

# **3. SIMPOZIJ STUDENATA KEMIČARA**



## **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. Vladimir Stilinović

Danijel Namjesnik, dipl. ing.

Red. 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

## **UREDNIČE**

Ana Milas  
Ana Mikelić

## **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 PREDSJEDNIKA ORGANIZACIJSKOG ODBORA..... | 8  |
| RIJEČ PROČELNIKA SSHKD-a.....                  | 9  |
| PROGRAM .....                                  | 10 |
| SAŽECI.....                                    | 13 |
| PREDAVANJA.....                                | 15 |
| USMENA IZLAGANJA.....                          | 20 |
| SPONZORI I DONATORI.....                       | 56 |

## RIJEČ PREDSEDNIKA 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, FKİT, 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

## 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> (PMF, Zagreb):<br><i>Putopis kroz čvrsto stanje</i>                                                                             |
| 12:30-13:00                                  | <b>„COFFEE BREAK“</b>                                                                                                                            |

| USMENA IZLAGANJA:        |                                                                                                                                                           |                                                                                                                                                                       |
|--------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|                          | A1 (predsjedavajući: Mihael Eraković )                                                                                                                    | A2 (predsjedavajuća: Tamara Rinkovec)                                                                                                                                 |
| 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 acetalacetona 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 heksafluoracetalacetonom i odabranim N-piridiloksimima</i>       | <b>Isabella Koprivec i Jasmina 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“                                                                                                                                             |                                                                                                                                                                       |
|                          |                                                                                                                                                           |                                                                                                                                                                       |
| A2 (Predavanje donatora) |                                                                                                                                                           |                                                                                                                                                                       |
| 15:20-15:50              | <b>Nenad Banjac</b> (Atlantic Grupa): <i>Atlantic Grupa - ocean prilika</i>                                                                               |                                                                                                                                                                       |

|             | <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 Povarovljevoj 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: Ana Mikelić)</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-etilriptofola 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 <i>Entropija</i></b> (PMF, Zagreb):                                                                                                   |                                                                                                                                                                                                                                                                      |



***SAŽECI***

# PREDAVANJA

**Ivan Ilić** (Freie Universität, Berlin): *Sinteza rotaksana koji reagira na podražaj i njegovo taloženje na površini pomoću metala*.....16

**Kristijan Vuković** (PMF, Zagreb): *Aminokiselinska raznolikost ljudskog proteoma*.....17

**Edi Topić** (PMF, Zagreb): *Putopis kroz čvrsto stanje* .....18

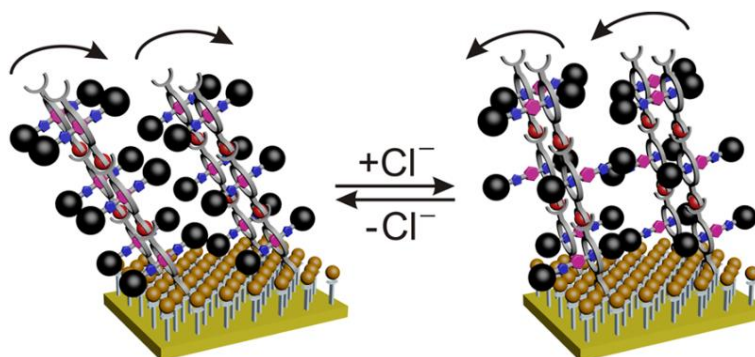


## Sinteza rotaksana koji reagira na podražaj i njegovo taloženje na površini pomoću metala

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.



## **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, podaci 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 Sistemska Genomiku u Melbourneu pod vodstvom: Izv. prof. Michael Inouye (Sveučilište u Melbourneu) i Izv. prof. Tomice Hrenara (Sveučilište u Zagrebu).



## 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 korisnika.

# USMENA

## IZLAGANJA

|                                                                                                                                                                         |    |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| <b>Luka Fotović</b> (PMF, Zagreb): <i>Sinteza adukata kompleksnog spoja bakra(II) s iminom izvedenim iz 2-hidroksi-1-naftaldehida i 4-nitroanilina .....</i>            | 23 |
| <b>Toni Grgurić</b> (PMF, Zagreb): <i>Kokristali dvovalentnih metalnih acetilacetonata s 1,4-dijodotetraflorobenzenom povezani halogenskom vezom .....</i>              | 24 |
| <b>Luka Šmital</b> (PMF, Zagreb): <i>Supramolekulski motivi u kompleksima bakra(II) s heksafluoracetilacetonom i odabranim N-piridiloksimima.....</i>                   | 25 |
| <b>Toni Vitasović</b> (PMF, Zagreb): <i>Sinteza i struktura kokristala donepezila s donatorom halogenske veze.....</i>                                                  | 26 |
| <b>Sara Marijan</b> (PMF, Zagreb): <i>Kokristali N-bromsukcinimida s derivatima piridina .....</i>                                                                      | 27 |
| <b>Katarina Belačić i Anja Kostelac</b> (PMF, Zagreb): <i>Priprema humane seril-tRNA-sintetaze i tRNA<sup>Ser</sup> za analizu mistranslacije serinskih kodona.....</i> | 28 |
| <b>Iva Sućec</b> (PMF, Zagreb): <i>Međuovisnost dviju domena Nudix-dipeptidil-peptidaze III iz mahovine Physcomitrella patens .....</i>                                 | 30 |
| <b>Isabella Koprivec i Jasmina Korman</b> (FBF, Zagreb): <i>Uloga topivih adhezijskih molekula sICAM i sVCAM u etiologiji i dijagnostici fibromialgije .....</i>        | 31 |
| <b>Jelena Bijelić</b> (Odjel za kemiju, Osijek): <i>Utjecaj pH vrijednosti na nastanak različitih struktura kompleksnih spojeva kinurenske kiseline s cinkom .....</i>  | 32 |

|                                                                                                                                                                                                                                                                  |    |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| <b>Silvija Šafranko</b> (Odjel za kemiju, Osijek): Djelovanje hidrodinamičkih i termodinamičkih čimbenika te aditiva na taloženje kalcijeva oksalata.....                                                                                                        | 33 |
| <b>Ingrid Gregorović</b> (PMF, Zagreb): Izučavanje halogenskih interakcija u metalo-organskoj sredini.....                                                                                                                                                       | 34 |
| <b>Matea Vitković</b> (PMF, Zagreb): Uloga N-bromftalimida u Povarovljevoj reakciji o-vanilaldimina i acetona.....                                                                                                                                               | 35 |
| <b>Karolina Kolarić</b> (PMF, Zagreb): NO <sub>2</sub> ...NO <sub>2</sub> interakcije u metalo-organskoj sredini, stabilizirajuće ili destabilizirajuće? .....                                                                                                   | 36 |
| <b>Mihael Eraković</b> (PMF, Zagreb): Kompeticija donora halogenske veze u čvrstom stanju.....                                                                                                                                                                   | 37 |
| <b>Tomislav Piteša</b> (PMF, Zagreb): Halogenska veza u kokristalima ditopičnih donora i akceptora.....                                                                                                                                                          | 38 |
| <b>Nives Bebek</b> (FBF, Zagreb): Nukleofugalnost pentafluorfenolata u 80%-tnoj vodenoj otopini etanola .....                                                                                                                                                    | 39 |
| <b>Matej Poletar</b> (PMF, Zagreb): Sintaza novih imidazolnih α-D-manopiranozida kao potencijalnih FimH inhibitora .....                                                                                                                                         | 40 |
| <b>Ida Boček i Petra Roškarić</b> (FKIT, Zagreb): Sintaza, spektroskopska karakterizacija i antioksidativna aktivnost novih hidroksi supstituiranih heteroaromatskih derivata kao potencijalnih senzora za detekciju pH i/ili metalnih kationa u otopinama ..... | 41 |
| <b>Filip Kozlina</b> (FBF, Zagreb): Sintaza i karakterizacija novih derivata cimetine kiseline i primakina.....                                                                                                                                                  | 43 |
| <b>Ines Cazin</b> (FKIT, Zagreb): Flow sintaza kombretastatina A-4 .....                                                                                                                                                                                         | 45 |
| <b>Matej Bubaš</b> (PMF, Zagreb): Proučavanje mikrosolvatacije anilina i hidroksilanilina novom klaster-kontinuum metodom .....                                                                                                                                  | 46 |
| <b>Karla Janeš</b> (PMF, Zagreb): Analiza onečišćenja 7-etiltriptofola pomoću sustava LC-SPE/krio NMR .....                                                                                                                                                      | 47 |
| <b>Petra Švelić i Šejla Zukić</b> (FKIT, Zagreb): Razvoj elektrokemijskog impedancijskog senzora za in situ ocjenu djelotvornosti zaštitnih premaza .....                                                                                                        | 48 |
| <b>Tin Klačić</b> (PMF, Zagreb): Dimerizacija derivata dinitrozobenzena na površini zlata .....                                                                                                                                                                  | 49 |

|                                                                                                                                                                                                                                                                    |    |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| <b>Karla Kelemen</b> (PMF, Zagreb): <i>Uloga konformacijske knjižnice u dizajnu novih receptora: kompleksi s hidrogenmalonatom – potvrda koncepta.....</i>                                                                                                         | 50 |
| <b>Iva Gavran i Josipa Smolković</b> (FKIT, Zagreb): <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> | 51 |
| <b>Martina Guliš</b> (FKIT, Zagreb): <i>Hidrotermalna sinteza i karakterizacija nanočestica cerijeva (IV) oksida.....</i>                                                                                                                                          | 52 |
| <b>Pavo Živković</b> (Odjel za kemiju, Osijek): <i>Upotreba ugljikovih nanočestica u izradi coated wire ISE za upotrebu u analitici tenzida.....</i>                                                                                                               | 53 |
| <b>Martina Perlog i Jasmina Stjepanović</b> (FKIT, Zagreb): <i>Fotokatalitičko djelovanje kompozitnog materijala polipirol/titanijev dioksid .....</i>                                                                                                             | 54 |





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

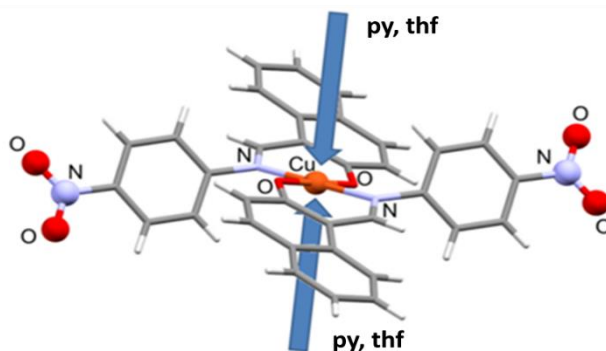
Luka Fotović, Vinko Nemec i Dominik Cinčić

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 prekrizacijom 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 Nemeca, 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

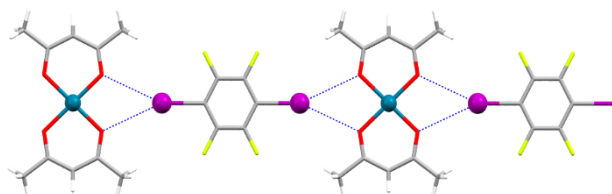
Prirodoslovno-matematički fakultet u Zagrebu, Kemijski odsjek, Horvatovac 102A, Zagreb  
dfory28@gmail.com

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 inženjerstvu, koristeći modificirane diketone, koji se se mogu povezivat 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 acetilacetona 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 lanac  $\text{Zn}(\text{acac})_2(\text{H}_2\text{O})$ , 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

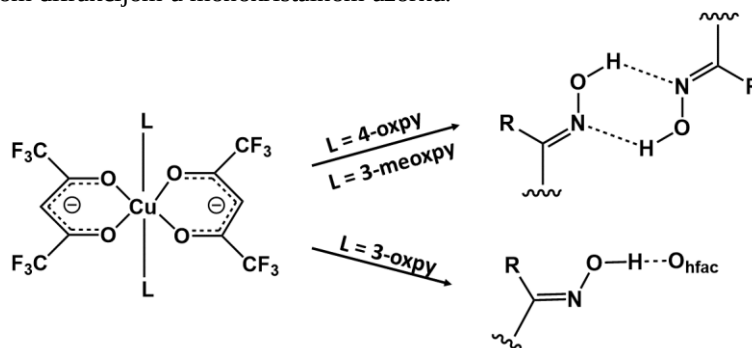
Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Horvátovac 102a, Zagreb

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 donorom halogenske veze

Toni Vitasović, Vinko Nemec i Dominik Cinčić

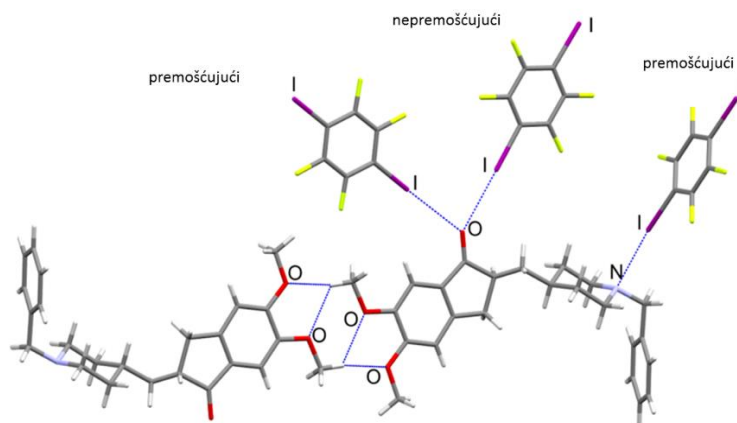
Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek, Horvatovac 102a, 10000 Zagreb

E-mail: [tvitasovic@gmail.com](mailto:tvitasovic@gmail.com)

Donepezil (**dpz**) je farmakološki aktivna tvar, koja pripada skupini inhibitora acetilkolinesteraze 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 donorom 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 zračenja na jediničnom 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-matematičkog fakulteta u Zagrebu pod vodstvom doc. dr. sc. Dominika Cinčića i neposrednim vodstvom Vinka Nemeca, 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.



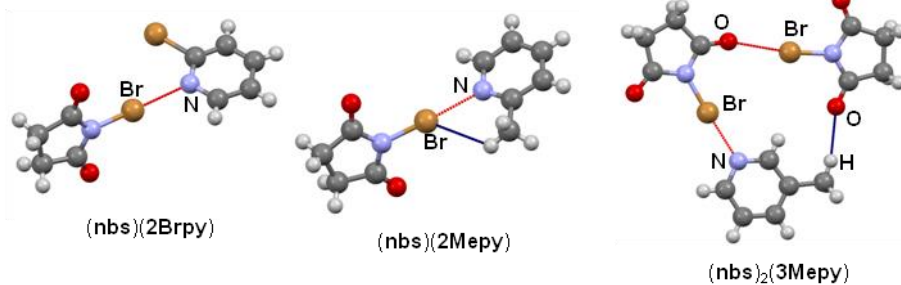
## Kokristali N-brosukcinimida s derivatima piridina

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

N-brosukcinimid (**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  $\text{Br}\cdots\text{N}$  između atoma broma **nbs** i piridinskog dušika. Izmjerene udaljenosti  $\text{Br}\cdots\text{N}$  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  $\text{C}\cdots\text{H}\cdots\text{O}$  vodikovim vezama. U kristalnoj strukturi (**nbs**)(**2Mepy**) diskretni 1:1 kompleksi vezani halogenskom vezom tvore 3D mreže povezane  $\text{C}\cdots\text{H}\cdots\text{O}$  i  $\text{C}\cdots\text{H}\cdots\text{C}$  vodikovim vezama. Također, halogenska veza u molekulskom kompleksu dodatno je potpomognuta vodikovom vezom  $\text{C}\cdots\text{H}\cdots\text{Br}$  između metilne skupine piridina i atoma broma **nbs**. U kokristalu (**nbs**)<sub>2</sub>(**3Mepy**) molekule su povezane s dvije vrste halogenske veze:  $\text{Br}\cdots\text{N}$  halogenskom vezom između molekula **nbs** i piridina, te  $\text{Br}\cdots\text{O}$  vezom između dviju susjednih molekula **nbs**. Diskretni 2:1 kompleksi tvore 2D mreže povezane  $\text{C}\cdots\text{H}\cdots\text{O}$  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 Nemeca, 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 aminokiseline 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 aminokiseline 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>

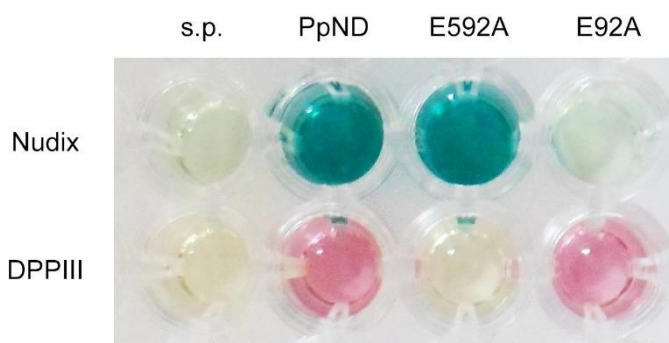
<sup>1</sup>Prirodoslovno matematički fakultet, Horvatovac 102A, Zagreb

<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





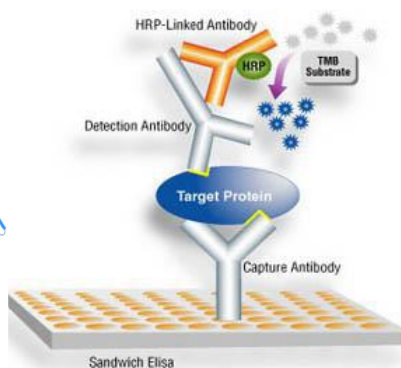
## Uloga topivih adhezijskih molekula sICAM i sVCAM u etiologiji i dijagnostici fibromialgije

Isabella Koprivec i Josipa Korman

Farmaceutsko-biokemijski fakultet, Zagreb

isabellakoprivec@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.

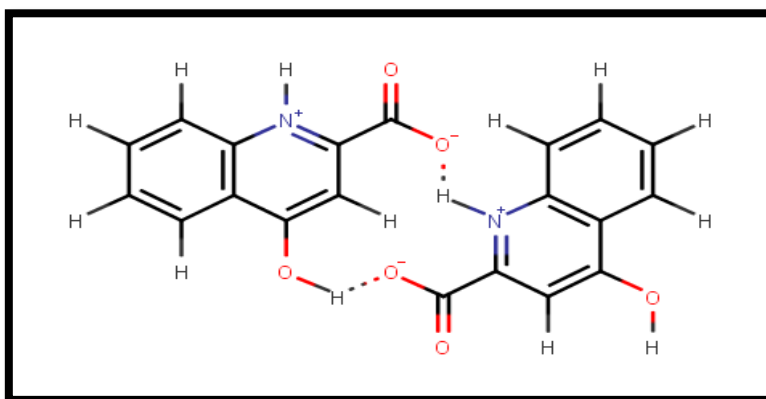




## Utjecaj pH vrijednosti na nastanak različitih struktura kompleksnih spojeva kinurenske kiseline s cinkom

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, Biljeznička cesta 54, 10000 Zagreb, Hrvatska

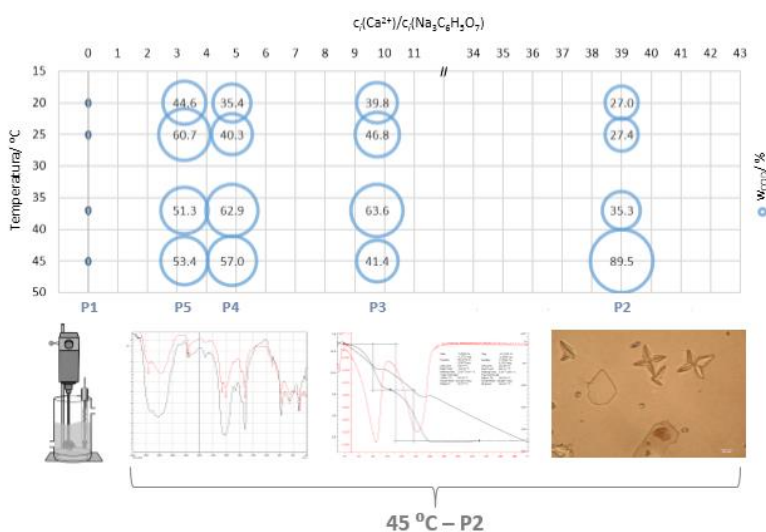
ssafranko@kemija.unios.hr

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.



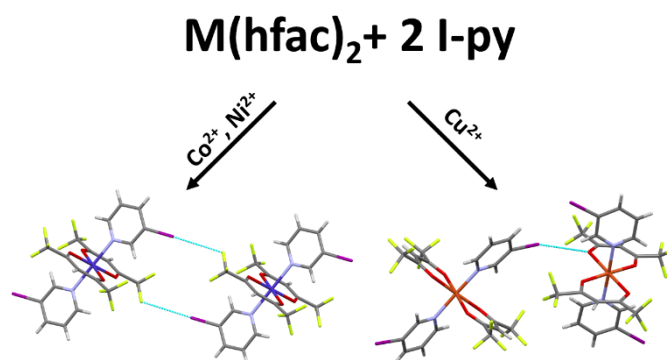
## Izučavanje halogenskih interakcija u metalo-organskoj sredini

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 najtemeljitije 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. Heksafluoroacetilacetnonat 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.



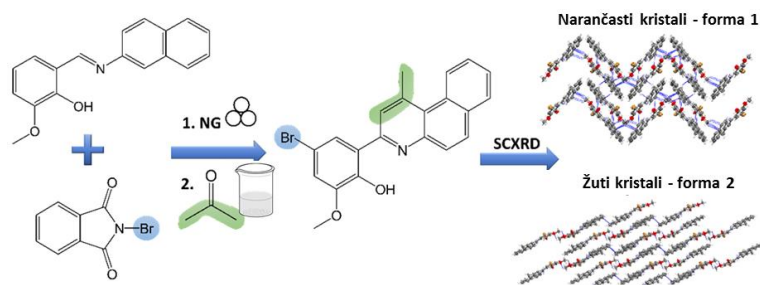
## Uloga N-bromftalimida u Povarovljevoj reakciji o-vanilaldimina i acetona

Matea Vitković, Marija Zbačnik, Katarina Pičuljan i Dominik Cinčić  
Kemijски 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 $\cdots$ O<sub>hidroksi</sub> vodikovim vezama u centrosimetrične dimere, tvoreći motiv  $R_2^2(18)$ , a nadalje se povezuju C–H $\cdots$ C vodikovim vezama u *cik-cak* lance i mreže. U triklinskoj formi molekule su povezane C–H $\cdots$ O<sub>metoksi</sub> vodikovim vezama u centrosimetrične dimere, tvoreći motiv  $R_2^2(6)$ , a nadalje se povezuju C–H $\cdots$ C kontaktima aromatskih sustava u dvije dimenzije.

Rad je izrađen na zavodu za Opću i anorgansku kemiju, na Kemijском 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.

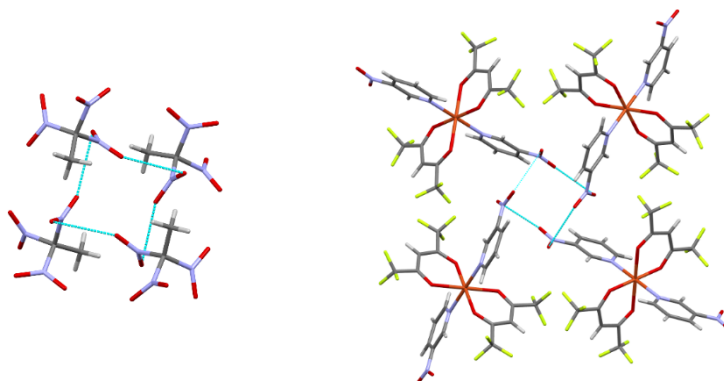


## NO<sub>2</sub>...NO<sub>2</sub> interakcije u metalo-organskoj sredini, stabilizirajuće ili destabilizirajuće?

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 hexafluoroacetilacetonatni 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.



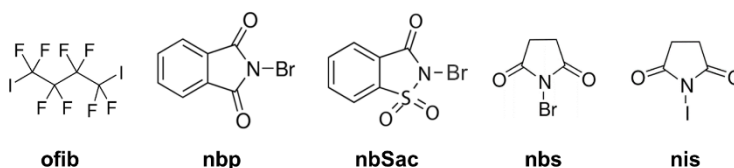
## Kompeticija donora halogenske veze u čvrstom stanju

Mihael Eraković, Tomislav Lež, Vladimir Stilinović, Vinko Nemec, 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 kapljevinom 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 kapljevinom 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. Dobivene 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

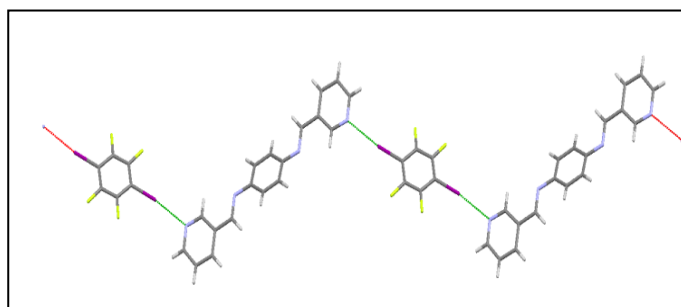
Zavod za fizičku kemiju, Institut Ruđer Bošković, Zagreb

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 ( $d(\text{N}\cdots\text{I})=2.897 \text{ \AA}$ ,  $\phi(\text{C}–\text{I}\cdots\text{N})=173.64^\circ$ ).

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

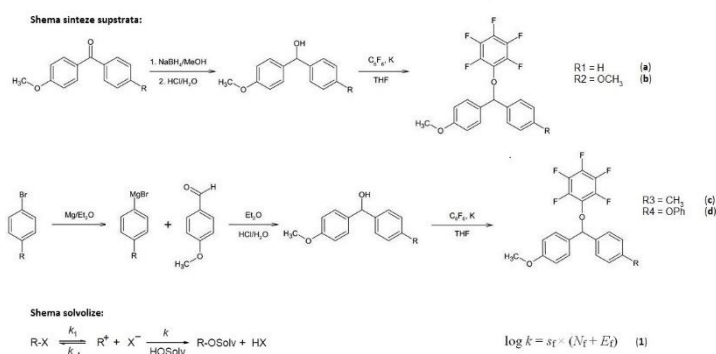
Relativna reaktivnost izlazne skupine, nukleofugalnost, ovisi o prirodi otapala zbog različitih energija solvatacije izlaznih skupina, prirodi karbokationa na koji je vezana izlazna skupina, kao i elektronskim i steričkim interakcijama na reakcijskom središtu. Jednadžba (1) omogućila je stvaranje najopsežnije 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

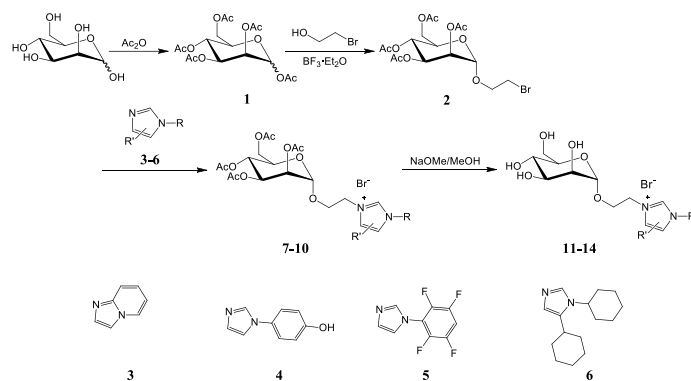
Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek, Zavod za organsku kemiju

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



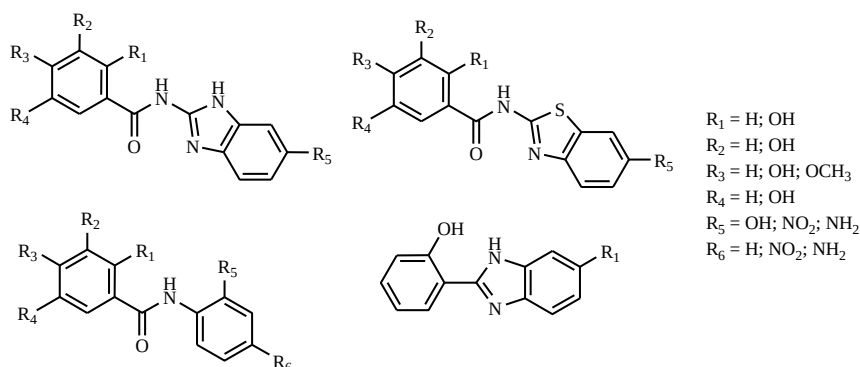


## Sinteza, spektroskopska karakterizacija i antioksidativna aktivnost novih hidroksi supstituiranih heteroaromatskih derivata kao potencijalnih senzora za detekciju pH i/ili metalnih kationa u otopinama

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 vodenjstvom 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

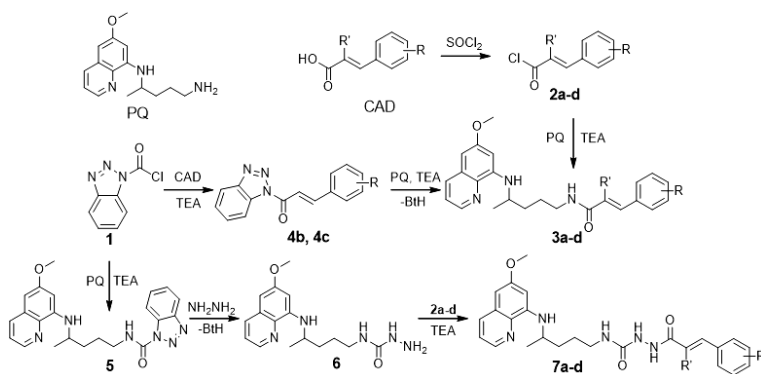
filip.kozlina@student.pharma.hr

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 hidroksiliranim supstituentima na primarnoj amino skupini primakina [2]. S druge strane, cimetine 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 pripremu CAD-primakin amida **3a-d** korištena su dva sintetska puta: prvi uključuje CAD kiselinske kloride **2a-d**, a drugi CAD benzotriazole **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.





- [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@ymail.com

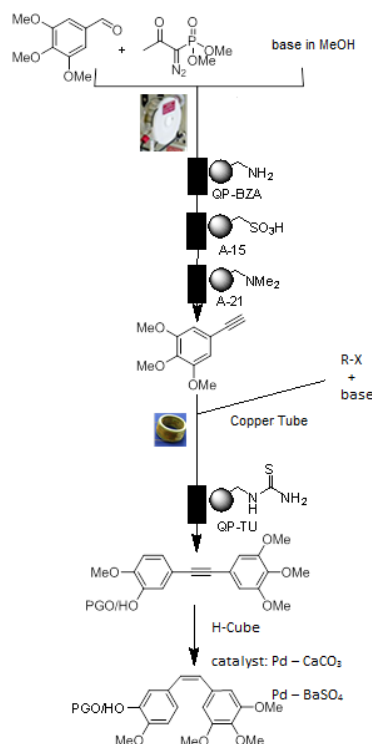
Kombretastatin A-4 (**1**) je prirodni spoj koji inhibira formiranje mikrotubula i pokazuje antiangiogenetsku aktivnost. 1995 godine izoliran je iz južnoafričkog stabla *Combretum caffrum*. [1-2]. Spoj **1** je potencijalni kandidat u liječenju raka. Nedavne studije uključuju razvoj novih derivata tog 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.

Priredeni 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, 1111; b) Baxendale, I. R., *et al*, *Chem. Commun.* **2009**, 1111; 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

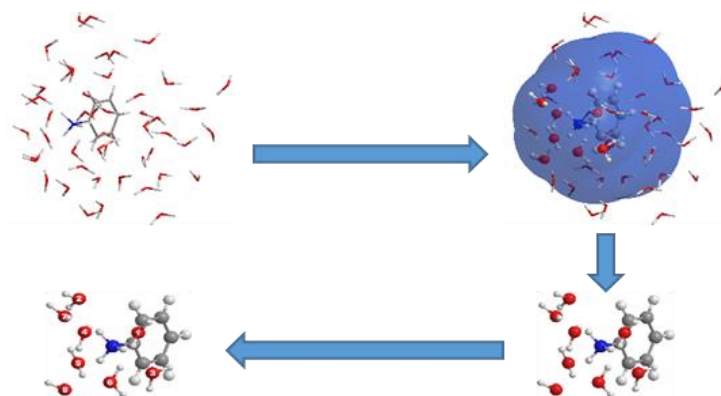
Matej Bubaš

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/ $\omega$ B97XD/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-etiltriptofola pomoću sustava LC-SPE/krio NMR

Karla Janeš

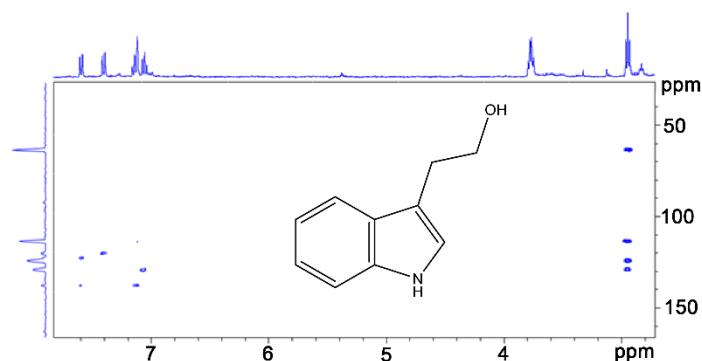
Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek, Horvatovac 102a, Zagreb

karla.janes@gmail.com

Polazna sirovina za sintezu Etodolaca, nesteroidnog protuupalnog lijeka, je 7-etiltriptofol, 2-(7-etil-1H-indol-3-il) etanol. Ovisno o putu sinteze 7-etiltriptofola 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-etiltriptofola. 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. multitrapping) 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

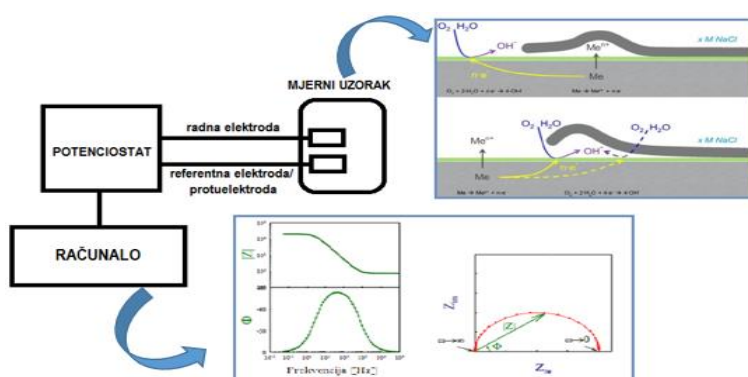
Petra.svelic79@gmail.com, sejla.zukic94@gmail.com

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.





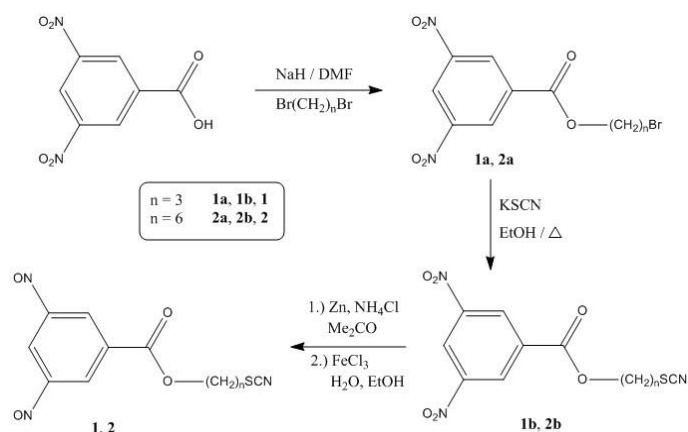
## Dimerizacija derivata dinitrozobenzena na površini zlata

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 molekulski 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 molekulskih slojeva. Rezultati ovog rada potvrđuju da su istraženi derivati dinitrozobenzena prikladni molekulski 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.

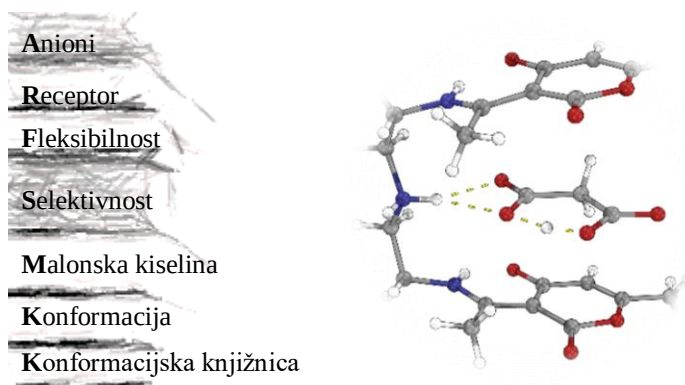


## Uloga konformacijske knjižnice u dizajnu novih receptora: kompleksi s hidrogenmalonatom – potvrda koncepta

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

Vezanje 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 vezno mjesto za anion, a ponekad se i samoudružuju u složenije vrste radi boljeg vezanja aniona. [3,4] Upravo zbog svoje prilagodljivosti, fleksibilni receptori imaju mogućnost prepoznavanja i vezanja više vrsta aniona, čak i u čvrstom stanju. [5,6]

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



- [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-etilendioksitiofen)/TiO<sub>2</sub> imobiliziranog na lebdećem pepelu i ispitivanje njegove učinkovitosti pod simuliranim sunčevim zračenjem

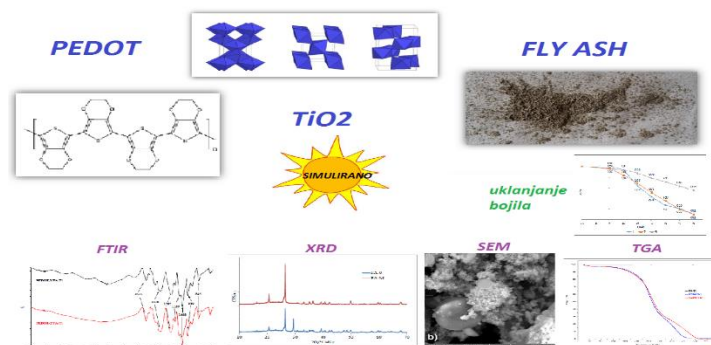
Iva Gavran, Josipa Smolković

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-etilendioksitiofen) (PEDOT). Elektrovodljivi polimeri imaju nižu energiju zabranjene zone te je energija vidljivog zračenja dovoljna da izbije elektrone iz valentne u vodljivu vrpce 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-etilendioksitiofen)/lebdeći pepeo-TiO<sub>2</sub> fotokatalizatora provedena je kemijskom oksidacijskom polimerizacijom 3,4-etilendioksitiofen (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. Pratilo 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 Katančiča.



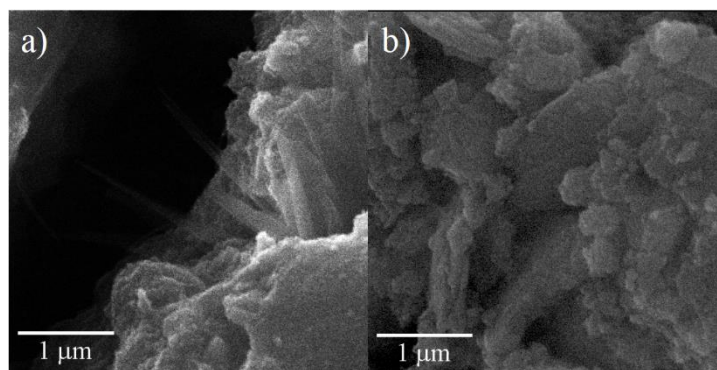


## Hidrotermalna sinteza i karakterizacija nanočestica cerijeva (IV) oksida

Martina Guliš

Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Sveučilište u Zagrebu  
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

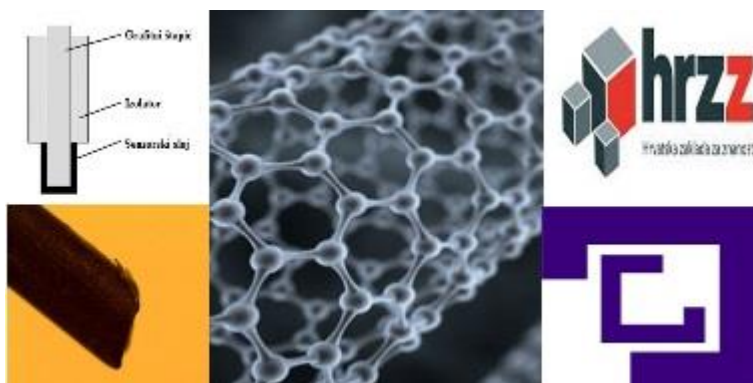
Pavo Živković

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

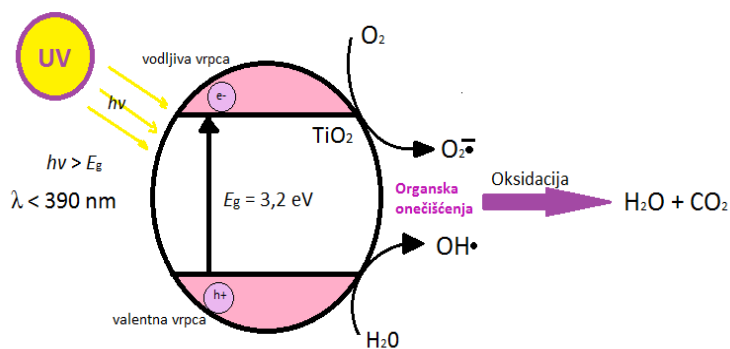
mperlog@fkit.hr, jasmina.stjepa@gmail.com

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 vidljivom 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.

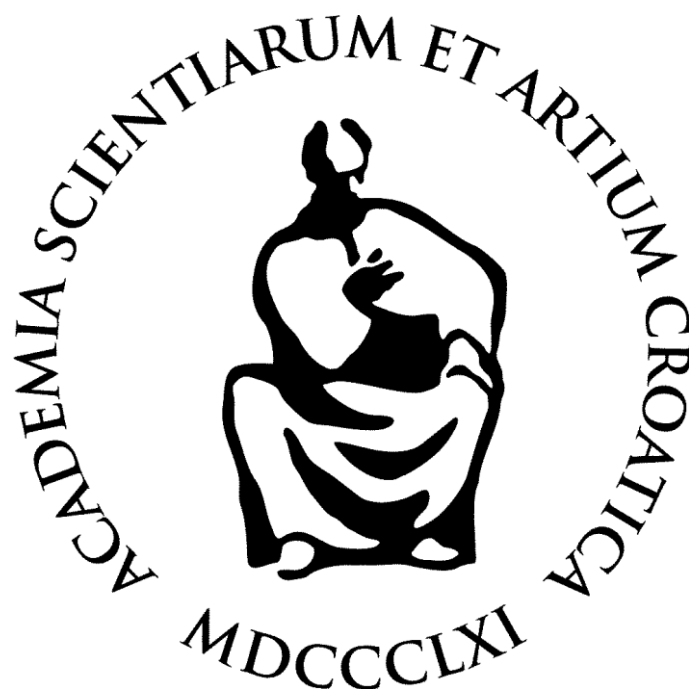




**SPONZOR**



## DONATORI





**ATLANTIC**  
G R U P A

STUDENT  
SKI ZBOR  
SVEUČILIŠTA  
U ZAGREBU