



SiSK⁷

Sedmi simpozij studenata kemičara

22. listopada 2022.

Kemijski odsjek PMF-a
Horvatovac, 102a Zagreb

KNJIGA SAŽETAKA



UREDNIŠTVO

Glavna urednica: Magda Topić

Urednici: Karla Kukina Gradečak, Leon Poljanić

TEKST PRIPREMILI

AUTORI, koji su odgovorni za tekstove sažetaka

NASLOVNICA

Domagoj Jurišak

GRAFIČKA PRIPREMA I DIZAJN

Domagoj Jurišak, Magda Topić

FOTOGRAFIJA NA ZADNJOJ STRANICI

Magda Topić

TISAK

Baris d.o.o.

IZDAVAČ

Studentska sekcija Hrvatskog kemijskog društva (SSHKD)



ORGANIZATOR

Studentska sekcija Hrvatskog kemijskog društva (SSHKD)

PARTNERI

Studentska sekcija Hrvatskog društva kemijskih inženjera (SSHDKI)

Udruga studenata biotehnologije Sveučilišta u Rijeci (USBRI)

Simpozij studenata bioloških usmjerenja (SiSB)

ORGANIZACIJA

Jelena Kovač, predsjednica Organizacijskog odbora

Antonio Magnabosco, pročelnik SSHKD-a

Tim za financije:

Karla Remar, predsjednica tima i potpredsjednica Organizacijskog odbora

Rea Bilić, Lana Bogdanovski, Andreja Cocut, Maja Mikulić, Lara Resman

Tim za marketing:

Domagoj Jurišak, predsjednik tima

Tara Balen, Marcela Pelicarić, Antonia Škarica

Tim za planiranje:

Leon Poljanić, predsjednik tima

Karla Kukina Gradečak, Adrijana Karniš, Anamarija Makoter, Vedran Šimunaj, Magda Topić, Lucija Vrban

Tim za tehničku podršku:

Antun Zelić, predsjednik tima

Hrvoje Tašner

SAVJETNICI

dr. sc. Danijel Namjesnik

Sara Marijan, mag. chem.



POKROVITELJI

Hrvatsko kemijsko društvo (HKD)

Kemijski odsjek Prirodoslovno-matematičkog fakulteta (KO PMF)

Prirodoslovno-matematički fakultet (PMF)

SPONZORI

Hrvatska elektroprivreda d.d. (HEP d.d.)

Xellia d.o.o.

PLIVA d.o.o.

AlphaChrom d.o.o.

Magritek GmbH

Coca-Cola HBC

Selvita d.o.o.

Accumular d.o.o.

DONATORI

BANIL PROMET d.o.o.

Ivero d.o.o.

Genos d.o.o. za vještačenje i analizu

KEFO D.O.O.

Reviso d.o.o.

PAGO Croatia d.o.o.

Školska knjiga d.d.

Alfa d.d.

Cute Zagreb d.o.o.

SUFINANCIRANJE

Studentski zbor Sveučilišta u Zagrebu (SZUniZG)

Studentski zbor Prirodoslovno-matematičkog fakulteta (SZPMF)



RIJEČ PREDsjedNICE ORGANIZACIJSKOG ODBORA

Dragi sudionici Sedmog simpozija studenata kemičara,

čast mi je poželjeti Vam dobrodošlicu na 7. SiSK! Većina vas, a i ja sama, nikad nije sudjelovala na SiSK-u, iako ih je održano već šest. Kao i većinu propuštenih iskustava, pripisat ćemo to pandemiji. Nakon tri godine pauze, Simpozij se uspješno vratio i spreman Vam je to nadoknaditi. Nadamo se da ćemo opravdati Vaše, kao i povjerenje bivših Organizacijskih odbora, te da ćete kvalitetno provesti dan na Simpoziju. Od samih početaka, cilj je uvijek bio povezati što više studenata iz različitih gradova Hrvatske i cijele regije te ih potaknuti na upoznavanje, komunikaciju i suradnju. Želja nam je da studenti upoznaju znanost izvan predavanja na fakultetu i da im to omogućimo u što opuštenijoj atmosferi, uz ostale kolege studente. Broj sudionika ove godine nadmašuje sva naša očekivanja, ukupno sudjeluje 317 ljudi, od toga 4 plenarna, 4 pozvana, 14 usmenih i 25 posterskih izlaganja. Hvala Vam svima na prijavama, motivaciji da dođete i budete, zajedno sa nama, dio ove priče!

Ta priča ne bi bila moguća bez napornog rada ovogodišnje Organizacije, kojima je, svima od reda, ovo prvi puta da organiziraju znanstveni skup i htjela bih im se svima zahvaliti na predanosti i obavljenom poslu jer bez njih danas ne bismo imali Simpozij. Veliku zahvalu dugujem i Sari Marijan, predsjednici Organizacijskog odbora 6. SiSK-a, te Danijelu Namjesniku koji nam je previše puta pomogao kad smo bili u nevolji sa stvarima koje nismo znali sami, a sa mnom je u tim nevoljama najčešće bila Karla Remar, bez koje bi moj posao bio puno zahtjevniji. Tu su i naši partneri: SSHDKI, USBRI te SiSB koji su nam pomagali i podržavali nas. Isto tako, zahvaljujem se našim brojnim sponzorima i donatorima koji su nas podržali financijski i na brojne druge načine pomogli u realizaciji Simpozija.

Nadam se da će Vam SiSK7 ostati u lijepom sjećanju i da će narednih godina biti želje za sudjelovanjem u organizaciji te sudjelovanjem na Simpoziju. Za mene je ovo bilo jedno prekrasno, iznimno poučno, ponekad stresno iskustvo, ali kad vidim broj prijava i osvrnem se na posao koji smo napravili, mogu reći da se uistinu isplatilo.

Jelena Kovač

Predsjednica Organizacijskog odbora 7. Simpozija studenata kemičara



7. Simpozij studenata kemičara, Zagreb, 22. listopada 2022.



RIJEČ PROČELNIKA STUDENTSKE SEKCIJE HKD-a

Dragi studenti, profesori, asistenti te svi ostali sudionici,

nakon pune dvije godine od zadnjeg SiSK-a, odnosno pauze u neodržavanju ove manifestacije dosljedno svake godine uzrokovane epidemijom koronavirusa, sretni smo da se konačno imamo prilike družiti i učiti jedni od drugih na 7.SiSK-u. Simpozij nudi studentima jedinstvenu priliku okušati se u izlaganju – što posterskom, što usmenom te ih tako priprema za buduće nastupe na “pravim” znanstvenim konferencijama, ali i u poslovnom svijetu. Zahvaljujući našim plenarnim i pozvanim predavačima studenti imaju prilike vidjeti i učiti od svojih seniornih kolega koji su i sami nekoć bili na njihovom mjestu te razmijeniti razna iskustva na predavanjima, ali i pauzama na kojima je takva razmjena iskustava postala običaj. Time ovaj Simpozij iako u potpunoj organizaciji studenata ima dojam i duh te „prave“ znanstvene konferencije. Misija i vizija samog Simpozija i je „studenti za studente“ pa se kao cilj postavlja da se studenti međusobno upoznaju te eventualno i započnu neke zajedničke suradnje. Također, sve studente koji sudjeluju kao pasivni sudionici i još nisu aktivni u istraživačkom radu cilj je potaknuti na isto.

Na kraju, sve ovo ne bi bilo moguće bez naših vjernih i predanih ljudi iz Organizacije. Taj „mali“ tim studenata uspio je dovesti ovaj Simpozij ponovno u život. Brojni su sati provedeni na sastancima, putu, promocijama Simpozija, a sve s ciljem da budemo ponosni na to što smo napravili. Ovim putem se zahvaljujem svima na predanosti u radu za naš Simpozij. Veliko hvala Jeleni što je danonoćno činila sve ne bi li ovaj Simpozij bio, kako ona kaže: „Najbolji do sada“. Karli koja je bila desna ruka naše Jelene te sa svojim FR timom (Reom, Andreom, Majom, Larom i Lanom) uspjela skupiti financijska sredstva kako bi u ovo doba poskupljenja svega uspjeli u provedbi svih ideja. Leonu i HR timu (Magdi, Luciji, Karli, Adrijani, Anamariji i Vedranu) što su odradili sav dio vezan uz prijave, raspored, knjigu sažetaka... Našim PR-ovcima (Marceli, Antoniji, Tari, Almi i Lovri) predvođenima Domagojem što su odradili izvrstan posao i ispromovirali Simpozij na razini da smo okupili studente kemije i srodnih studija iz cijele RH, ali i inozemstva. Šećer na kraju su naši IT-„stručnjaci“ Antun i Hrvoje kojima hvala za svu tehničku podršku koju su pružili Organizaciji. Ne manje bitnima, štoviše jako bitnima, od srca hvala našim savjetnicima: Danijelu, Marinu, Sari, Nei, kao i profesorima Tomišiću i Cinčiću, na potpori i svim odgovorima na naše nedoumice kako i što činiti, te pročelnici Miljanić i Kemijskom odsjeku na ustupanju prostora Odsjeka za održavanje Simpozija. Hvala i svima ostalima koje ovdje nisam spomenuo, jer ograničen sam prostorom (1 stranica), a dragih ljudi koji su pridonijeli organizaciji ima za nekoliko listova papira nabrojanja.

Nadam se da će ovaj Simpozij potaknuti i ostale studente da se uključe u rad naše Sekcije.

Antonio Magnabosco

Pročelnik Studentske sekcije Hrvatskog kemijskog društva



7. Simpozij studenata kemičara, Zagreb, 22. listopada 2022.



PROGRAM SIMPOZIJA



9:00 – 10:00

REGISTRACIJA

OTVARANJE SIMPOZIJA

predavaonica A1

10:00 – 10:20

riječ predsjednice Organizacijskog odbora: **Jelena Kovač**

riječ pročelnice Kemijskog odsjeka PMF-a: prof. dr. sc. **Snežana Miljanić**

riječ dekana PMF-a: prof. dr. sc. **Mirko Planinić**

riječ pročelnika Studentske sekcije Hrvatskog kemijskog društva: **Antonio Magnabosco**

PLENARNA PREDAVANJA

predavaonica A1

moderator: Leon Poljanić

10:20 – 10:50

dr. sc. **Daria Domazet Jurašin** (Zavod za fizičku kemiju, Institut Ruđer Bošković, Zagreb):
Površinski aktivne tvari – odnos strukture i svojstava te primjena u nanosustavima

10:50 – 11:20

dr. sc. **Ivana Bačić** (Centar za forenzična ispitivanja, istraživanja i vještačenja “Ivan
Vučetić”, Zagreb)

Kemija i forenzika: ima neka tajna veza

11:20 – 11:30

KRATKA PAUZA

11:30 – 12:00

dr. sc. **Ljiljana Fruk** (Department of Chemical Engineering and Biotechnology, University
of Cambridge): Bio-nano alati u modernoj molekularnoj znanosti: od biokatalizatora
do nosača lijekova

12:00 – 12:30

izv. prof. dr. sc. **Nela Malatesti** (Odjel za biotehnologiju, Sveučilište u Rijeci):
Tri(*N*-metilpiridin-3-ij)porfirini kao fotosenzibilizatori za fotodinamičku terapiju

12:30 – 12:55

PAUZA ZA KAVU

USMENA IZLAGANJA

predavaonica A1

moderator: Antonio Magnabosco

predavaonica A2

moderator: Lucija Vrban

12:55 – 13:10

Katarina Ležaić

Sinteza i strukturna karakterizacija 3D
metaloorganskih mreža bakra(II) s *N*-
propilglicinatom i 4,4'-bipiridinom

Ana Ivančić

Utjecaj koncentracije kitozana kao prvog sloja
na svojstva polielektrolitnih višeslojeva
kitozana i karboksimetilceluloze

13:10 – 13:25

Leon Poljanić

Kokristalizacija perhalogeniranih donora
halogenske veze s iminima izvedenima iz 2-
nitrobenzaldehida

Karlo Petrić

Fotokemijsko dearomativno
ciklopropaniranje elektronima bogatih arena

13:25 – 13:40

Lea Čolakić

Dvostruki stres - mehanička svojstva
kristala bakra(II) s 3-nitropiridinom

Tea Frey

Računalno istraživanje trisupstituiranih
aminskih i piridinskih kovalentnih organskih
polimera sa azo, azoksi i azodioksidnim
poveznicama za adsorpciju CO₂

13:40 – 14:00

PAUZA ZA FOTOGRAFIRANJE

stepenice ispred zgrade Kemijskog odsjeka

14:00 – 14:45

RUČAK



14:45 – 15:30

POSTERSKA SEKCIJA

15:30 – 15:40

KRATKA PAUZA**USMENA IZLAGANJA**

predavaonica A1

moderator: Leon Poljanić

predavaonica A2

moderator: Karla Kukina Gradečak

15:40 – 15:55

Mia Jurković

Kationske metaloorganske mreže bakra(II) s 4,4'-bipiridinom i N-etilglicinatom: otopinska sinteza i rendgenska strukturna analiza

Mia Mesić

Utjecaj vrste dvovalentnog kationa na formiranje i svojstva polielektrolitnog višesloja poli(dialilidimetilamonijev klorid)/poli(natrijev 4-stirensulfonat)

15:55 – 16:10

Sara Goman

Taloženje kalcijeva oksalata monohidrata i dihidrata s galnom kiselinom

Antun Habajec

Porfen kao membrana za odvajanje metalnih iona

16:10 – 16:25

Damjan Šinjori

Mehanokemijska sinteza policijanometalata u šupljinama zeolita Y

Eva Josić, Tea Juračić

Utjecaj adsorbiranih polioiona na agregaciju TiO₂ čestica

16:25 – 16:40

Josipa Sarjanović

Je li kemija molibdena predvidljiva?

Filip Sente

Kvantno-mehanički doking malih bioaktivnih skeleta unutar aktivnog mjesta butirilkolinesteraze

16:40 – 16:45

Predstavljanje: **Grainzz**Predstavljanje: **Grainzz**

16:45 – 17:10

PAUZA ZA KAVU

Predstavljanje partnera: SSHDKI, USBRI (Naturis), SiSB (BIUS)

POZVANA IZLAGANJA

predavaonica A1

moderator: Marcela Pelicarić

predavaonica A2

moderator: Magda Topić

17:10 – 17:25

Tamara Rinkovec

Istraživanje procesa formiranja samoudruženih molekulskih mreža na površiti tekućina/krutina: studija na primjeru derivata izoftalnih kiselina

Zvonimir Mlinarić

Analitikom lijekova do personaliziranog liječenja raka dojke

17:25 – 17:40

Karla Janeš Mesarić

Katalitička sinteza karijere

Pegi Pavletić

Selektivni antagonisti D4 receptora visoke potencije – sinteza i terapijski potencijal

ZATVARANJE SIMPOZIJA

predavaonica A2

17:40 – 18:00

ZABAVNI PROGRAM



7. Simpozij studenata kemičara, Zagreb, 22. listopada 2022.



SADRŽAJ

PLENARNA PREDAVANJA

PL1	Površinski aktivne tvari – odnos strukture i svojstava te primjena u nanosustavima Darija Domazet Jurašin	19
PL2	Kemija i forenzika: ima neka tajna veza Ivana Bačić	20
PL3	Bio-nano alati u modernoj molekularnoj znanosti: od biokatalizatora do nosača lijekova Ljiljana Fruk	21
PL4	Tri(N-metilpiridin-3-ij)porfirini kao fotosenzibilizatori za fotodinamičku terapiju Nela Malatesti, Ivana Gobin, Ivana Ratkaj, Martina Mušković, Iva Čavar, Andrija Lesar	22

POZVANA IZLAGANJA

PP1	Istraživanje procesa formiranja samoudruženih molekulskih mreža na površini tekućina/krutina: studija na primjeru derivata izoftalnih kiselina Tamara Rinkovec, Demian Kalebić, Mark Van der Auweraer, Wim Dehaen, Jeremy N. Harvey, Steven De Feyter	25
PP2	Katalitička sinteza karijere Karla Janeš Mesarić	26
PP3	Analitikom lijekova do personaliziranog liječenja raka dojke Zvonimir Mlinarić, Lu Turković, Tajana Silovski, Biljana Nigović, Miranda Sertić	27
PP4	Selektivni antagonisti D4 receptora visoke potencije – sinteza i terapijski potencijal Pegi Pavletić	28



USMENA IZLAGANJA

U1	Sinteza i strukturna karakterizacija 3D metaloorganskih mreža bakra(II) s <i>N</i>-propilglicinatom i 4,4'-bipiridinom	31
	Katarina Ležaić, Mia Jurković, Darko Vušak, Biserka Prugovečki	
U2	Kokristalizacija perhalogeniranih donora halogenske veze s iminima izvedenima iz 2-nitrobenzaldehida	32
	Leon Poljanić, Nea Baus Topić, Nikola Bedeković, Vladimir Stilinović, Dominik Cinčić	
U3	Dvostruki stres – mehanička svojstva kristala bakra(II) s 3-nitropiridinom	33
	Lea Čolakić, Mateja Pisačić, Marijana Đaković	
U4	Utjecaj koncentracije kitozana kao prvog sloja na svojstva polielektrolitnih višeslojeva kitozana i karboksimetilceluloze	34
	Ana Ivančić, Juraj Nikolić, Davor Kovačević	
U5	Fotokemijsko dearomativno ciklopropaniranje elektronima bogatih arena	35
	Karlo Petrić, Ana Čikoš, Matija Gredičak, Nikola Topolovčan	
U6	Računalno istraživanje trisupstituiranih aaminskih i piridinskih kovalentnih organskih polimera s azo, azoksi i azodioksidnim poveznicama za adsorpciju CO₂	36
	Tea Frey, Ivan Kodrin	
U7	Kationske metaloorganske mreže bakra(II) s 4,4'-bipiridinom i <i>N</i>-etilglicinatom: otopinska sinteza i rendgenska strukturna analiza	37
	Mia Jurković, Katarina Ležaić, Darko Vušak, Biserka Prugovečki	
U8	Taloženje kalcijeva oksalata monohidrata i dihidrata s galnom kiselinom	38
	Sara Goman, Silvija Šafranko, Dominik Goman, Stela Jokić, Martina Medvidović-Kosanović, Anamarija Stanković	
U9	Mehanokemijska sinteza policijanometalata u šupljinama zeolita Y	39
	Damjan Šinjori, Nikola Jakupec, Ana Palčić, Anamarija Stanković	
U10	Je li kemija molibdena predvidljiva?	40
	Josipa Sarjanović, Mirta Rubčić, Jana Pisk	
U11	Utjecaj vrste dvovalentnog kationa na formiranje i svojstva polielektrolitnog višesloja poli(dialilidimetilamonijev klorid)/poli(natrijev 4-stirensulfonat)	41
	Mia Mesić, Tin Klačić, Davor Kovačević	
U12	Porfen kao membrana za odvajanje metalnih iona	42
	Antun Habajec, Igor Rončević, Josef Michl	
U13	Utjecaj adsorbiranih poliiona na agregaciju TiO₂ čestica	43
	Eva Josić, Tea Juračić, Jasmina Jukić, Tajana Begović	
U14	Kvantno-mehanički doking malih bioaktivnih skeleta unutar aktivnog mjesta butirilkolinesteraze	44
	Filip Sente, Ana Mikelić, Ines Primožič, Tomica Hrenar	



POSTERSKA IZLAGANJA

P1	Priprava heterocikličkih poliakceptora halogenske veze van Leusenovom sintezom	47
	Sara Cerovski, Ruđer Sušan, Vinko Nemeč, Dominik Cinčić	
P2	Kokristalizacija Schiffove baze izvedene iz etilendiamina i piridin-2-karbaldehida s perfluoriranim donorima halogenske veze	48
	Antonio Magnabosco, Vinko Nemeč, Dominik Cinčić	
P3	Kokristalizacija benzoksazinskog analoga s tetrafluor-1,4-dijodbenzenom	49
	Lucija Marić, Antonio Magnabosco, Vinko Nemeč, Nikola Bedeković, Vladimir Stilinović, Dominik Cinčić	
P4	Izostrukturni koordinacijski polimeri olovovih halogenida s 3-halogenpiridinima	50
	Lucija Marić, Nikola Bedeković, Vladimir Stilinović	
P5	Istraživanje fotokatalitičke aktivnosti (ne)dopiranog CeO₂	51
	Laura Milišić, Dalibor Tatar, Igor Đerđ	
P6	Solvotermalna sinteza i optička svojstva kompleksnih spojeva na bazi lantanoida i njihovih derivata	52
	Tomislav Šilješ, Sara Goman, Jelena Kojčinović, Dalibor Tatar, Srijita Nundy, Igor Djerdj	
P7	Istraživanje primjene (sup)tropskog voća kao kiselo-baznog indikatora	53
	Rajna Marija Jozić, Ana Amić	
P8	Utjecaj različitih metoda pripreme površine SPCE-a na adsorpciju izabranih proteina	54
	Ivan Konjević, Tea Romih, Lea Žibret, Ika Fazarinc, Ajda Beltram, David Majer, Matjaž Finšgar, Samo B. Hočevar	
P9	Određivanje anionskih tenzida s različitim brojem ugljikovih atoma sensorima na bazi kvaternih amonijevih soli	55
	Mateja Peršić, Mirela Samardžić, Mateja Budetić	
P10	Sinteza i evaluacija citotoksičnosti konjugata 3-aminofenilboronične i cimetne kiseline	56
	Miran Kemura, Lea Goreta, Franko Burčul, Mladen Miloš, Siniša Ivanković	
P11	Carevo novo ruho: određivanje temperature glavnog faznog prijelaza lipida UV/Vis spektroskopijom	57
	Jana Munivrana, Petra Maleš, Danijela Bakarić	
P12	Učinak mikroplastičnih čestica PS-a na stanične linije zdravog i tumorskog porijekla	58
	Iva Polonji, Dajana Kučić, Martina Miloloža, Jelena Knežević, Jurica Baranašić	
P13	Računalna studija mehanizmom temeljenih ireverzibilnih inhibitora monoamin-oksidge B	59
	Lucija Vrban, Robert Vianello	



P14	Antibakterijska svojstva polielektrolitnog višesloja kitozan/poli(akrilna kiselina) sa slojem adsorbiranog lizozima Luka Babić, Tin Klačić, Jasmina Jukić, Anamarija Zore, Roman Štukelj, Andrijana Sever Škapin, Klemen Bohinc, Davor Kovačević	60
P15	<i>In silico</i> istraživanje utjecaja glikana i mutacija na rekombinantni enzim peroksidaza hrena Matej Kožić, Antun Barišić, Branimir Bertoša	61
P16	Kompleksiranje aniona s metilnim esterom pentafenilalanina u acetonitrilu Lucija Otmačić, Matija Modrušan, Nikolina Vidović, Nikola Cindro, Ivo Crnolatac, Giovanna Speranza, Vladislav Tomišić, Gordana Horvat	62
P17	Razvoj i implementacija ciljne molekulske dinamike u GROMACS-u Helena Alija, Vedran Miletić	63
P18	Kvalitet slada proizvedenih iz različitih udjela zobi i zobnih pahuljica Lenka Grubač, Hristina Radović	64
P19	Razvoj naprednog katalitičkog sustava za oksidaciju aromatskih spojeva Antonia Škarica, Filip Car, Vesna Tomašić	65
P20	Struktura i elektronska svojstva kubičnog LaMnO_3 - proračuni temeljeni na teoriji funkcionala gustoće (DFT) Iva Toković, Danica Piper, Stevan Armaković, Vladimir Srdić	66
P21	Istraživanje inkluzijskih kompleksa diamantoidnih amonijevih soli s ciklodekstrinima Amalija Ernečić, Sunčica Roca, Nikola Bregović, Viktorija Lazarenko, Marina Šekutor, Marija Alešković	67
P22	Određivanje antioksidativne aktivnosti ekstrakata <i>Calendula officinalis</i> L. primjenom Briggs-Rauscher reakcije Ajdin Mujezin, Lejla Klepo	68
P23	Optimizacija sinteze C6-derivata D-galaktoze Filip Grdović, Đani Škalamera	69
P24	Stereokemija ML_2 metalnih kompleksa s bpa i imda ligandima Aleks Logožar, Natalija Pantaloni Juraj, Berislav Perić, Robert Vianello, Srećko I. Kirin	70
P25	Termalna svojstva Cd(II) kompleksa pripremljenih u različitim otapalima Nađa Štetin, Berta Barta Holló	71



PLENARNA PREDAVANJA



7. Simpozij studenata kemičara, Zagreb, 22. listopada 2022.



POVRŠINSKI AKTIVNE TVARI – ODNOS STRUKTURE I SVOJSTAVA TE PRIMJENA U NANOSUSTAVIMA

STRUCTURE-PROPERTY RELATIONSHIP OF SURFACTANTS AND THEIR APPLICATION IN NANOSYSTEMS

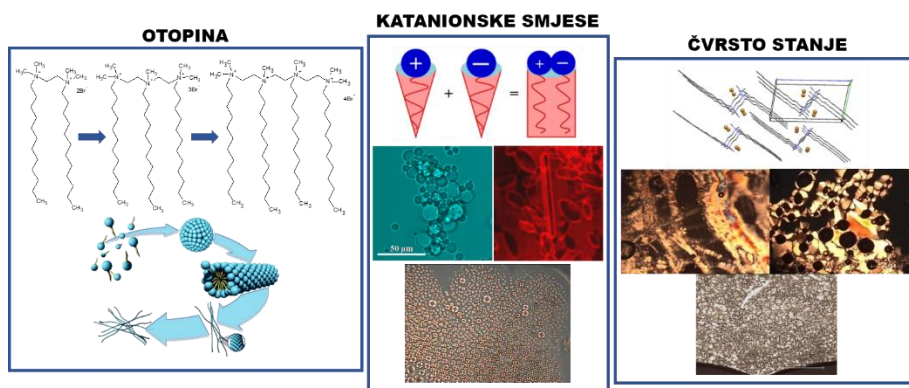
Darija Domazet Jurašin

Laboratorij za biokoloide i površinsku kemiju, Zavod za fizičku kemiju, Institut Ruđer Bošković, Zagreb, Hrvatska
djurasin@irb.hr

Površinski aktivne tvari (PAT) pokazuju posebna svojstva u vodenim otopinama: adsorpciju na granice faza i asocijaciju u micelle, vezikule te različite tekuće kristalne mezofaze. Takva svojstva posljedica su strukture molekula PAT koja sadrži dijelove s različitim afinitetima prema otapalu tj. hidrofilni i hidrofobni dio. Današnji trendovi u istraživanjima PAT su uglavnom usmjereni na sintezu ekološki prihvatljivijih PAT koje imaju poboljšana svojstva u svojoj praktičnoj primjeni od do sada korištenih. Naš istraživački pristup usredotočen je na (i) variranje strukturnih elemenata molekula PAT i/ili (ii) smjese ionskih PAT suprotnog naboja tzv. katanionske smjese. Do danas su sintetizirani i okarakterizirani površinski aktivni kvaterni amonijevi spojevi (kationske PAT) koji se međusobno razlikuju po broju (od monomerne do tetramerne PAT [1]) ili duljini alkilnih (C_{12} , C_{14} i C_{16} [2]) lanaca, strukturi ionske skupine (uvođenje kinuklidinskog prstena [2]) te vrsti protuiona (uvođenje metalnog iona). Također, istražen je utjecaj strukturno različitih PAT na taloženje kalcijevih fosfata i stabilnost titanatnih nanožica [3]. Budući da katanionske smjese pokazuju snažan sinergizam te raznoliko fazno ponašanje istražene su katanionske smjese PAT bitno različite strukture i geometrije molekula [4].

19

POVRŠINSKI AKTIVNE TVARI



[1] D. Jurašin, I. Habuš, N. Filipović-Vinceković, *Colloids Surf. A Physicochem. Eng. Asp.* **368** (2010) 119.

[2] M. Skočibušić, R. Odžak, Z. Štefanić, I. Križić, L. Krišto, O. Jović, T. Hrenar, I. Primožič, D. Jurašin, *Colloids Surf. B - Biointerfaces* **140** (2016) 548.

[3] A. Selmani, J. Lützenkirchen, K. Kučanda, D. Dabić, E. Redel, I. Delač Marion, D. Kralj, D. Domazet Jurašin, M. Dutour Sikirić, *Beilstein J. Nanotechnol.* **10** (2019) 1024.

[4] S. Novak, S. Morasi Piperčić, S. Makarić, I. Primožič, M. Ćurlin, Z. Štefanić, D. Domazet Jurašin, *J. Phys. Chem. B* **120** (2016) 12557.



KEMIJA I FORENZIKA: IMA NEKA TAJNA VEZA

CHEMISTRY AND FORENSIC SCIENCE: THERE MUST BE SOME SECRET BOND

Ivana Bačić

Centar za forenzična ispitivanja, istraživanja i vještačenja „Ivan Vučetić“ Ministarstva unutarnjih poslova Republike Hrvatske, Ilica 335, 10000 Zagreb, Hrvatska
ivana.bacic@mup.hr

Forenzička kemija je veoma prilagodljiva znanstvena disciplina koja provodi usporedbu i identifikaciju niza materijala temeljem njihovih kemijsko-fizikalnih svojstava, s ciljem pretvaranja traga s mjesta počinjenja kaznenog djela u pravovaljani materijalni dokaz. Zahvaljujući činjenici da je kemija svuda oko nas i materijalni tragovi u ovoj disciplini su veoma raznoliki. Neki se čak toliko često pojavljuju da su iznjedrili cijela područja vještačenja poput boja, stakla, tragova zapaljivih tekućina, eksploziva, polimera ili duhana. Iako ih je već puno nabrojano oni čine tek jedan dio izazova s kojima se kemičari susreću u svakodnevnoj borbi za pravom i pravdom. Kako je davno u svom načelu rekao Edmond Locard da "svaki kontakt ostavlja trag", tragovi s počinitelja na mjesto događaja ali i obratno mogu se prenijeti da počinitelj toga nije niti svjestan. Stoga vještaci kemičari, osim u laboratoriju, nerijetko imaju svoju ulogu i pri temeljitom pregledu mjesta događaja. Mirna ruka i jaki mikroskop temelj su kemijskih vještačenja, međutim bez podrške brojnih analitičkih instrumentnih tehnika vrijednost dobivenih informacija ostala bi na razini Sherlocka Holmesa. Srećom, tehnološki napredak i dobra opremljenost analitičkim instrumentima omogućili su dobivanje rezultata od forenzičkog značaja. Koja će se tehnika primijeniti ovisi o vrsti i količini traga kao i o pitanjima na koja je potrebno odgovoriti. Budući da tijekom vještačenja, kad god je to moguće, treba osigurati očuvanje materijalnih dokaza, nedestruktivne tehnike svakako su prvi izbor. Kako to u stvarnosti izgleda najbolje je pokazati na primjerima, a jedan od njih je dokazivanje prisutnosti tragova markera Solvent Yellow 124 (SY124) i antrakinonskog bojila Solvent Blue (SB35) u uzorcima "opranog" goriva. Ilegalna praksa uklanjanja bojila i markera iz fiskalnih goriva kao što je plavi diesel i njegova preprodaja po višim cijenama poznata je kao "pranje" goriva. U opranim gorivima markeri i bojila se još uvijek nalaze u tragovima, a u svrhu njihova dokazivanja u našem laboratoriju razvijena je metoda ekstrakcije na čvrstoj fazi za izolaciju fiskalnih bojila iz goriva. Ekstrahirana bojila analizirana su metodom tekućinske kromatografije spregnute s dvojnomo spektrometrijom masa uz ionizaciju elektroraspršenjem (LC-ESI-MS/MS). Dobiveni rezultati doprinijeli su rješavanju kaznenog djela s višemilijunskom materijalnom štetom i ekološkim posljedicama.



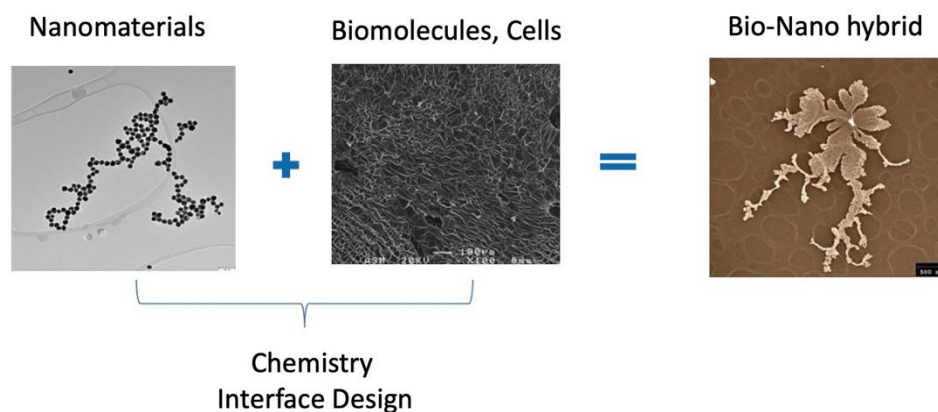
BIO-NANO ALATI U MODERNOJ MOLEKULARNOJ ZNANOSTI: OD BIOKATALIZATORA DO NOSAČA LIJEKOVA

BIONANO TOOLS IN MODERN MOLECULAR SCIENCE: FROM BIOCATALYSTS TO DRUG CARRIERS

Ljiljana Fruk

¹Department of Chemical Engineering and Biotechnology, University of Cambridge,
Phillipa Fawcett Drive, Cambridge, United Kingdom
Lf389@cam.ac.uk

Moderna molekularna znanost je sinteza kemije, molekularne biologije, fizike i umjetne inteligencije s ciljem razvoja novih materijala za korištenje u kemijskoj industriji, ali i medicini. Poseban napredak u posljednja dva desetljeća je postignut na području bio-nanotehnologije koja objedinjuje pripremu novih nanomaterijala s jedinstvenim svojstvima biomolekula. Tako je bionano inženjering nadavano doveo do razvoja nove vrste efikasnih cjepiva, ali i do niza zanimljivih materijala koji nam mogu pomoći da jednostavnije i lakše uđemo u eru održivih procesa i produkata. Bio-nano hibridi su sve prisutniji ne samo u dizajnu opto-elektroničkih uređaja i biosenzora, uključujući brze antigenske testove, već također u pripravi pametnih materijala i nove generacije nosača lijekova. Predavanje će se pozabaviti osnovnim principima pripreme bio-nano hibrida i njihovoj primjeni u katalizi i medicini.



[1] L.Fruk, A. Kerbs, Bionanotechnology: Concepts and Applications, Cambridge University Press 2021.

[2] A. Bistović et al, Size-tunable and immunocompatible polymer nanocarriers for drug delivery in pancreatic cancer, *Nanoscale* **2022**, DOI: 10.1039/d2nr00864e



TRI(N-METILPIRIDIN-3-IJ)PORFIRINI KAO FOTOSENZIBILIZATORI ZA FOTODINAMIČKU TERAPIJU

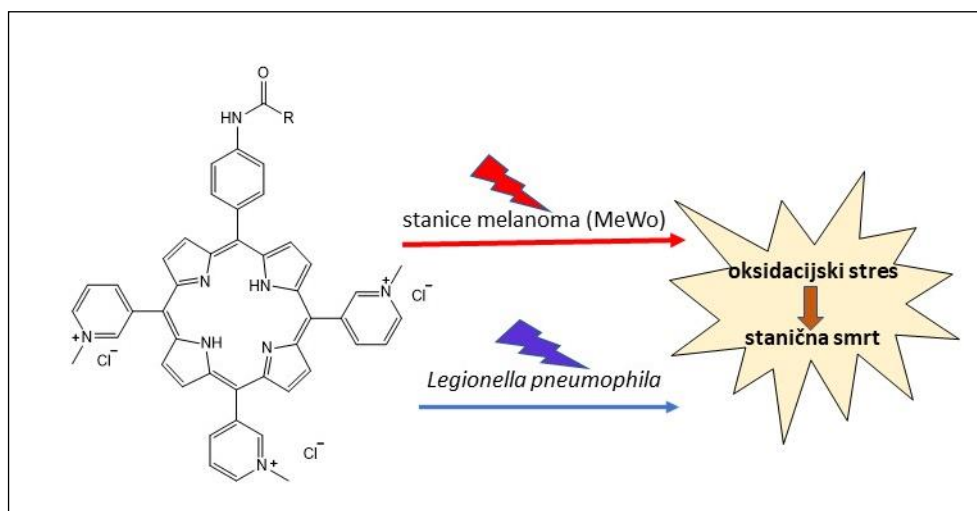
TRI(N-METHYLPYRIDINIUM-3-YL)PORPHYRINS AS PHOTOSENSITISERS FOR PHOTODYNAMIC THERAPY

Nela Malatesti¹, Ivana Gobin², Ivana Ratkaj¹, Martina Mušković¹, Iva Čavar¹, Andrija Lesar²

¹Odjel za biotehnologiju, Sveučilište u Rijeci, Radmile Matejčić 2, 51000 Rijeka, Hrvatska

²Zavod za mikrobiologiju i parazitologiju, Medicinski fakultet, Sveučilište u Rijeci, Braće Branchetta 20, 51000 Rijeka, Hrvatska
nela.malatesti@biotech.uniri.hr

Fotosenzibilizatori su spojevi koji se aktiviraju svjetlošću, a u fotodinamičkoj terapiji (PDT) se koriste za uništavanje stanica raka i različitih patogena, aktivacijom u prisustvu molekularnog kisika. [1] Fotosenzibilizator (PS) treba biti netoksičan bez svjetlosne aktivacije, što više apsorbirati svjetlost u području valnih duljina koje se koriste za aktivaciju, i što više proizvoditi singletni kisik i druge reaktivne kisikove vrste (ROS) koje uzrokuju oksidacijski stres i posljedično, dovode do smrti stanice. [1] S obzirom na kratko vrijeme života ovih citotoksičnih vrsta, za učinkovit PDT izuzetno je važan što bolji ulazak PS-a u stanice. Stoga se sve više istražuju načini kako povećati njihovu pasivnu selektivnost i stanični unos [1], i u tom smislu amfipatski porfirini predstavljaju skupinu spojeva koja bi u ulozi PS-a mogla osigurati ova tražena svojstva. [2] Posebno su zanimljivi asimetrični *meso*-tetraarilni porfirini kod kojih tri pozitivna naboja osiguravaju topljivost u vodi, a četvrta pozicija omogućava podešavanje lipofilnosti. [2] Naša istraživanja su fokusirana na asimetrične tri(*N*-metilpiridin-3-ij)porfirine koji su pokazali odgovarajuća fotofizikalna i fotokemijska svojstva, a povećanje lipofilnosti se potvrdilo kao dobra strategija za bolji ulazak u stanice i time učinkovitiji PDT. Između ostalog, antitumorski potencijal ovih spojeva se u našim istraživanjima do sada potvrdio na stanicama melanoma, a protumikrobni na legioneli, te će se ukratko predstaviti ovi rezultati.



[1] M. Ethirajan, Y. Chen, P. Joshi, R. K. Pandey, *Chem. Soc. Rev.* **40** (2011) 340.

[2] N. Malatesti, I. Munitić, I. Jurak, *Biophy. Rev.* **9** (2017) 149.



POZVANA IZLAGANJA



7. Simpozij studenata kemičara, Zagreb, 22. listopada 2022.



ISTRAŽIVANJE PROCESA FORMIRANJA SAMOUDRUŽENIH MOLEKULSKIH MREŽA NA MEĐUPOVRŠINI TEKUĆINA/KRUTINA: STUDIJA NA PRIMJERU DERIVATA IZOFTALIH KISELINA

EXPLORING FUNDAMENTALS OF THE FORMATION OF SELF-ASSEMBLED MOLECULAR NETWORKS AT THE LIQUID/SOLID INTERFACE: A CASE STUDY ON ISOPHTHALIC ACIDS DERIVATIVES

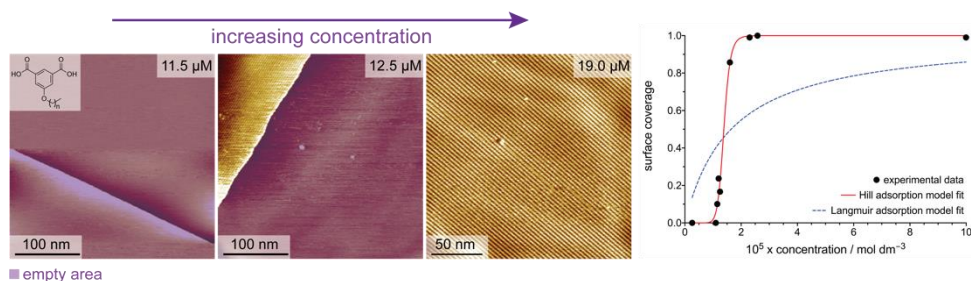
Tamara Rinkovec, Demian Kalebić, Mark Van der Auweraer, Wim Dehaen,
Jeremy N. Harvey, Steven De Feyter

KU Leuven, Department of Chemistry, Celestijnenlaan 200F, B-3001 Leuven, Belgium
tamara.rinkovec@kuleuven.be

Molecular self-assembly, a promising strategy for modifying surfaces on the nanometre scale, is of great importance for developing functional materials in electronics, photonics, catalysis, and 2D crystal engineering. However, the association of the free components into an ordered structure at the interface between a liquid and a crystalline solid, i.e. the liquid-solid interface, is a complex process that involves an interplay of interactions between assembling molecules, solvent and substrate. Therefore, understanding the complexity of molecular mechanisms controlling the self-assembly process at the liquid-solid interface presents the foundation for rational design and fine-tuning of properties of the materials. In this work, the main aim is to obtain a comprehensive picture of the formation of these systems through a systematic study of the influence of several key variables (e. g. concentration, temperature, molecular structure) on the overall process of self-assembled molecular network formation. The key idea is to correlate experimental results with analytical thermodynamic models to improve the understanding of supramolecular chemistry in two dimensions by obtaining quantitative data. For this purpose, a series of isophthalic acid derivatives have been chosen as a model system. The effect of the concentration on the adsorption behaviour, focusing on the surface coverage, has been evaluated at the nanoscale level using scanning tunnelling microscopy (STM). Our preliminary results confirm the existence of a critical concentration above which self-assembly occurs, and interestingly, the change in the molecular structure (the length of the alkyl chain) has a remarkable impact on its value.

25

Scanning tunnelling microscopy study



[1] O. Ochs, N. Martsinovich, W. M. Heckl i M. Lackinger, *J. Phys. Chem. Lett.* **11** (2020) 7320.

[2] K. Gurdumov, U. Mazur i K. W. Hipps, *J. Phys. Chem. C* **126** (2022) 12916.



KATALITIČKA SINTEZA KARIJERE

CATALYTIC CAREER SYNTHESIS

Karla Janeš Mesarić

Rimac Technology, Savska opatovina 36, 10090 Zagreb, Hrvatska

karla.janes@gmail.com

Hoću li uspjeti naći posao nakon faksa? Što ako nemam odlične ocjene? Jesam li osuđen/a cijeli život na rad u laboratoriju? Kako do prvih kontakata u poslovnom svijetu? Mijenjati poslove ili ne? Rad uz faks, dobra ili loša ideja? Dobra plaća kao najbitniji kriterij odabira, ili? Radio/la bi kod Rimca?! Pa nisi ti FERovac. Previše “što ako,” “možda”, “ne znam” neće te dovesti nikamo. Marljivost i naporan rad su najbolji katalizatori u stvarnom životu, zapamti to.



ANALITIKOM LIJEKOVA DO PERSONALIZIRANOG LIJEČENJA RAKA DOJKE

PHARMACEUTICAL ANALYSIS FOR PERSONALIZED BREAST CANCER TREATMENT

Zvonimir Mlinarić¹, Lu Turković¹, Tajana Silovski², Biljana Nigović¹,
Miranda Sertić¹

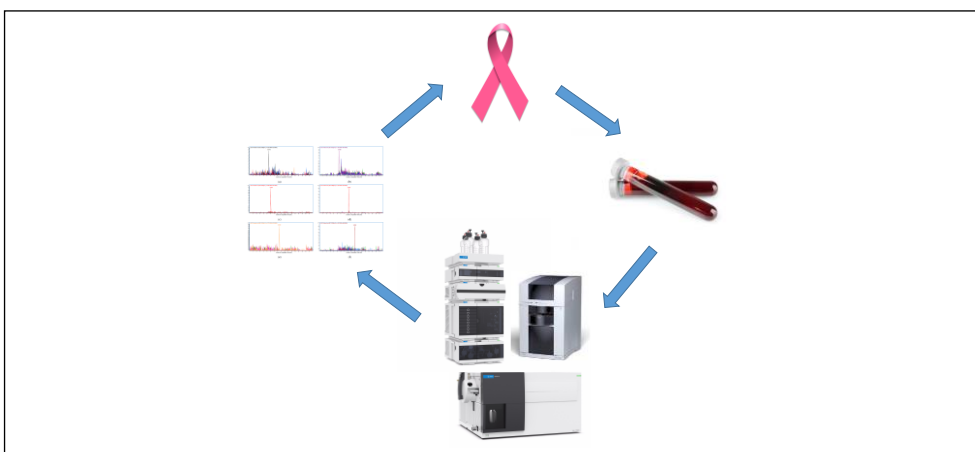
¹ Department of Pharmaceutical Analysis, Faculty of Pharmacy and Biochemistry,
University of Zagreb, Ante Kovačića 1, 10000, Zagreb, Croatia

² Department of Oncology, University Hospital Centre Zagreb, Kišpatićeva 12, 10000
Zagreb, Croatia

zmlinaric@pharma.hr

Breast cancer is the most common cancer in the world with 2.3 million new cases diagnosed in 2020 [1]. This type of cancer is of great public health interest and reducing its burden on the healthcare systems worldwide is of high importance. Over 70 % of breast cancers are hormone receptor-positive (HR+) and human epidermal growth factor receptor 2-negative (HER2-) [2]. Today, the standard therapy for locally advanced or metastatic HR+/ HER2- breast cancer is a combination of cyclin-D dependent kinase (CDK) 4 and 6 inhibitors with endocrine therapy because of better overall survival and progression-free survival. However, despite therapeutic benefits, these drugs exhibit serious side effects and toxicities. This problem can be tackled with therapeutic drug monitoring (TDM) which has been proven to improve clinical outcomes for some anticancer drugs. In order to enable precise determination of plasma concentrations of these drugs, advanced analytical methods have to be developed. One of the most common techniques utilized for this purpose is liquid chromatography coupled with a mass spectrometer. As a greener alternative, capillary electrophoresis with a mass spectrometer can be employed. Often for plasma drug analysis additional concentration and cleanup of a sample are required in which case various *on-line* or *off-line* concentrations like dispersive liquid-liquid microextraction (DLLME) or solid-phase extraction (SPE) can be implemented. Finally, these methods applied to breast cancer patients' plasma samples can result in a determination of an individual's own pharmacokinetic parameters with subsequent optimal drug dosage, better clinical outcomes and less side effects.

27



[1] Sung H et al. *CA: A Cancer Journal for Clinicians*. **71**(3), 209–249.

[2] Shah AN et al. *The Oncologist*. **25**(6), e900–e908.

This research was funded by Croatian Science Foundation, grant numbers HRZZ-UIP-2019-04-8461 and DOK-2021-02-4595.



SELEKTIVNI ANTAGONISTI D4 RECEPTORA VISOKE POTENCIJE- SINTEZA I TERAPIJSKI POTENCIJAL

HIGHLY POTENT AND SELECTIVE DOPAMINE D4 RECEPTOR ANTAGONISTS- SYNTHESIS AND THERAPEUTIC POTENTIAL

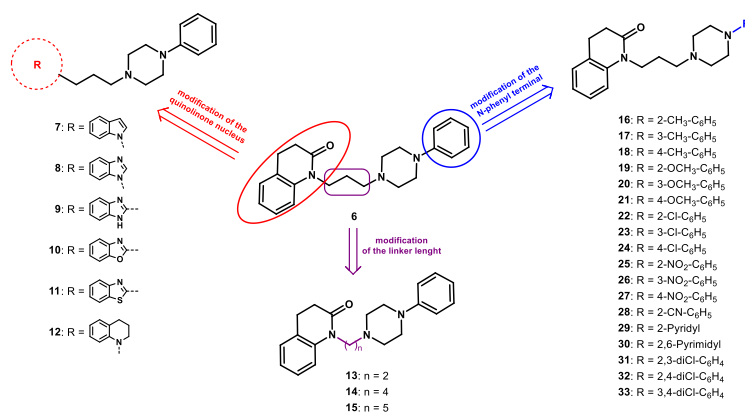
Pegi Pavletić

Via Madonna delle Carceri 10, ChIP, 62032 Camerino (MC), Italia
pegi.pavletic@unicam.it

Dopamine is a catecholamine neurotransmitter produced in several areas of the brain. It is involved in various physiological functions by interacting with specific receptors, members of the G protein- coupled receptor superfamily. They are classified in two main groups, namely D1-like receptors, including D1 and D5 receptors (DRD1 and DRD5), and D2-like receptors, comprised of D2, D3 and D4 receptors (DRD2, DRD3 and DRD4). DRD4 is a potential target for the treatment of several disorders, including Parkinson's disease, alcohol and substance use disorders, eating disorders and even carcinoma. [1] Based on previous research, compound **6** was modified in a following way to try and obtain highly selective DRD4 antagonists:

- Replacement of the quinolinone portion with other bioisosteric nuclei (compounds **7–12**);
- Replacement of the propyl linker with chains of different lengths (compounds **13–15**);
- Introduction of substituents with different electronic and lipophilic contributions in all combinations, such as CH₃(+ π , - σ), OCH₃(- π , - σ), Cl(+ π , + σ), and NO₂(- π , + σ), in ortho-, meta-, and para-positions of the N-phenyl ring (compounds **16–27**).

Synthesised compounds were analysed by radioligand binding assay against DRD4, DRD3 and DRD2, and the most promising compounds were tested in functional assays, via molecular modeling studies and even used as a starting point of the design of proteolysis targeting chimeras for DRD4. Our conclusion confirms that those compounds with the substituents in the para-positions of the aromatic terminal have the highest DRD4 selectivity and could be a good potential therapeutic lead-compound.



[1] G. Giorgioni, F. Del Bello, P. Pavletić, W. Quaglia, L. Botticelli, C. Cifani, M. V. Micioni Di Bonaventura, E. Micioni Di Bonaventura, A. Piergentili, *Eur. J. Med. Chem.* **212** (2021) 113141.



USMENA IZLAGANJA



7. Simpozij studenata kemičara, Zagreb, 22. listopada 2022.



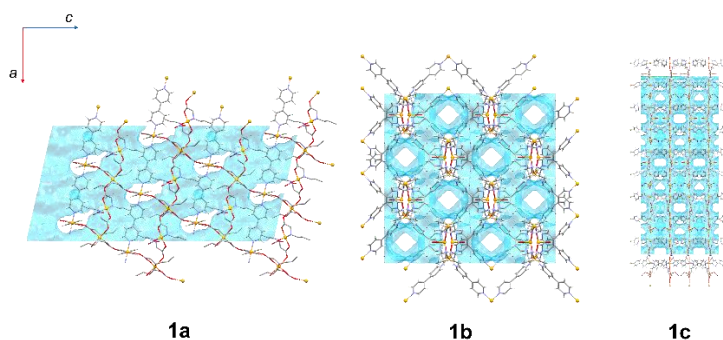
SINTEZA I STRUKTURNA KARAKTERIZACIJA 3D METALOORGANSKIH MREŽA BAKRA(II) S *N*-PROPILGLICINATOM I 4,4'-BIPIRIDINOM

SYNTHESIS AND STRUCTURAL CHARACTERIZATION OF 3D COPPER(II) METAL-ORGANIC FRAMEWORKS WITH *N*-PROPYLGLYCINATE AND 4,4'-BIPYRIDINE

Katarina Ležaić, Mia Jurković, Darko Vušak, Biserka Prugovečki

Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu,
Horvatovac 102a, 10000 Zagreb, Hrvatska
klezaic@chem.pmf.hr

Metaloorganske mreže (MOF) su polimerni koordinacijski spojevi koji sadrže metalne ione ili klustere međusobno povezane organskim ligandima (poveznicama). Mogu sadržavati potencijalne šupljine ispunjene molekulama otapala ili drugim malim molekulama što ih čini poroznim materijalima. [1] Struktura MOF-ova može biti fleksibilna te se mijenjati uslijed promjene temperature, tlaka ili pod utjecajem drugih vanjskih podražaja (zračenje, svjetlost). [2] Imaju širok spektar primjene kao na primjer u katalizi, skladištenju plinova, pročišćavanju zraka, ciljanoj dostavi lijekova i sakupljanju vode iz atmosfere. [2–5] U ovome radu predstavljene su tri nove trodimenzionalne metaloorganske mreže koje sadrže bakrov(II) ion, *N*-propilglicinat (PrGly) i 4,4'-bipiridin (4,4'-bpy): $\{[\text{Cu}_3(\text{NO}_3)_2(\text{PrGly})_4(4,4'\text{-bpy})_2] \cdot (4,4'\text{-bpy}) \cdot 2\text{H}_2\text{O}\}_n$ (**1a**), $\{[\text{Cu}(\text{NO}_3)_{1-x}(\text{PrGly})(\text{H}_2\text{O})(4,4'\text{-bpy})](\text{NO}_3)_x \cdot \text{solvat}\}_n$ (**1b**) i $\{[\text{Cu}_2(\text{NO}_3)_{2-x}(\text{PrGly})_2(\text{H}_2\text{O})(4,4'\text{-bpy})_2](\text{NO}_3)_x \cdot \text{solvat}\}_n$ (**1c**). Navedeni spojevi dobiveni su metodom otopinske sinteze te su im određene kristalne strukture metodom difrakcije rendgenskog zračenja na jediničnom kristalu. Ovi koordinacijski polimeri građeni su od tri tipa sekundarnih građevnih jedinica u kojima je prisutan Jahn-Tellerov efekt. Svi spojevi su porozni sadržavajući jednodimenzijske (**1a**) ili trodimenzijske (**1b**, **1c**) beskonačne kanale ispunjene molekulama otapala, 4,4'-bipiridina ili nitratnim ionima (slika 1). Raspon volumnog udjela kanala u kristalu od 28,2 do 44,7 %.



Slika 1. Prikaz kristalnog pakiranja spojeva **1a**, **1b** i **1c** duž kristalografske osi *b*. Plavom bojom prikazani su beskonačni kanali ispunjeni molekulama otapala, 4,4'-bipiridina ili nitratnim ionima.

- [1] S. R. Batten, N. R. Champness, X.-M. Chen, J. Garcia-Martinez, S. Kitagawa, L. Öhrström, M. O’Keeffe, M. Paik Suh i J. Reedijk, *Pure Appl. Chem.* **85** (2013) 1715–1724.
 [2] C. Pettinari, F. Marchetti, N. Mosca, G. Tosi i A. Drozdov, *Polym. Int.* **66** (2017) 731–744.
 [3] S. L. James, *Chem. Soc. Rev.* **32** (2003) 276–288.
 [4] W. Xu i O. M. Yaghi, *ACS Cent. Sci.* **6** (2020) 1348–1354.
 [5] V. F. Samanidou i E. A. Deliyanni, *Molecules* **25** (2020) 960.



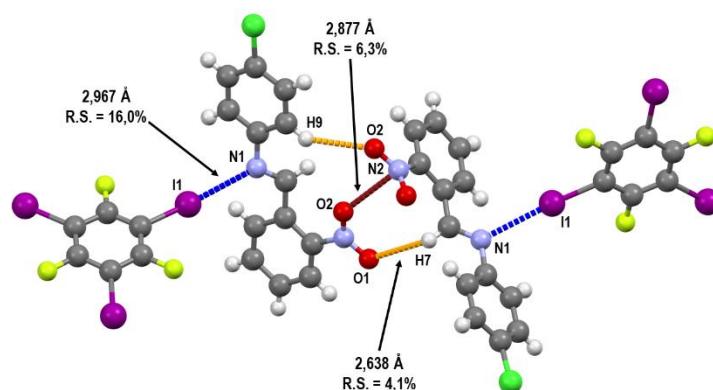
KOKRISTALIZACIJA PERHALOGENIRANIH DONORA HALOGENSKE VEZE S IMINIMA IZVEDENIMA IZ 2- NITROBENZALDEHIDA

COCRYSTALLIZATION OF PERHALOGENATED HALOGEN BOND DONORS WITH IMINES DERIVED FROM 2-NITROBENZALDEHYDE

Leon Poljanić, Nea Baus Topić, Nikola Bedeković, Vladimir Stilinović,
Dominik Cinčić

Zavod za opću i anorgansku kemiju, Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet,
Sveučilište u Zagrebu, Horvatovac 102a, Zagreb, Hrvatska
lpoljanic@chem.pmf.hr

Proučavanje halogenske veze i drugih interakcija σ -šupljine, poput pnikogenske veze, u višekomponentnim sustavima jedno je od najbrže rastućih područja kristalnog inženjerstva i supramolekulske kemije [1, 2]. U ovom istraživanju sintetizirana su tri imina izvedena iz 2-nitrobenzaldehida i 4-halogenanilina (halogen = Cl, Br, I) kako bi se pripravile molekule koje sadrže različite funkcijske skupine koje se mogu ponašati kao akceptori halogenske veze: halogeni atom, atom dušika iminske skupine i nitro skupina. Osim kao akceptor halogenske veze, nitro skupina je dodatno zanimljiva jer može ostvarivati i pnikogenske veze [3, 4]. Mogućnost kokristalizacije pripremljenih imina s odabranim perhalogeniranim donorima halogenske veze (1,2-dijodtetrafluorbenzen, 1,3-dijodtetrafluorbenzen, 1,4-dijodtetrafluorbenzen i 1,3,5-trijodtrifluorbenzen) ispitana je tekućinom potpomognutom mehanokemijskom sintezom, sintezom iz otopine i trokomponentnom mehanokemijskom sintezom u jednom koraku. Pripremljeno je šest novih kokristala samo s dva odabrana donora, 1,3-dijodtetrafluorbenzenom i 1,3,5-trijodtrifluorbenzenom. Dobiveni produkti okarakterizirani su difrakcijom rentgenskog zračenja na praškastom uzorku i jediničnom kristalu te termičkim i računalnim metodama. Strukturnom analizom utvrđeno je da je u svim kokristalima dominantna supramolekulska interakcija halogenska veza $N\cdots I$ koja se ostvaruje između atoma joda perhalogeniranog donora halogenske veze i atoma dušika iminske skupine. U pet kokristala molekule imina dodatno su povezane pnikogenskom vezom $N\cdots O$ između susjednih nitro skupina.



- [1] G. Cavallo, P. Metrangolo, R. Milani, T. Pilati, A. Priimagi, G. Resnati, G. Terraneo, *Chem. Rev.* **116** (2016) 2478.
[2] J. S. Murray, P. La Ne, T. Clark, P. Politzer, *J. Mol. Model.* **13** (2007) 1033.
[3] V. Nemeč, D. Cinčić, *CrystEngComm* **18** (2016) 7425.
[4] A. Bauza, A. V. Sharko, G. A. Senchyk, E. B. Rusanov, A. Frontera, K. V. Domasevitch, *CrystEngComm* **19** (2017) 1933.



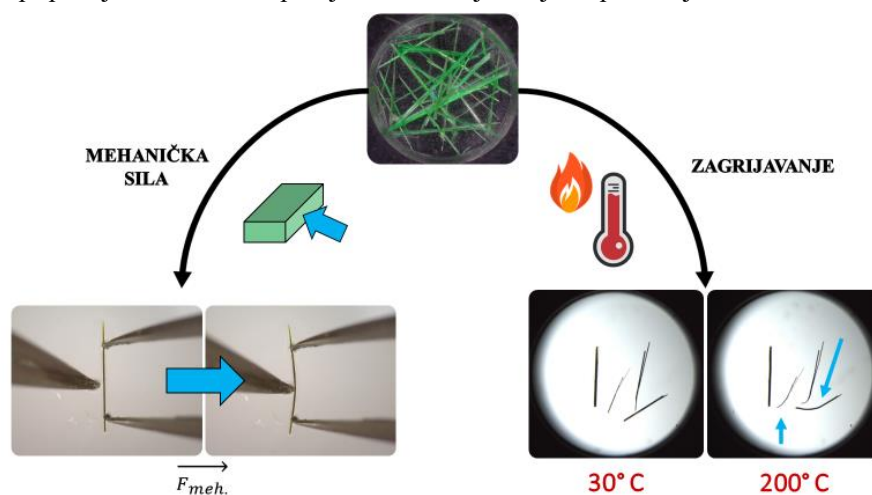
DVOSTRUKI STRES – MEHANIČKA SVOJSTVA KRISTALA BAKRA(II) S 3-NITROPIRIDINOM

DUAL STRESS – MECHANICAL PROPERTIES OF COPPER(II) CRYSTALS WITH 3-NITROPYRIDINE

Lea Čolakić, Mateja Pisačić, Marijana Đaković

Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu,
Horvatovac 102a, 10000 Zagreb, Hrvatska
lcolakic@chem.pmf.hr

Fizikalna svojstva kristalnih tvari ovise, ne samo o njihovoj molekularnoj strukturi, već i o međusobnom uređenju molekula u kristalnom stanju te su posljedično tome supramolekulske interakcije prepoznate kao jedan od važnih parametara za ugađanje fizikalnih svojstava kristalnih krutina. Upravo iz tog razloga sve se više ističe važnost kristalnog inženjerstva koje daje uvid u razumijevanje, ali i kontrolu međumolekulskih interakcija s ciljem pripreme kristalnih tvari željenog supramolekulskog ishoda, ali i teženih fizikalnih svojstava. [1] Ograničavajući faktori kod primjene kristalnih materijala u praksi predstavljaju njihova lomljivost i krtoš. No, nedavno otkriće molekularskih kristala prilagodljivih na vanjski mehanički podražaj rezultira značajnim pomakom prema razmatranju ovih materijala kao potencijalnih kandidata za primjenu u naprednim tehnologijama. [2, 3] Većina ovakvih fleksibilnih kristala organske su prirode, dok su se tek nedavno pojavila i istraživanja metalo-organskih sustava koji omogućuju pristup brojnim svojstvima koja je teško ostvariti u čisto organskim sustavima. Kao idealni modeli metalo-organskih sustava koji rezultiraju fleksibilnim kristalima pokazali su se koordinacijski polimeri. [4] U okviru ovog istraživanja priređeni su koordinacijski polimeri bakrovih(II) halogenida s 3-nitropiridinom. Na dobivene jedinične kristale primijenjena je vanjska mehanička sila pri čemu je određena vrsta mehaničkog odziva te je ista i dodatno kvantificirana. Mehanički odziv kristala koreliran je s jakošću i usmjerenošću međumolekulskih interakcija prisutnih u kristalnim pakiranjima. Jedinичnim kristalima pripremljenih spojeva detaljno su istražena termička svojstva te mehanički odziv na primjenu vanjskog toplinskog podražaja te je ustanovljen fleksibilan odziv pripremljenih kristala na primjenu ovih dvaju vanjskih podražaja.



[1] G.R. Desiraju, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **46** (2007) 8342.

[2] P. Naumov, S. Chizhik, M. K. Panda, N. K. Nath, E. Boldyreva, *Chem. Rev.*, **115** (2015) 12400.

[3] S. Saha, M. K. Mishra, C. M. Reddy, G. R. Desiraju, *Acc. Chem. Res.*, **51** (2017) 2957.

[4] M. Đaković, M. Borovina, M. Pisačić, C. B. Aakeröy, Ž. Soldin, B.-M. Kukovec, I. Kodrin, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **57** (2018) 14801.

Ovaj je rad financirala Hrvatska zaklada za znanost projektom IP-2019-04-1242.



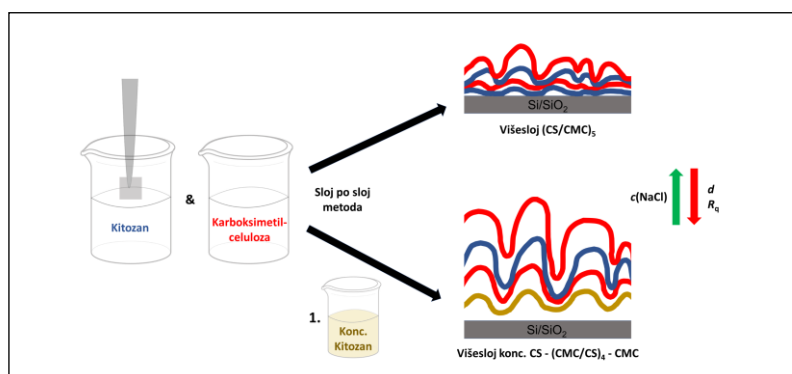
UTJECAJ KONCENTRACIJE KITOZANA KAO PRVOG SLOJA NA SVOJSTVA POLIELEKTROLITNIH VIŠESLOJEVA KITOZANA I KARBOKSIMETILCELULOZE

INFLUENCE OF CONCENTRATION OF CHITOSAN AS AN ANCHORING LAYER ON THE PROPERTIES OF CHITOSAN/CARBOXYMETHYL CELLULOSE POLYELECTROLYTE MULTILAYERS

Ana Ivančić, Juraj Nikolić, Davor Kovačević

Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu,
Horvatovac 102a, 10000 Zagreb, Hrvatska
aivancic@chem.pmf.hr

Polielektrolitni višeslojevi (PEM-ovi) tanki su filmovi koji se pripremaju naizmjeničnom adsorpcijom polielektrolita suprotnih naboja na površinu supstrata. [1] PEM-ovi kitozana (CS), prirodnog polikationa, i karboksimetilceluloze (CMC), polianiona derivata celuloze, su posebno zanimljivi zbog njihove biokompatibilnosti i netoksičnosti dok, s druge strane, pokazuju antibakterijska i antifungalna svojstva. [2] Zbog navedenih svojstava primjena im je raznolika, npr. u prehrambenoj industriji kao zaštita različitog voća od truljenja tijekom stajanja te dostavi lijekova. U ovom istraživanju pripremljeno je šest (CS/CMC)₅ PEM-ova pri tri različite koncentracije natrijeva klorida i s različitim koncentracijom kitozana kao prvog sloja. Rast filmova praćen je elipsometrijski dok je mikroskopijom atomskih sila (AFM) promatrana površinska morfologija višeslojeva. Nadalje, AFM-om su određeni parametri hrapavosti površine i debljina filmova te je napravljena usporedba debljine određene AFM-om i elipsometrijski. Rezultati dobiveni primjenom elipsometrije su pokazali da pripremljeni PEM-ovi rastu eksponencijalno te da dolazi do smanjenja debljine filmova s porastom koncentracije natrijeva klorida u otopinama polielektrolita. Nadalje, korištenjem koncentrirane otopine kitozana za pripremu prvog sloja dobivaju se do čak četiri puta deblji nanofilmovi što se može pripisati većoj prekrivenosti površine supstrata prvim adsorbiranim slojem. S druge strane, rezultati AFM-a su pokazali da su parametri hrapavosti površine povezani s debljinom filmova. Za kraj, usporedba debljine određivane elipsometrijski i mikroskopijom atomskih sila pokazala je dobro podudaranje u vrijednostima.



[1] L. M. Petrila, F. Bucatariu, M. Mihai, C. Teodosiu, *Materials* **14** (2021) 4152

[2] H. Wang, J. Qian, F. Ding, *J Agric Food Chem.* **66** (2018) 395-413.



FOTOKEMIJSKO DEAROMATIVNO CIKLOPROPANIRANJE ELEKTRONIMA BOGATIH ARENA

PHOTOCHEMICAL DEAROMATIVE CYCLOPROPANATION OF ELECTRON-RICH ARENES

Karlo Petrić¹, Ana Čikoš², Matija Gredičak³, Nikola Topolovčan³

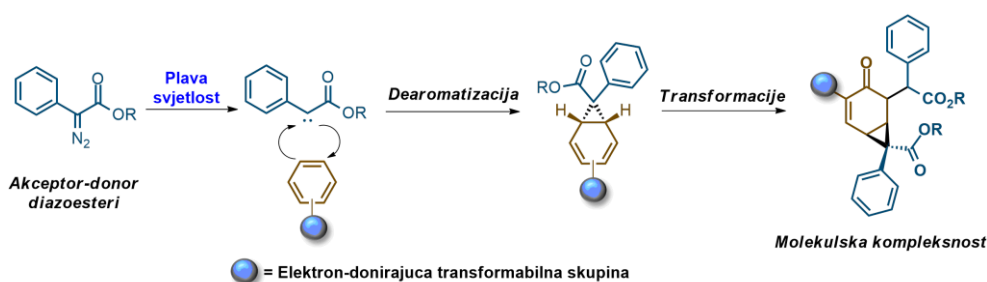
¹ Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Horvatovac 102a, 10000 Zagreb, Hrvatska

² Centar za NMR, Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, 10000 Zagreb, Hrvatska

³ Laboratorij za biomimetičku kemiju, Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, 10000 Zagreb, Hrvatska

kpetric@chem.pmf.hr

Reakcije dearomatizacije derivata benzena omogućuju sintetski dizajn koji uključuje pretvorbu jeftinih i lako dostupnih aromatskih π -sustava u strukturno kompleksne molekule u samo nekoliko konvergentnih sintetskih koraka. Generiranje singletnih ili tripletnih karbena i njihov transfer (ciklopropaniranje) na različite vrste aromata i heteroaromata rezultira policikličkim norkaradienima tj. cikloheksa-1,3-dienima koji su prekursori za daljnju strukturnu modifikaciju. [1] Za razliku od vrlo istraženog ciklopropaniranja karbenima prijelaznih metala, analogne fotokemijske mogućnosti su do nedavno bile rezervirane samo za reakcije pod utjecajem ultraljubičastog zračenja što vrlo često dovodi do neproduktivnih pozadinskih procesa. Uporabom akceptor-donor diazoestera omogućeno je generiranje vrlo reaktivnih karbena plavom svjetlošću što značajno proširuje kemijski prostor unutar kojeg se dobivaju strukturni motivi kojima je do sada bilo moguće pristupiti jedino preko velikog broja kemijskih pretvorbi. [2] Metodologija ovog istraživanja uključivala je generiranje donor-akceptor karbena pomoću vidljive svjetlosti te njihov transfer na derivate benzena supstituirane transformabilnim elektron-donirajućim skupinama. Dobiveni spojevi (norkaradieni) poslužili su kao platforma za daljnje transformacije u nearomatske strukture koje sadrže do šest uzastopnih centara kiralnosti (σ -bishomobenzeni). Također, prisustvo reaktivnih funkcijskih skupina omogućilo je njihovu daljnju manipulaciju u strukturno definirane ciljne molekule.



[1] a) L. W. Ciszewski, K. Rybicka-Jasinska, D. Gryko *Org. Biomol. Chem.* **17** (2019) 432–448. b) J. Durka, J. Turkowska, D. Gryko *ACS Sustainable Chem. Eng.* **9** (2021) 8895–8918. c) K. L. Smith, C. L. Padgett, W. D. Mackay, J. S. Johnson *J. Am. Chem. Soc.* **142** (2020) 6449–6455.

[2] a) I. D. Jurberg, H. M. L. Davies *Chem. Sci.* **9** (2018) 5122–5118. b) Y. Guo, T. V. Nguyen, R. M. Koenigs *Org. Lett.* **21** (2019) 8814–8818.



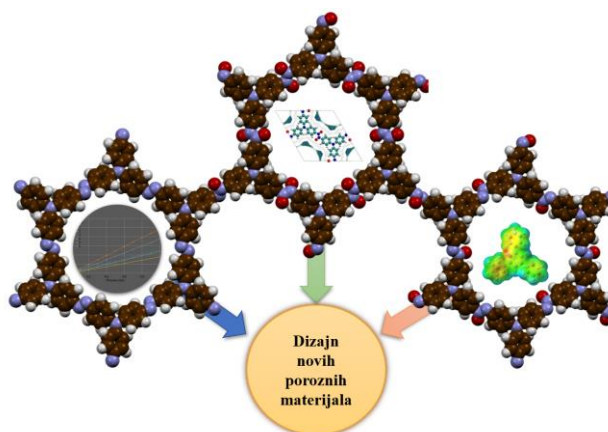
RAČUNALNO ISTRAŽIVANJE TRISUPSTITUIRANIH AMINSKIH I PIRIDINSKIH KOVALENTNIH ORGANSKIH POLIMERA S AZO, AZOKSI I AZODIOKSIDNIM POVEZNICAMA ZA ADSORPCIJU CO₂

COMPUTATIONAL STUDY OF TRISUPSTITUTED AMINE AND PYRIDINE COVALENT ORGANIC POLYMERS WITH AZO, AZOXY AND AZODIOXY LINKERS FOR CO₂ ADSORPTION

Tea Frey, Ivan Kodrin

Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu,
Horvatovac 102a, 10000 Zagreb, Hrvatska
tfrey@chem.pmf.hr

Ubrzan industrijski razvoj doveo je do povećanja razine ugljikovog dioksida u prirodi, koji negativno utječe na okoliš. Dizajn novih materijala za njegovu adsorpciju jedan je od glavnih smjerova istraživanja novih funkcionalnih sustava. Kovalentne organske mreže (engl. *covalent organic frameworks*, COFs) i kovalentni organski polimeri (engl. *covalent organic polymers*, COPs) pokazuju široku primjenjivost u selektivnoj adsorpciji CO₂. [1, 2] U sklopu ovog istraživanja, računalno je modelirano šest novih spojeva izgrađenih od trifenil supstituiranih amina i piridina kao građevnih jedinica povezanih azo, azoksi i azodiosidnim poveznicama u 2D mreže. Stabilnost kristalnih struktura pri različitim međuslojnim pomacima ispitana je računalno, periodičkim DFT metodama u programu CRYSTAL17. Dobivene optimizirane strukture podvrgnute su Monte Carlo simulacijama u programu RASPA pri temperaturama 298 i 273 K, a dobivene adsorpcijske izoterme međusobno su uspoređene. Programom VTK vizualizirana je raspodjela molekula CO₂ i N₂ unutar proučavanih poroznih materijala, a dobiveni rezultati uspoređeni su s rezultatima analize elektrostatskog potencijala danih spojeva. Pokazalo se da je azodiosidna poveznica obećavajući novi kandidat u sintezi novih kovalentnih organskih mreža. Dok analiza elektrostatskih potencijala daje dobar uvid u lokalna vezna mjesta, DFT metode i Monte Carlo simulacije omogućuju detaljni pregled strukturnih i adsorpcijskih karakteristika takvih materijala. Predložena računalna strategija predstavlja prvi korak u dizajnu novih poroznih organskih materijala za selektivnu adsorpciju CO₂.



[1] P. Šutalo, M. PISAČIĆ, I. Biljan, I. Kodrin, *CrystEngComm* **24** (2022) 4748–4763.

[2] J. Ozdemir, I. Mosleh, M. Abolhassani, L. F. Greenlee, R. R. Beitle, M. H. Beyzavi, *Front. Energy Res.* **7** (2019) 77.

Ovaj rad je financirala Hrvatska zaklada za znanost projektom IP-2020-02-4467.



KATIONSKE METALOORGANSKE MREŽE BAKRA(II) S 4,4'-BIPYRIDINOM I N-ETILGLICINATOM: OTOPINSKA SINTEZA I RENDGENSKA STRUKTURNA ANALIZA

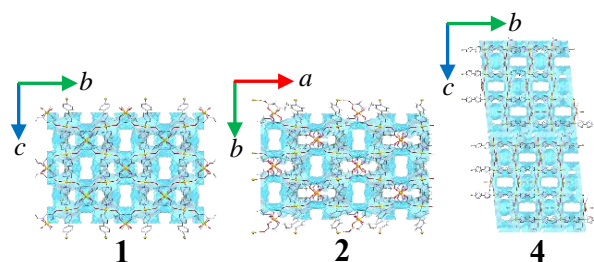
CATIONIC COPPER(II) METAL-ORGANIC FRAMEWORKS WITH 4,4'-BIPYRIDINE AND N-ETHYLGLYCINATE: SOLUTION SYNTHESIS AND X-RAY STRUCTURE ANALYSIS

Mia Jurković, Katarina Ležaić, Darko Vušak, Biserka Prugovečki

Zavod za opću i anorgansku kemiju, Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet,
Sveučilište u Zagrebu, Horvatovac 102a, Zagreb, Hrvatska

mjurkovic1@chem.pmf.hr

Metalni ioni i organski ligandi koji grade metaloorganske mreže (engl. *metal-organic frameworks*, MOF) smatraju se primarnim građevnim jedinicama, dok se veći agregati formirani pomoću polidentatnih poveznica nazivaju sekundarnim građevnim jedinicama. Polimerizacijom sekundarnih građevnih jedinica nastaju polimerni materijali visoke poroznosti i stabilnosti, male gustoće te velike specifične površine, odnosno MOF-ovi. [1,2] Zbog zanimljivih svojstava i raznolike primjene (skladištenje plinova, pročišćavanje zraka, ciljane dostava lijekova, asimetrična kataliza), [1,2] IUPAC je 2019. godine uvrstio MOF-ove među 10 istaknutih tehnologija koje će promijeniti svijet. [3] U okviru ovog istraživanja pripravljena su četiri nova koordinacijska polimera koji sadrže bakrov(II) ion, *N*-etilglicinat (EtGly) i 4,4'-bipiridin (4,4'-bpy): $\{[\text{Cu}_2(\text{NO}_3)(\text{EtGly})_2(\text{H}_2\text{O})(4,4'\text{-bpy})_2]\text{NO}_3 \cdot 2\text{DMSO} \cdot 3\text{H}_2\text{O}\}_n$ (**1**), $\{[\text{Cu}_2(\text{NO}_3)(\text{EtGly})_2(4,4'\text{-bpy})_2]\text{NO}_3 \cdot 2\text{DMSO} \cdot \text{H}_2\text{O}\}_n$ (**2**), $\text{Cu}/4,4'\text{-bpy}/\text{EtGly}/\text{solvat}$ (**3**) i $\{[\text{Cu}_7(\text{NO}_3)_{8-x}(\text{EtGly})_6(4,4'\text{-bpy})_8](\text{NO}_3)_x \cdot \text{solvat}\}_n$ (**4**). Koordinacijski polimeri **1** i **3** pripremljeni su metodom otopinske sinteze uz zagrijavanje, no pokazali su se nestabilnima u otopini što je rezultiralo pregradnjom spoja **1** u spoj **2** te spoja **3** u spoj **4**. Metodom difrakcije rendgenskog zračenja na jediničnom kristalu određene su kristalne strukture za **1**, **2** i **4**. Spojevi **1** i **2** su trodimenzijski koordinacijski polimeri, a u spoju **4** se izmjenjuju bakrovi(II) ioni i molekule 4,4'-bipiridina čineći dvodimenzijske slojeve. Kristalne strukture spojeva prožete su trodimenzijskim beskonačnim kanalima (slika 1), a volumni udio kanala u volumenu jedinične ćelije spojeva je u rasponu 36,6 – 52,0 %.



Slika 1. Kristalno pakiranje spojeva s bakrovim(II) ionom, *N*-etilglicinatom i 4,4'-bipiridinom. Plavom bojom su prikazani beskonačni kanali molekula otapala.

[1] V. V Butova, M. A. Soldatov, A. A. Guda, K. A. Lomachenko i C. Lamberti, *Russ. Chem. Rev.* **85** (2016) 280–307.

[2] C. Pettinari, F. Marchetti, N. Mosca, G. Tosi i A. Drozdov, *Polym. Int.* **66** (2017) 731–744.

[3] F. Gomollom-Bel, *Chem. Int.* **41** (2019) 12–17.



TALOŽENJE KALCIJEVA OKSALATA MONOHIDRATA I DIHIDRATA S GALNOM KISELINOM

NASLOV PRECIPITATION OF CALCIUM OXALATE MONOHYDRATE AND DIHYDRATE WITH GALLIC ACID

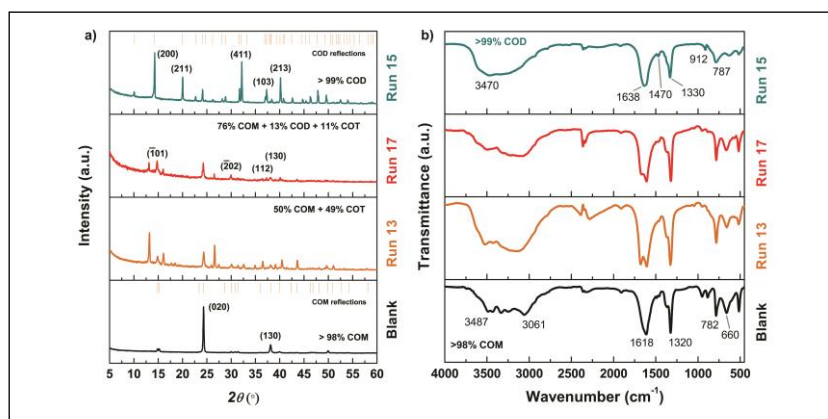
Sara Goman¹, Silvija Šafranko², Dominik Goman¹, Stela Jokić², Martina Medvidović-Kosanović¹, Anamarija Stanković¹

¹Odjel za kemiju, Sveučilište Josipa Juraja Strossmayera u Osijeku, Ulica cara Hadrijana 8/A, 31000 Osijek, Hrvatska

²Prehrambeno-tehnološki fakultet, Sveučilište Josipa Juraja Strossmayera u Osijeku, Ulica cara Hadrijana 8/A, 31000 Osijek, Hrvatska

gomansara7@gmail.com

S namjerom pronalaska novog lijeka ili inhibitora, čija će primarna uloga biti sprječavanje nastajanja bubrežnih kamenaca, provedena su mnogobrojna istraživanja. Glavni predmet proučavanja kroz navedeno istraživanje bio je kalcijev oksalat, kao i njegovi hidratizirani oblici (COM, COD i COT), koji su glavni spojevi prisutni u sastavu bubrežnih kamenaca. Istraživanje se uglavnom temeljilo na pripremi i proučavanju strukturne karakterizacije (TG, XDR, FTIR, SEM) hidrata kalcijevog oksalata u interakciji s galnom kiselinom (GA). Eksperimenti su provedeni na temelju variranja različitih parametara kao što su temperatura (25 °C, 36,5 °C i 48 °C), pH vrijednosti (5,6, 6,5 i 7,5) te količina dodanog GA (u rasponu od 100 mg do 1000 mg). Utjecaji parametara korištenih u istraživanju nastajanja COM i COD analizirani su metodologijom odziva površine. Osim toga, proces je optimiziran pomoću iste metode, kako bi se maksimizirala njihova količina u uzorcima. Analize su potvrdile da GA inhibira nastanak COM (0-100%), ali također utječe na COD (0 ≤ 99%) pospešujući njihov razvoj. Varijacija dodane količine GA kao i pH medija doprinosi još većem stvaranju COD. Istaživanje je također uključivalo i provođenje elektrokemijskih mjerenja kako bi se ispitala interakcija tijekom procesa stvaranja kristala i adsorpcija GA s formiranim kristalima.



Priznanja:

Autori zahvaljuju Odjelu za kemiju, Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku na financijskoj podršci (PPUZN_MMK).



MEHANOKEMIJSKA SINTEZA POLICIJANOMETALATA U ŠUPLJINAMA ZEOLITA Y

MECHANOCHEMICAL SYNTHESIS OF POLYCYANOMETALLATES INSIDE ZEOLITE Y CAVITIES

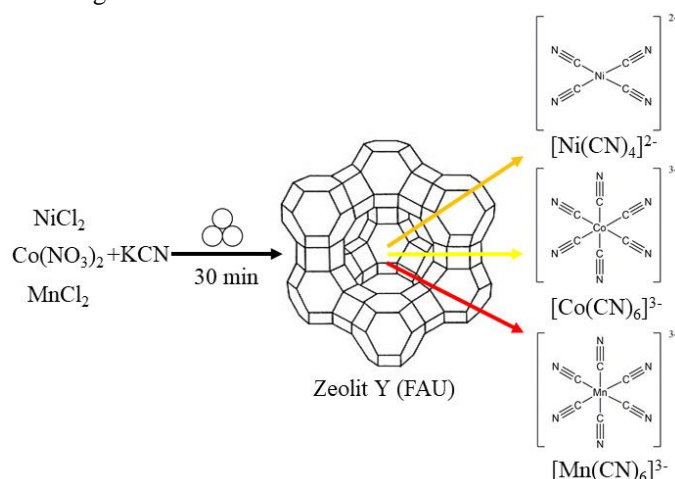
Damjan Šinjori¹, Nikola Jakupec², Ana Palčić², Anamarija Stanković¹

¹Sveučilište Josipa Jurja Strossmeyera u Osijeku, Odjel za kemiju, Ulica cara Hadrijana 8/A
31000 Osijek, Hrvatska

²Institut Ruđer Bošković, Bijenička Cesta 54, 10000 Zagreb, Hrvatska
dsinjori@kemija.unios.hr

Zeoliti su klasa anorganskih spojeva koji se sastoje od atoma aluminija i silicija premoštenih kisikom. U svojoj strukturi sadrže kanale i šupljine, koje ovisno o strukturnom tipu zeolita mogu biti do 2 nm u promjeru, u kojima su obično smješteni kationi alkalijskih i zemnoalkalijskih metala. Ti kationi se mogu zamijeniti drugim kationima [1] ili kompleksnim spojevima. Pokazano je kako se razni policijanometalati, kompleksni anioni opće formule $[M(CN)_x]^{y-}$ mogu otopinski sintetizirati unutar šupljina zeolita. [2]

U ovom radu mehanokemijski su sintetizirani policijanometalati prijelaznih metala unutar šupljina zeolita Y (strukturnog tipa FAU). Niklov(II) klorid ($NiCl_2$), kobaltov(II) nitrat ($Co(NO_3)_2$), manganov(II) klorid ($MnCl_2$) i bakrov(II) nitrat ($Cu(NO_3)_2$), zajedno s kalijevim cijanidom (KCN) i natrijevom formom zeolita Y, korišteni su u mehanokemijskoj sintezi. Mehanokemijska sinteza provedena je na dva načina: postupno i u jednom koraku. U postupnoj sintezi prvo je mljevenjem napravljena ionska izmjena natrijevih kationa s kationima prijelaznih metala. Dobiveni produkti su zatim mljeveni s KCN u odgovarajućim omjerima. Dobiveni produkti analizirani su infracrvenom spektroskopijom i difrakcijom rentgenskog zračenja na polikristalnom uzorku. Postupnom sintezom dobiveni su tetracijanikelat(II); $[Ni(CN)_4]^{2-}$, heksacijanokobaltat(II); $[Co(CN)_6]^{4-}$ i heksacijanomanganat(III); $[Mn(CN)_6]^{3-}$. U slučaju bakra(II) uspješno je napravljena ionska zamjena, ali policijanometaladni kompleks nije dobiven. Sintezom u jednom koraku priređen je niklov(II) cijanid; $Ni(CN)_2$. Ovim je istraživanjem pokazano kako je mehanokemija pogodna alternativa za sintezu policijanometalata unutar šupljina zeolita uz očuvanje kristalne strukture istog.



[1] T. Maesen, *Stud. Surf. Sci. Cat.*, **168** (2007) 1.

[2] R. J. Taylor, R. S. Drago, J. E. George, *J. Am. Chem. Soc.*, **111** (1989) 6610.

Rad je izrađen na Institutu Ruđer Bošković, na Zavodu za kemiju materijala pod vodstvom dr. sc. Ane Palčić i Nikole Jakupca, mag. chem. (HRZZ projekt: UIP-2019-04-4977) i mentorstvom doc. dr. sc. Anamarije Stanković.

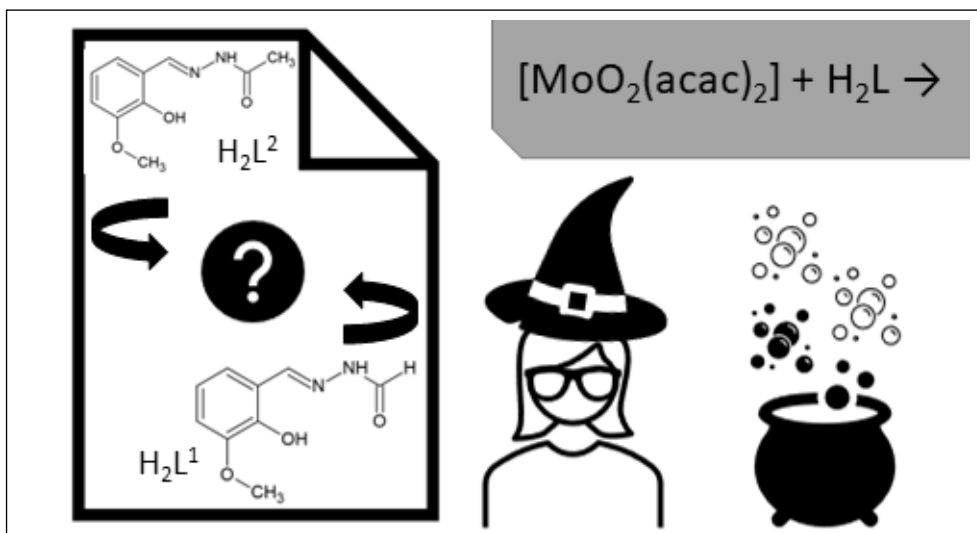


JE LI KEMIJA MOLIBDENA PREDVIDLJIVA? IS MOLYBDENUM CHEMISTRY PREDICTABLE?

Josipa Sarjanović, Mirta Rubčić, Jana Pisk

Zavod za opću i anorgansku kemiju, Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet,
Sveučilište u Zagrebu, Horvatovac 102a, 10000 Zagreb, Hrvatska
jsarjanovic@chem.pmf.hr

The coordination chemistry of molybdenum has expanded substantially due to the introduction of versatile range of ligands and catalytical properties of complexes. [1] Hydrazone ligands and their metal complexes have wide applications in biological, pharmaceutical, analytical, catalytic and industrial fields. [2–4] In this research, two ligands obtained from 2-hydroxy-3-methoxybenzaldehyde were prepared and coordinated to the MoO_2^{2+} core. If reactions were performed in methanol or acetonitrile, the polynuclear $[\text{MoO}_2(\text{L}^1)]_n$ or mononuclear complex $[\text{MoO}_2(\text{L}^2)(\text{D})]$, (D =solvent) was obtained. Different conditions for the preparation of the desired complexes were used. All the complexes were analysed and identified by IR-ATR, TG analysis, while molecular and crystal structure was determined by X-Ray diffraction. Further research perspective is to test the obtained complexes as catalysts, as well as to investigate their electric properties.



- [1] J. A. McCleverty, *Molybdenum: Inorganic & Coordination Chemistry*. In *Encyclopedia of Inorganic and Bioinorganic Chemistry*, John Wiley & Sons, New Jersey, 2011, str. 1–28.
- [2] M. Shakhdofa, M. Shataiwi, N. M. Morsy, T. M. A. Adbel-rassel, *Main Group Chem.* **13** (2014) 187–218.
- [3] S. Shujah, Zia-ur-Rehman, N. Muhammad, A. Shah, S. Ali, N. Khalid, A. Meetsma, *J. Organomet. Chem.* **741–742** (2013) 59–66.
- [4] S. Shujah, A. Shah, Zia-ur-Rehman, N. Muhammad, S. Ali, R. Qureshi, N. Khalid, A. Meetsma, *Eur. J. Med. Chem.* **45** (2010) 2902–2911.



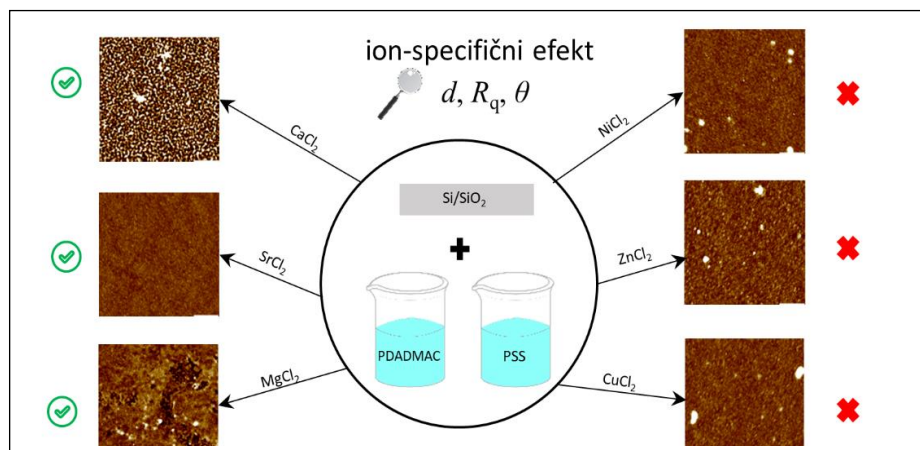
UTJECAJ VRSTE DVOVALENTNOG KATIONA NA FORMIRANJE I SVOJSTVA POLIELEKTROLITNOG VIŠESLOJA POLI(DIALILDIMETILAMONIJEV KLORID)/POLI(NATRIJEV 4-STIRENSULFONAT)

EFFECT OF DIVALENT CATIONS ON FORMATION AND PROPERTIES OF POLY(DIALILDIMETHYLAMMONIUM CHLORIDE)/POLY(SODIUM 4-STYRENESULFONATE) POLYELECTROLYTE MULTILAYER

Mia Mesić, Tin Klačić, Davor Kovačević

Zavod za fizikalnu kemiju, Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Horvatovac 102a, 10 000 Zagreb, Hrvatska
mmesic@chem.pmf.hr

Polielektroliti su makromolekule građene od jedne ili više monomernih jedinica koje se ponavljaju u strukturi. Naizmjeničnom adsorpcijom pozitivnih i negativnih polielektrolita (tzv. sloj-po-sloj metodom) na nekoj površini nastaju polielektrolitni višeslojevi.[1] Svojstva dobivenih filmova ovise o eksperimentalnim parametrima poput korištenih polielektrolita, vrste supstrata, ionske jakosti te vrste pozadinske soli.[2,3] U ovom istraživanju proučeno je kako vrsta divalentnog kationa utječe na svojstva višesloja pripremljenog od poli(dialildimetilamonijeva klorida) i poli(natrijeva 4-stirensulfonata). Izabrani kationi su Mg^{2+} , Ca^{2+} , Sr^{2+} , Ba^{2+} , Ni^{2+} , Zn^{2+} i Cu^{2+} . Elipsometrijom je praćen rast filmova do deset slojeva, a morfologija i površinska hrapavost određeni su mikroskopom atomskih sila. Tenzimetrijom je praćena promjena močivosti površine prilikom adsorpcije svakog polielektrolitnog sloja. Dobiveni rezultati ukazuju da kod kationa zemnoalkalijskih metala postoji ion-specifični efekt koji nije uočen kod kationa prijelaznih metala. Tako su debljine (d), hrapavosti (R_q) i močivosti (θ) filmova priređenih u prisutnosti kationa prijelaznih metala slične, dok se ova svojstva međusobno razlikuju za višeslojeve priređene u prisutnosti kationa zemnoalkalijskih metala.



[1] G. Decher, J. D. Hong, J. Schmitt, *Thin Solid Films* **210/211** (1992) 831–835.

[2] J. Borges, J. F. Mano, *Chem. Rev.* **114** (2014) 8883–8942.

[3] M. Mesić, T. Klačić, A. Abram, K. Bohinc, D. Kovačević, *Polymers* **14** (2022) 2566.



PORFEN KAO MEMBRANA ZA ODVAJANJE METALNIH IONA

PORPHENE AS A MEMBRANE FOR METAL ION SEPARATION

Antun Habajec^{1,2}, Igor Rončević^{2,3}, Josef Michl^{2,4}

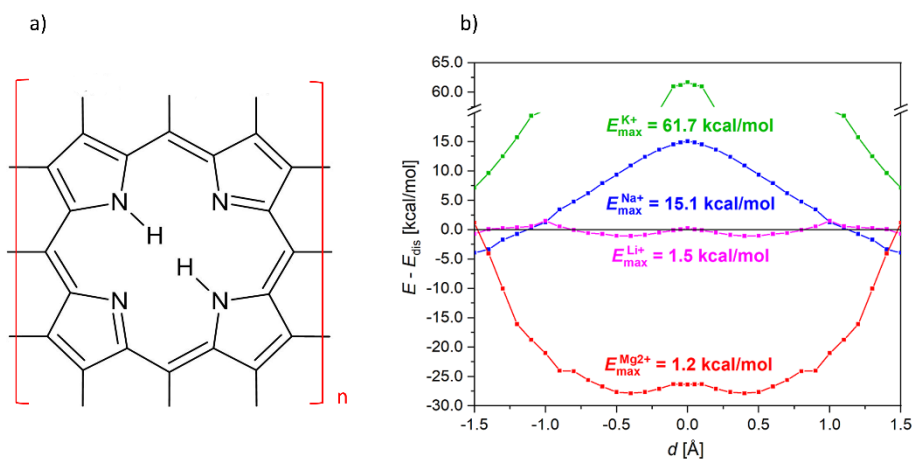
¹ Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Horvatovac 102A, 10000 Zagreb

² Institute of Organic Chemistry and Biochemistry of the CAS, Flemingovo nám. 2, 16610 Prague 6, Czechia

³ Department of Chemistry, University of Oxford, Chemistry Research Laboratory, Oxford OX1 3TA, UK

⁴ Department of Chemistry, University of Colorado, Boulder, Colorado 80309-0215, USA
ahabajec.chem@pmf.hr

Razvoj električnih vozila i ostalih uređaja koji koriste litij-ionske baterije doveo je do velikog porasta potrebe za litijem, koja se u posljednjem desetljeću utrostručila te trenutno prelazi 100 000 tona godišnje. [1] Većina proizvedenog litija i dalje se dobiva eksploatacijom rudača, čije je pročišćavanje energetski intenzivan proces koji proizvodi brojne nusprodukte štetne za okoliš. [2] Cilj ovoga rada je istražiti mogućnost korištenja porfena, novog 2D materijala sastavljenog od sraštenih porfirinskih prstena (slika 1a), [3] kao pasivne membrane za razdvajanje litija i drugih metalnih iona. Brzina prolaska iona kroz makrociklički prsten ovisit će o veličini iona, ali i njegovoj solvatacijskoj energiji te tendenciji da deprotonira pirolne prstenove (slika 1b). Kako bismo sve te efekte uzeli u obzir, koristimo *ab initio* molekularnu dinamiku u kombinaciji s metadinamikom. [4] Time se dobivaju vrijednosti energijskih barijera za prolazak pojedinih iona. Dosadašnji rezultati pokazuju vrlo malu barijeru za litij te visoke barijere za natrij i kalij.



Slika 1. (a) Jedinična ćelija porfena.
(b) Energije prolaska iona litija, natrija, kalija i magnezija kroz porfen.

[1] *Mineral Commodity Summaries 2022*, U.S. Geological Survey, 2022.

[2] *Application of Life-Cycle Assessment to Nanoscale Technology: Lithium-ion Batteries for Electric Vehicles*, United States Environmental Protection Agency, 2013.

[3] T. F. Magnera, P. I. Dron, J. P. Bozzone, M. Jovanović, I. Rončević, W. Bu, E. M. Miller, J. Michl, *Nat. Comm.*, u reviziji.

[4] G. Bussi, A. Laio, *Nat. Rev. Phys.*, 2 (2020) 200–212.



UTJECAJ ADSORBIRANIH POLIIONA NA AGREGACIJU TiO_2 ČESTICA

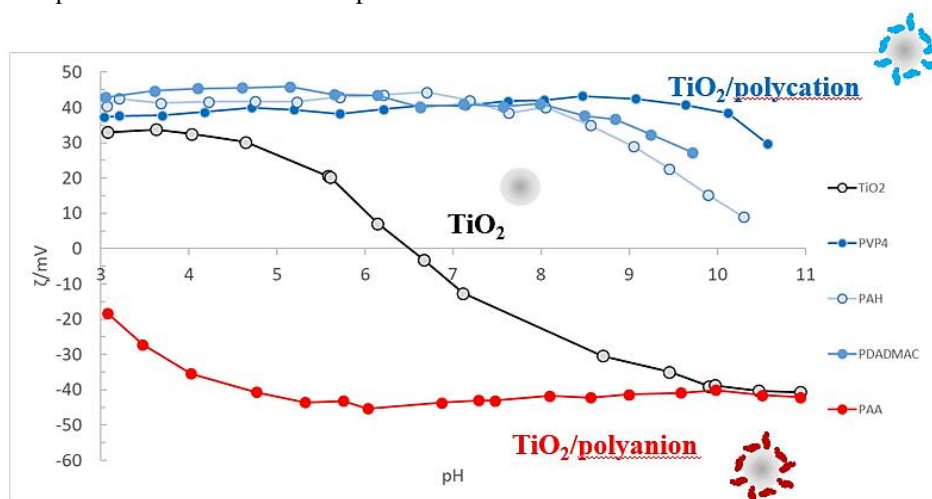
EFFECTS OF ADSORBED POLYIONS ON AGGREGATION OF TiO_2 PARTICLES

Tea Juračić, Eva Josić, Jasmina Jukić, Tajana Begović

Zavod za fizikalnu kemiju, Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet,
Sveučilište u Zagrebu, Horvatovac 102a, 10000 Zagreb, Hrvatska

tjuracic@chem.pmf.hr, ejosic@chem.pmf.hr

Međupovršine mineral/vodena otopina elektrolita imaju važnu ulogu u brojnim ekološkim i tehnološkim procesima. Modifikacija površina vezanjem poliiona od posebne je važnosti u spomenutim sustavima jer formiranje mono- ili višeslojeva značajno utječe na površinske reakcije i svojstva površina minerala. Polielektrolitni slojevi mogu premošćivati susjedne nanočestice minerala te voditi do agregacije čestica ili, ukoliko su dodani u suvišku u odnosu na nabijene površinske skupine, njihovoj stabilizaciji. Mineralne površine prekrivene polielektrolitima mogu pokazivati svojstva poprilično različita od samih minerala. [1, 2] U ovom istraživanju proučavana su površinska svojstva TiO_2 čestica prije i nakon adsorpcije polielektrolita. Kao poliioni korišteni su slabo nabijen polkation poli(alilamonijev) kation (PAH) i jako nabijen poli(*N*-etil-4-vinilpiridinijev) kation (P4VP), a kao slabi polianion korišten je anion poli(akrilne) kiseline (PAA). Čestice TiO_2 okarakterizirane su pretražnom elektronskom mikroskopijom (SEM), metodama dinamičkog i statičkog raspršenja svjetlosti (DLS i SLS) i mjerenjima elektrokinetičkog potencijala. [3] Ispitan je utjecaj pH i koncentracije natrijeva klorida na prekrivenost čestica poliionima, te na površinski potencijal i brzinu agregacije poliionima prekrivenih i neprekrivenih čestica titanijeva dioksida. Upotreba različitih eksperimentalnih metoda i istovremeno mjerenje različitih parametara daje detaljniju sliku električnog međupovršinskog sloja, distribucije iona i mehanizama na međupovršini mineral/vodena otopina elektrolita.



- [1] Z. Brkljača, N. Lešić, K. Bertović, G. Dražić, K. Bohinc, D. Kovačević, *J. Phys. Chem. C.*, **122** (2018) 27323.
 [2] T. Klačić, J. Katić, D. Namjesnik, J. Jukić, D. Kovačević, T. Begović, *Minerals*, **11** (2021) 1164.
 [3] T. Preočanin, D. Namjesnik, M. A. Brown, J. Lutzenkirchen, *Environ. Chem.*, **14** (2017) 295.



**KVANTNO-MEHANIČKI DOKING MALIH
BIOAKTIVNIH SKELETA UNUTAR AKTIVNOG
MJESTA BUTIRILKOLINESTERAZE**

**QUANTUM MECHANICAL DOCKING OF SMALL
BIOACTIVE SCAFFOLDS WITHIN
BUTYRYLCHOLINESTERASE'S ACTIVE SITE**

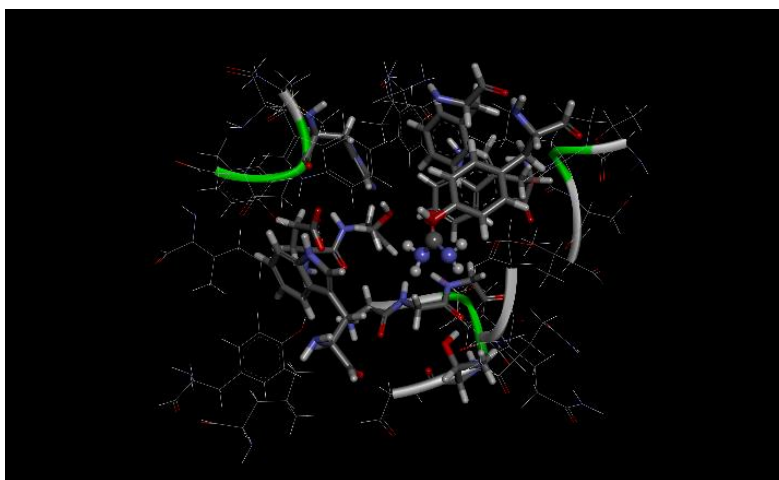
Filip Sente¹, Ana Mikelic², Ines Primožič², Tomica Hrenar²

¹Biološki odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu,
Rooseveltov trg 6, 10000 Zagreb

²Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu,
Horvatovac 102a, 10000 Zagreb

fsente@stud.biol.pmf.hr

Bioaktivne molekule često sadrže neke zajedničke strukturne motive koji čine okosnicu njihovih molekularnih struktura [1]. Suvremeni putevi u sintezi biomimetskih lijekova koji sadrže neke od najčešćih malih bioaktivnih skeleta ilustriraju potencijal ovih molekula u istraživanjima novih mogućih lijekova. Neki odabrani bioaktivni skeleti dokirani su u aktivno mjesto butirilkinesteraze korištenjem kvantno-mehaničkog dokinga [2,3]. Sustavna pretraga konfiguracijskog prostora provedena je korištenjem kombinatoričkog pretražnog algoritma koji uključuje translacijske i rotacijske stupnjeve slobode. Za svaku generiranu konfiguraciju sustava izračunana je energija korištenjem PM7 hamiltonijana te su određeni svi mogući lokalni minimumi. Za odabrane lokalne minimume optimizirana je geometrija korištenjem kvantno-mehaničko/kvantno-mehaničkog pristupa unutar ONIOM formalizma te su određene standardne Gibbsove energije vezanja.



[1] P. Peter Ertl, L. Patiny, T. Sander, C. Rufener, M. J. Zasso, *Cheminformatics* (2015) 7–10.

[2] A. Bosak, A. Ramić, T. Šmidlehner, T. Hrenar, I. Primožič, Z. Kovarik, *PLoS One* **13** (2018) e0205193.

[3] T. Hrenar, *qcc*, *Quantum Chemistry Code*, rev. 0.6826, 2022.

Zahvale: Ovo istraživanje provedeno je pod voditeljstvom prof. dr. sc. Tomice Hrenara, a financirano je od *Hrvatske zaklade za znanost*, projekti: „Razvoj karijere mladih istraživača – obuka novih doktoranada“ (ESF-DOK-2018-09-3416) i „Aktivnošću i *in silico* usmjeren dizajn malih bioaktivnih molekula (ADESIRE)“ (IP-2016-06-3775). Za istraživanje su korišteni resursi Računalnog centra Kemijskog odsjeka Sveučilišta u Zagrebu Prirodoslovno-matematičkog fakulteta financirani iz Europskog fonda za regionalni razvoj (infrastrukturni projekt CluK, grant KK.01.1.1.02.0016).



POSTERSKA IZLAGANJA



7. Simpozij studenata kemičara, Zagreb, 22. listopada 2022.



PRIPIRAVA HETEROCIKLIČKIH POLIAKCEPTORA HALOGENSKE VEZE VAN LEUSENOVOM SINTEZOM

PREPARATION OF HETEROCYCLIC HALOGEN BOND ACCEPTORS BY VAN LEUSEN SYNTHESIS

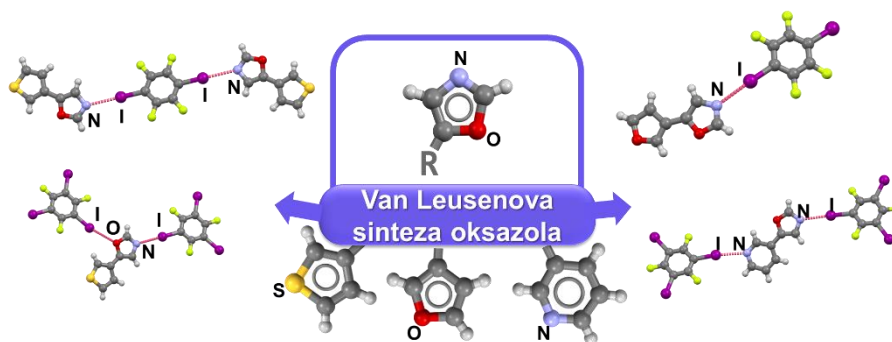
Sara Cerovski, Ruđer Sušanĳ, Vinko Nemec, Dominik Cinčić

Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu,
Horvatovac 102a, 10000 Zagreb, Hrvatska

scerovski@chem.pmf.hr, rudr.susanĳ@chem.pmf.hr

Halogenska veza je privlačna elektrostatska interakcija koja se javlja između elektrofilnog dijela halogenog atoma (σ -šupljine) i nukleofila. [1] Posljednjih godina važnost i primjenjivost te nekovalentne interakcije prepoznata je u mnogim poljima supramolekulske kemije, a istraĳivanih donora i akceptora halogenske veze sve je više. U ovom istraĳivanju proučavan je akceptorski potencijal heteroatoma (N, O, S) za halogensku vezu u trima različitim derivatima oksazola: 5-(piridin-3-il)oksazolu, 5-(furan-3-il)oksazolu i 5-(tiofen-3-il)oksazolu. Navedeni spojevi pripravljeni su van Leusenovom sintezom iz odgovarajućih aldehida ciklizacijskom reakcijom s *p*-toluensulfonilmetilizocijanidom. [2] Dobiveni derivati oksazola kokristalizirani su perhalogeniranim jodbenzenima (donorima halogenske veze). Rendgenskom strukturnom analizom na jediničnom kristalu (SCXRD) nađeno je ukupno 8 novih kokristala, do sada nenavedenih u bazi *Cambridge Structural Database*. [3] Kristalografska analiza pokazala je da je oksazolni atom dušika akceptor halogenske veze u svih 8 kokristala, tvoreći najkraće i najjače halogenske veze. S obzirom na prisutnost piridinskog fragmenta za koji je poznato da je pouzdan i jak akceptor, 5-(piridin-3-il)oksazol očekivano je uspješno kokristaliziran s najvećim brojem donora halogenske veze. Atomi sumpora u kokristalima 5-(tiofen-3-il)oksazola nisu sudjelovali u nastajanju halogenskih veza.

47



[1] P. Metrangolo, *Acta Cryst.* **A73** (2017) C309.

[2] H. Saikachi, T. Kitagawa, H. Sasaki, A. M. van Leusen, *Chem. Pharm. Bull.* **27** (1979) 793.

[3] C. R. Groom, I. J. Bruno, M. P. Lightfoot, S. C. Ward, *Acta Cryst.* **B72** (2016) 171.



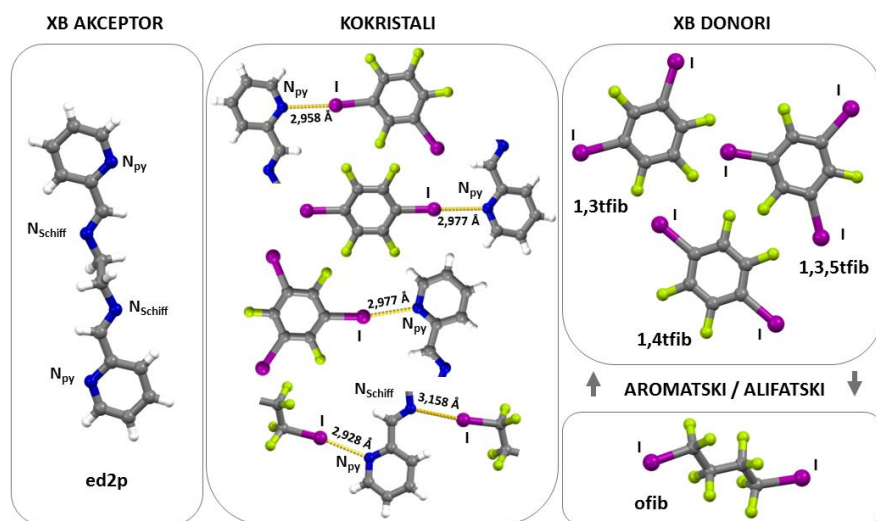
KOKRISTALIZACIJA SCHIFFOVE BAZE IZVEDENE IZ ETILENDIAMINA I PIRIDIN-2-KARBALDEHIDA S PERFLUORIRANIM DONORIMA HALOGENSKE VEZE

COCRYSTALLIZATION OF THE SCHIFF BASE DERIVED FROM ETHYLENEDIAMINE AND PYRIDINE- 2-CARBALDEHYDE WITH PERFLUORINATED HALOGEN BOND DONORS

Antonio Magnabosco, Vinko Nemeč, Dominik Cinčić

Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu,
Horvatovac 102a, Zagreb, Hrvatska
amagnabosco@chem.pmf.hr

Halogenska veza [1] predmet je istraživanja supramolekulske kemije i kristalnog inženjerstva zadnjih nekoliko desetljeća, te je zbog mogućnosti ugađanja jačine i usmjerenosti od većeg interesa naspram ostalih supramolekulskih interakcija. Kao neki od najistraženijih te najsigurnijih akceptora halogenske veze pokazali su se ciklički dušikovi atomi, posebice piridinski dušikovi atomi. [2] Stoga je razumno za pretpostaviti kako Schiffove baze sa više periferno lociranih piridinskih dušikovih atoma mogu biti pouzdani akceptori halogenske veze te formirati kokristale sa različitim donorima halogenske veze. U ovom radu je Schiffova baza **ed2p** sintetizirana iz etilendiamina i piridin-2-karbaldhida kondenzacijom u vrućem metanolu. Korištenjem dobivene Schiffove baze te perfluoriranih donora halogenske veze sa različitim brojem i položajem donorskih atoma: tetrafluor-1,3-dijodbenzena (**13tfib**), tetrafluor-1,4-dijodbenzena (**14tfib**), trifluor-1,3,5-trijodbenzena (**135tfib**) te oktafluor-1,4-dijodbutana (**ofib**), dobivena su četiri nova kokristala kristalizacijom iz otopine. Molekulske i kristalne strukture (**ed2p**)(**13tfib**)₂, (**ed2p**)(**14tfib**), (**ed2p**)(**135tfib**) i (**ed2p**)(**ofib**)₂ određene su metodom difrakcije rentgenskog zračenja na jediničnom kristalu. U svim dobivenim kokristalima dominantne su supramolekulske interakcije I...N halogenske veze oba piridinska dušikova atoma akceptora **ed2p** i donorskog atoma joda. Kod kokristala (**ed2p**)(**ofib**)₂ prisutna je i I...N halogenska veza sa iminskim dušikovim atomom. Sve ovdje opažene halogenske veze su linearne i kratke s relativnim skraćenjima između 10,8 % i 17,3 % te kutevima C-I...N između 168,3° i 175,9°.



[1] G. Desiraju *et al.*, *Pure Appl. Chem.* **85** (2013) 1711-1713.

[2] G. Cavallo *et al.*, *Chem. Rev.* **116** (2016) 2478-2601.



KOKRISTALIZACIJA BENZOKSAZINSKOG ANALOGA SA TETRAFLUOR-1,4-DIJODBENZENOM

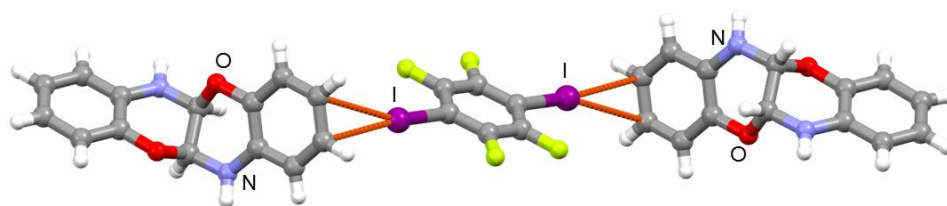
COCRYSTALLIZATION OF A BENZOXAZINE ANALOGUE WITH TETRAFLUORO-1,4- DIODOBENZENE

Lucija Marić, Antonio Magnabosco, Vinko Nemec, Nikola Bedeković,
Vladimir Stilinović, Dominik Cinčić

Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu,
Horvatovac 102a, Zagreb

lumaric@chem.pmf.hr, amagnabosco@chem.pmf.hr

Kako su to opisali Tauer i sur. [1], reakcijom glioksala i 2-aminofenola u stehiometrijskom omjeru 1:2, umjesto očekivanog iminskog produkta, zbog prisutnosti slobodne hidroksilne skupine u *ortho* položaju dolazi do kondenzacijske reakcije te nastanka benzoksazinskog analoga, **gly2ap**. Takva molekula pogodna je za istraživanje svojstava cikličkih amino skupina te eterskih kisikovih atoma, ali i elektronski bogatih π -sustava fenilnih prstenova kao potencijalnih akceptora halogenske veze. Halogenska veza, privlačna je interakcija između elektrofilne regije koja sadrži atom halogena X i nukleofila B te tvori supramolekulsku interakciju $X \cdots B$ [2]. U ovom radu je pripremljen kokristal akceptora **gly2ap** i donora halogenske veze tetrafluor-1,4-dijodbenzena (**14tfib**). Molekulska i kristalna struktura (**gly2ap**)₂(**14tfib**) određena je metodom rentgenske difrakcije na jediničnom kristalu. U kokristalu su ostvarene halogenske veze između dvaju ugljikovih atoma fenilnog prstena i donorskog atoma joda te relativna skraćjenja iznose 3,0 % i 7,4 %. Obje halogenske veze su pretežito linearne sa kutevima od 162,3° i 172,8°. Halogenska veza se ne ostvaruje sa dušikovim i eterskim kisikovim atomima nego se između njih ostvaruje jaka N–H \cdots O vodikova veza.



[1] E. Tauer, K. H. Grellmann, E. Kaufmann, M. Noltemeyer, *Chem. Ber.* **119** (1986) 3316-3325.

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



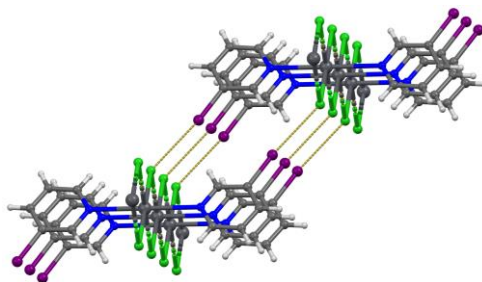
IZOSTRUKTURNI KOORDINACIJSKI POLIMERI OLOVOVIH HALOGENIDA S 3-HALOGENPIRIDINIMA

ISOSTRUCTURAL COORDINATION POLYMERS OF LEAD HALIDES WITH 3-HALOGENPYRIDINES

Lucija Marić, Nikola Bedeković, Vladimir Stilinović

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

Halogenska veza u metaloorganskim sustavima koristi se kao alat za pripremu novih materijala polazeći od diskretnih metaloorganskih jedinica (bilo neutralnih ili ionskih) [1] ili pak metaloorganskih polimera. [2] Najzastupljeniji metalni centri u polimernim sustavima povezanim halogenskim vezama su kobalt, kadmij, bakar i cink, dok je olovo zastupljeno iznimno malo. Razlog tome je velika koordinacijska i geometrijska fleksibilnost atoma olova u odnosu na prije spomenute metalne centre, što poprilično otežava ciljanu sintezu strukturno sličnih polimera, proučavanja njihovih svojstava te geometrija (duljina i kutova) međumolekulskih interakcija ostvarenih u njihovim kristalnim strukturama. U ovom istraživanju pripravljeno je devet koordinacijskih polimera olovovih halogenida (PbX_2 ; X=Cl, Br, I) s 3-halogenpiridinima (**3-Xpy**; X=Cl, Br, I) tekućinom potpomognutom mehanokemijskom sintezom, tradicionalnom sintezom iz otopine te solvotermalnom sintezom. Kao ligandi odabrani su 3-klorpiridin, 3-brompiridin i 3-jodpiridin, zbog dokazano dobrog vezanja na metalne centre i prisutnosti halogenih atoma, od kojih Br i I mogu dodatno sudjelovati u halogenskim vezama. Strukturnom analizom uočeno je da su svi dobiveni spojevi izostrukturalni. Atomi olova su heksakoordinirani s četiri premošćujuća halogenida i dva piridinska liganda vezana u aksijalnim položajima. Po dvije veze Pb–X u polimernom lancu su istih duljina, dok su duljine dviju aksijalnih veza Pb–N jednake. Polimerni lanci dalje se povezuju u kristalnu strukturu halogenskim vezama preko donornih atoma halogenpiridina i koordiniranih halogenida kao akceptora. Relativna skraćivanja halogenskih veza najveća su u slučaju **3-Ipy** kao donora, dok su u slučaju **3-Clpy** najmanja.



Slika 1. Polimerni lanci PbCl_2 (**3-Ipy**) povezani halogenskim vezama.

[1] V. Nemeč, K. Lisac, N. Bedeković, L. Fotović, V. Stilinović, D. Cinčić, *CrystEngComm* **23** (2021), 3063–3083.

[2] S.-Q. Zang, Y.-J. Fan, J.-B. Li, H.-W. Hou, T. C. W. Mak *Cryst. Growth Des.* **11** (2011), 3395–3405.



ISTRAŽIVANJE FOTOKATALITIČKE AKTIVNOSTI (NE)DOPIRANOG CeO₂

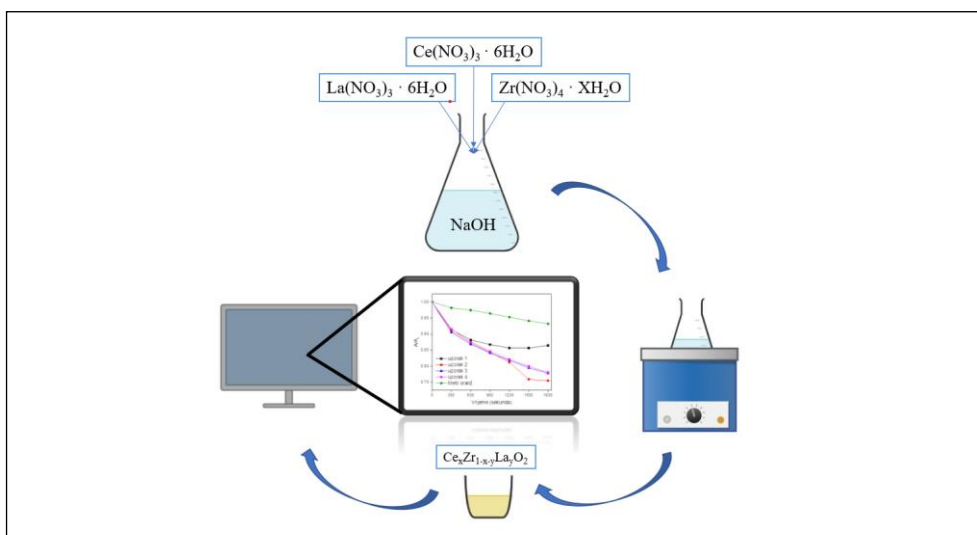
INVESTIGATION OF PHOTOCATALYTIC ACTIVITY OF (UN)DOPED CERIA

Laura Milišić, Dalibor Tatar, Igor Đerđ

Odjel za kemiju, Sveučilište J.J. Strossmayera u Osijeku,
Cara Hadrijana 8/A, 31000 Osijek, Hrvatska
laura.milisc@outlook.com

Fotokatalizator je tvar koja prilikom dovođenja u pobuđeno stanje sudjeluje u kemijskim pretvorbama reaktanata u produkte, prilikom čega nastaju međuprodukti, a fotokatalizator ostaje nepromjenjen. Najpoznatiji fotokatalizatori su Pt i Pd, ali iz ekonomskih razloga posljednjih nekoliko godina znanstvenici istražuju i koriste dostupnije i jeftinije metale poput Mn, Ni, Cr, Co, Cu, Ce za dizajniranje fotokatalizatora nove generacije. Istraživanje prikazano u ovom radu usmjereno je na utjecaj dopiranja kationa u kristalnu strukturu cerijeva dioksida. Cerij, kao najzastupljeniji elemenata rijetkih zemalja, standardna je komponenta katalizatora za razne katalitičke reakcije. Njegova svojstva proizlaze iz nepopunjene 4f orbitale i kontrakcije lantanoida te posjeduje dva oksidacijska stanja: +3 i +4, a prijelazom između Ce⁴⁺ i Ce³⁺ oksidacijskog stanja ne dolazi do narušavanja stabilnosti floritne strukture, stoga može doći do promjene udjela kisika u ovisnosti o promjeni temperature, tlaka, električnog polja i prisutnosti dopanata. Sintetizirana su četiri uzorka dopiranog i nedopiranog CeO₂ koristeći ultrazvučno potpomognutu sintezu. Istražena je fotokatalitička aktivnost sintetiziranih uzoraka na UV/VIS spektrofotometru (halogena lampa od 20 W kao izvor zračenja). Praćena je razgradnja dvije organske AZO boje (metil crveno i metil oranž) u vremenskom periodu od 30 minuta. Dopirani uzorci CeO₂ pokazali su bolju fotokatalitičku aktivnost usporedno s čistim, nedopiranim CeO₂.

51



[1] D. Zhang, Y. Qian, L. Shi, H. Mai, R. Gao, J. Zhang, W. Yu, W. Cao, *Catal. Commun.*, **26** (2012) 164-168.

[2] W. Tang, P. Gao, *MRS Commun.*, **6** (2016) 311-329.



SOLVOTERMALNA SINTEZA I OPTIČKA SVOJSTVA KOMPLEKSNIH SPOJEVA NA BAZI LANTANOIDA I NJIHOVIH DERIVATA

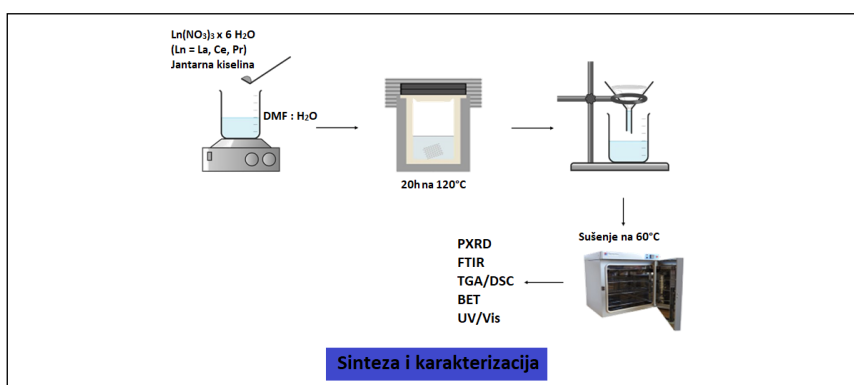
SOLVOTHERMAL SYNTHESIS AND OPTICAL PROPERTIES OF LANTHANIDE-BASED COMPLEXES AND THEIR DERIVATIVES

Tomislav Šilješ¹, Sara Goman¹, Jelena Kojčinović¹, Dalibor Tatar¹, Srijita Nundy², Igor Djerdj¹

¹Odjel za kemiju, Sveučilište Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku,
Cara Hadrijana 8/A, Osijek HR-31000, Hrvatska

²Environment and Sustainability Institute, University of Exeter,
Penryn TR10 9FE, Ujedinjeno Kraljevstvo
tomislav.siljes@gmail.com

Metalo-organske mreže (MOF) tip su poroznih materijala izgrađenih od metalnih kationa međusobno povezanih organskim komponentama, odnosno poveznicama. Velika poroznost MOF rezultira velikom specifičnom površinom spojeva zbog čega se koriste u katalitičke svrhe [1] i za skladištenje plinova [2]. U ovom istraživanju su solvotermalnom metodom sintetizirani MOF-ovi na osnovi lantana, cerija i praseodimija, te jantarne kiseline (SA). Kao otapalo je korištena kombinacija N,N-dimetilformamida (DMF) i vode. Sintetiziranim spojevima struktura je okarakterizirana pomoću infracrvene spektroskopije s Fourierovom transformacijom (FTIR) i rentgenske difrakcije na prahu (PXRD). Termička svojstva spojeva su okarakterizirana termogravimetrijskom analizom (TGA) i diferencijalnom pretražnom kalorimetrijom (DSC). Piroliza sintetiziranih spojeva provedena je u inertnoj i oksidativnoj atmosferi. Nadalje, pretražna elektronska mikroskopija (SEM) sintetiziranih spojeva ukazala je na morfologiju nanoštapića. Fizisorpcijskim mjerenjima je određena specifična površina i poroznost spojeva. Podaci dobiveni UV/Vis spektroskopijom su analizirani Taucovom metodom kako bi se odredile vrijednosti optičkih energijskih procijepa. Fotokatalitička razgradnja organskih bojila metilen plavo (MB) i rodamin B (RDB) uz dodatak sintetiziranih spojeva i/ili vodikovog peroksida kao kokatalizatora praćena je pomoću UV-VIS spektroskopije.



[1] H. Yang, L. Ji, Z. Zhang, B. Xu, Z. Liu, Q. Zhang, Y. Cao, Z. Nan, M. Zhang, T. Ohno, *Journal of Catalysis*, **405** (2022) 74-83.

[2] U. Ryu, S. Jee, P. Chandra Rao, J. Shin, C. Ko, M. Yoon, K. Sung Park, K. Min Choi, *Coordination Chemistry Reviews* **426** (2021) 213544.



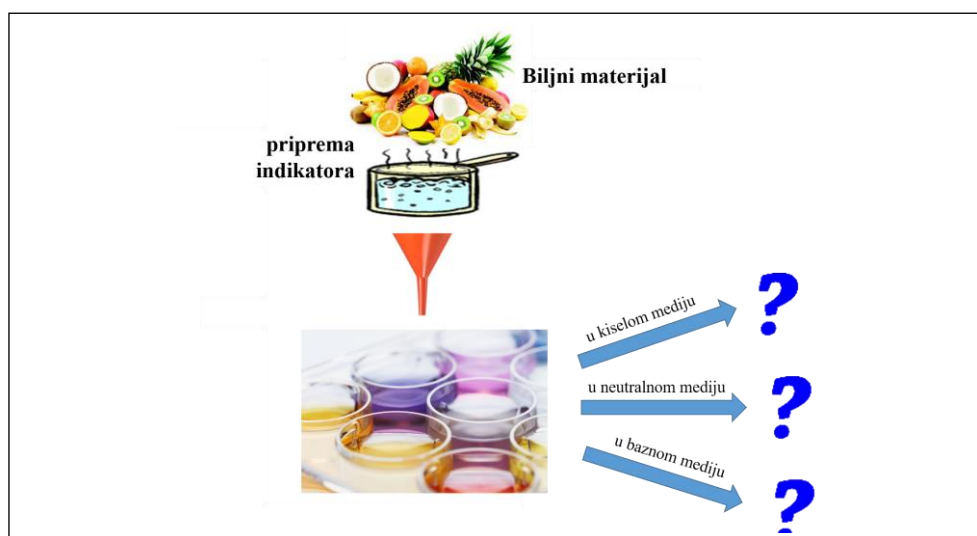
ISTRAŽIVANJE PRIMJENE (SUP)TROPSKOG VOĆA KAO KISELO-BAZNOG INDIKATORA

STUDY OF (SUB)TROPICAL FRUIT AS ACID-BASE INDICATOR

Rajna Marija Jozić, Ana Amić

Sveučilište u Osijeku, Odjel za kemiju, Ulica cara Hadrijana 8/A, Osijek, Hrvatska
jozic.rajna@gmail.com

Moderna nastava i dan danas često uključuje tradicionalne metode poučavanja, koje ne koriste često pokus. Osim toga, primjerice, nastava o kiselinama i bazama ukoliko i uključuje pokus, tada se u pokusu koriste sintetski kiselobazni indikatori, koji su često skupi i time nedostupni. Naša prethodna ispitivanja su pokazala kako se biljni materijal može uspješno upotrijebiti kao alternativni kiselobazni indikator. U ovom radu su prethodna istraživanja proširena te uključuju odabrane vrste voća kako bi utvrdili mogu li se koristiti kao kiselobazni indikatori. Istraženi biljni materijal uključivao je šest (sub)tropskih plodova, primjerice kaki, mango i nar, u obliku svježeg voća i u obliku dostupnih prerađevina. Indikatori su priređeni s četiri otapala (voda, aceton, etanol, metanol) kako bi utvrdili koje je od njih najbolje. Preliminarni rezultati pokazuju veliki potencijal primjene ne samo biljnih sirovina već i prerađevina kao kiselobaznog indikatora. Prema dobivenim rezultatima, vizualno najdojmljivijim se pokazala kombinacija kore manga i nara s acetonom.





UTJECAJ RAZLIČITIH METODA PRIPREME POVRŠINE SPCE-A NA ADSORPCIJU IZABRANIH PROTEINA

THE INFLUENCE OF DIFFERENT SURFACE PREPARATION METHODS OF SCREEN-PRINTED CARBON ELECTRODES ON ADSORPTION OF SELECTED PROTEINS

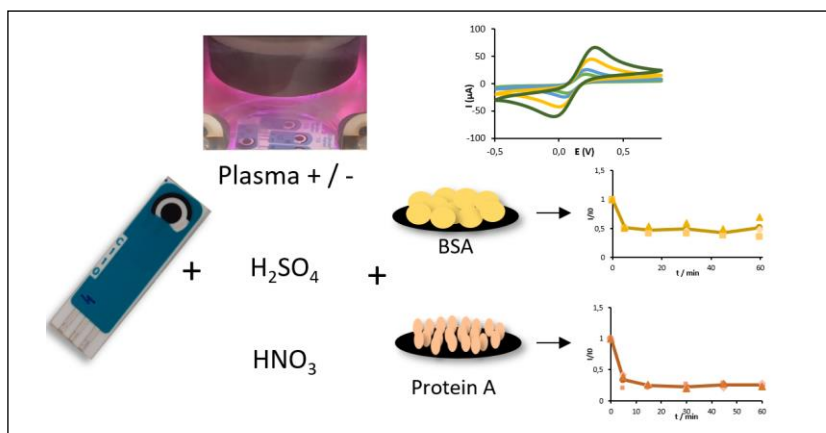
Ivan Konjević¹, Tea Romih², Lea Žibret², Ika Fazarinc², Ajda Beltram²,
David Majer¹, Matjaž Finšgar¹, Samo B. Hočevár²

¹Faculty of Chemistry and Chemical Technology, University of Maribor, Smetanova 17,
2000 Maribor, Slovenia

²Department of Analytical Chemistry, National Institute of Chemistry, Hajdrihova 19, 1000
Ljubljana, Slovenia

ivan.konjevic@student.um.si

Electrochemical biosensors are devices that combine electrical and biological components, taking advantage of the high selectivity of biological components and inherent characteristics of electroanalysis to produce a measurable signal. [1] Immobilization of biomolecules on the surface of supporting electrodes represents an important step in the development of biosensors. In this work, the effects of different pretreatment strategies (pretreatment using cyclic voltammetry (CV) in H_2SO_4 and H_2O_2 and plasma pretreatment using positive and negative glow discharge) on the electrochemical stability of screen-printed carbon electrodes (SPCEs) and on the adsorption kinetics of selected model proteins (bovine serum albumin (BSA) and protein A) were investigated. The CV and square-wave voltammetry experiments were carried out on commercial SPCEs before and after pretreatment, as well as before and after protein adsorption. All pretreatment procedures resulted in improved electrochemical stability of unmodified SPCEs. The pretreatment strategies had a positive effect on the stability of the adsorption kinetics of protein A with a significant signal attenuation, while BSA displayed a more complex adsorption behavior. Among all pretreatment procedures, negative glow discharge exhibited the most favorable effects on the adsorption of both BSA and protein A. The lower concentrations of both proteins, i.e., $5 \mu\text{g/mL}$ and $10 \mu\text{g/mL}$, were sufficient to form a stable protein layer after 60 minutes of incubation, except in the case of BSA adsorption on the positive glow discharge treated electrodes. Importantly, the pretreatment improved the electrode-to-electrode reproducibility compared to the untreated SPCEs, making it an advantageous step in biosensor design.



[1] Naresh, V. Lee, N. *Sensors* **21** (2021) 1109.



ODREĐIVANJE ANIONIJSKIH TENZIDA S RAZLIČITIM BROJEM UGLJIKOVIH ATOMA SENZORIMA NA BAZI KVATERNIH AMONIJEVIH SOLI

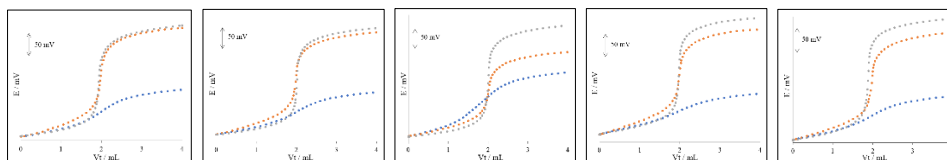
DETERMINATION OF ANIONIC SURFACTANTS WITH DIFFERENT NUMBER OF C ATOMS USING SENSOR BASED ON QUATERNARY AMMONIUM SALTS

Mateja Peršić, Mirela Samardžić, Mateja Budetić

Odjel za kemiju, Sveučilište Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku, Ulica cara Hadrijana 8/A,
31000 Osijek, Hrvatska

mpersic@kemija.unios.hr

Tenzidi kao površinski aktivne tvari sadrže hidrofilnu glavu i hidrofoban rep te kao takvi smanjuju površinsku napetost. [1] Ovisno o naboju glave, dijele se na anionske, kationske, amfoterne te neionske tenzide. [2] Jedna od najčešće korištenih analitičkih metoda kojom se određuju tenzidi jest potencijometrijska titracija koja se temelji na mjerenju razlike potencijala između indikatorske i referentne elektrode. [3] Cilj ovog rada bio je ispitati točnost određivanja anionskih tenzida s različitim brojem ugljikovih atoma u hidrofobnom dijelu molekule (C10, C12, C14), koristeći tenzidne senzore na bazi kvaternih amonijevih soli imidazola, triazola i piperidina potencijometrijskom titracijom koristeći automatski titrator. Testirano je pet tenzidnih senzora: KA1-TPB, KA2-TPB, KA3-TPB, KA4-TPB te KA5-TPB. Otopine analita C10, C12, C14 koncentracije $1 \cdot 10^{-3}$ mol/dm³ titrirane su ekvimolarnom otopinom cetilpiridinijeva klorida. Svi su senzori pokazali zadovoljavajuću točnost (96,0 % do 101,9 %) što ukazuje na činjenicu da točnost određivanja anionskih tenzida ovim senzorima ne ovisi o vrsti anionskog tenzida.



Slika 1. a), b), c), d), e).
Titracijske krivulje dobivene titracijom anionskih tenzida s različitim brojem C atoma koristeći senzor a) KA1-TPB, b) KA2-TPB, c) KA3-TPB, d) KA4-TPB i e) KA5-TPB kao detektor završne točke titracije.

[1] Tenzidi. Hrvatska enciklopedija, mrežno izdanje. Leksikografski zavod Miroslav Krleža, 2021. (31. 8. 2022.)

[2] J. L. Salager, Surfactants, types and uses, Laboratory of Formulation, Interfaces Rheology and Processes, Universidad de Los Andes, Mérida-Venezuela, 2002.

[3] D. A. Skoog, D. M. West, F. J. Holler, S. R. Crouch, Osnove analitičke kemije, Brooks/Cole, Belmont Calif., 2014.



SINTEZA I EVALUACIJA CITOTOKSIČNOSTI KONJUGATA 3-AMINOFENILBORONIČNE I CIMETNE KISELINE

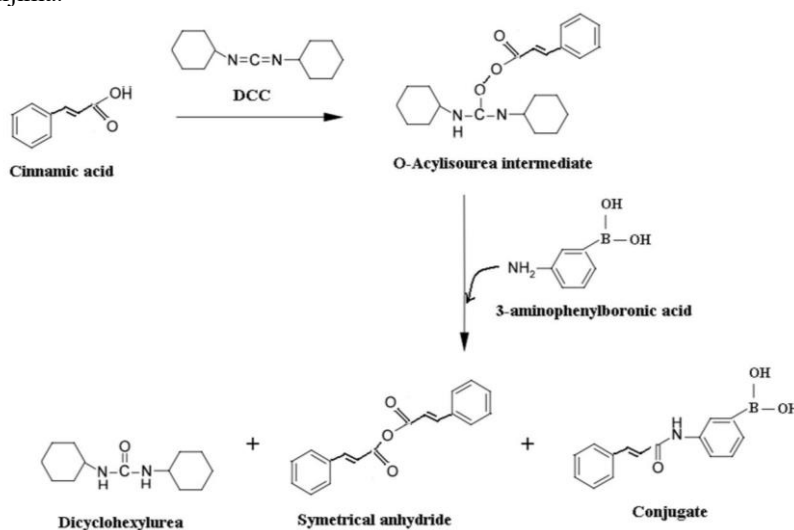
SYNTHESIS AND EVALUATION OF CYTOTOXICITY OF CINNAMIC ACID-3-AMINO-PHENYLBORONIC CONJUGATE

Miran Kemura¹, Lea Goreta¹, Franko Burčul¹, Mladen Miloš¹, Siniša Ivanković²

¹Faculty of Chemistry and Technology, University of Split,
Ruđera Boškovića 35, 21000 Split

²Division of Molecular Medicine, Rudjer Boskovic Institute,
Bijenička cesta 54, 10000 Zagreb
kemura.miran4@gmail.com

Koncept ciljanih terapijskih lijekova prvi je uveo Paul Ehrlich početkom dvadesetog stoljeća. On je tvrdio da su za povećanje akumulacije aktivnih farmaceutskih sastojaka u ciljnom tkivu potrebne dvije komponente: prva koja djeluje prepoznavanjem i vezanjem za ciljne stanice, tkivo ili organ, dok druga djeluje kao terapijsko sredstvo. U posljednje vrijeme derivati fenilboronične kiseline su u fokusu istraživanja zbog njihovog svojstva vezanja za glikane na staničnim membranama. Biološka aktivnost fenilboronične kiseline je trenutno predmet opsežnih istraživanja koja uključuju sintezu navedenih derivata i njihovu moguću primjenu u medicinske svrhe. Konjugat cimetine kiseline i 3-aminofenilboronične kiseline pokazuje zanimljivu sposobnost vezanja za sijalične kiseline (glikane), preko OH skupina 3-aminofenilboronične kiseline što pridonosi njegovom dužem zadržavanju na površini stanice, te na taj način omogućuje produljeno biološko djelovanje cimetine kiseline. U ovom radu, sinteza konjugata cimetine kiseline i 3-aminofenilboronične kiseline izvedena je amidacijom karboksilne skupine cimetine kiseline korištenjem dicikloheksilkarbodiimida u dietileteru. Stvoreni konjugati su evaluirani vezanim sustavom HPLC-MS. Kao produkt sinteze identificiran je odgovarajući konjugat (15%) i anhidrid cimetine kiseline (85%), koji su *in vitro* pokazali citotoksični učinak na ljudskim stanicama raka grlića materice (HeLa stanične linije). Rezultati su vrlo zadovoljavajući te nam daju razlog za optimizam u daljnjim istraživanjima.



[1] K Strebhardt, A. Ullrich, *Nat. Rev. Cancer* **8** (2008) 473-480.

[2] M. Marasović, S. Ivanković, R. Stojković, D. Đermić, B. Galić, M. Miloš, *J Enzyme Inhib Med Chem* **32** (2017) 1299-1304.



CAREVO NOVO RUHO: ODREĐIVANJE TEMPERATURE GLAVNOG FAZNOG PRIJELAZA LIPIDA UV/VIS SPEKTROSKOPIJOM

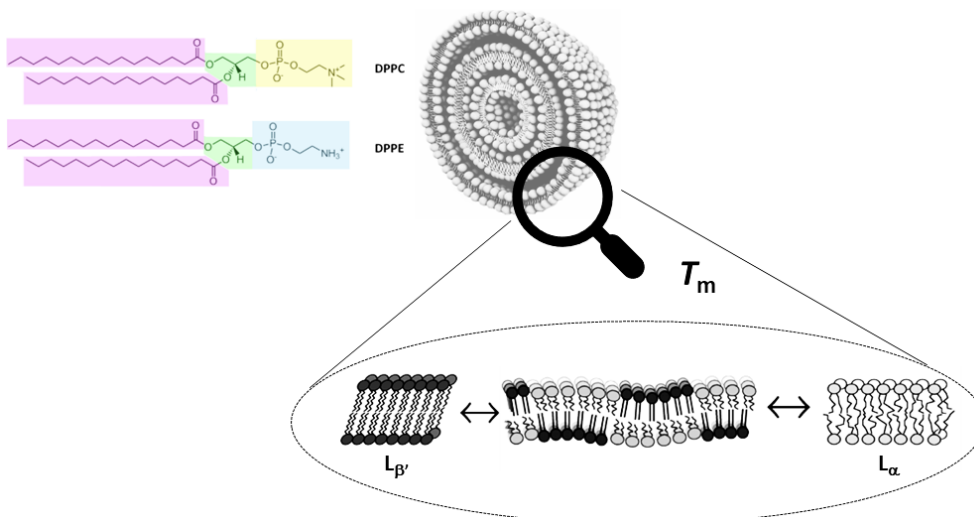
THE EMPEROR'S NEW CLOTHES: DETERMINATION OF THE MAIN PHASE TRANSITION TEMPERATURE OF LIPIDS BY UV/VIS SPECTROSCOPY

Jana Munivrana¹, Petra Maleš², Danijela Bakarić²

¹Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek, Horvatovac 102a, 10000 Zagreb, Republika Hrvatska

²Institut Ruđer Bošković, Zavod za organsku kemiju i biokemiju, Bijenička cesta 54, 10000 Zagreb, Republika Hrvatska
jana.munivrana@gmail.com

Lipidi su amfifilne molekule koje se u vodenom mediju samoorganiziraju u liposome, sferične strukture u kojima se lipidi nalaze poslagani u hidrirane dvosloje. Zbog svoje jednostavnosti liposomi često zamjenjuju biološke membrane u istraživanjima, a zbog mogućnosti ugradnje malih molekula primjenu nalaze u industriji i medicini. U lipidnom dvosloju, glavnom strukturnom motivu liposoma, ovisno o temperaturi molekule lipida nalaze se u nekoliko faza među kojima su najvažnije faza gela (L_{β}) i faza fluida (L_{α}). Glavnim faznim prijelazom naziva se prijelaz lipida iz faze gela u fazu fluida i opaža se pri temperaturi mekšanja T_m . Vrijednost T_m ovisi o strukturi lipida, točnije o duljini i stupnju zasićenosti masnokiselinskih lanaca i funkcijskim skupinama koje čine polarne glave lipida. [1] Uz razlikovnu pretražnu kalorimetriju (engl. *differential scanning calorimetry*, DSC) kao rutinsku tehniku kojom se određuje T_m odnedavno se ističe i UV/Vis spektroskopija, posebno primamljiva zbog jednostavnosti izvedbe i široke dostupnosti. [2] DSC tehnikom i temperaturno-ovisnom UV/Vis spektroskopijom određene su i uspoređene T_m vrijednosti dvaju neutralnih lipida 1,2-dipalmitoil-*sn*-glicero-3-fosfokolina (DPPC) i 1,2-dipalmitoil-*sn*-glicero-3-fosfoetanolamina (DPPE) suspendiranih u acetatnom (pH = 4,09), fosfatnom (pH = 7,01) i karbonatnom puferu (pH = 9,19). Ujedno je ispitan i utjecaj pH medija na T_m . Pokazano je da je temperaturno-ovisna UV/Vis spektroskopija prikladna za određivanje T_m te da promjena pH medija više utječe na DPPE liposome.



[1] T. Heimburg, *Thermal Biophysics of Membranes*, Wiley-VCH, Berlin, 2007, 29–40.

[2] P. Maleš, Z. Brkljača, D. Domazet Jurašin, D. Bakarić, *Spectrochim. Acta, Part A*, **272** (2022) 121013.



UČINAK MIKROPLASTIČNIH ČESTICA PS-a NA STANIČNE LINIJE ZDRAVOG I TUMORSKOG PORIJEKLA

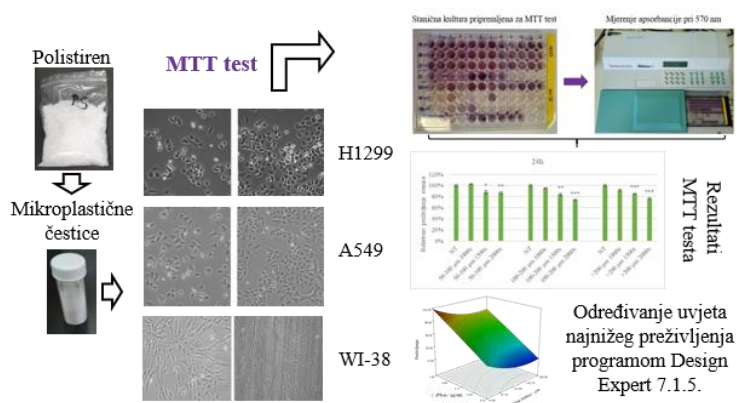
THE EFFECT OF PS MICROPLASTIC PARTICLES ON HEALTHY AND TUMOR CELL LINES

Iva Polonji¹, Dajana Kučić Grgić¹, Martina Miloloža¹, Jelena Knežević²,
Jurica Baranašić²

¹Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Sveučilište u Zagrebu, Marulićev trg 19,
10000 Zagreb

²Institut Ruđer Bošković, Zavod za molekularnu medicinu, Bijenička 54, 10000 Zagreb
ipolonji@fkit.hr

Preterana uporaba plastičnih materijala i loše gospodarenje plastičnim otpadom od polovine prošlog stoljeća, dovele su do rastućeg problema onečišćenja okoliša te utjecaja na žive organizme koji u njemu žive, pa tako i čovjeka. [1] Novija znanstvena istraživanja također se bave mikroplastikom, koja nastaje fragmentacijom plastičnog otpada uslijed izlaganja okolišnim uvjetima. [2] Mikroplastika predstavlja posebnu opasnost budući da se, zahvaljujući smanjenim dimenzijama, olakšano kreće u okolišu, uklapa u hranidbene lance, te akumulira unutar živih jedinki na koje potencijalno može imati štetne učinke. [3] U radu je provedeno ispitivanje učinka mikroplastičnih čestica polistirena na preživljenje humanih plućnih staničnih linija zdravog (WI-38) i tumorskog porijekla (H1299 i A549) u ovisnosti o rasponu veličina čestica mikroplastike, koncentraciji otopina mikroplastike i vremenu izlaganja. Preživljenje staničnih linija ispitano je MTT testom, a programom Desing Expert 7.1.5. određeni su eksperimentalni uvjeti pri kojima je preživljenje bilo najniže. Stanična linija WI-38 minimalno preživljenje imala je pri 157,01 μm (veličina čestica PS-a), 0,50 $\mu\text{g/mL}$ (koncentracija otopina PS-a) i 39,74 h (vrijeme izlaganja). Za H1299 najniže preživljenje ostvarilo se pri 103,11 μm , 1,00 $\mu\text{g/mL}$ i 24 h. Na posljertku, stanična linija A549 najmanje preživljenje imala je pri 200 μm , 2,00 $\mu\text{g/mL}$ i 51,17 h. Prema dobivenim rezultatima zaključeno je da polistiren ima štetan učinak na ispitane stanične linije u pogledu smanjenja preživljenja.



[1] W. Xia, Q. Rao, X. Deng, J. Chen, P. Xie, *Sci Total Environ* **732** (2020), 139065.

[2] S. Dehghani, F. Moore, R. Akhbarizadeh, *Environ Sci Pollut Res Int* **24** (2017), 20360-20371.

[3] T. S. M. Amelia, W. M. A. W. M. Khalik, M. C. Ong, Y. T. Shao, H. J. Pan, K. Bhubalan, *Prog Earth Planet Sci* **8** (2021), 12.

Ovo istraživanje provedeno je u sklopu projekata „Primjena naprednih tehnologija obrade voda za uklanjanje mikroplastike“ (IP-2019-04-9661) i „Genetički i epigenetički biomarkeri urođene imunosti u KOPBu i karcinomu pluća“ (IP-06-2016-1441) Hrvatske zaklade za znanost na Fakultetu kemijskog inženjerstva i tehnologije Sveučilišta u Zagrebu, te na Institutu Ruđer Bošković.



RAČUNALNA STUDIJA MEHANIZMOM TEMELJENIH IREVERZIBILNIH INHIBITORA MONOAMIN- OKSIDAZE B

COMPUTATIONAL STUDY OF THE MONOAMIN OXIDASE B MECHANISM-BASED IRREVERSIBLE INHIBITORS

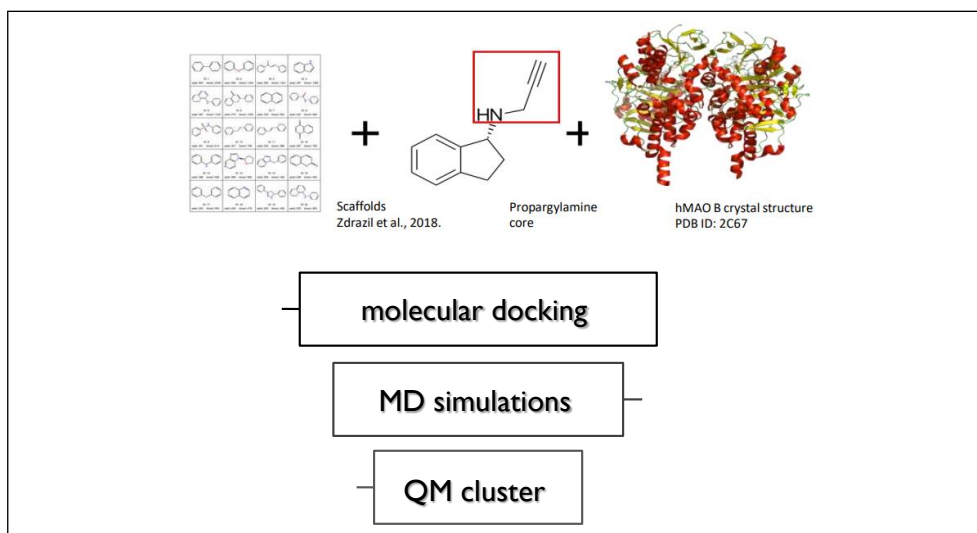
Lucija Vrban¹, Robert Vianello²

¹Biomolecular Structure and Function Group, Department of Biotechnology,
Rijeka, Croatia

²Laboratory for the Computational Design and Synthesis of Functional Materials,
Ruđer Bošković Institute, Zagreb, Croatia
lucija.vrban2@gmail.com

Monoamine oxidase B (MAO B) is a flavoenzyme responsible for the metabolism of endogenic and exogenic amines such as monoamine neurotransmitters whose disturbed homeostasis is implicated in the wide range of neurodegenerative pathogenesis. MAO B represents primary pharmacological target for the treatment of the Alzheimer's and Parkinson's disease. Commercial drugs, selegiline and rasagiline, are administrated with dietary restrictions and in high doses are associated with more frequent and greater intensity side effects. [1] There is a constant market pressure for the development of new, mechanism-based MAO B inhibitors with more favourable pharmacokinetic profiles. Innovative approach was developed for the drug design which involves binding of the scaffolds [2] with propargylamine core which is present in commercial drugs which target MAO enzymes. [3] More favourable thermodynamic profiles are obtained using methods of script based molecular docking and molecular dynamics simulations. More favourable kinetic profile of the inhibitory activity was obtained and characterized *via* the quantum chemical cluster approach.

59



[1] T. Tandarić, A. Prah, J. Stare, J. Mavri, R. Vianello, *Int. J. Mol. Sci.* **21** (2020) 6151.

[2] B. Zdrzil, R. Guha, *J. Med. Chem.* **61** (2018) 4688–4703.

[3] T. Tandarić, R. Vianello, *ACS Chem. Neurosci.* **10** (2019) 3532–3542.



ANTIBAKTERIJSKA SVOJSTVA POLIELEKTROLITNOG VIŠESLOJA KITOZAN/POLI(AKRILNA KISELINA) SA SLOJEM ADSORBIRANOG LIZOZIMA

ANTIBACTERIAL PROPERTIES OF CHITOSAN/POLY(ACRYLIC ACID) POLYELECTROLYTE MULTILAYER WITH ADSORBED LYSOZYME LAYER

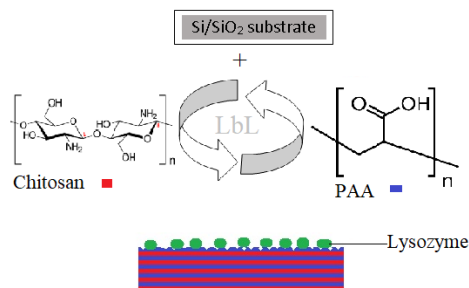
Luka Babić¹, Tin Klačić¹, Jasmina Jukić¹, Anamarija Zore², Roman Štukelj²,
Andrijana Sever Škapin³, Klemen Bohinc², Davor Kovačević¹

¹Division of Physical Chemistry, Department of Chemistry, Faculty of Science, University
of Zagreb, Horvatovac 102a, 10000 Zagreb, Croatia

²Faculty of Health Sciences, University of Ljubljana, Zdravstvena pot 5, 1000 Ljubljana,
Slovenia

³Slovenian National Building and Civil Engineering Institute, Dimičeva ulica 12, 1000
Ljubljana, Slovenia
lbabic.chem@pmf.hr

Surface properties are crucial in controlling the adhesion of bacteria to materials. The most important properties for adhesion are roughness, charge and hydrophilicity. [1,2] In this study, we characterized the surface of Si/SiO₂ substrate covered by biocompatible polyelectrolyte multilayer (PEM) made of chitosan (CS) and poly(acrylic acid) (PAA). Furthermore, we investigated the antibacterial properties of (CS/PAA) multilayer film with an added terminating lysozyme layer. The aforementioned properties were examined and characterized with a wide array of methods. The surface charge properties were obtained by zeta potential measurements, while the surface roughness was characterized by atomic force microscopy (AFM). The thickness of the multilayers was determined by AFM and ellipsometry. The hydrophilicity of the surface was investigated using the tensiometer. After the adhesion of bacteria *Pseudomonas aeruginosa* unmodified and lysozyme-modified PEMs, surface was studied using scanning electron microscope (SEM). Many of the aforementioned properties directly influence the extent of the adhesion of bacteria. These properties vary with different terminating polyelectrolyte layers and with the presence of the adsorbed lysozyme (known for its antibacterial properties).



[1] X. Zhu, X Jun Loh, *Biomater. Sci.* **3** (2015) 1505-1518.

[2] K. Bohinc, J. Bajuk, J. Jukić, A. Abram, M. Oder, K. Godič Torkar, P. Raspor, D. Kovačević, *Int. J. Adhes. Adhes.* **103** (2020) 102687.

ACKNOWLEDGEMENTS: This research was supported by the Croatian Science Foundation under the bilateral Slovenian-Croatian APPLPEMS project (IPS-2020-01-6126).



IN SILICO ISTRAŽIVANJE UTJECAJA GLIKANA I MUTACIJA NA REKOMBINANTNI ENZIM PEROKSIDAZA HRENA

IN SILICO STUDY OF THE EFFECTS OF GLYCANS AND MUTATIONS ON A RECOMBINANT ENZYME HORSERADISH PEROXIDASE

Matej Kožić, Antun Barišić, Branimir Bertoša

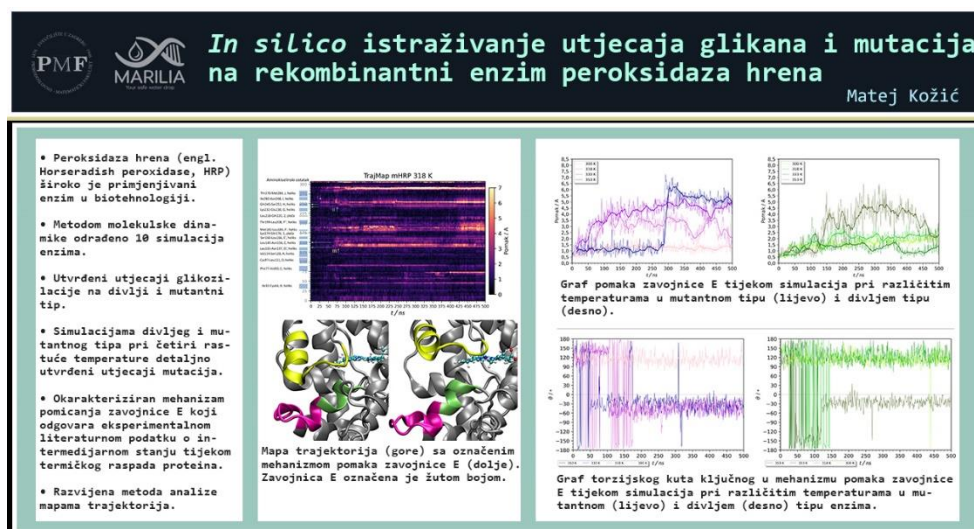
Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu

Horvatovac 102a, 10000 Zagreb

mkozic@chem.pmf.hr

Provedeno je istraživanje utjecaja glikozilacije, i utjecaja Martellovih [1] mutacija (razvijenih u svrhu korištenja enzima peroksidaze hrena (HRP) kao biosenzora) na enzim HRP te njegovu temperaturnu stabilnost. Provedeno je osam simulacija molekulske dinamike, svaka u trajanju od 500 ns, glikoziliranih oblika divljeg tipa i mutiranog oblika HRP pri temperaturama odabranim na temelju dostupnih eksperimentalnih podataka: 300 K, 318 K, 333 K i 353 K. Pored toga, provedene su i simulacije neglikoziliranog divljeg tipa HRP pri 300 K i neglikoziliranog rekombinantnog tipa HRP pri 300 K, također svaka u trajanju od 500 ns. Predstavljena je i opisana metoda analize trajektorija nazvana mapa trajektorija (engl. *Trajectory Map*) za koju je u sklopu ovog rada napisana skripta u programskom jeziku Python, uz koju su također provedene i uobičajene metode analize trajektorija. Analizom simulacija utvrđen je utjecaj glikozilacija na divlju i rekombinantnu varijantu enzima HRP, kao i utjecaj mutacija na enzim i na njegovu temperaturnu stabilnost. Na temelju rezultata simulacija i usporedbe s eksperimentalno dostupnim podacima predložen je mehanizam promjene u terciarnoj strukturi kao objašnjenje literaturno dostupnog podatka o intermedijernom stanju termičkog raspada enzima HRP znanog kao engl. *pre-molten globule*. [2]

61



[1] J. D. Martell, M. Yamagata, T. J. Deerinck, S. Phan, C. G. Kwa, M. H. Ellisman, J. R. Sanes, A. Y. Ting, *Nat. Biotechnol.* **34** (2016) 774-780.

[2] K. Chattopadhyay, S. Mazumdar, *Biochemistry* **39** (2000) 263-270.



KOMPLEKSIRANJE ANIONA S METILNIM ESTEROM PENTAFENILALANINA U ACETONITRILU

ANION COMPLEXATION BY PENTAPHENYLALANINE METHYL ESTER IN ACETONITRILE

Lucija Otmačić¹, Matija Modrušan¹, Nikolina Vidović², Nikola Cindro¹, Ivo Crnolatac³, Giovanna Speranza⁴, Vladislav Tomišić¹, Gordan Horvat¹

¹Department of Chemistry, Faculty of Science, Horvatovac 102a, Zagreb, Croatia

²Institute of Agriculture and Tourism, Department of Agriculture and Nutrition,
Karla Huguesa 8, 52440 Poreč, Croatia

³Ruđer Bošković Institute, Department of Organic Chemistry and Biochemistry,
Bijenička cesta 54, Zagreb, Croatia

⁴Department of Chemistry, University of Milan, Via Golgi 19, Milan, Italy
lucija.otmacic@chem.pmf.hr

Cyclic peptides have attracted an increasing interest over the past few decades due to their unique chemical and biological properties. However, the synthesis of cyclic peptides, especially late-stage cyclization step, continues to represent a significant synthetic challenge. Regardless of the macrocyclization strategy, the main factor influencing the success of a ring closure is the conformational preorganization, that is the ability of a linear precursor to bring its reactive termini in close spatial proximity. This can be achieved by using favorable template ions. [1, 2] In the scope of this work, the binding affinities of pentaphenylalanine methyl ester (Figure 1) towards several anions in acetonitrile were studied by means of fluorimetric, ¹H NMR and CD titrations as well as classical molecular dynamics simulations. The results showed that this compound could act as sensitive anion sensor due to its fluorescence properties, whereby the affinity for anion binding was moderate to strong. Moreover, used anions can serve as very efficient templating agents for the intramolecular head-to-tail linear peptide cyclization.

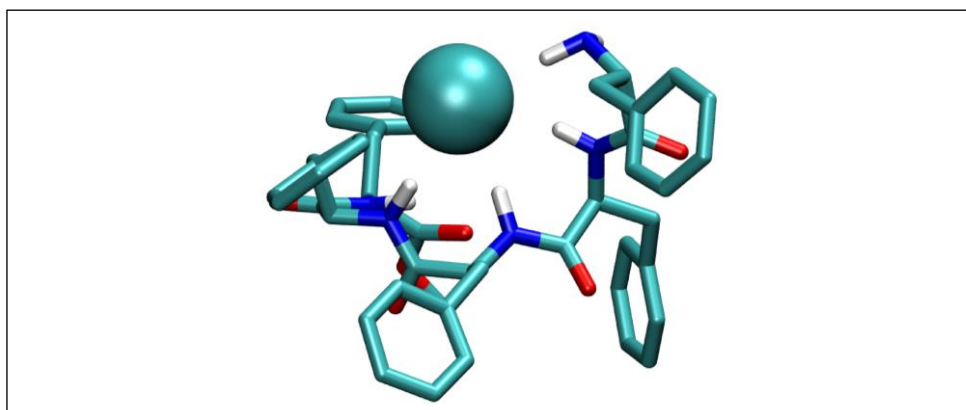


Figure 1. Structure of pentaphenylalanine methyl ester and its complex with chloride anion obtained by MD simulations.

[1] N. Vidović, G. Horvat, D. Riva, T. Rinkovec, N. Cindro, V. Tomišić, G. Speranza, *Org. Lett.* **22** (2020) 2129–2134.

[2] G. Horvat, S. Tarana, N. Vidović, N. Cindro, G. Speranza, V. Tomišić, *J. Mol. Liq.* **350** (2021) 116848.

ACKNOWLEDGEMENTS: This work was supported by the Croatian Science Foundation under project IP-2019-04-9560 (Macrosol). Scientific resources of Center of Excellence in Chemistry were used in this research.



RAZVOJ I IMPLEMENTACIJA CILJNE MOLEKULSKE DINAMIKE U GROMACS-U

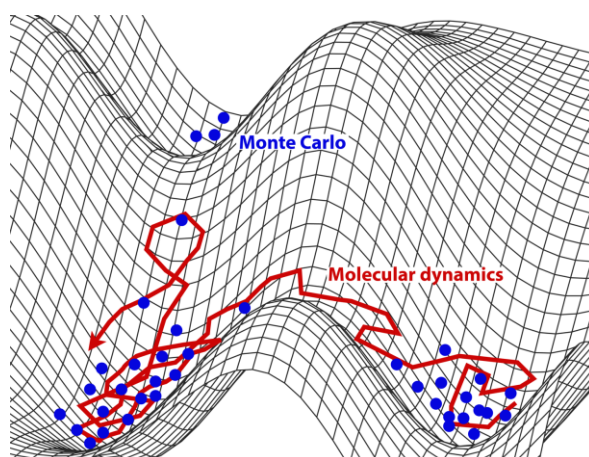
DEVELOPMENT AND IMPLEMENTATION OF TARGETED MOLECULAR DYNAMICS IN GROMACS

Helena Alija, Vedran Miletić

Grupa za aplikacije i usluge na eksperimentalnoj istraživačkoj infrastrukturi,
Fakultet informatike i digitalnih tehnologija, Ulica Radmile Matejčić 2, 51 000 Rijeka
helena.alija@student.uniri.hr

Predviđanjem promjena u strukturi proteina moguće je predvidjeti promjene njihovih funkcija. Koristeći se računalnim metodama moguće je predvidjeti te promjene mnogo učinkovitije, brže i financijski efikasnije nego što bi to bilo eksperimentalnim putem. Molekulska dinamika (MD) jest metoda računalne simulacije molekula koja se pokazala izuzetno vrijednim alatom za analizu i predviđanje fizičkih kretanja atoma i molekula te je redovno korištena pored drugih metoda simulacije kao što je Monte Carlo (MC). S obzirom na izuzetno velik broj čestica od kojih se molekularni sustav sastoji, analitičko određivanje putanje kretanja čestica je nemoguće te se koristi numerička integracija. Korištenjem MD moguće je odrediti stanja sustava u termodinamičkoj ravnoteži praćenjem razvoja sustava u dovoljno dugom simuliranom vremenu; često su to mikrosekunde do milisekunde. Specifično, obzirom da konformacijske promjene imaju izrazito važnu funkcionalnu ulogu za proteine, potrebno je karakterizirati moguće puteve prijelaza nizom stabilnih ili metastabilnih energetske barijere koje upravljaju evolucijskim postupkom. Specijalna vrsta metoda simulacije MD jesu one kod kojih se koriste neekvilibrirane metode, kod kojih se sustavu dodaje vanjska sila. Takve neekvilibrirane metode primjenjuju se za ubrzanje promjena na ciljani način što rezultira skraćenim simuliranim vremenom do ciljanih konformacija i skraćenim vremenom koje je potrebno za izvođenje simulacije. Jedna od tih metoda je ciljna molekulska dinamika (engl. *targeted molecular dynamics*, kraće TMD) kod koje se dio atoma simulacije vodi do ciljne strukture korištenjem većeg broja vanjskih sila. Ta je metoda već implementirana u NAMD-u, poznatom paketu za izvođenje simulacije MD dostupnom pod akademskom licencom. U okviru ovog rada prezentirat će se pristup implementacije iste metode u GROMACS-u, popularnom slobodnom softveru otvorenog koda slične namjene. To će omogućiti njeno korištenje u kombinaciji s drugim metodama podržanim u GROMACS-u, što će joj dati široki spektar primjena sve od lokalnih konformacijskih promjena do denaturacije proteina.

63



[1] J. Schlitter, M. Engels, P. Krüger, *J. Mol. Graph.* **12** (1994) 84-89.

[2] Qx8314, Schematic representation of the sampling of a potential energy surface in Monte Carlo and molecular dynamics. File:Sampling in Monte Carlo and molecular dynamics.png, Wikimedia Commons.



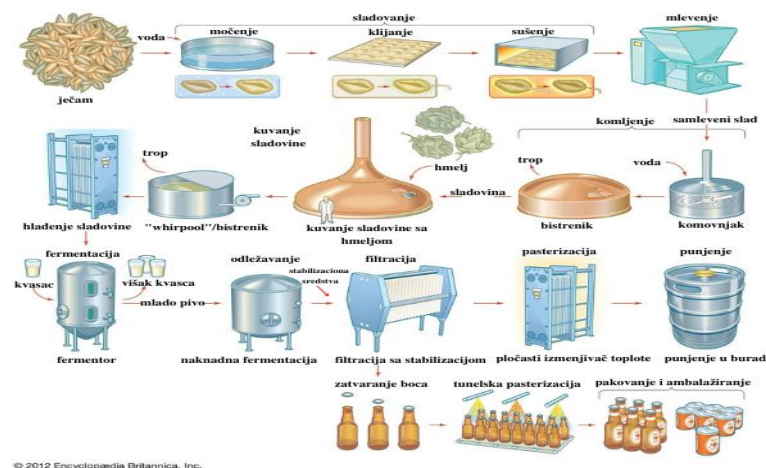
KVALITET SLADA PROIZVEDENIH IZ RAZLIČITIH UDJELA ZOB I ZOBENIH PAHULJICA

QUALITY OF WORTS PRODUCED WITH DIFFERENT PROPORTIONS OF OATS AND OAT FLAKES

Lenka Grubač, Hristina Radović

Tehnološki fakultet Novi Sad, Bulevar cara Lazara 1, 21000 Novi Sad, Srbija
grubaclenka@gmail.com

Pivo je osvježavajuće alkoholno piće proizvedeno alkoholnom fermentacijom vodenog ekstrakta zaslađenog ječma s dodatkom hmelja. Osnovne sirovine u proizvodnji piva su: ječmeni slad, voda, hmelj i kvasac, a pored osnovnih mogu se koristiti i nesladne sirovine kao jeftinija zamjena ječmenog slada. Zob je jednogodišnja biljka koja raste u uvjetima hladne i vlažne klime, a u proizvodnji piva se upotrebljava u prirodnom obliku, u vidu termički obrađenih proizvoda na bazi zobi odnosno zobnih pahuljica i kao zobeni slad. Posjeduje potencijal u proizvodnji piva bez glutena, što je značajno za ljude koji imaju neku vrstu bolesti koje gluten izaziva, a pogotovo za pacijente s dijagnosticiranom celijakijom. [1,2] Ispitivana je kvaliteta slada proizvedenih primjenom različitih udjela zobi, kao i zobnih pahuljica (10%, 30% i 50%) i ječmenog slada, bez i sa dodatkom komercijalnog enzima Ultraflo Max u količini od 50 μ l. Dobiveni rezultati uspoređeni su sa kvalitetom slada proizvedenom samo iz ječmenog slada, u cilju utvrđivanja u kojoj mjeri različiti udjeli zoba, kao i komercijalnog enzima Ultraflo Max, utječu na parametre kvalitete slada. Slad su proizvedena po Kongresnoj metodi. Sva analitička određivanja rađena su po standardnim EBC i/ili MEBAK metodama analize (Analytica - EBC, 2008; MEBAK, 2011). Svi rezultati prikazani su tablično. Kemijskom analizom proizvedenih sladova utvrđeno je da se sa porastom udjela zobnih pahuljica i prirodnog zoba ekstrakt slada smanjivao, dok je trajanje filtracije produljeno. Također, smanjena je boja slada, kako u sladovima bez dodatka komercijalnog enzima, tako i u sladovima sa dodatkom enzima. Dodatak enzima je utjecao na blago smanjenje boje proizvedenih sladova u odnosu na sladove bez dodatka komercijalnog enzima. Dobiveni rezultati pokazuju da zob i zobene pahuljice imaju potencijal u proizvodnji svijetlog piva.



[1] D. Briggs, C. Boulton, P. Brookes, R. Stevens, *Brewing Science and practice*, Woodhead publishing limited, Cambridge, England, 2004.

[2] J. Pejin, *Tehnologija piva*, Univerzitet u Novom Sadu, Tehnološki fakultet, Novi Sad, Republika Srbija, 2019.



RAZVOJ NAPREDNOG KATALITIČKOG SUSTAVA ZA OKSIDACIJU AROMATSKIH SPOJEVA

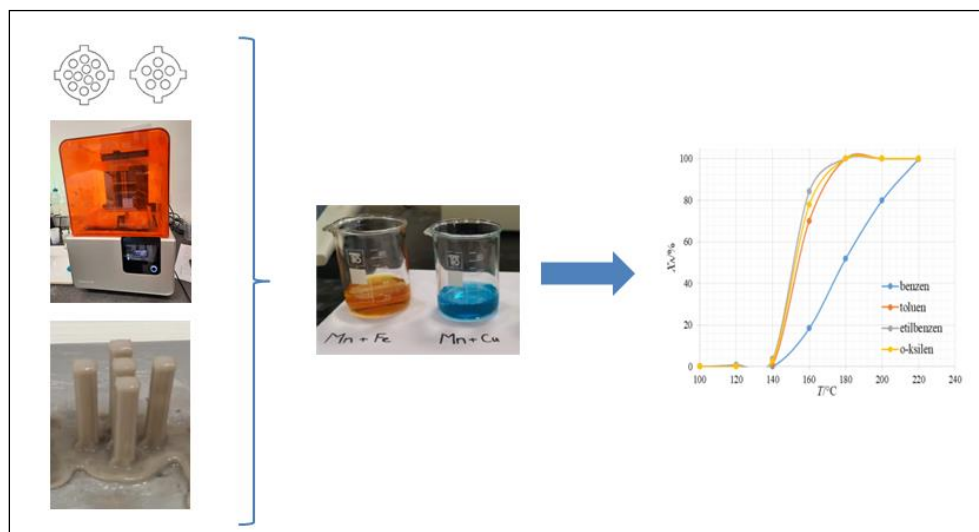
DEVELOPMENT OF ADVANCED CATALYTIC SYSTEM FOR OXIDATION OF AROMATIC COMPOUNDS

Antonia Škarica, Filip Car, Vesna Tomašić

Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije,
Marulićev trg 19, Zagreb
askarica@fkit.hr

Onečišćenje zraka sve je prisutnije, a posljedice koje ono donosi sve su vidljivije. U novije vrijeme svjedoci smo brojnih vremenskih nepogoda, temperaturnih ekstrema te lošije kvalitete zraka, vode i tla i drugih posljedica koje nastaju kao rezultat onečišćenja. Prema dokumentima Europske komisije, jedan od šest prioriteta za razdoblje od 2019.- 2024. je Europski zeleni plan prema kojem Europa želi postati prvi klimatski neutralan kontinent. [1,2] U ovom radu proučavana je katalitička oksidacija benzena, toluena, etilbenzena te *o*-ksilena (BTEX) kao predstavnika aromatskih hlapljivih organskih spojeva. Za pripremu prikladnih katalizatora korištene su monolitne strukture različitih geometrija pripremljene tehnologijom aditivne proizvodnje - obećavajućom tehnologijom industrije 4.0, na koje su metodom impregnacije nanosene katalitički aktivne komponente (miješani manganovi oksidi $MnCuO_x$, $MnFeO_x$ uz eventualni dodatak plemenitog metala, Pd). Katalitička oksidacija BTEX-a praćena je primjenom plinske kromatografije uz plameno ionizacijski detektor. Nađeno je da katalitička oksidacija ispitivanih BTEX spojeva započinje pri relativno niskim temperaturama, od 120 °C do 150 °C, a završava pri temperaturama od 200 °C do 340 °C, ovisno o geometriji monolitnog katalizatora i BTEX komponenti. Na temelju vrijednosti karakterističnih temperatura T_{10} , T_{50} te T_{90} zaključeno je da su tijekom oksidacije reaktivniji BTEX spojevi koji sadržavaju odgovarajući supstituent na benzenovom prstenu.

65



[1] https://ec.europa.eu/info/strategy/priorities-2019-2024_hr (pristup 27. lipnja 2022.)

[2] https://ec.europa.eu/info/strategy/priorities-2019-2024/european-green-deal_hr (pristup 27. lipnja 2022.)



STRUKTURA I ELEKTRONSKA SVOJSTVA KUBIČNOG LaMnO₃ - PRORAČUNI TEMELJENI NA TEORIJI FUNKCIONALNA GUSTOĆE (DFT)

STRUCTURE AND ELECTRONIC PROPERTIES OF CUBIC LaMnO₃ - DENSITY FUNCTIONAL THEORY (DFT) CALCULATIONS

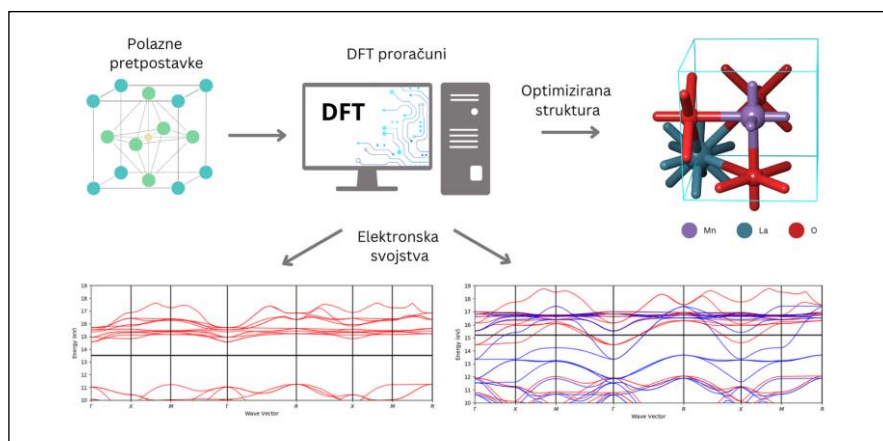
Iva Toković¹, Danica Piper¹, Stevan Armaković², Vladimir Srdić¹

¹Tehnološki fakultet Novi Sad, Bulevar cara Lazara 1, Novi Sad, Srbija

²Departman za fiziku, Prirodno-matematički fakultet Novi Sad, Trg Dositeja Obradovića 4
Novi Sad, Srbija

ivatokovic@gmail.com

Zbog specifičnih svojstava kao što su supravodljivost, magnetizam, piezoelektricitet, feroelektricitet i multiferoicitet, manganatni oksidi tipa perovskita imaju široku primjenu u raznim područjima. Struktura perovskitalantan-manganata (LMO) vrlo je osjetljiva na vanjske podražaje kao što su električna, magnetska polja i elektromagnetsko zračenje, kao i na prisutnost dopanata, što ovaj materijal čini pogodnim za primjenu u područjima visoke tehnologije kao što je spintronika (elektroničke komponente temeljene na svojstvima spina materijala) i memorijske jedinice. LMO se može pojaviti u različitim faznim oblicima kao što su romboedarski, rombski i kubični [1]. Cilj ovog rada bio je utvrditi strukturu i elektronska svojstva LMO kubične faze pomoću proračuna temeljenih na teoriji funkcionala gustoće (engl. *Density Functional Theory* (DFT)) korištenjem programskog paketa QuantumEspresso. Tijekom geometrijske optimizacije i pronalazanja energetskog minimuma definirano je osnovno stanje u kojem su određeni strukturalni parametri koji su kasnije korišteni u proračunima. Proračuni elektronskih svojstava uključivali su određivanje zonalne strukture, gustoće stanja, distribucije električnog naboja i širine zabranjene zone. Uz DFT pristup pri određivanju zonalne strukture korišten je i DFT+U pristup koji uključuje Hubbardove potencijale kao korekciju uz pretpostavku dobivanja točnijih rezultata [2]. Evaluacija dobivenih rezultata izvršena je usporedbom s literaturnim vrijednostima dobivenim eksperimentalnim putem.



[1] I. Koriba, B. Lagoun, A. Guibadj, S. Belhadj, A. Ameer, A. Cheriet, *Comput. Condens. Matter* **29** (2021) e00592.

[2] C. Franchini, R. Kováčik, M. Marsman, S.S. Murthy, J. He, C. Ederer, G. Kresse, *J. Phys. Condens. Matter* **24** (2012) 235602.



ISTRAŽIVANJE INKLUZIJSKIH KOMPLEKSA DIAMANTOIDNIH AMONIJEVIH SOLI S CIKLODEKSTRINIMA

INVESTIGATION OF INCLUSION COMPLEXES OF DIAMONDROID AMMONIUM SALTS WITH CYCLODEXTRINS

Amalija Ernečić¹, Sunčica Roca², Nikola Bregović³, Viktoriia Lazarenko³,
Marina Šekutor¹, Marija Alešković¹

¹Division of Organic Chemistry and Biochemistry, Ruđer Bošković Institute, Bijenička 54,
Zagreb, Croatia

²NMR Center, Ruđer Bošković Institute, Bijenička 54, Zagreb, Croatia

³Department of Chemistry, Faculty of Science, University of Zagreb, Horvatovac 102a,
Zagreb, Croatia

aernecic@fkit.hr, amalija.ernecic@gmail.com

Adamantane and diamantane derivatives are used as guest molecules in supramolecular inclusion complexes due to their unique structure. Cucurbituril hosts (CBs) bind diamondoid ammonium salts very strongly, with binding constants up to $10^{15} \text{ mol}^{-1} \text{ dm}^3$. [1] The next step was to broaden the scope of the research to a new series of guest compounds as well as other host molecules like cyclodextrins (CDs). [2a] Namely, CDs are important host macromolecules in supramolecular chemistry with broad applications in pharmacology, biotechnology, catalysis, nanotechnology, etc. [2b] Herein we present the synthesis of a continued series of diamondoid ammonium salts, and a detailed thermodynamic study of their complexation with β - and γ -CDs. The complex stability constants were determined by ITC and ^1H NMR titrations in aqueous solutions. Structures of the complexes and relevant interactions that occur between host and guest species were examined by ^1H - ^1H NOESY NMR experiments. The obtained results provided a deeper insight into the thermodynamics of hydrophobically driven complexation and structural characteristics of the corresponding supramolecules as well as a useful tool for the design a next generation of guest compounds.

67

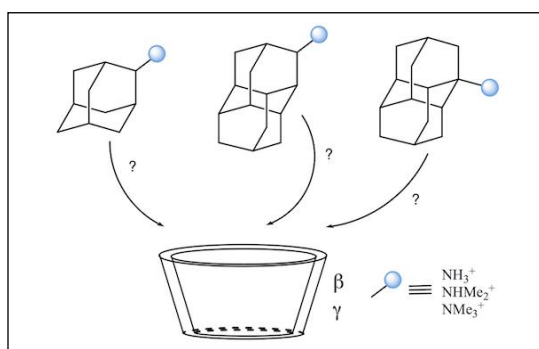


Figure 1. Diamondoid ammonium salt complexes with CDs.

[1] D. Sigwalt, M. Šekutor et al., *J. Am. Chem. Soc.* **139** (2017) 3249–3258.

[2] a) M. Alešković, S. Roca, R. Jozepović, N. Bregović, M. Šekutor, *New J. Chem.* **46** (2022) 13406–13414. b) H. Dodziuk, *Cyclodextrins and Their Complexes. Chemistry, Analytical Methods, Applications*, ILEY-VCH, Weinheim, 2006.

Acknowledgements. This work has been supported by the Croatian Academy of Science and Arts and the Croatian Science Foundation (UIP-2017-05-9653 (DiamMat), IP-2019-04-9560 (MacroSol)).



ODREĐIVANJE ANTIOKSIDATIVNE AKTIVNOSTI EKSTRAKATA *Calendula officinalis* L. PRIMJENOM BRIGGS-RAUSCHER REAKCIJE

DETERMINING THE ANTIOXIDANT ACTIVITY OF *Calendula officinalis* L. EXTRACTS USING BRIGGS- RAUSCHER REACTION

Ajdin Mujezin, Lejla Klepo

Department of Chemistry, Faculty of Science, University of Sarajevo, Zmaja od Bosne 33-35, 71000 Sarajevo, Bosnia and Herzegovina
mujezinajdin@gmail.com

Calendula officinalis L. (marigold) is a medicinal plant, which belongs to the Asteraceae family. All parts of this plant contain numerous phytochemical compounds. Because of that, marigold extracts manifest various biological effects [1]. The aim of this study was to determine the antioxidant activity of marigold extracts. Those extracts were prepared from leaves, flowers, stems and roots harvested in Lukavica, near Sarajevo, in 2021. In determining the antioxidant activity, marigold extracts were isolated by Soxhlet and ultrasonic extractions using 96% ethanol as a solvent. The Briggs-Rauscher (BR) reaction method was used in determining the antioxidant activity. BR reaction method is a potentiometric method for determining the antioxidant activity of hydrosoluble compounds, which are present in sample [2]. In the BR reaction method, gallic acid (GA) and curcumin (C) were used as standards. In this method, the best antioxidant activity was shown by the roots extract, obtained by Soxhlet extraction of roots. Briggs-Rauscher antioxidant indexes (BRAI) of this extract were 0.2587 (calculated over the standard of gallic acid) and 0.1184 (calculated over the standard of curcumin), at a concentration of 1 mg/mL. Apart from that, flowers extract, obtained by ultrasonic extraction of flowers, has shown significant antioxidant activity. BRAI of this extract were 0.0990 (std. GA) and 0.0332 (std. C), at a concentration of 5 mg/mL. In conclusion, marigold extracts have shown significant antioxidant activity according to the Briggs-Rauscher reaction method.



[1] V. D. Ashwlayan, A. Kumar, M. Verma, V. K. Garg, S. K. Gupta, *Pharm. Pharmacol. int. j.*, **6**(2) (2018) 149–155.

[2] R. Cervellati, K. Höner, S. D. Furrow, C. Neddens, S. Costa, *Helv. Chim. acta*, **84**(12) (2001) 3533–3547.



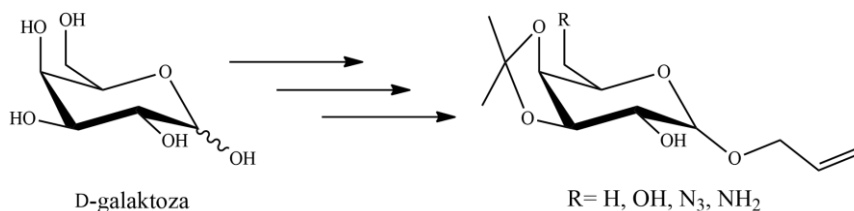
OPTIMIZACIJA SINTEZE C6-DERIVATA D-GALAKTOZE

OPTIMIZATION OF THE SYNTHESIS OF D-GALACTOSE C6-DERIVATIVES

Filip Grdović, Đani Škalamera

Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek, Zavod za organsku kemiju
Horvatovac 102a, 10 000 Zagreb, Hrvatska
filip.grdovic@chem.pmf.hr

Adjuvanti su ključne imunostimulirajuće komponente cjepiva koje usmjeravaju imunološki odgovor na primijenjeni antigen. Imaju sposobnost izazivanja snažnih i trajnih imunoloških odgovora, ali i mogućnost njihovog moduliranja. [1] Saponin QS-21, izoliran iz biljke *Quillaja saponaria* jedan je od najjačih poznatih adjuvanata. [2] Najveći nedostaci ovog saponina su njegova kemijska nestabilnost te dostupnost u relativno maloj količini nakon vrlo zahtjevnog pročišćavanja prirodnog materijala. Navedeno je potaknulo niz istraživanja korelacije strukture i aktivnosti u svrhu sinteze strukturno jednostavnijih i stabilnijih analoga QS-21. Pokazalo se da je linearna trisaharidna domena Xyl-Rha-Fuc nužna za adjuvantnu aktivnost ovog saponina [1], stoga je razvoj efikasnog sintetskog puta za njezinu pripremu od velike važnosti za pripremu niza novih derivata i razvoj ovog područja. D-Galaktoza je izosterička D-fukozi te će se u ovome radu koristiti kao prekursor čijom se funkcionalizacijom na položaju 6 mogu sintetizirati derivati koji primjerice imaju amino-skupinu ili azidnu skupinu vezanu na C6-atom, što će omogućiti jednostavnu daljnju funkcionalizaciju već gotovog trisaharida. Općeniti reakcijski slijed sinteze takvih derivata uključuje prevođenje C6-hidroksilne skupine u jodid koji se potom supstituira s nekom od navedenih skupina. Takvi derivati mogu se ugraditi u trisaharid Xyl-Rha-Fuc na mjesto fukoze u svrhu pripreme novih derivata i ispitivanja njihove imunoadjuvantne aktivnosti.



[1] I. Tuković, Sinteza trisaharida β -D-Xylp-(1 \rightarrow 4)- α -L-Rhap-(1 \rightarrow 2)-D-Fucp, Diplomski rad, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, 2021, str.1-2, 21-24.

[2] P. Wang, X. Ding, H. Kim, Đ. Škalamera, S. M. Michalek, P. Zhang, *J. Med. Chem.* **62** (2019) 9976-9982.



STEREOKEMIJA ML_2 METALNIH KOMPLEKSA S BPA I IMDA LIGANDIMA

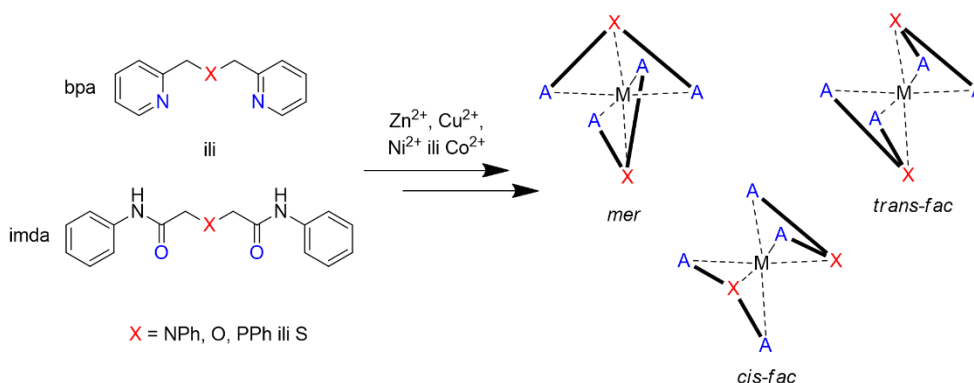
STEREOCHEMISTRY OF ML_2 METAL COMPLEXES WITH BPA AND IMDA LIGANDS

Aleks Logožar¹, Natalija Pantalon Juraj², Berislav Perić², Robert Vianello²,
Srećko I. Kirin²

¹Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu,
Horvatovac 102a, 10000 Zagreb

²Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, 10000 Zagreb
alogozar@chem.pmf.hr

Bis-tridentatni metalni kompleksi fleksibilnih liganada $[M(A-X-A)_2]$ strukture imaju tri različita geometrijska izomera: *mer*, *trans-fac* i *cis-fac*. [1] Na stabilnost pojedinih izomera utječe niz faktora poput elektronskih i steričkih svojstava liganda, vrsta metalnog iona, mogućnost ostvarivanja nekovalentnih interakcija, vrsta protuiona i drugih. Utjecaji pojedinih faktora na nastanak određenog izomera ML_2 kompleksa do danas nisu detaljno istraženi, a razumijevanje tih faktora nam omogućuje dizajn novih kompleksnih spojeva željene geometrije i svojstava. [2, 3] U ovom radu pripremljeni su derivati tridentatnih liganada bis(piridin-2-ilmetil)amina (bpa) i 2,2'-iminodiacetamida (imda) te njihovi kompleksi s različitim solima Zn(II), Cu(II), Ni(II) i Co(II). Središnji donorski atomi liganada bili su kisik ili sumpor, odnosno -NPh- ili -PPh- skupine. Strukture spojeva u čvrstom stanju karakterizirane su difrakcijom rendgenskih zraka na jediničnom kristalu, a strukture u otopini spektroskopijom NMR. Stehiometrija i stereokemija kompleksa te moguće konformacije supstituenata u ovim sustavima modelirane su pomoću DFT računa kako bi se odredila njihova međusobna relativna stabilnost. Usporedbom eksperimentalnih podataka i DFT računa uočene su preference pojedinih središnjih atoma ka određenim stereoizomerima ML_2 kompleksa. Jedan od ciljeva ovog istraživanja bio je odrediti koji čimbenici uzrokuju nastanak *cis-fac* izomera, koji bi se u slučaju dušika ili fosfora kao središnjeg donorskog atoma, mogli upotrijebiti za dizajn novih selektivnih katalizatora.



Slika 1. ML_2 kompleksi bpa i imda liganada, $M = Zn^{2+}, Cu^{2+}, Ni^{2+}$ i Co^{2+} .

[1] N. Pantalon Juraj, S. I. Kirin, *Coord. Chem. Rev.* **445** (2021) 214051.

[2] N. Pantalon Juraj, G. I. Miletić, B. Perić, Z. Popović, N. Smrečki, R. Vianello, S. I. Kirin, *Inorg. Chem.* **58** (2019) 16445–16457.

[3] Đ. Škalamera, E. Sanders, R. Vianello, A. Maršavelski, A. Pevec, I. Turel, S. I. Kirin, *Dalton Trans.* **45** (2016) 2845–2858.



TERMALNA SVOJSTVA Cd(II) KOMPLEKSA PRIPREMLJENIH U RAZLIČITIM OTAPALIMA

THERMAL PROPERTIES OF Cd(II) COMPLEXES PREPARED IN DIFFERENT SOLVENTS

Nađa Štetin, Berta Barta Holló

Faculty of Sciences, University of Novi Sad, Trg Dositeja Obradovića 3, Novi Sad, Serbia
stetin.nadja@gmail.com

Complexes with ethyl-5-amino-1-methyl-1H-pyrazole-4-carboxylate (L) are interesting from the chemical, and structural point of view [1], as well as from the aspect of biological activity [2]. Here, the preparation and thermoanalytical properties of complexes of CdCl₂ and CdBr₂ with this ligand are presented. The complexes with both halogenide salts were prepared by three different procedures. During the syntheses, methanol, mixtures methanol/acetonitrile, and methanol/acetone were used as solvents. The obtained microcrystalline products were characterized by methods of elemental and thermal analysis. The thermogravimetric (TG) curves of complexes prepared from CdCl₂ are different (figure 1) and suggest different compositions and structures of the obtained compounds. The main similarity between them is intermediate, which is in all cases CdCl₂. The thermoanalytical (TA) curves of the first compound, got from the methanolic solution are completely different than that of the other two compounds. Based on the mass percent of CdCl₂ in compounds 1B and 1C, their compositions were determined, thus the proposed formulas are CdL₂Cl₂ and Cd₂L₄Cl₂, respectively. In the case of CdBr₂, the TG and DTG curves of the samples prepared in different solvents are almost the same. It suggests that the solvent in the reaction mixture did not affect the formation of the complex and the same compound is prepared from all three reaction mixtures.

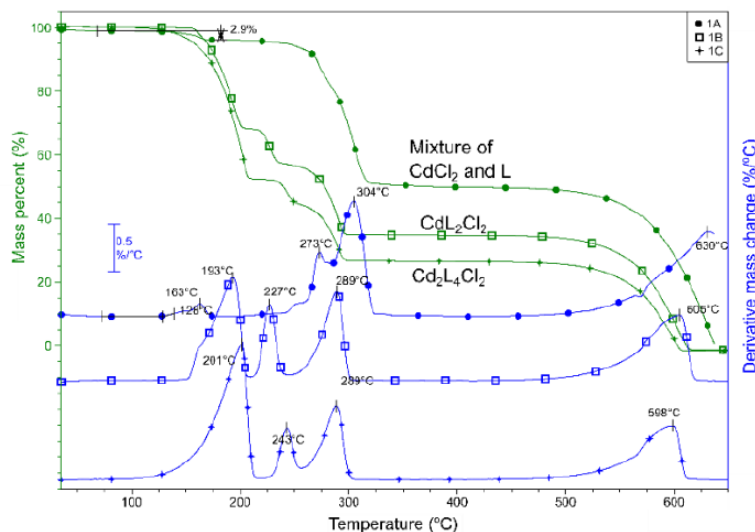


Figure 1. TG (green) and DTG (blue) curves of complexes prepared from CdCl₂ and L, recorded in N₂.

- [1] B. Barta Holló, Lj. S. Vojinović Ješić, M. M. Radanović, M. V. Rodić, Ž. K. Jaćimović, K. Mészáros Szécsényi, *J Therm Anal Calorim* **142** (2020) 451.
[2] B. Barta Holló, M. M. Radanović, M. V. Rodić, S. Krstić, Ž. K. Jaćimović, Lj. S. Vojinović Ješić, *Inorganics*, **10** (2022) 20.



7. Simpozij studenata kemičara, Zagreb, 22. listopada 2022.



VAHEP



PLIVA

teva



AlphaChrom
a member of Altium Group



Accumular Ltd



BANI | PROMET d.o.o.
ZA PROIZVODNJU I USLUGE



blista

Curte



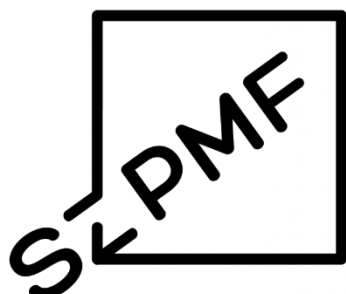
75

IVERO d.o.o.
PROIZVODNJA I VELEPRODAJA KEMIKALIJA
Zagreb, Radnička cesta 173t * 01/2406 900 * ivero@ivero.hr * www.ivero.hr

KEFO®
SINCE 1949



šk školska knjiga



Studentski zbor

Prirodoslovno
Matematičkog
Fakulteta

STUDENT
SKI ZBOR
SVEUČILIŠTA
U ZAGREBU





Udruga studenata biologije

BIUS



Pumpkina

GRAINΣ







7. Simpozij studenata kemičara, Zagreb, 22. listopada 2022.



Vidimo se za godinu dana na 8. SiSK-u!