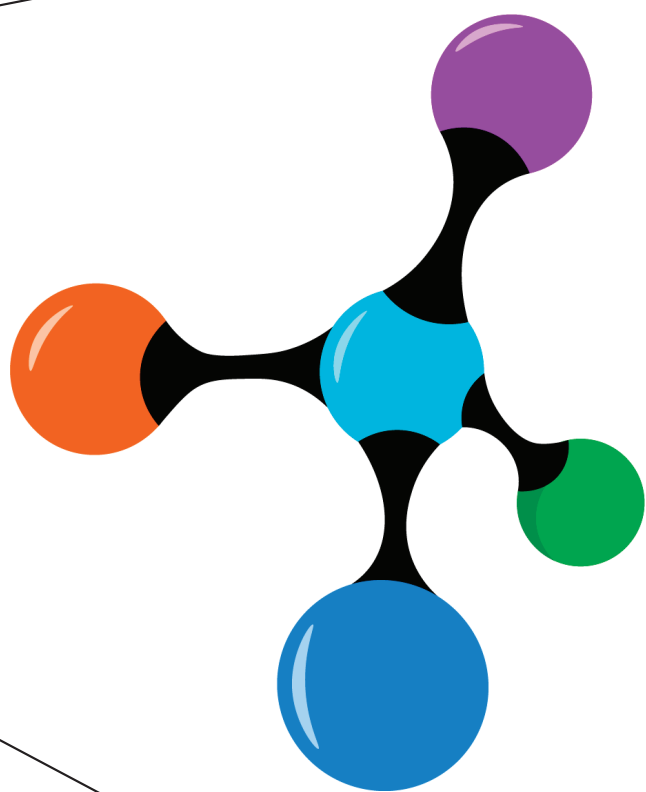




**SISK**<sup>4</sup> 2017.  
Simpozij Studenata Kemičara  
28. listopada 2017.

Knjiga  
sažetaka

## **ORGANIZACIJSKI ODBOR**

Tamara Rinkovec, predsjednica

Nea Baus

Kristin Becker

Mihael Eraković

Demian Kalebić

Toni Lijić

Matea Sršen

Petar Štrbac

## **SURADNICI**

Sara Marijan

Jerko Meštrović

Gregor Talajić

Edi Topić

Andrea Usenik

## **SAVJETNICI**

dr. sc. Dominik Cinčić, doc.

dr. sc. Vladimir Stilinović, doc.

Danijel Namjesnik, dipl. ing.

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

Kristina Smokrović, mag. chem.

Nikola Bedeković, mag. chem.

Tomislav Piteša

Milenko Korica, mag. educ. chem.

## ORGANIZATOR



Studentska sekcija Hrvatskog kemijskog društva

## POKROVITELJI



Hrvatsko kemijsko društvo



Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek

## **UREDNICI**

Mihael Eraković  
Demian Kalebić  
Tamara Rinkovec  
Petar Štrbac  
Gregor Talajić  
Andrea Usenik

## **TEKST PRIPREMILI**

AUTORI, koji su odgovorni za tekst sažetaka

## **IZDAVAČI**

Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek  
Hrvatsko kemijsko društvo

## **SPONZORI**

PLIVA Hrvatska d.o.o.  
Hrvatska akademija znanosti i umjetnosti  
Genos d.o.o.  
Alfa d.d.

## TABLICA SADRŽAJA

|                                                       |           |
|-------------------------------------------------------|-----------|
| <i>POKROVITELJI .....</i>                             | <i>3</i>  |
| <i>RIJEČ PREDSEDNICE ORGANIZACIJSKOG ODBORA .....</i> | <i>6</i>  |
| <i>RIJEČ PROČELNIKA SSHKD-a .....</i>                 | <i>7</i>  |
| <i>PROGRAM.....</i>                                   | <i>8</i>  |
| <i>PLENARNA PREDAVANJA.....</i>                       | <i>10</i> |
| <i>SAŽECI.....</i>                                    | <i>11</i> |
| <i>USMENA IZLAGANJA.....</i>                          | <i>12</i> |
| <i>POSTERSKA IZLAGANJA .....</i>                      | <i>33</i> |

## **RIJEČ PREDSEDNICE ORGANIZACIJSKOG ODBORA**

Simpozij studenata kemičara projekt je Studentske sekcije Hrvatskog kemijskog društva, a glavna mu je ideja okupiti studente koji se bave znanstveno - istraživačkim radom u području kemije. Također cilj je postići aktivnu suradnju i komunikaciju između studenata s različitih Sveučilišta, kako na nacionalnoj, tako i na međunarodnoj razini. 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. Prethodni Simpoziji postigli su veliki uspjeh te su se pokazali kao odlična mogućnost za mlade i ambiciozne znanstvenike da prezentiraju svoja područja interesa široj publici što je dodatno potvrđeno dodjelom Rektorove nagrade za društveno koristan rad u akademskoj i široj zajednici Organizacijskom odboru.

Ovogodišnji četvrti Simpozij sastoji se od četiri plenarna predavanja, 20 izlaganja te posterskih priopćenja, a sudjeluje više od 200 studenata kemičara s raznih hrvatskih fakulteta (PMF, FBF, FKIT, PBF, Odjel za kemiju u Osijeku, MEF, Odjel za Biotehnologiju u Rijeci). Plenarnim predavanjima cilj nam je pokazati raznovrsnost i mogućnosti koje mladi kemičari imaju u znanosti i industriji iz perspektive studenata doktorskih studija ili iskusnih znanstvenika. Ovim putem bih se željela zahvaliti svim nastavnicima Kemijskog odsjeka PMF-a u Zagrebu i članovima Hrvatskog kemijskog društva koji su prepoznali važnost Simpozija te omogućili i olakšali organizaciju, a također i svim sudionicima na golemom interesu. Potencijal Simpozija prepoznale su i tvrtke (Pliva, Alfa, Genos) te akademske institucije (Kemijski odsjek PMF-a u Zagrebu, Hrvatska Akademija Znanosti i Umjetnosti), bez čije potpore ne bi bilo moguće uspješno organizirati Simpozij.

Ove godine na Simpoziju sadržaj smo obogatili posterskim priopćenjima kako bi što većem broju studenata omogućili aktivno sudjelovanje na Simpoziju s ciljem poticanja komunikacije i rasprave među mladim znanstvenicima. Nadam se da će tradicija SiSK-a nastaviti i dalje i da će biti na dobrobit i ponos znanstvenoj zajednici u Hrvatskoj i šire.

Tamara Rinkovec

Predsjednica organizacijskog odbora

## RIJEČ PROČELNIKA SSHKD-a

Dragi studenti, profesori i ostali sudionici,

ove godine imamo priliku prisustvovati četvrtom po redu Simpoziju studenata kemičara. Iznimno mi je drago da ova hvalevrijedna manifestacija pomalo prelazi u tradicionalan projekt Studentske sekcije Hrvatskog kemijskog društva. Simpozij predstavlja izvrsnu priliku mladim znanstvenicima da razmijene ideje i prezentiraju svoj istraživački rad pred stručnom publikom te tako steknu vrijedna iskustva za početak svoje znanstvene karijere.

Također, jedan od ciljeva Simpozija je povezivanje mladih znanstvenika iz cijele Hrvatske i regije te poticanje međunarodne suradnje i izmjene ideja. Sa zadovoljstvom mogu izjaviti da Simpozij iz godine u godinu neprestano raste, kako po broju sudionika, tako i po broju izlagača, te predstavlja najveći i najvrijedniji projekt Studentske sekcije Hrvatskog kemijskog društva. Studentska sekcija bavi se i popularizacijom znanosti među djecom vrtićke dobi te učenicima osnovnih i srednjih škola putem projekata Znanstvene čarolije i Popularizacijski odred Entropija.

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

Mihael Eraković

Pročelnik Studentske sekcije Hrvatskog kemijskog društva

## PROGRAM

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

| <b>PLENARNA PREDAVANJA:</b>                  |                                                                                                                                                                                        |
|----------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>A2 (predsjedavajuća: Tamara Rinkovec)</b> |                                                                                                                                                                                        |
| 10:20-10:50                                  | <b>Ivica Cvrtila</b> (University of Groningen, Groningen)<br><i>Acilni hidrazoni, tioli i disulfidi u kemiji sustavâ</i>                                                               |
| 10:50-11:20                                  | <b>Marin Sapunar</b> (Institut Ruđer Bošković, Zagreb):<br><i>Dinamika molekula u pobuđenim stanjima</i>                                                                               |
| 11:20-11:30                                  | <b>KRATKA PAUZA</b>                                                                                                                                                                    |
| 11:30-12:00                                  | <b>Iva Tolić</b> (Institut Ruđer Bošković, Zagreb):<br><i>Per aspera ad astra</i>                                                                                                      |
| 12:00-12:30                                  | <b>Aleksandar Danilovski</b> (Xellia, Zagreb):<br><i>Slojevitost komercijalizacije znanstvene ideje i nužnost kontinuirane edukacije - prednosti nedostataka i nedostaci prednosti</i> |
| 12:30-13:00                                  | <b>„COFFEE BREAK“</b>                                                                                                                                                                  |

| <b>USMENA IZLAGANJA:</b> |                                                                                                            |                                                                                                                                                                                       |
|--------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|                          | <b>A1 (predsjedavajući: Gregor Talajić)</b>                                                                | <b>A2 (predsjedavajući: Demian Kalebić)</b>                                                                                                                                           |
| 13:00-13:15              | <b>Marin Liović</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Imini izvedeni iz 2,4-diklorbenzaldehida</i>                      | <b>Lucija Hok</b> (FBF, Zagreb):<br><i>Mehanizam reakcije kloriranja 5-fluorouracila i ekotoksikološka analiza kloriranih produkata</i>                                               |
| 13:15-13:30              | <b>Grazia Davidović</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Sirtuin 3 i hiperoksija: saveznici u borbi protiv tumora</i>  | <b>Ina Erceg</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Početni stadiji biomineralizacije: istraživanje nastajanja amorfnog kalcijevog fosfata metodama raspršenja svjetlosti i laserske difrakcije</i> |
| 13:30-13:45              | <b>Mateja Drulak</b> (Odjel za kemiju, Osijek):<br><i>Kompleksi bakra s histidin dipeptidom karnozinom</i> | <b>Barbara Radovani</b> (Odjel za biotehnologiju, Rijeka):<br><i>Konjugati porfirina u fotodinamičkoj terapiji</i>                                                                    |
| 13:45-14:00              | <b>Stjepan Džalto</b> (FKIT, Zagreb):<br><i>Studentska Sekcija HDKI-ja</i>                                 | <b>Marija Cvetnić</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Utjecaj solvatacije na kompleksiranje kationa alkalijskih metala s ketonskim derivatom kaliks[4]arena</i>                                  |
| 14:00-15:00              | <b>„LUNCH BREAK“</b>                                                                                       |                                                                                                                                                                                       |

|             |                                                                                                                                                                                                         |                                                                                                                                                                                              |
|-------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 14:00-18:00 | <b>POSTERSKA SEKCIJA</b>                                                                                                                                                                                |                                                                                                                                                                                              |
|             | <b>A1 (predsjedavajuća: Kristin Becker)</b>                                                                                                                                                             | <b>A2 (predsjedavajuća: Andrea Usenik)</b>                                                                                                                                                   |
| 15:00-15:15 | <b>Rok Ister</b> (Medicinski fakultet, Zagreb):<br><i>In silico probir derivata kumarina i L-askorbinske kiseline na histonskoj demetilazi LSD1 — pametni dizajn novih kemoterapeutika</i>              | <b>Patrizia Janković</b> (Odjel za biotehnologiju, Rijeka):<br><i>Funkcionalne skupine fluorescentnih boja za konjugaciju s proteinima</i>                                                   |
| 15:15-15:30 | <b>Vedran Vuković</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Računalni probir derivata azitromicina kao potencijalnih inhibitora bakterijskih ribosoma</i>                                                                | <b>Mateja Pisačić</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Kinetika dimerizacije 2-nitrozopiridina i njegovih derivata u čvrstom stanju</i>                                                                  |
| 15:30-15:45 | <b>Filip Car i Ivana Čevd</b> (FKIT, Zagreb):<br><i>Ispitivanje fizikalno-kemijskih svojstava polimera koji se koriste u 3D tiskanju</i>                                                                | <b>Silvija Šafranko</b> (Odjel za kemiju, Osijek):<br><i>Taloženje kalcijeva oksalata u uvjetima hiperoksalurije</i>                                                                         |
| 15:45-16:00 | <b>Nikolina Lešić</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Nanočestice cerijeva dioksida - sinteza, karakterizacija i adsorpcija polielektrolita</i>                                                                    | <b>Matea Tokić</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Supramolekulski sustavi s amfifilnim derivatom <math>\beta</math>-ciklodeskrina - kompleksiranje s adamantanskim gvanidinima i interakcije s DNA</i> |
| 16:00-16:20 | „COFFEE BREAK“                                                                                                                                                                                          |                                                                                                                                                                                              |
|             | <b>A1 (predsjedavajuća: Matea Sršen)</b>                                                                                                                                                                |                                                                                                                                                                                              |
| 16:20-16:35 | <b>Željko Rapljenović i Luka Vanjur</b> (PMF, Zagreb):<br><i>Termoodskočni materijali i anomalni fazni prijelazi</i>                                                                                    |                                                                                                                                                                                              |
| 16:35-16:50 | <b>Katarina Zirdum</b> (Odjel za biotehnologiju, Rijeka):<br><i>Sinteza borovog kompleksa dipirometena za konjugaciju s proteinima</i>                                                                  |                                                                                                                                                                                              |
| 16:50-17:05 | <b>Ana Dobrinčić i Lucija Tuđen</b> (PBF, Zagreb):<br><i>Učinkovitost različitih postupaka ekstrakcije lista masline obzirom na koncentraciju ukupnih fenola i antioksidacijski kapacitet ekstrakta</i> |                                                                                                                                                                                              |
| 17:05-17:20 | <b>Zvonimir Mlinarić</b> (FBF, Zagreb):<br><i>Sinteza i karakterizacija novih hibridnih derivata primakina i vorinostata</i>                                                                            |                                                                                                                                                                                              |

|                             |                                                              |
|-----------------------------|--------------------------------------------------------------|
| <b>ZAVRŠNICA SIMPOZIJA:</b> |                                                              |
| 17:25                       | <b>Popularizacijski odred <i>Entropija</i></b> (PMF, Zagreb) |

# ***PLENARNA PREDAVANJA***

**Ivica Cvrtila** (University of Groningen, Groningen)  
*Acilni hidrazoni, tioli i disulfidi u kemiji sustavâ*

**Marin Sapunar** (Institut Ruđer Bošković, Zagreb):  
*Dinamika molekula u pobuđenim stanjima*

**Iva Tolić** (Institut Ruđer Bošković, Zagreb):  
*Per aspera ad astra*

**Aleksandar Danilovski** (Xellia, Zagreb):  
*Slojevitost komercijalizacije znanstvene ideje i nužnost kontinuirane  
edukacije - prednosti nedostataka i nedostatci prednosti*

***SAŽECI***

# ***USMENA***

# ***IZLAGANJA***

## Imini izvedeni iz 2,4-diklorbenzaldehida

Marin Liović\*, Vinko Nemec, Dominik Cinčić i Vladimir Stilinović

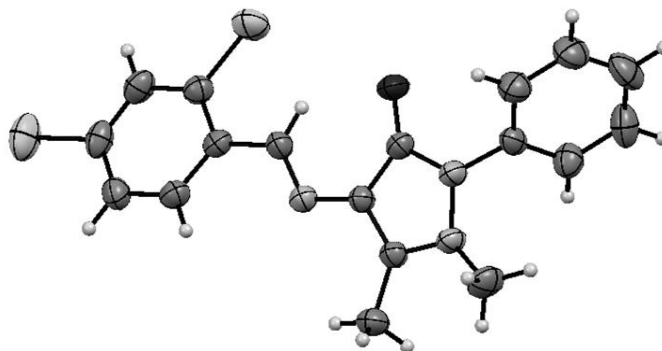
Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Horvatovac 102a, 10000 Zagreb

\*marin.liovic1@gmail.com

Imini su spojevi koji zbog lake sinteze (kondenzacijom aldehidâ s primarnim aminima) i velike modularnosti privlače sve veću pozornost kao gradivni blokovi u supramolekularnoj kemiji. U ovome je istraživanju pripremljen niz imina izvedenih iz 2,4-diklorbenzaldehida (**24clbzal**) i različitih aminâ, budući da bi takovi imini mogli poslužiti kao dobri modelni spojevi za izučavanje preferencije donora halogenske veze prema različitim akceptorskim atomima (klor, iminski dušik ili dodatni heteroatom aminske podjedinice).

Jedanaest imina pripremljeno je sintezom iz metanolne otopine. Od njih pet pripremljeni su jedinični kristali dovoljne kvalitete za difrakcijske pokuse, te su im određene kristalne i molekulske strukture. Ustanovljeno je da su dominantne interakcije u četiri kristalne strukture slabe vodikove veze C–H⋯Cl, dok su u jednom slučaju (imin izveden iz *p*-anisidi-na) prisutni međuhalogenski kontakti tipa I. Ova opažanja ukazuju na to da su atomi klora iminima ovoga niza potencijalni akseptori halogenske veze.

Spojeve kojima je određena kristalna struktura pokušalo se pripremiti i mehanokemijskim putem mljevenjem ekvimolarne količine reaktanata u kugličnom mlinu s katalitičkom količinom etanola. Uspješnost mehanokemijske sinteze praćena je difrakcijom na polikristalnom uzorku i usporedbom s difraktogramima izračunatima temeljem određene kristalne strukture.



Slika 1. ORTEP-prikaz kristalne strukture Schiffove baze **24clbzal** i 4-aminoantipirina (**4amapir**) elipsoidima pomaka prikazanih s vjerojatnošću 50%

## Sirtuin 3 i hiperoksija: saveznici u borbi protiv tumora

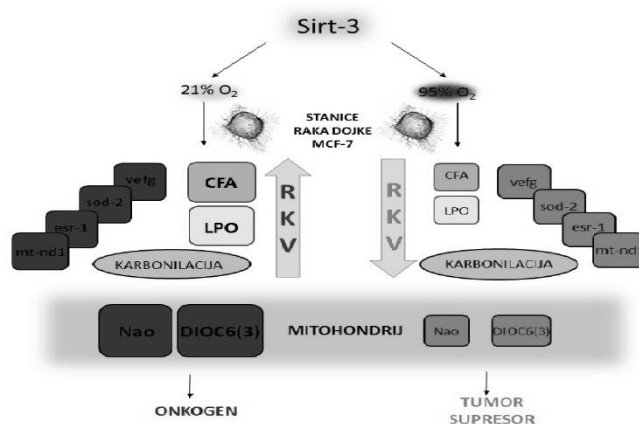
Grazia Davidović

Prirodoslovno-matematički fakultete, Biološki odsjek, Zagreb

Institut Ruđer Bošković, Zavod za molekularnu medicinu, Zagreb

grazia.davidovic@gmail.com

Oksidacijski stres i visoke razine reaktivnih kisikovih vrsta (RKV) izazivaju oštećenja DNA i genomsku nestabilnost, koje dovode do promjene staničnog metabolizma i u konačnici do gubitka kontrole staničnog ciklusa. Takvi uvjeti podržavaju stalni rast i proliferaciju, glavno obilježje tumorskih stanica. Iako se dugo raspravljalo o djelovanju čistog kisika (hiperoksije) kao promotora malignih bolesti, danas se hiperoksija koristi kao rutinska terapija u liječenju upravo takvih oboljenja. Sirtuin 3 (Sirt-3) je glavna mitohondrijska deacetilaza koja učinkovito sudjeluje u održavanju energetske homeostaze u stanicama. Nadalje, Sirt-3 ima ulogu onkogen, ali i tumor supresora u tumorskim stanicama, no nije razjašnjeno pod kojim uvjetima dolazi do promjene njegovog djelovanja. U ovom istraživanju ispitali smo djelovanje Sirt-3 na proliferaciju, preživljenje, rast i metaboličku aktivnost, te oksidacijski/antioksidacijski status i mitohondrijske funkcije MCF-7 stanice raka dojke u normoksiji i nakon izlaganja hiperoksiji. Utvrdili smo da u uvjetima normoksije Sirt-3 djeluje kao onkogen, te potiče oksidacijski stres i neke druge faktore odgovorne za tumorski rast, dok u uvjetima hiperoksije Sirt-3 ima tumor supresorsko djelovanje jer smanjuje tumorske karakteristike MCF-7 stanice raka dojke. Ovaj se učinak vjerojatno ostvaruje putem reprogramiranja staničnog metabolizma s aerobne glikolize na oksidacijsku fosforilaciju u mitohondrijima i na taj način tumorska stanica djelomično gubi svoja agresivna obilježja. Ovim smo istraživanjem pokazali da Sirt-3 regulira više staničnih procesa ključnih za proliferaciju i metastaziranje tumorskih stanica, te da hiperoksija potiče njegovo djelovanje kao tumor supresora. Navedene karakteristike čine ga potencijalnom terapijskom metom u kombinaciji s hiperoksijom u liječenju malignih oboljenja.



## Kompleksi bakra s histidin dipeptidom karnozinom

Mateja Drulak, Anamarija Stanković, Martina Medvidović – Kosanović, Milan Sak Bosnar

Odjel za kemiju, Cara Hadrijana 8/A, 31000 Osijek, Hrvatska

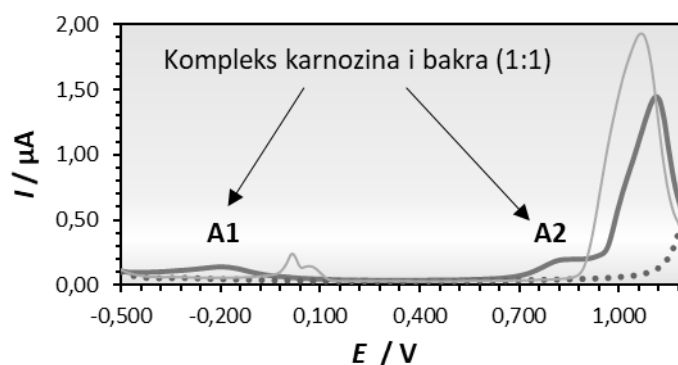
mateja.drulak@gmail.com

L-Karnozin ( $\beta$ -alanin-L-histidin) je dipeptid sastavljen od dvije aminokiseline  $\beta$ -alanina i L-histidina. U visokoj koncentraciji nalazi se u skeletnim mišićima i središnjem živčanom sustavu kralježaka [1,2], također ima i različite fiziološke uloge: poboljšava sposobnost učenja i smanjuje zamor mišića zbog svojih antioksidativnih učinaka [3], ima i puferske kapacitete zbog prisutnosti imidazolnog prstena. U organizmu još obavlja i čitav niz bioloških funkcija: anti-glikaciju, efekte protiv starenja, keliranje dvovalentnih metalnih kationa [4-6], a djeluje i kao sredstvo za uklanjanje reaktivnih kisikovih vrsta [7].

U interakciji s metalnim ionima, karnozin je polidentatni ligand koji nudi šest potencijalnih veznih mjesta: dva imidazolna dušika, jednu karboksilnu i jednu amino skupinu, te peptidnu vezu [8].

Cilj ovog istraživanja bio je proučiti elektrokemijska svojstva karnozina, L-histidina i  $\beta$ -alanina, te njihovo kompleksiranje s dvovalentnim bakrom. Za izradu ovog rada korištene su sljedeće metode: potenciometrija, ciklička i diferencijalna pulsna voltametrija te UV/VIS spektroskopija. Dobiveni rezultati ukazuju da  $\beta$ -alanin, L-histidin i karnozin nisu elektroaktivni pri pH = 10. Aminokiselina  $\beta$ -alanin ne kompleksira s dvovalentnim bakrom, dok L-histidin i karnozin kompleksiraju u omjeru 1:1.

Ovaj rad je izrađen na Odjelu za kemiju Sveučilišta J.J. Strossmayera u Osijeku pod mentorstvom prof. dr. sc. Milana Sak Bosnara i doc. dr. sc. Martine Medvidović – Kosanović.



[1] A.A. Boldyrev, Carnosine and Oxidative Stress in Cells and Tissues; Nova Science Publisher, USA, (2007)

[2] F. Gaunitz and A.R. Hipkiss, Amino Acids, 43 (2012) 135

[3] L. Alpsoy, G. Akcayoglu and H. Sahin, Hum. Exp. Toxicol., 30 (2011) 1979

[4] C. Sale, B. Saunders and R.C. Harris, Amino Acids, 39 (2010) 321

[5] A.A. Boldyrev, G. Aldini and W. Derave, Physiol., 93 (2013) 1803

[6] A. Guiotto, A. Calderan, P. Ruzza and G. Borin, Curr. Med. Chem., 12 (2005b) 2293.

[7] K.M. Chan and E.A. Decker Food Sci. Nutr., 34 (1994) 403

[8] E. J. Baran, Biochemistry (Moscow), 65 (2000) 789.

## Studentska sekcija HDKI-ja

Stjepan Džalto

Hrvatsko društvo kemijskih inženjera i tehnologa (HDKI), Zagreb  
sdzalto@fkit.hr

Studentska sekcija osnovana je 21. ožujka 2017. i jedna je od osam sekcija koje djeluju u sklopu HDKI-ja. Mnogobrojnim projektima, Studentska sekcija u kratkom je roku postala najaktivnija sekcija Društva. Sekcija okuplja studente Fakulteta kemijskog inženjerstva i tehnologije u Zagrebu s ciljem poticanja pozitivnih promjena u inženjerskoj zajednici. Pri tome su na suradnju pozvani studenti srodnih fakulteta poput PMF-a i PBF-a u Zagrebu, KTF-a u Splitu i PTF-a u Osijeku. Predsjednik Sekcije je Stjepan Džalto, osoba odgovorna za projekte je Nevena Milčić, a za službeni časopis *Reaktor ideja* zadužena je Ines Topalović. U sklopu programa Sekcije, do sada su održana tri predavanja (*Kako napisati projekt?*; *FKIT-ovci na razmjenama studenata*; *Što nakon faksa?*) i izdana tri broja *Reaktora ideja*. Časopis se do sada objavljivao isključivo u elektroničkom obliku, a broji oko 800 čitatelja mjesečno u Hrvatskoj i inozemstvu. U akademskoj godini 2017./18., cilj je nastavak objavljivanja i tiskanje časopisa, a za to je osiguran tek dio potrebnih sredstava. Sekcija je organizirala i Sportski dan FKIT-a, provodi i brojne druge aktivnosti poput Buddy projekta za savjetovanje bruća, instrukcije za djecu iz dječjih domova, održavanje kemijsko-inženjerskog case study natjecanja, itd. Stoga pozivamo sve zainteresirane da se jave putem Facebook stranice Studentske sekcije ili mailom, uključe u rad i tako daju svoj doprinos za boljitak čitave znanstvene zajednice.



## Mehanizam reakcije kloriranja 5-fluorouracila i ekotoksikološka analiza kloriranih produkata

Lucija Hok<sup>1</sup>, Tana Tandarić<sup>2</sup>, Davor Šakić<sup>1</sup>, Valerije Vrčeka<sup>1</sup>

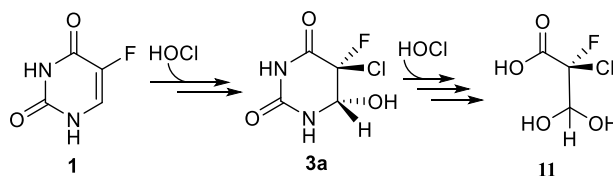
Farmaceutsko-biokemijski fakultet, Zagreb1

Institut Ruđer Bošković, Zagreb2

lucija.hok@gmail.com

Sve veća proizvodnja i potrošnja farmaceutika posljednjih nekoliko desetljeća dovela je do akumuliranja lijekova i njihovih metabolita u okolišu. Pojava lijekova u okolišu postala je goruća ekološka tema. Jedan od takvih farmaceutika je 5-fluorouracil, citostatik koji se nalazi u okolišu u koncentracijama i do 92 ng/L. U ovom je radu, kombinacijom eksperimentalnih i teorijskih metoda, predložen reakcijski mehanizam kloriranja 5-FU **1** hipoklorastom kiselinom. Pokazano je da kinetički i termodinamički favorizirani *trans*-klorhidrin **3a** nastaje preko iminskog međuprodukta, uz energetske barijere od 82.90 kJ/mol i 40.07 kJ/mol. Daljnje kloriranje se odvija u N1-položaju preko N1-anionskog međuprodukta uz energetske barijeru koja iznosi 85.43 kJ/mol. Konačni produkt kloriranja je geminalni diol **11**. Strukturne karakteristike produkata i međuprodukata određene su korištenjem <sup>1</sup>H, <sup>19</sup>F i <sup>13</sup>C NMR spektroskopije te spektrometrije masa. Reakcijski mehanizam istražen je pomoću kvantno-kemijskih metoda. Korišten je B3LYP funkcional uz 6-31+G(d) bazni skup. Solvatacijski efekti opisani su implicitnim SMD solvatacijskim modelom te korištenjem optimalnog broja eksplicitnih molekula otapala (H<sub>2</sub>O). Računalno dobiveni podaci u skladu su s eksperimentalnim opažanjima. Ekotoksikološkom analizom na testnom vodenom organizmu *Daphnia magna* utvrđeno je da je klorhidrin **3a** manje toksičan, a produkt **11** više toksičan od ishodne supstancije 5-FU. Dobiveni rezultati ključni su za poznavanje ekološke sudbine 5-FU i predlaganje novih, manje toksičnih načina obrade otpadnih voda.

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



## Početni stadiji biomineralizacije: istraživanje nastajanja amornog kalcijevog fosfata metodama raspršenja svjetlosti i laserske difrakcije

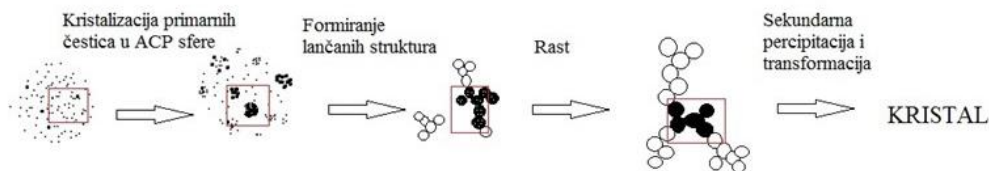
Ina Erceg

Prirodoslovno-matematički fakultet, Zagreb  
ercegina@gmail.com

Amorfni kalcijev fosfat (ACP) prva je faza koja nastaje pri taloženju kalcijevih fosfata (CaP) *in vivo* i *in vitro*. Nastajanje ACP-a je u osnovi agregacijski proces. Osnovna strukturalna jedinica ACP je Posnerov klaster,  $\text{Ca}_9(\text{PO}_4)_6$ . Veliki broj tih klastera je gusto pakirani u sfere koje se agregiraju u lančaste nakupine sferičnih čestica [1]. Iako je nastajanje ACP vrlo istraživani proces, zbog uloge u biomineralizaciji, njegovo odvijanje na nanoskali nije do kraja razjašnjeno.

Cilj ovog rada je primjenom dviju uobičajenih metoda određivanja veličina nanočestica, dinamičkog raspršenja svjetlosti (DLS) i laserske difrakcije [2,3], pratiti početne stadije nastajanja ACP-a i doprinijeti razumijevanju procesa na nanoskali.

Rezultati su pokazali da već u početnim trenucima taloženja ACP nastaje vrlo heterogen sistem, koji se sastoji od više populacija čestica različitih veličina, od pojedinačnih čestica ACP-a do njihovih lančastih agregata različitih veličina. Pri tome se laserska difrakcija pokazala kao osjetljivija metoda za određivanje veličine manjih čestica u tako složenim sustavima.



[1] S. Dorozhkin, *Acta Biomaterialia*, **6** (2010) 4457-4475.

[2] A. Selmani, I. Coha, K. Magdić, B. Čolović, V. Jakanović, S. Šegota, S. Gajović, A. Gajović, D. Jurašin, M. Dutour Sikirić, *Cryst. Eng. Comm.*, **17** (2015) 8529-8548.

[3] G. Wang, J. Liao, B. Gou, J. Huang, R. Tang, J. Tao, T. Zhang, K. Wang, *Cryst. Growth Des.*, **9** (2009) 2620-2626.

## Konjugati porfirina u fotodinamičkoj terapiji

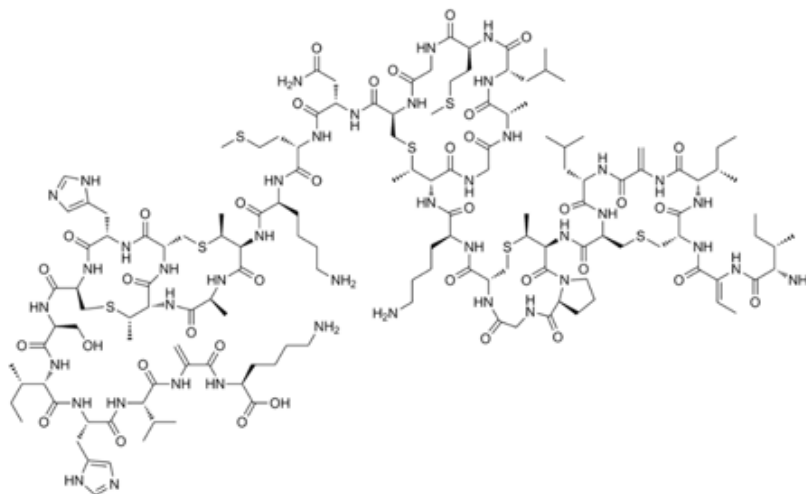
Barbara Radovani

Sveučilište u Rijeci, Odjel za biotehnologiju

barbara.radovani@student.uniri.hr

Fotodinamička terapija (PDT) predstavlja novi pristup u borbi protiv malignih oboljenja koji ne uključuje imunosupresivna sredstva kao što su kemoterapeutici i radioterapija. [1] Djelovanje PDT-a je velikim dijelom specifično za tumorska i netoksično za zdrava tkiva. Ova terapija kombinira tri zasebno netoksične komponente: kisik, fotosenzibilizator i svjetlo. Fotosenzibilizator je ključna komponenta, te je vrlo bitno da se lokalizira isključivo u tumorsko tkivo kako ne bi došlo do oštećenja zdravog tkiva. Porfirini su se pokazali kao relativno učinkoviti PS-ovi, ali jedna od mana im je nedovoljno visoka selektivnost i tumorska distribucija. Rješenje tog problema se pokazuje u konjugaciji porfirina s peptidima. U ovom radu je prikazana reakcija konjugacije porfirina s nizinom. Početni spoj korišten za konjugaciju je 5-(4-fenilizotiocijanat)-10,15,20-tris-(3-piridil) porfirin. Strukture dobivene u svim koracima potvrđene su spektroskopskim metodama (UV/Vis,  $^1\text{H}$  i  $^{13}\text{C}$  NMR). Svrha ove konjugacije je daljnja evaluacija protutumorske aktivnosti konjugata porfirina s nizinom u usporedbi s nekonjugiranim nizinom te nekonjugiranim porfirinom.

Rad je izrađen na Odjelu za biotehnologiju, Sveučilište u Rijeci pod mentorstvom doc.dr.sc. Nele Malatesti.



Slika 1. Kemijska struktura nizina

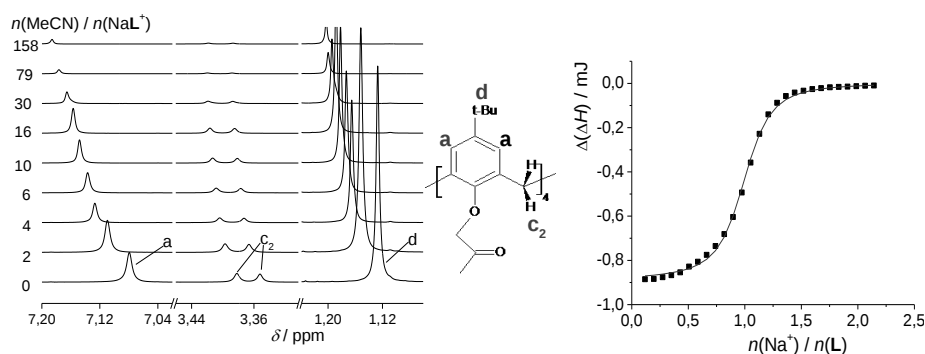
[1] M. Henriques Vicente, Porphyrins and the Photodynamic Therapy of Cancer, Revista Portuguesa Química, 1996, 3, 457-473.

## Utjecaj solvatacije na kompleksiranje kationa alkalijskih metala s ketonskim derivatom kaliks[4]arena

Marija Cvetnić, Ivana Nikšić-Franjić, Katarina Leko, Nikola Cindro, Katarina Pičuljan, Ivana Borilović, Leo Frkanec, Josip Požar, Vladislav Tomišić  
Kemijски odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Horvatovac 102a, Zagreb  
marija.cvetnic@gmail.com

Kaliksareni su makrociklički oligomerni spojevi sastavljeni od četiriju ili više fenolnih podjedinica povezanih metilenskim skupinama u *ortho*-položaju fenola. Raznolikost kaliksarenskih derivata posljedica je varijabilnog broja fenolnih podjedinica makrocikala te mogućnosti funkcionalizacije na gornjem i donjem kaliksarenskom obodu. Cilj ovoga rada bio je istražiti utjecaj otapala na kompleksiranje kationa alkalijskih metala ( $M^+$ ) ketonskim derivatom kaliks[4]arena (**L**). Mikrokalorimetrijskim i spektrofotometrijskim titracijama određene su konstante stabilnosti kompleksa  $ML^+$  u navedenim otapalima te je potvrđena entalpijska kontrola procesa kompleksiranja.<sup>1</sup> Kompleksiranje  $Na^+$  s **L** uočeno je u svim ispitivanim otapalima, dok je kompleksiranje ostalih alkalijskih kationa opaženo samo u metanolu i acetonitrilu. Spektrofotometrijskim, mikrokalorimetrijskim i <sup>1</sup>H-NMR titracijama ispitana je inkluzija molekula otapala u hidrofobnu šupljinu kompleksa  $NaL^+$  kao potencijalni dodatni pokretač nastanka kompleksa  $ML^+$ . Uočen je slabi afinitet kaliksarenske hidrofobne šupljine prema metanolu i *N*-metilformamidu te nešto jači afinitet za vezanje acetonitrila. Primjena izotermne mikrokalorimetrije u istraživanju formiranja kompleksa  $ML^+$ , istraživanje temperaturne ovisnosti topljivosti liganda **L** u ispitivanim otapalima i poznavanje standardnih termodinamičkih funkcija tranfera kationa alkalijskih metala omogućili su konstruiranje termodinamičkih ciklusa iz kojih slijedi detaljna termodinamička interpretacija različitih utjecaja ispitivanih otapala na stabilnost kompleksa  $ML^+$ . Različiti solvatacijski utjecaji na formiranje kompleksa mogu se za većinu promatranih otapala objasniti uzimajući u obzir samo solvataciju kationa i kompleksa, dok u slučaju acetonitrila važnu ulogu ima i inkluzija molekule otapala u kaliksarensku hidrofobnu šupljinu.

Rad je izrađen na Kemijском odsjeku Prirodoslovno-matematičkog fakulteta u Zagrebu pod vodstvom doc. dr. sc. Josipa Požara.



[1] J. Požar, I. Nikšić-Franjić, M. Cvetnić, K. Leko, N. Cindro, K. Pičuljan, I. Borilović, L. Frkanec, V. Tomišić, *J. Phys. Chem. B* **2017**, 121 (36), 8539.

## **In silico probir derivata kumarina i L-askorbinske kiseline na histonskoj demetilazi LSD1 — pametni dizajn novih kemoterapeutika**

Rok Ister

Medicinski fakultet, Zagreb

rok.ister@student.mef.hr

Razvoj novih lijekova podrazumijeva dugotrajan i skup proces. Uključivanje stručnjaka iz svih područja omogućuje smanjivanje rizika od gubitka potencijalno kvalitetnih molekula tijekom tog procesa, te su danas interdisciplinarni timovi imperativ za osiguravanje uspješnosti i brzine odvijanja samog tijeka istraživanja i razvoja novih terapijskih opcija. Budući da je razvoj novih tehnologija i kompjuterskih/računskih programa omogućio relativno uspješno predviđanje ponašanja molekula u biološkim sustavima, te je doprinio i ukupnom smanjenju troškova razvoja, upotreba računalne kemije danas je od velikog značaja i uvelike se koristi u farmaceutskoj industriji i u ostalim sustavima koji se bave problematikom iznalaženja novih obećavajućih molekula. U ovom radu je sa skupom novosintetiziranih hibridnih spojeva (33 kumarinsko-1,2,3-triazolna i 61 askorbinsko -1,2,3-triazolna derivata) provedeno molekularno uklapanje na poznatoj ciljnoj molekuli enzimu, LSD1 (lizin-specifičnoj demetilazi 1) kako bi se između navedenog skupa spojeva probrale aktivne molekule i pokušao pretpostaviti mehanizam njihove inhibicije ciljanog enzima koji sudjeluje u epigenetskoj regulaciji stanice. LSD1 igra vrlo važnu ulogu u modifikaciji epigenetskog izražaja stanice uklanjajući metilne skupine s lizina na histonskim podjedinicama i pojačano je izražen u neoplastičnim stanicama određenih vrsta tumora. Model je postavljen koristeći poznate reverzibilne inhibitore LSD1 i pomoću određenih graničnih vrijednosti između aktivnih i neaktivnih spojeva proban je podskup spojeva za daljnja in vitro testiranja. Također, metodom definicije dva vezna mjesta predloženi su strukturni mehanizmi inhibicije otvarajući time mogućnost pametnog dizajniranja novih lijekova u bliskoj budućnosti koji ciljaju na enzim LSD1 kao mjesto djelovanja.

## Računalni probir derivata azitromicina kao potencijalnih inhibitora bakterijskih ribosoma

Vedran Vuković<sup>1,2</sup>, Nina Čorak<sup>2,\*</sup>, Branimir Bertoša<sup>1</sup>, Predrag Novak<sup>1</sup>

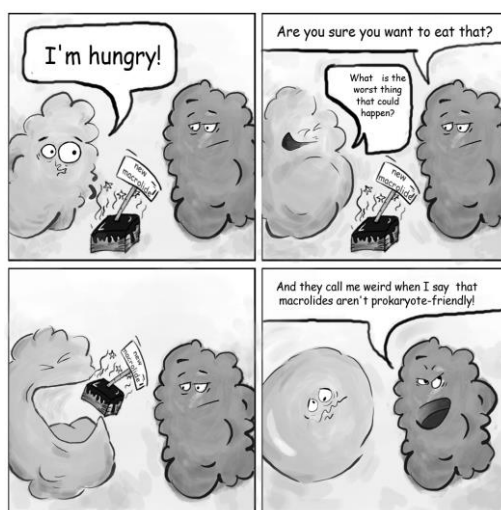
<sup>1</sup> Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Horvatovac 102a, 10000 Zagreb

<sup>2</sup> Biološki odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Rooseveltov trg 6, 10000 Zagreb

\* nina.corak31@gmail.com

Makrolidi su skupina antibiotika koja se veže u polipeptidni izlazni kanal bakterijskog ribosoma i time inhibiraju sintezu proteina u bakterijama. Iz objavljenih kristalnih struktura uočljivo je da metilne grupe na makrolidnom laktoskom prstenu nekovalentno interagiraju s nukleotidima A2058, G2059 i C2611 iz 23S ribosomske RNA. Poznato je da su neke bakterijske vrste razvile otpornost u obliku post-transkripcijske metilacije A2058.

Cilj je ovog istraživanja istražiti i opisati interakciju bakterijskog ribosoma s tiosemikarbazonskim derivatima makrolidnih antibiotika. Napravljena je konformacijska pretraga četiriju liganada metodom Monte Carlo, zatim računi njihovog molekularnog uklapanja (*docking*) u vezno mjesto ribosoma te konformacijska pretraga kompleksa ligand-ribosom, također koristeći metodu Monte Carlo s uključenim rotacijskim i translacijskim stupnjevima slobode gibanja liganada u veznom mjestu. Dobiveni rezultati upućuju na važnost pozicije semitiokarbazonskog supstituenta na makrolidu te povoljne  $\pi$ -interakcije feniltiosemikarbazonskog supstituenta i adenoza 2058. Na temelju geometrije tih interakcija može se preliminarno zaključiti da bi interakcija s metiliranim A2058 bila slična: ispitivani derivati imaju potencijala kao novi inhibitori ribosoma u bakterijama otpornim na tržišno dostupne makrolide. Nastavak istraživanja bit će usmjeren ka ispitivanju interakcije derivata s metiliranim A2058 i drugim čestim oblicima otpornosti, ali i prema usavršavanju svojstava obećavajućih derivata.



## **Ispitivanje fizikalno-kemijskih svojstava polimera koji se koriste u 3D tiskanju**

Filip Car, Ivana Čevič, Zana Hajdari Grečić, Domagoj Vrsaljko

Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Marulićev trg 19, 10000 Zagreb, Republika Hrvatska

fcar@fkit.hr, icevid@fkit.hr, zhajdari@fkit.hr, dvrsal@fkit.hr

Aditivna tehnologija omogućuje izradu širokog spektra proizvoda u relativno kratkom vremenskom periodu. Tako dobiveni proizvodi mogu biti kompleksne geometrije i njihova bi izrada klasičnim postupcima proizvodnje bila teško ili čak nemoguće izvediva. Izrađeni proizvodi temelje se na računalnom CAD (engl. *Computer Aided Design*) modelu, pri čemu se od krajnjeg proizvoda zahtjeva odgovarajuća kvaliteta, mehanička svojstva, te dimenzijska točnost i preciznost. Postoji čitav niz materijala koji se mogu koristiti u postupcima aditivne proizvodnje, s tim da se najčešće koriste polimeri i polimerni materijali. Sve je uočljiviji trend napuštanja masovne i porasta personalizirane proizvodnje, posebice u medicini gdje se u pravilu traže vrlo precizno izrađeni modeli složene geometrije.

U ovome radu su ispitana mehanička svojstva i kemijska otpornost određenih polimera i polimernih materijala koji se najčešće koriste u postupcima aditivne proizvodnje, tj. 3D tiskanju, te dimenzijski parametri referentnog modela tiskanog od komercijalnih Zortrax materijala. Provođenjem rasteznog ispitivanja utvrđeno je da su ispitani materijali kruti i krti. Uočena je značajna promjena mehaničkih svojstava poliakrilata nakon dodatnog umrežavanja pomoću UV svjetla. Ispitivanje kemijske otpornosti, odnosno test bubrenja, provedeno je pomoću tri otapala: redestilirana voda, etanol i aceton. Redestilirana voda se pokazala kao najmanje agresivno otapalo jer nije uzrokovala vidljiva oštećenja kod ni jednog ispitanog materijala iako je kod nekih došlo do povećanja mase. Sličan utjecaj na materijale imao je etanol, ali s većim vrijednostima stupnja bubrenja. Aceton se pokazao kao vrlo agresivan medij u kojem je došlo do vidljivih oštećenja pojedinih materijala, te su primijećeni najveći iznosi stupnja bubrenja kod gotovo svih ispitanih materijala. Ispitivanje dimenzijskih parametara provedeno je na FDM (engl. *Fused Deposition Modeling*) pisaču koji ima manju preciznost u usporedbi sa SLS (engl. *Selective Laser Sintering*) i SLA (engl. *Stereolithography*) postupcima aditivne proizvodnje što je i utvrđeno provedenim mjerenjima na tiskanom referentnom modelu.

Ovaj rad izrađen je na Zavodu za termodinamiku, strojarstvo i energetiku pod vodstvom doc. dr. sc. Domagoja Vrsaljka.

## Nanočestice cerijeva dioksida – sinteza, karakterizacija i adsorpcija polielektrolita

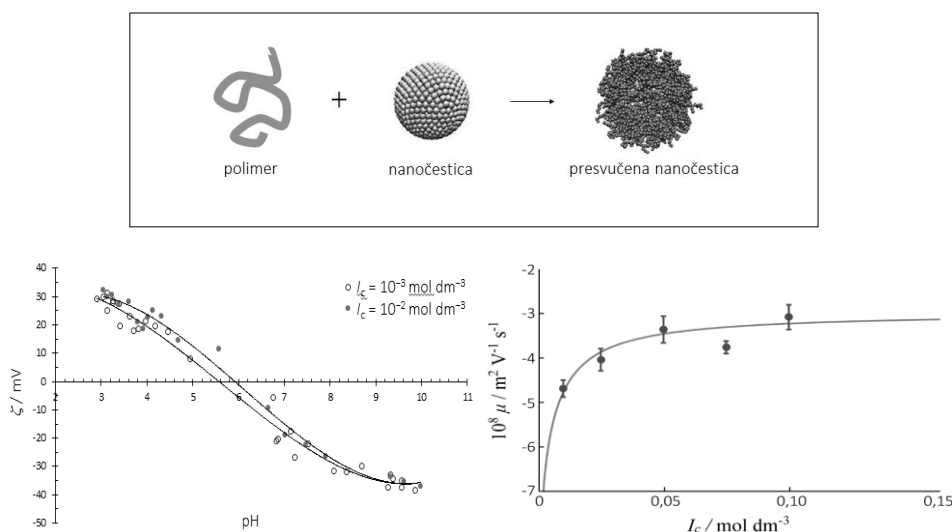
Nikolina Lešić, Zlatko Brkljača, Davor Kovačević

Prirodoslovno-matematički fakultet, Zagreb

nikolinal93@gmail.com

Interes za istraživanje nanočestica cerijeva(IV) oksida,  $\text{CeO}_2$ , u porastu je zbog važnosti njihove potencijalne primjene u različitim područjima, kao što su biomedicina i kataliza. [1] Cilj ovog istraživanja bio je sintetizirati i karakterizirati nanočestice  $\text{CeO}_2$  te sustavno istražiti interakcije s polielektrolitima. Kao polielektrolit je upotrijebljen jaki polianion poli(natrijev 4-stirensulfonat), PSS. [2] Nanočestice  $\text{CeO}_2$  sintetizirane su hidrolizom  $\text{Ce}(\text{NO}_3)_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  u vodenoj otopini  $\text{NaOH}$ , a karakterizirane difrakcijom rentgenskog zračenja (XRD), dinamičkim raspršenjem svjetlosti (DLS metoda) i mjerenjem  $\zeta$ -potencijala. XRD analiza pokazala je da srednji promjer nanokristala iznosi 6 nm. DLS metodom je uočeno da veličina nanočestica ovisi o pH i masenoj koncentraciji suspenzije, a dobiveni rezultati bili su u rasponu od 35 do 60 nm. Izoelektrična točka mjerena je pri dvije ionske jakosti ( $10^{-2} \text{ mol dm}^{-3}$  i  $10^{-3} \text{ mol dm}^{-3}$ ) te su dobivene vrijednosti  $\text{pH}_{\text{iep}} = 5,8 \pm 0,2$  i  $\text{pH}_{\text{iep}} = 5,9 \pm 0,1$ . Adsorpcija PSS-a na nanočestice  $\text{CeO}_2$  ispitana je mjerenjem  $\zeta$ -potencijala i DLS metodom. Pri  $\text{pH} = 2$  adsorpcijom PSS-a na pozitivno nabijene nanočestice  $\text{CeO}_2$  dolazi do negativiranja površine nanočestica. DLS metodom je dobivena debljina sloja adsorbiranog polielektrolita:  $\delta = 16,9 \text{ nm}$ . Eksperimentalno dobiveni rezultati interpretirani su primjenom elektroforetskog modela mekih čestica (modificirani Ohshima model). Izračunati parametri omogućavaju određivanje površinske gustoće adsorpcije PSS-a na nanočestice cerijeva dioksida te je dobivena vrijednost  $3,7 \text{ mg m}^{-2}$ . U ovom je radu pokazano da je obradom rezultata dobivenih DLS metodom i elektrokinetičkim mjerenjima uz primjenu Ohshima modela moguće kvantitativno interpretirati adsorpcijske rezultate što omogućava dizajn stabiliziranih nanočestica što je iznimno važno s primjenskog stanovišta.

Rad je izrađen na Zavodu za fizikalnu kemiju KO PMF-a pod vodstvom prof. dr. sc. Davora Kovačevića i neposrednim vodstvom dr. sc. Zlatka Brkljače.



[1] T. Xia *et al*, *ACS Nano* **2** (2008) 2121–2134.

[2] J. Požar, K. Bohinc, V. Vlasy, D. Kovačević, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13** (2011) 15610–15618.

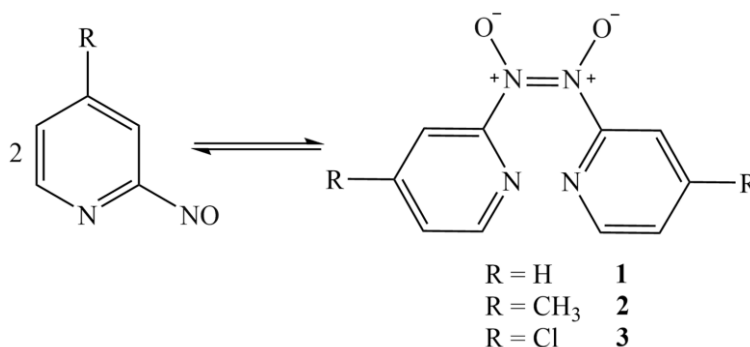


## Kinetika dimerizacije 2-nitrozopiridina i njegovih derivata u čvrstom stanju

Mateja Pisačić

Zavod za organsku kemiju, Kemijski odsjek Prirodoslovno-matematičkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu  
mpisacic@chem.pmf.hr

U sklopu ovog rada istražena je reakcija dimerizacije šesteročlanih heteroaromatskih C-nitrozo spojeva u čvrstom stanju. Sintetizirani su 2-nitrozopiridin te njegovi 4-metil- i 4-klor-derivati te su praćene njihove kinetike dimerizacije u čvrstom stanju. Reakcija dimerizacije je istražena u dvije različite topokemijske okoline: nakon fotodisocijacije dimera pri kriogenim uvjetima gdje su nastale molekule monomera u najpovoljnijoj topokemijskoj konfiguraciji za reakciju i nakon kriogene depozicije monomera na pločicu cezijevog jodida gdje su molekule monomera nasumično orijentirane. Kinetike reakcija dimerizacije praćene su pri različitim temperaturama vremenski razlučenom IR spektroskopijom. Iz temperature ovisnosti konstanti brzina reakcije procijenjene su energije aktivacije za dimerizaciju proučavanih spojeva u čvrstom stanju te su uspoređene vrijednosti dobivene u dvije različite topokemijske okoline. Rezultati ovog rada ukazuju da promjena u topokemiji utječe na reaktivnost 2-nitrozopiridina i njegovih 4-metil- i 4-klor-derivata te da istraženi heteroaromatski C-nitrozo spojevi predstavljaju prikladne molekularne modele za proučavanje mehanizama i kinetika reakcija u čvrstom stanju.



Rad je izrađen u sklopu projekta HRZZ (br. projekta 7444, ORGMOL).

## Taloženje kalcijeva oksalata u uvjetima hiperoksalurije

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

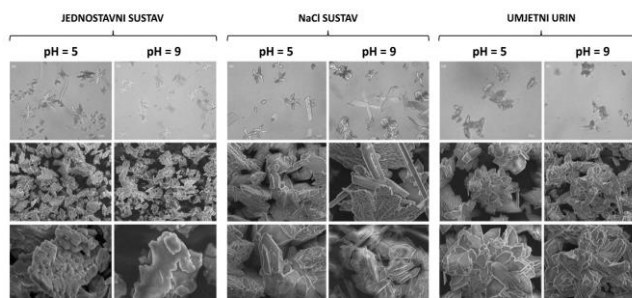
<sup>1</sup>Odjel za kemiju, Cara Hadrijana 8/A, 31000 Osijek, Hrvatska

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

[ssafranko@kemija.unios.hr](mailto:ssafranko@kemija.unios.hr)

Prema zadnjim svjetskim i nacionalnim epidemiološkim istraživanjima, učestalost pojave bubrežnih kamenaca neprestano raste, posebice u industrijaliziranim zemljama, što se najčešće pridodaje poboljšanju životnog standarda i lošijim prehrambenim navikama. Pojava čvrste, kristalne tvari u mokraćnom sustavu se naziva urolitijaza[1]. Proces stvaranja bubrežnih kamenaca je vrlo složen i ovisan o nizu čimbenika kao što su prezasićenost urina, pH, ionska jakost ili prisutnost promotora/inhibitora. U biološkim sustavima, stvaranje bubrežnih kamenaca može biti potaknuto različitim metaboličkim poremećajima poput hiperkalcemije, hiperoksalurije, hipocitraturije te promjene kiselosti urina. Značajan se postotak nastalih bubrežnih kamenaca pripisuje hiperoksaluriji, odnosno pojačanom izlučivanju oksalata urinom[2]. Kalcijevi oksalati su najčešći konstituenti bubrežnih kamenaca i upravo se zbog te činjenice izrazito povećao interes za istraživanje čimbenika nastanka kamenaca i njihove prevencije. Kalcijev oksalat kristalizira u tri hidratna oblika: termodinamički stabilan kalcijev oksalat monohidrat (vevelit, COM)[3,4], metastabilan dihidrat (vedelit, COD)[5,6] te metastabilan trihidrat (kaoksit, COT)[7,8] koji se rijetko pronalazi u kemijskom sastavu bubrežnih kamenaca. Glavni cilj ovog istraživanja je određivanje morfologije kristala i njihovog kemijskog sastava u tri različita sustava u uvjetima hiperoksalurije pri pH = 5 i pH = 9: u jednostavnom sustavu, NaCl sustavu i umjetnom urinu pri kontroliranim termodinamičkim i hidrodinamičkim uvjetima. Ispitivani uzorci su analizirani FT-IR spektroskopijom, termogravimetrijskom analizom (TGA), rendgenskom difrakcijom (XRD), pretražnom elektronskom mikroskopijom (SEM) te optičkom mikroskopijom.

Ovaj rad je izrađen u sklopu projekta "Taloženje kalcijeva oksalata u umjetnom urinu" financiran iz Poslovnog fonda Sveučilišta Josipa Jurja Strossmayera kroz interni natječaj „IZIP 2016“ na Odjelu za kemiju Sveučilišta J.J. Strossmayera u Osijeku uz suradnju Laboratorija za procese taloženja (IRB).



- [1] B. Hess, R.L.R., J. Kavanagh, S.R.Khan, D.J. Kok, A.L.Rodgers, H.G Tiselius, Eur. Urol. 40 (2001) 220.
- [2] Talati, J.J., Hulton, S.A., Garrelfs, S.F. et al. Urolithiasis (2017).
- [3] A.S. Bramley, M.J. Hounslow, R.L. Ryall, Chem. Engng. Sci. 52 (1997) 747-757.
- [4] Lj. Brečević, D. Kralj, J. Cryst. Growth 79 (1986) 178-184.
- [5] Lj. Brečević, D. Kralj, J. Garside, J. Cryst. Growth 97 (1989) 460.
- [6] P. Brown, D. Ackermann, B. Finlayson, J. Cryst. Growth 98 (1989) 285-292.
- [7] D. Škrtić, M. Marković, Lj. Komunjer, H. Füredi-Milhofer, J. Cryst. Growth 66 (1984) 431-440.
- [8] D. Škrtić, H. Füredi-Milhofer, M. Marković, J. Cryst. Growth 80 (1987) 113-120

## Supramolekulski sustavi s amfifilnim derivatom $\beta$ -ciklodekstrina - kompleksiranje s adamantanskim gvanidinima i interakcije s DNA

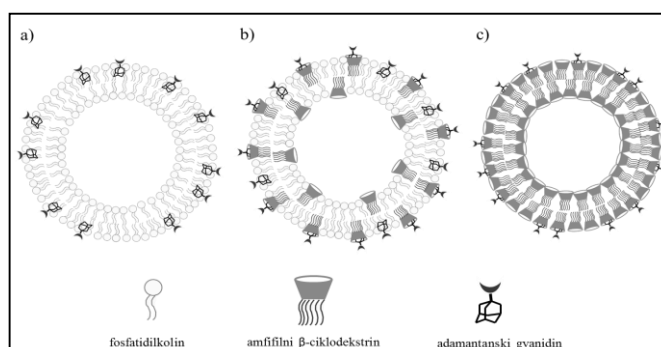
Adela Štimac, Matea Tokić, Ruža Frkanec

Centru za istraživanje i prijenos znanja u biotehnologiji, Sveučilište u Zagrebu

matea.tokic@hotmail.com

U ovome istraživanju opisana je kemijska sinteza amfifilnog derivata  $\beta$ -ciklodekstrina, heptakis[6-deoksi-6-dodeciltio-2-O-oligo-(etilen glikol)]- $\beta$ -ciklodekstrina<sup>1</sup> (EO-CD-SR) i nastajanje supramolekulskih sustava s adamantanskim gvanidinima. Pripravljene su i karakterizirane tri vrste supramolekulski sustava adamantanskih gvanidina s liposomima i ciklodekstrinskim vezikulama. Veličina i površinski naboj određeni su metodom dinamičkog raspršenja svjetlosti.<sup>2</sup> Kompleksiranje između adamantanskih gvanidina i  $\beta$ -ciklodekstrina proučeno je metodom spektralne izmjene<sup>3</sup> te je izračunata konstanta vezanja  $K_a$  za pripravljene komplekse. Ostvarivanje interakcija između fluorescentno obilježene DNA te nastalih kompleksa liposoma i ciklodekstrinskih vezikula s adamantanskim gvanidinima potvrđene su metodom fluorescencijske korelacijske spektroskopije.<sup>4</sup>

Ovaj rad izrađen je u Centru za istraživanje i prijenos znanja u biotehnologiji, Sveučilište u Zagrebu pod mentorstvom dr. sc., Ruže Frkanec i neposrednim voditeljstvom dr. sc., Adele Štimac.



- [1] A. Mazzaglia, R. Donohue, B. J. Ravoo i R. Darcy, *Eur. J. Org. Chem.* **2001** (2001) 1715-1721.
- [2] J. Voskuhl, T. Fenske, M. C. Stuart, B. Wibbeling, C. Schmuck, B. J. Ravoo, *Chem. Eur. J.* **16** (2010) 8300-8306
- [3] K. Sadreafi, E. E. Moore, M.W. Lee Jr., *J. Incl Phenom Macrocycl Chem.* **83** (2015) 159-166.
- [4] D. Granadero, J. Bordello, M. J. Pérez-Alvite, M. Novo, W. Al-Soufi, *Int. J. Mol. Sci.* **11** (2010) 173-188

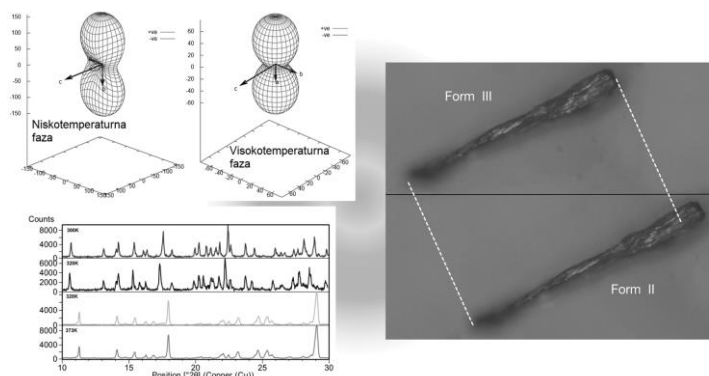
## Termoodskočni materijali i anomalni fazni prijelazi

Luka Vanjur, Željko Rapljenović, Teodoro Klaser, Željko Skoko

Prirodoslovno-matematički fakultet – Fizički odsjek

luka.vanjur@gmail.com ; zeljko.rapljenovic@gmail.com

Termoodskočni materijali su materijali kod kojih dolazi do strukturnog faznog prijelaza koji je obilježen makroskopskom akcijom kristala (Termoodskočni efekt). Trenutno objašnjenje efekta se nalazi u dinamici kristalne rešetke i u anizotropnoj i negativnoj termičkoj ekspanziji [1]. Ne postoji teorija koja bi mogla predvidjeti koji bi materijali bili termoodskočni. U našem radu dajemo dva nova kandidata koja pokazuju svojstva slična termoodskočnim materijalima, skopolamin metil bromid i hidrirani skopolamin metil bromid. Ta dva materijala su odabrani jer imaju veliku sličnost sa prvim zabilježenim termoodskočnim kristalima oksitropijum bromida [2]. Kod nehidriranog skopolamin metil bromida zabilježeno je gibanje kristala, ali fazni prijelaz nije zabilježen u ni jednoj eksperimentalnoj tehnici. Hidrirani oblik istog materijala doživljava fazni prijelaz, ali ima široki temperaturni raspon u kojem se događa gibanje kristala.



[1] Lončarić, I. & Popovic, J. & Despoja, V. & Burazer, S. & Grgičević, I. & Popović, D. & Skoko, Z. (2017). Reversible thermosolient effect of N'-2-propylidene-4-hydroxybenzohydrazide accompanied with an immense negative compressibility: Structural and theoretical arguments aiming towards the elucidation of jumping phenomenon. *Crystal Growth & Design*. 17.

[2] Skoko, Z. & Zamir, S. & Naumov, P. & Bernstein, J. (2010). The Thermosolient Phenomenon. "Jumping Crystals" and Crystal Chemistry of the Anticholinergic Agent Oxitropium Bromide. *Journal of the American Chemical Society*. 132. 14191-202.

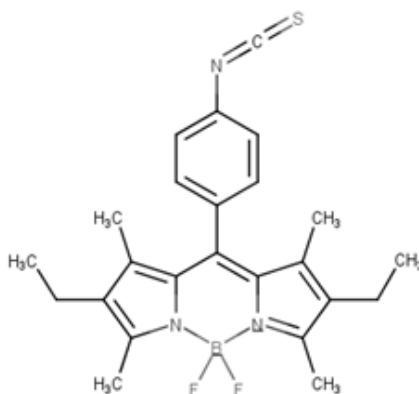
## Sinteza borovog kompleksa dipirometena za konjugaciju s proteinima

Katarina Zirdum

Odjel za biotehnologiju, Rijeka  
katarina.zirdum@student.uniri.hr

Borov kompleks dipirometena (BODIPY®) predstavlja razred fluorescentnih boja koje se mogu koristiti u medicinske i biološke svrhe. [1] BODIPY molekule su prilično neosjetljive na polarnost i pH okoliša te vrlo stabilne u fiziološkim uvjetima. Jezgra BODIPY fluorescentnih boja je dovoljno snažna da izdrži niz kemijskih promjena, a male promjene u strukturi omogućuju aktivaciju fluorescentnih svojstava. U ovom radu uspješno je sintetiziran N,N'-difluoroboril-2,8-dietil-1,3,7,9-tetrametil-5-(4-izotiocijanatofenil)-dipirometen, BODIPY derivat koji koristi za konjugaciju s proteinima. Opisan je alternativan put sinteze u odnosu na literaturni. [2] Svrha ove sinteze je stvaranje BODIPY molekule koja se može koristiti za fluorescentno obilježavanje proteina. Iako je prilikom sinteze došlo do gubitka fluorescentne skupine, na kraju se uspio dobiti željeni BODIPY te su raspravljeni mogući putevi sinteze u kojima bi fluorescentna skupina ostala očuvana. Struktura sintetizirane BODIPY molekule potvrđena je spektroskopskim metodama – UV/Vis i <sup>1</sup>H NMR.

Rad je napravljen na Odjelu za biotehnologiju Sveučilišta u Rijeci pod vodstvom doc. dr. sc. Nele Malatesti.



Slika 1. Struktura NCS-BODIPY

[1] Loudet A, Burgess K. BODIPY Dyes and Their Derivatives: Syntheses and Spectroscopic Properties. *Chemical Reviews*. 2007;107(11):4891-4932.

[2] Malatesti N, Hudson R, Smith K, Savoie H, Rix K, Welham K et al. Isothiocyanato Boron Dipyrromethenes—The First BODIPY Analogues of Fluorescein Isothiocyanate. *Photochemistry and Photobiology*. 2006;82(3):746.

## **Učinkovitost različitih postupaka ekstrakcije lista masline obzirom na koncentraciju ukupnih fenola i antioksidacijski kapacitet ekstrakta**

Ana Dobrinčić i Lucija Tuđen

Prehrambeno Biotehnološki Fakultet, Zagreb

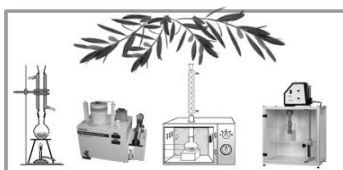
lucija.tudjen@gmail.com

Cilj ovog rada bio je istražiti utjecaj različitih postupaka ekstrakcije (konvencionalna ekstrakcija uz refluks, ekstrakcija potpomognuta ultrazvukom, ekstrakcija potpomognuta mikrovalovima i ekstrakcija potpomognuta visokim tlakom) i različitih tehnoloških parametara (vrijeme tretiranja, omjer uzorka i otapala te ovisno o tehnici broj ponavljanja ili amplituda ili temperatura ili tlak) na koncentraciju ukupnih fenola i antioksidacijski kapacitet ekstrakta lista masline te optimirati navedene postupke ekstrakcije.

Istraživanja su provedena na osušenom listu masline sorte Oblica. Određivanje koncentracije ukupnih fenola provodilo se spektrofotometrijskom metodom uz pomoć Folin-Ciocalteu reagensa. Antioksidacijski kapacitet ekstrakata određen je metodom elektronske spinske rezonancije pomoću DPPH radikala a maksimalna vrijednost je izražena kao 100 %. Dobiveni rezultati su statistički obrađeni i optimiranje je provedeno metodom odzivnih površina. Primjenom svih tehnika i parametara ekstrakcije postignuta je koncentracija ukupnih fenola u rasponu 48,21 mg GAE/g s.tv. – 68,35 mg GAE/g s.tv. i antioksidacijski kapacitet u rasponu 29,26 % - 79,23 %.

Prema dobivenim rezultatima masa od 1,5 g pokazala se povoljnijom od mase 3 g kao i kraće trajanje tretmana za sve tehnike ekstrakcije osim one potpomognute ultrazvukom. Utjecaj ostalih ispitivanih parametara ovisio je o primijenjenoj tehnici ekstrakcije. Najbolji rezultati konvencionalnom ekstrakcijom za koncentraciju fenolnih spojeva ( $68,35 \pm 3,16$  mg GAE/g s.tv.) postignuti su uzastopno ponovljenom ekstrakcijom 3 puta po 10 min a za antioksidacijski kapacitet (47,64 %) ponavljanjem ekstrakcije 2 puta po 18 min. Jedino pri ekstrakciji potpomognutoj ultrazvukom za koncentraciju ukupnih fenola najbolji postignuti rezultati ( $66,49 \pm 0,81$  mg GAE/g s.tv.) su s masom uzorka 3 g i to uz amplitudu 50 % tijekom dužeg vremena (21 min), a za antioksidacijski kapacitet (47,56 %) najbolji parametri su 100 % amplitude u vremenu 12 min. Najbolji rezultati ekstrakcije mikrovalovima za koncentraciju fenolnih spojeva ( $68,19 \pm 3,15$  mg GAE/g s.tv.) dobiju se u kraćem vremenu (2 min) i pri višoj temperaturi (80 °C) dok se najveći antioksidacijski kapacitet (55,24 %) dobije pri temperaturi 55 °C. Najveće vrijednosti koncentracije fenolnih spojeva ( $67,81 \pm 3,63$  mg GAE/g s.tv.) pri ekstrakciji visokim tlakom postignute su pri tlaku 500 MPa i 5 min dok se najbolji rezultat za antioksidacijski kapacitet (40,47 %) dobije u vremenu od 1 minute. Koncentracije ekstrahiranih fenolnih spojeva pri optimalnim uvjetima sve četiri tehnike ekstrakcije su podjednake međutim ekstrakcijom mikrovalovima postiže se u najkraćem vremenu, tj. za samo 2 min. Istom tehnikom dobije se i najbolji antioksidacijski kapacitet ekstrakta.

Ovo istraživanje je provedeno u okviru projekta „Primjena inovativnih tehnologija u proizvodnji biljnih ekstrakata kao sastojaka funkcionalne hrane (IT-PE-FF)“ financiranog sredstvima Hrvatske zaklade za znanost. Rad je izrađen u Laboratoriju za procese konzerviranja i preradu voća i povrća na Zavodu za prehrambeno-tehnološko inženjerstvo pod vodstvom prof.dr.sc. Branke Levaj

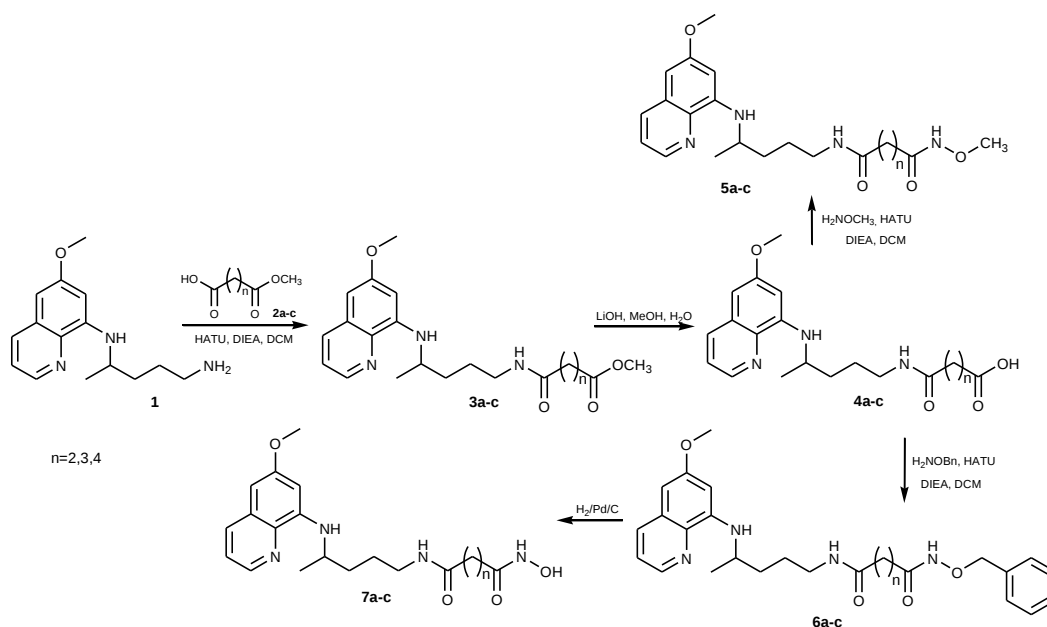


## Sinteza i karakterizacija novih hibridnih derivata primakina i vorinostata

Zvonimir Mlinarić

Farmaceutsko-biokemijski fakultet, Zagreb  
mlinka1712@gmail.com

Malarija je smrtonosna parazitska bolest tropskih i subtropskih krajeva koja se prenosi ubodom komarca, a uzrokovana je vrstama roda *Plasmodium*, *P. falciparum*, *P. vivax*, *P. ovale*, *P. malarie* i *P. knowlesi*. Monoterapija nije preporučena zbog razvoja rezistencije. Trenutno prva linija terapije uključuje artemisinin i njegove derivate u kombinaciji s krvnim shizontocidima različitih mehanizama djelovanja. *P. vivax* i *P. ovale* merozoiti mogu se u jetri razviti u hipnozoite (latentni oblik). U tom se slučaju primakin, kao jedini dostupni hipnozoitocid, mora uvesti u terapiju. S druge strane, istraživanja pokazuju da poznati antimalarici, uključujući primakin, imaju i citostatsko djelovanje na različite vrste tumora. Rak je jedan od vodećih uzroka smrtnosti u svijetu. Vorinostat je registrirani antitumorski lijek s antimalarijskim djelovanjem zbog inhibicije histonske deacetilaze iz *P. falciparum*. Pojava otpornosti vrsta *Plasmodium* na lijekove, kao i mutacije tumorskih stanica koje rezultiraju rezistencijom na lijekove, dovode do neučinkovitosti sadašnje terapije i zahtijevaju otkriće lijekova s novim mehanizmima djelovanja. Jedna od metoda razvoja novih lijekova je kombinacija dva farmakofora unutar jedne molekule, odnosno priprava hibridnih lijekova koji bi trebali imati dva neovisna mehanizma djelovanja. Ta saznanja potaknula su nas na dizajn konjugata primakina i vorinostata, koji imaju potencijal iskazati dvojno antimalarijsko i citostatsko djelovanje. Kako bismo u potpunosti provjerili našu hipotezu, mijenjali smo sljedeće parametre: duljinu poveznice između primakinskog i hidroksamskog dijela molekule (2, 3 ili 4 ugljikova atoma), kao i supstituente na hidroksamskom dijelu pri čemu smo dobili tri vrste derivata: O-metil hidroksamske kiseline 5, O-benzil hidroksamske kiseline 6 i nesupstituirane hidroksamske kiseline 7. Sinteza ovih produkata bila je jednostavna s visokim iskorištenjima (Shema).



U tijeku je ispitivanje citostatskog i antimalarijskog djelovanja.

***POSTERSKA***  
***IZLAGANJA***

## Sonokemijska sinteza nanostrukturiranog $\text{TiO}_2$ na bio-predlošku membrane ljske jaja

Jelena Petruša

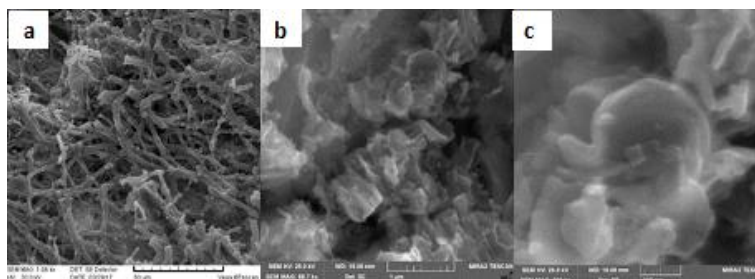
Fakultet strojarstva i brodogradnje, Sveučilište u Zagrebu  
jelena\_petrusa@hotmail.com

Biomimikrija je nova grana znanosti uz pomoć koje se nastoje oponašati održiva rješenja iz prirode kako bi se stvorili materijali poboljšanih svojstava. Membrana ljske jaja predstavlja jedinstveni biomaterijal koji se zbog svoje vlaknaste i porozne mikrostrukture može koristiti kao bio-predložak za sintezu hijerarhijski strukturiranih nanomaterijala.

U ovom radu sintetiziran je nanostrukturirani titanijev dioksid sol-gel/sonokemijskom sintezom pomoću membrane ljske jaja kao bio-predloška. Membrane ljske jaja ručno su odvojene od ljske, stavljene u razrijeđenu octenu kiselinu, isprane destiliranom vodom, te sušene na sobnoj temperaturi. Za pripravu sola korišten je titanov izopropoksid kao prekursor, 2-propanol kao otapalo, acetalacetone kao kompleksirajući reagens uz dodatak nitratne kiseline kao katalizator. U tako pripremljen sol dodane su membrane ljske jaja. Nakon infiltriranja, geliranja, sušenja i toplinske obrade provedena je karakterizacija nanostrukturiranog  $\text{TiO}_2$  praha.

Pomoću CHNS analize potvrđen je elementarni sastav membrane ljske jaja, te određen elementarni sastav nanostrukturiranog  $\text{TiO}_2$ . SEM analiza potvrdila je poroznu nanostrukturu različite morfologije  $\text{TiO}_2$ . XRD analizom određena je veličina kristalita u iznosu od 29 nm, te je potvrđena prisutnost čistog anatas u nanokristalima  $\text{TiO}_2$ . Također kristalna struktura potvrđena je i infracrvenom spektroskopijom. TGA analizom određen je gubitak mase od oko 65 % za  $\text{TiO}_2$  sintetiziran na bio-predlošku membrane ljske jaja. Na DTA krivulji zabilježena je endotermna reakcija s maksimumom oko 100 °C. Ramanovom spektroskopijom potvrđena je prisutnost anatas u nanočesticama  $\text{TiO}_2$  sintetiziranih na bio-predlošku membrane ljske jaja obrađenih na 500 °C. Fotokatalitička razgradnja azo bojila dokazali su da se nanočestice  $\text{TiO}_2$  sintetizirane na membrani ljske jaja mogu koristiti kao fotokatalizatori pri razgradnji azo bojila Kongo crvenila primjenom zračenja sličnog sunčevom zračenju.

Ovaj rad izrađen je na Katedri za materijale i tribologiju te na Katedre za inženjerstvo vode i okoliša Fakulteta strojarstva i brodogradnje Sveučilišta u Zagrebu, pod vodstvom prof. dr.sc. Lidije Ćurković i izv. prof. dr. sc. Davora Ljubasa. Rad je izrađen uz financijsku potporu Hrvatske zaklade za znanost projektom IP-2014-09-2353 „Sudbina farmaceutika u okolišu i tijekom naprednih postupaka obrade vode“.



FE-SEM snimka (a) membrana ljske jaja (b)  $\text{TiO}_2$  nanočestica na bio-predlošku membrane ljske jaja pri povećanju od 66700 × i (c) pri povećanju od 200000 ×

## Minimalni analog tRNA<sup>Leu</sup> koji se može uspješno aminoacilirati leucil-tRNA-sintetazom

Marta Bošnjaković i Andrea Hloušek-Kasun

Prirodoslovno-matematički fakultet, Zagreb

mbosnjakovic@stud.biol.pmf.hr, andrea.h.kasun@gmail.com

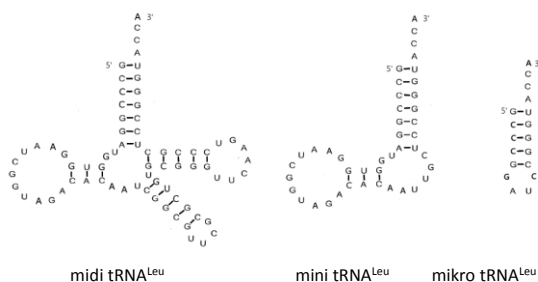
Aminoacil-tRNA-sintetaze (aaRS) su enzimi koji osiguravaju vjeran prijenos genetičke informacije u stanicama svih živih organizama, kovalentnim sparivanjem aminokiselina s njihovom pripadnom molekulom tRNA. Nastale aminoacilirane tRNA zatim služe kao prekursori za sintezu proteina na ribosomima.

Cilj ovog rada bio je pronaći najmanji mogući analog molekule tRNA<sup>Leu</sup> koji se može uspješno aminoacilirati, kako bi se kasnije iskoristio za određivanje interakcijskog doprinosa vezane aminokiseline prilikom vezanja aminoaciliranog analoga tRNA<sup>Leu</sup> u deacilacijsku domenu LeuRS.

Konstruirana su tri analoga tRNA<sup>Leu</sup>: midi tRNA<sup>Leu</sup> s uklonjenom antikodonskom rukom, mini tRNA<sup>Leu</sup> kojoj nedostaje varijabilna ruka, T $\psi$ C-ruka i antikodonska ruka, te mikro tRNA<sup>Leu</sup> koja sadrži samo akceptorosku peteljku. Uspješnost aminoacilacije detektirana je vizualizacijom produkata reakcije aminoacilacije na kiselim gelovima koji omogućavaju razdvajanje aminoacilirane od neaminoacilirane tRNA stabilizacijom esterske veze između molekule RNA i aminokiseline. Također, promatrano je nastajanje stabilnog kompleksa analoga molekule tRNA<sup>Leu</sup> i enzima LeuRS metodom gel-retardacijske elektroforeze.

Midi tRNA<sup>Leu</sup> se uspješno aminoacilirala leucil-tRNA-sintetazom, iako kompleks, do čijeg nastanka nužno dolazi, nije bio dovoljno stabilan za detekciju na gelu. Mini tRNA<sup>Leu</sup> također nije formirala dovoljno stabilan kompleks s leucil-tRNA sintetazom za detekciju gel-retardacijskom elektroforezom, a nije bilo moguće niti detektirati njezino aminoaciliranje na kiselim poliakrilamidnim gelovima. Eksperimenti vezanja i aminoacilacije mikro tRNA<sup>Leu</sup> leucil-tRNA-sintetazom nisu mogli biti izvedeni zbog preniskog prinosa ove RNA reakcijom *in vitro* transkripcije. Vjerojatno zbog prekratke sekvence. Dobiveni rezultati poslužiti će kao temelj daljnjim istraživanjima minimalne RNA koja interagira i reagira s leucil-tRNA-sintetazom, ali i interakcijskog doprinosa aminokiseline kovalentno vezane na analog prilikom vezanja u deacilacijsku domenu.

Ovaj rad je napravljen na Kemijskom odsjeku Prirodoslovno-matematičkog fakulteta pod stručnim vodstvom doc. dr. sc. Morane Dulić.



midi tRNA<sup>Leu</sup>

mini tRNA<sup>Leu</sup>

mikro tRNA<sup>Leu</sup>

## Istraživanje utjecaja adsorpcije acetona na kristalnu strukturu i stabilnosti rompskih polimorfa 1,3-difenilpropan-1,3-diona pomoću simulacija molekulske dinamike

Tomislav Piteša i Gordan Horvat

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

Kataliza procesa (faznih prijelaza i kemijskih reakcija) u čvrstom stanju fluidima dobro je poznat fenomen u kemiji čvrstog stanja, posebice na području mehanokemijskih reakcija i reakcija starenja. [1-2] Točan mehanizam takvih heterogenih kataliza nije poznat, ali se pretpostavlja da fluid adsorpcijom na površinu ili otapanjem površine kristala reaktanata destabilizira kristale i na taj način ubrzava proces.

Jedan od takvih procesa je fazni prijelaz kristala forme II 1,3-difenilpropan-1,3-diona (DBM-a) u kristal forme I, kataliziran parama acetona. [3] U ovom istraživanju računalno je istražena adsorpcija acetona na plohe formi I i II duž smjerova kristalografskih osi (plohe *ab*, *ac* i *bc*) pomoću simulacija molekulske dinamike. Kao početni model pločastih kristala korišteni su kvadri od 210 jediničnih ćelija određenog polimorfa DBM-a generiranih pomoću podataka iz eksperimentalno određenih kristalnih struktura. Prilagođavanje takvih modela pločastih kristala na vakuum provedeno je serijom simulacija do približne stabilizacije RMSD vrijednosti u odnosu na eksperimentalno određene kristalne strukture formi I i II. Potom su provedene *NpT* simulacije kristala s 256, 512 i 1024 molekula acetona dodanih u vakuum iznad svake plohe. Analiza trajektorija pokazala je da veća količina acetona nad svim ploham više i brže narušava strukturu pločastih kristala te da takvo narušavanje kristalinične strukture vodi do energijske destabilizacije pločastih kristala. Budući da je primijećeno da molekule acetona nakon adsorpcije na površinu pločastog kristala s vremenom prodiru u unutrašnjost kristala, napravljena je analiza vremenske evolucije tog procesa. Tako je dobiven uvid u interakciju pojedinih ploha formi I i II s molekulama acetona te u strukturne promjene izazvane tim procesom. Uzevši u obzir sve rezultate, određena je najmanje podložna ploha forme I (*ab*) i najviše podložna ploha forme II (*ac*) djelovanju acetona. Na temelju tog zaključeno je da te dvije plohe među istraženim ploham formi I i II nose najvažnije uloge u katalizi faznog prijelaza forme II u formu I acetonom.

[1] C. Avendano, Z. Zhang, A. Ota, H. Zhao, K. R. Dunbar, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2011**, 50, 6543–6547.

[2] D. Cinčić, I. Brekalo, B. Kaitner, *Chem. Comm.* **2012**, 48, 11683–11685.

[3] V. Stilinović, G. Horvat, T. Piteša, "Experimental study and molecular dynamics simulation of solvent vapour effects on solid state phase transition in dibenzoylmethane", *24<sup>th</sup> Congress of Chemists and Technologists of Macedonia - Book of Abstracts*, Ohrid, Republic of Macedonia, **2016**, 273–273.

## Izostrukturni kokristali *N*-bromftalimida s 2-klor i 2-brompiridinom

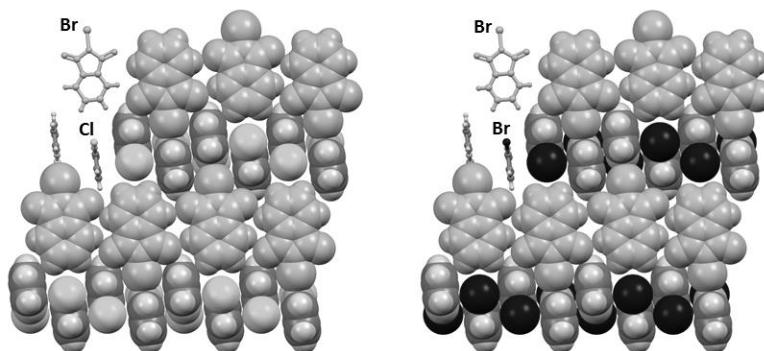
S. Marijan, V. Nemec, V. Stilinović, D. Cinčić

Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu

e-mail : smarijan@chem.pmf.hr

*N*-bromftalimid (**nb**) pripada skupini *N*-halogenimida, komercijalno dostupnih i jeftinih spojeva koji se najčešće koriste kao sredstva za halogeniranje u organskoj sintezi. Kako su atomi halogena u tim spojevima iznimno polarizirani, oni predstavljaju novu grupu potencijalno vrlo jakih donora halogenske veze te s akceptorima koji sadrže atome dušika i kisika stvaraju izrazito snažne i gotovo linearne halogenske veze preko robustnog sintona halogenske veze (CO)<sub>2</sub>N-X...N, gdje X može biti atom broma ili joda [1-3].

U ovom radu izučavana je kokristalizacija *N*-bromftalimida tekućinom potpomognutom mehanokemijskom sintezom i tradicionalnom sintezom iz otopine. Kao akceptori halogenske veze, odabrani su 2-klorpiridin (**2ClPy**) i 2-brompiridin (**2BrPy**). Sa stajališta kristalnog inženjerstva, ti su koformeri zanimljivi zbog prisutnosti piridinskog atoma dušika kao potencijalno snažnog akceptora te atoma halogena kao donora druge halogenske veze. Strukturna analiza pokazala je da su dobiveni kokristali izostrukturni. U oba kokristala dominantna supramolekulska interakcija je halogenska veza između atoma broma *N*-bromftalimida i piridinskog atoma dušika, dok atom halogena piridinskog prstena sudjeluje u halogen-halogen kontaktima (tip I).



Slika 1 Kristalne strukture (**2ClPy**)(**nb**) i (**2BrPy**)(**nb**) kokristala

- [1] Raatikainen, K., Rissanen, K., *CrystEngComm*. **13** (2011) 6972.
- [2] Stilinović, V., Horvat, G., Hrenar, T., Nemec, V., Cinčić, D., *Chem. Eur. J.* **23** (2017) 5244.
- [3] Mavračić, J., Cinčić D., Kaitner B., *CrystEngComm*. **18** (2016) 3343.

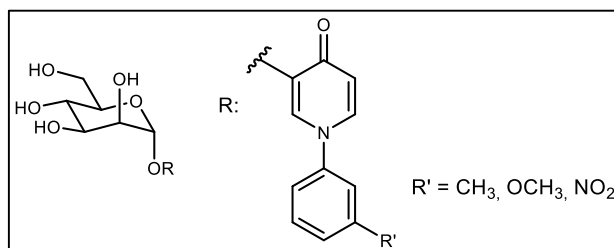
## Priprava novih *meta* supstituiranih *N*-aril-3-hidroksipiridin-4-onskih $\beta$ -D-manozida – potencijalnih FimH antagonista

Mateja Matišić, Željka Car, Vesna Petrović Peroković

Zavod za organsku kemiju, Kemijski odsjek Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu,  
Horvatovac 102a, 10000 zagreb  
matejamatisic.m@gmail.com

Ovaj rad nastavak je dosadašnjih istraživanja na 3-hidroksipiridin-4-onskim (3,4-HP)  $\beta$ -D manozidima koji su pokazali umjeren do značajan antiadhezijski učinak [1],[2]. Najprije je pripravljeno nekoliko *N*-aril supstituiranih derivata piromekonične kiseline (3-hidroksipiran-4-ona). Polazni spojevi za ovu sintezu su kojična kiselina koja se nakon zaštićivanja i oksidacije u Jonesovim uvjetima ciklizira, uz dekarboksilaciju i debenziliranje u autoklavu, s *meta* supstituiranim anilinskim derivatima dajući *N*-aril supstituirane derivate piromekonične kiseline, nove glikozidne donore za vezanje na šećer manozu. Vezanje acetilima zaštićene manozne podjedinice na 3,4-HP provodi se Koenigs-Knorrovom metodom glikozidacije uz srebrov triflat kao promotor. Uklanjanjem acetilne zaštite u Zemplénovim uvjetima nastaju konačni glikokonjugati. Glikokonjugatima  $\beta$ -anomerne konfiguracije bit će ispitan antiadhezijski učinak testom inhibicije hemaglutinacije. Strukture svih priređenih spojeva određene su NMR spektroskopijom ( $^1\text{H}$  i DEPTQ) i spektrometrijom masa (MS).

Ovaj rad napravljen je na Zavodu za organsku kemiju Kemijskog odsjeka Prirodoslovno-matematičkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu pod voditeljstvom izv. prof. dr. sc. Vesne Petrović Peroković i neposrednim voditeljstvom dr. sc. Željke Car.



**Zahvala:** Ova istraživanja finansijski podupire Hrvatska zaklada za znanost (projekt PEPTGLYCOSAR, IP-2014-09-7899).

[1] Car, Ž., Hrenar, T., Petrović Peroković, V., Ribić, R., Seničar, M., Tomić, S. Chem. Biol. Drug Des. **84** (2014) 393-401.

[2] Petrović Peroković, V., Ribić, R., Car, Ž., Tomić, S. Croat. Chem. Acta **86** (2016) 273-242.

Sponzori



**GENOS**



Organizacija

