

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 impozantne; 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 usmjeravali 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 zagarantirani.

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

PREDAVANJA:	
A2 (predsjedavajući: Nikola Bedeković)	
10:20-10:50	Juraj Nikolić i Tomislav Friganović (PMF, Zagreb): <i>Utjecaj aminskih kompleksa kobalta(III) na nastajanje polioksomolibdata</i>
10:50-11:20	Mario Špadina (PMF, Zagreb): <i>Ekspperimentalni i teorijski pristup razumijevanju površinskih svojstava TiO₂ nanomaterijala u vodenoj otopini elektrolita</i>
11:20-11:30	KRATKA PAUZA
11:30-12:00	Dajana Barišić (PMF, Zagreb): <i>Sinteza i kompleksacijska svojstva aromatskih diurea</i>
12:00-12:30	Mihael Eraković, Demian Kalebić, Edi Topić i Petar Štrbac (PMF, Zagreb): <i>Kemiluminiscencija i kinetika pirotehnike</i>
12:30-13:00	„COFFEE BREAK“

USMENA IZLAGANJA:		
	A1 (predsjedavajući: Tomislav Piteša)	A2 (predsjedavajuća: Ana Milas)
13:00-13:15	Nea Baus i Tamara Rinkovec (PMF, Zagreb): <i>Izgradnja anorganskih supramolekulskih arhitektura uz pomoć načela posuđenih iz organskih sustava</i>	Lucija Krišto i Ivana Križić (PMF, Zagreb): <i>Sinteza novih kinuklidinijevih spojeva kao mogućih površinski aktivnih tvari</i>
13:15-13:30	Kristina Smokrović (PMF, Zagreb): <i>Soli 2,4,6-trinitrobenzen-1,3,5-triola s donorima i akceptorima vodikove veze</i>	Dario Dugandžija (PMF, Zagreb): <i>Sinteza i karakterizacija novih heterocikličkih α-D-manokonjugata</i>
13:30-13:45	Luka Fotović (PMF, Zagreb): <i>Utjecaj reakcijskih uvjeta na supramolekulski ishod sinteze koordinacijskog spoja bakra(II) s iminom izvedenim iz 2-hidroksi-1-naftaldehida</i>	Marina Marinović i Natalija Pantaloni Juraj (FKIT, Zagreb): <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	Nives Matijaković i Nikolina Penić (PMF, Zagreb): <i>Polimerizacija halogenidnih i pseudohalogenidnih kompleksa kadmija(II) s izoniazidom i niazidom</i>	Iva Trtanj i Dunja Velagić (PBF, Zagreb): <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“	

	A1 (predsjedavajući: Mihael Eraković)	A2 (predsjedavajuća: Tana Tandarić)
15:30-15:45	Neven Golenić, Ivan Ilić i Tomislav Piteša (PMF, Zagreb): <i>Tetramorfni sustav 2-amino-4-metilpiridinijeva salicilata</i>	Mirna Jovičić i Lela Pintarić (FKIT, Zagreb): <i>Modeliranje biokatalitičke sinteze nanočestica CaCO₃</i>
15:45-16:00	Ivana Nogalo (PMF, Zagreb): <i>Polimorfija Schiffove baze izvedene iz o-vanilina i 3-aminoacetofenona: sinteza, struktura i svojstva</i>	Valentina Havaić (FBF, Zagreb): <i>Ferocenoilni derivati pirimidinskih nukleobaza</i>
16:00-16:15	Nikola Bedeković (PMF, Zagreb): <i>Binarni sustavi N-(2-karboksifenil)glicina i derivata piridina – vodikove veze i prijenos protona</i>	Karlo Skube i Ingrid Tomljanović (PMF, Zagreb): <i>Ekspresija i identifikacija nativno neuređenih proteina (IDP) iz Arabidopsisthaliana nakon izlaganja abiotičkom stresu</i>
16:30-16:45	Edi Topić i Nikola Bedeković (PMF, Zagreb): <i>Kobaloksimi i halogenska veza</i>	Vedran Vuković i Mislav Acman (PMF, Zagreb): <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“	
	A1 (predsjedavajući: Petar Štrbac)	A2 (predsjedavajuća: Ingrid Gregorović)
17:00-17:15	Robert Mićanović (FSB, Zagreb): <i>Drveno plastični kompoziti</i>	Tomislav Gregorić (FKIT, Zagreb): <i>Sinteza i molekularno modeliranje novih hibrida 1,2,3-triazola i pirimidina s potencijalnim protutumorskim djelovanjem</i>
17:15-17:30	Andrej Kukučka (PMF, Novi Sad) i Milenko Korica (Odjel za kemiju, Osijek): <i>Ispitivanje mogućnosti uklanjanja amonijaka iz podzemne vode umjetnim zeolitom u protočnom sustavu</i>	Petra Gilija i Ana Palajsa (FBF, Zagreb): <i>Sinteza i karakterizacija novih urea i semikarbazidnih derivata primakina</i>
17:30-17:45	Jelena Mirković (PMF, Novi Sad): <i>Uspoređivanje efikasnosti Fenton i foto-Fenton procesa obezbojavanja sintetičke otopine Reactive Red 120</i>	Bernarda Resman i Ivana Šustić (PBF, Zagreb): <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

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

SAŽECI

PREDAVANJA

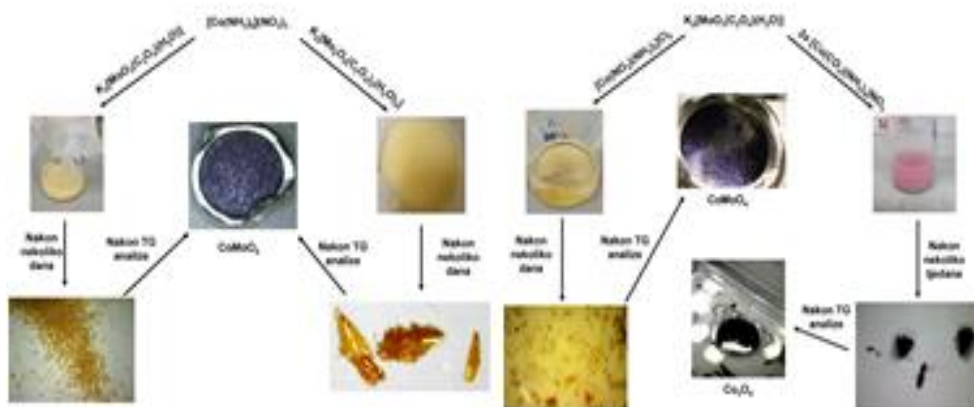
Juraj Nikolić i Tomislav Friganović (PMF, Zagreb): <i>Utjecaj aaminskih kompleksa kobalta(III) na nastajanje polioksomolibdata</i>	14
Mario Špadina (PMF, Zagreb): <i>Eksperimentalni i teorijski pristup razumijevanju površinskih svojstava TiO₂ nanomaterijala u vodenoj otopini elektrolita</i>	15
Dajana Barišić (PMF, Zagreb): <i>Sinteza i kompleksacijska svojstva aromatskih diurea</i>	16
Mihael Eraković, Demian Kalebić, Edi Topić i Petar Štrbac (PMF, Zagreb): <i>Kemiluminiscencija i kinetika pirotehnike</i>	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.friganovich@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 $[\text{Co}(\text{NO}_2)(\text{NH}_3)_5][\text{MoO}_3(\text{C}_2\text{O}_4)(\text{H}_2\text{O})] \cdot \text{H}_2\text{O}$, $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6][\text{Mo}_3\text{O}_9(\text{C}_2\text{O}_4)_3] \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ 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.

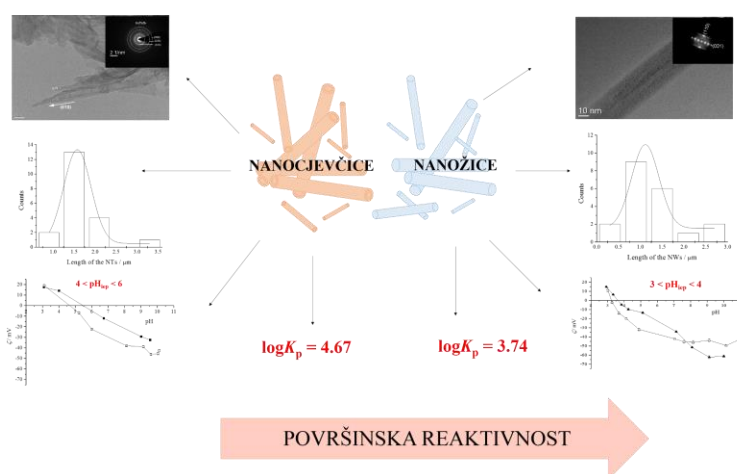


Eksperimentalni i teorijski pristup za razumijevanje površinskih svojstava i „reaktivnosti” 1-D TiO₂ nanomaterijala

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

Brojni procesi poput katalize, transporta i adsorpcije iona odvijaju se na međupovršini TiO₂/vodena otopina elektrolita. TiO₂ 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 TiO₂ 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 TiO₂ NWs (NTs) / vodena otopina elektrolita u odnosu na anione. Dobivene konstante protonacije mogu objasniti poboljšanu „reaktivnost“ TiO₂ 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^a, Nikola Cindro^a, Nikola Bregović^a, Leo Frkanec^b,
Krunoslav Užarević^c, Vladislav Tomišić^a

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

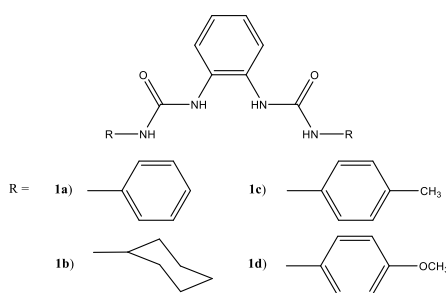
c) Laboratorij za kemijsku kinetiku i atmosfersku kemiju, Institut Ruđer Bošković,
Bijenička cesta 54, 10 000 Zagreb

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 ¹H 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): Sintaza novih kinuklidinijevih spojeva kao mogućih površinski aktivnih tvari..... 24

Dario Dugandžija (PMF, Zagreb): Sintaza i karakterizacija novih heterocikličkih α -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

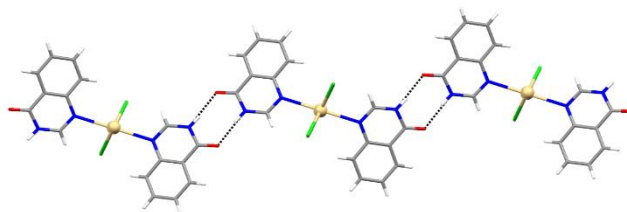
Neven Golenić, Ivan Ilić i Tomislav Piteša (PMF, Zagreb): Tetramorfni sustav 2-amino-4-metilpiridinijeva salicilata	28
Ivana Nogalo (PMF, Zagreb): Polimorfija Schiffove baze izvedene iz ovanilina i 3-aminoacetofenona: sinteza, struktura i svojstva	29
Nikola Bedeković (PMF, Zagreb): Binarni sustavi N-(2-karboksifenil)glicina i derivata piridina – vodikove veze i prijenos protona	30
Edi Topić i Nikola Bedeković (PMF, Zagreb): Kobaloksimi i halogenska veza	31
Mirna Jovičić i Lela Pintarić (FKIT, Zagreb): Modeliranje biokatalitičke sinteze nanočestica CaCO_3	32
Valentina Havaić (FBF, Zagreb): Ferrocenolni derivati pirimidinskih nukleobaza	34
Karlo Skube i Ingrid Tomljanović (PMF, Zagreb): Ekspresija i identifikacija nativno neuređenih proteina (IDP) iz Arabidopsisthaliana nakon izlaganja abiotičkom stresu	35
Vedran Vuković, Mislav Acman i Marija Klasić (PMF, Zagreb): Razvoj testova za analizu metilacije DNA regulatornih regija gena GMNN i EZH2 i njihova primjena u istraživanju podtipova difuznog B-velikostaničnoga limfoma	36
Robert Mićanović (FSB, Zagreb): Drvno plastični kompoziti	37
Andrej Kukučka (PMF, Novi Sad) i Milenko Korica (Odjel za kemiju, Osijek): Ispitivanje mogućnosti uklanjanja amonijaka iz podzemne vode umjetnim zeolitom u protočnom sustavu.....	38
Jelena Mirković (PMF, Novi Sad): Uspoređivanje efikasnosti Fenton i fotoFenton procesa obezbojavanja sintetičke otopine Reactive Red 120	39
Tomislav Gregorić (FKIT, Zagreb): Sinteza i molekulsko modeliranje novih hibrida 1,2,3-triazola i pirimidina s potencijalnim protutumorskim djelovanjem.....	40
Petra Gilijsa i Ana Palajsa (FBF, Zagreb): Sinteza i karakterizacija novih urea i semikarbazidnih derivata primakina	41
Bernarda Resman i Ivana Šustić (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 istraživanog sustava izabrani su halogenidni kompleksi kadmija(II) s navedenim ligandima jer je za kadmij poznato da s halogenidnim ionima tvori polimerne komplekse 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

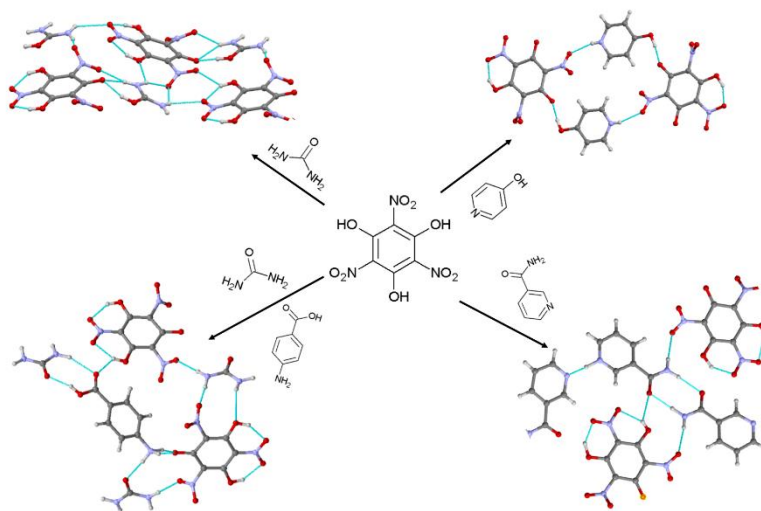
Kristina Smokrović

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 oksonijeve 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

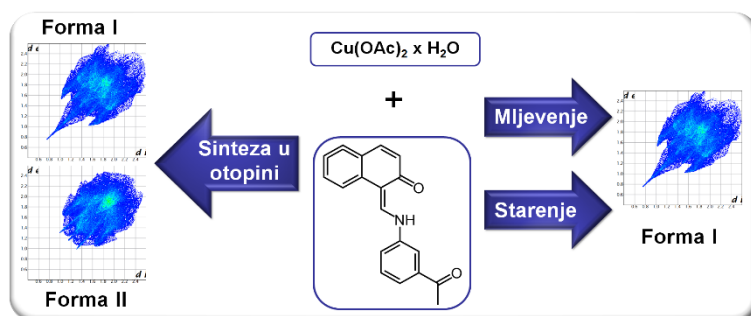
Luka Fotović, Vinko Nemec i Dominik Cinčić

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.

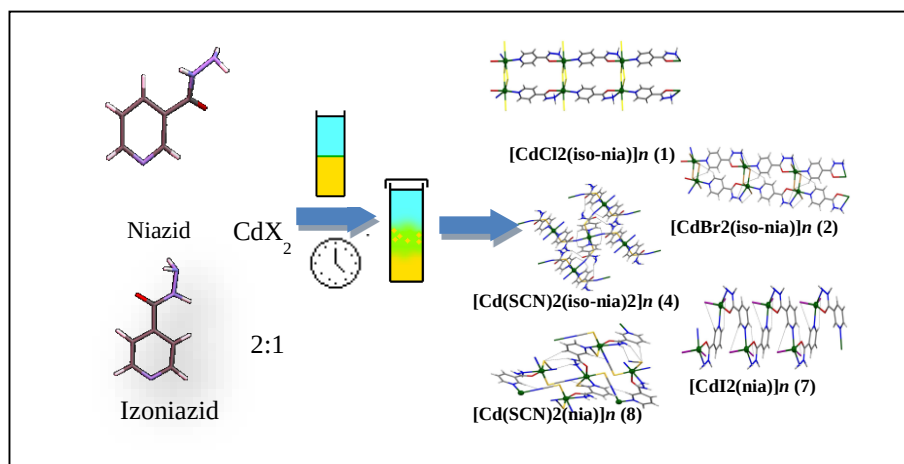


[1] A. Blagus, D. Cinčić, T. Friščić, B. Kaitner, V. Stilinović, *Maced. J. Chem. Chem. Eng.* 29 (2010) 117.

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): $[\text{CdCl}_2(\text{iso-nia})]_n$, $[\text{CdBr}_2(\text{iso-nia})]_n$, $[\text{CdI}_2(\text{nia})]_n$, $[\text{Cd}(\text{SCN})_2(\text{iso-nia})_2]_n$ i $[\text{Cd}(\text{SCN})_2(\text{nia})]_n$. Spojevi $[\text{CdCl}_2(\text{iso-nia})]_n$ i $[\text{CdBr}_2(\text{iso-nia})]_n$ grade 1D polimere s dvostrukim lancima. Spoj $[\text{CdI}_2(\text{nia})]_n$ je građen od cik-cak 1D polimernih lanca. Kompleksi kadmijeva(II) tiocijanata s izoniazidom $[\text{Cd}(\text{SCN})_2(\text{iso-nia})_2]_n$ i niazidom $[\text{Cd}(\text{SCN})_2(\text{nia})]_n$ grade 2D mreže. Molekule liganda vežu se *N,O*-bidentatno i *N*-premosno na kadmijeve(II) ione, osim u kompleksu $[\text{Cd}(\text{SCN})_2(\text{iso-nia})_2]_n$ 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.



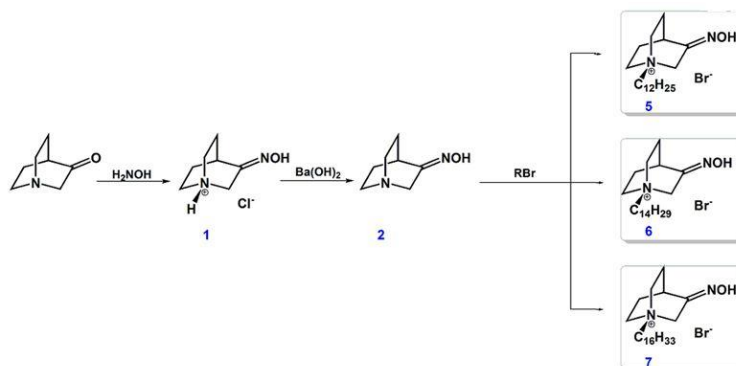
Sinteza novih kinuklidinijevih spojeva kao mogućih površinski aktivnih tvari

Lucija Krišto i Ivana Križić

Kemijski odsjek, Zavod za organsku kemiju, Prirodoslovno-matematički fakultet,
Sveučilište u Zagrebu, Horvatovac 102a, Zagreb
lucijakristo13@hotmail.com, ivanakrizic2@gmail.com

Pripravljeni 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 pripravljeni su *N*-dodecil (**5**), *N*-tetradecil (**6**) i *N*-heksadecil (**7**) 3-hidroksiiminokinuklidinijevi bromidi, shema 1. Svi pripravljeni 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

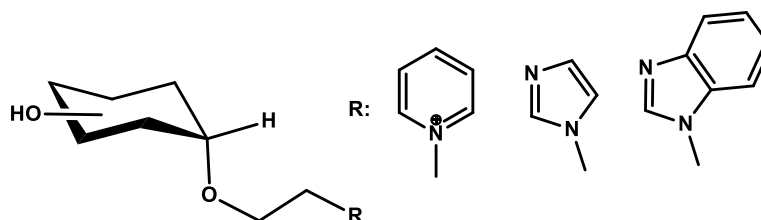
Sinteza i karakterizacija novih heterocikličkih α -D-manokonjugata

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 α -D-manozide, a aromatski α -D-manozidi su snažni inhibitori hemaglutinacije *E. coli*.^{1,2} Šećerna se komponenta ovakvih spojeva veže na CR (engl. *carbohydrate recognition*) domenu fimbrija dok aglikonski dio doprinosi stabilnosti vežući se na hidrofobnu regiju.² Upravo su zato pripremljeni novi heterociklički α -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-brometanonom uz BF_3 eterat kompleks kao aktivator. Heterociklički spojevi (piridin, imidazol i benzimidazol) su uspješno kvaternizirani prethodno pripremljenim manozidom. Ispitan je utjecaj različitih baza (NaH , K_2CO_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.³ Svi pripremljeni spojevi dobiveni su u zadovoljavajućem iskorištenju te im je struktura određena standardnim analitičkim postupcima (IR, MS, NMR), a α -D-anomeri potvrđeni su na osnovu konstanti sprege iz ^1H NMR spektara.

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



- [1] Ž. Car, T. Hrenar, V. Petrović Peroković, R. Ribić, M. Seničar, S. Tomić-Pisarić, *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 (spoj 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.

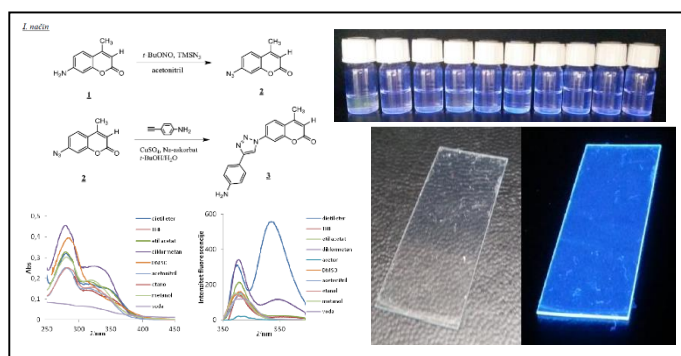
Spoj 3 pripravljen je na dva načina. U prvom načinu azid 2 pripravljen je klasičnom reakcijom diazotacije, a u drugom načinom azid 2 pripravljen je pomoću diazonijevog tosilata. Konačni spoj 3 u oba slučaja pripravljen je bakar (I) kataliziranom 1,3-dipolarnom cikloadicijom.

Ispitana je ovisnost svojstava spoja 3 o vrijednosti pH otopina univerzalnog pufera i etanolnih otopina, o polarosti 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 pripravljeni 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 γ -tokoferol kao spojevi specifični za bučino te $\Delta 5$ -steroli i α -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

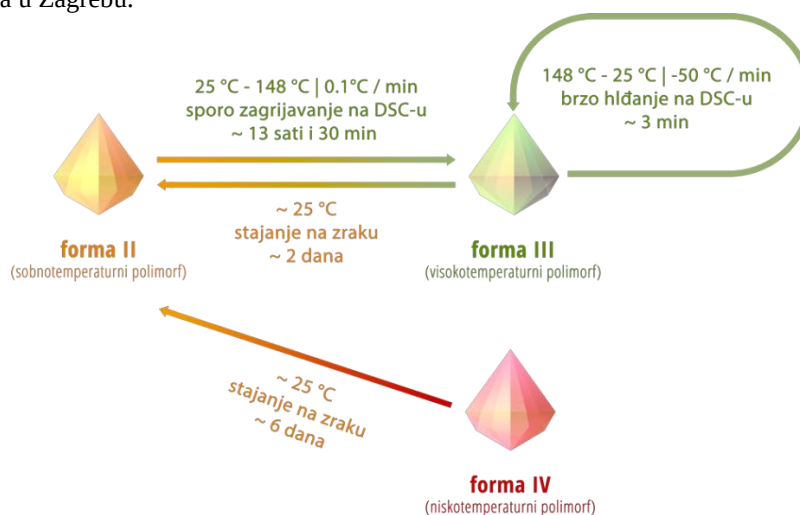
neven.golenic@gmail.com, ilic25693@gmail.com, tpitesa@gmail.com

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 priđe 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

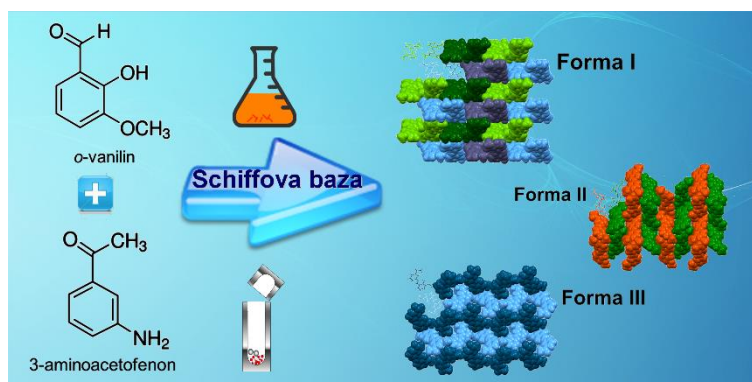
Ivana Nogalo, Marija Zbačnik, Dominik Cinčić

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 pripremiti i metodom mljevenja bez prisustva otapala. Time je pokazana mogućnost usmjeravanja supramolekulskog povezivanja molekula, produkta kovalentne sinteze, prema željenom kristalnom obliku. Pripravljene polimorfe opisane 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.

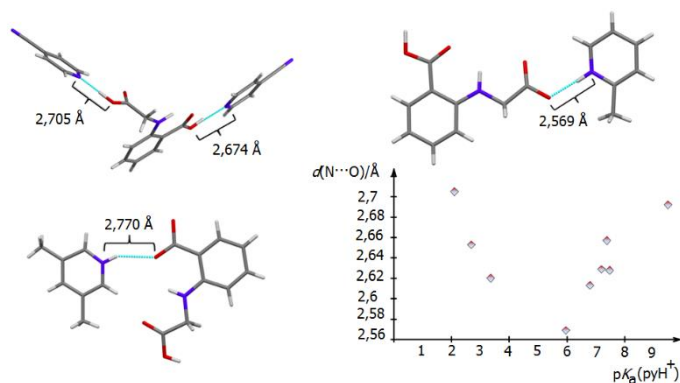
Binarni sustavi *N*-(2-karboksifenil)glicina i derivata piridina – vodikove veze i prijenos protona

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.

Kalboksimi 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.^[1] S druge strane, kobaloksimi su dugo poznati i lako pripravljivi kompleksi čija je kemija dobro istražena, primjerice kao model za proučavanje kemije vitamina B₁₂^[2], te kemije kobalta u neobičnim kemijskim okruženjima ili oksidacijskim stanjima^[3]. 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)₂XL, gdje je DMG dimetilglioksimatni anion, X halogenidni anion, a L Lewisova baza. Kompleksi su pripremljeni propuštanjem zraka u etanolnu otopinu kobaltova(II) acetata ili halogenida, dimetilglioksima, 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 utvrđeno 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 B₁₂ 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 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 μm . 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 (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, 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.

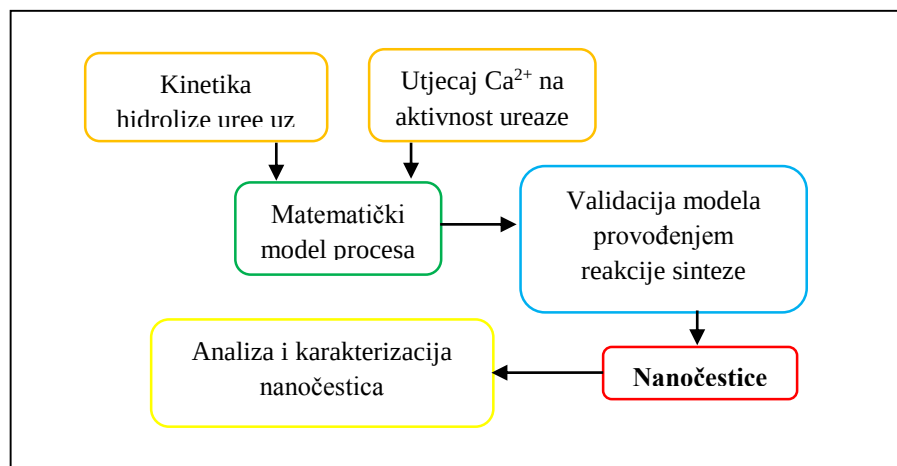
Na temelju dobivenih rezultata zaključeno je da porastom temperature raste specifična aktivnost ureaze u svim medijima. Procijenjeni su kinetički parametri te je zaključeno da porastom temperature raste i brzina reakcija provedenih u puferima, dok je maksimalna brzina reakcije, u slučaju provođenja reakcije 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, 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 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.

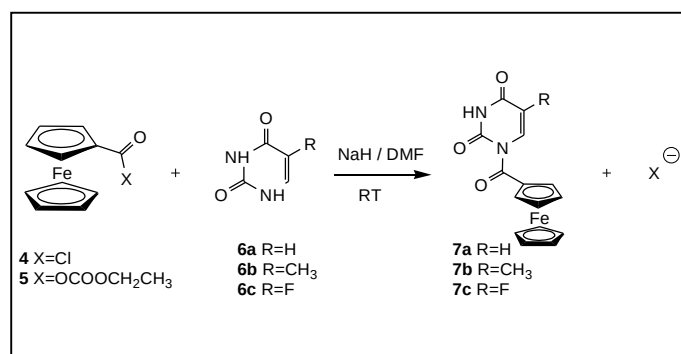
Ovaj rad izrađen je u Zavodu za reakcijsko inženjerstvo i katalizu Fakulteta kemijskog inženjerstva i tehnologije pod vodstvom izv. prof. dr. sc. Ane Vrsalović Presečki.



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 (FcCOOCOEt) u prisutnosti natrij hidrida (NaH) u dimetilformamidu (DMF). Regioselektivnost reakcija analizirana je NMR spektroskopijom i kvantno-kemijskim računima.¹ Mjerenja reakcijskih promjena provedena ¹H i ¹⁹F NMR spektroskopijom ukazuju na formiranje samo jednog produkta. Struktura produkta i položaj supstitucije potvrđeni su ¹³C 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_N2 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.

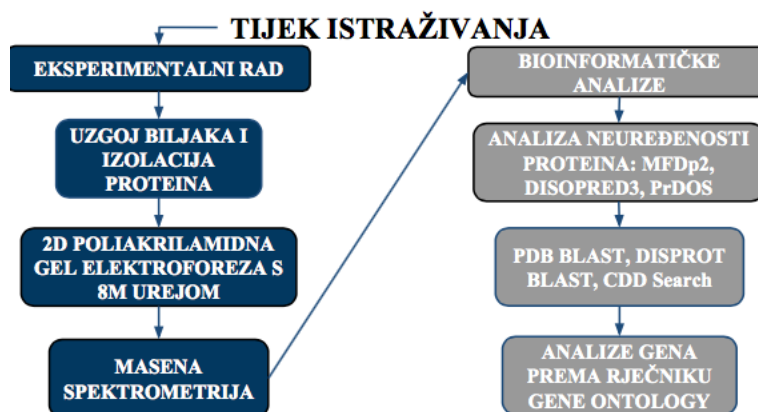
Ekspresija i identifikacija nativno neuređenih proteina (IDP) iz *Arabidopsis thaliana* nakon izlaganja abiotičkom stresu

Karlo Skube, Ingrid Tomljanović

Prirodoslovno-matematički fakultet, Zagreb

kskuba@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 terciarne, 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.

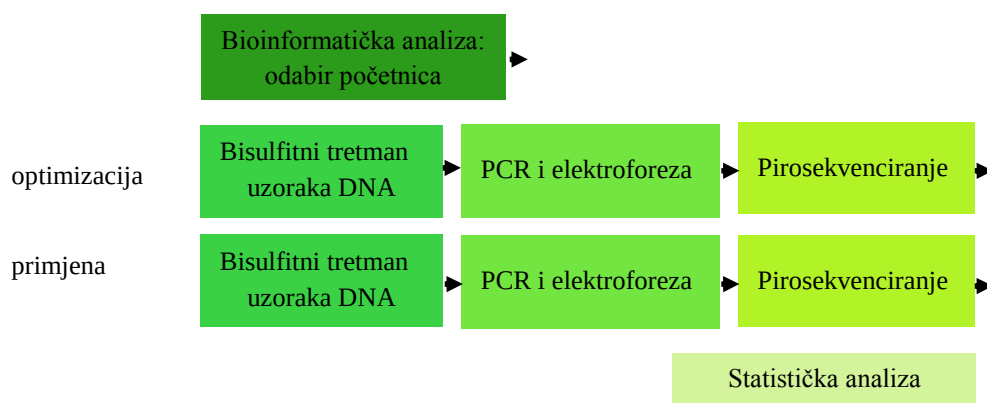


Razvoj testova za analizu metilacije DNA regulatornih regija gena *GMNN* i *EZH2* i njihova primjena u istraživanju podtipova difuznog B-velikostaničnog limfoma

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.

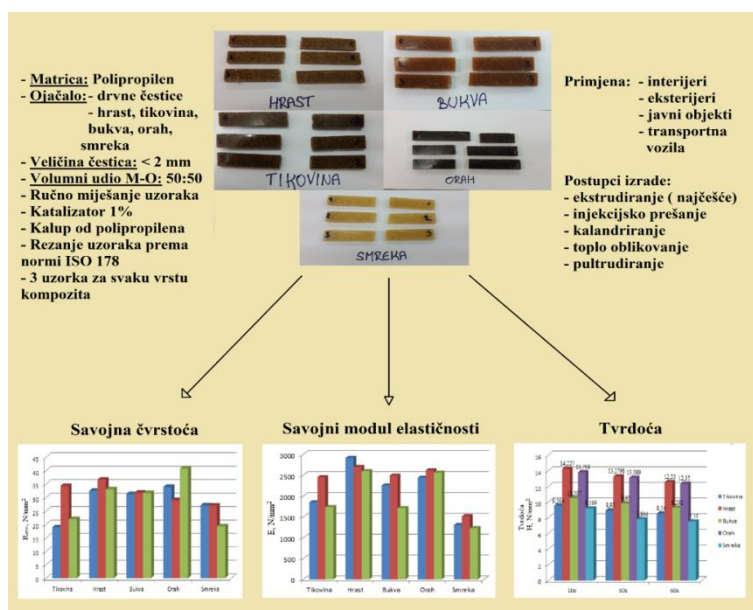


* podjednako pridonijeli radu

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 Kukučka¹, Milenko Korica²

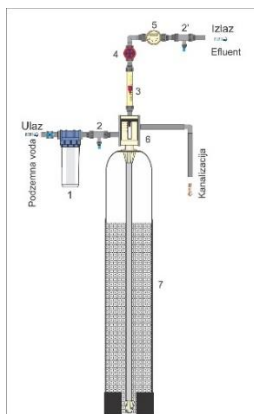
¹Prirodno-matematički fakultet, Novi Sad

²Odjel 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 NH₄⁺-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.

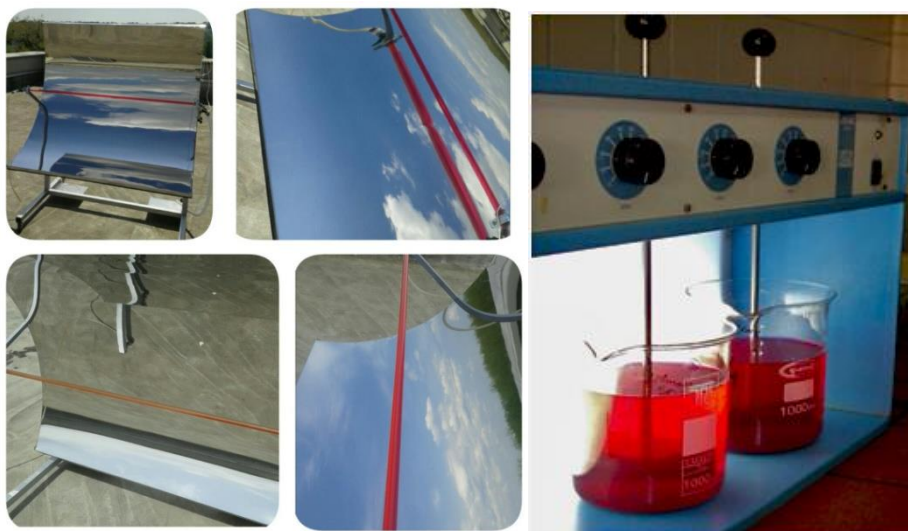


Uspoređivanje efikasnosti Fenton i foto-Fenton procesa obezbojavanja sintetičke otopine Reactive Red 120

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.

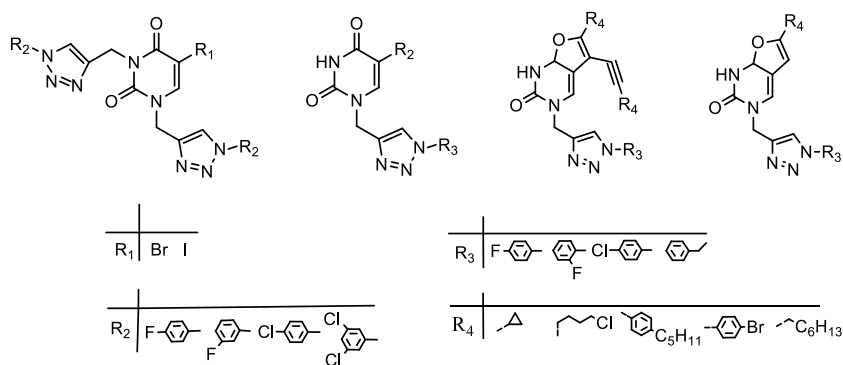


Sinteza i molekulsko modeliranje novih hibrida 1,2,3-triazola i pirimidina s potencijalnim protutumorskim djelovanjem

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, CuSO₄ 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 CuSO₄. 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 ¹H i ¹³C 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) (IC₅₀ = 0,79 μM). Spojevi **3**, **5**, **6** i **9** imali su snažno, ali i neselektivno inhibitoryno 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

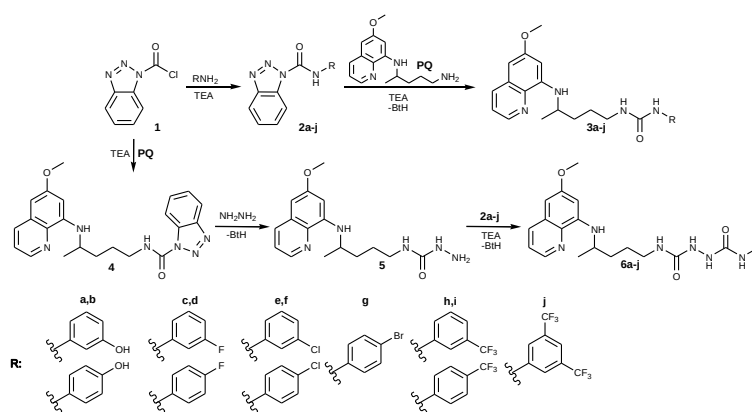
Primakin je važan antimalarijski lijek iz skupine 8-aminokinolina. Osim antimalarijskog, otkrivena je i citostatska aktivnost njegovih derivata s urea i semikarbazidnom skupinom. Kod prethodno sintetiziranih derivata dokazano je izraženo citostatsko djelovanje urea i semikarbazida primakina s halogeniranim 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, ¹H i ¹³C 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

