakovic@gmail.com, peniceva@hotmail.com

Sintetiziran je niz kadmijevih(II) koordinacijskih polimera s izoniazidom (iso-*nia*) i niazidom (*nia*) s raznim protuionima (klorid, bromid, jodid, tiocijanat):  $[\text{CdCl}_2(\text{iso-}n\text{ia})]_n$ ,  $[\text{CdBr}_2(\text{iso-}n\text{ia})]_n$ ,  $[\text{CdI}_2(n\text{ia})]_n$ ,  $[\text{Cd}(\text{SCN})_2(\text{iso-}n\text{ia})_2]_n$  i  $[\text{Cd}(\text{SCN})_2(n\text{ia})]_n$ . Spojevi  $[\text{CdCl}_2(\text{iso-}n\text{ia})]_n$  i  $[\text{CdBr}_2(\text{iso-}n\text{ia})]_n$  grade 1D polimere s dvostrukim lancima. Spoj  $[\text{CdI}_2(n\text{ia})]_n$  je građen od cik-cak 1D polimernih lanca. Kompleksi kadmijeva(II) tiocijanata s izoniazidom  $[\text{Cd}(\text{SCN})_2(\text{iso-}n\text{ia})_2]_n$  i niazidom  $[\text{Cd}(\text{SCN})_2(n\text{ia})]_n$  grade 2D mreže. Molekule liganda vežu se *N,O*-bidentatno i *N*-premosno na kadmijeve(II) ione, osim u kompleksu  $[\text{Cd}(\text{SCN})_2(\text{iso-}n\text{ia})_2]_n$  u kojem se molekule liganda vežu terminalno. Kristalna struktura kompleksa određena je rentgenskom strukturnom analizom na monokristalu. Kompleksi su proučavani IR spektroskopijom, metodom rentgenske difrakcije na prahu te je utvrđeno da se neki od spojeva mogu prirediti i mehanokemijskom sintezom. Također, određena je i topljivost kompleksa u vodi.



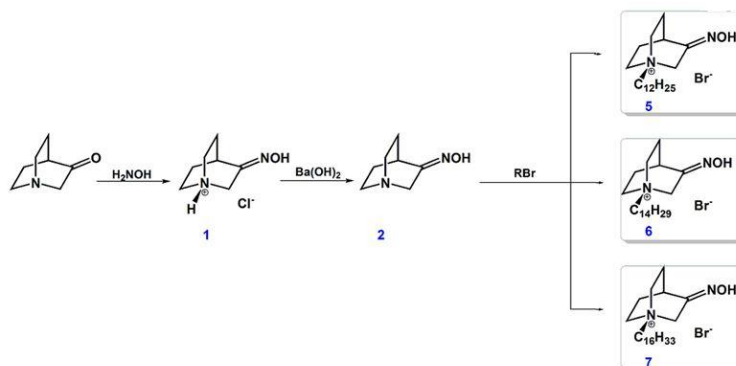
## Sinteza novih kinuklidinijevih spojeva kao mogućih površinski aktivnih tvari

Lucija Krišto i Ivana Križić

Kemijski odsjek, Zavod za organsku kemiju, Prirodoslovno-matematički fakultet,  
Sveučilište u Zagrebu, Horvatovac 102a, Zagreb  
lucjakristo13@hotmail.com, ivanakrizic2@gmail.com

Pripremljeni su novi, do sada u literaturi neopisani kvaterni derivati 3-hidroksiiminokinuklidina s alkilnim lancima različitih duljina ( $C_{12}$ ,  $C_{14}$ ,  $C_{16}$ ) da bi se istražila njihova svojstva kao površinski aktivnih tvari. Klasičnom sintetskom metodom s hidroksilaminom, opisanom u literaturi, te novim mehanokemijskim postupkom sintetizirani su 3-hidroksiiminokinuklidinijev klorid (**1**) i 3-hidroksiiminokinuklidin (**2**). Opisana je prvi put sinteza heterocikličkog oksima mehanokemijski bez otapala i bez korištenja dodatne baze, a reakcije su praćene FT-IR spektroskopijom. Kvaternizacijom oksima s odgovarajućim alkil-bromidima pripremljeni su *N*-dodecil (**5**), *N*-tetradecil (**6**) i *N*-heksadecil (**7**) 3-hidroksiiminokinuklidinijevi bromidi, shema 1. Svi pripremljeni spojevi dobiveni su u dobrom iskorištenju te dokazani standardnim analitičkim metodama. Određena je i kristalna struktura te utjecaj duljine alkilnog lanca na termička svojstva novosintetiziranih kinuklidinijevih oksima. Svi novosintetizirani kinuklidinijevi oksimi pokazuju termotropni polimorfizam i mezomorfizam ovisno o duljini alkilnog lanca. Novi spojevi pokazali su i izvrsna antibakterijska svojstva, posebno *N*-dodecilni derivat kinuklidinijevog oksima.

Ovaj je rad izrađen u laboratoriju Zavoda za organsku kemiju Kemijskog odsjeka Prirodoslovno-matematičkog Fakulteta Sveučilišta u Zagrebu, pod mentorstvom izv. prof. dr. sc. Ines Primožić.



**Shema 1.** Priprava 3-hidroksiiminokinuklidina i kvaternih derivata

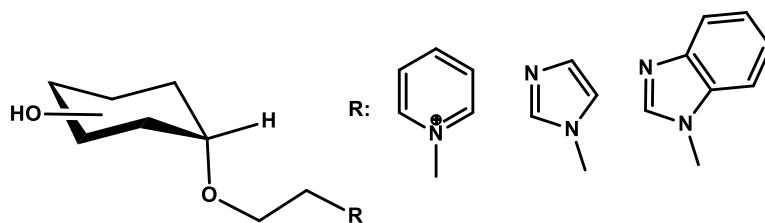
## Sinteza i karakterizacija novih heterocikličkih $\alpha$ -D-manokonjugata

D. Dugandžija, K. Baumann, S. Tomić

Zavod za organsku kemiju, Kemijski odsjek, Prirodoslovno matematički fakultet,  
Sveučilište u Zagrebu, Horvátovac 102a, HR-10000 Zagreb  
kbaumann@chem.pmf.hr

Glikospojevi su od velike važnosti u mnogim biološkim procesima posebno u međustaničnoj komunikaciji i prepoznavanju, prijenosu informacija i adheziji. Aglutinin (FimH) stanične membrane *E. coli* na fimbrijama tipa 1 specifičan je posebno na  $\alpha$ -D-manozide, a aromatski  $\alpha$ -D-manozidi su snažni inhibitori hemaglutinacije *E. coli*.<sup>1,2</sup> Šećerna se komponenta ovakvih spojeva veže na CR (engl. *carbohydrate recognition*) domenu fimbrija dok aglikonski dio doprinosi stabilnosti vežući se na hidrofobnu regiju.<sup>2</sup> Upravo su zato pripremljeni novi heterociklički  $\alpha$ -D-manokonjugati s ciljem ispitivanja njihove inhibitorne učinkovitosti u hemaglutinaciji *E. coli*. Manozu je uspješno acetilirana te je potom provedena glikozilacija Koenigs-Knorr metodom s 2-brometanolom uz  $\text{BF}_3$  eterat kompleks kao aktivator. Heterociklički spojevi (piridin, imidazol i benzimidazol) su uspješno kvaternizirani prethodno pripremljenim manozidom. Ispitan je utjecaj različitih baza ( $\text{NaH}$ ,  $\text{K}_2\text{CO}_3$ ) te različitih polarnih aprotičnih i nepolarnih otapala (aceton, eter, acetonitril, dioksan) na ishod reakcije. Deacetilacija konačnih produkata uspješno je provedena s dibutil kositrovim oksidom (DBTO) u metanolu.<sup>3</sup> Svi pripremljeni spojevi dobiveni su u zadovoljavajućem iskorištenju te im je struktura određena standardnim analitičkim postupcima (IR, MS, NMR), a  $\alpha$ -D-anomeri potvrđeni su na osnovu konstanti sprege iz  $^1\text{H}$  NMR spektara.

Rad je izrađen pod mentorstvom prof.dr.sc. Srđanke Tomić-Pisarović i neposrednim vodstvom dr.sc. Krešimira Baumanna.



[1] Ž. Car, T. Hrenar, V. Petrović Peroković, R. Ribić, M. Seničar, S. Tomić-Pisarović, *Chemical biology & drug design*, **84** (2014) 393-401.

[2] T. K. Lindhorst, S. Kötter, J. Kubisch, U. Krallmann-Wenzel, S. Ehlers, V. Kren, *Eur. J. Org. Chem.* **8** (1998) 1669-1674.

[3] S. M. Wang, W. Z. Ge, H. M. Liu, D. P. Zou, X. B. Yan, *Steroids* **69** (2004) 599-604.

## Dizajn, sinteza i imobilizacija novih fluorescentnih 1,2,3-triazolnih derivata kumarina za primjenu u (bio)kemijskim senzorskim materijalima

Marina Marinović, Natalija Pantalon Juraj  
 Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Sveučilište u Zagrebu  
 marinam243@hotmail.com, natalija.juraj@hotmail.com

Cilj ovog rada je prikaz brze i jednostavne *click* reakcije za sintezu potencijalnog optičkog senzora, spoja 7-(4-(4-aminofenil)-1H-1,2,3-triazol-1-il)-4-metil-2H-kromen-2-ona (spoja 3) te njegova imobilizacija u tanki polimerni film, vrstu ionsko selektivnih optoda koje omogućuju jednostavno određivanje različitih analita, jeftine su i pogodne za jednokratnu upotrebu.

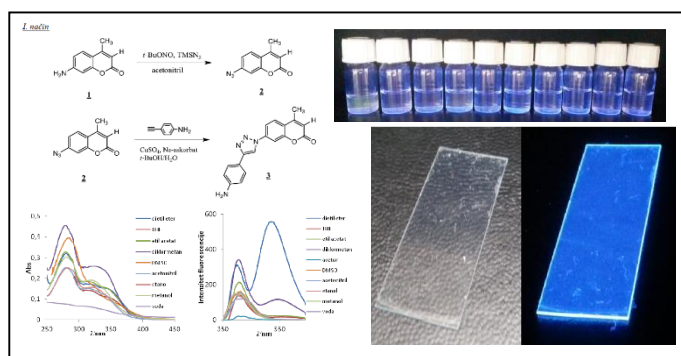
Spoj 3 pripremljen je na dva načina. U prvom načinu azid 2 pripremljen je klasičnom reakcijom diazotacije, a u drugom načinom azid 2 pripremljen je pomoću diazonijevog tosilata. Konačni spoj 3 u oba slučaja pripremljen je bakar (I) kataliziranom 1,3-dipolarnom cikloadicijom.

Ispitana je ovisnost svojstava spoja 3 o vrijednosti pH otopina univerzalnog pufera i etanolnih otopina, o polarnosti otapala te o prisutnosti metalnih iona. Mjerenja su provedena metodama UV-vidljive apsorpcijske i fluorescencijske spektrofotometrije pri čemu je koncentracija spoja za sva mjerenja bila  $1 \cdot 10^{-5}$  M.

Tanki polimerni filmovi pripremljeni su *spin-coating* tehnikom, odnosno brzim razmazivanjem smjese na poliestersku foliju te ravnomjernom raspodjelom smjese tehnikom brzog rotiranja podloge.

Spoj 3 pokazuje pojačanje intenziteta fluorescencije te hipsokromni pomak u kiselom mediju što ukazuje na njegovu potencijalnu primjenu kao pH senzora. U nepolarnim otapalima dolazi do stvaranja nove emisijske vrpce, odnosno zelene fluorescencije. Prisutnost metalnih iona nije dovela do promjene spektrofotometrijskih svojstava spoja te spoj 3 nije pogodan za upotrebu kao senzor za metale. Svojstva spoja u imobiliziranom stanju razlikuju se od svojstava spoja u otopini te bi za njegovu primjenu trebalo provesti daljnja ispitivanja.

Ovaj rad je izrađen na Fakultetu kemijskog inženjerstva i tehnologije, Sveučilišta u Zagrebu, pod mentorstvom prof. dr. sc. Ivane Steinberg, na Zavodu za opću i anorgansku kemiju.





## **Procjena autentičnosti bučinog ulja primjenom plinske kromatografije s masenom spektrometrijom, kolorimetrije i spektroskopijom u bliskom infracrvenom području**

Iva Trtanj, Dunja Velagić  
Prehrambeno-biotehnološki fakultet, Zagreb  
iva.trtanj1990@gmail.com; dunja.velagic@gmail.com

Zahvaljujući trendovima moderne prehrane koji propagiraju konzumaciju minimalno procesiranih namirnica, u posljednjih nekoliko godina bučino ulje se sve više odmiče od imidža regionalnog proizvoda, poznatog samo ograničenom broju potrošača i postaje jedan od najpoznatijih predstavnika tzv. funkcionalne hrane iz skupine ulja i masti. Radi niskog prinosa i visokih troškova proizvodnje bučino ulje postiže visoku tržišnu cijenu te je u proizvodnom procesu posljedično moguća i pojava njegovog patvorenja s jeftinijim rafiniranim uljima. Stoga je glavni cilj ovog rada bio, uz upotrebu plinske kromatografije s masenom spektrometrijom, procijeniti ima li patvorina među uzorcima bučinog ulja prikupljenim s hrvatskog tržišta. Radi određivanja markera patvorenja ista analiza provela se i na laboratorijski proizvedenom bučinom ulju te rafiniranom suncokretovom ulju. Također, specifični cilj rada bio je istražiti mogućnosti primjene kolorimetrije i spektroskopije u bliskom infracrvenom području za otkrivanje patvorenja bučinog ulja. U analiziranim uljima detektirani su  $\Delta 7$ -steroli, skvalen i  $\gamma$ -tokoferol kao spojevi specifični za bučino te  $\Delta 5$ -steroli i  $\alpha$ -tokoferol kao spojevi specifični za suncokretovo ulje. Provedbom analize osnovnih komponenti zajedno s analizom varijance određivanih kemijskih parametara utvrđeno je da se u 44% uzoraka na tržištu, označenih kao bučino ulje, radi o mješavinama sa suncokretovim uljem. Pojedini parametri kolorimetrije i spektroskopije u bliskom infracrvenom području imali su visoku korelaciju s kemijskim parametrima te postoji mogućnost njihovog korištenja u svrhu brze i jednostavne detekcije patvorenja bučinog ulja.

Ovaj rad izrađen je u Kabinetu za tehnološko projektiranje Zavoda za prehrambeno-tehnološko inženjerstvo, Prehrambeno-biotehnološkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu, pod stručnim vodstvom doc. dr. sc. Sandre Balbino.

## Tetramorfni sustav 2-amino-4-metilpiridinijeva salicilata

Neven Golenić, Ivan Ilić, Tomislav Piteša, Dominik Cinčić, Vladimir Stilinović

Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek, Zagreb

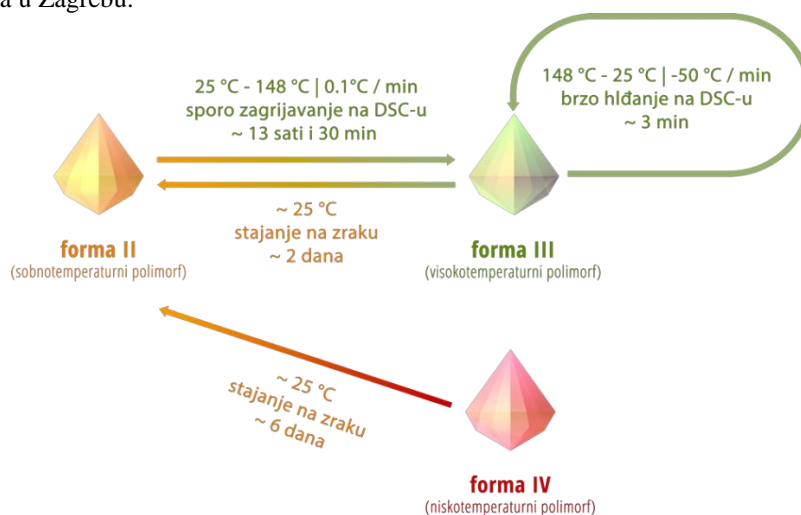
neven.golenic@gmail.com, ilic25693@gmail.com, tpitesa@gmail.com

Sol 2-amino-4-metilpiridina i salicilne kiseline kristalizira u nekoliko formi [1], [2]. Izučavanjem mehanokemijski sintetiziranog polimorfa (forma II) diferencijalnom pretražnom kalorimetrijom (DSC), u temperaturnom intervalu od 144,1 °C do 153,7 °C opažen je fazni prijelaz pri kojem forma II prelazi u drugi polimorf (formu III). Sporim zagrijavanjem jediničnog kristala forme II (od 25,0 °C do 148,0 °C u 13,5 h) te potom brzim hlađenjem na sobnu temperaturu (kroz 3 min) pripravljen je jedinični kristal forme III čija je kristalna struktura određena metodom difrakcije rendgenskih zraka na jediničnom kristalu. Jedinični kristal forme III pripravljen je i sporim hlađenjem otopine dobivene otapanjem reaktanata (salicilne kiseline i 2-amino-4-metilpiridina) u kipućem oktan-1-olu ( $T_b=195$  °C) uz dodatak malog uzorka forme III neposredno prije prezasićenja (*cijepljenje*). Također je opaženo da forma III stajanjem na sobnoj temperaturi kroz približno dva dana prijeđe u formu II. Stoga je pretpostavljeno da je forma II pri sobnoj temperaturi termodinamički stabilniji polimorf odnosno da je pri tim uvjetima forma III metastabilna. Mjerenjem ovisnosti topljivosti forme II i forme III u *o*-ksilenu o temperaturi, gornja je pretpostavka potvrđena te je određena temperatura faznog prijelaza.

Propuhivanjem zraka kroz razrijeđenu otopinu reaktanata u metanolu dobiven je novi polimorf (forma IV), čiji je jedinični kristal pripravljen „cijepljenjem“ metanolne otopine reaktanata. Kristalna struktura forme IV određena je metodom difrakcije rendgenskih zraka na jediničnom kristalu. DSC analizom forme IV otkriven je fazni prijelaz u temperaturnom intervalu od 114,1 °C do 128,1 °C pri kojem forma IV prelazi u formu II.

Za identifikaciju (odnosno razlikovanje) polimorfa u svim eksperimentima korištena je metoda difrakcije rendgenskih zraka na polikristalnom uzorku.

Istraživanje je provedeno na Kemijskom odsjeku Prirodoslovno-matematičkog fakulteta u Zagrebu.



[1] N. Golenić, I. Ilić, T. Piteša, D. Cinčić, *Polimorfi 2-amino-4-metilpiridinijeva salicilata, sinteza i struktura*, 1. Simpozij studenata kemičara, KO, PMF, Sveučilište u Zagrebu, (2014).

[2] M. Hemamalini, H.-K. Fun, *Acta Crystallogr.*, **E66** (2010) o2151.

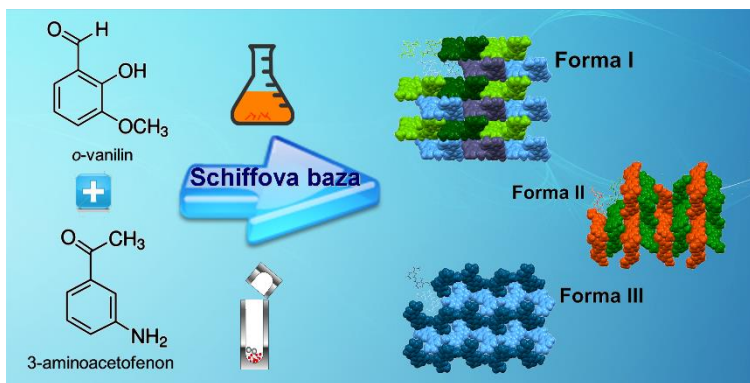
## Polimorfija Schiffove baze izvedene iz *o*-vanilina i 3-aminoacetofenona: sinteza, struktura i svojstva

Ivana Nogalo, Marija Zbačnik, Dominik Cinčić  
 Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu  
 ivana.nogalo3@gmail.com

Schiffove baze (imini) dobivene kondenzacijom *o*-hidroksi aromatskih aldehida i amina dobri su modelni spojevi za proučavanje keto-enolne tautomerije, fotokromizma i termokromizma u čvrstom stanju. Često su strukturno proučavane u posljednjih dvadesetak godina [1].

Tradicionalnom otopinskom sintezom pripravljena je Schiffova baza iz *o*-vanilina i 3-aminoacetofenona. Ovisno o udjelu vode u otapalu (etanolu), temperaturi prilikom kristalizacije te prisutnosti nečistoća, sintetizirani imin može kristalizirati u tri polimorfna oblika. Dva polimorfa od tri moguće je pripraviti i metodom mljevenja bez prisustva otapala. Time je pokazana mogućnost usmjeravanja supramolekulskog povezivanja molekula, produkta kovalentne sinteze, prema željenom kristalnom obliku. Pripravljene polimorfi opisani su FTIR spektroskopijom, diferencijalnom pretražnom kalorimetrijom, termogravimetrijom te difrakcijom rentgenskih zraka na praškastom uzorku i jediničnom kristalu. U kristalima sva tri polimorfa, molekule imina su u enol-iminskom obliku, konformacijski su različite te se međusobno povezuju vodikovim vezama vrste C–H···O: u dvodimenzijske mreže kod forme I i forme III te u trodimenzijske mreže kod forme II. Sve tri polimorfne forme pokazuju reverzibilna termokromna svojstva.

Rad je izrađen pod mentorstvom doc. dr. sc. Dominika Cinčića uz neposredno vodstvo dr. sc. Marije Zbačnik.



[1] A. Blagus, D. Cinčić, T. Friščić, B. Kaitner i V. Stilinović, *Maced. J. Chem. Chem. Eng.* **29** (2010) 117.

[2] M. Zbačnik, I. Nogalo, D. Cinčić i B. Kaitner, *CrystEngComm*, 2015, DOI: 10.1039/C5CE01445J.

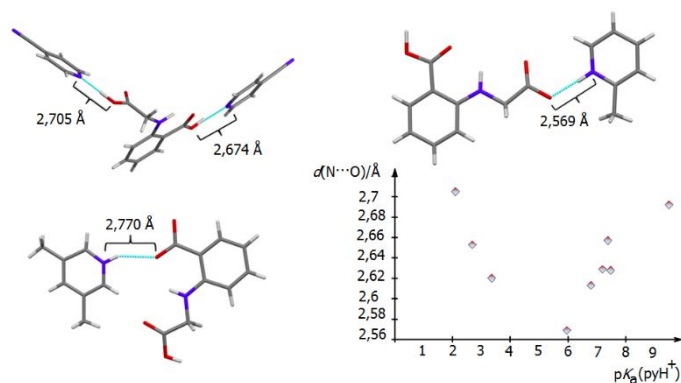
## Binarni sustavi *N*-(2-karboksifenil)glicina i derivata piridina – vodikove veze i prijenos protona

Nikola Bedeković

Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek, Horvatovac 102a, 10 000 Zagreb  
nbedekovic@chem.pmf.hr

Karboksilne kiseline su klasične modelne molekule za proučavanje vodikove veze. Dok su karboksilne monokiseline i simetrične dikiseline bile predmetom mnogih istraživanja, asimetrične dikiseline su relativno rijetko proučavane.

U ovome radu kao donor vodikove veze korištena je karboksilna dikiselina *N*-(2-karboksifenil)glicin, posebno zanimljiva jer sadrži jednu aromatsku i jednu alifatsku karboksilnu skupinu. Za akceptore vodikove veze odabrano je dvanaest piridinskih derivata čiji je raspon  $pK_a$  vrijednosti od 2 do 9,50. Radi proučavanja jakosti vodikovih veza u sustavima dikiselina-piridinski derivat sintetizirano je dvanaest binarnih krutina omjera 1:1, kojima su riješene, a potom i analizirane molekulske te kristalne strukture. Nađeno je da se molekula piridinskog derivata vezala na alifatsku karboksilnu skupinu (**al·py**) u šest slučajeva, na aromatsku karboksilnu skupinu (**ar·py**) u tri slučaja, dok se u tri slučaja vezala na obje karboksilne skupine (**al·py·ar**). U dvije (**al·py·ar**) strukture nađeno je da aromatska karboksilna skupina participira u jačoj vodikovoj vezi s piridinom nego li alifatska. Prijenos protona s karboksilne skupine na piridinski dušik opažen je u pet struktura (**al·py**) i u sve tri strukture (**ar·py**), a u strukturama u kojima participiraju obje karboksilne skupine nema prijenosa protona. Prijenosi protona i duljine vodikovih veza dobivenih struktura korelirane su s pripadajućim  $pK_a$  vrijednostima korištenih derivata piridina. Rad je izrađen na Zavodu za opću i anorgansku kemiju pod vodstvom doc. dr. sc. Vladimira Stilinovića.



Slika 1. Kompleksi *N*-(2-karboksifenil)glicina s 4-cianopiridinom, 2-metil piridinom te 3,5-lutidinom; ovisnost duljine vodikove veze na alifatskoj karboksilnoj skupini o  $pK_a$  piridina.

## Karboksimi i halogenska veza

Nikola Bedeković, Edi Topić, Vladimir Stilinović

Prirodoslovno matematički fakultet, Kemijski odsjek, Horvatovac 102a, 10000 Zagreb  
vstilinovic@chem.pmf.hr

Halogenska veza već je nekoliko godina glavna "atrakcija" u kemiji čvrstog stanja i kristalnom inženjerstvu, međutim, metalni kompleksi koji tvore halogene veze su malobrojni i slabo istraženi.<sup>[1]</sup> S druge strane, kobaloksimi su dugo poznati i lako pripravljivi kompleksi čija je kemija dobro istražena, primjerice kao model za proučavanje kemije vitamina B<sub>12</sub><sup>[2]</sup>, te kemije kobalta u neobičnim kemijskim okruženjima ili oksidacijskim stanjima<sup>[3]</sup>. Unatoč tome, u ovoj klasi kompleksa nije zabilježen niti jedan rad koji se tiče halogenih veza, pa se ovim radom to nastoji istražiti.

U svrhu proučavanja halogenskih veza pripravljeno je više od trideset različitih kompleksnih vrsta opće formule Co(DMG)<sub>2</sub>XL, gdje je DMG dimetilgliksimatni anion, X halogenidni anion, a L Lewisova baza. Kompleksi su pripremljeni propuštanjem zraka u etanolnu otopinu kobaltova(II) acetata ili halogenida, dimetilgliksima, halogenovodične kiseline i blagog suviška Lewisove baze, prilikom čega bi istaložio smečkasti talog. Dobiveni produkti su se prekrystalizirali iz pogodnog otapala, te je jediničnim kristalima dovoljno visoke kvalitete određena kristalna struktura difrakcijom rendgenskog zračenja na monokristalnom uzorku.

U do sada obrađenim strukturama u kojima se pojavljuje klorid ili bromid kao halogenidni ion utvrđen je ne samo izostanak halogenske veze bez obzira na prirodu Lewisove baze, već i neobično veliku udaljenost između halogenidnih iona dvaju susjednih kompleksa u strukturi. Rješenje ove strukturne enigme trebali bi otkriti jodidni analozi ovih spojeva, koji do sada nisu uspješno pripremljeni otopinskom metodom, međutim, razrađuje se mehanokemijska metoda za pripremu dotičnih analoga.

[1] L. Brammer, G. M. Espallargas, S. Libri, Combining metals with halogen bonds, *CrystEngComm*, 10 (2008) 1712–1727.

[2] G. N. Schrauzer, Organocobalt chemistry of vitamin B<sub>12</sub> model compounds (cobaloximes), *Acc. Chem. Res.*, 1 (1968) 97–103

[3] D. Dodd, M. D. Johnson, B. L. Lockman, Kinetics and mechanism of apparent alkyl transfer from alkylcobaloximes to cobaloxime(I), cobaloxime(II), and cobaloxime(III) reagents, *J. Am. Chem. Soc.*, 99 (1977) 3664–3673

## Modeliranje biokatalitičke sinteze nanočestica $\text{CaCO}_3$

Mirna Jovičić, Lela Pintarić

Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Zagreb

jovicic.mirna@gmail.com, lelapintaric@gmail.com

Nanočestice su superfine čestice veličine od 1 nm do 1  $\mu\text{m}$ . Što su one manje, povećava se njihova vanjska efektivna površina i samim time su reaktivnije, odnosno promjenom veličine nanočestica mijenjaju se njihova magnetska, optička i električna svojstva. Spektar primjene nanočestica vrlo je širok pa se njihovim dodavanjem materijalima mogu poboljšati čvrstoća, tvrdoća i druga mehanička svojstva, a primjenjuju se i u raznim industrijama, visokoj tehnologiji, medicini, farmaciji te proizvodnji širokog spektra proizvoda – od hrane i lijekova do kućanskih aparata, mobitela, tekstila. Za sintezu nanočestica dosad je razvijen veliki broj različitih fizičkih, kemijskih i bioloških metoda čija je upotreba ograničena zbog korištenja toksičnih kemikalija nužnih za njihovu provedbu. Korištenje enzima s druge strane predstavlja pouzdan i ekološki najprihvatljiviji način za sintetiziranje nanočestica.

Cilj ovog istraživanja stoga je bio enzimski provođenom reakcijom, pomoću enzima ureaze i produkata hidrolize uree, sintetizirati nanočestice kalcijevog karbonata, kao minerala s veoma širokim spektrom primjene. Ispitivana je kinetika reakcije hidrolize uree uz enzim ureazu te je promatran utjecaj kalcijevih ( $\text{Ca}^{2+}$ ) iona na aktivnost enzima. Reakcija je provedena u tri medija – hepes puferu, trietanolamin puferu (TEA) i redestiliranoj vodi, pri dvije temperature,  $T = 30^\circ\text{C}$  i  $T = 40^\circ\text{C}$ .

Ispitivanje kinetike reakcije provedeno je mjerenjem početne brzine reakcije pri različitim koncentracijama uree, uz stalnu koncentraciju enzima ureaze. Kinetika reakcije opisana je jednosupstratnom Michaelis – Menteničinom kinetikom. Utjecaj kalcijevih iona na aktivnost enzima ispitan je mjerenjem specifične aktivnosti ureaze u ovisnosti o različitim koncentracijama kalcijeva klorida,  $\text{CaCl}_2$ , uz stalnu koncentraciju uree i ureaze. Utvrđeno je da kalcijevi ioni inhibiraju ureazu nekompetitivnom inhibicijom. Razvijen je matematički model procesa koji je validiran provođenjem reakcije u kotlastom reaktoru uz stalno miješanje magnetskom miješalicom.

Sinteza nanočestica provedena je dodavanjem kalcijevog klorida u otopinu uree, uz dodatak enzima ureaze. Reakcijom kalcijevih iona s produktima hidrolize uree, amonijakom odnosno karbonatnom kiselinom, istaložene su nanočestice kalcijevog karbonata koje su potom karakterizirane pomoću pretražnog elektronskog mikroskopa i rendgenskog difraktometra.

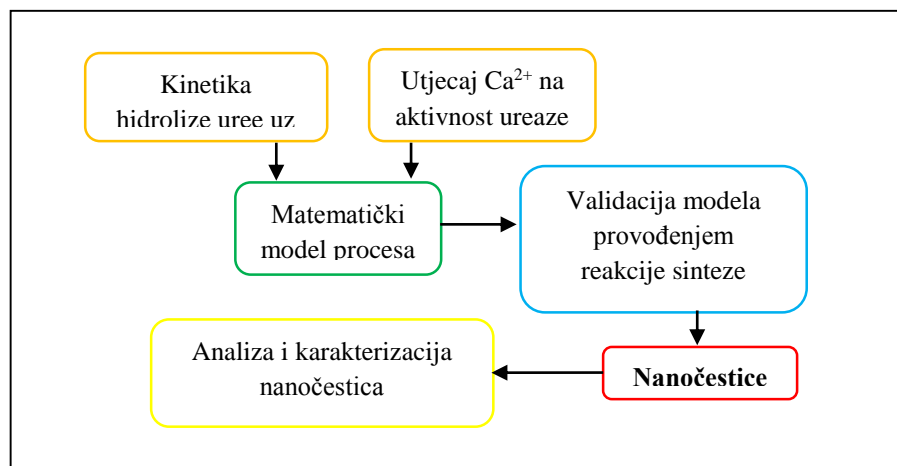
Na temelju dobivenih rezultata zaključeno je da porastom temperature raste specifična aktivnost ureaze u svim medijima. Procijenjeni su kinetički parametri te je zaključeno da porastom temperature raste i brzina reakcija provedenih u puferima, dok je maksimalna brzina reakcije, u slučaju provođenja reakcije u redestiliranoj vodi, približno jednaka pri obje temperature. Također, zaključeno je da enzim ureaza pokazuje veći afinitet prema supstratu prilikom provođenja reakcije hidrolize uree pri višoj temperaturi kao i u reakcijama provedenim u TEA puferu i u redestiliranoj vodi, dok je u reakcijama provedenim u hepes puferu situacija obrnuta.

Dodatkom kalcijeva klorida,  $\text{CaCl}_2$ , u reaktore u kojima se odvijala reakcija hidrolize uree uočeno je da dolazi do blagog smanjenja brzine reakcije te je zaključeno kako kalcijevi ioni inhibiraju enzim ureazu, no na temelju vrijednosti procijenjenih konstanti inhibicije reakcije kalcijem zaključeno je kako inhibicija nije značajna.

Pretpostavljeni matematički model vrlo dobro je opisao sintezu nanočestica kalcijevog karbonata iz produkata reakcije hidrolize uree uz enzim ureazu te prisustvo  $\text{CaCl}_2$ . Izračunata je brzina nastajanja nanočestica te je zaključeno da je ona u svim medijima manja na nižoj temperaturi ( $T = 30^\circ\text{C}$ ). Također, brzina nastajanja nanočestica na obje temperature najmanja je prilikom provođenja sinteze u redestiliranoj vodi.

Na temelju rezultata analize nanočestica pomoću pretražnog elektronskog mikroskopa i rendgenskog difraktometra zaključeno je da su u eksperimentima provedenim pri nižim temperaturama sintetizirane čestice manjih dimenzija u odnosu na čestice sintetizirane pri višim temperaturama.

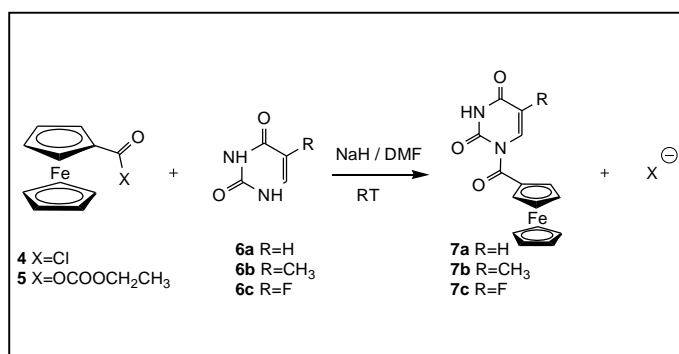
Ovaj rad izrađen je u Zavodu za reakcijsko inženjerstvo i katalizu Fakulteta kemijskog inženjerstva i tehnologije pod vodstvom izv. prof. dr. sc. Ane Vrsalović Presečki.



## Ferocenoilni derivati pirimidinskih nukleobaza

Valentina Havaić  
 Farmaceutsko-biokemijski fakultet, Zagreb  
 vhavaic@gmail.com

Ferocenoilna skupina je selektivno uvedena na N1-položaj pirimidinskog prstena uracila, timina i 5-fluorouracila. Deprotonirane pirimidinske nukleobaze reagiraju s ferocenoil kloridom (FcCOCl) ili ferocenoil etil karbonatom (FcCOOEt) u prisutnosti natrij hidrida (NaH) u dimetilformamidu (DMF). Regioselektivnost reakcija analizirana je NMR spektroskopijom i kvantno-kemijskim računima.<sup>1</sup> Mjerenja reakcijskih promjena provedena <sup>1</sup>H i <sup>19</sup>F NMR spektroskopijom ukazuju na formiranje samo jednog produkta. Struktura produkta i položaj supstitucije potvrđeni su <sup>13</sup>C NMR spektroskopijom i dvodimenzijskim NOESY spektrima u kojima je nedvojbeno identificiran isključivo N1-regioizomer. Izračunata energijska barijera za acilaciju na N3-položaju je značajno viša (> 40 kJ/mol) što upućuje na kinetičku kontrolu reakcije za reakciju supstitucije na N1-položaju. Nukleofilna supstitucija na karbonilnoj skupini ferocenoil klorida odvija se prema usklađenom S<sub>N</sub>2 mehanizmu bez tetraedarskog međuprodukta. Istraživanje je provedeno na Zavodu za organsku kemiju Farmaceutsko-biokemijskog fakulteta pod vodstvom prof. dr. sc. Valerija Vrčeka te u Laboratoriju za organsku kemiju Prehrambeno-biotehnološkog fakulteta.



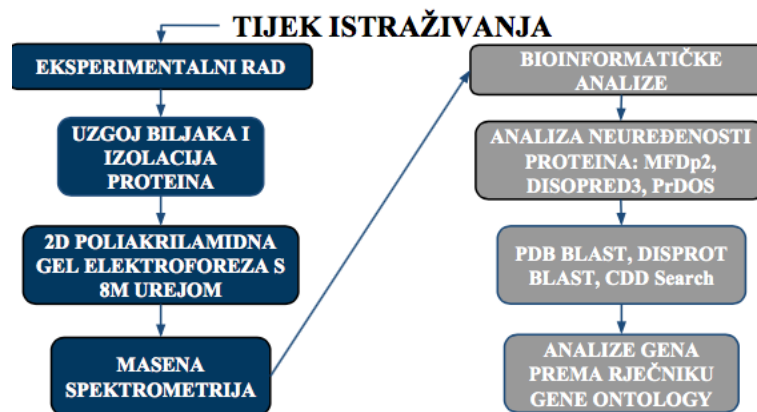
[1] Lapić, J., Cetina, M., Šakić, D., Djaković, S., Vrček, V., Rapić, V., *Arkivoc* ix (2010), 257-268.



## Ekspresija i identifikacija nativno neuređenih proteina (IDP) iz *Arabidopsis thaliana* nakon izlaganja abiotičkom stresu

Karlo Skube, Ingrid Tomljanović  
 Prirodoslovno-matematički fakultet, Zagreb  
 kskube@stud.biol.pmf.hr, ing.tomljanovic@gmail.com

Nativno neuređeni proteini i proteinske regije (*engl.* intrinsically disordered proteins/regions, IDP/IDR) pripadaju nedavno priznatoj skupini proteina koji su biološki aktivni usprkos nedostatku jasno definirane trodimenzionalne strukture. Za razliku od globularnih proteina, IDP u nativnom stanju ne posjeduju jedinstvenu stabilnu strukturu, već fluktuirajući skup strukturnih konformacija. Takve skupove konformacija odlikuje dinamičnost, tj. izrazita varijabilnost prostornih koordinata atoma polipeptidnog lanca u ovisnosti o vremenu. IDP najčešće pokazuju manjak stabilne tercijarne, rjeđe i sekundarne strukture, ali nipošto ne i potpuno odsustvo strukture. U biljaka, IDP imaju važnu ulogu u odgovoru na abiotički stres. Cilj našeg istraživanja bio je identificirati nove IDP u modelnom organizmu *A. thaliana* nakon tretmana hladnoćom. Prvi korak u pročišćavanju IDP bila je toplinska denaturacija pri kojoj se taloži većina uređenih proteina. Proteini su zatim razdvojeni dvodimenzionalnom elektroforezom u nativnim i denaturirajućim uvjetima (8M ureja), što omogućava razlikovanje IDP i uređenih proteina prema položaju na elektroforetskom gelu. Proteinske točke su izrezane iz gela i identificirane uz pomoć masene spektrometrije. Daljnje bioinformatičke analize proteinskih sekvenci uključuju primjenu softvera za procjenu neuređenosti proteina i drugih alata. Očekujemo da će rezultati osvijetliti ulogu IDP u biljkama, a posebice u mehanizmima odgovora biljaka na stresne uvjete.

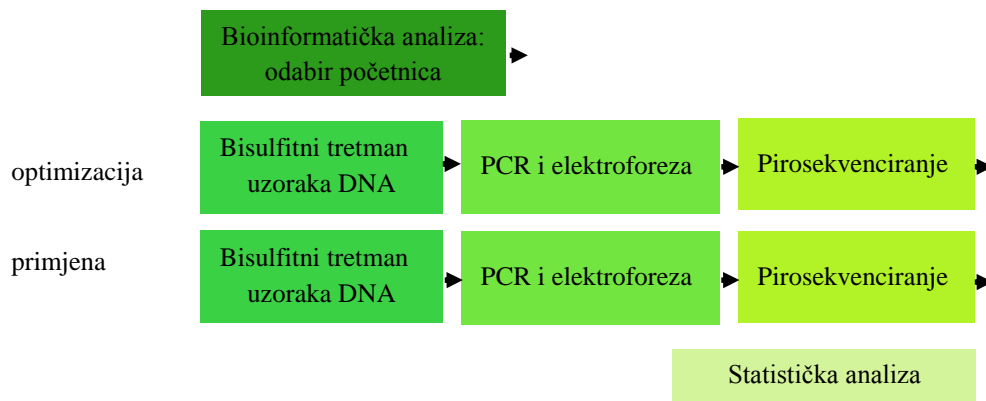


## Razvoj testova za analizu metilacije DNA regulatornih regija gena *GMNN* i *EZH2* i njihova primjena u istraživanju podtipova difuznog B-velikostaničnog limfoma

Vedran Vuković\*, Mislav Acman\*, Marija Klasić, Paula Dobrinić, Petra Korać  
 Biološki odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu  
 Kontakt: vvukovic@stud.biol.pmf.hr

Istraživanja malignih tumora ukazala su na važnost gena uključenih u replikaciju i ponovnu uspostavu kromatina u onkogenezi. Njihova poremećena funkcija može biti povezana s epigenetičkim promjenama. Cilj ovog istraživanja bio je analizirati stupanj metilacije DNA regulatornih regija gena *GMNN* i *EZH2* kod podtipova difuznog B-velikostaničnog limfoma. U tu su svrhu razvijeni testovi za procjenu stupnja metilacije pojedinih CpG mjesta unutar regulatornih regija tih gena. Odabrani su parovi početnica koji lančanom reakcijom polimerazom umnažaju fragmente bisulfitno konvertirane DNA unutar regulatornih regija gena od interesa. Razvijena su tri testa za regulatorne regije gena *GMNN* i četiri testa za regulatorne regije gena *EZH2*. Nakon toga određeni su optimalni uvjeti reakcija pirosekvenciranja. Završno je razvijen po jedan test za svaki gen. Ti su testovi primijenjeni u analizi podtipova difuznog B-velikostaničnog limfoma. Analizirani dijelovi regulatornih regija gena *GMNN* i *EZH2* nisu pokazali značajne razlike između podtipova. Budući da su ovim istraživanjem obuhvaćeni relativno mali dijelovi regulatornih regija oba gena, analizu bi trebalo proširiti na dodatna CpG mjesta te uključiti veći broj uzoraka.

Rad je napravljen na Zavodu za molekularnu biologiju Biološkog odsjeka PMF-a pod vodstvom Paule Dobrinić, mag. biol. mol. i doc. dr. sc. Petre Korać.

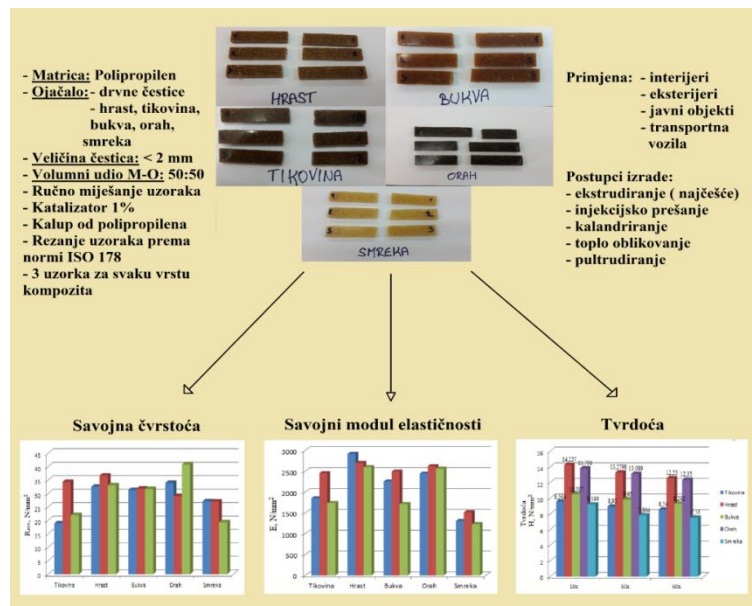


\* podjednako pridonijeli radu

## Drveno plastični kompoziti

Robert Mićanović  
Fakultet strojarstva i brodogradnje  
mics.robert@gmail.com

U suvremenom životu čovjeka recikliranje je postalo nužna potreba za zbrinjavanjem otpada. Ono uključuje odvajanje otpadnog materijala iz otpada u svrhu njegove ponovne upotrebe. Drveno plastični kompoziti (wooden plastic composite - WPC) jedni su od primjera modernih materijala, dobivenih spajanjem dviju supstanci koje su najčešće produkti recikliranja. Kombiniranjem polimera kao matrice i drva kao ojačala dobije se produkt takvih svojstava kakva ne posjeduje ni jedna komponenta zasebno. Cilj ovog rada bio je izraditi uzorke drveno plastičnih kompozita korištenjem otpadnog materijala od različitih vrsta drva. Polistirenska matrica ojačana je drvnim česticama različite veličine. Kao ojačalo korišteno je pet različitih drvnih čestica: hrast, tikovina, bukva, orah i smreka. Time je dobiveno pet različitih kompozita na kojima su ispitana i uspoređena sljedeća svojstva: savojna čvrstoća, savojni modul elastičnosti i tvrdoća. Na temelju dobivenih rezultata doneseni su odgovarajući zaključci o utjecaju vrste drva i veličine čestica na kvalitetu izrađenih kompozita.



## Ispitivanje mogućnosti uklanjanja amonijaka iz podzemne vode umjetnim zeolitom u protočnom sustavu

Andrej Kukučka<sup>1</sup>, Milenko Korica<sup>2</sup>

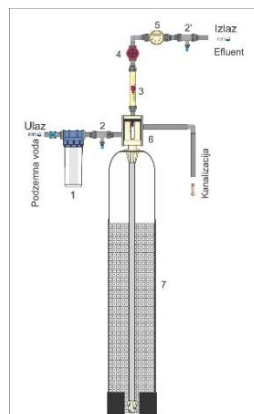
<sup>1</sup>Prirodno-matematički fakultet, Novi Sad

<sup>2</sup>Odjel za kemiju, Osijek

kukucka.rio@gmail.com, mile91k@gmail.com

U radu su prikazane teoretske osnove fizikalno-kemijskih i adsorpcijskih karakteristika prirodnih i umjetnih zeolita preko pregleda literaturnih referenci. Također, prikazane su osnovne hidrogeološke karakteristike sjeverno banatskog vodotoka sa posebnim osvrtom na područje Kikinde. Rad je posvećen ispitivanju mogućnosti uklanjanja amonijaka iz podzemnih voda kikinskog vodotoka na umjetnom zeolitu Crystal Right CR-100. Za potrebe istraživanja je izrađen ispitni – pilot uređaj koji je sadržavao navedeni zeolit, kao i prateću tehničku podršku koja je omogućavala mjerenja hidrauličkih parametara procesa adsorpcije amonijevih iona. Tijekom istraživanja su mjerene koncentracije amonijaka u podzemnoj vodi i efluentima iz pilot uređaja. Na osnovu dobijenih rezultata su izračunate adsorpcijske karakteristike ispitivanog zeolita u uvjetima protočnog kontinuiranog sustava odvijanja procesa ionske izmjene na aktivnim mjestima zeolita. Ukupno vrijeme odvijanja svakog od tri izvedena eksperimenta je bilo oko 140 sati.

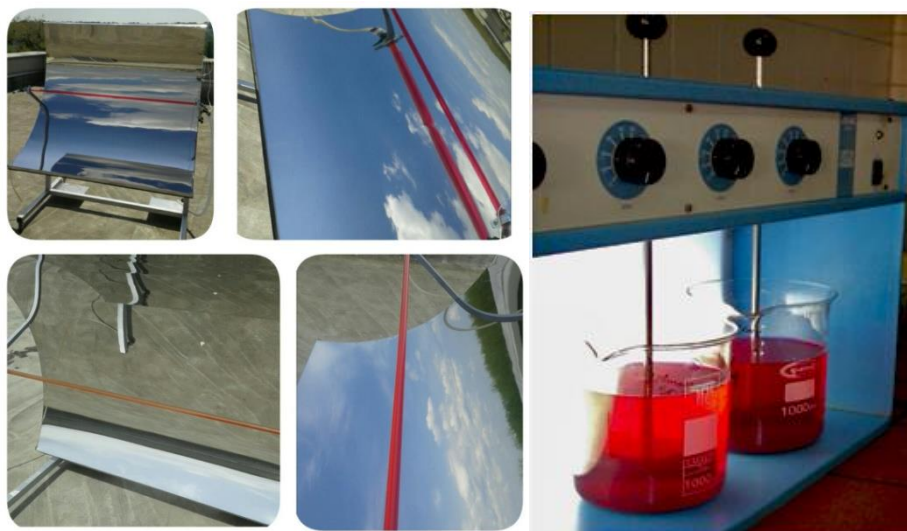
Dobijeni rezultati pokazuju da se proces adsorpcije amonijevih iona kinetički odvija u tri faze, i to prvoj, sporij fazi koja traje najkraće, a zatim drugoj fazi koju karakterizira brz porast koncentracije amonijaka u efluentu i traje najduže (54 h). Treća faza se odvija sporo uz blagi porast koncentracije amonijaka u efluentima koja se očigledno asimptotski približava vrijednosti ulazne koncentracije. U radu je prikazan nov pristup određivanju probojne točke kao presječne točke koncentracijskih zavisnosti od ukupnog vremena odvijanja eksperimenta, odnosno ukupnog proteklog volumena ispitivane vode. Grafički su prikazana dva osnovna tipa adsorpcijskih izoterma, i to Freundlich-ova i Langmuir-ova iz kojih su izračunati karakteristični parametri adsorpcije amonijaka na ispitivanom zeolitu. Freundlich-ov adsorpcijski model više odgovara ispitivanoj adsorpciji od Langmuirovog modela. Visoka linearna korelacija je kod Freundlich-ovog modela dobijena za sve eksperimentalne točke, kao i posebno za točke koje pripadaju drugom i trećem stupnju procesa adsorpcije. Langmuir-ov model pokazuje slabu linearnu korelaciju za cjelokupan broj točaka a visoku korelaciju za drugi i treći stupanj ispitivane adsorpcije. Iz oblika Freundlich-ove izoterme pokazano je da je ispitivani adsorpcijski proces višeslojan, a iz Langmuir-ove izoterme dobijena je vrijednost adsorpcijskog kapaciteta monosloja koji iznosi 6,67 mg NH<sub>4</sub><sup>+</sup>-N/g CR. Na osnovu prikazanih rezultata može se zaključiti da se primjenjeni tip zeolita može uspješno koristiti za uklanjanje amonijaka iz podzemne vode uz visoku učinkovitost uklanjanja amonijaka od preko 90% za protečenu količinu vode od 350 BV.



## Uspoređivanje efikasnosti Fenton i foto-Fenton procesa obezbojavanja sintetičke otopine Reactive Red 120

Jelena Mirković  
Prirodno-matematički fakultet Novi Sad  
mirkovicjel@gmail.com

Cilj ovog rada bio je određivanje efikasnosti obezbojavanja vodene otopine boje Reactive Red 120 primjenom Fenton i foto-Fenton procesa. U izvedenoj Fenton reakciji korištena je modificirana glina bentonit kao katalizator. Proučavani su utjecaji pH vrijednosti, koncentracije vodikovog peroksida i boje te doze katalizatora. Cjelokupno gledano, foto-Fenton proces, za razliku od Fenton procesa, može se odvijati na pH vrijednostima višim od 3, uz dobru efikasnost obezbojavanja. Također je pokazao prednost u smislu manje upotrebe reagensa i manje koncentracije izlučenog željeza u otopini nakon procesa. Ovaj rad izrađen je na Katedri za kemijsku tehnologiju i zaštitu životne sredine Odjela za kemiju, biokemiju i zaštitu životne sredine Prirodno-matematičkog fakulteta u Novom Sadu, pod vodstvom profesorice dr. Milene Bečelić-Tomin.

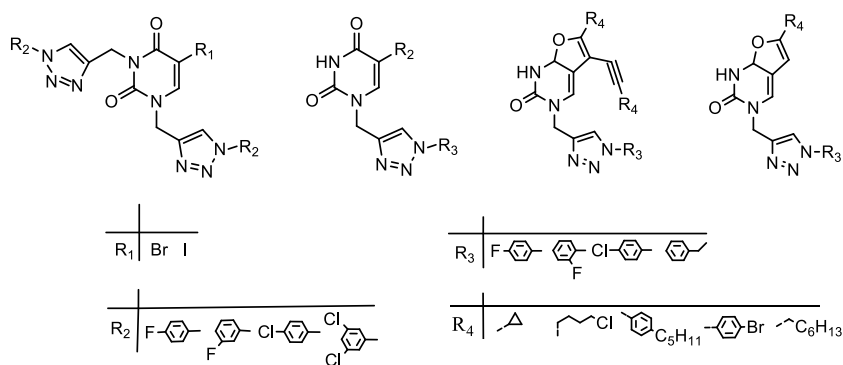


## Sinteza i molekulsko modeliranje novih hibrida 1,2,3-triazola i pirimidina s potencijalnim protutumorskim djelovanjem

Tomislav Gregorić, Silvana Raić-Malić  
Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Zagreb  
tgregoric@fkit.hr

Regioselektivnom 1,3-dipolarnom cikloadicijom, nazvanom „klik“ reakcijom, sintetizirani su ciljani 1,4-disupstituirani 1,2,3-triazolni derivati 5-bromuracila (**3–10**) i 5-joduracila (**14–16**). Priprava N-1,N-3-disupstituiranih hibrida 1,2,3-triazola i pirimidina (**3–6**) provedena je pomoću odgovarajućih aromatskih azida, Na-askorbata, CuSO<sub>4</sub> pri sobnoj temperaturi. Sinteza N-1 monosupstituiranih hibrida 1,2,3-triazola i pirimidina (**7–10**) odvijala se je primjenom mikrovalova pri temperaturi od 80 °C i 300 W uz katalizatore Cu(0), 1M CuSO<sub>4</sub>. Nadalje, Sonogashira-inom reakcijom N-1 triazolnih derivata 5-joduracila (**14–16**) i izabranih alkina pomoću paladija kao katalizatora, CuI kao ko-katalizatora i *N,N*-diizopropiletilamina sintetizirani su 5,6-disupstituirani (**17a–29a**) i 6-supstituirani biciklički furo[2,3-*d*]pirimidinski (**17b–29b**) derivati. Novopripremljenim spojevima potvrđena je struktura primjenom spektroskopije <sup>1</sup>H i <sup>13</sup>C NMR. Za furo[2,3-*d*]pirimidinski derivat **17a** određena je rendgenska strukturalna analiza. Rezultati antitumorskih ispitivanja za spojeve **3–11** pokazali su da je spoj **11** imao najučinkovitije i selektivno protutumorsko djelovanje na karcinom pluća (A549) (IC<sub>50</sub> = 0,79 μM). Spojevi **3**, **5**, **6** i **9** imali su snažno, ali i neselektivno inhibitorno djelovanje na karcinom vrata maternice (HeLa), karcinom debelog crijeva (SW620), karcinom jetre (Hep-G2) i karcinom gušterače (CFPAC-1). Rezultati molekuskog modeliranja novosintetiziranih pirimidinskih 1,2,3-triazolnih derivata (**3–10**) na enzim timidilat-sintetazu pokazali su moguće načine vezivanja i interakcije ispitanih spojevi u aktivnom mjestu enzima te su postavili osnove za daljnja istraživanja mehanizma protutumorskih djelovanja pirimidinskih spojeva koji su strukturno srodni prirodnim nukleozidima.

Ovaj rad izrađen je na Zavodu za organsku kemiju Fakulteta kemijskog inženjerstva i tehnologije Sveučilišta u Zagrebu pod mentorstvom prof. dr. sc. Silvine Raić- Malić



Slika 1: Novi hibridi 1,2,3-triazola i pirimidina

## Sinteza i karakterizacija novih urea i semikarbazidnih derivata primakina

Petra Gilja, Ana Palajsa, Ivana Perković  
 Farmaceutsko-biokemijski fakultet, Zagreb  
 pgilja@student.pharma.hr; apalajsa@student.pharma.hr

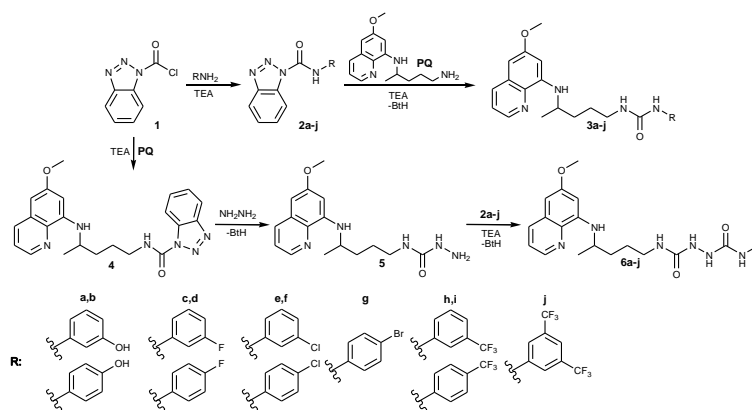
Primakin je važan antimalarijski lijek iz skupine 8-aminokinolina. Osim antimalarijskog, otkrivena je i citostatska aktivnost njegovih derivata s urea i semikarbazidnom skupinom. Kod prethodno sintetiziranih derivata dokazano je izraženo citostatsko djelovanje urea i semikarbazida primakina s halogeniranim benzenskim prstenom [1, 2].

Cilj ovog rada bio je sintetizirati nove urea i semikarbazidne derivate primakina s različitim elektronegativnim supstituentima (halogeni elementi ili kisik) na benzenskom prstenu. U sintezama je korištena benzotriazolska metoda [3], kojom su sintetizirani odgovarajući prekursorski 1-karbamoilbenzotriazoli (**2a-j**) te svi derivati primakina.

Kao početni spoj u sintezi korišten je klorid 1-benzotriazolkarboksilne kiseline (BtcCl, **1**). Reakcijom BtcCl (**1**) i odgovarajućeg anilina dobiveni su 1-karbamoilbenzotriazoli (**2a-j**). Urea derivati (**3a-j**) dobiveni su u reakciji primakina s odgovarajućim 1-karbamoilbenzotriazolom (**2a-j**), a semikarbazidni derivati (**6a-j**) u reakciji primakinskog semikarbazida (**5**) s odgovarajućim 1-karbamoilbenzotriazolom (**2a-j**).

Strukture svih sintetiziranih spojeva (uz iznimku spoja **2j**) potvrđene su uobičajenim spektroskopskim metodama (IR, <sup>1</sup>H i <sup>13</sup>C NMR, MS) te je čvrstim produktima određeno talište. Sintetiziranim derivatima primakina u daljnjim istraživanjima biti će ispitano antitumorsko djelovanje.

Rad je izrađen na Zavodu za farmaceutsku kemiju Farmaceutsko-biokemijskog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu.



[1] Pavić, K., Perković, I., Cindrić, M., Pranjić, M., Martin-Kleiner, I., Kralj, M., Schols, D., Hadjipavlou-Litina, D., Katsori, A. M., Zorc, B., Eur. J. Med. Chem. 86 (2014) 502–514.

[2] Perković, I., Tršinar, S., Žanetić, J., Kralj, M., Martin-Kleiner, I., Balzarini, J., Hadjipavlou-Litina, D., Katsori, A. M., Zorc, B., J. Enzyme Inhib. Med. Chem. 28 (2013) 601–610.

[3] Butula, I., Zorc, B., Kem. Ind. 56 (2007) 123–134.

## **Ekstrakcija fenolnih spojeva iz organskog otpada pokožice grožđa sorte *Teran* potpomognuta visokim hidrostatskim tlakom**

Resman Bernarda, Šustić Ivana  
Prehrambeno-biotenološki fakultet, Zagreb  
resman.bernarda@gmail.com; ivana.sustic2@gmail.com

Ekstrakcija potpomognuta visokim hidrostatskim tlakom (EVHT) je netermalna metoda gdje se tekući ili čvrsti uzorci podvrgavaju djelovanju visokog hidrostatskog tlaka (VHT) u vrijednostima od 100 do 800 MPa, a ponekad i do 1200 MPa. Za razliku od klasične metode ekstrakcije, ova metoda pripada skupini ekološki prihvatljivih metoda ekstrakcije budući da su potrebne male količine otapala te da je vremenski period obrade kratak, pa je stoga potreban i manji utrošak energije. Komina grožđa je pogodna sirovina za ekstrakciju biološki aktivnih spojeva budući da u njoj zaostaju velike količine fenolnih spojeva koji se mogu iskoristiti kao sekundarna sirovina u proizvodnji funkcionalnih prehrambenih proizvoda, te farmaceutske i kozmetičke industriji. Cilj rada bio je odrediti utjecaj vrste i polarnosti otapala, vrijednosti visokog hidrostatskog tlaka i vremena trajanja obrade na ekstrakciju ukupnih fenola, polimernih proantocijanidina i ukupnih antocijana te antioksidacijski kapacitet dobivenih ekstrakata. Ispitivana otapala su etanol i metanol, polarnosti 30%, 50% i 70%, vrijednosti hidrostatskog tlaka od 300 MPa, 400 MPa i 500 MPa, te vrijeme trajanja ekstrakcije od 3, 6.5 i 10 minuta. Etanol se pokazao kao najbolje otapalo za EVHT ukupnih fenola iz pokožice grožđa, dok je najveća vrijednost antioksidacijskog kapaciteta dobivena kada je kao otapalo korišten metanol. Dobiveni rezultati upućuju na to da je 50%-tni (v/v) etanol otapalo optimalne polarnosti s kojim se ostvaruje najveći prinos fenola i polimernih proantocijanidina iz pokožice grožđa pri provođenju EVHT. Najveća koncentracija ekstrahiranih polimernih proantocijanidina postignuta je pri vrijednosti VHT od 400 MPa, dok različite vrijednosti VHT ne pokazuju utjecaj na količinu ekstrahiranih ukupnih fenolnih spojeva i ukupnih antocijana. Rezultati dobiveni ovim istraživanjem upućuju na to da optimalno vrijeme trajanja EVHT polimernih proantocijanidina iz pokožice grožđa iznosi 6,5 min, kada je kao otapalo korišten etanol.

Rad je izrađen na Prehrambeno-biotehnološkom fakultetu na Zavodu za procesno inženjerstvo pod vodstvom prof.dr.sc. Damira Ježeka te na Zavodu za prehrambeno-tehnološko inženjerstvo pod vodstvom prof.dr.sc. Verice Dragović-Uzelac.





## SPONZORI



# PLIVA



# 3. SIMPOZIJ STUDENATA KEMIČARA

SPONZOR



DONATORI



## Knjiga sažetaka

22. listopada 2016.

Sveučilište u Zagrebu

Prirodoslovno-matematički fakultet

Kemijski odsjek

## **ORGANIZACIJSKI ODBOR**

Tomislav Piteša, predsjednik

Mihael Eraković

Nea Baus

Karolina Kolarić

Ana Mikelić

Ana Milas

Tamara Rinkovec

Petar Štrbac

Edi Topić

## **SURADNICI**

Kristin Becker

Luka Fotović

Dominik Gašparić

Neven Golenić

Ingrid Gregorović

Demian Kalebić

Toni Lijić

Matea Sršen

Ana Vlašić

Jelena Bijelić

Pavo Živković

## **SAVJETNICI**

Doc. dr. sc. Dominik Cinčić

Doc. dr. sc. Vladimír Stilinović

Danijel Namjesnik, dipl. ing.

Prof. dr. sc. Srđanka Tomić-Pisarović

Kristina Smokrović, mag. chem.

Nikola Bedeković, mag. chem.

Milenko Korica, mag. educ. chem.

## ORGANIZATOR



Studentska sekcija Hrvatskog kemijskog društva

## POKROVITELJI



Hrvatsko kemijsko društvo



Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek

## **UREDNICI**

Ana Milas

Ana Mikelić

Tamara Rinkovec

Mihael Eraković

Petar Štrbac

## **TEKST PRIPREMILI**

AUTORI, koji su odgovorni za tekst sažetaka

## **IZDAVAČI**

Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek

Hrvatsko kemijsko društvo

## **SPONZOR**

PLIVA Hrvatska d.o.o., Zagreb

## **DONATORI**

Hrvatska akademija znanosti i umjetnosti

BASF Hrvatska d.o.o., Zagreb

Atlantic Grupa Hrvatska d.d., Zagreb

Studentski zbor Sveučilišta u Zagrebu



## TABLICA SADRŽAJA

|   |    |
|---|----|
| RIJEČ PREDSEDNIKA ORGANIZACIJSKOG ODBORA .....  | 8  |
| RIJEČ PROČELNIKA SSHKD-a .....  | 9  |
| PROGRAM .....   | 10 |
| SAŽECI  |    |
| <b>Ivan Ilić:</b> Sinteza rotaksana koji reagira na podražaj i njegovo taloženje na površini pomoću metala .....                                    | 16 |
| <b>Kristijan Vuković:</b> Aminokiselinska raznolikost ljudskog proteoma .....   | 17 |
| <b>Edi Topić:</b> Putopis kroz čvrsto stanje .....  | 18 |
| <b>Luka Fotović:</b> Sinteza adukata kompleksnog spoja bakra(II) s iminom izvedenim iz 2-hidroksi-1-naftaldehida i 4-nitroanilina.....              | 20 |
| <b>Toni Grgurić:</b> Kokristali dvovalentnih metalnih acetilacetonata s 1,4-dijodotetraflorobenzenom povezani halogenskom vezom.....                | 21 |
| <b>Luka Šmital:</b> Supramolekulski motivi u kompleksima bakra(II) s heksafluoracetilacetonom i odabranim N-piridiloksimima .....                   | 22 |
| <b>Toni Vitasović:</b> Sinteza i struktura kokristala donepezila s donatorom halogenske veze .....  | 23 |
| <b>Sara Marijan:</b> Kokristali N-bromsukcinimida s derivatima piridina.....  | 24 |
| <b>Katarina Belačić i Anja Kostelac:</b> Priprema humane seril-tRNA-sintetaze i tRNA <sup>Ser</sup> za analizu mistranslacije serinskih kodona..... | 25 |
| <b>Iva Sućec:</b> Međuovisnost dviju domena Nudix-dipeptidil-peptidaze III iz mahovine <i>Physcomitrella patens</i> .....                           | 27 |
| <b>Isabella Koprivec i Josipa Korman:</b> Uloga topivih adhezijskih molekula sICAM i sVCAM u etiologiji i dijagnostici fibromialgije .....          | 28 |
| <b>Jelena Bijelić:</b> Utjecaj pH vrijednosti na nastanak različitih struktura kompleksnih spojeva kinurenske kiseline s cinkom .....               | 29 |
| <b>Silvija Šafranko:</b> Djelovanje hidrodinamičkih i termodinamičkih čimbenika te aditiva na taloženje kalcijeva oksalata.....                     | 30 |

|   |    |
|---|----|
| <b>Ingrid Gregorović:</b> Izučavanje halogenskih interakcija u metalo-organskoj sredini .....   | 31 |
| <b>Matea Vitković:</b> Uloga N-bromftalimida u Povarovljevoj reakciji o-vanilaldimina i acetona .....   | 32 |
| <b>Karolina Kolarić:</b> NO <sub>2</sub> ···NO <sub>2</sub> interakcije u metalo-organskoj sredini, stabilizirajuće ili destabilizirajuće? .....  | 33 |
| <b>Mihael Eraković:</b> Kompeticija donora halogenske veze u čvrstom stanju.....  | 34 |
| <b>Tomislav Piteša:</b> Halogenska veza u kokristalima ditopičnih donora i akceptora .....  | 35 |
| <b>Nives Bebek:</b> Nukleofugalnost pentafluorfenolata u 80%-tnoj vodenoj otopini etanola.....  | 36 |
| <b>Matej Poletar:</b> Sinteza novih imidazolnih α-D-manopiranozida kao potencijalnih FimH inhibitora .....  | 37 |
| <b>Ida Boček i Petra Roškarić:</b> Sinteza, spektroskopska karakterizacija i antioksidativna aktivnost novih hidroksi supstituiranih heteroaromatskih derivata kao potencijalnih senzora za detekciju pH i/ili metalnih kationa u otopinama ..... | 38 |
| <b>Filip Kozlina:</b> Sinteza i karakterizacija novih derivata cimetine kiseline i primakina .....  | 39 |
| <b>Ines Cazin:</b> Flow sinteza kombretastatina A-4.....  | 41 |
| <b>Matej Bubaš:</b> Proučavanje mikrosolvatacije anilina i hidroksilanilina novom klaster-kontinuum metodom .....   | 42 |
| <b>Karla Janež:</b> Analiza onečišćenja 7-etiltriptofola pomoću sustava LC-SPE/krio NMR .....   | 43 |
| <b>Petra Švelić i Šejla Sukić:</b> Razvoj elektrokemijskog impedancijskog senzora za <i>in situ</i> ocjenu djelotvornosti zaštitnih premaza.....  | 44 |
| <b>Tin Klačić:</b> Dimerizacija derivata dinitrozobenzena na površini zlata .....   | 45 |
| <b>Karla Kelemen:</b> Uloga konformacijske knjižnice u dizajnu novih receptora: kompleksi s hidrogenmalonatom – potvrda koncepta.....   | 46 |



|   |    |
|---|----|
| <b>Iva Gavran i Josipa Smolković:</b> Sinteza novog fotokatalitičkog nanokompozita poli(3,4-etilendioksitiofen)/TiO <sub>2</sub> imobiliziranog na lebdećem pepelu i ispitivanje njegove učinkovitosti pod simuliranim sunčevim zračenjem ..... | 47 |
| <b>Martina Guliš:</b> Hidrotermalna sinteza i karakterizacija nanočestica cerijeva(IV) oksida .....   | 48 |
| <b>Pavo Živković:</b> Upotreba ugljikovih nanočestica u izradi coated wire ISE za upotrebu u analitici tenzida .....  | 49 |
| <b>Martina Perlog i Jasmina Stjepanović:</b> Fotokatalitičko djelovanje kompozitnog materijala polipirrol/titanijev dioksid .....   | 50 |
| SPONZOR .....   | 52 |
| DONATORI .....  | 54 |

## RIJEČ PREDSJEDNIKA ORGANIZACIJSKOG ODBORA

Simpozij studenata kemičara, održan prošle i prethodne godine, već polako prelazi u tradicionalan projekt Studentske sekcije Hrvatskog kemijskog društva. Na svakom od dosad održanih Simpozija sudjelovalo je više od 150 studenata raznih sveučilišta u užoj regiji te je na svakom održano više od 20 studentskih izlaganja i predavanja. Stoga sa zadovoljstvom mogu izjaviti da su prethodni Simpoziji polučili veliki uspjeh te da su uvelike bili na korist studentskoj populaciji, kako znanstveno aktivnim studentima, tako i onima koji se tek namjeravaju uključiti u znanstveni rad.

S ciljem nastavljanja tradicije, Studentska sekcija je i ove godine organizirala, treći po redu, Simpozij studenata kemičara. Ovogodišnji Simpozij se sastoji od 4 tridesetominutna predavanja i 29 desetominutnih izlaganja, a sudjeluje više od 150 studenata kemičara s raznih hrvatskih fakulteta (PMF, FBF, FKIT, PBF, Odjel za kemiju u Osijeku). Nastavnici Kemijskog odsjeka PMF-a u Zagrebu i iskusni članovi Hrvatskog kemijskog društva prepoznali su važnost Simpozija te su mojim kolegama i meni i ove godine bili velika podrška pri organizaciji. Potencijal Simpozija prepoznale su i brojne firme (Pliva, BASF, Atlantic Grupa) te akademske institucije (Kemijski odjel PMF-a u Zagrebu, Studentski zbor Sveučilišta u Zagrebu, HAZU), bez čije potpore efikasno organizirati Simpozij nebi bilo moguće.

I ove godine na Simpoziju sudjeluju studenti kemičari koji su svoja istraživanja proveli na inozemnim fakultetima (Freie Universität, University of Melbourne, Université de Namur). Jedan od budućih ciljeva ovog projekta upravo je postizanje aktivne suradnje i komunikacije među studentima kemičarima i na međunarodnoj razini. Za ostvarivanje tog cilja Studentskoj sekciji neophodna će biti velika podrška asistentata i profesora s fakulteta, kao i naklonost domaćih, ali i stranih sponzora. Osobno smatram da upravo takva svestrana podrška, u kombinaciji s entuzijastičnim angažmanom studenata, obećava uspjeh budućih Simpozija te omogućava da SiSK i u nadolazećim godinama bude na korist i ponos svekolikoj znanstvenoj populaciji u Hrvatskoj i šire.

Tomislav Piteša

Predsjednik Organizacijskog odbora

## RIJEČ PROČELNIKA SSHKD-a

Dragi studenti, profesori i ostali sudionici,

ove godine imamo priliku prisustvovati trećem po redu Simpoziju studenata kemičara. Iznimno mi je drago da ova hvalevrijedna manifestacija pomalo prelazi u tradicionalan projekt Studentske sekcije Hrvatskog kemijskog društva. Simpozij predstavlja izvrsnu priliku mladim znanstvenicima da razmijene ideje i prezentiraju svoj istraživački rad pred stručnom publikom te tako steknu vrijedna iskustva za početak svoje znanstvene karijere. Također, jedan od ciljeva Simpozija je povezivanje mladih znanstvenika iz cijele Hrvatske i regije te poticanje međunarodne suradnje i izmjene ideja.

Sa zadovoljstvom mogu izjaviti da Simpozij iz godine u godinu neprestano raste, kako po broju sudionika, tako i po broju izlagača, te predstavlja najveći i najvrijedniji projekt Studentske sekcije Hrvatskog kemijskog društva. Studentska sekcija bavi se i popularizacijom znanosti među djecom vrtićke dobi te učenicima osnovnih i srednjih škola putem projekata Znanstvene čarolije i Popularizacijski odred Entropija koji će i na ovom Simpoziju imati priliku predstaviti svoj rad.

Ovom prilikom zahvaljujem se kolegama iz Organizacijskog odbora na uloženom radu i vremenu te Hrvatskom kemijskom društvu, Kemijskom odsjeku Prirodoslovno-matematičkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu, Plivi, Hrvatskoj akademiji znanosti i umjetnosti, BASF-u, Studentskom zboru Sveučilišta u Zagrebu te Atlantic Grupi na financijskoj potpori. Također se zahvaljujem svim profesorima, docentima, asistentima i tehničkom osoblju na podršci i savjetima u realizaciji ovog projekta, te svim sudionicima Simpozija. Nadam se da će se neki od vas uključiti u rad studentske sekcije i sudjelovati u budućim projektima.

Mihael Eraković

Pročelnik Studentske sekcije Hrvatskog kemijskog društva

## PROGRAM

|             |   |
|-------------|---|
| 9:30-10:00  | <b>Registracija</b>   |
| 10:00-10:20 | <b>OTVARANJE SIMPOZIJA:</b><br>- riječ predsjednika Organizacijskog odbora: <b>Tomislav Piteša</b><br>- riječ pročelnika Kemijskog odsjeka PMF-a: prof. dr. sc. <b>Vladislav Tomišić</b><br>- riječ pročelnika Studentske sekcije Hrvatskog kemijskog društva: <b>Mihael Eraković</b> |

| <b>PREDAVANJA:</b>                           |  |
|--|--|
| <b>A2 (predsjedavajući: Tomislav Piteša)</b> |  |
| 10:20-10:50                                  | <b>Zrinka Banić Tomišić</b> (Državni zavod za intelektualno vlasništvo):<br><i>Intelektualno vlasništvo – osnove koje bi svatko trebao znati</i> |
| 10:50-11:20                                  | <b>Ivan Ilić</b> (Freie Universität, Berlin):<br><i>Sinteza rotaksana koji reagira na podražaj i njegovo taloženje na površini pomoću metala</i> |
| 11:20-11:30                                  | <b>KRATKA PAUZA</b>  |
| 11:30-12:00                                  | <b>Kristijan Vuković</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Aminokiselinska raznolikost ljudskog proteoma</i>  |
| 12:00-12:30                                  | <b>Edi Topić</b> (Pliva d.o.o.):<br><i>Putopis kroz čvrsto stanje</i>  |
| 12:30-13:00                                  | „COFFEE BREAK“   |

| <b>USMENA IZLAGANJA:</b> |   |   |
|--------------------------|---|---|
|                          | <b>A1 (predsjedavajući: Mihael Eraković )</b>   | <b>A2 (predsjedavajuća: Tamara Rinkovec)</b>  |
| 13:00-13:10              | <b>Luka Fotović</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Sinteza adukata kompleksnog spoja bakra(II) s iminom izvedenim iz 2-hidroksi-1-naftaldehida i 4-nitroanilina</i> | <b>Katarina Belačić i Anja Kostelac</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Priprema humane seril-tRNA-sintetaze i tRNA<sup>Ser</sup> za analizu mistranslacije serinskih kodona</i> |
| 13:10-13:20              | <b>Toni Grgurić</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Kokristali dvovalentnih metalnih acetilacetonata s 1,4-dijodotetrafluorobenzenom povezani halogenskom vezom</i>  | <b>Iva Sućec</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Međuovisnost dviju domena Nudix-dipeptidil-peptidaze III iz mahovine Physcomitrella patens</i>                                  |
| 13:20-13:30              | <b>Luka Šmital</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Supramolekulski motivi u kompleksima bakra(II) s heksafluoracetilacetonom i odabranim N-piridiloksimima</i>       | <b>Isabella Koprivec i Josipa Korman</b> (FBF, Zagreb):<br><i>Uloga topivih adhezijskih molekula sICAM i sVCAM u etiologiji i dijagnostici fibromialgije</i>          |
| 13:30-13:40              | <b>Toni Vitasović</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Sinteza i struktura kokristala donepezila s donatorom halogenske veze</i>                                      | <b>Jelena Bijelić</b> (Odjel za kemiju, Osijek):<br><i>Utjecaj pH vrijednosti na nastanak različitih struktura kompleksnih spojeva kinurenske kiseline s cinkom</i>   |
| 13:40-13:50              | <b>Sara Marijan</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Kokristali N-bromsukcinimida s derivatima piridina</i>   | <b>Silvija Šafranko</b> (Odjel za kemiju, Osijek):<br><i>Djelovanje hidrodinamičkih i termodinamičkih čimbenika te aditiva na taloženje kalcijeva oksalata</i>        |
| 13:50-15:20              | „LUNCH BREAK“   |   |

| <b>A2 (Predavanje donatora)</b> |  |
|---------------------------------|--|
| 15:20-15:50                     | <b>Nenad Banjac</b> (Atlantic Grupa): Atlantic Grupa - ocean prilika |

|             | <b>A1 (predsjedavajući: Demian Kalebić)</b>   | <b>A2 (predsjedavajući: Edi Topić)</b>   |
|-------------|---|--|
| 15:55-16:05 | <b>Ingrid Gregorović</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Izučavanje halogenskih interakcija u metalo-organskoj sredini</i>   | <b>Nives Bebek</b> (FBF, Zagreb):<br><i>Nukleofugalnost pentafluorfenolata u 80%-tnoj vodenoj otopini etanola</i>  |
| 16:05-16:15 | <b>Matea Vitković</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Uloga N-bromftalimida u Povaravljevoj reakciji o-vanilaldimina i acetona</i>   | <b>Matej Poletar</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Sinteza novih imidazolnih <math>\alpha</math>-D-manopiranozida kao potencijalnih FimH inhibitora</i>   |
| 16:15-16:25 | <b>Karolina Kolarić</b> (PMF, Zagreb):<br><i>NO<sub>2</sub>...NO<sub>2</sub> interakcije u metalo-organskoj sredini, stabilizirajuće ili destabilizirajuće?</i> | <b>Ida Boček i Petra Roškarić</b> (FKIT, Zagreb):<br><i>Sinteza, spektroskopska karakterizacija i antioksidativna aktivnost novih hidroksi supstituiranih heteroaromatskih derivata kao potencijalnih senzora za detekciju pH i/ili metalnih kationa u otopinama</i> |
| 16:25-16:35 | <b>Mihael Eraković</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Kompeticija donora halogenske veze u čvrstom stanju</i>   | <b>Filip Kozlina</b> (FBF, Zagreb):<br><i>Sinteza i karakterizacija novih derivata cimetne kiseline i primakina</i>  |
| 16:35-16:45 | <b>Tomislav Piteša</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Halogenska veza u kokristalima ditopičnih donora i akceptora</i>  | <b>Ines Cazin</b> (FKIT, Zagreb):<br><i>Flow sinteza kombretastatina A-4</i>   |
| 16:45-17:00 | „COFFEE BREAK“  |  |
|             | <b>A1 (predsjedavajuća: Nea Baus)</b>   | <b>A2 (predsjedavajuća: Kristin Becker)</b>  |
| 17:00-17:10 | <b>Matej Bubaš</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Proučavanje mikrosolvatacije anilina i hidroksilanilina novom klaster-kontinuum metodom</i>                             | <b>Iva Gavran i Josipa Smolković</b> (FKIT, Zagreb):<br><i>Sinteza novog fotokatalitičkog nanokompozita poli(3,4-etilendioksitiofen)/TiO<sub>2</sub> imobiliziranog na lebdećem pepelu i ispitivanje njegove učinkovitosti pod simuliranim sunčevim zračenjem</i>    |
| 17:10-17:20 | <b>Karla Janeš</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Analiza onečišćenja 7-etiltriptofola pomoću sustava LC-SPE/krio NMR</i>   | <b>Martina Guliš</b> (FKIT, Zagreb):<br><i>Hidrotermalna sinteza i karakterizacija nanočestica cerijeva (IV) oksida</i>  |
| 17:20-17:30 | <b>Petra Švelić i Šejla Zukić</b> (FKIT, Zagreb):<br><i>Razvoj elektrokemijskog impedancijskog senzora za in situ ocjenu djelotvornosti zaštitnih premaza</i>   | <b>Pavo Živković</b> (Odjel za kemiju, Osijek):<br><i>Upotreba ugljikovih nanočestica u izradi coated wire ISE za upotrebu u analitici tenzida</i>   |
| 17:30-17:40 | <b>Tin Klačić</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Dimerizacija derivata dinitrozobenzena na površini zlata</i>   | <b>Martina Perlog i Jasmina Stjepanović</b> (FKIT, Zagreb):<br><i>Fotokatalitičko djelovanje kompozitnog materijala polipirol/titanijev dioksid</i>  |
| 17:40-17:50 | <b>Karla Kelemen</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Uloga konformacijske knjižnice u dizajnu novih receptora: kompleksi s hidrogenmalonom – potvrda koncepta</i>          |  |

|             |  |
|-------------|--|
| 17:50-18:10 | <b>Popularizacijski odred Entropija</b> (PMF, Zagreb): |
|-------------|--|



**SAŽECI**





# Predavanja

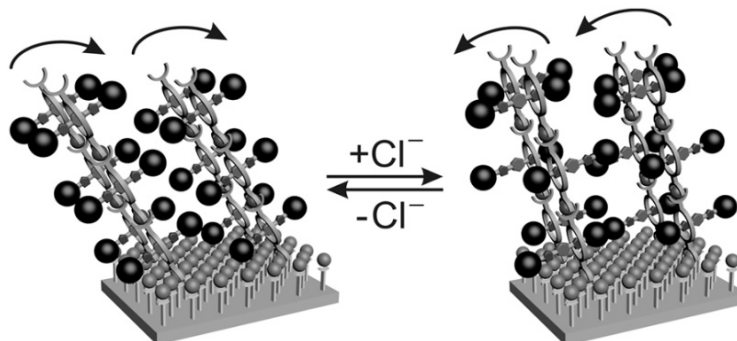


## Sinteza rotaksana koji reagira na podražaj i njegovo taloženje na površini pomoću metala

Thomas Heinrich, Ivan Ilić, Christoph A. Schalley  
Freie Universität Berlin  
iilic25693@gmail.com

Poznate su mnoge molekule koje reagiraju na različite kemijske, električne i svjetlosne podražaje mijenjajući konformaciju i time proizvodeći pomak na nanoskali. Taj pomak može se multiplicirati i time proizvesti korisno gibanje na makroskopskoj skali. Kako bi se određeno gibanje moglo multiplicirati potrebno ga je usmjeriti, odnosno postaviti molekule u istu orijentaciju. To se može ostvariti taloženjem molekula na površinu [1.].

U grupi Prof. Schalleya razvijen je postupak kojim se rotaksani koji reagiraju na kemijski podražaj višeslojno talože na površinu pomoću metalnih kationa [2.]. Takvi slojevi pokazuju slična svojstva kao i rotaksani od kojih su napravljeni. Kako bi se svojstva takvih sustava dalje istražila potrebno je sintetizirati nove rotaksane. Zbog toga je sintetizirana nova rotaksanska osovina i ukomponirana je u rotaksan, te su ispitana njegova svojstva u otopini. Također, jedan prethodno sintetiziran rotaksan je istaložen na površinu kako bi se ispitala njegova svojstva na površini. Rad je izrađen u grupi Prof. C. A. Schalleya, uz mentorstvo T. Heinricha.



[1.] S. Richter, J. Poppenberg, C.-H. Traulsen, E. Darlatt, A. Sokolowski, D. Sattler, W. Unger, C. A. Schalley, *J. Am. Chem. Soc.* 2012, 134, 16289.

[2.] T. Heinrich, C. H.-H. Traulsen, M. Holzweber, S. Richter, V. Kunz, S. K. Kastner, S. O. Krabbenborg, J. Huskens, W. E. S. Unger, C. A. Schalley, *J. Am. Chem. Soc.* 2015, 137, 4382.



3. Simpozij Studenata kemičara, 22.10.2016.

## **Aminokiselinska raznolikost ljudskog proteoma**

Kristijan Vuković

Centre for Systems Genomics, University of Melbourne, Victoria, Australia

kvukovic6@gmail.com

Aminokiseline su važne biološke molekule koje kao monomerne jedinice sudjeluju u izgradnji proteina. Nedavni razvoj tehnologija za sekvenciranje genoma omogućio je indirektno određivanje njihovih sekvenci mapiranjem nukleotidnih sljedova protein-kodirajućih regija genoma na odgovarajuće aminokiselinske sljedove proteoma. Takva metoda višestruko je brža i jeftinija od direktnog sekvenciranja proteina, a nove tehnologije revolucionarizirale su primjenu genetskog koda u medicinskim i znanstvenim istraživanjima. U ovom radu, podatci iz projekta “1000 Genomes” i nekoliko sličnih projekata iskorišteni su za konstrukciju mapa aminokiselinskih supstitucija s obzirom na njihovu učestalost i patogenost. Biokemijska klasifikacija aminokiselina pokazala se ključnom u objašnjavanju dobivenih rezultata, a tranzicije između strukturnih grupa u ove dvije mape imale su značajnu obrnuto proporcionalnu korelaciju koja je u skladu s evolucijskim selektivnim pritiscima. Distribucija kodona pojedinih aminokiselina pokazala se nedostatnom za objašnjavanje dobivenih supstitucijskih mapa, a s obzirom na nukleotidne pozicije unutar kodona, uočena je povećana patogenost aminokiselinskih supstitucija uzrokovanih promjenom 2. te smanjena patogenost supstitucija uzrokovanih promjenom 3. nukleotida. Konačno, konstruirane su i analizirane frekvencijski razriješene supstitucijske mape 5 populacijskih grupa definiranih u projektu “1000 genomes”. Ovaj rad izrađen je pri Centru za Sistemsku Genomiku u Melbourneu pod vodstvom: Izv. prof. Michael Inouye (Sveučilište u Melbourneu) i Izv. prof. Tomice Hrenara (Sveučilište u Zagrebu).



3. Simpozij Studenata kemičara, 22.10.2016.

## Putopis kroz čvrsto stanje

Edi Topić  
Pliva Hrvatska d.o.o.  
edi.topic@pliva.com

U cilju sprječavanja i liječenja bolesti te povećanja kvalitete života milijunâ ljudi, znanstvenici u farmaceutskoj industriji susreću se s mnogobrojnim izazovima. Od prvog reagensa u sintezi do pakiranja u *blistere*, aktivna farmaceutska tvar (API) proživljava izuzetno kompleksne fizikalne i kemijske transformacije. Kako barem jedan korak u ovom putu uključuje API u čvrstom stanju, od velike je važnosti istražiti svojstva istoga, te razviti čvrstu formu API-ja pogodnu za daljnju primjenu.

Jedan od glavnih izazova u farmaceutskoj industriji generičkih lijekova je pronaći novu kristalnu formu aktivne tvari koja je po svojim svojstvima usporediva ili bolja od kristalne forme lijeka inovatora. Kombinacija inovativnosti i iskustva, u sprezi s najmodernijom instrumentacijom, omogućuje potpuni uvid u svojstva proučavanog materijala, a s time i razvoj proizvoda koji će ljudima omogućiti bolju kontrolu nad vlastitim zdravljem.

Ovo predavanje priča je o međumolekulskim interakcijama, adsorpciji, kristalnoj strukturi i svemu onom što nam pomaže da shvatimo čudesni svijet čvrstog stanja.

Isto tako, ovo predavanje putopis je kroz polimorfne prijelaze, površinu čestica, termičku razgradnju i sve ono što nam je važno da razumijemo ponašanje aktivne tvari na putu od istraživačkog laboratorija do krajnjeg korisnik

# Usmena izlaganja



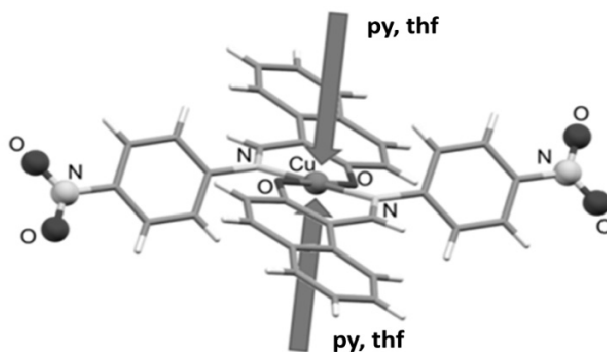
## Sinteza adukata kompleksnog spoja bakra(II) s iminom izvedenim iz 2-hidroksi-1-naftaldehida i 4-nitroanilina

Luka Fotović, Vinko Nemeć i Dominik Cinčić  
Kemijski odsjek, Prirodoslovno matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu  
lfotovic@stud.biol.pmf.hr

Imini, odnosno Schiffove baze kao ligandi intenzivno se izučavaju kroz zadnjih pet desetljeća, a od devedesetih godina prošlog stoljeća imini izvedeni iz aromatskih aldehida postaju jedni od najtipičnijih liganada u području koordinacijske kemije [1].

U ovome radu sintetiziran je koordinacijski spoj bakra(II) i imina (**1**), dobivenog kondenzacijom 2-hidroksi-1-naftaldehida i 4-nitroanilina te su pripremljeni njegovi piridinski (**1-py**) i tetrahidrofuranski (**1-thf**) adukti. Pri sintezi bio je stavljen naglasak na usporedbu mehanokemijske metode i tradicionalne sinteze iz otopine kao poznate načine dobivanja koordinacijskih spojeva i adukata. Spoj **1** pripremljen je metodom zagrijavanja otopine reaktanata uz povratno hlađenje, a adukti prekriztalizacijom sintetiziranog kompleksa iz otopine **py**, odnosno **thf**. Svi dobiveni spojevi okarakterizirani su termogravimetrijskom analizom te difrakcijom rentgenskih zraka na praškastom uzorku. Adukt **1-py** kao i spoj **1** pripremljeni su mehanokemijskim metodama. Spoj **1** je pripremljen mljevenjem bakrova(II) acetata monohidrata i imina u kugličnom mlinu uz katalitičku količinu pogodnog otapala. Mljevenjem prethodno pripremljenog kompleksa s otopinom **py** uspješno je sintetiziran adukt. Također, u radu je pokazano da se adukt **1-py** može pripremiti bez prethodne sinteze kompleksa; odnosno mljevenjem bakrova(II) acetata monohidrata, imina i **py** u stehiometrijskom omjeru 1:2:2 te trietilaminom u katalitičkim količinama. Molekulska i kristalna struktura kompleksa i adukata određena je difrakcijom rentgenskih zraka na jediničnom kristalu. U kristalima molekule se međusobno povezuju vodikovim vezama vrste C–H...O i C–H...C te C–H... $\pi$  interakcijama.

Rad je izrađen na Kemijskom odsjeku Prirodoslovno-matematičkog fakulteta u Zagrebu pod vodstvom doc. dr. sc. Dominika Cinčića i neposrednim vodstvom Vinka Nemeća, mag. chem.



[1] A. Blagus, D. Cinčić, T. Friščić, B. Kaitner, V. Stilinović, *Maced. J. Chem. Chem. Eng.* 29 (2010) 117.



## Kokristali dvovalentnih metalnih acetilacetonata s 1,4-dijodotetrafluorobenzenom povezani halogenskom vezom

Toni Grgurić, Vladimir Stilinović, Dominik Cinčić

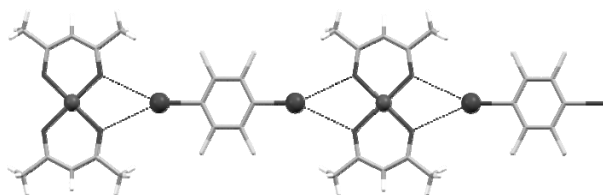
Prirodoslovno-matematički fakultet u Zagrebu, Kemijski odsjek, Horvatovac 102A, Zagreb  
dfory28@gmail.com

Koordinacijski spojevi prijelaznih metala s  $\beta$ -diketonima (pogotovo s acetilacetonom (**Hacac**)) su dobro istraženi kroz povijest. U zadnje vrijeme  $\beta$ -diketonati metala počinju dobivati znatnu pozornost kao građevne jedinice u kristalnom inženjstvu, koristeći modificirane diketone, koji se mogu povezivati u supramolekulske strukture ili adukte. U ovom radu ćemo prikazati nemodificirane bis(acetilacetonate) kao moguće akceptore halogenske veze.

Pripravljeno je šest kompleksa ( $\text{Cu}(\text{acac})_2$ ,  $\text{Pd}(\text{acac})_2$ ,  $\text{VO}(\text{acac})_2$ ,  $\text{Zn}(\text{acac})_2(\text{H}_2\text{O})$ ,  $\text{Ni}(\text{acac})_2(\text{H}_2\text{O})_2$  i  $\text{Co}(\text{acac})_2(\text{H}_2\text{O})_2$ ) i kokristalizirani su s 1,4-dijodotetrafluorobenzenom (**tfib**). U svih šest slučajeva dobiveni su kokristali u kojima su molekule kompleksa i **tfib**-a povezani u supramolekulske lance  $\text{O}\cdots\text{I}$  halogenskom vezom, ali stehiometrija i mjesto vezanja atoma joda je ovisno o prisustvu koordiniranih molekula vode. Tako u slučaju  $\text{Cu}(\text{acac})_2$ ,  $\text{Pd}(\text{acac})_2$  i  $\text{VO}(\text{acac})_2$  formirani su 1:1 kokristali u kojima svaki atom joda formira bifurkiranu halogensku vezu s atomima kisika dvaju acetilacetonatnih liganda.  $\text{VO}^{2+}$  kisikov atom ne sudjeluje u halogenskoj vezi, već je koordiniran na šesto koordinacijsko mjesto susjednog atoma vanadija tvoreći linearni koordinacijski polimer.

$\text{Co}(\text{acac})_2(\text{H}_2\text{O})_2$  i  $\text{Ni}(\text{acac})_2(\text{H}_2\text{O})_2$  također formiraju 1:1 kokristale s **tfib**-om, ali ovdje koordinirana voda formira vodikovu vezu s atomima kisika liganda od susjedne molekule čineći ih nedostupnima prema atomima joda **tfib**-a. Ovo povezivanje ostavlja atome kisika, od koordinirane vode, slobodne za povezivanje s atomom joda. Dobivena struktura se sastoji od lanaca molekula povezanih vodikovom u jednom smjeru te halogenskom vezom u drugom smjeru.

Slični lanci su prisutni u strukturi  $\text{Zn}(\text{acac})_2(\text{H}_2\text{O})$ -**tfib** kokristala. Pošto je koordinirana jedna voda, ovdje je ona povezana vodikovom vezom s jednim parom kisikovih atoma acetilacetonata po molekuli  $\text{Zn}(\text{acac})_2(\text{H}_2\text{O})$  ostavljajući drugi par slobodan da tvori bifurkiranu halogensku vezu ekvivalentnu onoj kod  $\text{Cu}(\text{acac})_2$ ,  $\text{Pd}(\text{acac})_2$  i  $\text{VO}(\text{acac})_2$ . Dobiveni kokristal, stehiometrije 2:1, se sastoji od dvostrukih lanaca  $\text{Zn}(\text{acac})_2(\text{H}_2\text{O})$ , povezanih vodikom vezom, međusobno povezani molekulama **tfib**-a





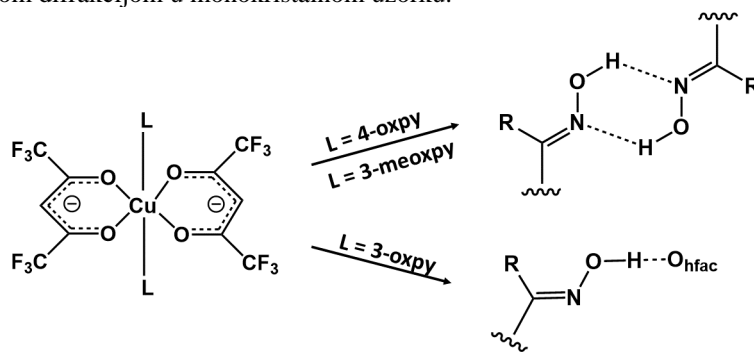
## Supramolekulski motivi u kompleksima bakra(II) s heksafluoracetilacetonom i odabranim N-piridiloksimima

Luka Šmital, Mladen Borovina, Marijana Đaković  
Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Horvatovac 102a, Zagreb  
E-mail: luka.smital@chem.pmf.hr

Zadnjih nekoliko desetljeća supramolekulska kemija bavi se proučavanjem nekovalentnih interakcija odgovornih za prostornu organizaciju molekula te ostvarenih supramolekulskih motiva i arhitektura u sustavima od interesa. U kristalnim strukturama organskih tvari često su prisutni određeni supramolekulski sintoni koji ovise o funkcionalnim skupinama vezanim na molekule, ali ne nužno i o strukturi samih molekula. Uvođenjem metalnih centara u organske sustave susrećemo se s problemom protuiona nužnog za neutralizaciju pozitivnog naboja metalnog centra. Protuion često ima destruktivni učinak na samu supramolekulsku strukturu jer je, kao nosioc lokaliziranog negativnog naboja, bolji akceptor u odnosu na ostale potencijalne akceptore koji potječu iz neutralnih skupina. Kao cilj istraživanja poslužio je dimerni motiv ostvaren N—H...O vodikovim vezama između oksimskih skupina koji je često prisutan u organskim sustavima<sup>1</sup>. Cilj istraživanja je ispitati mogućnost opstanka navedenog sintona u metalo-organskim sredinama.

U svrhu istraživanja priređeni su kompleksi bakra(II) s heksafluoracetilacetonom (**hfac**) i *N*-piridiloksimima (**3-oxpy**, **4-oxpy** i **3-meoxpy**). Produkti su dizajnirani na način da sadrže jednog dobrog donora (O—H skupinu) i tri potencijalna akceptora vodikove veze – dva na samom ligandu (oksimski dušikov i kisikov atom) te jedan na hfac ligandu koje ujedno služi i za kompenzaciju naboja (kisikov atom).

Spojevi su pripremljeni mehanokemijskom sintezom. Monokristali su dobiveni metodama sporog isparavanja otapala. Molekulska i kristalna struktura određena je rentgenskom difrakcijom u monokristalnom uzorku.



[1] Aakeröy, C.B., Schultheiss, N., in Braga, D., Grepioni, F., Making Crystals by Design, WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2007, 209.

Ovaj rad je u potpunosti financiran od strane Hrvatske zaklade za znanost u okviru projekta UIP-11-2013-1809.





## Sinteza i struktura kokristala donepezila s donatorom halogenske veze

Toni Vitasović, Vinko Nemeć i Dominik Ćinčić

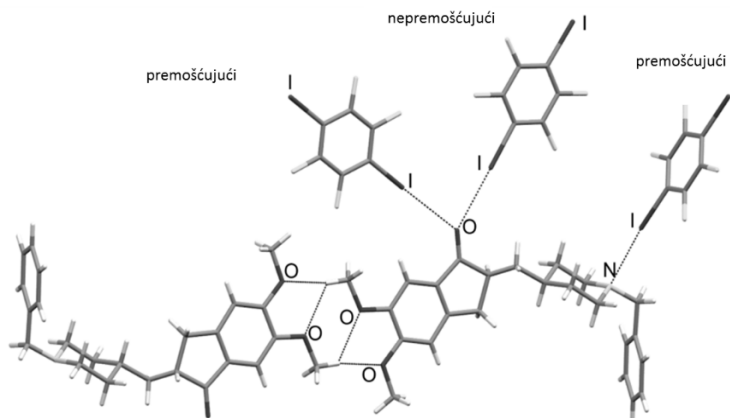
Prirodoslovno-matematićki fakultet, Kemijski odsjek, Horvatovac 102a, 10000 Zagreb

E-mail: tvitasovic@gmail.com

Donepezil (**dpz**) je farmakološki aktivna tvar, koja pripada skupini inhibitora acetil-kolinesteraze i svoju primjenu nalazi u medicini.<sup>1</sup> Sa stajališta kristalnog inženjerstva, **dpz** je zanimljiva molekula zbog prisutnosti funkcionalnih skupina koje mogu biti akceptori vodikove ili halogenske veze: kisikovi atomi metoksi i karbonilne skupine te dušikov atom piperidinilnog prstena.

Cilj našeg rada bio je istražiti mogućnost priprave kokristala **dpz**-a s donatorom halogenske veze. Mehanokemijskom sintezom potpomognutom otapalom i tradicionalnom sintezom iz otopine priređen je kokristal **dpz**-a s 1,4-dijodotetrafluorobenzenom (**tfib**) u stehiometrijskom omjeru 1:2. Difrakcijom rentgenskog zraćenja na jedinićnom kristalu određena je molekulska i kristalna struktura kokristala, te su analizirani strukturni motivi i uspoređeni sa već poznatima u bazi podataka. U kristalnoj strukturi (**dpz**)(**tfib**)<sub>2</sub>, molekule **dpz**-a povezane su bifurkiranim C–H...O vodikovim vezama te stvaraju R<sub>2</sub><sup>4</sup>(12) dimere. Dimeri su nadalje povezani u lance I...O halogenskim vezama ( $d(\text{I}\cdots\text{O}) = 3,24 \text{ \AA}$ ,  $\angle(\text{C}-\text{I}\cdots\text{O}) = 175^\circ$ ) koje se ostvaruju između molekule **tfib**-a i karbonilnih kisikovih atoma molekula **dpz**-a. Tako stvoreni lanci su povezani u 3D strukturu pomoću molekula **tfib**-a koje premošćuju dva piperidinilna dušikova atoma ( $d(\text{I}\cdots\text{N}) = 2,91 \text{ \AA}$ ,  $\angle(\text{C}-\text{I}\cdots\text{N}) = 175^\circ$ ). Osim toga, na karbonilni kisikov atom halogenskom vezom ( $d(\text{I}\cdots\text{O}) = 2,99 \text{ \AA}$ ,  $\angle(\text{C}-\text{I}\cdots\text{O}) = 178^\circ$ ) vezana je još jedna molekula **tfib**-a koja ne premošćuje molekule **dpz**-a već popunjavanja prazan prostor uzrokovan konformacijskim promjenama **dpz**-a.

Rad je izrađen na Kemijskom odsjeku Prirodoslovno-matematićkog fakulteta u Zagrebu pod vodstvom doc. dr. sc. Dominika Ćinčića i neposrednim vodstvom Vinka Nemeća, mag. chem.



### Literaturna vrela:

1. Christodoulou, C., Melville, P., Scherl, W. F., MacAllister, W. S., Elkins, L. E. & Krupp, L. B. (2006). *J. Neurol. Sci.* **245**, 127–136.



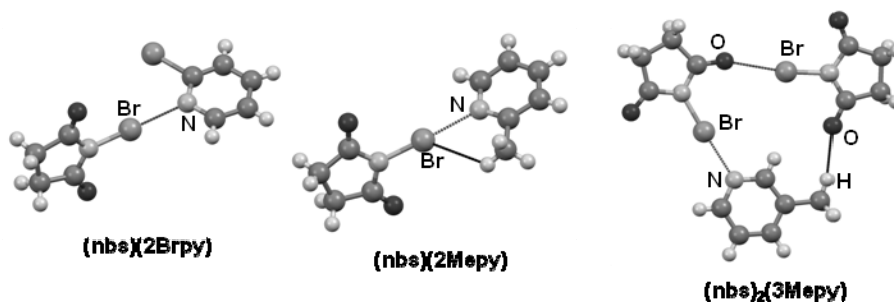
## Kokristali N-bromsukcinimida s derivatima piridina

Sara Marijan, Vinko Nemeć, Vladimir Stilinović i Dominik Cinčić  
Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu  
Email : smarijan@chem.pmf.hr

N-bromsukcinimid (**nbs**) je komercijalno dostupan i jeftin spoj koji se često koristi kao sredstvo za bromiranje u organskoj sintezi. Budući da posjeduje iznimno polarizirani atom broma, **nbs** je potencijalno snažan donor halogenske veze [1].

Cilj ovog rada bio je istražiti mogućnost pripreme kokristala **nbs** sa sljedećim akceptorima halogenske veze: 2-brompiridinom (**2Brpy**), 2-metilpiridinom (**2MePy**) i 3-metilpiridinom (**3MePy**). Sintezom iz otopine priređena su tri kokristala čije su molekulske i kristalne strukture određene difrakcijom rentgenskog zračenja na jediničnom kristalu. U sva tri kokristala molekule su povezane halogenskom vezom Br...N između atoma broma **nbs** i piridinskog dušika. Izmjerene udaljenosti Br...N u pripremljenim kokristalima bitno su kraće od sume van der Waalsovih polumjera broma (1.85 Å) i dušika (1.55 Å) iz čega se može zaključiti da se radi o vrlo jakim međumolekulskim interakcijama. U kristalnoj strukturi (**nbs**)(**2Brpy**) diskretni 1:1 kompleksi vezani halogenskom vezom tvore 3D mreže povezane C–H...O vodikovim vezama. U kristalnoj strukturi (**nbs**)(**2MePy**) diskretni 1:1 kompleksi vezani halogenskom vezom tvore 3D mreže povezane C–H...O i C–H...C vodikovim vezama. Također, halogenska veza u molekulskom kompleksu dodatno je potpognuta vodikovom vezom C–H...Br između metilne skupine piridina i atoma broma **nbs**. U kokristalu (**nbs**)<sub>2</sub>(**3MePy**) molekule su povezane s dvije vrste halogenske veze: Br...N halogenskom vezom između molekula **nbs** i piridina, te Br...O vezom između dviju susjednih molekula **nbs**. Diskretni 2:1 kompleksi tvore 2D mreže povezane C–H...O vodikovim vezama koje se nadalje slažu u slojeve.

Rad je izrađen na Kemijskom odsjeku Prirodoslovno-matematičkog fakulteta u Zagrebu pod vodstvom doc. dr. sc. Dominika Cinčića i neposrednim vodstvom Vinka Nemeća, mag. chem.



1. J. Mavračić, D. Cinčić, B. Kaitner, *CrystEngComm*, 2016, **18**, 3343-3346.
2. K. Raatikainen, K. Rissanen, *CrystEngComm*, 2011, **13**, 6972-6977.



## Priprema humane seril-tRNA-sintetaze i tRNA<sup>Ser</sup> za analizu mistranslacije serinskih kodona

Katarina Belačić, Anja Kostelac

Prirodoslovno matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu

katarina.belacic@gmail.com, akostelac@hotmail.com

**Ideja rada:** Mistranslacija je proces tijekom kojeg dolazi do pogrešne ugradnje aminokiselina u proteine. Jedan od najvažnijih faktora sprečavanja mistranslacije su aminoacil-tRNA-sintetaze, koje imaju mehanizam razlikovanja pripadne od nepripadne aminokiseline te tRNA, kao i isključivanje većine neproteinogenih aminokiselina iz procesa sinteze proteina.  $\beta$ -N-metilamino-L-alanin (BMAA) je neproteinogena aminokiselina za koju se pretpostavljalo da se ugrađuje umjesto L-serina u humane proteine prilikom translacije[1]. Misaciliranje i ugradnja BMAA u proteine jedan je od mogućih uzroka agregiranja funkcionalno aktivnih proteina[2]. Cilj rada bio je transkripcijom *in vitro* proizvesti humanu citosolnu tRNA<sup>Ser</sup><sub>AGA</sub> i mitohondrijsku tRNA<sup>Ser</sup><sub>TGA</sub>, *in vivo* nadeksprimirati humanu mitohondrijsku seril-tRNA-sintetazu. Ideja rada bila je ustanoviti hoće li enzimi mitohondrijska i/ili citosolna seril-tRNA-sintetaza aktivirati L-serin i/ili BMAA i prenijeti aktiviranu BMAA na pripadne tRNA<sup>Ser</sup>.

**Okvirni plan istraživanja:** Pomoću tehnika rekombinantne DNA bilo je potrebno napraviti plazmidni vektor koji sadrži gen koji kodira za humanu citosolnu tRNA<sup>Ser</sup><sub>AGA</sub> odnosno vektor koji sadrži gen koji kodira za humanu mitohondrijsku tRNA<sup>Ser</sup><sub>TGA</sub> te vektor s ugrađenim genom koji kodira za humanu mitohondrijsku seril-tRNA-sintetazu. Nakon toga je uslijedilo dobivanje konačnih produkata: tRNA<sup>Ser</sup> transkripcijom *in vitro* i humane seril-tRNA-sintetaze nadeksprimiranjem *in vivo* u stanicama bakterije *Escherichia coli* soja BL21. Zaključna faza istraživanja uključivala je kinetičke metode kojima se provjerilo aktivira li humana mitohondrijska i/ili citosolna seril-tRNA-sintetaza L-serin i/ili BMAA i prenosi li seril-tRNA-sintetaza aktiviranu BMAA na pripadne tRNA<sup>Ser</sup>.

**Korištene metode/tehnike:** za dobivanje molekula tRNA<sup>Ser</sup> korištene su sljedeće metode/tehnike: kinaziranje sintetskih oligonukleotida tRNA, sparivanje komplementarnih oligonukleotida i dobivanje gena koji kodira tRNA s ljepljivim krajevima za restrikcijske endonukleaze EcoRI i BamHI, cijepanje plazmida pUC18 sa restrikcijskim endonukleazama EcoRI i BamHI, ugradnja gena za tRNA<sup>Ser</sup> u pUC18 pomoću komplementarnih ljepljivih krajeva, transformacija kompetentnih stanica *E. coli* soja DH5 $\alpha$  metodom kemijske transformacije, identifikacija pozitivnih kolonija plavo bijelom selekcijom i dodatna provjera PCR-om na bakterijskim kolonijama, izolacija plazmidne DNA iz bakterijskih stanica i provjera ugradnje željenog gena u plazmid restrikcijskom analizom, PCR-om na kalupu pročišćenih plazmida i sekvenciranjem, priprema lineariziranog kalupa za transkripciju *in vitro* restrikcijskom endonukleazom NsiI, transkripcija *in vitro* T7 RNA-polimerazom, pročišćavanje transkripcijske smjese od DNA kalupa i izolacija molekula tRNA iz gela. Svi PCR produkti analizirani su pomoću elektroforeze molekula DNA u gelu agaroze, a veličina i koncentracija molekula tRNA provjerene su poliakrilamidnom gel-elektroforezom pri denaturirajućim uvjetima u prisutnosti ureje.

Za dobivanje humane mitohondrijske seril-tRNA-sintetaze (mtSerRS) korištene su sljedeće metode/tehnike: predikcija signalnog slijeda bioinformatičkim algoritmima te sukladno tome dizajn početnica, sinteza gena za humanu mtSerRS preparativnim PCR-om, ugradnja PCR produkata gena za humanu mtSerRS u vektor pProEX HTb pomoću restrikcijskih endonukleaza BamHI i SalI, transformacija bakterija *E. coli* soja DH5 $\alpha$  metodom kemijske transformacije i detekcija pozitivnih kolonija pomoću PCR-a na bakterijskim kolonijama, izolacija plazmidne DNA iz pozitivnih kolonija te dodatna provjera plazmida s ugrađenim genom pomoću PCR-a i sekvenciranjem, transformacija bakterija *E. coli* soja BL21 metodom kemijske transformacije s plazmidima koji sadrže ugrađen gen za humanu mtSerRS, indukcija transkripcije gena mtSerRS induktorom IPTG, nadekspresija i optimizacija



količine proteina mtSerRS *in vivo*, pročišćavanje proteina mtSerRS na Ni-NTA afinitetnoj kromatografiji, a nakon toga ionskom izmjenom pomoću brze proteinske tekućinske kromatografije na sustavu AKTAFPLC. Svi PCR produkti analizirani su pomoću elektroforeze molekula DNA u gelu agaroze, a prisutnost i koncentracija proteina analizirana je npoliakrilamidnom gel-elektroforezom pri denaturirajućim uvjetima u prisutnosti SDS-a. Kao metode kinetičke analize korištene su: kinetička izmjena ATP/PP<sub>i</sub> za aktivaciju BMAA i L-serina te aminoacilacija pripadne tRNA<sup>Ser</sup> s BMAA i/ili L-serinom mjerenjem brzine reakcije katalizirane enzimima pri kojem su pripadne tRNA obilježene s <sup>32</sup>P na 3' terminalnom nukleotidu.

**Glavni rezultati i spoznaje:**

U ovom radu potvrđeno je da je humana mitohondrijska seril-tRNA-sintetaza bez signalnog slijeda od 34 aminokiseline aktivan oblik mitohondrijskog enzima. Glavni rezultati rada dokazuju da humana citosolna seril-tRNA-sintetaza i seril-tRNA-sintetaza bakterije *E. coli* aktiviraju neproteinogenu aminokiselinu BMAA, dok humana mitohondrijska seril-tRNA-sintetaza bez signalnog slijeda od 34 aminokiseline vrlo slabo aktivira BMAA. Također je potvrđeno da su humana citosolna tRNA<sup>Ser</sup><sub>AGA</sub> i mitohondrijska tRNA<sup>Ser</sup><sub>TGA</sub> funkcionalni oblici tRNA. Nakon provedenog preliminarnog pokusa, zaključeno je da enzimi, humana citosolna seril-tRNA-sintetaza i mitohondrijska seril-tRNA-sintetaza bez signalnog slijeda od 34 aminokiseline, prenose neproteinogenu aminokiselinu BMAA na vlastite tRNA - humanu citosolnu tRNA<sup>Ser</sup><sub>AGA</sub> i humanu mitohondrijsku tRNA<sup>Ser</sup><sub>TGA</sub>. Nastajanje tRNA aminoacilirane s BMAA sugerira da se BMAA ugrađuje u proteine na mjesto L-serina. Ovim su se rezultatima potvrdile dosadašnje pretpostavke da se BMAA ugrađuje umjesto L-serina u humane proteine prilikom translacije, a čija ugradnja u proteine potencijalno uzrokuje neurodegenerativne bolesti[1].

Ovaj rad izrađen je na Zavodu za biokemiju, Kemijski odsjek, PMF, Sveučilište u Zagrebu pod mentorstvom izv. prof. dr. sc. Ite Gruić - Sovulj i neposrednim voditeljstvom dr. sc. Vlatke Godinić Mikulčić.

[1] The use of L-serine to prevent β-methylamino-L-alanine(BMAA)-induced proteotoxic stress *in vitro*, BJ., Main, RA.,Dunlop, KJ.,Rodgers, Toxicon. 109 (2015) 7-12

[2] The non-protein amino acid BMAA is misincorporated into human proteins in place of L-serine causing protein misfolding and aggregation, RA., Dunlop, PA., Cox, SA., Banack, JK., Rodgers, PLOS ONE. 8(2013) e75376



## Međuovisnost dviju domena Nudix-dipeptidil-peptidaze III iz mahovine *Physcomitrella patens*

Iva Sućec<sup>1</sup>, Zrinka Karačić<sup>2</sup>, Mihaela Matovina<sup>2</sup>

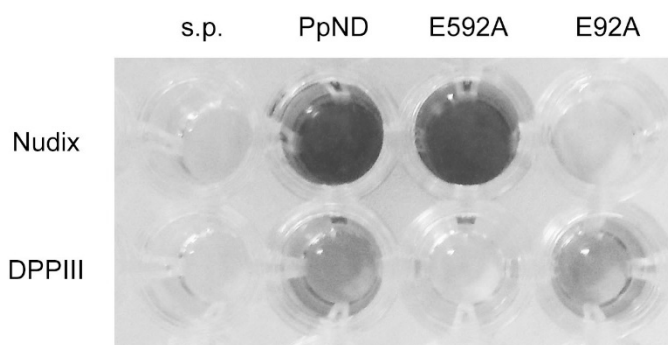
<sup>1</sup>Prirodoslovno matematički fakultet, Horvatovac 102A, Zagreb

<sup>2</sup>Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, Zagreb

iva.sucec.is@gmail.com

Nudix-dipeptidil-peptidaze III (Nudix-DPPIII) su biljni fuzijski proteini koji uz DPPIII domenu sadrže i domenu koja pripada obitelji Nudix fosfataza. Prethodna ispitivanja na Nudix-DPPIII iz mahovine *Physcomitrella patens* (PpND) pokazala su dualnu aktivnost ovog proteina, fosfataznu i peptidaznu<sup>1</sup>. Kako bi se ispitala međuovisnost ovih dviju aktivnosti, planirana je karakterizacija odvojenih domena, Nudix i DPPIII, i mutiranih varijanti proteina. Zamjenom u alanin testirane su uloge očuvanog glutamata nekarakterističnog pentapeptidnog DPPIII motiva, E592 i očuvanog glutamata Nudix motiva, E92, u katalizi. Pripremljeni su rekombinantni vektori za ekspresiju proteinskih fragmenata i mutiranih varijanta proteina sa histidinskim privjeskom. Nakon ekspresije u stanicama *Escherichia coli* proteini su afinitetno pročišćeni. Hidrolazne aktivnosti određivane su kolorimetrijski uz izopentil-difosfat kao supstrat za fosfataznu i Arg<sub>2</sub>-2-naftilamin za peptidaznu aktivnost. Rezultati pokazuju da je aminokiselinski ostatak E92 nužan za fosfataznu, a E592 za peptidaznu aktivnost proteina. Inaktivacijom fosfatazne aktivnosti preostaje peptidazna i obrnuto, što ukazuje da su aktivna mjesta enzima neovisna. No, kako fragmenti Nudix domene nisu dobiveni u topljivoj frakciji, a fragmenti DPPIII domene ne pokazuju značajnu peptidaznu aktivnost, ovaj rad je pokazao da su obje domene proteina PpND potrebne za pravilno smatanje i pune aktivnosti obaju enzima.

Ovaj rad izrađen je na Institutu Ruđer Bošković u Laboratoriju za biokemiju proteina i molekulsko modeliranje pod neposrednim voditeljstvom mag. chem. Zrinke Karačić te pod voditeljstvom dr. sc. Mihaele Matovina.



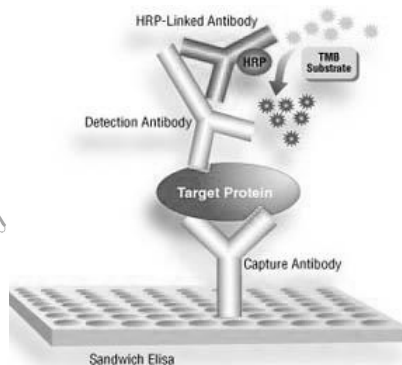
[1] Z. Karačić et al. (2016), A novel plant enzyme with dual activity: an atypical Nudix hydrolase and a dipeptidyl peptidase III, *Biol. Chem.*, DOI: 10.1515/hsz-2016-0141



## Uloga topivih adhezijskih molekula sICAM i sVCAM u etiologiji i dijagnostici fibromialgije

Isabella Koprivec i Josipa Korman  
Farmaceutsko-biokemijski fakultet, Zagreb  
isbellakoprivec@gmail.com, josipakorman@gmail.com

Novije studije ukazuju na moguću povezanost povišenih koncentracija topivih oblika adhezijskih molekula (sICAM-1 i sVCAM-1) i različitih autoimunih, neuroloških i upalnih bolesti, što je potaknulo ovo istraživanje. Istraživanje je obuhvatilo određivanje koncentracija sICAM-1 i sVCAM-1 molekula u serumu osoba oboljelih od fibromialgije (26) te u kontrolnoj skupini (zdravi dobrovoljci, 31). Za određivanje koncentracije topivih adhezijskih molekula sICAM-1 i sVCAM-1 korišteni su komercijalno dostupni imunokemijski ELISA testovi. Analizom dobivenih rezultata utvrđeno je da ne postoji statistički značajna razlika u koncentracijama topivih oblika adhezijskih molekula između skupine pacijenata s fibromialgijom (medijan sICAM-1=645 pg/mL, medijan sVCAM-1=850 pg/mL) i zdravih dobrovoljaca (medijan sICAM-1=729 pg/mL, medijan sVCAM-1=937 pg/mL). Međutim, uočena je razlika u korelaciji. U serumu osoba oboljelih od fibromialgije postoji korelacija između koncentracija sICAM-1 i sVCAM-1 (Spearmanov koeficijent korelacije=0,729;  $p < 0,050$ ). Rezultati ovog istraživanja mogu služiti kao osnova za daljnja istraživanja koja bi obuhvatila veći broj ispitanika te uključila i netopive oblike ovih adhezijskih molekula. Ovaj rad izrađen je na Zavodu za medicinsku biokemiju i hematologiju Farmaceutsko-biokemijskog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu pod vodstvom prof. dr. sc. Karnele Barišić.

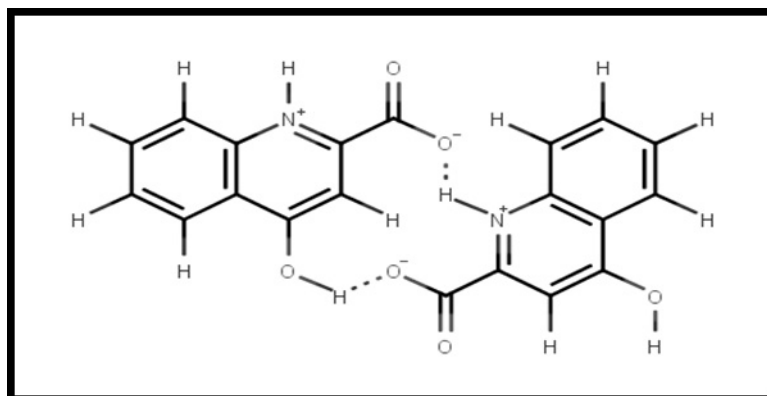




## Utjecaj pH vrijednosti na nastanak različitih struktura kompleksnih spojeva kinurenske kiseline s cinkom

Jelena Bijelić, Tomislav Balić, Berislav Marković  
Odjel za kemiju, Cara Hadrijana 8/A, 31 000 Osijek  
jelena.bijelic@kemija.unios.hr | jelena.bijelic@hotmail.com

**Sažetak** Kinurenska kiselina naziv je za 4-hidroksikinolin-2-karboksilnu kiselinu koja nastaje kao metabolit L-triptofana u organizmu tzv. kinurenskim metaboličkim putem. Čak 95% triptofana u središnjem živčanom sustavu razgrađuje se ovim putem, a nastali produkti, kao što je kinurenska kiselina, djeluju kao antagonisti neuroreceptora. Na NMDA (N-metil-D-aspartat) receptor se vežu glutamat i glicin kao agonisti i tako omogućuju slobodan protok kationima kroz staničnu membranu neurona. Kinurenska kiselina djeluje kao antagonist vežući se na glicinsko mjesto u navedenom receptoru te tako utječe na neurotransmisijske procese [1]. Često se koncentracije kinurenske kiseline mjere keliranjem s cinkom pri čemu nastaje fluorescentni kompleks [2]. U ovom radu istražene su reakcije kinurenske kiseline s kationima cinka tako što su pripravljene serije otopina kinurenske kiseline i cinkova acetata u vodi pri određenim pH vrijednostima. Dobiveni su spojevi okarakterizirani infracrvenom spektroskopijom i termogravimetrijskom analizom. Predložene su strukture spojeva na temelju dobivenih rezultata.



[1] Schwartz K. J., During M. J., Freese A., Beal M. F., *The Journal of Neuroscience* 10 (1990) 9.

[2] Bao Y., Luchetti D., Schaffer E., Cutrone J., *Biomedical Chromatography* 30 (2015) 1.

[2] M. Hemamalini, H.-K Fun, *Acta Crystallogr.*, **E66** (2010) o2151.



## Djelovanje hidrodinamičkih i termodinamičkih čimbenika te aditiva na taloženje kalcijeva oksalata

Silvija Šafranko<sup>1</sup>, Anamarija Šter<sup>1</sup>, Berislav Marković<sup>1</sup>, Damir Kralj<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Odjel za kemiju, Cara Hadrijana 8/A, 31000 Osijek, Hrvatska

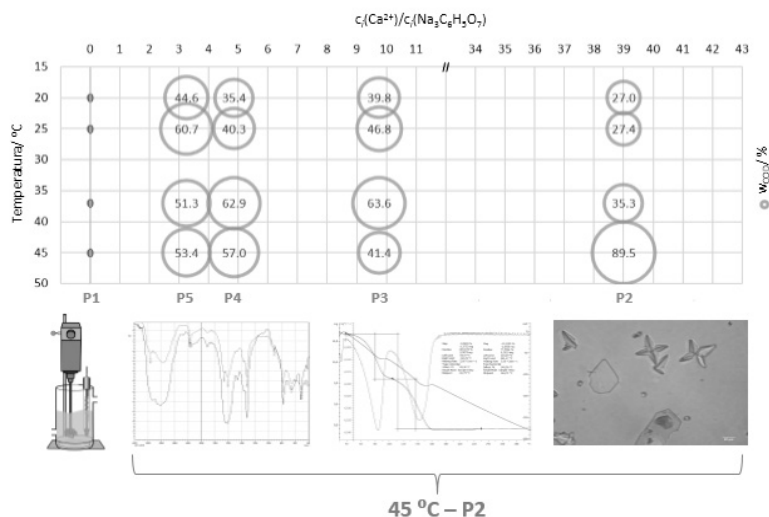
<sup>2</sup>Institut Ruđer Bošković, Biljenička cesta 54, 10000 Zagreb, Hrvatska  
ssafranko@kemija.unios.hr

Bubrežni kamenci posljedica su rasta kristala u urinarnom traktu, a gotovo 10 % ljudi susretne se s tim problemom tijekom života. Kalcijevi oksalati su kalcijeve soli oksalne kiseline i jedan su od najčešćih konstituenata bubrežnih kamenaca. Upravo se zbog te činjenice sve češće provode istraživanja kojima bi se u potpunosti objasnio mehanizam, uvjeti i moguća prevencija nastajanja bubrežnih kamenaca.

Kalcijev oksalat kristalizira u tri hidratna oblika: termodinamički stabilan kalcijev oksalat monohidrat (vevelit, COM)<sup>1,2</sup>, metastabilan dihidrat (vedelit, COD)<sup>3,4</sup> te metastabilan trihidrat (kaoksit, COT)<sup>5,6</sup> koji se rijetko pronalazi u kemijskom sastavu bubrežnih kamenaca.

Eksperimentalno je pokazano da promjena temperature i koncentracije citrata može utjecati na taloženje kalcijeva oksalata te na morfologiju i veličinu nastalih kristala. Rezultati su obrađeni FTIR spektroskopijom, TG analizom i optičkom mikroskopijom.

Ovaj rad je izrađen na Odjelu za kemiju Sveučilišta J.J. Strossmayera u Osijeku uz suradnju Laboratorija za procese taloženja (IRB).



[1] A.S. Bramley, M.J. Hounslow, R.L. Ryall, Chem. Engng. Sci. 52 (1997) 747-757.

[2] Lj. Brečević, D. Kralj, J. Cryst. Growth 79 (1986) 178-184.

[3] Lj. Brečević, D. Kralj, J. Garside, J. Cryst. Growth 97 (1989) 460.

[4] P. Brown, D. Ackermann, B. Finlayson, J. Cryst. Growth 98 (1989) 285-292.

[5] D. Škrtić, M. Marković, Lj. Komunjer, H. Füredi-Milhofer, J. Cryst. Growth 66 (1984) 431-440.

[6] D. Škrtić, H. Füredi-Milhofer, M. Marković, J. Cryst. Growth 80 (1987) 113-120.





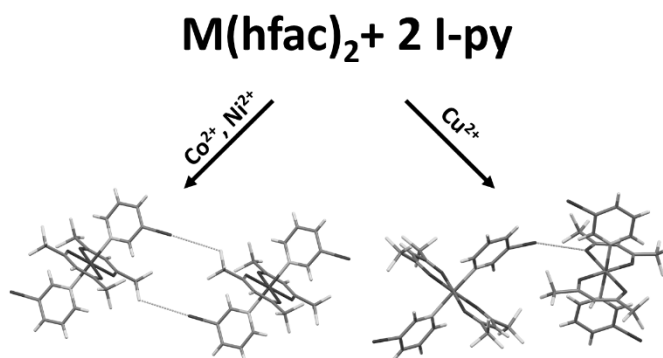
## Izučavanje halogenskih interakcija u metalo-organskoj sredini

Ingrid Gregorović, Karolina Kolarić, Mladen Borovina, Marijana Đaković  
Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagreb, Horvatovac 102a, 10000 Zagreb  
E-mail: igregorovic@chem.pmf.hr

Razumijevanje supramolekulskih interakcija te njihova finog međudjelovanja nužno je ukoliko se žele prirediti spojevi ciljanih topologija i strukturnih motiva. Vodikova veza jedna je od najtemeljitiije istraženih interakcija, te su mnoge korisne strategije supramolekulske sinteze utemeljene na korištenju upravo te interakcije. Nasuprot tome, halogenska veza je tek nedavno prepoznata kao korisna, vrlo usmjerujuća interakcija te su trenutno predložene samo smjernice za njezino korištenje u svrhe supramolekulske sinteze u organskim sustavima.<sup>1,2</sup> Razumijevanje halogenskih interakcija u procesima molekuskog prepoznavanja u sustavima koji sadrže metalne centre još je uvijek u ranoj fazi razvoja.

Heksafluoroacetilacetnonatni (**hfac**) kompleksi kobalta(II), nikla(II) i bakra(II) s 3-jodopiridinom priređeni su s ciljem istraživanja selektivnosti halogenskih veza u metalo-organskim spojevima. Heksafluoroacetilaceton korišten je radi smanjivanja destruktivnog utjecaja protuiona koji je nužno prisutan u sustavu radi neutralizacije pozitivnog naboja metala. Na ovaj način priređeni su neutralni oktaedarski kompleksi, koji uz jednog donora sadrže dva potencijalna akceptora halogenske veze te tako omogućavaju sustavno istraživanje ostvarivanja halogenskih interakcija u sustavima od interesa.

Pripremljeni spojevi su strukturno okarakterizirani difrakcijom rentgenskog zračenja u monokristalnom uzorku, čime su otkrivene I•••F interakcije prisutne u kristalnim strukturama izostrukturnih kompleksa kobalta(II) i nikla(II), dok su u kompleksu bakra(II) uočene I•••O interakcije.



[1] Aakeröy, C. B., Wijethunga, T.K., Desper, J., Đaković, M., Cryst Growth & Des 16 (2016) 2662

[2] Aakeröy, C. B., Wijethunga, T.K., Desper, J., J.Mol.Struct. 1072 (2014) 20.

Ovaj rad je u potpunosti financiran od strane Hrvatske zaklade za znanost u okviru projekta UIP-11-2013-1809.



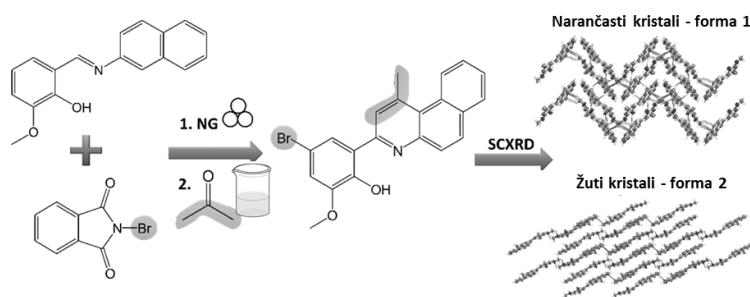
## Uloga N-bromftalimida u Povarovljevoj reakciji *o*-vanilaldimina i acetona

Matea Vitković, Marija Zbačnik, Katarina Pičuljan i Dominik Cinčić  
Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu,  
Horvatovac 102a, 10000 Zagreb, Hrvatska  
Kontakt: mvitkovic93@gmail.com

*N*-bromftalimid (**nbf**) pripada u skupinu *N*-haloimida, komercijalno dostupnih spojeva koji se najčešće primjenjuju kao sredstva za halogeniranje i katalizatori u različitim reakcijama ciklizacije i halolaktonizacije u organskoj kemiji.<sup>[1]</sup> Osim toga, u posljednjih desetak godina privukli su pažnju u sintezi kokristala jer mogu poslužiti kao donori halogenske veze.<sup>[2][3]</sup>

U ovome radu izučavana je uloga **nbf**-a u Povarovljevoj reakciji *o*-vanilaldimina i acetona. Imin, dobiven kondenzacijom *o*-vanilina i 2-aminonaftalena, te **nbf** mljeveni su u stehiometrijskom odnosu 1:1 u kugličnom mlinu pri standardnim laboratorijskim uvjetima (25 °C, 40-50 % RH). Dobiveni praškasti produkt otopljen je u acetonu te je nakon evaporacije otapala izoliran aril[*f*]kinolin,<sup>[4]</sup> bromirani produkt Povarovljeve ciklizacije imina, koji kristalizira u dva polimorfna oblika. Produkti mehanokemijske sinteze i pokusa u otopini opisani su difrakcijom rentgenskog zračenja na praškastom uzorku i NMR spektroskopijom. Molekulska i kristalna struktura oba polimorfa određene su difrakcijom rentgenskih zraka na jediničnom kristalu. U monoklinskoj formi molekule su međusobno povezane C–H···O<sub>hidroksi</sub> vodikovim vezama u centrosimetrične dimere, tvoreći motiv  $R_2^2(18)$ , a nadalje se povezuju C–H···C vodikovim vezama u *cik-cak* lance i mreže. U triklnskoj formi molekule su povezane C–H···O<sub>metoksi</sub> vodikovim vezama u centrosimetrične dimere, tvoreći motiv  $R_2^2(6)$ , a nadalje se povezuju C–H···C kontaktima aromatskih sustava u dvije dimenzije.

Rad je izrađen na zavodu za Opću i anorgansku kemiju, na Kemijskom odsjeku Prirodoslovno-matematičkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu pod vodstvom doc. dr. sc. Dominika Cinčića i neposrednom vodstvom dr. sc. Marije Zbačnik.



[1] H. Nakatsuji, Y. Sawamura, A. Sakakura, K. Ishihara, *Angew. Chem. Int. Ed.* **53** (2014) 6974-6977.

[2] K. Raatikainen, K. Rissanen, *CrystEngComm* **13** (2011) 6972-6977.

[3] J. Mavračić, D. Cinčić, B. Kaitner, *CrystEngComm* **18** (2016), 3343-3346.

[4] L. S. Povarov, *Russ. Chem. Rev.* **36** (1967) 656-670.

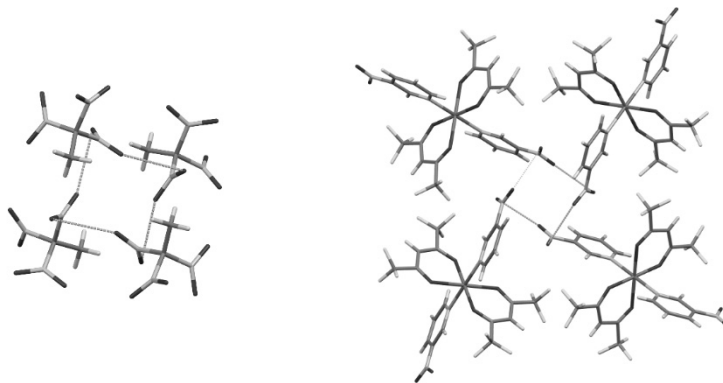


## NO<sub>2</sub>...NO<sub>2</sub> interakcije u metalo-organskoj sredini, stabilizirajuće ili destabilizirajuće?

Karolina Kolarić, Ingrid Gregorović, Mladen Borovina, Marijana Đaković  
Prirodoslovno matematički fakultet-kemijski odsjek, Horvatovac 102a, Zagreb  
E-mail: kkolaric@chem.pmf.hr

Dosadašnja istraživanja spojeva s nitro skupinama pokazuju da NO<sub>2</sub>...NO<sub>2</sub> interakcije mogu imati važnu ulogu u kristalnim strukturama organskih molekula. Nekih autori navode da su takve interakcije privlačnog, dok drugi tvrde da su odbojnog karaktera.<sup>1,2</sup> Nitro skupine često se nalaze u dušikom bogatim visokoenergetskim materijalima gdje u pravilu pridonose destabilizaciji materijala te su odgovorne za njihovu mehaničku i termalnu nestabilnost. Same NO<sub>2</sub>...NO<sub>2</sub> interakcije su česta pojava kod spojeva koji sadrže nitro skupine a tetramerni motiv NO<sub>2</sub>...NO<sub>2</sub> interakcija uočen je i u nekim visokoenergetskim materijalima poput 1,1,1-trinitroetana. Dodatna istraživanja koja se provode nastoje pridonijeti boljem razumijevanju tih interakcija te veze između strukture i svojstava energetskih materijala.<sup>3</sup>

U svrhu istraživanja strukturnog potencijala NO<sub>2</sub>...NO<sub>2</sub> interakcija u metalo-organskim sustavima priređeni su hexafluoroacetilacetatni kompleksi kobalta(II), nikla(II) i bakra(II) s 3-nitropiridinom. Ovako dizajnirani sustavi pogodni su za istraživanje NO<sub>2</sub>...NO<sub>2</sub> interakcija jer nemaju jačih donora i akceptora vodikovih veza. Kristalne strukture kompleksa kobalta(II) i bakra(II) određene su difrakcijom rentgenskog zračenja u monokristalnom uzorku, te je utvrđeno da su kompleksi izostrukturalni u *P4/n* prostornoj grupi. Difrakcijom rentgenskog zračenja u polikristalnom uzorku utvrđeno je da je kompleks nikla(II) također izostrukturalan s druga dva produkta. U samoj strukturi uočene su slabe C—H...O vodikove veze i NO<sub>2</sub>...NO<sub>2</sub> bliski kontakti kao i C—F... $\pi$  interakcije.



[1] Daszkiewicz, M., CrystEngComm. 15 (2013) 10427.

[2] Wozniak, K., He, H., Klinowski, J., Jones, W. Grech, E., J.Phys.Chem. 98 (1994) 13775.

[3] Aakeroy, C. B., Wijethunga, T. K., Desper, J., Chem.Eur.J. 21 (2015) 11029.

Ovaj rad je u potpunosti financiran od strane Hrvatske zaklade za znanost u okviru projekta UIP-11-2013-1809.



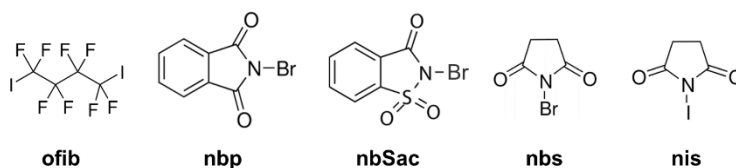
## Kompeticija donora halogenske veze u čvrstom stanju

Mihael Eraković, Tomislav Lež, Vladimir Stilinović, Vinko Nemeč, Filip Topić,  
Dominik Cinčić i Kari Rissanen  
Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet Zagreb, Horvatovac 102a,  
10000 Zagreb  
merakovic@chem.pmf.hr

Halogenske veze međumolekulske su interakcije između Lewisove baze i parcijalno pozitivno nabijenog dijela atoma halogena vezanog za elektron-odvlačeću skupinu. Jakost halogenske veze jako ovisi o kemijskom okruženju unutar molekule za koju je atom halogena vezan.[1] Cilj ovog istraživanja bio je pronaći način kako kvalitativno okarakterizirati jakosti donora halogenske veze.

U tu svrhu pripremili smo kokristale 4-benzoilpiridina (**4bzpy**) s oktafluor-1,4-dijodbutanom (**ofib**) i *N*-bromsaharinom (**nbSac**). Kokristali su pripremljeni iz otopine i pomoću kapljevina potpomognutog mljevenja te okarakterizirani difrakcijom rentgenskog zračenja na praškastom uzorku i monokristalu. U oba kokristala molekule su povezane halogenskim vezama  $X \cdots N$  između atoma halogena i piridinskog dušika. Udaljenost između atoma joda i atoma dušika u (**4bzpy**)(**ofib**) iznosi 2,795 Å, što je 20,8 % manje od zbroja odgovarajućih van der Waalsovih radijusa. Udaljenost između atoma broma i atoma dušika u (**4bzpy**)(**nbSac**) iznosi 2,140 Å, što je značajno manje (37 %) od zbroja van der Waalsovih radijusa. Veza N–Br u molekuli **nbSac** u kokristalu je produljena za 0,189 Å u odnosu na vezu u kristalu čistoga **nbSac**, što ukazuje na prijenos naboja između donora i akceptora halogenske veze te njen djelomičan kovalentni karakter.

Kako bismo istražili jakosti donora halogenske veze u čvrstom stanju pripremljeni su, uz navedene, i kokristali 4-benzoilpiridina s *N*-bromftalimidom (**nbp**), *N*-bromsukcinimidom (**nbs**) i *N*-jodsukcinimidom (**nis**) te podvrgnuti kapljevina potpomognutom mljevenju s ostalim donorima halogenske veze. Pripremljene krutine okarakterizirali smo difrakcijom rentgenskog zračenja na praškastom uzorku te smo dobivene difraktograme usporedili s difraktogramima čistih kokristala kako bismo odredili je li došlo do izmjene donorâ. Dobi-vene rezultate iskoristili smo kako bismo odredili hijerarhiju jakosti donorâ halogenske veze, koja je zatim uspoređena s onom predviđenom duljinama halogenskih veza, izračunatih iz strukture kokristala, i hijerarhijom dobivenom uspoređivanjem energija halogenskih veza, izračunatih kvantnokemijskim metodama (*counterpoise* uz DFT).



### Reference:

[1] Cavallo, G., Metrangolo, P., Milani, R., Pilati, T., Priimagi, A., Resnati, G., Terraneo, G., *Chem. Rev.* **116** (2016) 2478–2601



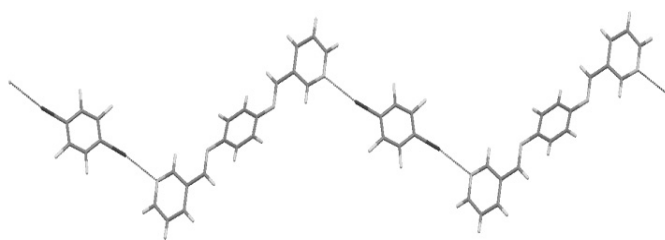
## Halogenska veza u kokristalima ditopičnih donora i akceptora

Tomislav Piteša, Vladimir Stilinović, Ivan Ljubić i Dominik Cinčić  
Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Zagreb  
Zavod za fizičku kemiju, Institut Ruđer Bošković, Zagreb  
tomislav.pitesa@chem.pmf.hr

Jake supramolekulske interakcije kratkog doseg (npr. vodikova i halogenska veza) igraju glavnu ulogu u kristalnom pakiranju te su stoga od velike važnosti za kristalno inženjerstvo. [1] Iako stabilnost kristala ne ovisi samo o njima, razlike u energijama ovih interakcija najčešće su dovoljno dobar pokazatelj koja od njih (u slučaju kompeticije) će se pojaviti u kristalu. Međutim, energije vodikovih i halogenskih veza opaženih u kristalima ispitane su gotovo isključivo *in vacuo*, pri tom zanemarujući utjecaj okoline u kristalu na dotičnu interakciju i njenu energiju.

U ovom radu sintetiziran je kokristal 1,4-dijodtetrafluorbenzena (TFIB) i imina izvedenog iz *p*-fenilendiamina i piridin-3-karboksialdehida (PDAPCA) te su mu molekulska i kristalna struktura određene metodom difrakcije rentgenskih zraka na jediničnom kristalu. Kristalizira u prostornoj grupi  $P\bar{1}$  s jednom formulskom jedinkom u jediničnoj ćeliji. Molekule TFIB-a i imina u ovom kokristalu naizmjenično su povezane u lance C–I $\cdots$ N halogenskim vezama ( $d(\text{N}\cdots\text{I})=2.897 \text{ \AA}$ ,  $\varphi(\text{C}-\text{I}\cdots\text{N})=173.64^\circ$ ).

Koristeći funkcional elektronske gustoće CAM-B3LYP, [2] izračunata je energija opažene C–I $\cdots$ N halogenske veze *in vacuo* i u pripravljenom kokristalu. Izračun energije u čvrstom stanju napravljen je tako da su postupno dodavane susjedne molekule TFIB-a i PDAPCA u lancu oko promatrane supramolekule. Nakon što su četiri molekule dodane u lanac sa svake strane promatrane supramolekule, energija halogenske veze se ustalila te je razlika energije halogenske veze u plinskoj fazi i u čvrstom stanju iznosila 4,14 kJ/mol. Ovaj rezultat pokazuje da se utjecaj okoline u kristalu na supramolekulsku interakciju ne smije zanemariti jer, s aspekta kristalnog inženjerstva, može promijeniti relativan odnos jakosti interakcija te usmjeriti kristalno pakiranje u neočekivanom smjeru (s obzirom na *in vacuo* izračune).



- [1] Aakeröy, C. B., Wijethunga, T. K., & Desper, J., *J. Mol. Struct.* **1072** (2014). 20-27.  
[2] T. Yanai, D. Tew & N. Handy, *Chem. Phys. Lett.*, **393** (2004) 51-57.



## Nukleofugalnost pentafluorfenolata u 80%-tnoj vodenoj otopini etanola

Nives Bebek

Sveučilište u Zagrebu, Farmaceutsko-biokemijski fakultet  
nbebek@student.pharma.hr

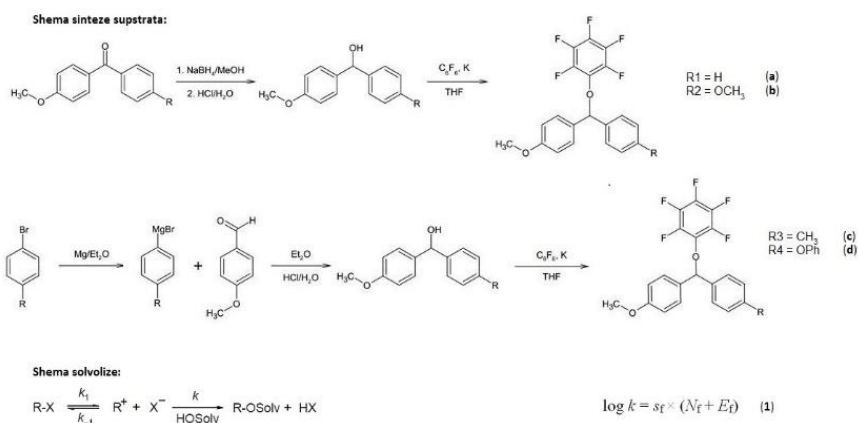
Relativna reaktivnost izlazne skupine, nukleofugalnost, ovisi o prirodi otapala zbog različitih energija solvatacije izlaznih skupina, prirodi karbokationa na koji je vezana izlazna skupina, kao i elektronskim i steričkim interakcijama na reakcijskom središtu. Jednadžba (1) omogućila je stvaranje najopsežnije danas postojeće ljestvice nukleofugalnosti, uz ideju da je odabirom odgovarajućih benzhidrilnih elektrofuga za ispitivanu izlaznu skupinu moguće sastaviti supstrat čiju je konstantu brzine solvolize u određenom otapalu moguće odrediti uobičajenim metodama (konduktometrijski, titrimetrijski i dr.) [1-3].

U jednadžbi (1)  $k$  predstavlja konstantu brzine solvolize,  $E_f$  elektrofugalnost (reaktivnost) karbokationa, dok  $N_f$  i  $s_f$  predstavljaju reaktivnost izlazne skupine u određenom otapalu.

Svrha rada bila je odrediti parametre nukleofugalnosti  $s_f$  i  $N_f$  pentafluorfenolata u 80%-tnom vodenom etanolu i time proširiti ljestvicu nukleofugalnosti. Ljestvice nukleofugalnosti korisne su primjerice prilikom pročišćavanja spojeva jer omogućavaju eliminaciju upotrebe otapala u kojima do degradacije spoja dolazi prije kraja samog postupka pročišćavanja (prekristalizacija, kromatografija). Također, mogu biti korisne prilikom razjašnjavanja mehanizama reakcija.

Fenolate, u odnosu na ranije istražene izlazne skupine, karakterizira drugačiji tip stabilizacije nastajućeg negativnog naboja u prijelaznom stanju i anionu. Sintetizirana su četiri supstrata: 4-metoksibenzhidril-pentafluorfenil-eter (a), 4-metoksi-4'-metilbenzhidril-pentafluorfenil-eter (c), 4-metoksi-4'-fenoksibenzhidril-pentafluorfenil-eter (d) i 4,4-dimetoksibenzhidril-pentafluorfenil-eter (b). Konstante brzine solvolize sintetiziranih supstrata određene su konduktometrijski u 80%-tnom etanolu. Konstruiran je graf ovisnosti logaritma konstante brzine solvolize supstrata o parametru elektrofugalnosti  $E_f$ . Iz dobivene jednadžbe pravca, primjenom jednadžbe (1), određeni su parametri nukleofugalnosti koji iznose  $s_f = 1,29$  i  $N_f = -0,97$ . Za pentafluorfenolat se, s obzirom na navedene parametre i smještaj u ljestvici nukleofugalnosti, može reći da je umjereno reaktivna izlazna skupina.

Rad je izrađen na Zavodu za organsku kemiju Farmaceutsko-biokemijskog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu pod vodstvom dr. sc. Mirele Matić.



[1] Streidl, N., Denegri, B., Kronja, O., Mayr, H., Acc. Chem. Res. 43 (2010) 1537–1549.

[2] Matić, M., Denegri, B., O. Kronja, J. Org. Chem. 77 (2012) 8986–8998.

[3] Denegri, B., Matić, M., Kronja, O., Org. Biomol. Chem. 12 (2014) 5968–5709.



## Sinteza novih imidazolnih $\alpha$ -D-manopiranozida kao potencijalnih FimH inhibitora

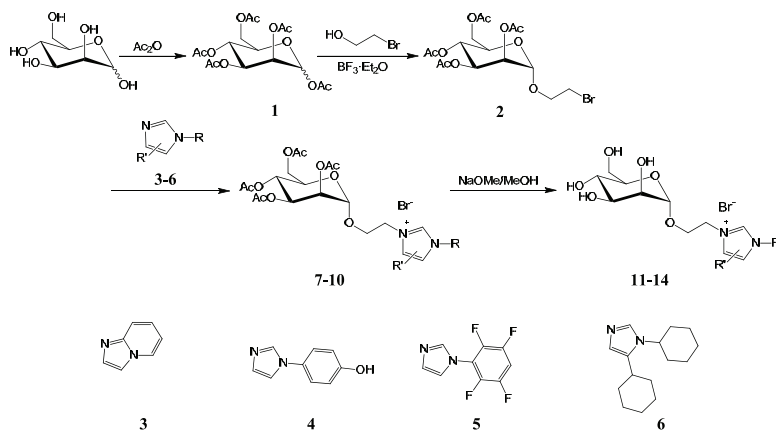
Matej Poletar

Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek, Zavod za organsku kemiju  
matej.poletar@gmail.com

Poznato je da FimH adhezin koji gradi fimbrije tipa 1 bakterije *Escherichia coli* ima vezna mjesta za  $\alpha$ -D-manopiranozu i druge spojeve koji u strukturi uključuju taj monosaharid. Ova specifična interakcija omogućuje bakterijama vezanje za razna tkiva i kolonizaciju stanica domaćina uzrokujući time razna oboljenja. U svrhu pronalaženja pogodnih inhibitora FimH proteina, potencijalnih anti-adhezina, sintetiziran je niz bicikličkih imidazolnih derivata  $\alpha$ -D-manopiranozida. Sinteza ciljnih molekula odvijala se u 4 koraka. U prvom koraku zaštićene su slobodne hidroksilne skupine D-manoze acetiliranjem. Potom je na anomerni C-atom peracetilirane  $\alpha$ -D-manopiranoze vezan 2-brometanol (*O*-glikozilacija). Fragment od dva ugljikova atoma je poveznica između manopiranozida i imidazolnog derivata koji je kondenziran s glikozidom u idućem koraku. Naposljetku su uklonjene preostale zaštitne acetilne skupine s manopiranoznog prstena te su dobiveni željeni spojevi.

Sintetizirani spojevi okarakterizirani su standardnim analitičkim spektroskopskim metodama: IR spektroskopijom, masenom spektrometrijom, nuklearnom magnetskom rezonancijom kao i polarimetrijskim mjerenjima. Također, u daljnjem toku istraživanja optimizirane su geometrije ciljnih molekula računalnim metodama molekulske mehanike (MM2) i konformacijskim pretraživanjem u svrhu izučavanja molekulskih interakcija s FimH adhezinom.

Ključne riječi: imidazol,  $\alpha$ -D-manopiranozidi, FimH inhibitori

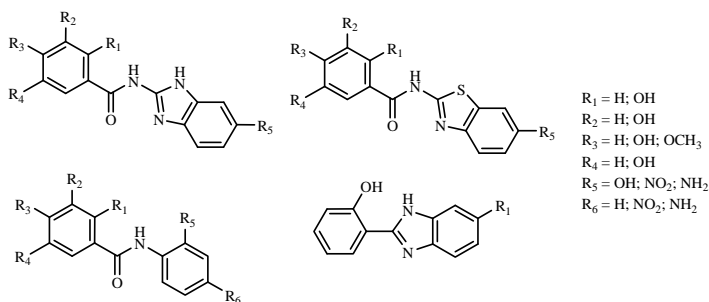




## Sinteza, spektroskopska karakterizacija i antioksidativna aktivnost novih hidroksi supstituiranih heteroaromatskih derivata kao potencijalnih senzora za detekciju pH i/ili metalnih kationa u otopinama

Ida Boček, Petra Roškarić  
Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Zagreb  
ibocek@fkit.hr, proskarić@fkit.hr

U ovom radu prikazana je sinteza, spektroskopska karakterizacija i antioksidativna aktivnost novih hidroksi derivata nitro i amino supstituiranih benzamida, benzamidnih derivata benzimidazola i benzotiazola te 2-benzimidazola. Novi spojevi priređeni su klasičnim reakcijama organske sinteze. Kondenzacijom odgovarajućih supstituiranih benzoil-klorida **4-6** s 2-amino-5(6)-nitrobenzimidazolom **7**, 2-amino-6-nitrobenzotiazolom **20** ili odgovarajućim aminom **33** i **34** priređeni su metoksi supstituirani benzamidi **8-10**, **21-23** i **35-38**. Amino supstituirani derivati **14-16**, **27-29** i **44-46** priređeni su reakcijom redukcije sa  $\text{SnCl}_2 \times 2\text{H}_2\text{O}$ . Uklanjanjem zaštitnih metoksi skupina korištenjem reagensa  $\text{BBr}_3$  priređeni su hidroksi supstituirani derivati benzamida **11-13**, **17**, **18**, **24-26**, **30**, **40**, **42**, **47** i **48**. Hidroksi derivat nitro supstituiranog benzimidazola **53** priređen je reakcijom kondenzacije 4-nitro-1,2-fenilendiamina **52** s aromatskim aldehydom **49**, dok je hidroksi derivat amino supstituiranog benzimidazola **56** priređen reakcijom redukcije sa  $\text{SnCl}_2 \times 2\text{H}_2\text{O}$ . Strukture svih novopriređenih spojeva potvrđene su korištenjem  $^1\text{H}$  i  $^{13}\text{C}$  NMR spektroskopije.



Provedena je i spektroskopska karakterizacija odabranih derivata **11**, **17**, **24**, **48** i **53** korištenjem UV/Vis i fluorimetrijske spektroskopije u dva organska otapala; u metanolu (protično otapalo) i acetonitrilu (aprotično otapalo). Svi spojevi pokazali su zanimljive spektroskopske karakteristike koje značajno ovise o korištenom otapalu.

Kako bi se potvrdila mogućnost primjene priređenih hidroksi, nitro i amino supstituiranih heteroaromatskih derivata **11**, **17**, **24**, **48** i **53** kao senzora za određivanje kationa u vodenim otopinama i/ili detekciju pH, provedene su UV i fluorimetrijske titracije vodenih otopina navedenih spojeva s vodenim otopinama odabranih metalnih soli  $\text{ZnCl}_2$ ,  $\text{AgCl}$  i  $\text{FeCl}_3$  te pH titracije. Spojevi **24** i **53** su pokazali najveći afinitet za metalne katione dok su amino supstituirani spojevi **17** i **48** pokazali značajne promjene spektroskopskih svojstava kod različitih vrijednosti pH. Odabranim spojevima je također ispitana i antioksidativna aktivnost korištenjem DPPH metode te su spojevi **17** i **48** pokazali značajnu antioksidativnu aktivnost.

Ovaj rad je izrađen na Zavodu za organsku kemiju Fakulteta kemijskog inženjerstva i tehnologije pod mentorstvom izv. prof. dr. sc. Marijane Hranjec i neposrednim voditeljstvom dr. sc. Irene Sović u sklopu projekta Hrvatske nacionalne zaklade br. 5596. Antioksidativna aktivnost ispitana je u suradnji s dr. sc. Kristinom Starčević s Veterinarskog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu.





## Sinteza i karakterizacija novih derivata cimetine kiseline i primakina

Filip Kozlina

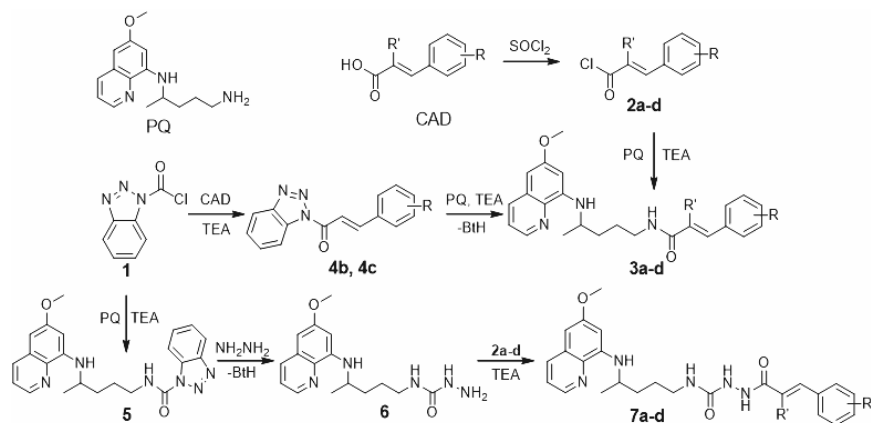
Sveučilište u Zagrebu, Farmaceutsko-biokemijski fakultet  
filip.kozlina@student.pharma.hr

Primakin je antimalarik 8-aminokinolinske strukture čiji su derivati pokazali i antitumorsko djelovanje. Istraživanja na Zavodu za farmaceutsku kemiju Farmaceutsko-biokemijskog fakulteta usmjerena su na pronalaženje novih derivata primakina s pojačanim cistostatskim djelovanjem. Tijekom zadnjih nekoliko godina sintetiziran je niz novih derivata primakina koji su pokazali citostatsko djelovanje u mikromolarnim koncentracijama [1, 2], a neki od njih i veliku selektivnost prema MCF-7 (stanična linija humanog adenokarcinoma dojke) ili prema SW 620 (stanična linija karcinoma kolona). Snažno i/ili selektivno djelovanje *in vitro*, osobito prema MCF-7 pokazali su urea i semikarbazidni derivati primakina s lipofilnim halogeniranim ili hidrosiliranim supstituentima na primarnoj amino skupini primakina [2]. S druge strane, cimena kiselina i njeni prirodni i sintetski derivati pokazuju vrlo širok spektar farmakoloških djelovanja, uključujući antitumorsko, antimikrobno, antioksidativno i druga [3].

Na temelju rezultata dosadašnjih istraživanja derivata primakina i bogatih literaturnih izvora o biološkim djelovanjima derivata cimetine kiseline (CAD, *eng.* cinnamic acid derivatives), dizajnirani su i sintetizirani konjugati primakina i CAD. Pripravljene su dvije serije derivata. Prvu seriju predstavljaju amidni (**3a-d**), a drugu acilsemikarbazidni (**7a-d**) derivati primakina i cimetine, odnosno 3,4,5-trimetoksicimetine, 4-klorcimetine i 3,5-bis(trifluorometil)cimetine kiseline. Za pripravu CAD-primakin amida **3a-d** korištena su dva sintetska puta: prvi uključuje CAD kiselinske kloride **2a-d**, a drugi CAD benzotriazolide **4b** i **4c** kao ključne intermedijere. Benzotriazolskom metodom, koja kao polazni spoj koristi klorid 1-benzotriazolkarboksilne kiseline (BtcCl, **1**), sintetizirani su i acilsemikarbazidi **7a-d**: primakin je preveden preko primakinskog benzotriazolida **5** u primakinski semikarbazid **6** koji reakcijom s odgovarajućim CAD kiselinskim kloridom **2a-d** daje željeni acilsemikarbazid **7a-d**. Derivati **3a-d** i **7a-d** su novi, do sada neopisani spojevi, a njihova je struktura određena uobičajenim analitičkim i spektroskopskim metodama (IR,  $^1\text{H}$  i  $^{13}\text{C}$  NMR, MS).

U daljnjim istraživanjima provodi se ispitivanje antitumorskog, antimikrobnog i antioksidativnog djelovanja sintetiziranih spojeva. Rezultati tih istraživanja bit će pridruženi dosadašnjim i činit će bazu za razvoj QSAR modela za dizajn i optimizaciju strukture derivata primakina.

Ovaj rad je izrađen na Zavodu za farmaceutsku kemiju Farmaceutsko-biokemijskog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu pod vodstvom prof. dr. sc. Branke Zorc i Kristine Pavić, mag. pharm., a financirala ga je Hrvatska zaklada za znanost projektom IP-2014-09-1501.





3. Simpozij Studenata kemičara, 22.10.2016.

- [1] Pavić, K., Perković, I., Cindrić, M., Pranjić, M., Martin-Kleiner, I., Kralj, M., Schols, D., Hadjipavlou-Litina, D., Katsori, A.-M., Zorc, B., Eur. J. Med. Chem. 86 (2014) 502.
- [2] Perković, I., Antunović, M., Marijanović, I., Pavić K., Ester, K., Kralj, M., Vlainić, J., Kosalec, I., Schols, D., Hadjipavlou-Litina, D., Pontiki, E., Zorc, B., Eur. J. Med. Chem. 124 (2016) 622.
- [3] Lone, R., Shuab, R., Koul, K. K., Glob. J. Pharmacol. 8 (2014) 328.



## Flow sinteza kombretastatina A-4

Ines Cazin, Laurent De Backer, Stéphane Collin, Titouan Desrues, Eduard Dolušić,  
Steve Lanners  
COS, Université de Namur, Belgija  
ines.cazin@gmail.com

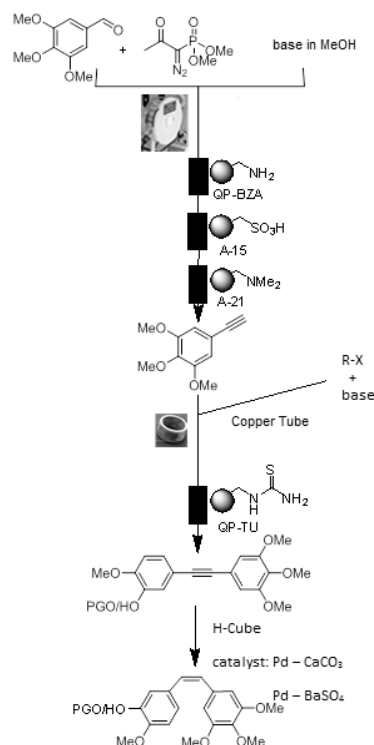
Kombretastatin A-4 (**1**) je prirodni spoj koji inhibira formiranje mikrotubula i pokazuje antiangiogenetsku aktivnost. 1995 godine izoliran je iz južnoafričkog stabla *Combretum caffrum*. [1-2]. Spoj **1** je potencijalni kandidat u liječenju raka. Nedavne studije uključuju razvoj novih derivata tog spoja kako bi se poboljšala svojstva poput topljivosti i stabilnosti te izučavao odnos između strukture i aktivnosti. [3]

Ovdje opisujemo razvoj sintetske strategije za dobivanje kombretastatina A-4 koristeći isključivo tehniku 'flow chemistry'. Ova moderna metoda [4] ima niz prednosti u usporedbi s klasičnim tehnikama organske sinteze. Dosadašnja klasična sinteza ovog spoja uključuje niz problema kao što je stereoselektivnost, opsežni postupci pročišćavanja te mala iskorištenja. Integracija svih koraka sinteze u kontinuirani proces 'flow chemistry' značajno je skratila vrijeme reakcije i poboljšala iskorištenja.

Reakcije tipa Bestmann-Ohira [5a] i Sonogashira [5b] su optimizirane u uređajima marke VapourTec (R-, i modernijoj E-seriji). Eksperimenti katalitičke hidrogenacije [5c] provedeni su u uređaju H-Cube pri čemu je dobiven željeni spoj.

Priređeni derivati okarakterizirani su spektroskopskim metodama  $^1\text{H}$  i  $^{13}\text{C}$  NMR.

Rad je izrađen u Laboratoriju za organsku kemiju i sinteze, Université de Namur, u Belgiji.



**1**

Shema 1. Predloženi sintetski put kombretastatina A-4

[1] Pettit, G. R. *et al*, *J. Med. Chem.* **1995**, 38, 1666.

[2] Kerr, D. J. *et al*, *Bioorg. Med. Chem.* **2007**, 15, 3290.

[3] Marrelli, M. *et al*, *Curr. Med. Chem.* **2011**, 18, 3035.

[4] Hopkin, M. D., *et al*, *Chem. Comm.* **2010**, 2450.

[5] a) Baxendale, I. R., *et al*, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2009**, 48, 4017; b) Zhang, Y., *et al*, *Org. Lett.* **2011**, 13, 280; c) Chandrasekhar, S., *et al*, *Tetrahedron Lett.* **2011**, 52, 3865.

This work is supported by WBGREEN – MICROECO (Convention No. 1217714).



## Proučavanje mikrosolvatacije anilina i hidroksilanilina novom klaster-kontinuum metodom

Matej Bubaš

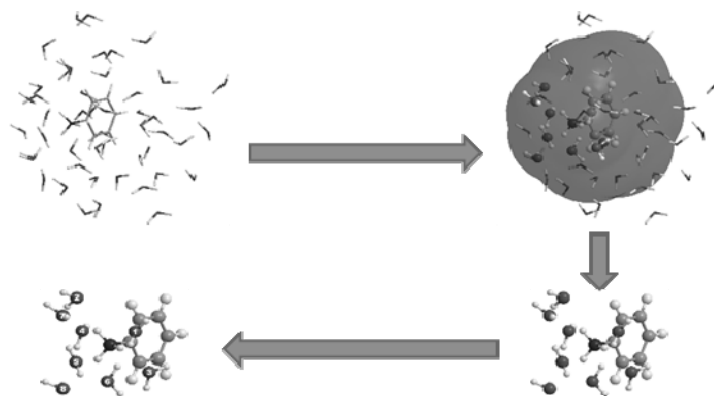
Prirodoslovno-matematički fakultet, Zagreb

matejbubas0161@yahoo.com

U radu je testirana nova klaster-kontinuum metoda modeliranja solvatacije [1]. U sklopu rada je sistematskim variranjem parametara *basin hopping Monte Carlo* procedure u GAMESS programskom paketu optimiziran prvi korak metode – generiranje različitih klastera sa solvatiranim funkcionalnim skupinama.

Na temelju početnih klastera napravljene su funkcije radijalne gustoće vjerojatnosti nalaženja atoma kisika molekula vode oko funkcionalnih skupina soluta. Pomoću tako dobivenih funkcija, određeni solvatacijski bazeni funkcionalnih skupina koji sadrže sve potencijalno bitne eksplicitne molekule otapala za mikrosolvataciju soluta. Nakon toga odabir najčvršće vezanih molekula vode proveden je NCU analizom.

Kao modelni soluti odabrani su anilin, fenilhidroksilamin i njihove protonirane vrste. Proučeni su strukturni uzorci nekolicine najstabilnijih konfiguracija soluta s jednom, dvije i tri molekule na SMD/ωB97XD/6-311+G(2df,2p) razini teorije. Dobiveni rezultati pokazuju značajno poboljšanje u odnosu na one dobivene korištenjem samo implicitnog otapala.



[1] I. Rončević, doktorska disertacija, 2015



## Analiza onečišćenja 7-etiltryptofola pomoću sustava LC-SPE/krio NMR

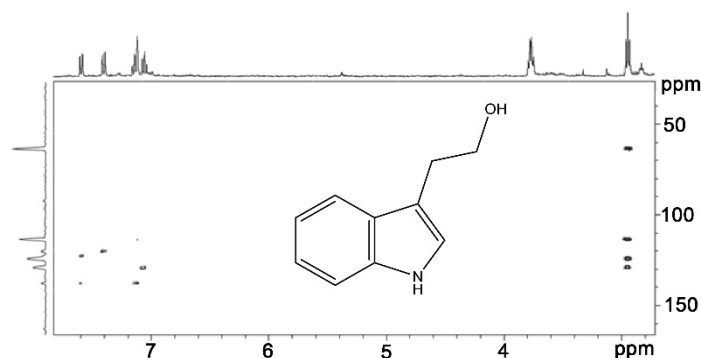
Karla Janeš

Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek, Horvatovac 102a, Zagreb  
karla.janes@gmail.com

Polazna sirovina za sintezu Etodolaca, nesteroidnog protuupalnog lijeka, je 7-etiltryptofol, 2-(7-etil-1H-indol-3-il) etanol. Ovisno o putu sinteze 7-etiltryptofola komercijalno dostupna sirovina može sadržavati velik broj nečistoća koje uzrokuju nastajanje koprodukata prilikom sinteze, a time otežavaju i pročišćavanje konačnog produkta.<sup>[1]</sup> Kako bi se razvila optimalna metoda pročišćavanja Etodolaca, potrebno je poznavati strukture onečišćenja polazne sirovine.

U ovom istraživanju korištena je LC-SPE/krio NMR metodologija za određivanje onečišćenja u uzorku 7-etiltryptofola. Kromatografsko odjeljivanje sastojaka postignuto je na kolonama Waters XBridge Phenyl i C18 (150 mm x 4.6 mm; 3.5  $\mu$ m) uz kombinaciju izokratnog i gradijentnog eluiranja. Onečišćenja su ukoncentrirana poslijekolonskim višestrukim skladištenjem (engl. multitraping) na HySphere Resin GP SPE-kolone. Snimljeni su jedno- i dvo-dimenzijski NMR ( $^1\text{H}$ , COSY,  $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$  HSQC,  $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$  HMBC) i MS spektri na temelju kojih su određene strukture onečišćenja.

Rad je izrađen na Kemijskom odsjeku Prirodoslovno-matematičkog fakulteta u Zagrebu pod vodstvom prof. dr. sc. Predraga Novaka i neposrednim vodstvom mag. chem. Ive Habinovec.



[1] M. C. Sekharayya, G. V. Narayana, S. Nigam, G. Madhusudhan, *Indian J. Chem.* **51B** (2012) 1763-1766.



## Razvoj elektrokemijskog impedancijskog senzora za *in situ* ocjenu djelotvornosti zaštitnih premaza

Petra Švelić, Šejla Zukić

Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije

Marulićev trg 19, 10000 Zagreb

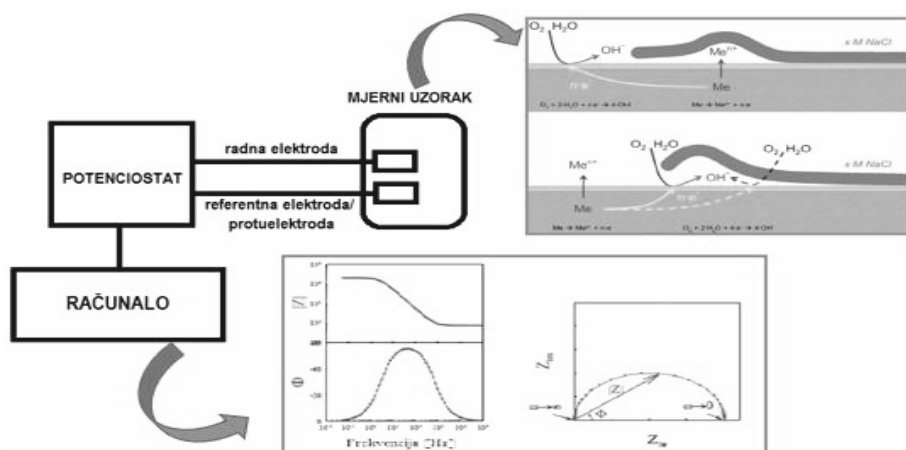
Petra.svelic79@gmail.com, sejla.zukic94@gmail.com

Instrument koji bi dao brze i precizne rezultate o stanju premaza te uočio pojavu procesa korozije dok ona još nije vidljiva okom, izrazito bi olakšao kontrolu premaza i smanjio nastanak mogućih šteta.

Motivacija ovog rada je razviti elektrokemijski senzor koji bi bio što jednostavnije konstrukcije i koji bi imao široku mogućnost primjene. Trenutno ne postoji takav komercijalni instrument, ali znanstvenici rade na izradi. Problem izrade senzora je i elektrokemijske i elektrotehničke prirode. Najbitniji dio instrumenta predstavlja elektrokemijska ćelija, za koju su u ovom radu postavljeni sljedeći zahtjevi: trebala bi služiti za višestruku primjenu, biti dovoljno male dodirne površine sa premazom, po mogućnosti ne zahtijevati izravan kontakt sa metalnom podlogom te omogućavati mjerenje nametanjem simetričnog izmjeničnog naponskog signala bez istosmjerne komponente 0 V. Ti zahtjevi su postupno ispunjavani tijekom eksperimentalnih mjerenja. Posebno je značajan rezultat primjene komercijalnih elektrostimulacijskih elektroda koje nikad nisu korištene u svrhu mjerenja impedancije premaza, a pokazale su se izrazito praktičnim.

Sve izvedbe elektrokemijskih ćelija u ovom radu, ukazale su na isti poredak premaza prema kvaliteti. Rezultati za iste premaze nisu kvantitativno jednaki, što je posljedica različitih konstrukcija ćelija. Međutim, trend je izrazit, a u korozijske svrhe, značajna promjena u kvaliteti premaza odražava se padom impedancije premaza za nekoliko redova veličine. Također, mjerenjem ovisnosti karakteristika premaza o vremenu, uočeno je da s vremenom otpor premaza pada, dok kapacitet, dielektrična konstanta i volumni udio upijene vode rastu. To ukazuje da zaštitna svojstva premaza mogu bitno degradirati s vremenom i da je svrhovito kontrolirati impedanciju premaza *in situ* u određenim vremenskim razmacima. Upravo u tu svrhu, služio bi istraživani impedancijski senzor.

Ovaj rad je izrađen na Zavodu za elektrokemiju, Fakulteta kemijskog inženjerstva i tehnologije, pod vodstvom prof. dr. sc. Sanje Martinez.





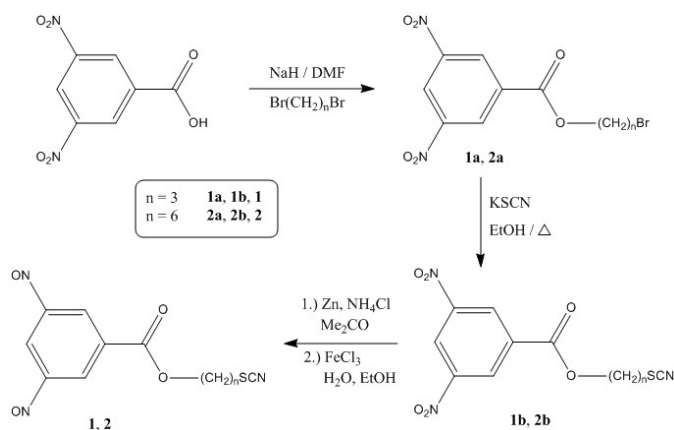
## Dimerizacija derivata dinitrozobenzena na površini zlata

Tin Klačić<sup>1</sup>, Ivana Biljan<sup>1</sup>, Marko Kralj<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb

<sup>2</sup>Centar izvrsnosti za napredne materijale i senzore, Institut za fiziku, Zagreb  
tin.klacic@gmail.com

Sintetizirana su dva derivata dinitrozobenzena, spoj **1** i **2**, pomno dizajnirane strukture koja ih čini pogodnim za vezanje na površinu zlata preko atoma sumpora (slika 1.). Njihovom adsorpcijom na ravnu površinu zlata (111) pripremljeni su samoudruženi molekularni slojevi. Karakterizacijom pripremljenih slojeva pretražnim tunelirajućim mikroskopom (STM-om) i mikroskopom atomskih sila (AFM-om) ustanovljeno je da se na površini zlata (111) formiraju samoudruženi monomolekulski (SAM-ovi), ali i bimolekulski slojevi (SAB-ovi). Nadalje, mjerenjima AFM-om određena je prosječna debljina pripremljenih slojeva. S obzirom na položaje nitrozo skupina, unutar SAM-ova postoji mogućnost za lateralnu polimerizaciju jedinki proučavanih derivata, ali i za vertikalnu dimerizaciju s molekulama iz otopine. Stoga su modeliranjem semiempirijskom metodom PM6 i DFT metodom na B3LYP/3-21G razini teorije razvijeni modeli i određena je najstabilnija struktura proučavanih samoudruženih molekularnih slojeva. Rezultati ovog rada potvrđuju da su istraženi derivati dinitrozobenzena prikladni molekularni modeli koji bi se mogli koristiti za dizajniranje i proučavanje bimolekulskih slojeva na metalnim površinama.



Slika 1. Sintetski put priprave derivata dinitrozobenzena **1** i **2**.

Rad je izrađen u sklopu projekta HRZZ (br. projekta 7444, ORGMOL) na Zavodu za organsku kemiju Kemijskog odsjeka Prirodoslovno-matematičkog fakulteta u Zagrebu pod mentorstvom doc. dr. sc. Ivane Biljan te u Centru izvrsnosti za napredne materijale i senzore Instituta za fiziku u Zagrebu pod komentorstvom dr. sc. Marka Kralja.



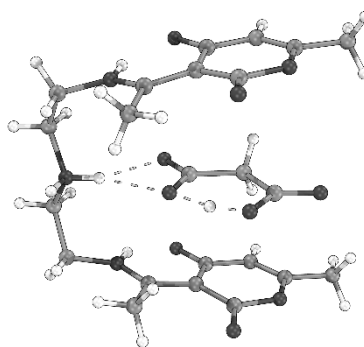
## Uloga konformacijske knjižnice u dizajnu novih receptora: kompleksi s hidrogenmalonom – potvrda koncepta

Karla Kelemen, Krunoslav Užarević, Ivica Đilović  
Prirodoslovno-matematički fakultet, Institut Ruđer Bošković, Zagreb  
kelemen.karla@yahoo.com, ivica.djilovic@chem.pmf.hr

Vežanje aniona na sintetičke receptore spada u carstvo supramolekulske kemije, a to je područje interakcije molekulskih i ionskih vrsta u kojem ne dolazi do stvaranja kovalentne veze. Takvi receptori mogu biti *rigidni (kruti)*, a time i izrazito selektivni – čvrsto vežu točno određeni anion. [1,2] S druge pak strane, *fleksibilni receptori* promjenom konformacije osiguravaju najbolje vežno mjesto za anion, a ponekad se i samoudružuju u složenije vrste radi boljeg vežanja aniona. [3,4] Upravo zbog svoje prilagodljivosti, fleksibilni receptori imaju mogućnost prepoznavanja i vežanja više vrsta aniona, čak i u čvrstom stanju. [5,6]

U ovom je istraživanju ispitana mogućnost prepoznavanja i vežanja hidrogenmalonatnog aniona na poznati receptor [3-6] u alkoholnim otopinama. Informacije iz konformacijske knjižnice receptora poslužile su kao potvrda koncepta strategije vežanja „aromatskih sustava“. [3-6] Pritom su određene dvije nove kristalne strukture. Drugi dio istraživanja posvećen je pronalazanju nove generacije receptora te je sintetiziran novi spoj kojemu je struktura određena pomoću NMR-a.

Anioni  
Receptor  
Fleksibilnost  
Selektivnost  
Malonska kiselina  
Konformacija  
Konformacijska knjižnica



- [1] Gale, P. A., Chem. Soc. Rev. 39 (2010) 3746-3771.
- [2] Custelcean, R., Chem. Soc. Rev. 39 (2010) 3675-3685.
- [3] Užarević, K., Đilović, I., Matković-Čalogović, D., Šišak, D., Cindrić, M., Angew. Chem. Int. Ed. 47 (2008) 7022-7025.
- [4] Užarević, K., Đilović, I., Bregović, N., Tomišić, V., Matković-Čalogović, D., Cindrić, M., Chem Eur. J. 17 (2011) 10889-10897.
- [5] Užarević, K., Halasz, I., Đilović, I., Bregović, N., Rubčić, M., Matković-Čalogović, D., Tomišić, V., Angew. Chem. Int. Ed. 52 (2013) 5504-5508.
- [6] Đilović, I., Užarević, K., CrystEngComm 17 (2015) 3153-3161.





## Sinteza novog fotokatalitičkog nanokompozita poli(3,4- etilen-dioksitiofen)/TiO<sub>2</sub> imobiliziranog na lebdećem pepelu i ispitivanje njegove učinkovitosti pod simuliranim sunčevim zračenjem

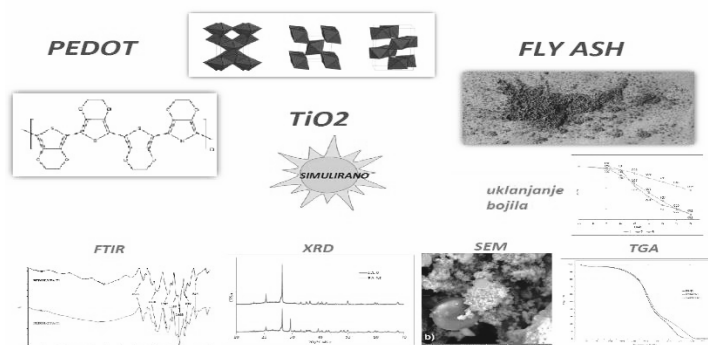
Iva Gavran, Josipa Smolković

Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb  
igavran@fkit.hr, josipa.smolkovic@gmail.com

Otpadne vode iz industrije proizvodnje i primjene bojila i tekstilne industrije predstavljaju značajan ekološki problem, ne samo zbog intenzivne obojenosti, već i zbog sadržaja različitih organskih spojeva čija je prisutnost u okolišu i vodotokovima nepoželjna te se kao takve ne mogu ispustiti u okoliš bez prethodne odgovarajuće obrade. Fotokataliza je napredni oksidacijski proces kojim, uz upotrebu metalnih poluvodiča, dolazi do razgradnje onečišćenja, odnosno do nastajanja potpuno neopasnih razgradnih produkata. Titanijev dioksid je najčešće korišteni fotokatalizator, međutim, njegov nedostatak je što vidljivi dio sunčevog zračenja nema dovoljnu energiju da ga bi aktivirao već se on može aktivirati samo pod djelovanjem UV svjetla. Kako bi se povećala aktivnost TiO<sub>2</sub> u vidljivom dijelu spektra sintetiziran je nanokompozit TiO<sub>2</sub> s elektrovodljivim polimerom poli(3,4-etilen-dioksitiofen) (PEDOT). Elektrovodljivi polimeri imaju nižu energiju zabranjene zone te je energija vidljivog zračenja dovoljna da izbije elektrone iz valentne u vodljivu vrpcu i on na taj način djeluje kao aktivator fotokatalizatora. S ciljem lakšeg uklanjanja čestica fotokatalizatora nakon fotokatalize, fotokatalizator TiO<sub>2</sub> je imobiliziran na porozni nosač, modificirani lebdeći pepeo. U ovom istraživanju, korišteni lebdeći pepeo dobiven je iz termoelektrane Plomin, gdje nastaje kao nusprodukt spaljivanja ugljene prašine. Na prethodno obrađeni lebdeći pepeo imobiliziran je TiO<sub>2</sub> sol-gel metodom. Sinteza poli(3,4-etilen-dioksitiofen)/lebdeći pepeo-TiO<sub>2</sub> fotokatalizatora provedena je kemijskom oksidacijskom polimerizacijom 3,4-etilen-dioksitiofen (EDOT) monomera, uz korištenje dva različita oksidansa: amonijevog peroksidisulfata (APS) i željezovog(III) klorida (FeCl<sub>3</sub>). Sintetizirani uzorci fotokatalizatora okarakterizirani su infracrvenom spektroskopijom s Fourierovim transformacijama (FTIR), rendgenskom difrakcijskom analizom (XRD), termogravimetrijskom analizom (TGA), plinskom adsorpcijsko-desorpcijskom analizom i pretražnom elektronskom mikroskopijom (SEM).

Fotokatalitička učinkovitost nanokompozitnog fotokatalizatora ispitana je praćenjem razgradnje azo-bojila Reactive Red 45 (RR45) u simulatoru sunčevog zračenja. Pratio se obezbojenje putem UV/Vis spektrofotometra te se mjerio ukupni organski ugljik (TOC). Rezultati su pokazali da su svi koraci sinteze uspješno provedene. Stupanj uklanjanja bojila RR45 je bio vrlo visok u prvom ciklusu fotokatalize dok je u ponovljenim ciklusima došlo do brzog zasićenja površine fotokatalizatora molekulama bojila te je zbog toga učinkovitost bila znatno manja.

Ovaj rad izrađen je na Zavodu za polimerno inženjerstvo i organsku kemijsku tehnologiju pod vodstvom dr. sc. Zvonimira Katančića.





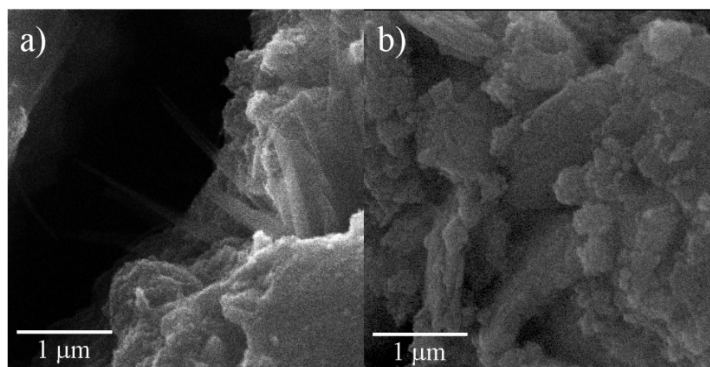
## Hidrotermalna sinteza i karakterizacija nanočestica cerijeva(IV) oksida

Martina Guliš

Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Sveučilište u Zagrebu

[martina.gulis@gmail.com](mailto:martina.gulis@gmail.com)

Provedena je serija hidrotermalnih sinteza nanočestica cerijeva (IV) oksida,  $\text{CeO}_2$ , pri čemu je za procjenu relativne važnosti parametara koji utječu na specifičnu površinu i na ostala svojstva  $\text{CeO}_2$  korišten Taguchi eksperimentalni dizajn. Pripravljene  $\text{CeO}_2$  nanočestice karakterizirane su rendgenskom difrakcijom (XRD), adsorpcijsko-desorpcijskim izotermama, infracrvenom spektrometrijom s Fourierovim transformacijama signala (FTIR), termogravimetrijskom analizom (TGA) i pretražnom elektronskom mikroskopijom (SEM). Optimalni uvjeti za dobivanje čestica s većom specifičnom površinom izračunati su korištenjem Taguchi modela s izvedbenom značajkom „više je bolje“. Utvrđeno je kako niža razina temperature hidrotermalne sinteze ima najveći utjecaj na dobivanje čestica s većom specifičnom površinom. Dobiven je mezoporozni nanokristalinični  $\text{CeO}_2$  specifične površine  $226 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$  što je do sada najveća specifična površina nanočestica  $\text{CeO}_2$  dobivenih hidrotermalnom sintezom ikada. Nanočestice  $\text{CeO}_2$  su dobivene bez ikakvih aditiva čime je izbjegnuto korištenje organskih tvari koje smanjuju katalitičku aktivnost cerijeva (IV) oksida i koje nisu ekološki prihvatljive. Dobiveni su vrlo fini kristaliti, veličine 5.9 nm te je pokazano kako je njihova veličina obrnuto proporcionalna sa veličinom specifične površine; što su manje veličine kristalita to je njihova specifična površina veća. Razlog važnosti temperature kao parametra koji najviše utječe na specifičnu površinu je njen utjecaj na difuzijski koeficijent. Izabrani uzorci bili su testirani kao katalizatori za oksidaciju čađe te se ispostavilo kako je morfologija uzorka odlučujući faktor za katalitičku aktivnost.



Slika 1. Reprezentativne SEM mikrografije uzoraka CNR5 (a) i CNR6 (b), koji imaju najmanju i najveću specifičnu površinu.

Ovaj rad je izrađen na Fakultetu kemijskog inženjerstva i tehnologije, Sveučilišta u Zagrebu na Zavodu za anorgansku kemijsku tehnologiju i nemetale pod vodstvom prof. dr. sc. Stanislava Kurajice.



## Upotreba ugljikovih nanočestica u izradi coated wire ISE za upotrebu u analitici tenzida

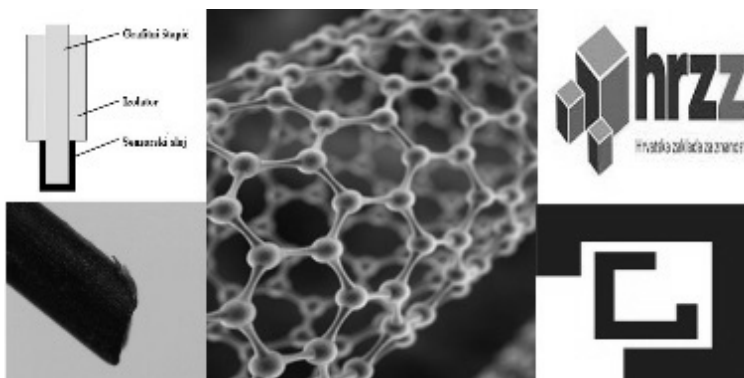
Pavo Živković

Odjel za kemiju, Cara Hadrijana 8/A, 31000 Osijek, Hrvatska  
zivkovic.pavo@gmail.com

Glavni cilj je bio izrada potenciometrijskog senzora koji će biti baziran na ugljikovim nanočesticama čija bi glavna primjena bila određivanje koncentracije tenzida u realnim sustavima. Budući da su tenzidi zbog svojih karakteristika vrlo često upotrebljavani spojevi vrlo je bitno odrediti njihovu koncentraciju. U tu svrhu se najčešće primjenjuje potenciometrijska titracija pri čemu se kao referentna elektroda koristi ISE. Kao referentna elektroda korištena je izrađena elektroda s nanočesticama. Nanočestice u izradi ovakve elektrode imaju ulogu poboljšanja karakteristika same elektrode te smo zbog toga i mjerili linearni odziv elektrode, određivali koeficijent selektivnosti te odradili titracije u realnim otopinama kako bi smo odredili točnost i preciznost senzora.

Izrada ovakvog senzora je vrlo brza i jednostavna, a sam senzor pokazuje zadovoljavajuće karakteristike i može se koristiti za brze, jednostavne i jeftine analize što i je jedan od najvažnijih ciljeva u izradi senzora za analizu.

Rad je napravljen na Odjelu za kemiju pod vodstvom doc.dr.sc Nikole Sakač u sklopu projekta NanoSens





## Fotokatalitičko djelovanje kompozitnog materijala polipirol/titanijev dioksid

Martina Perlog, Jasmina Stjepanović  
Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije,  
Marulićev trg, 10000 Zagreb  
mperlog@fkit.hr , jasmina.stjepa@gmail.com

U radu je provedena sinteza i karakterizacija kompozita vodljivog polimera polipirola s titanijevim dioksidom (PPy/TiO<sub>2</sub>) s ciljem dobivanja kompozita fotoosjetljivih u vidljivoj dijelu sunčeva spektra koji bi mogli poslužiti kao fotokatalizatori za razgradnju organskih onečišćenja u otpadnim vodama. Uzorci su pripremljeni polimerizacijom iz monomera pirola (PPy) u prisustvu titanijeva dioksida (TiO<sub>2</sub>) te oksidansa željezova klorida (FeCl<sub>3</sub>); uz omjer koncentracija monomera i oksidansa 1:1 te uz omjer polipirol:titanijev dioksid 1:100. Proces polimerizacije vođen je 90, 180 i 270 minuta.

Uzorci su karakterizirani infracrvenom spektroskopijom s Fourierovom transformacijom (FTIR), UV-Vis spektroskopijom, rendgenskom difrakcijskom analizom (XRD) te pretražnom elektronskom mikroskopijom (SEM). Provedeno je ispitivanje njihove fotokatalitičke djelotvornosti u razgradnji organskog azo-bojila *Reactive Red 45* kao modelnog onečišćenja vode, na UV-A i vidljivom svjetlu.

Iz rezultata fotokatalitičke razgradnje može se zaključiti da fotokatalitička učinkovitost kompozita PPy/TiO<sub>2</sub> raste s produljenjem vremena trajanja polimerizacije. Fotokatalizator PPy/TiO<sub>2</sub> 270 min pokazao je visoku učinkovitost razgradnje bojila pri UV-A, a posebno pri vidljivom svjetlu što se tumači mogućnošću apsorpcije vidljivog svjetla polimera polipirola, prisutnog u kompozitima PPy/TiO<sub>2</sub>, koji onda aktivira TiO<sub>2</sub>. Dakle, TiO<sub>2</sub> fotokatalizator u kombinaciji s vodljivim polimerom polipirolom, u obliku ovakvih kompozita, ima mogućnost primjene za razgradnju organskih onečišćenja i na vidljivom svjetlu.

Ovaj je rad izrađen na Zavodu za polimerno inženjerstvo i organsku kemijsku tehnologiju, Fakulteta kemijskog inženjerstva i tehnologije pod vodstvom doc. dr. sc. Ljerke Kratočil Krehula.

