

24
HSKIKI

HRVATSKI SKUP KEMIČARA I KEMIJSKIH INŽENJERA, 21. – 24. travnja 2015.
Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije Sveučilišta u Zagrebu, Zagreb

24
CMCCE

CROATIAN MEETING OF CHEMISTS AND CHEMICAL ENGINEERS, April 21st – 24th, 2015
Faculty of Chemical Engineering and Technology University of Zagreb, Zagreb, Croatia

ORGANIZATORI/ORGANIZERS:

Hrvatsko društvo kemijskih inženjera i tehnologa
Croatian Society of Chemical Engineers

Hrvatsko kemijsko društvo
Croatian Chemical Society

Knjiga sažetaka *Book of Abstracts*

Zagreb 2015.



KONTAKT/CONTACT:

e-mail: hskiki@fkit.hr
tel.: +385 (0) 1 4597 118
fax: +385 (0) 1 4597 142

www.24hskiki.hr

H·KI
HRVATSKO DRUŠTVO
KEMIJSKIH INŽENJERA I
TEHNOLOGA

HKD
1926

Fotografija Zagreba: Zvonimir Katandić | dizajn: Zdenko Blažeković

Hrvatsko društvo kemijskih inženjera i tehnologa
Croatian Society of Chemical Engineers



Hrvatsko kemijsko društvo
Croatian Chemical Society

**XXIV. HRVATSKI SKUP
KEMIČARA I KEMIJSKIH INŽENJERA**

***XXIV CROATIAN MEETING
OF CHEMISTS AND CHEMICAL ENGINEERS***

**Mini-simpozij Vladimir Prelog
*Mini-symposium Vladimir Prelog***

**Knjiga sažetaka
*Book of Abstracts***

**Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Sveučilište u Zagrebu
Faculty of Chemical Engineering and Technology, University of Zagreb
Zagreb, 21.–24. travnja 2015.
*April 21–24, 2015***

XXIV. HRVATSKI SKUP KEMIČARA I KEMIJSKIH INŽENJERA
XXIV CROATIAN MEETING OF CHEMISTS AND CHEMICAL ENGINEERS

Znanstveni odbor
Scientific Committee

Lidija Barišić
Nikola Basarić
Mate Bilić
Tomislav Bolanča (Chairman)
Nives Galić
Ita Gruić-Sovulj
Ante Jukić
Damir Kralj
Olga Kronja
Nenad Kuzmanić
Zoran Mandić
Draginja Mrvoš Sermek
Vesna Petrović Peroković
Marin Roje
Vesna Tomašić
Lidija Varga-Defterdarović
Bruno Zelić

Organizacijski odbor
Organizing Committee

Danijela Ašperger
Branimir Bertoša
Tomislav Biljan
Tomislav Bolanča (Chairman)
Dominik Cinčić
Mojca Čakić Semenčić
Zvonimir Katančić
Hrvoje Kušić
Anita Šalić
Šime Ukić
Mario Vazdar
Elvira Vidović

Počasni odbor
Honorary Committee

Smiljko Ašperger†
Egon Bauman
Ivan Butula†
Marin Hraste
Zvonimir Janović
Boris Kamenar†
Olga Kronja
Želimir Kurtanjek
Predrag Novak
Ivan Piljac
Vitomir Šunjić
Vesna Tomašić
Srdanka Tomić-Pisarović
Nenad Trinajstić
Đurđa Vasić-Rački
Ivan Vicković
Stanka Zrnčević

Tajništvo skupa
Secretariat of the Meeting

Zvonimir Katančić
Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije
Sveučilišta u Zagrebu
Marulićev trg 19, HR-10 000, Zagreb,
Hrvatska
Tel.: 01/4597–118
Faks: 01/4597–142
e-pošta: hskiki@fkit.hr
www.24hskiki.hr

Organizatori / Organizers:
Hrvatsko društvo kemijskih inženjera i tehnologa
Croatian Society of Chemical Engineers
Hrvatsko kemijsko društvo
Croatian Chemical Society

Izdavač / Published by:
HDKI/CSCE

Urednici / Editors:
Šime Ukić, Tomislav Bolanča

Dizajn korica / Cover design:
Zdenko Blažeković

Tekst pripremili / Text prepared by:
AUTORI, koji su odgovorni za tekst sažetaka
AUTHORS, who are fully responsible for the abstracts

ISBN 978-953-6894-54-3

CIP zapis je dostupan u računalnome katalogu Nacionalne i sveučilišne knjižnice u Zagrebu pod brojem 000904121.

HRVATSKI skup kemičara i kemijskih inženjera (24; 2015; Zagreb)
Knjiga sažetaka = Book of Abstracts /
XXIV. hrvatski skup kemičara i kemijskih inženjera,
Zagreb, 21.–24. travnja 2015.;
<urednici: Šime Ukić, Tomislav Bolanča>.–Zagreb
Hrvatsko društvo kemijskih inženjera i tehnologa / Hrvatsko kemijsko
društvo, 2015.

Tekst na hrv. i engl. jeziku. – Bibliografija iza većine radova.

Mjesto održavanja Skupa / Meeting Venue

Sveučilište u Zagrebu / University of Zagreb
Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije / Faculty of Chemical Engineering and Technology
Marulićev trg 19, 10000, Zagreb
URL: <http://www.fkit.unizg.hr/>
Tel: +385 1 4597 281

Pokrovitelji / Under the Auspices of the

Ministarstvo znanosti, obrazovanja i sporta / *Ministry of Science, Education and Sport*

Ministarstvo gospodarstva / *Ministry of Economy*

Ministarstvo zaštite okoliša i prirode / *Ministry of Environment and Nature Protection*

Grad Zagreb / *City of Zagreb*

Sveučilište u Zagrebu / *University of Zagreb*

Akademija tehničkih znanosti Hrvatske / *Croatian Academy of Engineers*

Hrvatski inženjerski savez / *Croatian Association of Engineers*

Agencija za odgoj i obrazovanje / *Education and Teacher Training Agency*

Zlatni sponzor / Golden sponsor

Pliva Hrvatska d.o.o., Zagreb

Srebrni sponzor / Silver sponsor

Labena d.o.o., Zagreb

Brončani sponzori / Bronze sponsors

INA-Industrija nafte, d.d., Zagreb

Kemolab d.o.o., Zagreb

Sponzori / Sponsors

Alphachrom d.o.o., Zagreb

AnAs d.o.o., Zagreb

Hebe d.o.o., Split

Jamnica d.d. Zagreb

Kobis d.o.o., Zagreb

Merck d.o.o., Zagreb

PAN-PEK d.o.o., Zagreb

Primalab d.o.o., Zabok

Royal Society of Chemistry, Cambridge, UK

Ru-Ve d.o.o., Sveta Nedelja

Shimadzu d.o.o., Zagreb

PREDGOVOR

Kemija, kao temeljna znanost, osnova je mnogih najvećih dostignuća svekolike svjetske znanosti. Uzimajući u obzir neka od interesantnih kemijskih otkrića i ideja i pretvarajući ih u inovativne procese ili proizvode, kemičari i kemijski inženjeri su više nego dokazali doraslost izazovu konstantnog unaprjeđenja kvalitete svakodnevnog života. Primjena kemije u različitim područjima (npr. znanosti o materijalima, ekologiji, biotehnologiji, medicini itd.), a sudeći prema broju publikacija citiranima u Chemical Abstracts, također je u stalnom porastu. Posljedično je to rezultat promišljanja i razumijevanja prirodnih fenomena i zakonitosti integralno s osmišljavanjem tehničkih i tehnoloških rješenja. Stručnjak na današnjem tržištu rada nužno mora poznavati navedene relacije i primjenjivati ih u svakodnevnoj praksi. Navedene činjenice nedvojbeno su dostatna argumentacija potrebi da se još jednom organizira Hrvatski skup kemičara i kemijskih inženjera.

Hrvatski skup kemičara i kemijskih inženjera utemeljen je 1952. godine, a od 1969. održava se tradicionalno svake druge godine. Već u godinama ubrzo nakon osnivanja Skup se pokazao svrsishodnim forumom kemičara i kemijskih inženjera većinom iz Hrvatske i susjednih zemalja, dok se danas pokušava pozicionirati unutar prostora Europske unije. Kvaliteta Skupa oduvijek je bila imperativ; zbog toga i ovoga puta Skup okuplja eminentne znanstvenike, koji će pozvanim predavanjima podijeliti svoja najnovija otkrića, dok će zastupnici proizvođača instrumenata, kemikalija i ostale opreme prikazati praktična rješenja. Gospodarski forum ponudit će promišljanja kako gospodarstveni subjekti mogu imati koristi od znanstvenika te zašto svjetska znanost potrebuje sve više znanstvenika s iskustvom u gospodarskim djelatnostima. Navedeno u prvi plan stavlja obrazovanje kao kritičan faktor, kako za karijeru pojedinog stručnjaka, tako i za gospodarske subjekte i širu društvenu zajednicu u konačnici. Stoga je ključno provoditi najkvalitetnije moguće obrazovanje nastavnika, a pri tome dostupno širokoj populaciji. Organizacijski odbor Skupa prepoznao je ovu potrebu i organizirajući certificiranu Obrazovnu sekciju, kojoj je moguće prisustvovati bez kotizacije, postoji nada da će ovaj mali doprinos u konačnici pokrenuti pozitivne društvene inicijative. Iako je program Skupa vrlo sadržajan, za očekivati je da će se pronaći poneki trenutak za opuštanje u gradu Zagrebu; gradu čija su vrata uvijek otvorena.

U ime Znanstvenog i Organizacijskog odbora iznimna mi je čast i zadovoljstvo zaželjeti Vam dobrodošlicu na 24. hrvatski skup kemičara i kemijskih inženjera.

S poštovanjem,



Predsjednik Znanstvenog i Organizacijskog odbora
Prof.dr.sc. Tomislav Bolanča

PREFACE

As the central science, Chemistry is responsible for many of the most important breakthroughs in science. In taking some of the world's most exciting ideas and discoveries and turning these into innovative processes and products, chemical engineers meet its potential and significantly improve our everyday lives. The applications in a wide number of areas (*i.e.* material science, environmental science, biotechnology, medical chemistry *etc.*), as judged by the number of articles summarized in Chemical Abstracts, continues to grow at a healthy rate. All this has been accomplished because there is an understanding of natural phenomena and technical principles. As an expert one should understand these relations and implement them into daily practice. We find above arguments are compelling enough to organize Croatian Meeting of Chemists and Chemical Engineers (CMCChE) once again.

The origin of the CMCChE can be found back in 1952, and starting from 1969 it regularly occurs biannually. During early years meeting proves to be an ideal forum for chemists, and chemical engineers mainly from Croatia and neighboring countries, while nowadays it tries to integrate European Union audience. The quality of the CMCChE program has always been an imperative and therefore eminent scientist will join the meeting as invited lecturers to share valuable experiences while representatives of instruments, chemicals and other consumables production companies will offer practical solutions for particular problem. The business forum will identify how business benefits from people with the skills developed during a scientific training; at the same time, it will discuss why world of science needs more people with experience of business. Furthermore, it is well known that education plays one of the most important roles in the prosperity of particular expert, business economy of the particular company as well as for the global society. Therefore, it is essential to organize education section available to large number of participants. Organizing committee of CMCChE recognizes this need and making CMCChE Education Section free of charge we are hoping that our small contribution might make the difference. Even though the program will be very intensively scheduled, probably there will be some spare moment to enjoy spring in city of Zagreb; the city whose doors are always open.

On behalf of the Organizing Committee it is my honor and privilege to welcome you all to 24th Croatian Meeting of Chemists and Chemical Engineers.

Sincerely,



Chairman of the Scientific and Organizing Committee
Prof. Tomislav Bolanča, Ph.D.

SADRŽAJ / CONTENTS

PREDGOVOR

PREFACE

PLENARNA PREDAVANJA

PLENARY LECTURES

- J. Plavec: 34
STRUKTURE G-KVADRIPEKSA I UVID U NJIHOVO SAVIJANJE NMR
SPEKTROSKOPIJOM
*STRUCTURES OF G-QUADRUPLICES AND INSIGHTS INTO THEIR
FOLDING BY NMR SPECTROSCOPY*
- P. Jungwirth: 35
RAZJAŠNJENJE SLOŽENE PRIRODE HIDRATIZIRANOG ELEKTRONA
UNRAVELING THE COMPLEX NATURE OF THE HYDRATED ELECTRON
- J.-M. Le Lann: 36
MENADŽMENT „SUSTAVNIH“ INOVACIJA: PRIMJENE U KEMIJSKOM
INŽENJERSTVU
*MANAGEMENT OF “SYSTEMATIC” INNOVATION: APPLICATIONS IN
CHEMICAL ENGINEERING*
- Ž. Knez: 37
MOGU LI SUPERKRITIČNI FLUIDI ZAMIJENITI KONVENCIONALNA
OTAPALA?
COULD SUPERCRITICAL FLUIDS REPLACE CONVENTIONAL SOLVENTS?
- G. Falini: 38
BIOMINERALIZACIJA I BUJANJE VRSTA USLIJED ACIDIFIKACIJE
OCEANA
*BIOMINERALIZATION AND SPECIES ABUNDANCE UNDER OCEAN
ACIDIFICATION*
- J. Weiss: 39
IONSKA KROMATOGRAFIJA BEZ PRIPREME ELUENSA (RFIC) I NJENA
PRIMJENA U ZAŠTITI OKOLIŠA
*REAGENT-FREE ION CHROMATOGRAPHY (RFIC) AND ITS APPLICATION
IN ENVIRONMENTAL ION ANALYSIS*

T. McNally:	40
HOLISTIČKI PRISTUP PRIPRAVI KOMPOZITA POLIMERA I NANOČESTICA <i>A HOLISTIC APPROACH TO THE PREPARATION OF COMPOSITES OF POLYMERS AND NANOPARTICLES</i>	
G. Mali:	41
UPOTREBA NMR SPEKTROSKOPIJE ČVRSTOG STANJA U ZNANOSTI O MATERIJALIMA <i>APPLICATION OF SOLID-STATE NMR SPECTROSCOPY IN MATERIALS SCIENCE</i>	
S. Markić:	42
INKLUZIJA I NASTAVA KEMIJE <i>INCLUSION AND CHEMISTRY EDUCATION</i>	
POZVANA PREDAVANJA	
<i>INVITED LECTURES</i>	
R.W. Bates:	44
KATALIZA: "BUĐENJE AFINITETA" ZA ORGANSKU SINTEZU <i>CATALYSIS: "AWAKENING AFFINITIES" FOR ORGANIC SYNTHESIS</i>	
Z. Kovarik:	45
KATALITIČKA RAZGRADNJA ORGANOFOSFORNIH SPOJEVA POMOĆU ACETILKOLINESTERAZE I ALDOKSIMA <i>CATALYTIC ORGANOPHOSPHORUS COMPOUNDS SCAVENGING BY ACETYLCHOLINESTERASE ASSISTED WITH ALDOXIMES</i>	
S. Rast, M. Stephan, B. Mohar:	46
RAZVOJ LIGANADA ZA RODIJEM KATALIZIRANE ASIMETRIČNE REDUKCIJE <i>DEVELOPMENT OF LIGANDS FOR RHODIUM-CATALYZED ASYMMETRIC REDUCTIONS</i>	
I. Plazl:	47
FENOMENI PRIJENOSA NA MIKRO I MULTI RAZINAMA MODELIRANJA <i>TRANSPORT PHENOMENA AT THE MICRO SCALE AND THE MULTISCALE MODELING CONCEPT</i>	

Z. Mandić:	48
<p>SUPERKONDENZATORI KAO SPREMNICI ENERGIJE: NADOMJESTAK ILI DODATAK GALVANSKIM ČLANCIMA (BATERIJAMA)? <i>SUPERCAPACITORS AS ENERGY STORAGE DEVICES: ALTERNATIVE OR COMPLEMENTARY DEVICES TO BATTERIES?</i></p>	
N. Vukojević Medvidović:	49
<p>EKOLOŠKI PRIHVATLJIVA TEHNOLOGIJA OBRADE OTPADNIH VODA PRIMJENOM PRIRODNOG ZEOLITA <i>ENVIRONMENTALLY FRIENDLY WASTEWATER TREATMENT TECHNOLOGY BASED ON NATURAL ZEOLITE</i></p>	
M. Tišma:	50
<p>BIOLOŠKA OBRADA POLJOPRIVREDNOG OTPADA I OTPADA IZ PREHRAMBENE INDUSTRIJE POMOĆU GLJIVA BIJELOG TRULJENJA – MOGUĆNOSTI I IZAZOVI <i>BIOLOGICAL TREATMENT OF AGRICULTURAL AND FOOD INDUSTRY WASTE BY WHITE-ROT FUNGI – OPPORTUNITIES AND CHALLENGES</i></p>	
A. Šuligoj, U. Lavrenčić Štangar, N. Novak Tušar:	51
<p>FOTOKATALITIČKA RAZGRADNJA TOLUENA I FORMALDEHIDA U PLINOVITOJ FAZI UZ IMOBILIZIRANI SLOJ TiO_2/SiO_2 <i>DECOMPOSITION OF GASEOUS TOLUENE AND FORMALDEHYDE WITH TiO_2/SiO_2 PHOTOCATALYTIC COATINGS</i></p>	
S. Kurajica:	52
<p>KONTROLA SOL-GEL PROCESA MODIFICIKACIJOM ALKOKSIDNIH PREKURSORA <i>SOL-GEL PROCESS CONTROLL BY MODIFICATION OF ALKOXIDE PRECURSORS</i></p>	
B. Andričić, M. Erceg, S. Perinović:	53
<p>POLIMERNI MATERIJALI S BIORAZGRADLJIVIM KOMPONENTAMA <i>POLYMERIC MATERIALS WITH BIODEGRADABLE COMPONENTS</i></p>	
N. Judaš, F.M. Brueckler, N. Cindro, D. Cinčić, S. Habazin, H. Mesić, K. Molčanov, M. Sikirica, V. Stilinović, M. Vrbnjak:	54
<p>POKUS I NASTAVA KEMIJE (POSVEĆENO PETRU VRKLJANU) <i>EXPERIMENT AND CHEMICAL EDUCATION (DEDICATED TO PETAR VRKLJAN)</i></p>	
R. Vladušić:	55
<p>KOLIKO ČVRSTIM VEZAMA SMO VEZANI? PRIČA O RAZUMIJEVANJU KEMIJSKIH VEZA U HRVATSKOM OBRAZOVNOM SUSTAVU <i>HOW STRONG ARE THE BONDS THAT TIE US? A STORY ABOUT CHEMICAL BOND CONCEPTIONS IN CROATIAN EDUCATIONAL SYSTEM</i></p>	

I. Vicković, B. Marković:	56
PROGRAMI SVEUČILIŠNIH NASTAVNIČKIH STUDIJA KEMIJE U REPUBLICI HRVATSKOJ <i>EDUCATIONAL UNIVERSITY STUDY PROGRAMMES OF CHEMISTRY IN CROATIA</i>	
D. Trivić, B. Tomašević:	57
AKTIVNOSTI ZA RAZVOJ PEDAGOŠKIH SADRŽAJA KOLEGIJA METODIKA NASTAVE KEMIJE <i>ACTIVITIES IN CHEMISTRY DIDACTICS COURSE FOR CHEMISTRY TEACHER PEDAGOGICAL CONTENT KNOWLEDGE DEVELOPMENT</i>	
O. Martinis:	58
KOMPETENCIJSKA PODRUČJA U RAZVOJU STANDARDA KVALIFIKACIJE UČITELJA KEMIJE <i>THE DEVELOPMENT OF STANDARD QUALIFICATIONS FOR CHEMISTRY TEACHER – COMPETENCY AREAS</i>	
USMENA PRIOPĆENJA <i>ORAL PRESENTATIONS</i>	
N. Cvetešić, A. Palencia, S. Cusack, I. Gruić-Sovulj:	60
GLAVNA ULOGA POPRAVKA POGREŠKE LEUCIL-tRNA-SINTETAZE IZ BAKTERIJE <i>ESCHERICHIA COLI</i> JE SPRJEČAVANJE NEKANONSKE MISTRANSLACIJE <i>THE PRIME FUNCTION OF LEUCYL-tRNA SYNTHETASE PROOFREADING IS PREVENTION OF THE NON-CANONICAL MISTRANSLATION IN ESCHERICHIA COLI</i>	
S. Miljanić:	62
ISTRAŽIVANJE INTERAKCIJA MALIH MOLEKULA I DNA SPEKTROKOPIJOM POVRŠINSKI POJAČANOG RAMANOVOG RASPRŠENJA <i>STUDY OF SMALL MOLECULE-DNA INTERACTIONS BY SURFACE-ENHANCED RAMAN SCATTERING SPECTROSCOPY</i>	
R. Ribić, R. Frkanec, S. Tomić:	63
SINTEZA I BIOLOŠKA AKTIVNOST MUROPEPTIDA <i>SYNTHESIS AND BIOLOGICAL ACTIVITY OF MUROPEPTIDES</i>	
I. Dejanović, Ž. Olujić, H. Jansen:	64
HIDRAULIČKI DIZAJN KOLONA S RAZDJELNOM STIJENKOM OPREMLJENIH STRUKTURIRANIM PUNILOM <i>HYDRAULIC DESIGN OF PACKED DIVIDING WALL COLUMNS</i>	

- A. Kačunić, M. Ćosić, D. Rušić, N. Kuzmanić: 65
 UTJECAJ PARAMETARA MIJEŠANJA NA ŠIRINU METASTABILNE ZONE
 BORAKSA U ŠARŽNOM KRISTALIZATORU S DVAMA TURBINSKIM
 MIJEŠALIMA
*IMPACT OF MIXING PARAMETERS ON METASTABLE ZONE WIDTH OF
 BORAX IN DUAL IMPELLER BATCH COOLING CRYSTALLIZER*
- A. Mikleušević, M. Majerić Elenkov, Z. Hameršak: 66
 SINTEZA OKSAZOLIDINONA DINAMIČKOM KINETIČKOM REZOLUCIJOM
 KATALIZIRANOM HALOGENHIDRIN DEHALOGENAZOM
*OXAZOLIDINONE SYNTHESIS THROUGH THE HALOHAYDRIN
 DEHALOGENASE CATALYSED DYNAMIC KINETIC RESOLUTION*
- D. Kučić, M. Vuković Domanovac, F. Briški: 67
 OBRADA OTPADNIH VODA IZ PROIZVODNJE MASLINA:
 BIORAZGRADNJA I UČINKOVITOST
*TREATMENT OF OLIVE MILL WASTEWATER:
 BIODEGRADATION AND EFFICIENCY*
- P. Šonjić, T. Tandarić, D. Šakić, V. Vrček: 68
 UTJECAJ SUPSTITUENATA NA OTPORNOST DERIVATA BARBITURNE
 KISELINE NA KLORIRANJE HIPOKLORNOM KISELINOM.
 KVANTNO-KEMIJSKA STUDIJA
*INFLUENCE OF VARIOUS MOIETIES ON RESISTANCE OF DERIVATIVES
 OF BARBITURIC ACID IN REACTION OF CHLORINATION WITH
 HYPOCHLOROUS ACID. QUANTUM-CHEMICAL STUDY*
- D. Madunić-Čačić, Z. Lovinčić Kraljević, A. Lončarić Božić: 69
 POTENCIOMETRIJSKO PRAĆENJE RAZGRADNJE NATRIJEVOG
 DODECILBENZENSULFONATA NAPREDNIM OKSIDACIJSKIM
 PROCESOM
*POTENTIOMETRIC DETERMINATION OF SODIUM
 DODECYLBENZENESULFONATE DECOMPOSITION
 BY ADVANCED OXIDATION PROCESS*
- S. Šegota: 71
 KARAKTERIZACIJA FUNKCIONALNIH MATERIJALA NA NANOSKALI:
 AFM VIŠE OD OSLIKAVANJA
*NANOSCALE CHARACTERISATION ON FUNCTIONAL MATERIALS:
 AFM BEYOND IMAGING*
- L. Ferhatović Hamzić, T. Pospišil, L. Frkanec, M. Lovrić, S. Gajović: 73
 KARAKTERIZACIJA I *IN VITRO* ISPITIVANJE BIOKOMPATIBILNOSTI
 NOVOG SUPRAMOLEKULARNOG GELA
*CHARACTERIZATION AND IN VITRO BIOCOMPATIBILITY
 ASSESSMENT OF NEWLY DEVELOPED SUPRAMOLECULAR GEL*

F. Faraguna, E. Vidović, A. Jukić:	74
POBOLJŠANJE DISPERZIVNOSTI UGLJIKOVIH NANOCIJEVI U POLISTIRENU KEMIJSKOM FUNKCIONALIZACIJOM <i>IMPROVED DISPERSION OF FUNCTIONALIZED CARBON NANOTUBES IN POLYSTYRENE</i>	
V. Husetović, O. Martinis:	75
OSTVARIVANJE ISHODA UČENJA U NASTAVI KEMIJE KOD DJECE S POSEBNIM POTREBAMA <i>THE REALIZATION OF THE LEARNING OUTCOMES IN TEACHING CHEMISTRY TO THE CHILDREN WITH SPECIAL EDUCATIONAL NEEDS</i>	
V. Vrček, M. Vrbnjak Grdan:	76
DODATNA NASTAVA S NADARENIM UČENICIMA <i>ADDITIONAL CLASSES WITH GIFTED STUDENTS</i>	
D. Turčinović, M. Žgela:	77
AFIRMATIVNA NASTAVA I INOVATIVNO UČENJE I POUČAVANJE U GIMNAZIJAMA U OKVIRU HRVATSKOG KVALIFIKACIJSKOG OKVIRA, IPAQ PETA <i>AFFIRMATIVE AND INNOVATIVE LEARNING AND TEACHING IN GYMNASIUMS BASED ON THE CROATIAN QUALIFICATIONS FRAMEWORK, IPAQ PETA</i>	
E. Meštrović, A. Bjelopetrović, L. Papa, K. Meglič, T. Lež, T. Lijić, Z. Matutinović, A. Višnjevac, K. Molčanov, V. Stilinović:	78
LJEPOTA KRISTALNIH PLOHA <i>THE BEAUTY OF CRYSTAL FACES</i>	
L. Šarić, M. Varga:	79
INTEGRIRANA NASTAVA NA JEZERIMA PARKA MAKSIMIRA <i>INTEGRATED TEACHING ON THE LAKES OF PARK MAKSIMIR</i>	
I. Nuić, S. Aleksij Glažar:	80
PERCEPCIJE UČENIKA O UPORABI MREŽNO POTPOMOĞNUTIH MATERIJALA ZA POUČAVANJE OSNOVNIH KEMIJSKIH POJMOVA <i>STUDENTS' PERCEPTIONS ON THE USE OF WEB-BASED LEARNING MATERIAL FOR TEACHING FUNDAMENTAL CHEMICAL CONCEPT</i>	
I. Marić Zerdun:	81
VIZUALIZACIJA KEMIJSKE APARATURE POMOĆU RAČUNALNOG PROGRAMA U SVRHU RAZUMIJEVANJA NJEZINE FUNKCIJE <i>VISUALISATION OF CHEMISTRY LABORATORY EQUIPMENT USING A SOFTWARE TOOL IN ORDER TO UNDERSTAND ITS FUNCTION</i>	

S. Šimičić, D. Mrvoš-Sermek: 82
UPORABA ČESTIČNOG CRTEŽA PRI PROVJERI KONCEPTUALNE RAZINE
ZNANJA U NASTAVI KEMIJE
*USING OF PARTICULATE DRAWING IN TESTING OF CONCEPTUAL
KNOWLEDGE IN TEACHING CHEMISTRY*

S. Rupčić Petelinc, B. Zdjelarević, S. Žužek: 83
SPEKTAR BOJA KEMIJE
SPECTRE OF CHEMISTRY COLOURS

N. Škvorc, D. Mrvoš-Sermek: 84
MEĐUMOLEKULSKE INTERAKCIJE – POGREŠNO RAZUMIJEVANJE
KONCEPTA
INTERMOLECULAR FORCES – MISUNDERSTANDING OF CONCEPT

MINI-SIMPOZIJ VLADIMIR PRELOG

MINI-SYMPOSIUM VLADIMIR PRELOG

PLENARNA PREDAVANJA

PLENARY LECTURES

P.R. Schreiner: 86
KONTROLA KEMIJSKIH REAKCIJA TUNELIRANJEM
TUNNELING CONTROL OF CHEMICAL REACTIONS

N. Budiša: 88
KEMIJSKA EVOLUCIJA BAKTERIJSKOG PROTEOMA
CHEMICAL EVOLUTION OF A BACTERIAL PROTEOME

POZVANO PREDAVANJE

INVITED LECTURE

Goran Kragol: 89
DIZAJN NOVIH ANTIINFLAMATORNIH MAKROLIDA
THE DESIGN OF NOVEL ANTI-INFLAMMATORY MACROLIDES

PREDAVANJE NAGRAĐENIKA

LAUREATES LECTURE

M. Gredičak: 90
PRIPRAVA PIROLO- I PIRIDOINDOLINSKIH JEZGARA U UVJETIMA
MEĐUFAZNE KATALIZE
*PHASE-TRANSFER CATALYSED SYNTHESIS OF PYRROLO-
AND PYRIDOINDOLINES*

POSTERSKA PRIOPĆENJA

POSTER PRESENTATIONS

A. KEMIJA CHEMISTRY

- P 1:** A. Miličević, N. Raos: 93
MODELIRANJE KONSTANTI STABILNOSTI BAKROVIH(II)
KOMPLEKSA S TRIPEPTIDIMA GLICINA I GLUTAMINSKE KISELINE
*MODELLING THE STABILITY CONSTANTS OF COPPER(II)
COMPLEXES WITH TRIPEPTIDES CONTAINING GLYCINE AND
GLUTAMIC ACID*
- P 2:** M. Hranjec, N. Perin, E. Horak, Z. Srdović, S. Plavljani: 94
NOVI BENZIMIDAZO[1,2-*a*]KINOLINI KAO pH SENZORI I
KEMOSENZORI
*NOVEL BENZIMIDAZO[1,2-*a*]QUINOLINES AS pH SENSORS AND
CHEMOSENSORS*
- P 3:** M. Aleksić, I. Sović, G. Karminski-Zamola, J. Bunjevac, M. Šuša, 95
V. Rep, M. Hranjec:
NOVI BIOLOŠKI AKTIVNI AMIDNI DERIVATI BENZIMIDAZOLA
I BENZOTIAZOLA
*NOVEL BIOLOGICALLY ACTIVE BENZIMIDAZOLE AND
BENZOTHIAZOLE AMIDES*
- P 4:** M. Merkaš, A. Lučić, N. Smrečki, B.-M. Kukovec, Z. Popović: 96
KOMPLEKSI BAKRA(II) I NIKLA(II) S DERIVATIMA
N-BENZILIMINODIACETAMIDA
*COPPER(II) AND NICKEL(II) COMPLEXES WITH THE
N-BENZYLIMINODIACETAMIDE DERIVATIVES*
- P 5:** T. Benković, D. Kontrec, V. Tomišić, N. Galić: 97
PROTONACIJSKE KONSTANTE AROMATSKIH HIDRAZONA
PROTONATION CONSTANTS OF AROMATIC HYDRAZONES
- P 6:** I. Pavličić, R. Biba, N. Smrečki, I. Pulić, D. Matković-Čalogović, 98
Z. Popović:
KOMPLEKSI Co(II), Ni(II) I Cu(II) S
N-CIKLOHEKSILIMINODIACETAMIDOM
*Co(II), Ni(II) AND Cu(II) COMPLEXES WITH
N-CYCLOHEXYLIMINODIACETAMIDE*

- P 7:** A. Kišić, M. Stephan, B. Mohar: 99
 RAZVOJ RUTENIJEVIH KATALIZATORA ZA ASIMETRIČNU
 TRANSFER HIDROGENACIJU
*DEVELOPMENT OF RUTHENIUM-BASED CATALYSTS FOR
 ASYMMETRIC TRANSFER HYDROGENATION*
- P 8:** P. Bošković, D. Eterović, V. Sokol: 100
 MIKROEMULZIJA BEZ SURFAKTANTA SASTAVLJENA OD
 CITRONELOLA, ETANOLA I VODE
*SURFACTANT-FREE MICROEMULSION COMPOSED OF
 CITRONELOL, ETHANOL AND WATER*
- P 9:** T. Jednačak, P. Novak, E. Meštrović, D. Šahnić, J. Parlov Vuković: 101
 IN-LINE PRAĆENJE SINTEZE DJELATNE TVARI I
 KARAKTERIZACIJA PRODUKATA
*IN-LINE MONITORING OF API SYNTHESIS AND PRODUCT
 CHARACTERISATION*
- P 10:** I. Jerković, Z. Marijanović, M. Kranjac, A. Radonić: 102
 PROFILI VRŠNIH PARA MEDA MASLAČKA (*Taraxacum officinale*
 Weber): PREVAGA NITRILA
*HEDASPACE PROFILES OF DANDELION HONEY (Taraxacum officinale
 Weber): NITRILES ABUNDANCE*
- P 11:** I. Jerković, J. Družić, Z. Marijanović, M. Gugić, S. Jokić, M. Roje: 103
 GC-FID/MS PROFILIRANJE SUPERKRITIČNOG CO₂ EKSTRAKTA
 KORE *Citrus aurantium L.*
*GC-FID/MS SCREENING OF SUPERCRITICAL CO₂ EXTRACT OF PEELS
 FROM Citrus aurantium L.*
- P 12:** Z. Rajić Džolić, I. Perković, B. Zorc: 104
 SINTEZA NOVIH PIRAZINSKIH ANALOGA SORAFENIBA
SYNTHESIS OF NOVEL PYRAZINE SORAFENIB ANALOGUES
- P 13:** Ž. Maleš, M. Bojić, K. Hazler Pilepić, G. Benković: 105
 DENZITOMETRIJSKO ODREĐIVANJE KLOROGENATNE KISELINE I
 FLAVONOIDNIH GLIKOZIDA U DVANAEST VRSTA RODA
HYPERICUM L.
*DENZITOMETRIC DETERMINATION OF CHLOROGENIC ACID AND
 FLAVONOID GLYCOSIDES IN TWELVE SPECIES OF
 HYPERICUM L. GENUS*

- P 14:** M. Bojić, G. Benković, H. Rimac, I. Žuntar, Ž. Maleš: 106
 ODREĐIVANJE PASIVNE PERMEABILNOSTI FLAVONOIDA NA
 IMOBILIZIRANIM UMJETNIM MEMBRANAMA HPLC METODOM
*DETERMINATION OF PASSIVE PERMEABILITY OF FLAVONOIDS ON
 IMMOBILIZED ARTIFICIAL MEMBRANES BY HPLC*
- P 15:** O. Politeo, I. Brahović, I. Carev: 107
 TESTIRANJE SPOSOBNOSTI HVATANJA SUPEROKSID RADIKALA
 HLAPLJIVIM SPOJEVIMA BILJAKA RODA CENTAUREA
*SUPEROXIDE RADICAL SCAVENGING PROPERTIES OF VOLATILE
 COMPOUNDS FROM PLANTS OF CENTAUREA GENUS*
- P 16:** A. Đulović, F. Burčul, M. Radan: 108
 IN VITRO BIOLOŠKA PRETRAGA ETERIČNIH ULJA DAMAŠČANSKE
 CRNJIKE (*NIGELLA DAMASCENA L.*) I CRNOG KUMINA (*NIGELLA
 SATIVA L.*) KAO INHIBITORA ACETILKOLINESTERAZE:
 TANKOSLOJNA KROMATOGRAFIJA *VERSUS* MIKROTITARSKA
 METODA
*IN VITRO SCREENING OF ESSENTIAL OILS RAGGED LADY (NIGELLA
 DAMASCENA L.) AND BLACK CUMIN (NIGELLA SATIVA L.) AS
 ACETYLCHOLINESTERASE INHIBITORS: THIN LAYER
 CHROMATOGRAPHY VERSUS MICROPLATE METHOD*
- P 17:** I. Sović, V. Stilinović, G. Karminski-Zamola: 109
 NOVI DERIVATI IZOINDOLINA: SINTEZA, MEHANIZAM I
 KRISTALNA STRUKTURA
*NOVEL ISOINDOLINE DERIVATIVES: SYNTHESIS, MECHANISM AND
 CRYSTAL STRUCTURE*
- P 18:** A. Šter, I. Kuliš, V. Sesar, M. Karnaš, M. Medvidović-Kosanović: 110
 CIKLIČKA I DIFERENCIJALNA PULSNA VOLTAMETRIJA
 KOMPLEKSA SCHIFFOVE BAZE S BAKROM
*CYCLIC AND DIFFERENTIAL PULSE VOLTAMMETRIC BEHAVIOUR
 OF SCHIFF BASE COMPLEX WITH COPPER*
- P 19:** A. Prkić, T. Vukušić, J. Giljanović: 111
 DIREKTNO POTENCIOMETRIJSKO ODREĐIVANJE PENICILAMINA
 KORIŠTENJEM BAKROVE IONSKO-SELEKTIVNE ELEKTRODE
*DIRECT POTENTIOMETRIC DETERMINATION OF PENICILLAMINE
 BY USING COPPER ION-SELECTIVE ELECTRODE*
- P 20:** M. Pelajić, D. Vitali Čepo: 112
 OPTIMIZACIJA EKSTRAKCIJE U ČVRSTOJ FAZI PRI ODREĐIVANJU
 OSTATAKA PESTICIDA U CRNIM VINIMA
*SOLID PHASE EXTRACTION OPTIMIZATION FOR THE
 DETERMINATION OF PESTICIDES IN RED WINE*

- P 21:** M. Pelajić, D. Vitali Čepo: 113
 UTJECAJ MATRICE UZORKA NA ODREĐIVANJE OSTATAKA
 PESTICIDA U UZORCIMA VINA PLINSKOM KROMATOGRAFIJOM-
 SPEKTROMETRIJOM MASA
*EVALUATION OF MATRIX EFFECT IN THE DETERMINATION OF
 PESTICIDES IN WINE BY GAS CHROMATOGRAPHY-MASS
 SPECTROMETRY*
- P 22:** L. Mandić, K. Mlinarić-Majerski, N. Basarić: 114
 SINTEZA FTALIMIDNIH DERIVATA ADAMANTANSKIH
 AMINOKISELINA
*SYNTHESIS OF PHTHALIMIDE DERIVATIVES OF
 ADAMANTYLAMINO ACIDS*
- P 23:** S. Mutka, D. Namjesnik, T. Preočanin: 115
 SVOJSTVA MEĐUPOVRŠINE CERIJEV(IV) OKSID / VODENA
 OTOPINA ELEKTROLITA
*SURFACE PROPERTIES OF CERIUM(IV) OXIDE / AQUEOUS
 ELECTROLYTE SOLUTION INTERFACE*
- P 24:** Z. Spahić, M. Sohora, N. Basarić, K. Mlinarić-Majerski: 116
 MEMORIJA KIRALNOSTI U FOTOCIKLIZACIJI ALANINSKIH
 DERIVATA ADAMANTILFTALIMIDA
*MEMORY OF CHIRALITY IN PHOTOCYCLIZATION OF ALANINE
 DERIVATIVES OF ADAMANTYLPHTHALIMIDE*
- P 25:** D. Namjesnik, S. Mutka, T. Preočanin, N. Kallay: 117
 POVRŠINSKI POTENCIJAL RAZLIČITIH KRISTALNIH PLOHA
 CERIJEVOG(IV) OKSIDA U VODENOJ OTOPINI ELEKTROLITA
*SURFACE POTENTIAL OF DIFFERENT CRYSTAL PLANES OF
 CERIUM(IV) OXIDE IN AQUEOUS ELECTROLYTE SOLUTION*
- P 26:** D. Ašperger, I. Tomaz, M. Gavranić, B. Prišlin, L. Maslov, 118
 J. Karoglan Kontić, S. Babić:
 UKLANJANJE ENROFLOKSACINA IZ OTPADNIH VODA
 SORPCIJOM NA KOMINU GROŽĐA
*ENROFLOXACINE REMOVAL FROM WASTEWATER BY
 SORPTION ON GRAPE MARC*
- P 27:** I. Tomac, M. Šeruga: 119
 ELEKTROKEMIJSKA SVOJSTVA NEKIH KLOOROGENSKIH KISELINA
ELECTROCHEMICAL PROPERTIES OF SOME CHLOROGENIC ACIDS

- P 28:** L. Kukoč – Modun, M. Biočić, Nj. Radić: 120
 RAZVOJ KINETIČKE SPEKTROFOTOMETRIJSKE METODE ZA
 ODREĐIVANJE CISTEINA, PENICILAMINA, TIOPRONINA I
 GLUTATIONA, KAO ČISTE TVARI I U FARMACEUTSKIM
 PRIPRAVCIMA
*DEVELOPMENT OF KINETIC SPECTROPHOTOMETRIC METHOD FOR
 DETERMINATION OF CYSTEINE, PENICILLAMINE, TIOPRONIN AND
 GLUTATHIONE IN PURE FORM AND IN PHARMACEUTICAL
 FORMULATIONS*
- P 29:** L. Racané, M. Cetina, L. Ptiček, F. Topić, K. Rissanen, 121
 V. Tralić-Kulenović:
 SINTEZA I RENDGENSKA STRUKTURNA ANALIZA
 AMIDINO-SUPSTITUIRANIH 2-AMINOFENOLA
*SYNTHESIS AND X-RAY STRUCTURAL ANALYSIS OF
 AMIDINO-SUBSTITUTED 2-AMINOPHENOLS*
- P 30:** M. Medvidović-Kosanović, A. Blagus Garin, F. Perdih, 122
 A. Šter, B. Marković:
 ELEKTROKEMIJSKA KARAKTERIZACIJA HIDRAZIDA
 DIPIKOLINSKE KISELINE
*ELECTROCHEMICAL CHARACTERISATION OF
 DIPICOLINIC ACID HYDRAZIDES*
- P 31:** S. Opačak, M. Šekutor, K. Mlinarić-Majerski: 123
 SINTEZA KARBAZOLNIH GVANIDINA, NOVIH ANIONIHKIH
 RECEPTORA
SYNTHESIS OF CARBAZOLE GUANIDINES, NOVEL ANION RECEPTORS
- P 32:** M. Glavaš, M. Alešković, K. Mlinarić-Majerski: 124
 SINTEZA NOVIH ADAMANTANSKIH PIROLKARBOKSIAMIDA
SYNTHESIS OF NOVEL ADAMANTANE PYRROLECARBOXYAMIDES
- P 33:** I. Šagud, Ž. Marinić, I. Škorić: 125
 SINTEZA I FOTOKEMIJSKE TRANSFORMACIJE
 2- I 3-[4-(2-VINILFENIL)BUTA-1,3-DIENIL]TIOFENA
*SYNTHESIS AND PHOTOCHEMICAL TRANSFORMATIONS OF
 2- AND 3-[4-(2-VINYLPHENYL)BUTA-1,3-DIENYL]THIOPHENE*
- P 34:** I. Šagud, Ž. Marinić, M. Šindler-Kulyk: 126
 FOTOKEMIJA 2/4/5-(2-VINILSTIRIL)OKSAZOLA
PHOTOCHEMISTRY OF 2/4/5-(2-VINYLSYRYL)OXAZOLES

- P 35:** A. Amić, B. Lučić: 127
 PM7 I DFT STUDIJI MEHANIZAMA HVATANJA SLOBODNIH
 RADIKALA MOKRAĆNOM KISELINOM
*PM7 AND DFT STUDY ON THE FREE RADICAL SCAVENGING
 MECHANISMS OF URIC ACID*
- P 36:** D. Sviben, B. Halassy, D. Forčić, M. Brgles: 128
 STABILNOST I BIOFIZIKALNA SVOJSTVA VIRUSA MUMPSA I
 OSPICA
*STABILITY AND BIOPHYSICAL PROPERTIES OF MUMPS AND
 MEASLES VIRUS*
- P 37:** L. Kukoč-Modun, D. Tsikas, M. Biočić, T. Kraljević, Nj. Radić: 129
 ODREĐIVANJE *N*-ACETIL-L-CISTEINA I *N*-ACETIL-L-CISTEIN ETIL
 ESTERA PRIMJENOM SIA METODE SA SPEKTROFOTOMETRIJSKOM
 DETEKCIJOM
*DETERMINATION OF N-ACETYL-L-CYSTEINE AND
 N-ACETYL-L-CYSTEINE ETHYL ESTER BY USING SIA METHOD WITH
 SPECTROPHOTOMETRIC DETECTION*
- P 38:** M. Stipković Babić, A. Ratković, M. Mihovilović, M. Miošić, L. Kurajica, 130
 F. Blažeković, M. Jukić, Lj. Glavaš-Obrovac, S. Raić-Malić, T. Gazivoda
 Kraljević:
*N-1 I C-5 SUPSTITUIRANI CITOZINSKI I URACILNI I C-6
 SUPSTITUIRANI PIROLO[2,3-*d*]PIRIMIDINSKI DERIVATI: SINTEZA I
 BIOLOŠKA ISPITIVANJA*
*N-1 AND C-5 SUBSTITUTED CYTOSINE, URACIL AND C-6
 SUBSTITUTED PYRROLO[2,3-*d*]PYRIMIDINE DERIVATIVES:
 SYNTHESIS AND BIOLOGICAL EVALUATION*
- P 39:** K. Varga, H. Vančik: 131
 MEHANIZAM TERMALNE *E-Z* IZOMERIZACIJE
 3-HALOGENNITROZOBENZENA U ČVRSTOM STANJU
*MECHANISM OF THERMALLY INDUCED SOLID-STATE E-Z
 ISOMERIZATION OF 3-HALOGENNITROSOBENZENES*
- P 40:** D. Gašo-Sokač, M. Komar, M. Štivojević, V. Bušić1, M. Habuda-Stanić: 132
 BIOREDUKCIJA AROMATSKIH ALDEHIDA I KETONA
BIOREDUCTION OF AROMATIC ALDEHYDES AND KETONES
- P 41:** N. Maraković, A. Knežević, V. Vinković, Z. Kovarik, G. Šinko: 133
 ODJELJIVANJE ENANTIOMERA *N*-SUPSTITUIRANIH
 2-HIDROKSIIIMINOACETAMIDA I INTERAKCIJE S
 KOLINESTERAZAMA
*ENANTIOSEPARATION OF N-SUBSTITUTED
 2-HYDROXYIMINOACETAMIDES AND INTERACTIONS
 WITH CHOLINESTERASES*

- P 42:** I. Tartaro Bujak, B. Mihaljević: 134
 STUDIJ UČINAKA PRIRODNIH ANTIOKSIDANSA NA PROCESU U
 MODELNOM LIPIDNOM SUSTAVU
*A STUDY OF THE ANTIOXIDATIVE EFFECTS OF NATURAL
 COMPOUNDS ON THE PROCESSES IN MODEL LIPID SYSTEM*
- P 43:** G. Mendaš, I. Habinovec, V. Drevenkar, M. Dvorščak, S. Fingler, 135
 S. Stipičević, Ž. Vasilić:
 ANALIZA TRIAZINSKIH I FENILUREA-HERBICIDA U TLU
 MIKROVALNOM EKSTRAKCIJOM I TEKUĆINSKOM
 KROMATOGRAFIJOM
*ANALYSIS OF TRIAZINE AND PHENYLUREA HERBICIDES IN SOIL BY
 MICROWAVE-ASSISTED EXTRACTION AND LIQUID
 CHROMATOGRAPHY*
- P 44:** A. Štimac, J. Trmčić Cvitaš, L. Frkanec, O. Vugrek, R. Frkanec: 136
 SPECIFIČNO PREPOZNAVANJE LEKTINA KONKANAVALINA A I
 MANOZIL-LIPOKONJUGATA NA POVRŠINI LIPOSOMA
*SPECIFIC RECOGNITION OF THE LECTINE CONCANAVALINE A AND
 MANNOSYL-LIPOCONJUGATES ON LIPOSOME SURFACE*
- P 45:** J. Matić, T. Šmidlehner, F. Šupljika, M. Radić Stojković, I. Piantanida: 137
 SINTETSKE STRATEGIJE PRIPRAVE PEPTIDNIH INTERKALATORA
*SYNTHETIC STRATEGIES FOR THE PREPARATION OF PEPTIDE
 BASED INTERCALATORS*
- P 46:** M. Tomin, I. Rončević, Z. Mihalić: 138
 RAČUNALNO PROUČAVANJE MEHANIZMA REDUKCIJE
 NITROBENZENA
*A COMPUTATIONAL STUDY OF THE NITROBENZENE REDUCTION
 MECHANISM*
- P 47:** J. Salopek, J. Požar, D. Kovačević: 139
 UTJECAJ TEMPERATURE I KONCENTRACIJE ELEKTROLITA NA
 STVARANJE POLIELEKTROLITNIH VIŠESLOJEVA I KOMPLEKSA U
 OTOPINI
*TEMPERATURE AND ELECTROLYTE CONCENTRATION INFLUENCE
 ON FORMATION OF POLYELECTROLYTE MULTILAYERS AND
 COMPLEXES IN SOLUTION*
- P 48:** M. Matić, B. Denegri, O. Kronja: 140
 NUKLEOFUGALNOST KARBONATA
NUCLEOFUGALITY OF CARBONATES

- P 49:** K. Sklepić, P. Mošner, L. Koudelka, A. Moguš-Milanković: 141
 UTJECAJ „MIJEŠANIH“ STAKLOTVORACA NA STRUKTURNA I
 ELEKTRIČNA SVOJSTVA $\text{Li}_2\text{O}-(\text{B}_2\text{O}_3)-\text{P}_2\text{O}_5-\text{GeO}_2$ STAKALA
*THE INFLUENCE OF MIXED GLASS FORMER EFFECT ON
 STRUCTURAL AND ELECTRICAL PROPERTIES OF
 $\text{Li}_2\text{O}-(\text{B}_2\text{O}_3)-\text{P}_2\text{O}_5-\text{GeO}_2$ GLASSES*
- P 50:** F. Burčul, I. Generalić Mekinić, A. Đulović, I. Kardum, J. Brekalo, 142
 D. Stojanov, M. Ruščić, G.R. De Nicola, S. Montaut, P. Rollin,
 I. Blažević:
 IZOTIOCIJANATI KAO INHIBITORI ACETILKOLINESTERAZE I
 NJIHOVI IZVORI U DIVLJE RASTUĆIM BILJKAMA
 REPUBLIKE HRVATSKE
*ISOTHIOCYANATES AS ACETYLCHOLINESTERASE INHIBITORS AND
 THEIR SOURCES FROM CROATIAN WILD-GROWING PLANTS*
- P 51:** E. Horak, S. Krištafor, N. Perin, M. Hranjec, I. Steinberg: 144
 AMINO SUPSTITUIRANI BENZIMIDAZO [1,2-*a*]KINOLINI KAO
 FLUORESCENTNI pH SENZORI
*AMINATED BENZIMIDAZO[1,2-*a*]QUINOLINES AS FLUORESCENT pH
 SENSORS*
- P 52:** K. Vlahoviček-Kahlina, A. Jakas: 145
 SINTEZA CIKLIČKIH PEPTIDA S UGRAĐENOM MURAMINSKOM
 KISELINOM NA ČVRSTOM NOSAČU
*SOLID PHASE SYNTHESIS OF CYCLIC PEPTIDES
 CONTAINING MURAMIC ACID*
- P 53:** V. Godinić Mikulčić, I. Sviben, J. Rokov-Plavec, I. Gruić-Sovulj: 146
 ODREĐIVANJE VEZNIH DOMENA RIBOSOMSKOG
 PROTEINA L12 VAŽNIH U STVARANJU KOMPLEKSA SA
 SERIL-*t*RNA-SINTETAZOM POMOĆU FLUORESCENCIJSKE
 SPEKTROMETRIJE
*FLUORESCENCE APPROACH FOR DETERMINATION OF RIBOSOMAL
 L12 PROTEIN BINDING DOMAINS INVOLVED IN INTERACTION WITH
 SERYL-*t*RNA SYNTHETASE*
- P 54:** D. Saftić, B. Žinić, M. Radić Stojković, L.-M. Tumor, I. Piantanida: 148
 FLUOROFOROM OBILJEŽENI DERIVATI NUKLEOBAZA
FLUOROPHORE-TAGGED NUCLEOBASE DERIVATIVES
- P 55:** Ž. Ban, B. Žinić, I. Piantanida: 149
 SINTEZA TRIAZOLNIH DERIVATA 9-DEAZAGVANINA KAO
 VIŠENAMJENSKIH PROBA
*SYNTHESIS OF 9-DEAZAGUANINE TRIAZOLE DERIVATIVES AS
 MULTIPURPOSE PROBES*

- P 56:** N. Golenić, I. Ilić, T. Piteša, D. Cinčić: 150
 POLIMORFI 2-AMINO-4-METILPIRIDINIJEVA SALICILATA –
 SINTEZA I STRUKTURA
*POLYMORPHS OF 2-AMINO-4-METHYLPYRIDINE SALICYLATE –
 SYNTHESIS AND STRUCTURE*
- P 57:** M. Zbačnik, I. Nogalo, D. Cinčić: 151
 KONTROLA POLIMORFIZMA SCHIFFOVE BAZE U
 MEHANOKEMIJSKOJ REAKCIJI I SINTEZI IZ OTOPINE
*POLYMORPHISM CONTROL IN MECHANOCHEMICAL AND SOLUTION
 SYNTHESIS OF A SCHIFF BASE*
- P 58:** J. Nikolić, V. Nemec, D. Cinčić: 152
 SINTEZA METALOORGANSKIH POLIMERA
 5-AMINOIZOFTALNE KISELINE METODAMA STARENJA
 I MLJEVENJA
*SYNTHESIS OF METALORGANIC POLYMERS OF
 5-AMINOISOPHTHALIC ACID BY AGING AND GRINDING METHODS*
- P 59:** N. Škvorc, V. Nemec, D. Cinčić: 153
 KOKRISTALIZACIJA 9,10-FENANTRENKINONA I TIOUREE
*COCRYSTALLIZATION OF 9,10-PHENANTHRENEQUINONE
 AND THIOUREA*
- P 60:** K. Lisac, V. Nemec, D. Cinčić: 154
 KOKRISTALIZACIJA FENAZINA S DONORIMA VODIKOVE I
 HALOGENSKE VEZE
*COCRYSTALLIZATION OF PHENAZINE WITH HYDROGEN AND
 HALOGEN BOND DONORS*
- P 61:** M. Gašparić, D. Cinčić: 155
 PRIPRAVA I KARAKTERIZACIJA RAZLIČITIH FARMAKOLOŠKIH
 OBLIKA DONEPEZILA
*PREPARATION AND CHARACTERIZATION OF DIFFERENT
 PHARMACOLOGICAL FORMS OF DONEPEZIL*
- P 62:** M. Karnaš, N. Marjanović, M. Drulak, M. Jozanović,
 M. Sak-Bosnar, N. Sakač: 156
 POTENCIOMETRIJSKO ODREĐIVANJE KATIONSКИH TENZIDA U
 TEKUĆIM DEZINFICIJENSIMA
*POTENTIOMETRIC DETERMINATION OF CATIONIC SURFACTANTS IN
 LIQUID DISINFECTANTS*

- P 63:** V. Simunović, A. Truman, I. Weygand-Đurašević, I. Gruić Sovulj: 157
IN VITRO KARAKTERIZACIJA PROTEIN NOSAČ-AMINOKISELINSKE-HIDROKSILAZE AcdB OVISNE O FLAVIN-MONONUKLEOTID-OKSIDOREDUKTAZI
IN VITRO CHARACTERIZATION OF AN FMN-OXIDOREDUCTASE-DEPENDENT AMINOACYL-CARRIER PROTEIN HYDROXYLASE AcdB
- P 64:** P. Bibulić, I. Rončević, K. Varga, Z. Mihalić, H. Vančik: 159
 POLIMERIZACIJA I DEPOLIMERIZACIJA 1,4-DINITROZOBENZENA
POLYMERIZATION AND DEPOLYMERIZATION OF 1,4-DINITROSOBENZENE
- P 65:** I. Picek, R. Vianello, P. Zekan, B. Foretić: 160
 ESTEROLITIČKA AKTIVNOST *N*-SUPSTITUIRANIH PRIDINIJEVIH-4-OKSIMA
ESTEROLYTIC ACTIVITY OF N-SUBSTITUTED PYRIDINIUM-4-OXIMES
- P 66:** T. Mihelj, V. Tomašić: 161
 STVARANJE SUPRAMOLEKULSKIH MEMBRANA MEĐUDJELOVANJEM FACIJALNOG BIOAMFIFILNOG ANIONA S KATIONIMA KONVENCIONALNIH AMFIFILA, METALNIM KATIONIMA ILI KELIRAJUĆIM LIGANDOM
BIOINSPIRED SUPRAMOLECULAR MEMBRANES FORMATION BY INTERACTIONS OF FACIAL BIOAMPHIPHILIC ANION WITH CONVENTIONAL AMPHIPHILIC CATIONS, METAL CATIONS, OR CHELATING LIGAND
- P 67:** N. Župančić, D. Bešić, E. Meštrović: 162
 ODREĐIVANJE NIKLA U *N*-METIL PIPERAZINU POMOĆU ICP-MS
DETERMINATION OF NICKEL IN N-METHYL PIPERAZINE BY ICP-MS
- P 68:** I. Raič, D. Bešić, E. Meštrović: 163
 ODREĐIVANJE TRAGOVA ŽELJEZA POMOĆU SPEKTROMETRIJE MASA S INDUKTIVNO SPREGNUTOM PLAZMOM – SAVLADAVANJE KONTAMINACIJA, MATIČNIH I POLIATOMSKIH INTERFERENCIJA
Fe DETERMINATION BY INDUCTIVELY COUPLED PLASMA MASS SPECTROMETRY – OVERCOMING CONTAMINATION, MATRIX AND POLYATOMIC INTERFERENCES

- P 69:** V. Roje, M. Dujmović, I. Perković, D. Bakšić, N. Pernar: 164
 PROCJENA MOBILNOSTI ELEMENATA U TRAGOVIMA U ŠUMSKIM
 TLIMA MEDVEDNICE
*ASSESSMENT OF MOBILITY OF THE TRACE ELEMENTS IN SOILS
 FROM THE MEDVEDNICA MOUNTAIN FORESTS*
- P 70:** V. Roje, J. Rončević, J. Župan, I. Perković, D. Bakšić, N. Pernar: 165
 ELEMENTI U TRAGOVIMA U ŠUMSKIM TLIMA
 MEDVEDNICE – PSEUDO-UKUPNI UDJEL
*TRACE ELEMENTS IN SOILS FROM THE MEDVEDNICA MOUNTAIN
 FORESTS – PSEUDO-TOTAL FRACTION*
- P 71:** E. Lekšić, D. Čavužić: 166
 POVEĆANJE TOPLJIVOSTI LAMOTRIGINA PRIPRAVOM
 KOKRISTALA
*ENHANCEMENT OF SOLUBILITY OF LAMOTRIGIN VIA
 COCRYSTALLIZATION*
- P 72:** C. Markov, V. Petrović Peroković, Ž. Car, B. Prugovečki, V. Tomišić, A. 167
 Gojmerac Ivšić, S. Tomić:
 3-HIDROKSI-1-(*p*-HIDROKSIFENIL)-2-METILPIRIDIN-4-ON KAO
 KOMPLEKSIRAJUĆI REAGENS ZA VANADIJ(V)
*3-HYDROXY-1-(p-HYDROXYPHENYL)-2-METHYLPYRIDIN-4-ONE AS
 COMPLEXING REAGENT FOR VANADIUM(V)*
- P 73:** R. Zadavec, V. Petrović Peroković, Ž. Car, S. Tomić: 168
 SELEKTIVNA PRIPRAVA ADAMANTANSKIH I MANOZNIH
 DERIVATA *N*-ARIL SUPSTITUIRANIH
 3-HIDROKSIPIRIDIN-4-ONA
*SELECTIVE SYNTHESIS OF ADAMANTYLATED AND MANNOSYLATED
 N-ARYL SUBSTITUTED
 3-HYDROXYPYRIDIN-4-ONES*
- P 74:** L. Frkanec, M. Jokić, J. Makarević, N. Šijaković Vujičić: 169
 POLIMERIZACIJA FUMARAMIDNIH ORGANOGELATORA
POLYMERISATION OF FUMARAMIDE ORGANOGELATORS
- P 75:** D. Barišić, N. Cindro, N. Bregović, L. Frkanec, 170
 K. Užarević, V. Tomišić:
 SINTEZA I KOMPLEKSACIJSKA SVOJSTVA AROMATSKIH DIUREA I
 FENANTROLINSKOG DITOPIČNOG RECEPTORA
*SYNTHESIS AND COMPLEXATION PROPERTIES OF AROMATIC
 DIUREAS AND PHENANTROLINE DITOPIC RECEPTOR*

- P 76:** T. Pospišil, L. Frkanec, M. Žinić: 171
 SAMOORGANIZACIJA TRIPEPTIDNIH HIDROGELATORA KAO
 MODELA AGREGIRANJA A β -PROTEINA
*SELF-ASSEMBLY OF TRIPEPTIDE HYDROGELATORS AS A MODEL OF
 A β -PROTEINS AGGREGATION*
- P 77:** M. Marijan, S. Jurić, M. Matić, B. Denegri, O. Kronja: 172
 ELEKTROFUGALNOST NEKIH FERROCENILBENZILNIH KATIONA
ELECTROFUGALITIES OF SOME FERROCENYL BENZYL CATIONS
- P 78:** S. Jurić, M. Matić, B. Denegri, M. Marijan, O. Kronja: 173
 NUKLEOFUGALNOSTI NEUTRALNIH IZLAZNIH SKUPINA U 80%
 VODENOM ACETONITRILU
*NUCLEOFUGALITIES OF NEUTRAL LEAVING GROUPS
 IN 80% AQUEOUS ACETONITRILE*
- P 79:** I. Nikšić-Franjić, J. Požar, I. Borilović, L. Frkanec, V. Tomišić: 174
 UTJECAJ SOLVATACIJE NA KOMPLEKSIRANJE ALKALIJSKIH
 KATIONA S KETONSKIM DERIVATOM KALIKS[4]ARENA
*SOLVATION EFFECT ON THE COMPLEXATION OF ALKALI-METAL
 CATIONS WITH CALIX[4]ARENE KETONE DERIVATE*
- P 80:** N. Šoštarić, N. Cvetešić, M. Dulić, M. Biluš, I. Gruić-Sovulj: 175
 ZNAČAJ tRNA-OVISNOG POPRAVKA POGREŠKE PRIJE PRIJENOSA
 AMINOKISELINE KOD EUKARIOTSKE
 IZOLEUCIL-tRNA-SINTETAZE
*SIGNIFICANCE OF THE PRE-TRANSFER EDITING PATHWAY IN
 EUKARYOTIC ISOLEUCYL-tRNA SYNTHETASE*
- P 81:** R. Katava, G. Pavlović, A.D. Mance, H. Otmačić Čurković: 177
 BAKROVI(II) KOMPLEKSI S METILIMIDAZOLNIM LIGANDIMA KAO
 INHIBITORIMA KOROZIJE
*COPPER(II) COMPLEXES WITH METHYLIMIDAZOLE LIGANDS
 AS CORROSION INHIBITORS*
- P 82:** A. Briš, Ž. Marinić, Z.-L. Chen, D. Margetić: 178
 SINTEZA KLORINA CIKLOADICIJAMA FEOFORBIDA A
 I NJEGOVIH DERIVATA
*SYNTHESIS OF CHLORINS BY CYCLOADDITIONS OF PHEOPHORBIDE
 A AND ITS DERIVATIVES*
- P 83:** N. Matijaković, B.-M. Kukovec, I. Kodrin, M. Đaković: 179
 HIJERARHIJA MEĐUMOLEKULSKIH INTERAKCIJA U TERNARNIM
 KOMPLEKSIMA KADMIJA(II)
*HIERARCHY OF INTERMOLECULAR INTERACTIONS IN TERNARY
 COMPLEXES OF CADMIUM(II)*

- P 84:** D. Madunić-Čačić, M. Aničić, I. Steinberg: 180
 TITRACIJE KATIONSКИH I AMFOTERNИH POVRŠINSKI AKTIVNIH
 TVARI PRIMJENOM VISOKO-OSJETLJIVOG POTENCIOMETRIJSKOG
 SENZORA
*TITRATIONS OF CATIONIC AND AMPHOTERIC SURFACTANTS
 USING HIGH-SENSITIVE POTENTIOMETRIC SENSOR*
- P 85:** M. Runje, N. Vojčić, Ž. Dujmić Vučinić, I. Krizmanić, E. Meštrović,
 S. Babić: 182
 ODREĐIVANJE ONEČIŠĆENJA UPLC-MS METODOM NASTALA
 DEGRADACIJOM NEPAFENAKA
*DETERMINATION OF DEGRADATION IMPURITIES IN NEPAFENAC BY
 UPLC-MS*
- P 86:** M. Runje, N. Vojčić, Ž. Dujmić Vučinić, I. Krizmanić,
 E. Meštrović, S. Babić: 183
 VALIDACIJA UPLC METODE ZA ODREĐIVANJE ONEČIŠĆENJA U
 NEPAFENAKU
*VALIDATION OF UPLC METHOD FOR DETERMINATION OF
 IMPURITIES IN NEPAFENAC*
- P 87:** I. Cazin, I. Kovačić, A. Meščić, V. Štepanić, S. Raić-Malić: 184
 1,2,3-TRIAZOLNI DERIVATI L-ASKORBINSKE KISELINE I NJIHOVA
 ANTIOKSIDATIVNA SVOJSTVA
*1,2,3-TRIAZOLE APPENDED L-ASCORBIC ACID WITH ANTIOXIDANT
 PROPERTIES*
- P 88:** T. Gregorić, A. Bistrović, A. Tomljenović Paravić, M. Sedić,
 S. Kraljević Pavelić, T. Gazivoda Kraljević, S. Raić-Malić: 185
 DERIVATI PURINSКИH BIOIZOSTERA I PIRIMIDINA S
 1,2,3-TRIAZOLOM KAO FARMAKOFOROM
*1,2,3-TRIAZOLE PHARMACOPHORE-BASED DERIVATIVES OF PURINE
 BIOISOSTERES AND PYRIMIDINES*
- P 89:** R. Kobetić, V. Ključarić, J. Matić, D. Saftić, Ž. Ban, B. Žinić: 186
 INTEREFERENCIJA Zn²⁺ S N-SULFONILPIRIDINSКИM DERIVATIMA
 Zn²⁺ INTERFERENCES WITH N-SULFONYLPYRIDINE DERIVATIVES
- P 90:** I. Đapić, L. Brkljačić, I. Jakaša, S. Kežić, R. Kobetić: 187
 KARAKTERIZACIJA CERAMIDA PRISUTNIH U HUMANOM
 EPIDERMISU PRIMJENOM LC-ESI-MS
*CHARACTERIZATION OF CERAMIDES PRESENT IN HUMAN
 EPIDERMIS BY LC-ESI-MS*

- P 91:** L. Ban, N. Baus, N. Bedeković, T. Begušić, I. Gregorović, I. Ilić, K. Kolarić, A. Mikelić, A. Milas, T. Piteša, K. Smokrović, E. Topić, A. Vlašić: 188
 1. SIMPOZIJ STUDENATA KEMIČARA
1ST CROATIAN CHEMISTRY STUDENT SYMPOSIUM
- B. KEMIJSKO I BIOKEMIJSKO INŽENJERSTVO**
CHEMICAL AND BIOCHEMICAL ENGINEERING
- P 92:** Ž. Kurtanjek: 190
 KEMOINFORMACIJSKA ANALIZA MODELA PROŠIRENIH VALENCIJA I MOLEKULSKIH DESKRIPTORA
CHEMOINFORMATIC ANALYSIS OF THE EXTENDED VALANCE AND MOLECULAR DESCRIPTOR MODELS
- P 93:** L. Foglar, D. Margeta, S. Papić, K. Sertić-Bionda: 191
 BIOLOŠKA OBRADA RAFINERIJSKIH OTPADNIH VODA U RAZLIČITIM REAKTORSKIM SUSTAVIMA
THE BIOLOGICAL TREATMENT OF RAFINERY WASTEWATERS IN DIFFERENT REACTOR SYSTEMS
- P 94:** M. Rogošić, V. Kojić, A. Sander: 192
 RAVNOTEŽA KAPLJEVINA–KAPLJEVINA TROKOMPONENTNOG SUSTAVA IONSKA KAPLJEVINA [bzmim][Tf₂N] – PIRIDIN – UGLJIKOVODIK
LIQUID–LIQUID EQUILIBRIA FOR THE TERNARY SYSTEM IONIC LIQUID [bzmim][Tf₂N] – PYRIDINE – HYDROCARBON
- P 95:** E. Vidović, F. Faraguna, V. Siuc, A. Jukić: 193
 RADIKALSKA KOPOLIMERIZACIJA I KOPOLIMERI 2-ETOKSIETIL-METAKRILATA SA STIRENOM I DODECIL-METAKRILATOM
RADICAL COPOLYMERIZATION AND COPOLYMERS OF 2-ETHOXYETHYL METHACRYLATE WITH STYRENE AND DODECYL METHACRYLATE
- P 96:** K. Žižek, A. Odak, R. Pavlina: 194
 FORMULACIJA AGRIKULTURNE TVARI PRIMJENOM GRANULIRANJA U FLUIDIZIRANOM SLOJU S DONJIM RASPRŠIVANJEM
FORMULATION OF AGRICULTURAL SUBSTANCE USING BOTTOM-SPRAY FLUID-BED GRANULATION

- P 97:** Lj. Matijašević, M. Petrić: 195
 INTEGRACIJA SUSTAVA VODIKA U PROCESIMA PRERADE NAFTE
INTEGRATION OF HYDROGEN SYSTEMS IN PETROL REFINER
- P 98:** I. Rezić, D. Oros, M. Kolarić, D. Kracher, S. Mujadžić, N. Pankiewicz, T. Rezić, R. Ludwig: 196
 OKSIDATIVNI ENZIMI ZA RAZGRADNJU BOJILA U OTPADNIM VODAMA TEKSTILNE INDUSTRIJE
OXIDATIVE ENZYMES IN REMOVAL OF DYES FROM TEXTILE WASTEWATERS
- P 99:** J. Jakić, M. Labor, V. Martinac: 197
 KARAKTERIZACIJA DOLOMITNOG VAPNA KAO BAZNOG REAGENSA ZA TALOŽENJE $Mg(OH)_2$ IZ MORSKE VODE
CHARACTERIZATION OF DOLOMITIC LIME AS BASED REAGENT FOR THE PRECIPITATION $Mg(OH)_2$ FROM SEAWATER
- P 100:** A. Alispahić, A. Šapčanin, E. Ramić, A. Dedić, M. Salihović, M. Pazalja: 198
 KVALITATIVNA I KVANTITATIVNA ANALIZA SLOBODNIH AMINO KISELINA U GLJIVAMA
QUALITATIVE AND QUANTITATIVE ANALYSIS OF FREE AMINO ACIDS IN MUSHROOMS
- P 101:** A. Šapčanin, A. Alispahić, A. Dedić, E. Ramić, M. Salihović, M. Pazalja: 199
 UKUPNI FENOLI, ANTOCIJANINI I ANTIOKSIDATIVNA AKTIVNOST ODABRANIH JESTIVIH BILJAKA
TOTAL PHENOLS, ANTHOCYANINS AND ANTIOXIDANT ACTIVITY OF SELECTED EDIBLE PLANTS
- P 102:** A. Švarc, D. Valinger, Đ. Vasić-Rački, A. Vrsalović Presečki: 200
 STEREOSELEKTIVNA SINTEZA KIRALNIH 1,2-DIOLA IZ (S)-2-HIDROKSIPROPIOFENONA POMOĆU ALKOHOL I GLICEROL DEHIDROGENAZA UZ REGENERACIJU KOENZIMA
STEREOSELECTIVE SYNTHESIS OF CHIRAL 1,2-DIOLS FROM (S)-2-HYDROXYPROPIOPHENONE BY ALCOHOL AND GLYCEROL DEHYDROGENASES WITH COENZYME REGENERATION
- P 103:** K. Mastanjević, J. Frece, D. Kovačević: 201
 UTJECAJ DODATKA ŠEĆERA I AUTOHTONE STARTER KULTURE NA KVALITETU I SIGURNOST SLAVONSKOG KULENA
INFLUENCE OF ADDITION OF SUGARS AND AUTHENTIC STARTER CULTURE ON THE QUALITY AND SAFETY OF SLAVONIAN KULEN

- P 104:** A. Maršavelski, S. Lesjak, M. Močibob, I. Weygand-Đurašević, S. Tomić: 202
 ZAMJENA JEDNE AMINOKISELINE U AKTIVNOM MJESTU
 HOMOLOGA SERIL-*t*RNA-SINTETAZE ZNAČAJNO MIJENJA
 NJEGOVU SPECIFIČNOST PREMA SUPSTRATU
*SUBSTITUTION OF A SINGLE ACTIVE SITE AMINO ACID DRASTICALLY
 ALTERS THE SUBSTRATE SPECIFICITY OF A SERYL-*t*RNA SYNTHETASE
 HOMOLOGUE*
- P 105:** T. Penović, J. Ulatowska, A. Sander: 203
 KINETIKA SUŠENJA SFERIČNIH ČESTICA U SUŠIONIKU S
 FLUIDIZIRANIM SLOJEM
FLUID BED DRYING KINETICS OF SPHERICAL PARTICLES
- P 106:** G. Matijašić, K. Žižek, M. Gretić, A.-M. Đumbir, T. Havaić, M. Bokulić: 204
 OBLAGANJE U FLUIDIZIRANOM SLOJU WURSTER
 TEHNOLOGIJOM
FLUID-BED COATING WITH WURSTER INSERT
- P 107:** K. Maduna Valkaj, V. Tomašić, N. Kumar, S. Zrnčević, D.Yu. Murzin: 205
 KATALITIČKA OKSIDACIJA POLIFENOLA UZ Cu-MCM-22
 I Cu-MCM-36 ZEOLITNE KATALIZATORE
*CATALYTIC OXIDATION OF POLYPHENOLS OVER
 Cu-MCM-22 AND Cu-MCM-36 ZEOLITE CATALYSTS*
- P 108:** K. Babić, M. Duplančić, K. Maduna Valkaj, V. Tomašić: 206
 RAZVOJ METALNOG MONOLITNOG KATALIZATORA/REAKTORA
 ZA OKSIDACIJU TOLUENA
*DEVELOPMENT OF METALLIC MONOLITH
 CATALYST/REACTOR FOR TOLUENE OXIDATION*
- P 109:** A. Sander, A. Slivar, B. Žuteg, J. Prlić Kardum, M. Rogošić: 207
 EKOLOŠKI PRIHVATLJIVA OTAPALA U PROCESU SEPARACIJE
 ORGANSKIH SPOJEVA
*SEPARATION OF ORGANIC COMPOUNDS WITH ECO-FRIENDLY
 SOLVENTS*
- P 110:** A. Sander, M. Bužančić, A. Klobučić, A. Petračić, T. Penović: 208
 UVEĆANJE SUŠIONIKA S FLUIDIZIRANIM SLOJEM
 KONUSNE GEOMETRIJE
SCALE-UP OF CONICAL FLUIDBED DRYER
- P 111:** M. Hrkovac, M. Tuksar, J. Prlić Kardum, M. Žegarac, E. Meštrovic: 209
 DODATAK POMOĆNE KOMPONENTE U ŠARŽNOJ KRISTALIZACIJI
 MEMANTIN HIDROGENSULFATA
*ADDING OF ADDITIVE IN BATCH CRYSTALLIZATION OF MEMANTINE
 HYDROGENSULFATE*

- P 112:** M. Sudar, Z. Findrik Blažević, Đ. Vasić-Rački: 210
 SINTEZA ALDOLNOG PRODUKTA, PREKURSORA
 D-FAGOMINA
SYNTHESIS OF ALDOL ADDUCT, PRECURSOR OF D-FAGOMINE
- P 113:** J. Prlić Kardum, T. Milin: 211
 METODE PROČIŠĆAVANJA IONSKIH KAPLJEVINA
PURIFICATION OF IONIC LIQUIDS
- P 114:** S. Svilović, R. Stipišić, D. Rušić, N. Kuzmanić: 212
 USPOREDBA RAZLIČITIH KINETIČKIH MODELA DRUGOG REDA
 PRI MODELIRANJU KINETIKE IONSKE IZMJENE BAKRA NA
 ZEOLITU NaX
*COMPARISON BETWEEN DIFFERENT SECOND-ORDER KINETIC
 MODELS AND MODELLING ION EXCHANGE KINETICS OF COPPER
 ON ZEOLITE NaX*
- P 115:** N. Pandurić, B. Zelić: 213
 BIOTRANSFORMACIJA STIRENA U (S)-STIREN OKSID U ŠARŽNOM
 BIOREAKTORU
*BIOTRANSFORMATION OF STYRENE TO (S)-STYRENE OXIDE IN
 A BATCH BIOREACTOR*
- P 116:** A. Arias, M. Mussati, N. Scenna, S. Mussati: 214
 OPTIMIZACIJA DVOSTUPANJSKIH MEMBRANSKI SUSTAVA ZA
 IZDVAJANJE CO₂ IZ DIMNIH PLINOVA
*OPTIMIZATION OF TWO-STAGE MEMBRANE SYSTEM FOR CO₂
 CAPTURE FROM FLUE GAS*
- P 117:** A. Arias, M. Mussati, N. Scenna, S. Mussati: 215
 UKLANJANJE CO₂ IZ ISPUŠNIH PLINOVA BRZIM POSTUPKOM
 ADSORPCIJE S PROMJENJIVIM TLAKOM – ISTRAŽIVANJE
 PARAMETARSKE OSJETLJIVOSTI
*RAPID PRESSURE SWING ADSORPTION PROCESS FOR CO₂
 SEPARATION FROM EXHAUST GASES –
 A PARAMETRIC STUDY*
- P 118:** M. Cvetnić, Ž. Ujević Andrijić, I. Mohler, N. Bolf: 216
 RAZVOJ MODELA ZA PROCJENU SADRŽAJA AROMATA NA
 TEMELJU MALIH SKUPOVA PODATAKA
*MODEL DEVELOPMENT BASED ON SMALL DATASETS FOR
 AROMATIC CONTENT ESTIMATION*

C. MATERIJALI
MATERIALS

- P 119:** E. Kristan, K. Marušić, Z. Hajdari, H. Otmačić Ćurković: 218
ZAŠTITNA SVOJSTVA SAMOORGANIZIRAJUĆIH
MONOSLOJEVA STEARINSKE KISELINE DOBIVENIH
RAZLIČITIM METODAMA FORMIRANJA
*THE PROTECTIVE PROPERTIES OF SELF-ASSEMBLED
MONOLAYERS OF STEARIC ACID PREPARED BY DIFFERENT
APPLICATION METHODS*
- P 120:** M. Jakić, N. Stipanelov Vrandečić, M. Erceg, I. Krešić: 219
TOPLINSKA STABILNOST MJEŠAVINA PHB/PEO PRIPREMLJENIH
EKSTRUDIRANJEM
*THERMAL STABILITY OF PHB/PEO BLENDS PREPARED BY
EXTRUSION*
- P 121:** D. Barbir, P. Dabić, A. Lisica: 220
UTJECAJ OTPADNOG MATERIJALA NA HIDRATACIJU PORTLAND
CEMENTA I MEHANIČKA SVOJSTVA OČVRSLIH PORTLAND
CEMENTNIH PASTI
*EFFECTS OF WASTE MATERIALS ON PORTLAND CEMENT HYDRATION
AND MECHANICAL PROPERTIES OF HARDENED PORTLAND CEMENT
PASTES*
- P 122:** A. Pustak, M. Denac, I. Pucić, I. Švab, V. Musil, I. Šmit: 221
MORFOLOGIJA I MEHANIČKA SVOJSTVA iPP/SiO₂ KOMPOZITA
MODIFICIRANIH S METALOCENSKIM KOPOLIMERIMA
POLIPROPILENA
*THE MORPHOLOGY AND MECHANICAL PROPERTIES OF iPP/SiO₂
COMPOSITES MODIFIED WITH METALLOCENE PROPYLENE-BASED
COPOLYMERS*
- P 123:** A. Ivanković, A.-M. Županić, N. Šandrk, M. Vitek, S. Martinez: 223
ISPITIVANJE STABILNOSTI VODENIH DISPERZIJA NANOČESTICA
TiO₂ PRIMJENJIVIH U ZAŠTITI OD KOROZIJE
*TESTING THE STABILITY OF AQUEOUS DISPERSIONS TiO₂
NANOPARTICLES APPLICABLE IN CORROSION PROTECTION*
- P 124:** V. Novosel – Radović, N. Radović, F. Šafar: 224
UPOTREBLJIVOST UZORKA PERLE U SPEKTROMETRIJI
RENDGENSKIH ZRAKA
*USABILITY MELTED SAMPLES (GLASS DISK) FOR
X-RAY EMISSION SPECTROMETRY*

- P 125:** I. Minga, V. Mandić, I. Brnardić, S. Kurajica: 225
 PRIPRAVA I KARAKTERIZACIJA TITANATNIH NANOCIJEVI
THE PREPARATION AND CHARACTERIZATION OF TITANATE NANOTUBES
- P 126:** T. Holjevac Grgurić, M. Gojić, D. Živković, A. Kostov, S. Kožuh: 226
 KARAKTERIZACIJA LEGURA S PRISJETLJIVOŠĆU OBLIKA
 NA BAZI BAKRA
CHARACTERIZATION OF Cu-BASED SHAPE MEMORY ALLOYS
- P 127:** Lj. Kratofil Krehula, M. Pokos, S. Krehula, V. Gilja, L. Foglar, 227
 Z. Hrnjak-Murgić:
 PRIPREMA I KARAKTERIZACIJA DVOSLOJNIH
 POLI(VINIL-KLORIDNIH) NANOKOMPOZITA
*PREPARATION AND CHARACTERIZATION OF TWO LAYER
 POLY(VINYL-CHLORIDE) NANOCOMPOSITES*
- P 128:** D. Sačer, I. Šrut Rakić, M. Plodinec, D. Čapeta, S. Sopčić, D. Antonić, 228
 Z. Mandić, M. Kraljić Roković:
 SINTEZA REDUCIRANOG GRAFEN OKSIDA KEMIJSKIM PUTEM
*SYNTHESIS OF REDUCED GRAPHENE OXIDE BY CHEMICAL
 METHODS*
- P 129:** A. Šantić, M. Čalogović, L. Pavić, J. Gladić, Z. Vučić, D. Lovrić, 229
 K. Prskalo, B. Janković, Z. Tarle, A. Moguš-Milanković:
 DIELEKTRIČNA SVOJSTVA STAKLENIH IONOMERA
DIELECTRIC PROPERTIES OF GLASS IONOMER CEMENTS
- P 130:** L. Pavić, H. Ertap, M. Karabulut, A. Moguš-Milanković: 230
 ELEKTRIČNA I DIELEKTRIČNA SVOJSTVA B_2O_3 - Fe_2O_3 - P_2O_5
 STAKALA
*ELECTRICAL AND DIELECTRIC PROPERTIES OF B_2O_3 - Fe_2O_3 - P_2O_5
 GLASSES*
- P 131:** A. Kruljac, L. Mihić, Z. Katančić, A. Ptiček Siročić, Z. Hrnjak-Murgić: 231
 KARAKTERIZACIJA PE/PCL DVOSLOJNIH AMBALAŽNIH FILMOVA
 MODIFICIRANIH NANOČESTICAMA
*CHARACTERIZATION OF PE/PCL MULTILAYER PACKAGING FILMS
 MODIFIED BY NANOPARTICLES*
- P 132:** L. Štajner, B. Njegić Džakula, J. Kontrec, T. Dražić, D. Jurašin, 232
 M. Dutour Sikirić, D. Kralj:
 USPOREDBA TALOŽNIH DIJAGRAMA BIOMINERALIZIRAJUĆIH
 SOLI, KALCIJEVIH KARBONATA I KALCIJEVIH FOSFATA
*COMPARISON OF PRECIPITATION DIAGRAM OF BIOMINERAL SALTS,
 CALCIUM CARBONATES AND CALCIUM PHOSPHATES*

- P 133:** L. Štajner, B. Njegić Džakula, J. Kontrec, N. Nekić, D. Jurašin, M. Dutour Sikirić, D. Kralj: 233
 UTJECAJ ALANINA, ASPARAGINSKE KISELINE I LIZINA NA TALOŽENJE KALCIJEVIH KARBONATA I KALCIJEVIH FOSFATA
INFLUENCE OF ALANINE, ASPARTIC ACID AND LYSINE ON PRECIPITATION OF CALCIUM CARBONATES AND CALCIUM PHOSPHATES
- P 134:** I. Buljan, A. Gajović, J. Kontrec, D. Kralj: 234
 KRISTALIZACIJA CaCO_3 U ALGINATNOM HIDROGELU UZ DODATAK NABIJENIH AMINOKISELINA
CRYSTALIZATION OF CaCO_3 IN ALGINATE HYDROGEL WITH THE ADITION OF CHARGED AMINOACIDS
- D. OBRAZOVANJE**
EDUCATION
- P 135:** D. Crnčec: 236
 KORIŠTENJEM KENOGRAMA DO BOLJEG RAZUMIJEVANJA NASTAVNIH SADRŽAJA ORGANSKE KEMIJE U OSNOVNOJ ŠKOLI
USING KENOGRAMS TO ACHIEVE BETTER UNDERSTANDING OF ORGANIC CHEMISTRY CONTENTS IN PRIMARY SCHOOLS
- P 136:** V. Flegar, S. Paušek-Baždar: 237
 ODRAZ MENDELJEJEVOG PERIODNOG SUSTAVA ELEMENATA U HRVATSKOJ KEMIJI
REFLECTION OF MENDELEEV'S PERIODIC TABLE OF ELEMENTS IN CROATIAN CHEMISTRY
- P 137:** S. Smerdel: 238
 PREDNOSTI VIZUALIZACIJE U POUČAVANJU ZNANSTVENOG SADRŽAJA
BENEFITS OF VISUALIZATION IN TEACHING SCIENTIFIC CONTENT
- P 138:** M. Vrbnjak Grđan: 239
 ULOGA POKUSA I MODELA U RADU S UČENICIMA S PRIMJERENIM PROGRAMOM OBRAZOVANJA
THE ROLE OF EXPERIMENTS AND MODELS IN THE WORK WITH STUDENTS WITH APPROPRIATE EDUCATIONAL PROGRAM
- P 139:** I. Javornicki, M. Zejnilagić-Hajrić, I. Nuić: 240
 O PRIMJENI KONCEPTNIH MAPA U NASTAVI KEMIJE U OSNOVNOJ ŠKOLI
ABOUT THE APPLICATION OF CONCEPT MAPS IN CHEMICAL EDUCATION IN PRIMARY SCHOOL

- P 140:** M. Luetić, R. Vladušić, M. Ožić: 241
 ISKUSTVO KAO ČIMBENIK USPJEŠNOSTI NASTAVE KEMIJE
EXPERIENCE AS A FACTOR IN SUCCESFULL CHEMISTRY EDUCATION
- P 141:** R. Vladušić, M. Ožić: 242
 PORAST METODIČKOG ZNANJA O KEMIJSKIM VEZAMA KAO
 REZULTAT KONCEPTUALNIH PROMJENA
*THE GROWTH OF PEDAGOGICAL CONTENT KNOWLEDGE ABOUT
 CHEMICAL BONDS AS RESULT OF CONCEPTUAL CHANGES CONTENT
 KNOWLEDGE BASED ON CONCEPTUAL CHANGE*
- P 142:** A. Biruški, N. Judaš: 243
 UPORABA UDŽBENIKA TIJEKOM OSNOVNOŠKOLSKE NASTAVE
 KEMIJE
*USING CHEMISTRY TEXTBOOKS DURING PRIMARY SCHOOL
 CHEMICAL EDUCATION*
- P 143:** A. Meštrić, N. Judaš: 244
 CILJEVI OSNOVNOŠKOLSKE NASTAVE KEMIJE – STAVOVI
 PRAKTIČARA
*GOALS OF PRIMARY SCHOOL CHEMICAL EDUCATION –
 PRACTICIONER OPINIONS*
- E. ZAŠTITA OKOLIŠA**
ENVIRONMENT PROTECTION
- P 144:** T. Sofilić, M. Poljak, I. Brnardić, B. Lazarević, A. Rađenović: 246
 ČELIČANSKA ELEKTROPEČNA TROSKA KAO POBOLJŠIVAČ TLA I
 SREDSTVO ZA POPRAVAK KISELOSTI TLA U POLJOPRIVREDI
*STEELMAKING ELECTRIC ARC FURNACE SLAG AS A SOIL
 CONDITIONER AND A MEANS FOR CORRECTING SOIL ACIDITY
 IN AGRICULTURE*
- P 145:** M. Čakal, A. Šapčanin, Ž. Jaćimović, E. Pehlić, G. Jančan: 247
 POLICIKLIČNI AROMATSKI UGLJIKOVODICI U TLU JAVNIH
 DJEČJIH PARKOVA SARAJEVA
*POLYCYCLIC AROMATIC HYDROCARBONS IN SOIL FROM PUBLIC
 CHILD PARKS OF SARAJEVO*
- P 146:** M. Čakal, A. Šapčanin, Ž. Jaćimović, E. Pehlić, G. Jančan: 248
 SADRŽAJ TEŠKIH METALA U TLU JAVNIH DJEČJIH PARKOVA
 SARAJEVA
*HEAVY METALS CONTENT IN SOIL FROM PUBLIC CHILD PARKS
 OF SARAJEVO*

- P 147:** A. Rakić, L. Foglar: 249
 UTJECAJ pH VRIJEDNOSTI I ELEKTRIČNE VODLJIVOSTI NA
 PRISUTNOST MEZOFILNIH BAKTERIJA U PROČIŠĆENOJ VODI
 KOJA SE KORISTI ZA LABORATORIJSKE ANALIZE
*EFFECT OF pH AND ELECTRICAL CONDUCTIVITY ON THE PRESENCE
 OF MESOPHILIC BACTERIA IN PURIFIED WATER USED FOR THE
 LABORATORY ANALYSES*
- P 148:** K. Forgić, L. Mandić, S. Višek, E. Kovač-Andrić: 250
 OZON U PRIZEMNOM SLOJU ATMOSFERE IZNAD PARKA PRIRODE
 KOPAČKI RIT, NACIONALNOG PARKA PLITVIČKA JEZERA I
 OTOKA VISA
*OZONE IN THE ATMOSPHERIC BOUNDARY LAYER IN THE NATURE
 PARK KOPAČKI RIT, NATIONAL PARK PLITVICE LAKES AND ISLAND
 OF VIS*
- P 149:** I. Jakovljević, G. Pehnc, V. Vadić: 251
 MASENE KONCENTRACIJE PAU ZA VRIJEME POŽARA U
 POSTROJENJU CENTRA ZA RECIKLAŽU OTPADA
*PAH MASS CONCENTRATIONS DURING A FIRE AT A WASTE
 RECYCLING FACILITY*
- P 150:** M. Jukić, S. Siročić, M. Janković, I. Hrga, A. Krivohlavek: 252
 PREGLED TOPLINSKIH VRIJEDNOSTI MULJEVA S RAZLIČITIH
 UREĐAJA ZA PROČIŠĆAVANJE OTPADNIH VODA U REPUBLICI
 HRVATSKOJ
*OVERVIEW OF NET CALORIFIC VALUES OF SLUDGES AT DIFFERENT
 WASTE WATER TREATMENT PLANTS IN CROATIA*
- P 151:** I. Lautarević, B. Milovanović: 253
 ANALIZA VREMENSKOG TRENDA, SEZONALNOSTI I
 MEĐUSOBNIH ODNOSA FIZIKALNIH, FIZIKALNO-KEMIJSKIH
 I ANORGANSKIH EKO-KEMIJSKIH PARAMETARA
 NA DUNAVU U SRBIJI
*THE ANALYSIS OF TIME TREND, SEASONALITY AND CORRELATIONS
 OF THE PHYSICAL, PHYSICAL-CHEMICAL AND INORGANIC ECO-
 CHEMICAL PARAMETERS OF
 THE DANUBE RIVER IN SERBIA*
- P 152:** K. Vidović, M. Plavšić, P. Orlović-Leko: 254
 KAPACITET KOMPLEKSIRANJA IONA BAKRA U DRENAŽNOJ VODI
 HIDROMELIORIRANOG TLA
*COMPLEXATION OF COPPER IONS IN DRAINAGE WATER OF
 HYDROAMELIORATED SOIL*

- P 153:** M. Mitrović, H. Filipović, A. Mrković, M. Ramović: 255
 RAZLIČITE METODE ODREĐIVANJA SADRŽAJA SUMPORA
 U TLU REGIJE ZENICE
*DIFFERENT DETERMINATION METHODS OF SULFUR CONTENT IN
 THE SOIL OF ZENICA REGION*
- P 154:** I. Grčić, J. Pađan, B. Plavac, S. Papić: 256
 FOTOKATALITIČKA RAZGRADNJA SALICILNE KISELINE SA
 SUSPENDIRANIM I IMOBILIZIRANIM TiO₂ I Ag/TiO₂ U RAZLIČITIM
 TIPOVIMA FOTOREAKTORA
*PHOTOCATALYTIC DEGRADATION OF SALICYLIC ACID WITH
 SUSPENDED AND IMMOBILIZED TiO₂ AND Ag/TiO₂ IN DIFFERENT
 TYPES OF PHOTOREACTORS*
- P 155:** M. Dvorščak, Ž. Vasilić, S. Fingler, G. Mendaš, S. Stipičević,
 V. Drevenkar, D. Vujević, Z. Stančić: 257
 POSTOJANI ORGANOKLOROVI SPOJEVI U TLU NACIONALNOG
 PARKA "PLITVIČKA JEZERA" I GRADA VARAŽDINA
*PERSISTENT ORGANOCHLORINE COMPOUNDS IN SOIL OF PLITVICE
 LAKES NATIONAL PARK AND THE CITY OF VARAŽDIN*
- P 156:** A. Sironić, J. Barešić, N. Horvatinčić: 258
 UTJECAJ TEMPERATURE NA PROCESU U VODAMA PLITVIČKIH
 JEZERA
*INFLUENCE OF TEMPERATURE ON THE PROCESSES IN THE PLITVICE
 LAKES WATERS*
- P 157:** M. Habuda-Stanić, D. Gašo-Sokač, M. Ergović Ravančić,
 M. Šiljeg, M. Nujić: 259
 UTJECAJ KEMIJSKE MODIFIKACIJE NA STRUKTURNA SVOJSTVA
 AKTIVNIH UGLJENA
*EFFECT OF CHEMICAL MODIFICATION ONTO STRUCTURAL
 CHARACTERISTICS OF ACTIVATED CARBONS*
- P 158:** M. Zebić Avdičević, S. Dobrović: 260
 MOGUĆNOST PRIMJENE KERAMIČKIH ULTRAFILTRACIJSKIH
 MEMBRANA PRI OBRADI OTPADNE VODE IZ PROCESA
 MERCERIZACIJE TEKSTILA U SVRHU REKUPERACIJE OTPADNE
 LUŽINE
*APPLICATION OF CERAMIC ULTRAFILTRATION MEMBRANES IN THE
 TREATMENT OF TEXTILE MERCERIZATION WASTEWATER FOR
 CAUSTIC SODA RECOVERY*

- P 159:** B. Mifka, A. Alebić-Juretić: 261
 PRIMJENA PMF METODE ZA ODREĐIVANJE IZVORA
 PM₁₀ U RIJECI
*APPLICATION OF PMF RECEPTOR MODEL FOR SOURCE
 APPOINTMENT OF PM₁₀ IN RIJEKA, CROATIA*
- P 160:** M. Buljac, G. Olujić, M. Bralić, N. Periš, M. Čurlin: 262
 SPEKTROFOTOMETRIJSKO ODREĐIVANJE I MULTIVARIJANTNA
 ANALIZA NUTRIJENATA U ESTUARIJU RIJEKE ZRMANJE
*SPECTROPHOTOMETRIC DETERMINATION AND MULTIVARIATE
 ANALYSIS OF NUTRIENTS IN THE ZRMANJA ESTUARY*
- P 161:** M. Barbarić, N. Mumiši, G. Čanadi Jurešić, B. Blagović, Č. Milin: 263
 UTJECAJ IONA OLOVA I INSEKTICIDA IMIDAKLOPRIDA NA
 SASTAV STANICA KVASCA KAO MODELNOG ORGANIZMA U
 IZUČAVANJU ETIOPATOGENEZE NEURODEGENERATIVNIH
 BOLESTI
*THE IMPACT OF LEAD IONS AND INSECTICIDE IMIDACLOPRID ON
 THE COMPOSITION OF YEAST CELLS AS MODEL ORGANISM IN THE
 STUDY OF NEURODEGENERATIVE DISEASES ETIOPATHOGENESIS*
- P 162:** N. Touabi, S. Martinez, M. Bounoughaz: 264
 OPTIMIZACIJA PROCESA ELEKTROKEMIJSKOG IZDVAJANJA
 BAKRA: UTJECAJ BRZINE MIJEŠANJA U KLORIDNOM
 MEDIJU pH=3
*OPTIMIZATION OF ELECTROCHEMICAL COPPER RECOVERY
 PROCESS: EFFECT OF THE STEERING SPEED IN CHLORIDE MEDIUM
 OF pH=3*
- P 163:** G. Herjavić, L. Klasinc, M. Hu, K. Lu, Y. Zhang: 265
 HRVATSKO-KINESKA SURADNJA NA SEKUNDARNIM ORGANSKIM
 AEROSOLOVIMA
*CHINESE-CROATIAN COOPERATION ON SECONDARY ORGANIC
 AEROSOL RESEARCH*
- P 164:** T. Strahovnik, M. Novak, Š. Ukić, M. Rogošić, T. Bolanča: 266
 RAZVOJ OPTIMALNOG MODELA UMJETNIH NEURONSKIH MREŽA
 ZA PREDVIĐANJE EMISIJA STAKLENIČKIH PLINOVA PREMA
 PROJEKCIJAMA SEKTORSKE POTROŠNJE ENERGIJE
*DEVELOPMENT OF OPTIMAL ARTIFICIAL NEURAL NETWORK MODEL
 FOR GREENHOUSE GAS EMISSIONS PREDICTION ACCORDING TO
 SECTORAL ENERGY CONSUMPTION PROJECTIONS*
- P 165:** D. Juretić, M. Kovačić, H. Kušić, U. Lavrenčić-Štangar, A. Lončarić Božić: 268
 RAZGRADNJA FARMACEUTIKA U VODI UV-A/TiO₂ PROCESOM
*DEGRADATION OF PHARMACEUTICALS IN WATER BY UV-A/TiO₂
 PROCESS*

P 166: M. Kovačić, S. Salaeh, D. Juretić, H. Kušić, U. Lavrenčić-Štangar, A. Lončarić Božić: PRIMJENA NAPREDNIH OKSIDACIJSKIH PROCESA UZ NANOČESTICE ZA RAZGRADNJU DIKLOFENAKA U VODENOM MEDIJU <i>APPLICATION OF NANOPARTICLES INADVANCED OXIDATION PROCESSES FOR THE DEGRADATION OF DICLOFENAC IN WATER MATRIX</i>	269
PREDSTAVLJANJE UDŽBENIKA <i>PROMOTION OF TEXTBOOK</i>	
Nj. Radić, L. Kukoč – Modun: UVOD U ANALITIČKU KEMIJU <i>INTRODUCTION TO ANALYTICAL CHEMISTRY</i>	271
KAZALO AUTORA <i>AUTHOR INDEX</i>	273
SPONZORI <i>SPONSORS</i>	282

PLENARNA PREDAVANJA
PLENARY LECTURES

PL 1

**STRUKTURE G-KVADRIPEKSA I UVID U NJIHOVO
SAVIJANJE NMR SPEKTROSKOPIJOM****STRUCTURES OF G-QUADRUPLEXES AND INSIGHTS INTO
THEIR FOLDING BY NMR SPECTROSCOPY**Janez Plavec¹⁻³¹Slovenian NMR Center, National Institute of Chemistry, Ljubljana, Slovenia²University of Ljubljana Faculty of Chemistry and Chemical Technology, Slovenia³EN-FIST Center of Excellence, Ljubljana, Slovenia

Guanine-rich nucleic sequences with potential to form G-quadruplex structures are highly populated in telomeric and promoter regions of the human genome. The basic building block of G-quadruplex is a G-quartet in which four guanine bases are held together by eight Hoogsteen hydrogen bonds in a co-planar arrangement. G-quadruplexes are additionally stabilized by monovalent cations such as K⁺ and Na⁺ ions. Structural information of G-quadruplex formed under physiologically relevant conditions is necessary for structure-based rational drug design.

A huge effort of several groups world-wide has been made in recent years to analyze specific properties of G-quadruplexes with the objective to understand and predict their structure and folding process. We demonstrated several years ago [1] that hydrodynamic dimensions assessed by NMR on d(G₄T₄G₄) originating from 1.5 telomeric repeats of *Oxytricha nova* without added salt do not correspond to an extended cylindrical shape of a linearized oligomer. The inferred fold-back structure(s) of globular shape are stabilized by GG base pairs in N1-carbonyl symmetric geometry. [2] The pre-organized structure held together by transient hydrogen bonds with distinctive fingerprint features represents an intermediate on pathway to G-quadruplex formation. Upon addition of cations pre-organized intermediate folds rapidly into G-quadruplex structure.

DNA oligonucleotides with alternating GGG and GCG tracts found in the regulatory region of PLEKHG3 gene are capable of forming tetrahelical DNA structure that is distinct from G-quadruplexes. The four-stranded architecture adopted by d(GGGAGCGAGGGAGCG) is stabilized by four G-C, four G.A and six GG base pairs. [3] No G-quartets or Hoogsteen-type hydrogen bonded guanine residues are present and the overall topology is conserved in the presence of Li⁺, Na⁺, K⁺ and NH₄⁺ ions. Unique structural features include two edgewise loops each stabilized by three GG base pairs in N1-carbonyl symmetric geometry and a hydrophobic pocket that contains two adenine residues.

References:

- [1] M. Cevec, J. Plavec, *Biochemistry* 44 (2005) 15238–15246.
- [2] S. Čeru, P. Šket, I. Prisljan, J. Lah, J. Plavec, *Angew. Chem. Int. Ed.* 53 (2014) 4881–4884.
- [3] V. Kocman, J. Plavec, *Nat. Commun.* 5 (2014) 5831.

PL 2

**RAZJAŠNENJE KOMPLEKSNE PRIRODE
HIDRATIZIRANOG ELEKTRONA****UNRAVELING THE COMPLEX NATURE OF THE
HYDRATED ELECTRON**

Pavel Jungwirth

Academy of Sciences of the Czech Republic, Institute of Organic Chemistry and Biochemistry,
Flemingovo nám. 2, 16610 Prague 6, Czech Republic,
e-mail: pavel.jungwirth@uochb.cas.cz

Interaction of water with ionizing radiation is, in addition to direct DNA damage, causing radiation damage in living organisms and it is also important for nuclear waste treatment. Upon photoionization in water an electron and a cationic hole are formed, and we have followed the fate of both. In the talk, I focus on the structure and dynamics of the hydrated electron which, despite its key role in radioactive processes in water, has remained elusive. The traditional cavity model has been questioned recently, but the newly suggested picture of an electron delocalized over a region of enhanced water density is controversial. Here, we present results from *ab initio* molecular dynamics simulations, where not only the excess electron but also the valence electrons of the surrounding water molecules are described quantum mechanically. Unlike in previous one-electron pseudopotential calculations, many-electron interactions are explicitly accounted for. The present approach allows for partitioning of the electron solvated in liquid water into contributions from an inner cavity, neighboring water molecules, and a diffuse tail. We demonstrate that all three of these contributions are sizable and, consequently, important, which underlines the complex nature of the hydrated electron and warns against oversimplified interpretations based on pseudopotential models. We also investigate the electron solvated at the water surface. The present results clearly demonstrate that the surface electron is mostly buried in the interfacial water layer, with only about ten percent of its density protruding into the vapor phase. Consequently, it has structure which is very similar to that of an electron solvated in the aqueous bulk. Finally, we show how to follow solvated electrons upon dissolving sodium in water (yes, it is explosive!).

**References:**

- [1] J. Savolainen, F. Uhlig, S. Ahmed, P. Hamm, P. Jungwirth, *Nature Chemistry* 6 (2014) 697–701.
- [2] F. Uhlig, O. Marsalek, P. Jungwirth, *J. Phys. Chem. Lett.* 4 (2013) 338–343.
- [3] F. Uhlig, O. Marsalek, P. Jungwirth, *J. Phys. Chem. Lett.* 3 (2012) 3071–3075.
- [4] P. Mason, F. Uhlig, V. Vanek, T. Buttersack, S. Bauerecker, P. Jungwirth, *Nature Chemistry*, 7 (2015) 250–254.

PL 3

**MENADŽMENT „SUSTAVNIH“ INOVACIJA: PRIMJENE U
KEMIJSKOM INŽENJERSTVU****MANAGEMENT OF “SYSTEMATIC” INNOVATION:
APPLICATIONS IN CHEMICAL ENGINEERING**

Jean-Marc Le Lann

University of Toulouse, LGC (Laboratory of Chemical Engineering),
INP-ENSIACET, 4 allée Emile Monso, BP 44362, 31030 Toulouse Cedex 4
e-mail: JeanMarc.LeLann@ensiacet.fr; Directeur@ensiacet.fr

In this contribution, authors proposed a joined contribution based on different views and focuses on the management of “systematic” Innovation coming from Human Social Sciences (HSS) and Scientific Technological aspects. It will be applied in order to help the solving of problems encountered in Chemical and Process Systems Engineering.

After revisiting some philosophical and historical aspects including the history of Innovation in the context of the Evolution of Sciences and Technologies, the concepts between creativity, innovation and inventive solving problem are well defined. It shows the necessity to get a strong methodology for innovation (more precisely technical one) in order to build an efficient framework for Design and Operation in Chemical Engineering and in Process Systems Engineering. These HSS concepts will revisit theories for Innovation (theory of ordinary innovation, process for destruction-creation, technological jump, notion of paradigms...), including similarities with the concepts of the so-called technological Innovation.

After dealing with the importance of Process Innovation and Problem solving investigation, as integrated parts in the business Process management including Process Systems Engineering tools such as Modelling, Simulation, optimization, the proposed approach mainly based on Process solving theory is presented. Originally based on an extension of TRIZ theory, it has been improved in a valuable manner by using tools such as Knowledge Based Management (KBM) and Case-based reasoning (CBR).

Using original concepts and ideas coupled with TRIZ theory and advanced tools connected with artificial intelligence, including new features such as the Matrix contradiction concepts revisited and multicontradictions, authors show the applicability of the proposed framework in order to tackle and revisit problems encountered in Chemical engineering and in Process Systems engineering. More, it shows how using efficient PSE tools, it may emphasize a lot the proposed framework.

“Success stories” and case studies about that will be enlighten and finally a “philosophical” conclusion and the necessity about this synergy between Human Social Sciences and Scientific approaches will be developed with future works in mind.

Keywords: management of innovation, TRIZ theory, case based reasoning (CBS), problem solving approaches in chemical engineering, knowledge based management (KBM)

PL 4

**MOGU LI SUPERKRITIČNI FLUIDI ZAMIJENITI
KONVENCIONALNA OTAPALA?****COULD SUPERCRITICAL FLUIDS REPLACE
CONVENTIONAL SOLVENTS?**

Željko Knez

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

Is it realistic that supercritical fluids will replace conventional solvents in processing industries? From the current point of view, it is not realistic. But the main impetus for certain replacements of organic solvents is influenced by environmental impact and a need to design and produce the products with completely new specifications.

Extraction of substances from plant materials and their formulation in products with specific properties and their in "situ" formulation is at the moment one of the very promising applications of supercritical fluids.

Several industrial units are in operation also for extraction of spices for food industry and plant materials, like hop constituents, decaffeination of tea and coffee and separation of lecithin from oil. One of the most important advantages of use of supercritical fluids is selective extraction of components or fractionation of total extracts.

Applying supercritical fluids for particle formation may give powders and composites with special characteristics. Several processes for formation and design of solid particles using dense gases are studied intensively. The unique properties of SCFs can be used for impregnation of solid particles, for formation of solid powderous emulsions, particle coating, e.g. for formation of solids with unique properties for the use in different applications.

The potential of supercritical CO₂ as solvent or plasticizer for the processing of polymeric biomaterials was studied by solubility measurements in two biodegradable polymers: poly(L-lactide) and poly(D,L-lactide-co-glycolide) at different temperatures and pressures. The results suggest that supercritical CO₂ due to its good solubility and plasticizing effect in polymers can be successfully used in processing polymers. Lab scale experimental results on potential applications in developing tissue engineering strategies and drug delivery systems will be presented.

Sub- and supercritical fluids are a unique class of reaction media for chemical and biochemical reactions. Application of near - critical water for processing of biomass as an example of conversion of biomass into gas fuels such as hydrogen and methane will be presented.

Processes using sub- and supercritical fluids lead to sustainable manufacturing methods that are not only ecologically preferable but also gives the products with very special properties. But in some applications traditional processing processes will never be replaced by supercritical fluids as solvents.

Keywords: sub-critical, supercritical fluids, high pressure, extraction, particle formation, foaming, chemical and biochemical reactions

PL 5

**BIOMINERALIZACIJA I BUJANJE VRSTA USLIJED
ACIDIFIKACIJE OCEANA****BIOMINERALIZATION AND SPECIES ABUNDANCE UNDER
OCEAN ACIDIFICATION**

Giuseppe Falini

Department of Chemistry “G. Ciamician”, Alma Mater Studiorum–Università di Bologna,
Via Selmi 2, 40126 Bologna, Italy

Ocean acidification (OA) has raised concerns about its effects on marine organisms and ecosystems, particularly for those reliant on the generation and accumulation of calcium carbonate (CaCO_3) shells, tests, skeletons, and/or structures. As a consequence of OA, the ability of marine calcifiers to deposit CaCO_3 is modified by response to changes in ocean geochemistry, mainly inorganic carbon speciation and calcium ions concentration. This can result in a variation of composition, crystal sizes, morphology, texture and content of mineral phases, together with a change of the population density of organisms. Scant information is available on how the latter is related to the former. Four sites along a natural CO_2 gradient, generated by an underwater (Panarea island, Italy; $38^\circ 38' \text{N}$ $15^\circ 05' \text{E}$) continuous and localized cold CO_2 emission, were used to study the impact of future OA on ecological survey and mineralization of benthic organisms. The data indicate a decrease in the abundance of a scleractinian coral (*Balanophyllia europaea*), a mollusc (*Vermetus triqueter*), two calcifying (*Padina pavonica*, *Acetabularia acetabulum*) and one non-calcifying (*Lobophora variegata*) macroalgae, up to thresholds below which they no longer occur. The mineralogy of the calcified regions showed a different response to OA, apparently related to the organism degree of control over biomineralization processes. *V. triqueter* did not change any feature of its skeleton, *B. europaea* showed a minimal increase of aragonitic fibres thickness, *P. pavonica* decreased the content of aragonite in favour of calcium sulphate minerals and *A. acetabulum* decreased the content of aragonite in favour of calcium oxalates. These results indicate that (i) increasing levels of CO_2 can profoundly affect the abundance of a wide range of benthic organisms, (ii) the calcification response to OA is strictly connected with the organism level of control over the (bio)mineralization process and that thus venting sites may be useful for assessing the long-term effects of OA on benthic biota and sea-floor ecosystems.

PL 6

**IONSKA KROMATOGRAFIJA BEZ PRIPREME ELUENSA
(RFIC) I NJENA PRIMJENA U ZAŠTITI OKOLIŠA****REAGENT-FREE ION CHROMATOGRAPHY (RFIC) AND ITS
APPLICATION IN ENVIRONMENTAL ION ANALYSIS**

Joachim Weiss

Thermo Fisher Scientific GmbH, Im Steingrund 4-6, D-63303 Dreieich

Phone: +49-171-3764914

e-mail: joachim.weiss@thermofisher.com

In the almost forty years that encompass its birth and development, ion chromatography (IC) has undergone enormous changes. While in its earliest embodiments IC was focused primarily on the analysis of inorganic anions, today IC has an important role in the analysis of organic and inorganic anions and cations. For the majority of applications, suppressed conductivity detection represents the most versatile detection system augmented today. Other detection methods include UV/Vis detection, various application forms of amperometry, charge detection as well as element-specific (IC-ICP), and mass-selective detection (IC-MS).

One of the major breakthroughs in the development of Ion Chromatography (IC) was the introduction of Reagent-Free IC in 2003, a combination of membrane-based technology and electrolysis to generate high-purity acid or base with only deionized water as the carrier. Because eluent concentration is controlled electrically, isocratic or gradient applications are enormously simplified. In addition, RFIC facilitates sub-ppb level anion and cation analysis by direct injection. Traditionally, eluents in ion chromatography are prepared off-line from reagent-grade chemicals. However, off-line preparation often introduces contaminants that can cause undesirable chromatographic baseline artifacts. When working with hydroxide eluents in anion exchange chromatography, for instance, irreproducible retention times of target analytes are observed due to carbonate contamination. By generating hydroxide eluents on-line via electrolysis, eluent contaminants such as carbonate are eliminated, which improves baseline stability during gradient runs.

The concept of RFIC is supported by a series of hydroxide-selective anion exchangers as well as weak acid cation exchangers for a variety of applications. Compliance monitoring of common inorganic anions and cations in all kinds of aqueous samples is one of the most important applications of RFIC. While suppressed conductivity detection is still the most important detection method for standard inorganic anions, cations, and amines, UV detection is often used for trace analysis of nitrite, nitrate, bromide, and iodide. Toxic anions such as sulfide and cyanide are usually detected electrochemically. However, in recent years there has been considerable interest in the development of IC methods to meet regulatory requirements for analytes other than common inorganic anions, including disinfection by-products such as bromate, chlorite, and haloacetic acids. Many of these methods require the use of large injection volumes, high-capacity columns, and advanced detection schemes such as IC/ICP-MS or post-column derivatizations with UV/Vis detection to meet current regulatory objectives. The combination of IC with mass-selective detection is emerging as an important tool for the analysis of trace ionic species in aqueous samples, as it provides increased specificity and sensitivity in comparison to traditional detection methods. In this presentation, the principles of RFIC are described and the advantages in isocratic and gradient IC separations of environmentally relevant anions and cations are demonstrated.

PL 7

**HOLISTIČKI PRISTUP PRIPRAVI KOMPOZITA
POLIMERA I NANOČESTICA****A HOLISTIC APPROACH TO THE PREPARATION OF
COMPOSITES OF POLYMERS AND NANOPARTICLES**

Tony McNally

International Institute for Nanocomposites Manufacturing (IINM), WMG,
University of Warwick, UK

There continues to be intense research interest in polymer nanocomposites (PCN's) [1], but their potential has yet to be fully realised. Predominately, the practice has been to utilise solvent and/or sonication assisted mixing, *in-situ* polymerisation and template synthesis to prepare PCN's. All approaches have significant limitations and are not readily scalable. The preparation of PCN's using melt mixing, typically in twin-screw extruders, has also been reported. However, many studies utilise micro-extruders which operate with conical screws, the results from which are not scalable and those studies that have employed industrially relevant parallel twin-screw extruders have not been systematic. The tendency has been for researchers to mix the NP of interest into the polymer melt using whatever extruder/mixer available with no appreciation of the parameters that control NP dispersion and distribution in polymer melts. Moreover, many polymers are utilised in blends and localisation of NP's in either phase has not been widely reported [2]. Effective NP dispersion is a non-trivial task in the production of PCN's. A further challenge is in understanding the interface between NP and polymer. The structure, morphology and properties of the interface govern many properties of composite materials [3,4]. An appreciation of the factors required for scaling PCN preparation in a continuous process is essential [5]. While many researchers try to achieve high levels of NP dispersion, in reality such composites will almost certainly go through some secondary process. This could include a second thermo-mechanical cycle in the case of injection moulding or solid-state or quasi-solid state uniaxial and biaxial deformation in the case of thermoforming or blow moulding [6]. In this presentation, the processing parameters which govern effective mixing of NP's in polymer melts, and the effect of secondary processing and annealing on structural evolution and properties of PCN's will be discussed. Innovation in processing of these composites via the application of magnetic fields to align magnetic nanoparticles in polymer melts will be introduced.

References:

- [1] T. McNally, P. Pötschke (eds.) Polymer Carbon Nanotube Composites: Synthesis, Properties and Applications, Woodhead Publishing Ltd. Cambridge, UK, 2011.
- [2] R. Cardinaud, T. McNally, Eur. Polym. J. 49 (2013) 1287–1297.
- [3] S.J. Chin, S. Vempati, P. Dawson, M. Knite, A. Linarts, K. Ozols, T. McNally, Polymer 58 (2015) 209–221.
- [4] D. Nuzhnyy, M. Savinov, V. Bovtun, M. Kempa, J. Petzelt, B. Mayoral, T. McNally, Nanotechnology 24 (2013) 055707.
- [5] B. Mayoral, G. Garrett, T. McNally, Macromol. Mater. Eng. 299 (2014) 748–756.
- [6] B. Mayoral, P.R. Hornsby, T. McNally, T. Schiller, K. Jack, D.J. Martin, RSC Advances 3 (2013) 5162–5183.

PL 8

**UPOTREBA NMR SPEKTROSKOPIJE ČVRSTOG STANJA U
ZNANOSTI O MATERIJALIMA**

**APPLICATION OF SOLID-STATE NMR SPECTROSCOPY IN
MATERIALS SCIENCE**

Gregor Mali

National Institute of Chemistry, Hajdrihova 19, SI-1001 Ljubljana, Slovenia
e-mail: gregor.mali@ki.si

During the last two decades solid-state NMR spectroscopy has become one of the most important techniques for studying structure and dynamics of solids. On one hand the increasing importance of this spectroscopic tool is due to the continuing development of research equipment, including higher and higher-field magnets and probes that enable ever faster rotation of solid samples under the so-called magic angle, which lead to increased sensitivity and resolution of NMR measurements of solids. On the other hand, NMR spectroscopy has gained power as a tool for structural analysis of crystalline materials also because it became possible to predict the NMR detectable parameters, such as chemical shift and quadrupolar coupling parameters, *ab-initio* using the density-functional-theory-based calculations. In this contribution fundamental characteristics of solid-state NMR spectroscopy shall be presented and application of this spectroscopy, complemented by the first-principles calculations, to the studies of molecular crystals, inorganic and metal-organic porous materials, and new battery materials developed at the National Institute of Chemistry in Ljubljana shall be reviewed.

PL 9

INKLUZIJA I NASTAVA KEMIJE
INCLUSION AND CHEMISTRY EDUCATION

Silvija Markić

University of Bremen, IDN-Chemistry Education, Leobener Str. NW2, 28334 Bremen, Germany
e-mail: smarkic@uni-bremen.de

“Whereas the paradigm of heterogeneity perceives difference as a challenge to be dealt with actively, diversity as a systemic paradigm perceives difference as an asset” [1] and a resource for learning.

The relevance of “heterogeneity” and “diversity” is growing because of such widespread developments as globalization, international migration, and both demographic and ethical changes in societies. Students bring many different prerequisites to the classrooms and teachers have to cope with each one. The differences are multifarious and often overlap. These differences are summarized to so-called “Big 8”: age, gender, ethnicity, religion, race, sexual orientation, functional role, and mental/physical ability [2]. Those dimensions can be transferred to school life, because they impact students’ achievement, a priori knowledge, beliefs, language skills, ways of learning, interests, motivations, etc. [3]. Teachers often face an enormous combination of such factors in any given classroom. Depending on who you ask, the varying dimensions are considered to carry varying levels of importance. However, dealing with differences means that research must take individual learning prerequisites into consideration in order to optimize teaching practices and learner achievement. [4] explains four options for reacting to different sets of preconditions: 1. Ignore the differences (passive reaction), 2. Adapt the students to the lesson requirements (substitutive reaction), 3. Adapt the lesson to the relevant differences between the students (active reaction) and 4. Foster all students individually with specifically differentiated lessons (proactive reaction). The reactions named in point 1 and 2 view differences as problems which have to be compensated for. 3 and 4 claim that difference is the norm. In addition to point 3, point 4 not only demands adaptation of the methods and task complexities, but also requires differentiated aims to be stated and met for each student (or group of students). Thus, in the meaning of inclusion teaching and learning must be reformed to fulfil each student’s needs and right to equal education. It is the system, not the student, which should be adapted to the situation. During the presentation the issue of inclusion and its adaptation in chemistry classes will be discussed as well as the possibility how to deal with inclusion in chemistry classes.

References:

- [1] A. Sliwka, From homogeneity to diversity in German education in Centre for Educational Research and Innovation, in *Educating teachers for diversity: meeting the challenge*, OECD Publishing, Paris (2010) 205–217. DOI: 10.1787/9789264079731-en.
- [2] G. Krell, B. Riedmüller, B. Sieben, D. Vinz, *Diversity Studies: Grundlagen und disziplinäre Ansätze*, Campus, Frankfurt am Main, New York, 2007.
- [3] T. Bohl, M. Bönsch, M. Trautmann, B. Wischer, *Binnendifferenzierung. Teil 1: Didaktische Grundlagen und Forschungsergebnisse zur Binnendifferenzierung im Unterricht*, Prolog-Verlag, Immenhausen bei Kassel, 2012.
- [4] F.E. Weinert, *Friedrich Jahresheft* 15 (1997) 50–52.

POZVANA PREDAVANJA
INVITED LECTURES

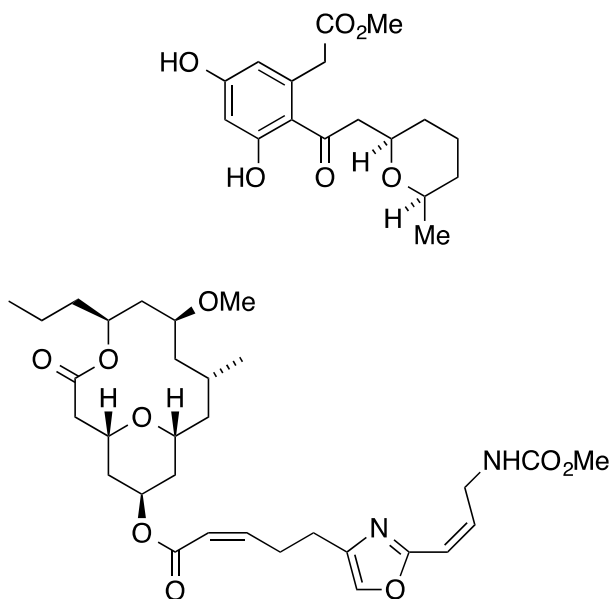
PO 1

**KATALIZA: "BUĐENJE AFINITETA"
ZA ORGANSKU SINTEZU****CATALYSIS: "AWAKENING AFFINITIES"
FOR ORGANIC SYNTHESIS**

Roderick Wayland Bates

Division of Chemistry and Biological Chemistry, School of Physical and Mathematical Sciences,
Nanyang Technological University, Singapore 637371

The synthesis of a complex molecule without the use of catalysis would, nowadays, be unthinkable. Catalytic reactions, from the mundane to the exotic, are ubiquitous in the field of organic synthesis. In particular, the use of transition metal catalysis has revolutionised the ways that we think about the formation of carbon-carbon bonds. We are currently employing a wide variety of metals to achieve mild and selective bond formation, especially in the field of natural product synthesis. This includes palladium, rhodium, osmium, iridium, platinum, silver and gold. In addition, we have developed methods using the properties of Lewis acidic main group metal catalysts to supplement the activity of transition metals, harnessing them together with designer ligands. A selection of catalytic reactions and their applications will be presented.



PO 2

**KATALITIČKA RAZGRADNJA ORGANOFOSFORNIH
SPOJEVA POMOĆU ACETILKOLINESTERAZE I
ALDOKSIMA**

**CATALYTIC ORGANOPHOSPHORUS COMPOUNDS
SCAVENGING BY ACETYLCHOLINESTERASE ASSISTED
WITH ALDOXIMES**

Zrinka Kovarik

Institute for Medical Research and Occupational Health, Ksaverska cesta 2, 10000 Zagreb, Croatia
e-mail: zkovarik@imi.hr

The high toxicity of organophosphorus compounds (OP; tabun, soman and VX) originates from the irreversible inhibition of acetylcholinesterase (AChE), an essential enzyme in cholinergic neurotransmission. Poisonings that lead to life-threatening toxic manifestations call for immediate treatment, which usually consists of a combined administration of anticholinergic drugs and an aldoxime as the reactivator of AChE. A new approach to reduce the *in vivo* toxicity of OPs focuses on the use of bioscavengers – enzymes that could react with a nerve agent before it inhibits AChE. Butyrylcholinesterase (BChE), naturally present in plasma, the liver, the small intestine, smooth muscles, heart, adipose tissue, and the brain, is considered an endogenous bioscavenger of OP. Due to the limited concentration of BChE in the organism, a stoichiometric reduction of OP is not sufficient. Furthermore, the stoichiometric approach itself has limitations mostly due to the inability of currently applied aldoximes to reactivate tissue AChE efficiently, particularly when it is repeatedly phosphorylated by an excess of OP that remain in circulation upon exposure. Our recent studies have shown that AChE mutagenesis enables aldoximes to substantially accelerate the reactivation of OP-enzyme conjugates. Moreover, the oxime-enzyme assisted hydrolysis of OP has been proven *ex vivo* and *in vivo*. The catalytic scavenging of OP in mice improved the therapeutic outcome and resulted in a delayed onset of toxicity symptoms.

PO 3

RAZVOJ LIGANADA ZA RODIJEM KATALIZIRANE ASIMETRIČNE REDUKCIJE

DEVELOPMENT OF LIGANDS FOR RHODIUM-CATALYZED ASYMMETRIC REDUCTIONS

Slavko Rast¹, Michel Stephan², Barbara Mohar¹

¹National Institute of Chemistry, Hajdrihova 19, SI-1001 Ljubljana, Slovenia,
e-mail: slavko.rast@ki.si, barbara.mohar@ki.si

²PhosPhoenix SARL, 115, rue de l'Abbé Groult, 75015 Paris, France,
e-mail: mstephan@phosphoenix.com

New enantiopure cyclic phosphinite-P-borane key-intermediate together with new cyclization strategies in phosphorous chemistry are introduced. Efficient preparation of P-stereogenic phosphacyclic structures with > 99 % ee, such as 1-phenylphosphindane, and 1-phenyl-3-oxa-phosphindane (Figure 1) was accomplished. These P-stereogenic-based intermediates can be used as precursors to novel generations of phosphine ligands. [1]

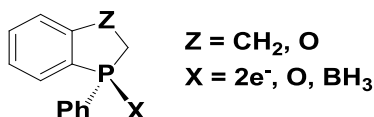


Figure 1. Cyclic P-stereogenic phosphindanes.

Synthesis of knockout PCCP-type diphosphines, with knocked-out backbone flexibility and identical P,P'-substituents of related C₂-symmetrical ethylene-bridged diphosphines (Figure 2), allowed further mechanistic insight in the Rh(I)-catalyzed hydrogenation of olefins. [2]

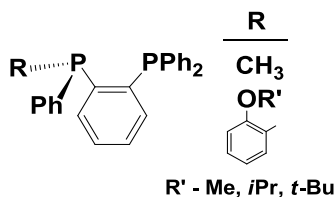


Figure 2. *o*-Diphenylphosphinophenyl-based diphosphines.

References:

- [1] S. Rast, B. Mohar, M. Stephan, *Org. Lett.* 16 (2014) 2688–2691.
[2] S. Rast, M. Stephan, B. Mohar, *Eur. J. Org. Chem.* DOI: 10.1002/ejoc.201403570

PO 4

**FENOMENI PRIJENOSA NA MIKRO I MULTI RAZINAMA
MODELIRANJA**

**TRANSPORT PHENOMENA AT THE MICRO SCALE AND
THE MULTISCALE MODELING CONCEPT**

Igor Plazl

University of Ljubljana, Faculty of Chemistry and Chemical Technology,
Večna pot 113, 1000 Ljubljana, Slovenia
e-mail: igor.plazl@fkkt.uni-lj.si

A numerous excellent publications in the last two decades demonstrated the advantages of microfluidic devices for very efficient performing of chemical and biochemical processes at controlled and repeatable conditions. The new concepts, like continuous processing, flow chemistry, high-throughput screening, and process intensification, have been established to open novel pathways in process design and engineering. Besides, a number of highly innovative and systematic approaches, protocols, tools, and strategies are currently being developed in both industry and academia, all to minimize the gap between research and industry, and to define a smooth transfer of (bio)chemical processes to the industrial environment. To meet these challenges, we must advance the field from (bio)catalyst discovery to (bio)catalytic microprocess design. This advance will require not only a new level of understanding of reaction mechanisms and transport phenomena at the micro scale, but also the development of computational tools [1].

In this work the theoretical description of transport phenomena at the micro scale is discussed together with the presentation of multiscale modeling concept. Multiscale modeling combines existing and emerging methods from diverse scientific disciplines to bridge the wide range of time and length scales that are inherent in a number of essential phenomena and processes in materials science and engineering. Multiscale modeling may help to design and optimize microsystems technology for chemical and biochemical processes from a microscopic point of view [1].

Reference:

- [1] R. Wohlgemuth, I. Plazl, P. Žnidaršič-Plazl, K.V. Gernaey, J.M. Woodley, Trends Biotechnol. (2015) *in press*. DOI: 10.1016/j.tibtech.2015.02.010.

PO 5

**SUPERKONDENZATORI KAO SPREMNICI ENERGIJE:
NADOMJESTAK ILI DODATAK GALVANSKIM ČLANCIMA
(BATERIJAMA)?**

**SUPERCAPACITORS AS ENERGY STORAGE DEVICES:
ALTERNATIVE OR COMPLEMENTARY DEVICES TO
BATTERIES?**

Zoran Mandić

Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije,
Marulićev trg 19, HR-10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: zmandic@fkit.hr

Superkondenzatori su elektrokemijski pretvornici i spremnici energije koju skladište energiju putem razdvajanja naboja na granici faza kruto/tekuće. U usporedbi s galvanskim člancima oni mogu oslobađati veću specifičnu snagu i obaviti praktički neograničen broj ciklusa punjenja i pražnjenja bez značajne degradacije njihovih svojstava. S druge strane, sadašnje stanje razvoja superkondenzatora uključuje nekoliko slabih točaka kao što su relativno niska specifična energija koju mogu skladištiti i koja je manja od energije koju oslobađaju napredni galvanski članci temeljeni na Li-ion tehnologiji. Također, visoka razina samopražnjenja kao i relativno usko temperaturno područje rada ograničavaju njihovu današnju primjenu.

Zbog strogih zahtjeva koje imaju pojedine primjene posebnu važnost u tehnologiji izrade superkondenzatora zauzima razvoj elektrodnih materijala te sustava membrana/elektrolit. Uz ugljikove materijale koji su danas najzastupljeniji u konstrukciji tzv. dvoslojnih kondenzatora, posebna pažnja se posvećuje razvoju funkcionalnih pseudokapacitivnih nano-materijala koji omogućavaju skladištenje energije putem redoks reakcija na elektrodama. Takvi materijali moraju imati vrlo brzu elektrokemijsku reakciju, visoku reverzibilnost i kemijsku stabilnost.

U ovom izlaganju bit će dan pregled sadašnjeg stanja primjene i razvoja tehnologije superkondenzatora te će se usporediti mehanizam rada superkondenzatora i galvanskih članaka.

PO 6

**EKOLOŠKI PRIHVATLJIVA TEHNOLOGIJA OBRADE
OTPADNIH VODA PRIMJENOM PRIRODNOG ZEOLITA**

**ENVIRONMENTALLY FRIENDLY WASTEWATER
TREATMENT TECHNOLOGY BASED ON
NATURAL ZEOLITE**

Nediljka Vukojević Medvidović

Sveučilište u Splitu, Kemijsko-tehnološki fakultet, Teslina 10/V, 21000 Split, Hrvatska
e-mail: nvukojev@ktf-split.hr

Kvalitetno obrađena otpadna voda ima ogroman potencijal kao izvor vode za industrijske potrebe, čišćenje javnih površina, uzgoj usjeva te općenito pridonosi u prevenciji nestašice vode. Do danas su razvijeni različiti postupci obrade otpadnih voda u skladu s vrstama onečišćenja koja se nalaze u otpadnim vodama, a uključuju fizičke, biološke i kemijske procese te njihove kombinacije. Međutim, poznato je da su postupci obrade otpadnih voda veliki potrošači energije, te pridonose značajnoj emisiji ugljikova dioksida. Kako bi se ublažila nestašica vode i smanjio otisak ugljika, novija rješenja moraju biti usmjerena prema razvoju novih ekološki prihvatljivih tehnologija obrade otpadnih voda. Pri tome je za postizanje održivog upravljanja vodnim resursima u zemljama u razvoju nužno poticati razvoj sustava koji su ekonomski i ekološki prihvatljivi. Istraživanja su pokazala da se uporabom prirodnih zeolita efikasno uklanjaju onečišćenja iz otpadnih voda. Tome pridonosi činjenica da se prirodni zeolitni minerali odlikuju izrazitom selektivnošću prema kationima, a njihovi modificirani oblici prema anionima i organskim molekulama. Nalazišta zeolita su veoma rasprostranjena, a eksploatacija je jednostavna i ekonomski isplativa. Zasićeni zeolit pokazuje izvrsna puferska svojstva, te je kemijski i termički stabilan u širokom pH području. Također, zasićeni zeolit može se regenerirati, čime je omogućeno višestruko korištenje iste mase zeolita i obrada veće količine otpadne vode primjenom kontinuirane izvedbe u koloni.

U ovom radu dati će se osvrt na rezultate primjene prirodnog zeolita za uklanjanje kationa teških metala iz otpadnih voda, mogućnost desorpcije, regeneracije i ponovnog korištenja regeneriranog zeolita te primjene prirodnog zeolita kao permeabilne reaktivne barijere za *in situ* remedijaciju okoliša.

PO 7

**BIOLOŠKA OBRADA POLJOPRIVREDNOG OTPADA I
OTPADA IZ PREHRAMBENE INDUSTRIJE POMOĆU
GLJIVA BIJELOG TRULJENJA – MOGUĆNOSTI I IZAZOVI**

**BIOLOGICAL TREATMENT OF AGRICULTURAL AND
FOOD INDUSTRY WASTE BY WHITE-ROT FUNGI –
OPPORTUNITIES AND CHALLENGES**

Marina Tišma

Prehrambeno-tehnološki fakultet Osijek, F. Kuhača 20, 31 000 Osijek, Hrvatska
e-mail: marina.tisma@ptfos.hr

Agricultural and food industry are generators of large quantities of lignocellulose waste. White-rot fungi are unique organisms showing the capacities of degrading and mineralizing all three major lignocellulose polymers (cellulose, hemicellulose and lignin) owing to their ability to produce a variety of hydrolytic and oxidative enzymes. Prior to apply the white-rot fungi in lignocellulose waste treatment for enzyme or biofuels production, the knowledge on microorganism's kinetic growth, substrate utilization, complex material composition measurements and the biodegradation process optimization is beneficial.

The results on laccase production during *Trametes versicolor* submerge cultivation and laccase application in phenolic compounds oxidation in classical reactors and in microreactors will be presented. An overview of the application of different white-rot fungi in solid-state fermentation processes using various lignocellulose materials as substrates will be given resulting with the work on process development of corn stover biological pretreatment with *Trametes versicolor* for its further use in anaerobic co-digestion with cow manure for biogas production.

This work is co-financed by European regional development fund (ERDF), Operational Programme Regional Competitiveness 2007.–2013.

PO 8

**FOTOKATALITIČKA RAZGRADNJA TOLUENA I
FORMALDEHIDA U PLINOVITOJ FAZI
UZ IMOBILIZIRANI SLOJ $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$**

**DECOMPOSITION OF GASEOUS TOLUENE AND
FORMALDEHYDE WITH $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$
PHOTOCATALYTIC COATINGS**

Andraž Šuligoj¹, Urška Lavrenčič Štangar¹, Nataša Novak Tušar^{1,2}

¹University of Nova Gorica, Vipavska 13, 5000 Nova Gorica, Slovenia

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

Indoor air pollution has been recognised as one the main source for the so-called “sick building syndrome”. In this respect, volatile organic compounds (VOCs) present the majority of the species responsible for this effect. An efficient way of elimination of VOCs from indoor air has proven to be photocatalytic oxidation, one of the advanced oxidation processes (AOP). So far, titanium dioxide (TiO_2) has been found as the most suitable material for photocatalyst, due to its high activity, low cost, non-toxicity and photostability. In order to utilise TiO_2 , immobilisation to a solid carrier is suggested to avoid the need for post reaction filtration. In this manner, several photocatalysts of TiO_2 grafted on porous SiO_2 ($\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$) were prepared by simple and sustainable low-temperature sol-gel synthesis and immobilised onto glass slides in the form of thin layers. Their photocatalytic activity was assessed towards decomposition of toluene and formaldehyde (as proposed by ASHRAE) in lab-made photoreactor system. It was found that grafting of titania onto mesoporous silica improved adsorption of pollutants as well as their photocatalytic decomposition. A correlation between activity and surface area was found for several samples. The adsorption capacity for toluene has been linked to the amount of surface hydroxyl groups in the composites, which was determined by TPD-IR. The influence of Ti : Si molar ratio on the photoreactivity of the samples has also been studied. Lastly, the evaluation of the release of aerosols during the operation of a continuous flow reactor mode was done in order to confirm the suitability of the coatings for application in air cleaning devices.

PO 9

**KONTROLA SOL-GEL PROCESA MODIFICIKACIJOM
ALKOKSIDNIH PREKURSORA****SOL-GEL PROCESS CONTROLL BY MODIFICATION OF
ALKOXIDE PRECURSORS**

Stanislav Kurajica

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

Sol-gel procesom naziva se niz kemijskih reakcija hidrolize i kondenzacije metalnih alkoksida pri čemu prvo dolazi do stvaranja sola (stabilne suspenzije vrlo finih čestica čvrste faze dispergiranih u kapljevitoj fazi), a potom do tranzicije sola u gel (disperziju kapljevite faze u čvrstom matriksu). Kontrola procesa hidrolize i kondenzacije metalnih alkoksida vrlo je složena budući da su procesi hidrolize i kondenzacije međusobno ovisni a utjecaj različitih čimbenika na njih ponekad kontroverzan i kompleksan. Najčešće se brzina procesa hidrolize i kondenzacije regulira kontrolom uvjeta reakcije poput: prirode i koncentracije katalizatora, molarnog odnosa H_2O/M , temperature, vremena reakcije, vrste otapala itd. Ukoliko je metalni alkoksid iznimno reaktivan jedan od načina kontrole je i kemijska modifikacija kelirajućim agensom čime se postiže veća hidrolitička stabilnost alkoksida. Kao kelirajući agensi, zbog prikladnosti i niske cijene, često se koriste β -ketoestri, poput etil-acetoacetata, ($C_6H_{10}O_3$). β -ketoestere karakterizira pojava keto-enolne tautomerije a budući da enolni tautomer ima reaktivnu hidroksilnu skupinu sposoban je zamijeniti alkoksilnu grupu u metalnom alkoksidu. Supstitucijom monodentatne alkoksilne grupe s bidentatnim β -ketoesterskim ligandom stvara se šestočlani kelatni prsten što ima veliki utjecaj na hidrolitičku stabilnost alkoksida. Osim hidrolitičke stabilnosti kelirajući agens utječe i na strukturu alkoksidnog oligomera. Naime, metali u alkoksidima teže ostvarivanju maksimalnog koordinacijskog broja stvaranjem oligomera. Budući da keliranjem dolazi do promjena u koordinaciji metalnog alkoksida dolazi i do nastanka različitih oligomernih struktura. U izlaganju će biti opisana vlastita iskustva i rezultati u pripravi kelata titanija i aluminija. Biti će dan prikaz nastalih oligomernih struktura te utjecaj ovih struktura na tijek sol-gel procesa i keramičke produkte nastale termičkom obradom gela.

PO 10

**POLIMERNI MATERIJALI S BIORAZGRADLJIVIM
KOMPONENTAMA****POLYMERIC MATERIALS WITH BIODEGRADABLE
COMPONENTS**

Branka Andričić, Matko Erceg, Sanja Perinović

Sveučilište u Splitu, Kemijsko-tehnološki fakultet, Teslina 10/V, 21000 Split, Hrvatska
e-mail: branka@ktf-split.hr

Polimerni materijali obilježje su modernog doba i njihovo svojstvo bionerazgradljivosti nije nužno nedostatak. Biorazgradljivi polimeri vjerojatno nikada neće uspjeti postati širokoprimjenljiva plastika te mjesto za njih treba tražiti u specifičnim primjenama, tzv. nišama, gdje će njihova svojstva biti najbolje primjenljiva.

Poli(L-laktid), (PLLA), i poli(3-hidroksi butirat), (PHB), najviše su istraživani biorazgradljivi polimeri, bilo kao komponente polimernih mješavina, bilo kao kompozitni materijali. Komercijalno se primjenjuju kao ambalažni materijali, u medicini, farmaciji i poljoprivredi. Nedostatak obaju polimera je još uvijek relativno visoka cijena, krtoš i loša preradbenost svojstva. Također, zbog male brzine nukleacije proces kristalizacije ne završava tijekom procesa preradbe, pa dolazi do nepoželjne sekundarne (hladne) kristalizacije.

U predavanju će biti prikazana svojstva PLLA i PHB omekšanih tributil-acetil-citratom (TBAC), PLLA kompozita s lignoceluloznom punilom (mljevenim košticama masline određene granulacije) te PHB nanokompozita s organskim modificiranim montmorilonitom (OMMT). Rezultati istraživanja svojstava modificiranog PLLA pokazali su da nije postignuta dovoljna adhezija polimera i punila, ali punilo i omekšavalo ubrzavaju proces nukleacije tijekom hlađenja. Rezultati biorazgradnje u okolišu pokazuju da najprije počinje razgradnja omekšavala odnosno punila, što doprinosi dezintegraciji samog materijala.

TBAC učinkovito omekšava PHB i ubrzava proces nukleacije [2]. Nanokompoziti PHB-a i OMMT pripravljeni su s ciljem poboljšanja toplinske postojanosti PHB-a i povećanja njegove brzine nukleacije. Metodom raspršenja rendgenskih zraka pod malim kutom (SAXS) potvrđena je interkalirana struktura PHB/OMMT nanokompozita [3]. Također, utvrđeno je da OMMT povećava brzinu nukleacije PHB-a te poboljšava toplinsku postojanost PHB-a. Provedena je i kinetička analiza toplinske razgradnje PHB/OMMT nanokompozita (mehanizam, kinetički parametri i kinetički modeli procesa toplinske razgradnje).

Literatura:

- [1] S. Perinović, Modifikacija svojstava biorazgradljivog poli(L-laktida), disertacija, Kemijsko-tehnološki fakultet, Split, 2012.
- [2] A. Bezić, Migracija omekšavala iz PHB-a omekšanog TBAC-om, završni rad, Kemijsko-tehnološki fakultet, Split, 2011.
- [3] M. Erceg, D. Jozić, E-Polymers 13 (1) (2013) 273–284. DOI: 10.1515/epoly-2013-0125.

PO 11

**POKUS I NASTAVA KEMIJE
(POSVEĆENO PETRU VRKLJANU)**

**EXPERIMENT AND CHEMICAL EDUCATION
(DEDICATED TO PETAR VRKLJAN)**

Nenad Judaš¹, Franka Miriam Brueckler², Nikola Cindro¹, Dominik Cinčić¹,
Siniša Habazin¹, Hrvoje Mesić³, Krešimir Molčanov⁴, Milan Sikirica¹,
Vladimir Stilinović¹, Mihaela Vrbnjak⁵

¹Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek,
Horvatovac 102a, 10000, Zagreb, Hrvatska
e-mail: judas@chem.pmf.hr

²Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Matematički odsjek,
Bijenička cesta 30, 10000, Zagreb, Hrvatska

³Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Fizički odsjek,
Bijenička cesta 32, 10000, Zagreb, Hrvatska

⁴Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, 10000, Zagreb, Hrvatska

⁵VI. Osnovna škola Varaždin, Dimitrija Demetra 13, 42000, Varaždin, Hrvatska

Nastava kemije i pokusi čine neraskidivu cjelinu. To je tvrdnja o kojoj će malo tko sporiti. No, iako se svi s njom slažemo, pitanje je znači li ona isto svakome od nas.

Da je to upitno uči nas iskustvo. Često se dogodi da se ljudi dok pričaju o nastavi kemije i pokusima "razumiju", ali, kad se ozbiljnije "zaviri" u njihove prakse, brzo se pokaže da su one bitno različite i da se sugovornici zapravo "ne razumiju".

Razlike su ponajprije u tome kako tko od njih u svojoj nastavi rabi pokus jer pokus u nastavu može biti uključen na različite načine:

- može poslužiti kao potvrda izloženih teza ("klasičan" pristup),
- može poslužiti kao provjera mogućih rješenja ("analitički" pristup),
- može biti i izvor mogućih pitanja ("otkrivački" pristup).

Nijedno od ovih rješenja nije za odbaciti, ali je prednost posljednjega, koji nas vodi u problemsku nastavu, izrazita. No dobro, reći ćete, slažemo se, ali kako nam to pomaže?

Kažu da je bit reforme školstva izmjena nastavnih programa. Ako je zaista tako onda prije svega treba odgovoriti na pitanje: Što je program? Je li to niz naslova tema i nastavnih jedinica? Mnogi misle da je tako, ali nije. S druge strane, neki će stvari postaviti ovako:

ŠTO JE PROGRAM?

Ovo je pokus.

Što mogu o tome reći?

Što mogu o tome pitati?

PROGRAM JE PITANJE!

Složimo li se s njima i provedemo li to u vlastitoj nastavnoj praksi postići ćemo, bez mnogo novaca, najbolju i najveću reformu i dokinuti spomenuto "ne razumijevanje".

Problem trajan, zadatak sjajan!

PO 12

**KOLIKO ČVRSTIM VEZAMA SMO VEZANI?
PRIČA O RAZUMIJEVANJU KEMIJSKIH VEZA U
HRVATSKOM OBRAZOVNOM SUSTAVU****HOW STRONG ARE THE BONDS THAT TIE US? A STORY
ABOUT CHEMICAL BOND CONCEPTIONS IN
CROATIAN EDUCATIONAL SYSTEM**

Roko Vladušić

Prirodoslovno-matematički fakultet, Teslina 12, 21000, Split, Hrvatska
e-mail: vladusic@pmfst.hr

Kemijske su veze jedna od najvažnijih tema [1] i fundamentalni koncept [2] na srednjoškolskoj i fakultetskoj razini. Njihovo je razumijevanje, između ostalog, važno za spoznavanje prirode kemijskih reakcija, termodinamičkih procesa, strukture molekula i objašnjavanje fizikalnih svojstva poput topljivosti, vodljivosti ili vrelišta. Sadržaji o kemijskim vezama u pravilu su apstraktnog karaktera. Utemeljeni su na različitim konceptima i teorijama ograničene primjenjivosti. Ako dodamo da se u području kemijskih veza razumijevanje postiže uporabom različitih modela te da se od učenika/studenta očekuje interpretacija velikog broja različitih simbola [2,3], postaje jasnije zašto o kemijskim vezama učenici i studenti razvijaju veliki broj alternativnih razumijevanja [4,5]. Kako bismo detektirali probleme, a kasnije i pokušali iznaći odgovarajuća rješenja, proveli smo istraživanje o razumijevanju kemijskih veza sudionika obrazovnog sustava Republike Hrvatske. Pokazalo se da pojedini učenici, studenti i nastavnici kemije iskazuju alternativna razumijevanja. Njihov je broj obrnuto razmjern stupnju obrazovanja. Problem se, ciklički, samo obnavlja. Alternativna su razumijevanja, u nekim slučajevima, konceptualno ukorijenjena. S obzirom na njihovu postojanost, osmišljavanje metoda i iznalaženje rješenja koja će potaknuti konceptualne promjene, pravi je izazov. Revizija udžbeničkih sadržaja i nastava utemeljena na elektrostatskoj (i kvantno-mehaničkoj) osnovi, nužni su koraci u filtriranju postojećih razumijevanja odnosno stjecanju znanstveno prihvatljivih spoznaja o kemijskim vezama.

Literatura:

- [1] R.K. Coll, D.F. Treagust, Res. Sci. Ed. 31 (2001) 357–382.
- [2] K.S. Taber, R. Coll, Chemical Bonding, in J.K. Gilbert, O. De Jong, R. Justi, D.F. Treagust, J.H. Van Driel (eds.), Chemical Education: Towards Research-based Practice, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2002, 213–234.
- [3] R.K. Coll, N. Taylor, Chem. Educ. Res. Pract. 3(2) (2002) 175–184.
- [4] K.S. Taber, Misconceptions in chemistry – prevention, diagnosis and cure, Royal Society of Chemistry, London, 2002.
- [5] H. Özmen, J. Sci. Educ. Technol. 13 (2) (2004) 147–159.

PO 13

**PROGRAMI SVEUČILIŠNIH NASTAVNIČKIH STUDIJA
KEMIJE U REPUBLICI HRVATSKOJ**

**EDUCATIONAL UNIVERSITY STUDY PROGRAMMES OF
CHEMISTRY IN CROATIA**

Ivan Vicković, Berislav Marković

University J.J.Strossmayer in Osijek, Department of Chemistry,
Ul. Cara Hadrijana 8a, 31000 Osijek, Croatia
e-mail: vickovic@kemija.unios.hr

Prelaskom na bolognski sustav obrazovanja 2006. godine, programi sveučilišnih studija kemije za obrazovanje učitelja/nastavnika kemije na tri sveučilišta (Kemijski odsjek, Fizički odsjek i Biološki odsjek Prirodoslovno-matematičkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu, Odjel za kemiju i Odjel za biologiju Prirodoslovno-matematičkog fakulteta Sveučilišta u Splitu i Odjel za kemiju i Odjel za biologiju Sveučilišta Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku) prilagodili su svoje studijske programe na dva ciklusa: preddiplomski u trajanju od tri godine i u nastavku diplomski u trajanju od dvije godine ili su ga integrirali u 5-godišnji studij. U skladu sa zakonom, nakon 3+2 ili 5 godina studija, diplomirani studenti dobivaju akademski naziv magistar edukacije kemije (mag.educ.chem) na Kemijskom odsjeku u Zagrebu i Odjelu za kemiju u Osijeku, a u slučaju dvopredmetnih studija magistar edukacije fizike i kemije, te biologije i kemije (mag. educ. phys. et chem. i mag. educ. biol. et chem.) na Fizičkom odnosno Biološkom odsjeku PMF-a u Zagrebu, PMF-u u Splitu i Biološkom odjelu u Osijeku.

Na PMF-u u Zagrebu, na Kemijskom odsjeku, preddiplomski studij je identičan za istraživački i nastavnički smjer, a na diplomskom studiju ova se dva smjera razlikuju u više izbornih stručnih kolegija vs. metodički kolegiji. Na taj način osigurano je podjednako obrazovanje u temeljnim kemijskim kolegijima kako budućim istraživačima, tako i budućim nastavnicima. Na Odjelu za kemiju u Osijeku, program preddiplomskog studija odobren je 2007. godine, a program sveučilišnog diplomskog nastavničkog studija kemije 2009. godine. Studenti iz Osijeka i Zagreba, bez ikakvih poteškoća mogu prijeći na diplomske studije oba sveučilišta, jer su programi u velikoj mjeri usklađeni što omogućava mobilnost. Za pretpostaviti je da uz veće ili manje razlike u kadru i opremljenosti, pojedini fakultet/odjel pruža podjednake ishode učenja i da studenti dobivaju podjednake kompetencije za nastavu kemije. Pitanje je međutim kakve kompetencije za nastavu kemije dobivaju studenti dvojnih studijskih programa biologija/kemija. Ovakav dvopredmetni studij najčešće nije pod ingerencijom kemičara, nominalno se odvija u suradnji odjela/odsjeaka, ali se ponuđeni programi međusobno znatno razlikuju. Štoviše, u nekim slučajevima je znatno narušena ravnopravna zastupljenost struka na štetu kemije. Također se postavlja pitanje opravdanosti različitih naziva zvanja u osnovnim (učitelj kemije) vs. srednjim školama (nastavnik kemije) za jednako obrazovane stručnjake s akademskom titulom magistar edukacije kemije.

Razlike u programima, usklađenost sa zakonima te problemi prilikom zapošljavanja studenata koji završe jednopredmetne studije tj. neopravdane prednosti onih s dvije titule, bit će komentirani i ilustrirani primjerima.

PO 14

**AKTIVNOSTI ZA RAZVOJ PEDAGOŠKIH SADRŽAJA
KOLEGIJA METODIKA NASTAVE KEMIJE****ACTIVITIES IN CHEMISTRY DIDACTICS COURSE FOR
CHEMISTRY TEACHER PEDAGOGICAL CONTENT
KNOWLEDGE DEVELOPMENT**

Dragica Trivić, Biljana Tomašević

University of Belgrade, Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, Belgrade, Serbia
e-mail: dtrivic@chem.bg.ac.rs, bsteljic@chem.bg.ac.rs

Život u tehničko-tehnološki oblikovanom društvu ubrzano se mijenja što zahtjeva stvaranje uvjeta za razvoj dinamičke kombinacije znanja, vještina i stavova nastavnika kemije, primjenjive u različitim kontekstima budućeg obrazovanja i života mladih. Cilj našeg rada u okviru predmeta Metodika nastave kemije [1] bio je da razvijemo nastavne situacije s aktivnostima koje doprinose razvoju pedagoškog znanja sadržaja kemije budućih nastavnika [2,3], komponente nastavničkih kompetencija. U razvijanju nastavnih situacija tragalo se za aktivnostima koje povezuju ciljeve obrazovanja, prirodu nastavnog sadržaja kemije, metode nastave i učenja kemije i praćenja i vrednovanja napretka u učenju kemije. Namjera nam je bila da metode nastave i učenja postavljaju studente u poziciju da samostalno i u interakciji s drugima konstruiraju razumijevanje, razvijaju vještine i formiraju stavove, kao i da takav način rada ujedno bude model za njihovu buduću praksu. Napravljene su i promjene u načinu praćenja i vrednovanja napredovanja studenata, odnosno razvijenosti njihovih nastavničkih kompetencija, kao dinamičke kombinacije znanja, vještina i stavova. Razvijeni su i primijenjeni različiti načini formativnog provjeravanja studenata tokom procesa nastave i učenja, kao i drugačiji načini za vrednovanje krajnjeg rezultata tog procesa na ispitu (sumativno provjeravanje). Ovi načini formativnog i sumativnog provjeravanja također su trebali poslužiti kao modeli za buduću praksu nastavnika. Navedene aktivnosti povezane su sa zadacima i aktivnostima u okviru školske prakse, tako da predstavljaju jedinstven sistem inicijalnog obrazovanja nastavnika kemije.

Literatura:

- [1] D. Trivić, B. Tomašević, Praktikum za vežbe iz Metodike nastave hemije, Hemijski fakultet, Beograd, 2008.
- [2] L.S. Shulman, Educational Researcher 15 (1986) 4–14.
- [3] S. Magnusson, J. Krajcik, H. Borko, Nature, Sources and Development of Pedagogical Content Knowledge for Science Teaching, in J. Gess-Newsome, N. Lederman (eds.), Examining Pedagogical Content Knowledge: The Construct and its Implications for Science Education, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1999, 95–132.

PO 15

**KOMPETENCIJSKA PODRUČJA U RAZVOJU STANDARDA
KVALIFIKACIJE UČITELJA KEMIJE****THE DEVELOPMENT OF STANDARD QUALIFICATIONS
FOR CHEMISTRY TEACHER – COMPETENCY AREAS**

Olgica Martinis

Agencija za odgoj i obrazovanje, Donje Svetice 38, 10 000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: olgica.martinis@azoo.hr

Prijedlog stručnog povjerenstva Nacionalnog centra za vanjsko vrednovanje obrazovanja (NCVVO) o novom sustavu licenciranja učitelja u Republici Hrvatskoj poslužit će kao podloga za razvijanje nacionalnog kompetencijskog standarda učiteljske profesije s ciljem razvoja sustava licenciranja učitelja. Uporište pri izradi Prijedloga jest Zakon o odgoju i obrazovanju u osnovnoj i srednjoj školi (2008) u kojem se navodi da NCVVO provodi postupak licenciranja učitelja u Republici Hrvatskoj [1]. Teorijsko-konceptualni okvir Prijedloga temelji se na kompetencijskom standardu [2], primjerima međunarodne prakse [3] i prikaza stanja obrazovnog sustava u Republici Hrvatskoj [4]. Budući da je provođenje stručnih ispita [5], uvida u rad učitelja na temelju prijedloga za napredovanje u položajna zvanja (mentor i savjetnik) [6] te stručno usavršavanje učitelja u djelokrugu rada Agencije za odgoj i obrazovanje, interes za razvoj standarda kvalifikacije učitelja kemije rezultirao je organizacijom predavanja za učitelje kemije u okviru Sekcije Obrazovanje na 24. Hrvatskom skupu kemičara i kemijskih inženjera prema postavljenim kompetencijskim područjima. Predložena su kompetencijska područja učenje i poučavanje, vrednovanje, okruženje za učenje, suradnja u školi, s obiteljima i zajednicom, obrazovni sustav i organizacija škole, profesionalna komunikacija i interakcija, profesionalnost i profesionalni razvoj [6]. Opisana kompetencijska područja tijekom predavanja bit će okosnica rasprave s ciljem upoznavanja učitelja kemije sa skupovima ishoda učenja svakog pojedinog kompetencijskog područja te značenja razvoja standarda kvalifikacije za učiteljsku profesiju.

Literatura:

- [1] Zakon o odgoju i obrazovanju u osnovnoj i srednjoj škola, NN 87/08 (2008).
<http://www.zakon.hr/z/317/Zakon-o-odgoju-i-obrazovanju-u-osnovnoj-i-srednjoj-skoli>
- [2] Common European principles for teacher competences and qualifications, European Commission, 2005. http://docs.china-europa-forum.net/doc_48.pdf
- [3] The General Teaching Council for Scotland. <http://www.gtcs.org.uk/home/home.aspx>.
- [4] V. Vizek Vidović, V. Domović, I. Marušić, Praćenje i vrednovanje profesionalnog razvoja učitelja – kompetencijski pristup: podloga za model licenciranja, Nacionalni centar za vanjsko vrednovanje obrazovanja, Zagreb, 2015.
- [5] Pravilnik o polaganju stručnih ispita učitelja i stručnih suradnika u osnovnom školstvu i nastavnika u srednjem školstvu, NN 88/03, (2003).
- [6] Pravilnik o napredovanju učitelja i nastavnika u osnovnom i srednjem školstvu, NN 89/95, 148/99, 20/05 (2005).

USMENA PRIOPĆENJA
ORAL PRESENTATIONS

UP 1

GLAVNA ULOGA POPRAVKA POGREŠKE LEUCIL-TRNA-SINTETAZE IZ BAKTERIJE *ESCHERICHIA COLI* JE SPRJEČAVANJE NEKANONSKE MISTRANSLACIJE**THE PRIME FUNCTION OF LEUCYL-TRNA SYNTHETASE
PROOFREADING IS PREVENTION OF THE
NON-CANONICAL MISTRANSLATION IN
*ESCHERICHIA COLI***Nevena Cvetešić¹, Andres Palencia², Stephen Cusack², Ita Gruić-Sovulj¹¹University of Zagreb, Faculty of Science, Department of Chemistry,
Horvatovac 102a, 10000 Zagreb, Croatiae-mail: ncvetesic@chem.pmf.hr, gruic@chem.pmf.hr²University of Grenoble Alpes-EMBL-CNRS, Grenoble Outstation and Unit of Virus Host-Cell
Interactions, European Molecular Biology Laboratory, Grenoble, Francee-mail: palencia@embl.fr, cusack@embl.fr

Aminoacyl-tRNA synthetases (aaRSs) are enzymes that covalently pair amino acids with cognate tRNAs in a two-step reaction. Amino acid is firstly activated through formation of aminoacyl-adenylate, and in the second step, aminoacyl-moiety is transferred to cognate tRNA. Coupling of cognate aa-tRNA pairs is crucial for accurate protein biosynthesis. Selection of the cognate tRNA generally does not pose a problem for aaRSs, as they share a large interacting surface with the tRNA molecules. However, some structurally similar amino acids are difficult to discriminate in the synthetic reaction alone. AaRSs have developed complex proofreading mechanisms for correction of errors made in amino acid selection that may occur before or after transfer of amino acid to tRNA (hydrolysis of aminoacyl-adenylate or misacylated tRNA, respectively) [1].

Leucyl-tRNA synthetases (LeuRS) covalently couple tRNA^{Leu} with leucine, and thereby provide the pool of Leu-tRNA^{Leu} for ribosomal protein synthesis. LeuRS may also activate and transfer to tRNA^{Leu} structurally and chemically similar norvaline, a non-canonical amino acid that accumulates in *Escherichia coli* under micro-aerobic conditions [2]. However, incorporation of norvaline into proteins is prevented by efficient intrinsic LeuRS hydrolytic activity toward norvalyl-tRNA^{Leu} within a dedicated post-transfer editing domain. In spite of the prevailing opinion that non-cognate isoleucine mimics leucine well in the LeuRS synthetic reactions and thus requires editing to prevent errors in leucyl-tRNA^{Leu} synthesis, we now demonstrate that isoleucine is discriminated with high specificity within the synthetic site [3]. Thermodynamic, structural and kinetic approaches establish that both very weak ground state binding and the decreased rate of the chemical step contribute to isoleucine discrimination. These results were complemented by *in vivo* experiments, showing that *E. coli* strain relying on the LeuRS with defunct post-transfer editing domain exhibits normal growth in the presence of high isoleucine concentration, but displays growth defects under micro-aerobic conditions where norvaline accumulates. Our results reveal that LeuRS-mediated translational quality control represents the essential part of the major *E. coli* adaptive response necessary for survival in environments with low oxygen levels.

References:

- [1] J.J. Perona, I. Gruic-Sovulj, *Top. Curr. Chem.* 344 (2014) 1–41.
- [2] J. Soini, C. Falschlehner, C. Liedert, J. Bernhardt, J. Vuoristo, P. Neubauer, *Microb. Cell Fact.* 7 (30) (2008) 14 pages. DOI: 10.1186/1475-2859-7-30
- [3] N. Cvetesic, A. Palencia, I. Halasz, S. Cusack, I. Gruic-Sovulj, *EMBO J.* 33 (2014) 1639–1653.

UP 2

**ISTRAŽIVANJE INTERAKCIJA MALIH MOLEKULA I DNA
SPEKTROKOPIJOM POVRŠINSKI POJAČANOG
RAMANOVOG RASPRŠENJA****STUDY OF SMALL MOLECULE-DNA INTERACTIONS
BY SURFACE-ENHANCED RAMAN
SCATTERING SPECTROSCOPY**

Snežana Miljanić

Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek,
Zavod za analitičku kemiju, Horvatovac 102a, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: miljanic@chem.pmf.hr

Pri strukturnoj karakterizaciji kompleksnih vrsta nastalih nekovalentnim interakcijama malih molekula i DNA koriste se brojne metode, primjerice difrakcija X-zraka, NMR, IR, Ramanova, UV/Vis apsorpcijska i fluorescencijska spektroskopija [1]. S obzirom na jedinstvene podatke o strukturi prikupljene svakom od metoda, a u svrhu cjelokupnog uvida u način vezanja malih molekula s DNA, primjena različitih tehnika je neophodna.

Spektroskopija površinski pojačanog Ramanovog raspršenja (*surface-enhanced Raman scattering*, SERS) je tehnika vibracijske spektroskopije koja omogućava osjetljivu strukturnu detekciju molekula u blizini nanostrukturiranih metalnih površina. Zahvaljujući visokoj osjetljivosti i informacijama o strukturi, primijenjena je pri izučavanju mjesta i načina vezanja malih organskih molekula s nukleinskim kiselinama [2–5].

Interakcije malih, strukturno različitih molekula sa svojstvima interkaliranja i vezanja u utor istražene su s DNA/RNA polinukleotidima koji su se razlikovali prema slijedu parova baza i sekundarnoj strukturi. Kao metalni supstrati za pojačanje Ramanovog raspršenja korištene su koloidne suspenzije srebra pripravljene redukcijom srebrova nitrata s trinatrijevim citratom ili hidroksilamin hidrokloridom. Predloženi su mehanizmi adsorpcije malih molekula na površinu nanočestica srebra te pojačanja raspršenog zračenja. Opaženi SERS spektri malih molekula s polinukleotidima asignirani su i detaljno analizirani, pri čemu su spektralne karakteristike upućivale na interakcije malih molekula s DNA u skladu s rezultatima drugih spektroskopskih metoda.

Literatura:

- [1] K. Nakamoto, M. Tsuboi, G.D. Strahan, *Drug-DNA Interactions: Structures and Spectra*, John Wiley & Sons, New Jersey, 2008.
- [2] S. Miljanić, A. Dijanošić, I. Matošević, I. Piantanida, *Vib. Spectrosc.* 57 (2011) 23–29.
- [3] S. Miljanić, A. Dijanošić, I. Piantanida, Z. Meić, M. Teresa Albelda, A. Sornosa-Ten, E. García-Espana, *Analyst* 136 (2011) 3185–3193.
- [4] S. Miljanić, A. Dijanošić, K. Landeka, M. Radić Stojković, I. Piantanida, *Appl. Spectrosc.* 66 (2012) 82–89.
- [5] A. Dijanošić, S. Miljanić, I. Piantanida, J. González-García, E. García-España, *J. Raman Spectrosc.* 45 (2014) 863–872.

UP 3

**SINTEZA I BIOLOŠKA AKTIVNOST MUROPEPTIDA
SYNTHESIS AND BIOLOGICAL ACTIVITY OF
MUROPEPTIDES**

Rosana Ribić, Ruža Frkanec, Srđanka Tomić

University of Zagreb, Faculty of Science, Horvatovac 102a, HR-10000 Zagreb, Croatia
e-mail: rribic@chem.pmf.hr

Muropeptides (muramylpeptides) are fragments of peptidoglycans, unique polymers that build up the cell wall of bacteria. Peptidoglycans are not produced by higher organisms making them structural patterns of pathogens that are perceived as danger signals by the higher host organisms. Therefore, muropeptides are used as immunostimulating compounds (adjuvants). Muramyl dipeptide (MDP), *N*-acetylmuramyl-L-alanyl-D-*iso*glutamine, is the smallest structural unit of peptidoglycans showing the immunostimulating activity. In clinical use MDP is characterized by poor macrophage penetration, rapid elimination, pyrogenic and arthritogenic activity. Numerous MDP analogues have been synthesized with the intention of improving the pharmacological properties of the parent molecule. One important parameter in improving the pharmacological properties of MDP is lipophilicity. Therefore, numerous MDP analogues lacking the hydrophilic carbohydrate moiety (desmuramyl dipeptides) with different groups at C- and N-terminus of the L-Ala-D-*iso*Gln moiety have been synthesized. [1] We have synthesized desmuramylpeptides with incorporated lipophilic adamantyl group and also their mannosylated derivatives. [2] Mannosyl moiety was introduced since it may allow the targeted delivery of these active substances through interaction with lectins specific for mannose, such as mannose receptors (MR) expressed at macrophages and dendritic cells. The adamantylated muropeptides connected to a mannose can also be encapsulated into liposomes, vesicles often used for the target delivery. Adamantane group penetrates into the lipid bilayer and acts as an anchor of the muropeptide cargo while mannose exposed at the liposome surface can serve in targeting MRs. [3] Furthermore, mannosylation can also influence the direction of the immune reaction. This was shown by the examples of structurally related mannosylated adamantyl tripeptides and peptidoglycan monomer (PGM) which were biologically evaluated *in vivo*, in mouse model. [4]

References:

- [1] C. Ogawa, Y.-J. Liu, K. S. Kobayashi, *Curr. Bioact. Compd.* 7 (2011) 180–197.
- [2] R. Ribić, L. Habjanec, R. Frkanec, B. Vranešić, S. Tomić, *Chem. Biodivers.* 9 (2012) 1373–1381.
- [3] A. Štimac, S. Šegota, M. Dutour Sikirić, R. Ribić, L. Frkanec, V. Svetličić, S. Tomić, B. Vranešić, R. Frkanec, *BBA-Biomembranes* 1818 (2012) 2252–2259.
- [4] R. Ribić, L. Habjanec, M. Brgles, S. Tomić, J. Tomašić, *Bioorg. Med. Chem.* 17 (2009) 6096–6105.

UP 4

**HIDRAULIČKI DIZAJN KOLONA S RAZDJELNOM
STIJENKOM OPREMLJENIH STRUKTURIRANIM PUNILOM**

**HYDRAULIC DESIGN OF PACKED DIVIDING WALL
COLUMNS**

Igor Dejanović¹, Žarko Olujić², Helmut Jansen³

¹Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije,
Savska cesta 16, HR-10000, Zagreb, Hrvatska
e-mail: ideja@fkit.hr

²TU Delft, Delft, Nizozemska
e-mail: Z.Olujic@tudelft.nl

³Julius Montz GmbH, Hilden, Njemačka
e-mail: h.jansen@montz.de

Destilacijske kolone s razdjelnom stjenkom (KRS) minimiziraju troškove opreme, energije, kao i površine potrebne za izgradnju destilacijskog niza za separaciju triju ili više komponenata. Iako je njihov učinak dokazan u industrijskoj praksi, primjena im je još uvijek ograničena.

KRS je atipična destilacijska kolona, što znači da postoje određene nesigurnosti vezane uz njihov mehanički dizajn, vođenje i moguća ograničenja, koje su glavni razlog njihove nedovoljne primjene [1]. Spomenuti rad ukazuje na mogućnost značajnog proširenja primjene KRS-a, u novim aplikacijama, kao i za preuređenje postojeće opreme, uz značajne uštede energije.

U međuvremenu, brojni su procesni inženjeri stekli znanja i vještine potrebne za dizajn KRS-a uz korištenje komercijalnih procesnih simulatora za određivanje potrebnog broja ravnotežnih stupnjeva i refluksnog omjera. Ono što nije dostupno, su alati za dimenzioniranje KRS-a. Pouzdana metoda hidrauličkog dizajna je neophodna kako bi se rezultati simulacije preveli u potrebne promjere i visinu plašta kolone, kao i detaljan unutarnji raspored sekcija, ovisno o odabranoj vrsti unutarnje opreme (tip punila, raspodjelnika i sabirnika). Isto tako, rigorozan hidraulički proračun je potreban kako bi se na pouzdan način procijenila isplativost novih dizajna ili preuređenja.

U svrhu doprinosa znanju potrebnom za širu primjenu ovaj rad se bavi svim važnim aspektima dimenzioniranja KRS-a, uz pomoć svima dostupnih inženjerskih alata, uz naglasak na odabir opreme i njen detaljan raspored u raspodijeljenim sekcijama, s posebnim naglaskom na važnost izjednačavanja padova tlaka u paralelnim sekcijama.

Literatura:

- [1] H. Jansen, I. Dejanović, Ž. Olujić, Chem. Eng. 121 (2014) 40–48.

UP 5

**UTJECAJ PARAMETARA MIJEŠANJA NA ŠIRINU
METASTABILNE ZONE BORAKSA U ŠARŽNOM
KRISTALIZATORU S DVAMA TURBINSKIM MIJEŠALIMA****IMPACT OF MIXING PARAMETERS ON METASTABLE
ZONE WIDTH OF BORAX IN DUAL IMPELLER BATCH
COOLING CRYSTALLIZER**

Antonija Kačunić, Marija Ćosić, Davor Rušić, Nenad Kuzmanić

Sveučilište u Splitu, Kemijsko-tehnološki fakultet, Zavod za kemijsko inženjerstvo,
Teslina 10/V, 21000 Split, Hrvatska

Jedan od bitnijih čimbenika koji utječe na početak i brzinu nukleacije, a time i na cjelokupan proces kristalizacije je širina metastabilne zone matične otopine. To je zona unutar koje spontana nukleacija još nije moguća, ali čija širina bitno utječe na rast kristala i stabilnost prezasićene otopine. Mogućnost utjecaja na širinu metastabilne zone predstavlja i mogućnost direktnog utjecaja na svojstva kristalnog produkta. S obzirom da s termodinamičkog i kinetičkog aspekta ta zona metastabilnosti nije u potpunosti definirana, u ovom radu je ispitan utjecaj parametara miješanja na njenu širinu i to u procesu kristalizacije dinatrijevog tetraborat dekahidrata (boraksa). Kristalizacija se odvijala u šaržnom kristalizatoru u kojem se matična otopina volumena 15 dm^3 , zasićena na $30 \text{ }^\circ\text{C}$, hladila brzinom od $6 \text{ }^\circ\text{C h}^{-1}$. Omjer visine stupca otopine i promjera kristalizatora (H/d_T) iznosio je 1,3 što je zahtijevalo uvođenje drugog miješala u sustav tj. uporabu dvaju miješala smještenih na istoj osovini. Primijenjena radialna turbinska miješala (tzv. 4-SBT tip miješala) svojom brzinom vrtnje osiguravala su u kristalizatoru stanje potpune suspenzije. Eksperimentalna ispitivanja su provedena s različitim promjerima miješala (D/T) te pri različitim omjerima c/D (omjer udaljenosti donjeg miješala od dna posude i promjera miješala), različitim vrijednostima s/D (omjer međusobne udaljenosti miješala i promjera miješala) kao i pri različitim vrijednostima N/N_{JS} (omjer brzine vrtnje miješala i brzine vrtnje koja osigurava stanje potpune suspenzije). Promjena koncentracije matične otopine boraksa kontinuirano je praćena Na -ion selektivnom elektrodom uz uporabu Ag/AgCl elektrode kao referentne elektrode.

Rezultati navedenih ispitivanja ukazuju da u šaržnom kristalizatoru s dvama turbinskim miješalima, uz brzinu hlađenja matične otopine, geometrijske karakteristike korištenih miješala, njihova pozicija kao i udaljenost miješala na zajedničkoj osovini te brzina vrtnje miješala imaju značajan utjecaj na vrijednost maksimalne apsolutne prezasićenosti, a samim tim i na vrijednost brzine nukleacije.

UP 6

SINTEZA OKSAZOLIDINONA DINAMIČKOM KINETIČKOM REZOLUCIJOM KATALIZIRANOM HALOGENHIDRIN DEHALOGENAZOM

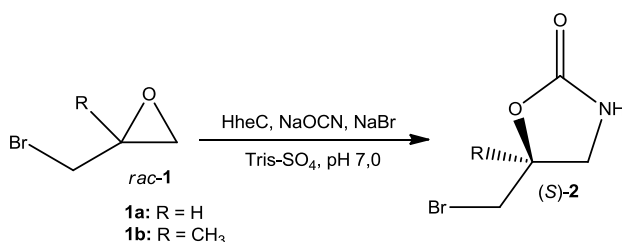
OXAZOLIDINONE SYNTHESIS THROUGH THE HALOHYDRIN DEHALOGENASE CATALYSED DYNAMIC KINETIC RESOLUTION

Ana Mikleušević*, Maja Majerić Elenkov, Zdenko Hameršak

Institut Ruder Bošković, Bijenička cesta 54, 10 000 Zagreb, Hrvatska

Dinamička kinetička rezolucija (DKR) može se koristiti za deracemizaciju, a bazira se na kombinaciji kinetičke rezolucije (KR) racemata s *in situ* racemizacijom sporije reagirajućeg enantiomera. Enzimski katalizirana racemizacija je dobar izbor za dinamičku kinetičku rezoluciju jer se izvodi pri sobnoj temperaturi, neutralnom pH, atmosferskom tlaku i visoke je kemooselektivnosti. Halogenhidrin-dehalogenaze su jedinstveni enzimi koji simultano kataliziraju i racemizaciju i kinetičku rezoluciju određenih derivata halogenhidrina. [1]

Razvijen je vrlo učinkovit postupak za DKR kataliziranu sirovim enzimskim ekstraktom halogenhidrin-dehalogenaze iz *Agrobacterium radiobacter* AD1 (HheC). [2] Postupak je jednostavan, brz i ekonomičan. HheC katalizirana reakcija epibromhidrina **1a** i **1b** s natrijevim cijanatom, u prisutnosti katalitičke količine natrijeva bromida, rezultirala je 5-supstituiranim 2-oksazolidinonima (*S*)-**2a** i (*S*)-**2b** u visokom iskorištenju (97 % i 87 %) i visoke optičke čistoće (89 % i > 99 % *ev*).



Literatura:

- [1] J.H. Lutje Spelberg, L. Tang, R. Kellogg, D.B. Janssen, *Tetrahedron-Asymmetr.* 15 (2004) 1095–1102.
- [2] M. Majerić Elenkov, L. Tang, A. Meetsma, B. Hauer, D.B. Janssen, *Org. Lett.* 10 (2008) 2417–2420.

* Sadašnja adresa: PLIVA Hrvatska d.o.o., Prilaz baruna Filipovića 25, 10000 Zagreb, Hrvatska.

UP 7

**OBRADA OTPADNIH VODA IZ PROIZVODNJE MASLINA:
BIORAZGRADNJA I UČINKOVITOST**

**TREATMENT OF OLIVE MILL WASTEWATER:
BIODEGRADATION AND EFFICIENCY**

Dajana Kučić, Marija Vuković Domanovac, Felicita Briški

Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije,
Zavod za industrijsku ekologiju, Marulićev trg 19, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: dkucic@fkit.hr

U posljednjih desetak godina u Republici Hrvatskoj te u drugim mediteranskim zemljama bilježi se znatan porast proizvodnje maslinovog ulja i usporedno s time povećanje nastalog otpada i otpadnih voda. Sastav i količina otpada ovisi o postupku dobivanja maslinovog ulja. Otpadne vode karakterizira visoko organsko opterećenje i sadržaj suspendiranih tvari te su izrazito toksične zbog visoke koncentracije fenola. Nadalje, pokazuju nisku pH-vrijednost, visoku vodljivost i tamne su boje zbog prisutnosti lignina i tanina. Sve stroži zakonski propisi vezani uz kvalitetu obrade otpadnih voda potaknuli su potrebu za unaprjeđenjem i uvođenjem novih tehnologija koje su učinkovite, ekonomski isplative te ekološki prihvatljive. Primjenjuju se različiti fizikalno-kemijski i biološki postupci obrade industrijskih otpadnih voda, kao što su adsorpcija, elektrokoagulacija, flokulacija, koagulacija te obrada aktivnim muljem.

Cilj ovog rada je bio biološki obraditi otpadnu vodu, nastalu kontinuiranim procesom proizvodnje maslinovog ulja, aktivnim muljem u SBR-u radnog volumena 5 dm^3 s protokom zraka od $1,5 \text{ dm}^3 \text{ min}^{-1}$. Vrijednost KPK/BPK omjera iznosio je 1,74 što ukazuje da je voda biološki razgrađiva. S obzirom da je takva voda visoko opterećena organskom tvari ($\text{KPK} > 100 \text{ g dm}^{-3}$) te iznimno toksična ($\text{TII}_{50} = 313$), prije postavljanja pokusa razrijedila se na početne koncentracije od 5 i 10 g dm^{-3} . Početne koncentracije aktivnog mulja su iznosile 3 i 5 g dm^{-3} . Tijekom procesa obrade pratili su se različiti čimbenici, kao što su pH-vrijednost, vodljivost, KPK, koncentracije otopljenog kisika, fenola i aktivnog mulja.

Dobiveni rezultati ukazuju da aktivni mulj učinkovito uklanja organsko opterećenje i fenole iz industrijskih otpadnih voda dobivenih proizvodnjom maslinovog ulja. Postotak uklonjene organske tvari, kao i fenola, iznosio je između 80 i 90 % čime su postignute vrijednosti niže od graničnih vrijednosti emisije otpadnih voda za ispuštanje u sustav javne odvodnje. Međutim, intenzitet boje otpadne vode se nije smanjio te bi se trebala provesti daljnja istraživanja.

UP 8

**UTJECAJ SUPSTITUENATA NA OTPORNOST DERIVATA
BARBITURNE KISELINE NA KLOORIRANJE HIPOKLORNOM
KISELINOM.
KVANTNO-KEMIJSKA STUDIJA**

**INFLUENCE OF VARIOUS MOIETIES ON RESISTANCE OF
DERIVATIVES OF BARBITURIC ACID IN REACTION OF
CHLORINATION WITH HYPOCHLOROUS ACID.
QUANTUM-CHEMICAL STUDY**

Pavica Šonjić, Tana Tandarić, Davor Šakić, Valerije Vrček

Farmaceutsko-biokemijski fakultet, A. Kovačića 1, 10000 Zagreb
e-mail: pavica.sonjic@gmail.com, tana.tandarić@gmail.com

Pojava lijekova u okolišu u posljednjih je dvadesetak godina postala goruća ekološka tema. Većina ih dopijeva u okoliš zbog nepotpunog uklanjanja u postrojenjima za pročišćavanje otpadnih voda, gdje su najčešće izloženi oksidativnim procesima kloriranja i ozonolize. Poseban problem predstavljaju perzistentni lijekovi koji su otporni na razgradnju, biološku i kemijsku, pa se nakupljaju u okolišu zadržavajući svoja farmakološka svojstva. U skupini perzistentnih spojeva nalaze se barbiturati, antiepileptici čije koncentracije u vodama iznose i do 6 µg/L. Istraživanja su pokazala da se tijekom kloriranja, odnosno kemijske obrade otpadnih voda, struktura barbiturata ne mijenja.[1] Kako bismo objasnili kemijsku inertnost barbiturata prema kloriranju, upotrijebili smo standardne kvantno-kemijske metode za opis reakcija odabranih barbiturata s hipoklornom kiselinom (HOCl). Na B3LYP teorijskoj razini detaljno je prikazan mehanizam reakcije kloriranja barbiturata koji su supstituirani različitim skupinama (alkili, cikloalkenili ili fenili vezani na C5 položaju). Gibbsove energije solvatacije izračunate su koristeći CPCM solvatacijski model na odgovarajućoj teorijskoj razini s UFF atomskim radijusom i elektrostatskim skalarnim faktorom 1,1, što je standardna vrijednost u Gaussian09 programu. Izračunate energije barijera za kloriranje iznose preko 150 kJ/mol, što ukazuje na kinetičku stabilnost barbiturata. Kod barbiturata supstituiranih elektronegativnim skupinama (-F, -Cl, -CN, -NO₂) na C5 položaju, energije barijera za kloriranje niže su i do 30 kJ/mol. Izračuni su provedeni i s drugim elektron- odvlačućim skupinama. Dobiveni rezultati ukazuju da kemijska sudbina barbiturata, npr. u postrojenjima za obradu voda, ovisi o vrsti supstituenata na C5-položaju. Ovo istraživanje otvara mogućnost dizajna novih barbiturata koji su lakše razgradivi u okolišu i, prema tome, imaju povoljniji ekotoksikološki profil.

Literatura:

- [1] M. Peschka, J.P. Eubeler, T.P. Knepper, Environ. Sci. Technol. 40 (2006) 7200–7206.

UP 9

POTENCIOMETRIJSKO PRAĆENJE RAZGRADNJE NATRIJEVOG DODECILBENZENSULFONATA NAPREDNIM OKSIDACIJSKIM PROCESOM

POTENTIOMETRIC DETERMINATION OF SODIUM DODECYLBENZENESULFONATE DECOMPOSITION BY ADVANCED OXIDATION PROCESS

Dubravka Madunić-Čačić¹, Zdravka Lovinčić Kraljević¹,
Ana Lončarić Božić²

¹Saponia, Chemical, Pharmaceutical and Foodstuff Industry,
Matije Gupca 2, 31000 Osijek, Croatia
e-mail: dubravka.madunic-cacic@saponia.hr

²University of Zagreb, Faculty of Chemical Engineering and Technology,
Marulićev trg 19, 10000 Zagreb, Croatia

Surfactants are used in varieties of industrial cleansing processes as well as in consumer products. Spent surfactants normally enter domestic or industrial wastewater. Resistance of some surfactants to biodegradation, their toxicity and environmental persistence are emerging concerns [1].

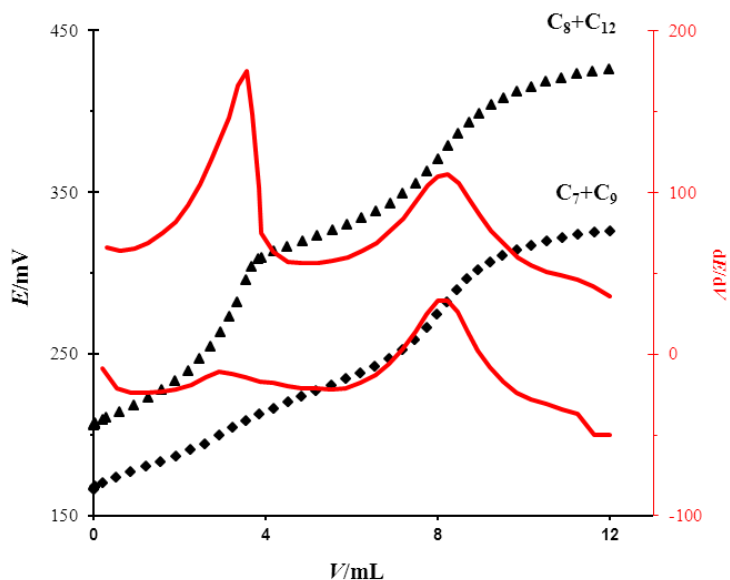


Figure 1. Titration curves and their corresponding first derivatives of two-component model mixtures of alkan sulfonates using potentiometric sensor based on 1,3-didecyl-2-methylimidazolium-teraphenylborate as a sensing material, and 1,3-didecyl-2-methylimidazolium chloride ($c = 2 \text{ mmol L}^{-1}$) as a titrant.

The importance of hydroxyl radical ($\text{HO}\cdot$) reactions in degradation of recalcitrant water pollutants has been recognised and advanced oxidation processes are viewed as potentially convenient and economical way for treatment of water loaded with different chemical wastes [2]. This study reports the development of potentiometric method for monitoring of decomposition of sodium dodecylbenzenesulfonate (NaDBS), anionic surfactant (AS) which are not easily biodegradable at higher concentrations or under anaerobic conditions [3,4]. For that purpose photo assisted advanced oxidation process UV-C/ H_2O_2 was applied. The results obtained in potentiometric titrations with self made ionic surfactant sensitive liquid membrane electrode with Nernstian response for dodecylbenzenesulfonate (DBS) and dodecylsulfate [5] agreed with those obtained by the official method for determination of AS in wastewater based on spectrophotometry of methylene blue active substances (MBAS) [6,7]. The sensor enables the titration of shorter hydrocarbon chain AS as well as differential titration of two-component AS mixtures whose chain lengths differ for at least 2 carbon atoms (Figure 1). The results of determinations are expressed as NaDBS concentration, which is conventionally used as a standard AS for the MBAS method.

References:

- [1] K. Ikehata, M.G. El-Din, *Ozone Sci. Eng.* 26 (2004) 327–343.
- [2] J.J. Pignatello, E. Oliveros, A. MacKay, *Crit. Rev. Environ. Sci. Tech.* 36 (2006) 1–84.
- [3] E. Manousaki, E. Psillakis, N. Kalogerakis, D. Mantzavinos, *Water Res.* 38 (2004) 3751–3759.
- [4] J. Sanz, J. I. Lombrana, A. de Luis, *Chem. Eng. J.* 215–216 (2013) 533–541.
- [5] D. Madunić-Čačić, M. Sak-Bosnar, R. Matešić-Puač, Z. Grabarić, *Sensor Lett.* 6 (2008) 339–346.
- [6] D. Madunić-Čačić, M. Sak-Bosnar, M. Samardžić, Z. Grabarić, *Sensor Lett.* 7 (2009) 50–56.
- [7] ISO 7875-1:1996 Water Quality - Determination of Surfactants - Part 1: Determination of Anionic Surfactants by Measurement of the Methylene Blue Index (MBAS), International Standardization Organization, Geneva, Switzerland.

UP 10

KARAKTERIZACIJA FUNKCIONALNIH MATERIJALA NA NANOSKALI: AFM VIŠE OD OSLIKAVANJA**NANOSCALE CHARACTERISATION ON FUNCTIONAL MATERIALS: AFM BEYOND IMAGING**

Suzana Šegota

Ruđer Bošković Institute, Division for Marine and Environmental Research,
Bijenička 54, 10000 Zagreb, Croatia
e-mail: ssegota@irb.hr

Materials and devices at the nanoscale hold vast promise for innovation in virtually every industry and public endeavor including health, electronics, transportation, the environment and national security [1–3]. The atomic force microscope (AFM) belongs to the broad family of scanning probe microscopes in which a proximal probe is exploited for investigating properties of surfaces with subnanometre resolution. AFM has been found to provide useful information on the multitude of its applications in fundamental and applied research (biology, chemistry and biophysics). The possibilities of spectroscopic analysis, surface modification and molecular manipulation gave rise to a real breakthrough in the realm of AFM use. The use of mild imaging conditions opened the way to dynamic studies in which conformational changes and molecular interactions could be followed in real time at single-molecule level. AFM is widely viewed as the most significant technological frontier currently being employed in material science [4–7]. In these cases AFM is an excellent technique to characterize morphology of obtained films, including the possibility of resolving defects on the nanometre scale. Not only structural properties can be investigated, but also mechanical or chemical and functional properties are the focus of many AFM applications. The possibility of resolving phase separation, distinguishing areas with different mechanical or surface charge properties and identifying the presence of different phases is related to the high vertical resolution of AFM in liquid environments [8–9]. Also, broad application of AFM stems from its ability to follow biogeochemical processes [10] in environment on various interfaces by monitoring the surface morphology through the surface images acquired at nanoresolution.

References:

- [1] A. Noy, *Handbook of Molecular Force Spectroscopy*, Springer, New York, 2008.
- [2] S. Amelinckx, D. van Dyck, J. van Landuyt, G. van Tendeloo, *Handbook of Microscopy, Methods*, Wiley-VCH, Weinheim, 1997.
- [3] P.C. Braga, D. Ricci, *Atomic Force Microscopy: Biomedical Methods and Applications*, Humana Press Inc., Totowa, 2004.
- [4] S. Šegota, L. Čurković, D. Ljubas, V. Svetličić, I. Fiamengo Houra, N. Tomašić, *Ceram. Int.* 37 (2011) 1153–1160.
- [5] L. Čurković, D. Ljubas, S. Šegota, I. Bačić, J. *Alloys Compd.* 604 (2014) 309–316.
- [6] K. Mehulić, V. Svetličić, S. Šegota, D. Vojvodić, I. Kovačić, D. Katanec, N. Petričević, D. Glavina, A. Čelebić, *Coll. Antropol.* 34 (2010) 235–238.
- [7] S. Ercegović Ražić, R. Čunko, V. Svetličić, S. Šegota, *Mater. Technol.* 26 (2011)146–152.
- [8] S. Šegota, D. Vojta, G. Pletikapić, G. Baranović, *Chem. Phys. Lipids* 186 (2015)17–29.

- [9] A. Štimac, S. Šegota, M. Dutour Sikirić, R. Ribić, L. Frkanec, V. Svetličić, S. Tomić, B. Vranešić, R. Frkanec, *BBA-Biomembranes* 1818 (2012) 2252–2259.
- [10] I. Sondi, B. Salopek-Sondi, S. Škapin, D. Srečo, S. Šegota, I. Jurina, B. Vukelić, J. *Colloid Interf. Sci.* 354 (2011) 181–189.

UP 11

**KARAKTERIZACIJA I *IN VITRO* ISPITIVANJE
BIOKOMPATIBILNOSTI NOVOG
SUPRAMOLEKULARNOG GELA**

**CHARACTERIZATION AND *IN VITRO* BIOCOMPATIBILITY
ASSESSMENT OF NEWLY DEVELOPED
SUPRAMOLECULAR GEL**

Lejla Ferhatović Hamzić¹, Tihomir Pospišil², Leo Frkanec², Marija Lovrić¹, Srećko Gajović¹

¹Croatian Institute for Brain Research, School of Medicine, University of Zagreb,
Šalata 3, 10000 Zagreb, Croatia
e-mail: mlovric@hiim.hr

²Laboratory of Supramolecular and Nucleoside Chemistry, Ruđer Bošković Institute,
Bijenička 54, 10000 Zagreb, Croatia

Hydrogel biomaterials, closely mimicking the three-dimensional extracellular matrix, are considered to be an ideal material for cell and tissue scaffolding applications. The dynamic nature of the noncovalent hydrogels fibril network allows the hydrogel material to spontaneously adjust to the surrounding environment and the cells to migrate through the matrix comparing to covalent hydrogels whose pores are chemically constrained and relatively inflexible.

A new type of such noncovalent supramolecular gel, the self-assembling peptide (SAP) hydrogel has been designed and synthesized. Spontaneous assembly of low molecular weight tripeptides that form extensive hydrogen bonds and π - π stacking under physiological conditions results the formation of hydrogel fibrous material.

Series of experiments have been performed in order to assess *in vitro* biocompatibility of the novel material. HEK293T cells have been used as a reproducible model cell line and were cultured following established proliferation protocols. Survival and proliferation of HEK293T cells encapsulated within SAP gel have been evaluated by using Live/Dead® Cell Viability assay and PicoGreen DNA quantification assay. Analysis was performed on 0 and 5 days upon encapsulation. Results showed high viability and high proliferation rate of the cells distributed throughout the SAP hydrogel structure.

The obtained material was proved to serve as stabile and biocompatible physical support in improving HEK293T cells biological outcome *in vitro*. Furthermore, these results suggest further development of designed three-dimensional engineered tissue culturing system as well as evaluation of *in vitro* biocompatibility and bioactivity on the neural stem cells in order to be investigated for brain tissue engineering application.

The study was supported by EU FP7 grant GlowBrain (REGPOT–2012–CT2012–316120).

UP 12

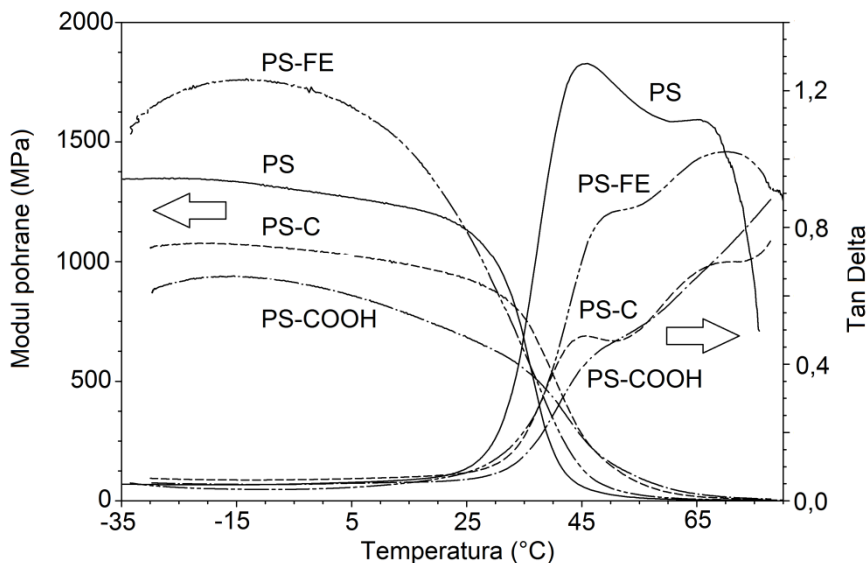
POBOLJŠANJE DISPERZIVNOSTI UGLJIKOVIH NANOCIJEVI U POLISTIRENU KEMIJSKOM FUNKCIONALIZACIJOM

IMPROVED DISPERSION OF FUNCTIONALIZED CARBON NANOTUBES IN POLYSTYRENE

Fabio Faraguna, Elvira Vidović, Ante Jukić

Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije,
Marulićev trg 19, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: ffaragun@fkit.hr

Osnovni problem pripreme polimernih kompozita je postizanje dobre raspodjele i dobre interakcije (prijenosa naprezanja, topline s polimerne matrice na punilo) između punila i polimerne matrice. Prilikom rada s nanopunilom uz dobru raspodjelu potrebno je postići i dobru dispergiranost, što podrazumijeva izbjegavanje aglomeriranja pojedinačnih nanočestica zbog njihove velike površinske energije. Kod ugljikovih nanocijevi dolazi do njihova „sljepljivanja“ te stvaranja svežnjeva. Kovalentnom funkcionalizacijom nanocijevi može se riješiti navedeni problem. U ovom radu za pripremu nanokompozita korištene su nefunkcionalizirane (C), oksidirane (COOH) i fenetil-ester funkcionalizirane (FE) ugljikove nanocijevi. Praćen je utjecaj navedenih funkcionalnih skupina na poboljšanje: dispergiranosti, raspodjele nanocijevi u polimernoj matrici, mehaničkih (DMA) i toplinskih (DSC) svojstava nanokompozita. Ispitan je i utjecaj prisutnosti nanocijevi na mehanizam reakcije polimerizacije, odnosno raspodjelu molnih masa polimera (SEC).



Slika 1. Rezultati DMA; najviši modul pohrane ima nanokompozit s fenetil-ester funkcionaliziranim nanocijevima.

UP 13

**OSTVARIVANJE ISHODA UČENJA U NASTAVI KEMIJE
KOD DJECE S POSEBNIM POTREBAMA****THE REALIZATION OF THE LEARNING OUTCOMES
IN TEACHING CHEMISTRY TO THE CHILDREN
WITH SPECIAL EDUCATIONAL NEEDS**Vlatka Husetović¹, Olgica Martinis²¹OŠ grofa Janka Draškovića, Vrapčanska 7, 10100 Zagreb, Hrvatska
e-mail: vlatka.husetovic@gmail.com²Agencija za odgoj i obrazovanje, Donje Svetice 38, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: olgica.martinis@azoo.hr

Danas se pred učitelje kemije postavlja sve češće novi izazov u poučavanju kemije: *Kako razumjeti i prihvatiti učenika s posebnim odgojno-obrazovnim potrebama? Na koji način oblikovati nastavu kemije za učenike s posebnim potrebama? Koja su znanja i vještine učitelja kemije potrebna za uspješno poučavanje djece s posebnim potrebama? Zbog sve većeg broja učenika kojima je potreban individualizirani pristup i prilagođeni program iz kemije, nameće se potreba za stručnim usavršavanjem odgojno-obrazovnih djelatnika i svih sudionika nastavnog procesa vezano za razvijanje alata za rad. Cilj je oblikovanje nastave kemije prema individualnim sposobnostima učenika ovisno o njegovom zdravstvenom stanju [1].* Podrobno i stalno pripremanje za nastavu kemije uključuje i pažljivo odabrane metode rada te prilagodbe razine usvojenosti kemijskih sadržaja za svakog učenika s posebnim potrebama. Uz navedeno, kontinuirana suradnja učitelja kemije i podrška stručne službe škole te roditelja, garancija je uspješne nastave kemije za djecu s posebnim potrebama. Stoga će tijekom izlaganja biti predstavljen primjer dobre prakse u OŠ grofa Janka Draškovića u Zagrebu. Provedba nastavnog programa za djecu s posebnim potrebama u toj školi provodi se niz godina, a izlaganje će biti potkrijepljeno prikazom radnih listića s prilagođenim sadržajem koje prati „banka pojmova“. Radni materijali rezultat su provedene inicijalne procjene koji upućuje na obrazovne potrebe učenika i usmjerava učitelja na odabir odgovarajuće didaktičko-metodičke podrške. Konačni cilj ovakvoga načina rada je osposobljavanje učenika za samostalan rad i život prema osobnim sposobnostima učenika sukladno obrazovnoj inkluziji [2]. Nadalje će tijekom izlaganja biti riječi i o *didaktičko-metodičkim značajkama nastavnog listića za obradu nastavne jedinice „Fizikalna svojstva sumpora“ u osmom razredu osnovne škole?* [3].

Literatura:

- [1] Đ. Ivančić, Diferencirana nastava u inkluzivnoj školi: procjena, poučavanje i vrednovanje uspješnosti učenika s teškoćama, Alka script, Zagreb, 2010.
- [2] J. Kudek Mirošević, M. Granić, Uloga edukacijskog rehabilitatora – stručnog suradnika u inkluzivnoj školi, Alfa d. d., Zagreb, 2014.
- [3] M. Pernar, R. Vladušić, S. Šimičić, N. Štiglić, E. Kovač, A. Lopac Groš, M. Ožić, V. Husetović, Kemija 7 i 8: priručnik za učiteljice i učitelje kemije za sedmi i osmi razred osnovne škole, Profil, Zagreb, 2014.

UP 14

DODATNA NASTAVA S NADARENIM UČENICIMA
ADDITIONAL CLASSES WITH GIFTED STUDENTSVesna Vrček¹, Mihaela Vrbnjak Grđan²

¹Graditeljska, prirodoslovna i rudarska škola, Hallerova aleja 3, 42000 Varaždin, Hrvatska
e-mail: vesna.vrcek@gmail.com

²VI. osnovna škola Varaždin, Dimitrija Demetra 13, 42000 Varaždin, Hrvatska
e-mail: mihaela.vrbnjak@gmail.com

Jedna od važnih zadaća učitelja je, da u heterogenom razrednom odjelu, uoči darovite učenike i potiče razvoj njihove darovitosti izradbom programa u skladu s njihovim sklonostima i interesima. Dva najčešća pristupa koja se koriste za potrebe darovitih učenika u osnovnoj školi su: izradba i realizacija posebnog ili obogaćenog odgojno – obrazovnog programa i akceleracija programa [1]. Pravilnik o osnovnoškolskom odgoju i obrazovanju darovitih učenika obvezuje učitelje i stručne suradnike osnovne škole da uoče i procijene darovitost pojedinog učenika što se često ne događa upravo zbog velikog broja učenika u razrednom odjelu ili zbog prikrivenosti darovitosti emocijama, osobnošću, niskim samopoštovanjem ili specifičnim teškoćama u učenju [2].

Visoke sposobnosti i kreativnost bez motivacije ne mogu doći do izražaja i upravo zato su u Varaždinskoj županiji osnovani Centri izvrsnosti koji razvijaju: opće intelektualne sposobnosti, stvaralačke sposobnosti, sposobnosti za pojedina nastavna i znanstvena područja i psihomotorne sposobnosti. Centar izvrsnosti za kemiju okuplja darovite učenike zainteresirane za kemiju. Cilj Centra izvrsnosti iz kemije je razviti naviku opažanja, kritičkog promišljanja o opaženom, donošenja zaključaka i samostalnih odluka. Kemija kao predmet služi kao idealan objekt na kojem se mogu razviti vještine i sposobnosti. U Centru izvrsnosti nastava kemije temelji se na pokusima i problemskim zadacima [3], a gradivo koje se obrađuje nadilazi gradivo redovne nastave, čime se učenicima pruža uvid u nove znanstvene spoznaje kao i mogućnost osobnog angažmana u traženju i obradi znanstvenih spoznaja. Učenici mogu predložiti teme koje ih posebno zanimaju, te u skladu s time nastavnik prilagodi aktivnosti. Polaznici Centra izvrsnosti za kemiju biraju se, nakon prijave, eliminacijskim ispitom na početku školske godine koji sastavljanju nastavnici kemije bez potpore psihologa, a obuhvaća gradivo prethodnih razreda te problemske zadatke. U Centru izvrsnosti dozvoljava se posebno darovitim učenicima da rade u starijim grupama, da rade samostalno, a često i na način jedan mentor jedan učenik, što osigurava potpuno individualizirani pristup svakom pojedinom učeniku prema njegovim potrebama.

Literatura:

- [1] Nastavni plan i program za osnovnu školu, Ministarstvo znanosti obrazovanja i športa, Zagreb, 2006. (temeljem čl. 22 Zakona o osnovnom školstvu, „Narodne novine“ broj 59/90., 26/93., 27/93., 29/93., 7/94., 59/01. i 76/05.)
- [2] Pravilnik o osnovnoškolskom odgoju i obrazovanju darovitih učenika, Ministarstvo prosvjete i kulture, Zagreb, 1991. (temeljem čl. 28. Stavak 2. i čl. 29. Stavak 3. Zakona o osnovnom školstvu; NN broj 59/1990)
- [3] M. Sikirica, Metodika nastave kemije – priručnik za nastavnike kemije, Školska knjiga, Zagreb, 2002.

UP 15

**AFIRMATIVNA NASTAVA I INOVATIVNO UČENJE I
POUČAVANJE U GIMNAZIJAMA U OKVIRU HRVATSKOG
KVALIFIKACIJSKOG OKVIRA, IPAQ PETA**

**AFFIRMATIVE AND INNOVATIVE LEARNING AND
TEACHING IN GYMNASIUMS BASED ON THE CROATIAN
QUALIFICATIONS FRAMEWORK, IPAQ PETA**

Dubravka Turčinović, Marijana Žgela

V. gimnazija, Klaićeva 1, 10000, Zagreb, Hrvatska
e-mail: mzgela@gmail.com

Projekt IPAQ Peta razvio se iz želje nastavnika da pokušaju uskladiti nastavne programe s potrebama učenika i zahtjevima vremena u kojem živimo. Naime, mladim ljudima gotovo je nemoguće naći zaposlenje nakon završetka školovanja – djelomice zbog općeg nedostatka prilika za zapošljavanje, a djelomice zbog činjenice da u školama razvijaju pretežno teorijsko znanje te ne razvijaju praktične vještine.

Cijeli projekt počiva na europskim preporukama, dio je šireg procesa modernizacije sustava obrazovanja i u skladu je s ciljevima određenim u Hrvatskom kvalifikacijskom okviru (HKO), a kao specifični ciljevi projekta postavljeni su:

1. Razvoj i modernizacija obrazovnog sustava i kvalifikacija u gimnazijama
2. Modernizacija postojećih i razvoj naprednih kurikula za gimnazije temeljenih na ishodima učenja
3. Razvoj nastavnih kapaciteta za provedbu inovativnog učenja i poučavanja

Projektini tim sastavljen je od profesora iz zagrebačke V. gimnazije i partnerskih institucija iz raznih dijelova Hrvatske: gimnazije Vukovar, gimnazije Metković, srednje škole Pakrac, srednje škole Lovre Montija iz Knina i Prirodoslovno-matematičkog fakulteta u Zagrebu.

Analizirajući sve veći broj znanstvenih radova u području edukacije, uočeno je da rezultati govore u prilog nastavi usmjerenoj na učenika. Nastavnik time iz uloge predavača prelazi u ulogu organizatora, menadžera, mentora, instruktora i suradnika. U skladu s tim je kroz godinu i pol dana trajanja projekta osmišljeno i razvijeno 7 potprojekata: 1. Istraživanje i rekreacija u prirodi (IRUP), 2. Projektna nastava – održivi razvoj (PN), 3. Nastavne metode u biologiji i kemiji (NM), 4. Oblikovanje urbanog okoliša (UED), 5. Matematika, 6. Informatika, 7. Fizika. Kroz navedene potprojekte su prošireni i modernizirani kurikuli iz kemije, biologije, fizike, matematike i informatike, te stvorena tri potpuno nova interdisciplinarna kurikula – IRUP, PN i UED.

Svi materijali razvijeni u sklopu projekta su na internetskim stranicama projekta <http://ipaq.petagimnazija.hr/>, i javno su dostupni svima zainteresiranima za njihovo korištenje, te se nadamo se da će se i nakon završetka projekta nastaviti s razvojem novih materijala na zadovoljstvo učenika i nastavnika.

UP 16

LJEPOTA KRISTALNIH PLOHA
THE BEAUTY OF CRYSTAL FACES

Ernest Meštrović¹, Alen Bjelopetrović², Lucija Papa², Karlo Meglič², Tomislav Lež², Toni Lijić², Zvonimir Matutinović¹, Aleksandar Višnjevac³, Krešimir Molčanov³, Vladimir Stilinović²

¹PLIVA Istraživanje i razvoj, Prilaz baruna Filipovića 29, Zagreb

e-mail: Ernest.Mestrovic@pliva.com

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

³Institut „Ruđer Bošković“, Bijenička 29, Zagreb

Povodom obilježavanja 2014. godine kao Svjetske godine kristalografije, Hrvatska udruga kristalografa i Hrvatska kristalografska zajednica u suradnji s PLIVOM i Kemijskim odsjekom Prirodoslovno-matematičkog fakulteta u Zagrebu, osmislila je i realizirala prvo hrvatsko natjecanje u rastu kristala, pod nazivom Ljepota kristalnih ploha.

Kako bi se osiguralo minimalno poznavanje kemije potrebno za natjecanje, u istom su sudjelovali učenici koji su se već susreli s nastavom kemije, odnosno učenici sedmih i osmih razreda osnovnih škola, te učenici srednjih škola.

Zadatak natjecatelja temeljen je na pripravi kristala anorganske soli, organske tvari ili kristala unutar kristala; što veće mase, bistrine i pravilnosti ploha, iz unaprijed dostavljene količine materijala. Za kristalizaciju su odabrane tvari s kojima su se učenici susreli tijekom ranijeg školovanja – modra galica, limunska kiselina, te kromova i aluminijska stipsa. Vrijeme kristalizacije bilo je ograničeno na dva mjeseca.

Pored temeljnih ciljeva natjecanja, upoznavanja učenika s kristalima, kristalnim rastom i kristalografijom, kao i povećanja njihovog interesa za bavljenje kemijom i znanosti općenito, postignuto je upoznavanje učenika s osnovama laboratorijskog rada, odnosno korištenjem laboratorijskog pribora i kemikalija, vođenjem detaljnih bilješki i opisa pokusa u laboratorijskom dnevniku, kao i važnosti kritičkog razmišljanja i vrednovanja vlastitih rezultata.

Postignut je neočekivano dobar odaziv. Na natjecanje je prijavljeno više od 100 škola s ukupno 465 natjecatelja podijeljenih u 155 timova. To je pokazatelj velikog interesa učenika prema kemiji i izvođenju pokusa, što je osnovni preduvjet za donošenje zaključaka na temelju vlastitih rezultata. Ovo je također pokazatelj spremnosti mentora na proširivanje nastavnih sadržaja, u cilju boljeg usvajanja gradiva i proširivanja znanja učenika.

Za objektivnu valorizaciju podataka razrađena je metodologija koja je uključivala ocjenu kvalitete dobivenih kristala uz poseban osvrt na vođenje laboratorijskih dnevnika.

UP 17

**INTEGRIRANA NASTAVA NA JEZERIMA
PARKA MAKSIMIRA**

**INTEGRATED TEACHING ON THE LAKES OF
PARK MAKSIMIR**

Lana Šarić¹, Marijan Varga²

¹OŠ Remete, Remete 99a, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: ana.saric2712@gmail.com

²OŠ Retkovec, Aleja Javora 2, 10040 Zagreb, Hrvatska

Premda su već pedagozi humanisti (Komensky, Locke, Rousseau) stavljali naglasak na potrebe povezivanja nastave s učenikovim okruženjem, terenska se nastava, kao pedagoški pojam, spominje tek u novijoj literaturi [1]. Nastavni sadržaji, predloženi kao primarni izvor znanja, postaju vidljivi, opipljivi i zanimljiviji što uzrokuje njihovo lakše pamćenje.

Učenik je nositelj aktivnosti što kod njega povećava motivaciju i interes za rad [2]. Nastavni se sadržaji usvajaju ne samo na razini činjenica već se učenike, kroz timski rad i rad na terenu, osposobljava za razumijevanje i otkrivanje svijeta u kojem žive čime dolazi do razvoja samostalnosti i upornosti u radu [3] – cijeloživotno učenje.

Kroz tri etape terenske nastave na jezerima parka Maksimira (pripremna, izvedbena i zaključna) dolazi do integracije prirodnih i društvenih znanosti: kemije, biologije, geografije, povijesti, matematike, informatike i hrvatskog jezika te građanskog odgoja i obrazovanja. Nastava se provodila u periodu od 2009. – 2014. godine tijekom kojih su prikupljeni podaci o fizikalno – kemijskim parametrima vode i okoliša [4] pet maksimirskih jezera i potoka Blizneca. Učenici su rezultate analiza opisali te prikazali tablično i grafički.

Literatura:

- [1] Ž. Lukša, M. Žamarija, T. Dragić Runjak, N. Sinković, Ed Bi. 1 (2014) 69–79.
- [2] L. Bognar, M. Matijević, Didaktika, Školska knjiga, Zagreb, 2001.
- [3] M. Sikirica, Metodika nastave kemije, Školska knjiga, Zagreb, 2003.
- [4] B.Mihanović, I. Perina, Fizikalno i kemijsko ispitivanje zagađenosti vode, Školska knjiga, Zagreb, 1982.

UP 18

**PERCEPCIJE UČENIKA O UPORABI MREŽNO
POTPOMOĞNUTIH MATERIJALA ZA POUČAVANJE
OSNOVNIH KEMIJSKIH POJMOVA**

**STUDENTS' PERCEPTIONS ON THE USE OF WEB-BASED
LEARNING MATERIAL FOR TEACHING FUNDAMENTAL
CHEMICAL CONCEPTS**

Ines Nuić¹, Saša Aleksij Glažar²

¹Univerzitet u Sarajevu, Prirodno-matematički fakultet,
Zmaja od Bosne 33-35, Sarajevo, Bosna i Hercegovina
e-mail: ividovic@pmf.unsa.ba

²Univerza v Ljubljani, Pedagoška fakulteta,
Kardeljeva ploščad 16, Ljubljana, Slovenia
e-mail: sasa.glazar@guest.arnes.si

Johnstone je još 1982. godine iznio potrebu poučavanja kemije na tri spoznajne razine kemijskih pojmova: makroskopskoj, submikroskopskoj i simboličkoj [1]. U ovom radu predstavljeni su rezultati pilot istraživanja provedenog školske 2013./2014. godine o uporabi mrežno potpomognutih materijala za učenje kemije na razini osnovne škole, s naglaskom na makroskopsku i submikroskopsku razinu predstavljanja kemijskih pojmova.

Ispitanici su bili 68 učenika osmoga razreda (uzrasta 13–14 godina) jedne osnovne škole na području grada Sarajeva. Podaci su prikupljeni uporabom upitnika Ocjena nastavnog sata [2] i Izvedba nastavnog sata [3] baziranih na ljestvici Likertova tipa, provedenih nakon poučavanja odabranih osnovnih kemijskih pojmova primjenom mrežno potpomognutih materijala za učenje.

Rezultati su pokazali općenit pozitivan dojam učenika o primjeni ovih materijala za učenje kemije što sugerira daljnja istraživanja primjene ovih materijala pri poučavanju drugih kemijskih i općenito prirodoslovnih pojmova.

Literatura:

- [1] A.H. Johnstone, *School Science Review* 64 (227) (1982) 377–379.
- [2] M. Vrtačnik, Ocjena učne ure, in *Interim Report V5-0424: Analiza dejavnika, ki vplivajo na trajnejše znanje z razumevanjem naravoslovno-tehniških vsebin*, Pedagoška fakulteta Univerze v Ljubljani, Ljubljana, 2010.
- [3] M. Jurišević, J. Vogrinc, S.A. Glažar, Izvedba učne ure, in *Interim Report V5-0424: Analiza dejavnika, ki vplivajo na trajnejše znanje z razumevanjem naravoslovno-tehniških vsebin*, Pedagoška fakulteta Univerze v Ljubljani, Ljubljana, 2010.

UP 19

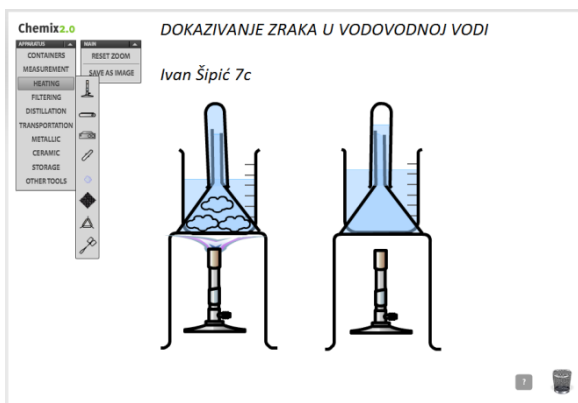
**VIZUALIZACIJA KEMIJSKE APARATURE POMOĆU
RAČUNALNOG PROGRAMA U SVRHU
RAZUMIJEVANJA NJEZINE FUNKCIJE****VISUALISATION OF CHEMISTRY LABORATORY
EQUIPMENT USING A SOFTWARE TOOL IN ORDER
TO UNDERSTAND ITS FUNCTION**

Ivana Marić Zerdun

OŠ Trilj, Poljičke republike 18, 21240 Trilj, Hrvatska
e-mail: imzerdun@gmail.com

Vizualizacija u nastavi kemije učenicima je od izuzetne pomoći u približavanju i razumijevanju apstraktnih pojmova. Međutim, ukazala se potreba i za vizualizacijom konkretnih pojmova. Tijekom provođenja ispita znanja iz kemije u sedmom razredu, učenici su pogrešno rješavali zadatak u kojem su trebali navesti posuđe i pribor koje kemičar koristi u opisanom postupku. Zašto je ovaj nastavni sadržaj težak mojim učenicima? Kako umanjiti njihove pogreške? Zbog neopremljenosti škole, kao moguće rješenje provela sam edukaciju učenika uporabom računalnog programa Chemix 2.0. Chemix 2.0 je besplatni online 'softver' za jednostavno dizajniranje laboratorijske aparature, što je osiguralo brži, atraktivniji i kvalitetniji put do usvajanja i razumijevanja. Nakon edukacije svi su učenici na vrijeme i s lakoćom crtali aparature pokusa za domaći rad. Vizualizacija i način na koji se koristi 'softver' povećala je sposobnost učenika da zadrži pozornost, poveća interes i pojmove približi stvarnosti.

Primjer:



Najbolji uratci i provedba bit će prezentirani u kratkom priopćenju.

UP 20

UPORABA ČESTIČNOG CRTEŽA PRI PROVJERI KONCEPTUALNE RAZINE ZNANJA U NASTAVI KEMIJE

USING OF PARTICULATE DRAWING IN TESTING OF CONCEPTUAL KNOWLEDGE IN TEACHING CHEMISTRY

Sanda Šimičić¹, Draginja Mrvoš-Sermek²

¹OŠ Split 3, Bruna Bušića 6, 21 000 Split, Hrvatska
e-mail: sandasimicic@yahoo.co.uk

²Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek,
Zavod za opću i anorgansku kemiju, Horvatovac 102 a, 10 000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: mrvos@chem.pmf.hr

Čestični crtež predstavlja koristan vizualizacijski alat primjenjiv na svim obrazovnim razinama poučavanja kemije na različite načine i s različitom svrhom pri: *analizi i provjeri usvojenosti kemijskih sadržaja i pojmova, otkrivanju pogrešnih predkonceptata i alternativnih konceptata, unapređenju usvajanja kemijskih znanja do konceptualnog razumijevanja sadržaja i pojmova.*

U edukacijskim istraživanjima provedenim i opisanim tijekom posljednja tri desetljeća čestični crtež se najčešće koristi u dijagnostičke i evaluacijske svrhe kroz mnoga područja kemije: vrste tvari, fizikalna svojstva tvari, fizikalne i kemijske promjene, građa tvari; vodene otopine soli, kiselina i baza; jednadžba kemijske reakcije, taložne reakcije, redoks-reakcije, elektrokemija i stehiometrija [1]. Ostanu li rezultati tih istraživanja nepoznati široj nastavničkoj populaciji, jer ih i udžbenički materijali sporo slijede, njihov željeni utjecaj na nastavnu praksu izostaje. Tijekom radionice bit će stoga predstavljeni:

- primjeri najcitiranijih čestičnih crteža kao alata u provjeri razine znanja uz uporabu sustava za glasovanje 'klikera'.
- rezultati dijela našeg preliminarnog dijagnostičkog istraživanja temeljenog na hipotezi da su učenici uspješniji u rješavanju problema koji zahtijevaju čitanje čestičnog prikaza nego li u njihovom samostalnom crtanju i translaciji čestičnog prikaza u simbolički zapis.

Istraživanje je provedeno u razdoblju od listopada 2013. do travnja 2015. godine a provjeravano je temeljno znanje iz područja *jednadžba kemijske reakcije i vodene otopine soli, kiselina i baza*, na reprezentativnom uzorku populacije učenika osmih razreda u Splitu, Rijeci i Zagrebu. Ispitni materijali konstruirani su iz literaturno poznatih i vlastitih konceptualnih zadataka. Čestičnim crtežom koji su učenici morali sami nacrtati da bi objasnili makroskopske događaje otkriven je niz poteškoća u učenikom shvaćanju temeljnih kemijskih pojmova. Rezultati su poslužili za osmišljavanje i provedbu akcijskog istraživanja kako uporabom čestičnog crteža unaprijediti poučavanje navedenih područja, koje je još u tijeku.

Literatura:

- [1] S.G. Prilliman, J. Chem. Educ. 91 (2014) 1291–1298.

UP 21

SPEKTAR BOJA KEMIJE

SPECTRE OF CHEMISTRY COLOURS

Sonja Rupčić Petelinc, Biserka Zdjelarević, Sanja Žužek

Prirodoslovna škola Vladimira Preloga, 10000 Zagreb, Hrvatska

e-mail: sonja.petelinc@gmail.com, biserkazdjelarevic@yahoo.com, sanja.zuzek@zg.t-com.hr

Indikator (lat. *indicator*) u kemiji jest tvar koja se rabi da bi svojom bojom pokazala prisutnost neke druge kemijske tvari, najčešće određenih iona, u otopini. U nastavi kemije uglavnom se koriste kiselobazni indikatori. To su kompleksni organski prirodni ili sintetski spojevi koji mogu postojati u dva ravnotežna, različito obojena oblika, a položaj ravnoteže ovisi o koncentraciji oksonijevih i hidroksidnih iona. Za određivanje kiselosti ili lužnatosti neke otopine, u osnovnoj i srednjoj školi se tijekom izvođenja učeničkih pokusa najčešće koriste crveni i plavi lakmusov papir, univerzalni indikatorski papir, azo-indikatori metiloranž i metilno crvenilo i ftaleinski indikatori fenolftalein i timolftalein. Nastojeći proširiti učeničke interese za ovo područje, konkretizirati opća znanja i povezati ih sa stvarnim životom, osmišljen je niz eksperimenata u kojima se koriste neuobičajeni sintetski i prirodni indikatori.

Sintetski indikatori: **Metilensko modrilo** je tetrametiltionin-klorid, fenotiazinski spoj, zelenomodra kristalna tvar metalna sjaja, najvažniji predstavnik (bazičnih) tijazinskih bojila. Lako se reducira u bezbojan oblik pa kao akceptor vodika i kemijski indikator služi u istraživanju bioloških reakcija. Ovim se indikatorom može, primjerice, odrediti količina živih bakterija u uzorcima mlijeka. **Crvena lužina** je otopina natrijevog hidroksida i fenolftaleina. Ovim indikatorom se kod preuzimanja mlijeka od proizvođača redovito ispituje kiselost mlijeka. Smjesa crvene lužine i mlijeka ima crvenu boju koja nestaje kada je mlijeko kiselije od stupnja kiselosti za koji je priređen indikator. **Univerzalni indikator Yamadin** je otopina timolskog plavog, metilnog crvenila, bromtimolskog plavog i fenolftaleina u etanolu. Boje ove indikatorske smjese, ovisno o pH vrijednosti sustava, mijenjaju se od ljubičaste u lužnatom mediju preko indigo, plave, zelene, žute, narančaste do crvene u kiselom mediju.

Prirodni indikatori: **Mnoge biljke, odnosno biljni pigmenti**, u prirodi djeluju kao indikatori kiselosti ili lužnatosti. Biljni pigmenti koji se najčešće nalaze u staničnim organelima su klorofil A i B (zeleni), ksantofili (žuti), karotenoidi (narančasti), flavonoidi i antocijanini (crveni, plavi i ljubičasti). Antocijanini daju boju plodovima, primjerice, trešnje, crnog i crvenog grožđa, cvjetovima, hibiskusa i ljubičice, te listovima crvenoga kupusa. Antocijanini se ponašaju kao indikatori pH-vrijednosti. Ovisno o kiselosti ili lužnatosti otopine mijenja boju od crvene, ljubičaste, plave i zelene do žute, što je nizom eksperimenata i dokazano.

Literatura:

- [1] D.A. Skoog, D.M. West, F.J. Holler, Osnove analitičke kemije, Školska knjiga, Zagreb, 1999.
- [2] V. Rapić, Postupci pripreme i izolacije organskih spojeva; Školska knjiga, Zagreb 1994.
- [3] R. Božanić, I. Jeličić, T. Bilušić, Analiza mlijeka i mliječnih proizvoda: priručnik, Plejada, Zagreb, 2010.

UP 22

**MEĐUMOLEKULSKE INTERAKCIJE –
POGREŠNO RAZUMIJEVANJE KONCEPTA****INTERMOLECULAR FORCES –
MISUNDERSTANDING OF CONCEPT**Nikola Škvorc¹, Draginja Mrvoš-Sermek²

¹Gimnazija i ekonomska škola Benedikta Kotruljevića, Ul. Sveti Duh 129, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: nikolaskvorc11@gmail.com

²Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek,
Zavod za opću i anorgansku kemiju, Horvatovac 102a, 10 000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: mrvos@chem.pmf.hr

Rezultati edukacijskih istraživanja ukazuju na učestalost pogrešnog učeničkog shvaćanja koncepta međumolekulskih interakcija, što dovodi i do pogrešnog shvaćanja osnovnih fizikalnih i kemijskog promjena. Učenički izvori informacija koji se temelje na vlastitom iskustvenom znanju i često neprikladnoj udžbeničkoj literaturi mogu dovesti do stvaranja predkonceptata i pogrešnog shvaćanja temeljnih kemijskih pojmova, a ne smije se zanemariti ni utjecaj poučavanja bez mentalnog izazova. Navedeni čimbenici onemogućuju učeniku daljnji napredak u pravilnom usvajanju novih kemijskih sadržaja, a usvojeni "miskoncepti" zadrže se najčešće trajno.

Najčešća učenička pogrešna shvaćanja koncepta međumolekulskih interakcija mogu se sažeti na sljedeće pretpostavke: *veze među molekulama ne postoje* (postoji samo ionska i kovalentna veza); *molekule su međusobno povezane kovalentnom vezom*; *vodikova veza je kovalentna veza u molekuli u kojoj sudjeluje atom vodika*; *u ionskim kristalima molekule su povezane van der Waalsovom silama*; *jake veze među molekulama određuju fizikalna svojstva atomskih kristala* [1–3].

Uvažavajući te spoznaje, dan je prijedlog obrade nastavnog sata o jakosti međumolekulskih interakcija primjeren uzrastu učenika prvog razreda gimnazije. Vodeći se strategijom učenja otkrivanjem, predložen je pokus uz pripadajući radni listić za učenike, te pripremu za nastavnike. Predloženi nastavni sat moguće je izvesti u redovitoj nastavi, jer su potreban pribor, kemikalije i vrijeme provedbe primjereni predmetnom kurikulumu [4,5].

Literatura:

- [1] G. Miller, Ending Misconceptions About Inter- and Intramolecular Forces, University of California, Irvine, 2014.
- [2] M.B. Nakhleh, J. Chem. Educ. 69 (1992) 191–195.
- [3] K. Taber, Chemical misconceptions – prevention, diagnosis and cure, Volume I: theoretical background, Royal Society of Chemistry, London, 2002.
- [4] E.C. Person, D. Golden, J. Chem. Educ. 12 (2010) 1332–1335.
- [5] N. Škvorc, Međumolekulske interakcije – učenje otkrivanjem, diplomski rad, Prirodoslovno-matematički fakultet, Zagreb, 2014.

MINI-SIMPOZIJ
VLADIMIR PRELOG
MINI-SYMPOSIUM
VLADIMIR PRELOG

MS 1

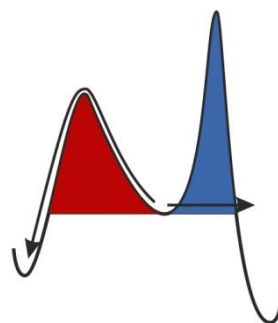
KONTROLA KEMIJSKIH REAKCIJA TUNELIRANJEM [1–3]

TUNNELING CONTROL OF CHEMICAL REACTIONS [1–3]

Peter R. Schreiner

Justus-Liebig University, Institute of Organic Chemistry,
 Heinrich-Buff-Ring 58, 35392 Giessen, Germany
 e-mail: prs@uni-giessen.de

Chemical reactivity is traditionally understood [4,5] in terms of kinetic versus thermodynamic control [6,7], wherein the driving force is the lowest activation barrier among the possible reaction paths or the lowest free energy of the final products, respectively. Here we expose quantum mechanical tunneling as a third driving force that can overwrite traditional kinetic control and govern reactivity based on nonclassical penetration of the potential energy barriers connecting the reactants and products. These findings are exemplified with the first experimental isolation and full spectroscopic and theoretical characterization of the elusive hydroxycarbenes (R–C–OH) [9–11] that undergo facile [1,2]hydrogen tunneling to the corresponding aldehydes under barriers of nearly 30.0 kcal mol⁻¹ with half-lives of around 1–2 h even at 10 K, despite of the presence of paths with substantially lower barriers. We will demonstrate that this is a general phenomenon [12–14], as exemplified by other OH-tunneling examples such as the rotational isomerization of a variety of carbocyclic acids [15,16]. Such tunneling processes do not merely represent corrections to the reaction rate, they *are* the reaction rate, *i.e.*, the completely *control* the reaction outcome [1].



References:

- [1] P.R. Schreiner, H.P. Reisenauer, D. Ley, D. Gerbig, C.-H. Wu, W.D. Allen, *Science* 322 (2011) 1300–1303.
- [2] D. Ley, D. Gerbig, P.R. Schreiner, *Org. Biomol. Chem.* 10 (19) (2012) 3781–3790.
- [3] D. Gerbig, P.R. Schreiner, *Tunneling in the reactions of Carbenes and Oxocarbenes*, John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, 2014.
- [4] H. Eyring, *J. Chem. Phys.* 3 (1935) 107–115.
- [5] M.G. Evans, M. Polanyi, *Trans. Faraday Soc.* 31 (1935) 875–894.
- [6] R.B. Woodward, H. Baer, *J. Am. Chem. Soc.* 66 (1944) 645–649.
- [7] A.G. Catchpole, E.D. Hughes, C.K. Ingold, *J. Chem. Soc.* 11 (1944) 8–17.
- [8] D. Gerbig, H.P. Reisenauer, C.-H. Wu, D. Ley, W.D. Allen, P.R. Schreiner, *J. Am. Chem. Soc.* 132 (2010) 7273–7275.
- [9] D. Gerbig, D. Ley, H.P. Reisenauer, P.R. Schreiner, *Beilstein J. Org. Chem.* 6 (2010) 1061–1069.
- [10] P.R. Schreiner, H.P. Reisenauer, F.C. Pickard IV, A.C. Simmonett, W.D. Allen, E. Mátyus, A.G. Császár, *Nature* 453 (2008) 906–909.
- [11] P.R. Schreiner, H.P. Reisenauer, *Angew. Chem. Int. Edit.* 47 (2008) 7071–7074.
- [12] D. Ley, D. Gerbig, P.R. Schreiner, *Chem. Sci.* 4 (2013) 677–684.

- [13] D. Ley, D. Gerbig, J.P. Wagner, H.P. Reisenauer, P.R. Schreiner, *J. Am. Chem. Soc.* 133 (2011) 13614–13621.
- [14] D. Gerbig, D. Ley, P.R. Schreiner, *Org. Lett.* 13 (2011) 3526–3529.
- [15] S. Amiri, H.P. Reisenauer, P.R. Schreiner, *J. Am. Chem. Soc.* 132 (2010) 15902–15904.
- [16] D. Gerbig, P.R. Schreiner, *J. Phys. Chem. B* 119 (2014) 693–703.

MS 2

KEMIJSKA EVOLUCIJA BAKTERIJSKOG PROTEOMA
CHEMICAL EVOLUTION OF A BACTERIAL PROTEOME

Nediljko Budiša

Berlin Institute of Technology/TU Berlin, Department of Chemistry,
Biocatalysis Group Müller-Breslau-Straße 10, D-10623 Berlin, Germany
e-mail: budisa@chem.tu-berlin.de

Genetic encoding in living systems is based on highly standardized chemistry composed of the same number of “letters” or nucleotides as informational polymers (DNA, RNA) and the 20 α -amino acids as basic building blocks for proteins. The universality of the genetic code enables the horizontal transfer of genes across biological taxa which afford a high degree of standardization and interconnectivity. Thus, all deep chemistry changes within living systems tend to be generally lethal.

In this context, I will argue that one of the greatest challenges for science of 21st century would be finding the way to expand the standard basic chemical repertoire of living cells in order to obtain biocontainment. All basic constituents of DNA are exchangeable with alternative chemical structures such as Xeno-DNA or XNA. On the other hand, one can also design experiments with cells with defined genetic and metabolic configurations to cross the canonical / noncanonical chemical barrier (e.g. by synthetic amino acids).

To perform such a far-reaching experiments, we need a deeper understanding how incorporation of different noncanonical synthetic amino acids affects e.g. translation machinery, protein folding and cell survival in general. I will exemplify this with our studies on proline as the unique imino acid that play critical roles in the biochemistry of peptides and proteins. The focus is to find and to understand the underlying principles which would account both for the variations of the chemical reactivity at the ribosome.

Second example includes chemical evolution of bacteria recently done in my group that lead to changes in the amino acid set of the genetic code of *Escherichia coli*. In particular, we succeeded to evolve cells capable of growing on the synthetic L- β -(thieno[3,2-b]pyrrolyl)-alanine as a sole surrogate for the canonical amino acid L-tryptophan. The creation of the evolved bacteria with new-to-nature amino acid composition illustrates an approach for the evolution of synthetic cells with alternative biochemical building blocks.

Therefore, I anticipate future experiments that combine chemistry, physics and biology in the context of controlled evolution experiments. Doubtless, this will enable the partial or full redirection of informational flow in biology to achieve "new version" of the genetic code.

Reference:

- [1] N. Budisa, *Curr. Org. Chem.* 18 (2014) 936–943.

MS 3

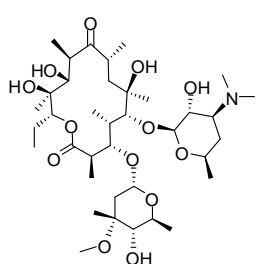
DIZAJN NOVIH ANTIINFLAMATORNIH MAKROLIDA

THE DESIGN OF NOVEL ANTI-INFLAMMATORY MACROLIDES

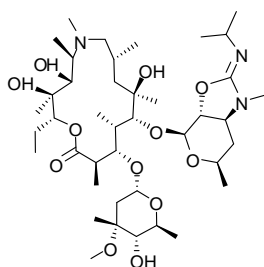
Goran Kragol

Fidelta d.o.o., Prilaz b. Filipovića 29, 10000 Zagreb, Hrvatska

Neutrophil dominated inflammatory diseases present a significant medical problems lacking adequate therapy. Macrolide antibiotics have been reported to be effective in aforementioned diseases unrelated to their anti-bacterial action. This has led to research activities aimed towards a better understanding of immunomodulatory actions of macrolides and the synthesis of various novel anti-inflammatory macrolides without antimicrobial activity. Erythromycin-based macrolide scaffold is still highly predominant template for further derivatization in order to obtain new anti-inflammatory macrocycles. This is not a surprise since erythromycin is available in bulk quantities and is therefore reasonable cheap starting material. Only a few reports regarding new derivatives of other natural macrolides like FK506 (tacrolimus), FK520 (ascomycin), and desmycocin as possible anti-inflammatory agents can be found. In spite of difficult chemistry and lack of a deep knowledge of mechanism action, several exciting molecules from this class, potential clinical candidates, are on the horizon. Moreover, novel macrolide-inspired macrocyclic compounds were designed that show significant potential for hitting anti-inflammatory targets.



Natural antibiotic macrolides
with anti-inflammatory activity,
i.e. erythromycin



Anti-inflammatory macrolides
without antibiotic activity,
i.e. desozamin modification



Macrolide-inspired anti-inflammatory macrocycles

MS 4

PRIPRAVA PIROLO- I PIRIDOINDOLINSKIH JEZGARA U UVJETIMA MEĐUFAZNE KATALIZE

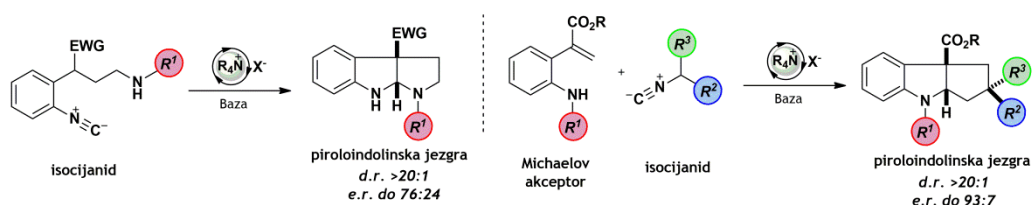
PHASE-TRANSFER CATALYSED SYNTHESIS OF PYRROLO- AND PYRIDOINDOLINES

Matija Gredičak

Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, 10 000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: matija.gredicak@irb.hr

Pirol- i piridoindolinske jezgre sastavni su dijelovi brojnih skupina biološki aktivnih prirodnih spojeva. Na primjer, (–)-fisostigmin je klinički odobren inhibitor acetilkolinesteraze u liječenju glaukoma, mijestenije gravis, Alzheimerove bolesti, te kao protuotrov izlaganja nervnim plinovima, dok (–)-komunesin A pokazuje citotoksičnu aktivnost prema stanicama P-388 murinske limfocitne leukemije.

Postojeće pripreme pirolindolina temelje se na strategijama u kojima su supstrati uglavnom derivati triptofana, triptamina i oksoindola, što ograničava varijabilnost supstituenata i naknadnih modifikacija. U okviru ovog istraživanja razvijena je intramolekulska kaskadna reakcija u kojoj pirolindolini nastaju iz isocijanidnih prekursora u uvjetima međufazne katalize (eng. *phase-transfer catalysis*). Transformacija se odvija diastereoselektivno u baznim uvjetima pri sobnoj temperaturi, uz prisutstvo kvaternih amonijevih soli kao katalizatora. Reakcija je primjenjiva i na pripravu piridoindolinskih jezgara, te je tolerantna na niz supstituenata. Ispitivanja asimetričnog provođenja reakcije upotrebom cinkoninskih i cinkonidinskih katalizatora pokazala su umjeren stupanj enantioselektivnosti, do 76:24 e.r. Ovaj princip je proširen i na kaskadnu dvokomponentnu reakciju u kojoj nastaju pirolindolinske jezgre sa tri stereocentra, uz enantiomerne viškove do 93:7 e.r.



Ispitivanje mehanizama reakcija provedeno je kvatno-kemijskim računom i eksperimentalnim metodama. Utvrđeno je kako je u oba slučaja intramolekulska vodikova veza ključna za aktivaciju i reaktivnost isocijanidne skupine.

Opisani procesi omogućuju brz i stereoselektivan pristup složenim jezgrama prirodnih spojeva, koje mogu naći primjenu kao njihovi analozi ili okosnice u razvoju biološki aktivnih spojeva.

POSTERSKA PRIOPĆENJA
POSTER PRESENTATIONS

A

KEMIJA
CHEMISTRY

P 1

**MODELIRANJE KONSTANTI STABILNOSTI
BAKROVIH(II) KOMPLEKSA S TRIPEPTIDIMA
GLICINA I GLUTAMINSKE KISELINE**

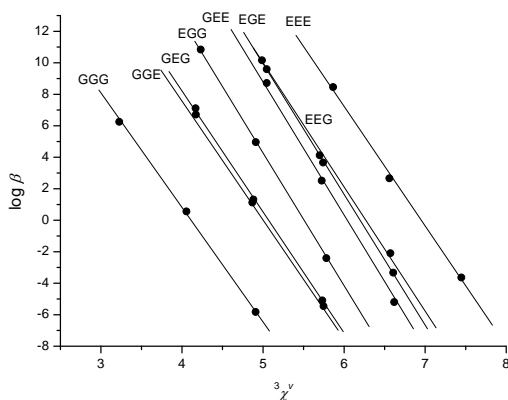
**MODELLING THE STABILITY CONSTANTS OF
COPPER(II) COMPLEXES WITH TRIPEPTIDES
CONTAINING GLYCINE AND GLUTAMIC ACID**

Ante Miličević, Nenad Raos

Institute for Medical Research and Occupational Health, 10001 Zagreb, P.O.B. 291, Croatia
e-mail: antem@imi.hr, raos@imi.hr

Logarithm of stability constants, $\log \beta$, of copper(II) complexes with eight tripeptides containing Glu and Gly was modelled with ${}^3\chi^v$ connectivity index. Measured $\log \beta$ of CuL , CuH_1L , CuH_2L complexes [1] for every ligand upon linear correlation with ${}^3\chi^v$ gave approximately the same slope (figure). This observation led us to an overall model for all complexes and constants ($N = 24$):

$$\log \beta = a_1 [{}^3\chi^v] + a_2 [{}^3\chi^v]_0 + a_3 \log \beta_0 + b$$



Depending on whether CuL , CuH_1L or CuH_2L complexes were taken as referent ($[{}^3\chi^v]_0$, $\log \beta_0$), standard errors of leave-one-out cross validation were 0.58, 0.48 and 0.68, respectively.

Reference:

- [1] R.R. Khoury, G.J. Sutton, D. Ebrahimi, D.B. Hibbert, *Inorg. Chem.* 53 (2014) 1278–1287.

NOVI BENZIMIDAZO[1,2-*a*]KINOLINI KAO pH SENZORI I KEMOSENZORI

NOVEL BENZIMIDAZO[1,2-*a*]QUINOLINES AS pH SENSORS AND CHEMOSENSORS

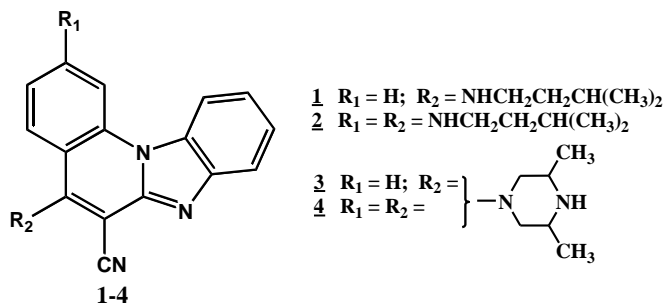
Marijana Hranjec¹, Nataša Perin¹, Ema Horak²,
Zrinka Srdović¹, Sanela Plavljanić¹

¹University of Zagreb, Faculty of Chemical Engineering and Technology,
Department of Organic Chemistry, Marulićev trg 20, 10000 Zagreb, Croatia
e-mail: mhranjec@fkit.hr

²University of Zagreb, Faculty of Chemical Engineering and Technology,
Department of General and Inorganic Chemistry, Marulićev trg 19, 10000 Zagreb, Croatia

In recent years there is a permanent and growing interest in the synthesis of fused, benzannulated benzimidazole derivatives, as a one of the most important groups of nitrogen heterocycles, as a direct consequence of their great importance in the natural, medicinal and environmental sciences. [1] Cyclic benzimidazole derivatives with mostly excellent spectroscopic properties are important for their application in several other areas like optoelectronics or chemosensors, with side chain substituents designed to enable additional interactions with potential biological targets. [2]

For the synthesis of novel benzimidazo[1,2-*a*]quinolines, classical and microwave assisted reactions were used. [3] Due to the highly conjugated planar tetracyclic chromophore, prepared compounds showed interesting spectroscopic properties which were studied by using UV/Vis and fluorescence spectroscopy in several solvents. In addition, to prove their possible analytical applications for the detection of cations in solutions as well as pH sensors, their spectroscopic properties were studied in the presence of different metal cations and depending on different pH of used solution.



References:

- [1] N. Perin, R. Nhili, K. Ester, W. Laine, G. Karminski-Zamola, M. Kralj, M.H. David-Cordonnier, M. Hranjec, *Eur. J. Med. Chem.* 80 (2014) 218–227.
- [2] M. Hranjec, E. Horak, M. Tireli, G. Pavlović, G. Karminski-Zamola, *Dyes Pigments* 95 (2012) 644–656.
- [3] N. Perin, M. Hranjec, G. Pavlović, G. Karminski-Zamola, *Dyes Pigments* 91 (2011) 79–88.

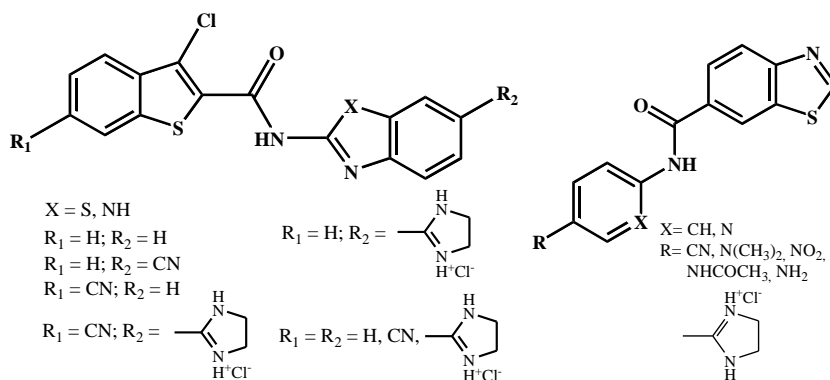
NOVI BIOLOŠKI AKTIVNI AMIDNI DERIVATI BENZIMIDAZOLA I BENZOTIAZOLA

NOVEL BIOLOGICALLY ACTIVE BENZIMIDAZOLE AND BENZOTHIAZOLE AMIDES

Maja Aleksić, Irena Sović, Grace Karminski-Zamola, Jurica Bunjevac,
Maja Šuš, Valentina Rep, Marijana Hranjec

University of Zagreb, Faculty of Chemical Engineering and Technology, Department of Organic
Chemistry, Marulićev trg 20, 10000 Zagreb, Croatia
e-mail: maleksic@fkit.hr

The development of effective antineoplastic drugs has become one of the most intensively studied aspects of contemporary medicinal chemistry and therefore has been tremendous growth in the number and types of new anticancer agents. Substituted heterocyclic amides exhibit wide range of pharmacological activities and have therefore attracted considerable attention from medicinal and synthetic organic chemists. The amide functional moiety is considered to be an important building block present in the structure of many natural and synthetic medical and biochemical agents. As a continuation of our scientific search for potential anticancer agents, we have synthesized novel heteroaromatic 2-benzimidazole and 2- and 5-benzothiazole amides as potential antitumor agents using classical linear and convergent organic synthesis reactions. Antiproliferative activity *in vitro* was tested on several human tumor cell lines. Structures of prepared compounds were confirmed by means of ^1H , ^{13}C NMR, IR and UV spectroscopy.



References:

- [1] M. Hranjec, I. Sović, I. Ratkaj, G. Pavlović, N. Ilić, L. Valjalo, K. Pavelić, S. Kraljević Pavelić, G. Karminski-Zamola, *Eur. J. Med. Chem.* 59 (2013) 111–119.
- [2] M. Aleksić, B. Bertoša, R. Nhili, L. Uzelac, I. Jarak, S. Depauw, M.H. David-Cordonnier, M. Kralj, S. Tomić, G. Karminski-Zamola, *J. Med. Chem.* 55 (2012) 5044–5060.

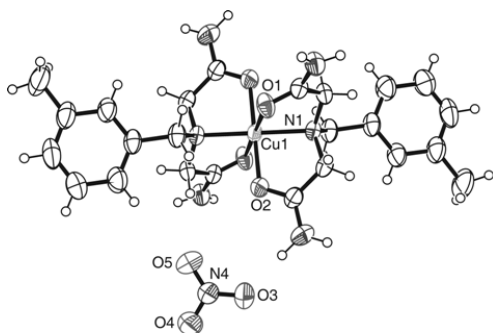
KOMPLEKSI BAKRA(II) I NIKLA(II) S DERIVATIMA N-BENZILIMINODIACETAMIDA

COPPER(II) AND NICKEL(II) COMPLEXES WITH THE N-BENZYLIMINODIACETAMIDE DERIVATIVES

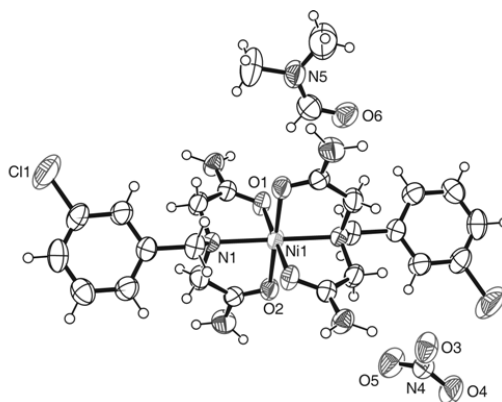
Maja Merkaš, Andrea Lučić, Neven Smrečki,
Boris-Marko Kukovec, Zora Popović

Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek,
Zavod za opću i anorgansku kemiju, Horvatovac 102a, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: merkasmaja@gmail.com

Istražene su reakcije metiliranih i halogeniranih derivata *N*-benziliminodiacetamida (Bnimda) s nitratima bakra(II) i nikla(II) u vodenoj otopini te utjecaj nekoordinirajućeg dijela molekule liganda na svojstva liganada i njihovih kompleksa. Priređeno je 8 liganada (L) opće formule $RN(CH_2CONH_2)_2$, gdje je R *o*-metilbenzil, *m*-metilbenzil, *p*-metilbenzil, *o*-klorbenzil, *m*-klorbenzil, *p*-klorbenzil, *p*-fluorbenzil odnosno *p*-brombenzil. Ligandi su priređeni reakcijom odgovarajućih amina s kloracetamidom u vodenoj otopini, uz kalijev jodid kao katalizator i natrijev karbonat kao bazu. Svi navedeni ligandi daju komplekse analognog sastava $[CuL_2](NO_3)_2$ odnosno $[NiL_2](NO_3)_2$, koji se međusobno razlikuju u sadržaju kristalizacijske vode. Za razliku od bakrova(II) nitrata, niklov(II) nitrat reagira s *m*-ClBnimda samo uz dodatak dimetilformamida (DMF). Svi produkti su karakterizirani infracrvenom spektroskopijom i metodama termičke analize. Molekulske i kristalne strukture spojeva $[Cu(m-MeBnimda)_2](NO_3)_2$ (**1**), $[Cu(m-ClBnimda)_2](NO_3)_2$ (**2**) i $[Ni(m-ClBnimda)_2](NO_3)_2 \cdot 2DMF$ (**3**) riješene su rendgenskom strukturnom analizom. Spojevi su *trans*-izomeri s dva *O,N,O'*-tridentatna iminodiacetamidna liganda koji zauzimaju *fac*-položaj oko središnjeg iona metala.



(1)



(3)

PROTONACIJSKE KONSTANTE AROMATSKIH HIDRAZONA

PROTONATION CONSTANTS OF AROMATIC HYDRAZONES

Tomislav Benković¹, Darko Kontrec², Vladislav Tomišić¹, Nives Galić¹

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

e-mail: tbenkovic@chem.pmf.hr, vtomistic@chem.pmf.hr, ngalic@chem.pmf.hr

²Ruder Bošković Institute, Department of Organic Chemistry and Biochemistry,
Bijenička 54, 10000 Zagreb, Croatia

e-mail: Darko.Kontrec@irb.hr

The protonation constants of aroylhydrazones derived from nicotinic acid hydrazide (Figure 1) were determined in methanol/water 1/1 mixture at 25 °C and ionic strength 0.1 mol dm⁻³ (NaCl). Aroylhydrazones were prepared according to the procedures described elsewhere [1].

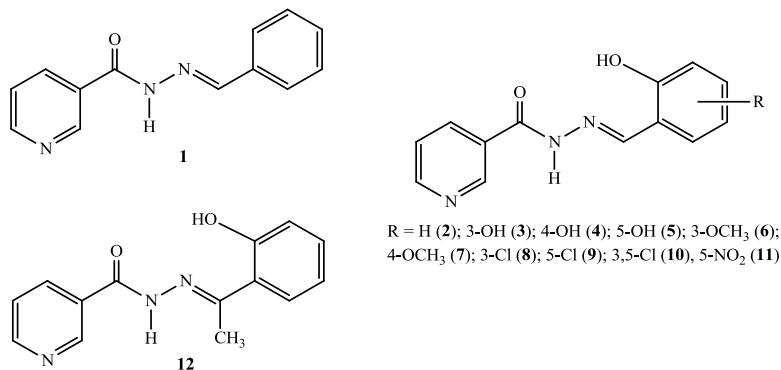


Figure 1. Structures of compounds 1–12.

Considering the fact that aroylhydrazones hydrolyse in water-containing solvents, batch spectrophotometric titrations were carried out. All UV-Vis spectra were recorded within first 3 min following the preparation of solutions. To provide more accurate assignation of the pK values for aromatic hydrazones, comparison with the protonation constants of starting compounds, which were also determined in this work, was made. The pK values assigned to the protonation of amide nitrogen were in the range from 10.5 to 12.9, whereas those corresponding to the *ortho*-hydroxyl group ranged from 6.4 to 8.9. Constants corresponding to the protonation of pyridine nitrogen (which takes place at pH ≤ 2) could not be determined due to the rather fast hydrolysis.

Reference:

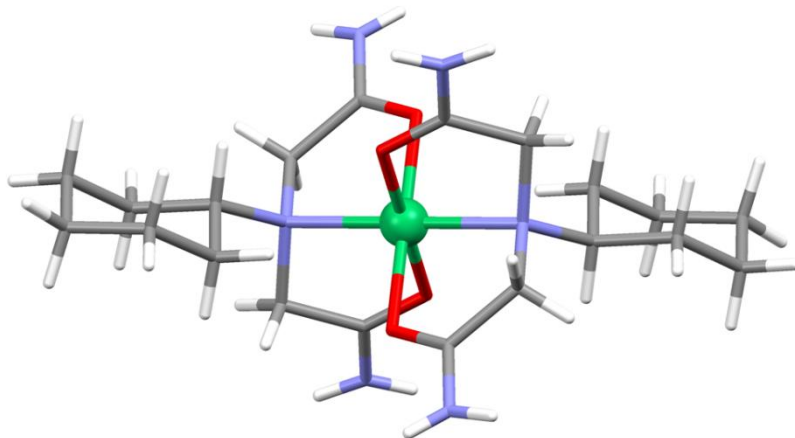
- [1] N. Galić, I. Brođanac, D. Kontrec, S. Miljanić, *Spectrochim. Acta A* 107 (2013) 263–270.

**KOMPLEKSI Co(II), Ni(II) I Cu(II) S
N-CIKLOHEKSILIMINODIACETAMIDOM****Co(II), Ni(II) AND Cu(II) COMPLEXES WITH
N-CYCLOHEXYLIMINODIACETAMIDE**

Ivana Pavličić, Renata Biba, Neven Smrečki, Ivana Pulić,
Dubravka Matković-Čalogović, Zora Popović

Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek,
Zavod za opću i anorgansku kemiju, Horvatovac 102a, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: ivana_pavlicic@hotmail.com

Istražene su reakcije nitrata i sulfata metala kasnog d-bloka (Co(II), Ni(II), Cu(II)) s *N*-cikloheksiliminodiacetamidom ($C_6H_{11}N(CH_2CONH_2)_2$; L). Ligand je priređen alkiliranjem cikloheksilamina s kloracetamidom u vodenoj otopini, uz kalijev jodid kao katalizator i kalijev karbonat kao bazu. Svi nitrati daju s ovim ligandom ionske komplekse analognog sastava $[ML_2](NO_3)_2$ (M = Co, Ni, Cu). Ligand ne reagira s kobaltovim(II) sulfatom, dok s niklovim(II) odnosno bakrovim(II) sulfatom daje produkte koji nisu stabilni na zraku. Ustanovljeno je i da *N*-feniliminodiacetamid ($C_6H_5N(CH_2CONH_2)_2$), kao aromatski analogon dotičnog liganda, pri istim uvjetima reakcije ne daje komplekse ni sa jednom od navedenih soli. Produkti su karakterizirani infracrvenom spektroskopijom i metodama termičke analize. Neki od priređenih kompleksa dodatno su okarakterizirani rendgenskom strukturnom analizom njihovih jediničnih kristala. Koordinacijsko okruženje oko niklova(II) iona u kompleksnom kationu $[NiL_2]^{2+}$ prikazano je na slici.



RAZVOJ RUTENIJEVIH KATALIZATORA ZA ASIMETRIČNU TRANSFER HIDROGENACIJU

DEVELOPMENT OF RUTHENIUM-BASED CATALYSTS FOR ASYMMETRIC TRANSFER HYDROGENATION

Andrea Kišič¹, Michel Stephan², Barbara Mohar¹

¹National Institute of Chemistry, Hajdrihova 19, SI-1001 Ljubljana, Slovenia
e-mail: andrea.kisic@ki.si, barbara.mohar@ki.si

²PhosPhoenix SARL, 115, rue de l'Abbé Groult, 75015 Paris, France
e-mail: mstephan@phosphoenix.com

Ansa-ruthenium(II) complexes of multidentate ligands, wherein the η^6 -arene is tethered to the *N*-sulfamoyl-(*S,S*)-DPEN (DPEN = 1,2-diphenylethylenediamine) from the sulfamoyl terminal leading to complex series **I** and from the amine terminal (transshifted tether) leading to complex series **II**, is presented (Figure 1).[1,2]

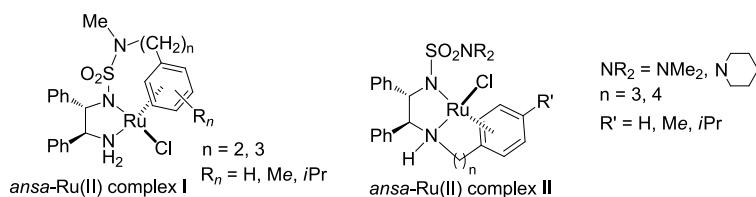


Figure 1. *Ansa*-ruthenium(II) complexes of multidentate ligands.

The ATH using these new *ansa*-Ru(II) complexes was studied on various classes of aryl ketones. In both series, the beneficial effect of the *ansa*-bridge, especially the 3C long tether together with the anchored η^6 -aryl having a *para*-Me or *i*Pr substituent was identified. Extended longevity of the catalytic species and increased enantioselectivity using such complexes was found.

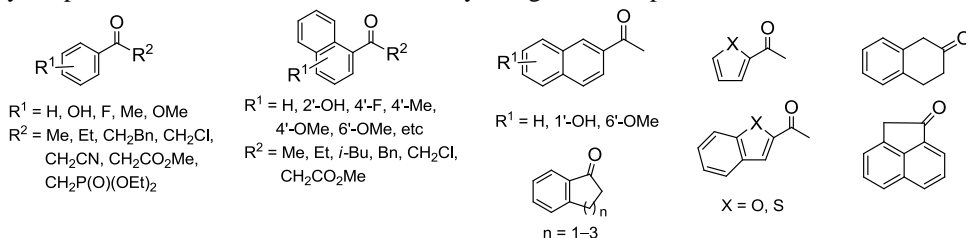


Figure 2. Various classes of aryl ketones evaluated in Ru(II) catalyzed ATH.

References:

- [1] A. Kišič, M. Stephan, B. Mohar, *Org. Lett.* 15 (2013) 1614–1617.
- [2] A. Kišič, M. Stephan, B. Mohar, *Adv. Synth. Catal.* 356 (2014) 3193–3198.

**MIKROEMULZIJA BEZ SURFAKTANTA SASTAVLJENA OD
CITRONELOLA, ETANOLA I VODE****SURFACTANT-FREE MICROEMULSION COMPOSED OF
CITRONELLOL, ETHANOL AND WATER**

Perica Bošković, Darija Eterović, Vesna Sokol

University of Split, Faculty of Chemistry and Technology, Department of Physical Chemistry,
N. Tesle 10, 21000 Split, Croatiae-mail: perica@ktf-split.hr, vsokol@ktf-split.hr

Generally, a microemulsion consists of oil, water, surfactant, and sometimes cosurfactant. Herein, we report a surfactant-free microemulsion [1], consisting of citronellol (oil phase), water, and ethanol without the amphiphilic molecular structure of a traditional surfactant. The phase behavior of the ternary system was investigated, showing that there were a single-phase microemulsion region and a multiphase region in the ternary phase diagram. The electrical conductivity measurement was undertaken to investigate the microregion of the single-phase microemulsion region. On the basis of the percolation theory [2], the single-phase microemulsion region was subdivided into three different microregions: citronellol-in-water (O/W), bicontinuous region and water-in-citronellol (W/O), which structuration were confirmed by dynamic and static light scattering experiments [3]. Dynamic and static light scattering experiments reveal also the presence of nano-droplets in this ternary tincture system.

References:

- [1] D. Smith, C.E. Donelan, R.E. Barden, *J. Colloid Interf. Sci.* 60 (1977) 488–496.
- [2] Y.A. Gao, N. Li, L.Q. Zheng, X.Y. Zhao, S.H. Zhang, B.X. Han, W.G. Hou, Z.G. Li, *Green Chem.* 8 (2006) 43–49.
- [3] J. Marcus, M.L. Klossek, D. Touraud, W. Kunz, *Flavour Fragr. J.* 28 (2013) 294–299.

IN-LINE PRAĆENJE SINTEZE DJELATNE TVARI I KARAKTERIZACIJA PRODUKATA

IN-LINE MONITORING OF API SYNTHESIS AND PRODUCT CHARACTERISATION

Tomislav Jednačak¹, Predrag Novak¹, Ernest Meštrović², Damir Šahnić²,
Jelena Parlov Vuković³

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

e-mail: tjednacak@chem.pmf.hr, pnovak@chem.pmf.hr

²PLIVA Croatia Ltd., Prilaz baruna Filipovića 25, 10000 Zagreb, Croatia

e-mail: Ernest.Mestrovic@pliva.com, Damir.Sahnic@pliva.com

³INA-Industrija Nafta d.d., Refining and Marketing Business Division,
Product Development Department, Lovinčičeva bb, HR-10002 Zagreb, Croatia

e-mail: Jelena.Parlov-Vukovic@ina.hr

In recent years, process analytical technology (PAT) has emerged as one of the key elements to fully implement *in-line* analytical techniques for process monitoring [1]. *In-line* techniques based on vibrational spectroscopy enable *in situ* monitoring of physical and chemical transformations and provide insight into the mixture composition at a given time.

Here we report on using *in-line* Raman spectroscopy for monitoring the synthesis of an active pharmaceutical ingredient (API) shown in Figure 1. This API is used as a selective proton pump inhibitor [2]. Raman spectroscopy was employed for the remote detection through a fibre optic probe which facilitated real-time monitoring of the API synthesis. In order to unambiguously identify the reaction product, the obtained crystals were further evaluated *off-line* using NMR spectroscopy in solution and solid state.

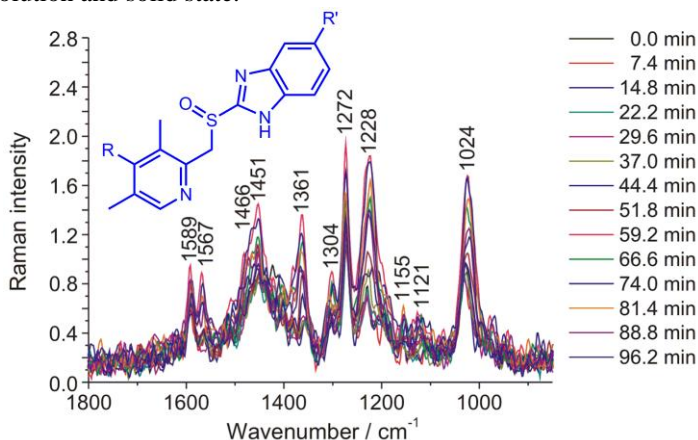


Figure 1. *In-line* Raman spectra of the API synthesis reaction in methanol.

References:

- [1] K.E. Bakeev, *Process Analytical Technology*, Blackwell Publishing Ltd., Oxford, 2005.
- [2] H.D. Langtry, M.I. Wilde, *Drugs* 56 (1998) 447–486.

**PROFILI VRŠNIH PARA MEDA MASLAČKA
(*Taraxacum officinale* Weber): PREVAGA NITRILA**

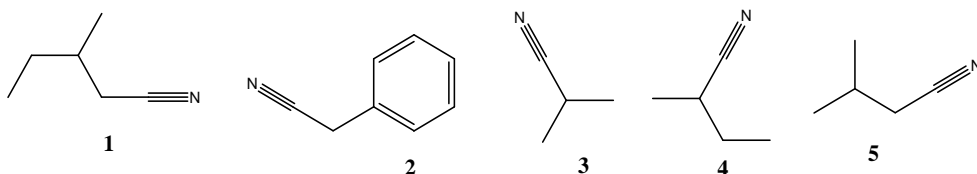
HEDASPACE PROFILES OF DANDELION HONEY (*Taraxacum officinale* Weber): NITRILES ABUNDANCE

Igor Jerković¹, Zvonimir Marijanović², Marina Kranjac¹, Ani Radonić¹

¹University of Split, Faculty of Chemistry and Technology, N. Tesle 10/V, Split, Croatia
e-mail: igor@ktf-split.hr

²Marko Marulić Polytechnic in Knin, Petra Krešimira IV 30, Knin, Croatia
e-mail: zmarijanovic@veleknin.hr

Headspace solid-phase microextraction (HS-SPME) followed by GC-FID/MS was used for screening of dandelion (*Taraxacum officinale* Weber) honey headspace. Two fibers were selected taking into account total number of isolated compounds: DVB/CARB/PDMS and CAR/PDMS. The major dandelion headspace compounds were nitriles such as 3-methylpentanenitrile (**1**) and phenylacetoneitrile (**2**) with minor abundance of 2-methylpropanenitrile (**3**), 2-methylbutanenitrile (**4**) and 3-methylbutanenitrile (**5**).



Total percentage of nitriles was higher on CAR/PDMS fiber in comparison with DVB/CARB/PDMS fiber. 2-Methylpropanenitrile, 2-methylbutanenitrile, 3-methylbutanenitrile, 2-butenenitrile (undetermined isomer), 3-butenenitrile and 3-methylpentanenitrile were previously identified in dandelion honey [1] that is in accordance with our results. Nitriles have also been tentatively found at low concentrations [2] in the honeys from rape (2-methylpropanenitrile), thyme (phenylacetoneitrile), rosemary (3-methylbutanenitrile and phenylacetoneitrile), loquat (several short-chain nitriles) and in Greek cotton honey (neryl and geranyl nitriles).

The research was founded by HRZZ project NaPro-Flav (No. 8547). The work of doctoral student Marina Kranjac has been fully supported by HRZZ.

References:

- [1] A.C. Soria, I. Martínez-Castro, C. de Lorenzo, J. Sanz, *Food Chem.* 107 (2008) 439–443.
[2] I. Jerković, P.M. Kuš, *RSC Advances* 4 (2014) 31710–31728.

**GC-FID/MS PROFILIRANJE SUPERKRITIČNOG CO₂
EKSTRAKTA KORE *Citrus aurantium* L.****GC-FID/MS SCREENING OF SUPERCRITICAL CO₂
EXTRACT OF PEELS FROM *Citrus aurantium* L.**

Igor Jerković¹, Jasmina Družić², Zvonimir Marijanović³, Mirko Gugić³, Stela Jokić⁴, Marin Roje⁵

¹University of Split, Faculty of Chemistry and Technology, N. Tesle 10/V, Split, Croatia
e-mail: igor@ktf-split.hr

²University of Dubrovnik, Department of Mediterranean Crops,
Marka Marojice 4, Dubrovnik, Croatia
e-mail: jasmina.druzic@unidu.hr

³Marko Marulić Polytechnic in Knin, Petra Krešimira IV 30, Knin, Croatia
e-mail: zmarijanovic@veleknin.hr

⁴Josip Juraj Strossmayer University of Osijek, Faculty of Food Technology,
F. Kuhača 18, Osijek, Croatia

⁵Ruder Bošković Institute, Bijenička c. 54, Zagreb, Croatia
e-mail: mroje@irb.hr

The peels of *Citrus aurantium* L. from Dubrovnik region (south Croatia) were extracted first time by supercritical CO₂ (SC-CO₂) at 40 °C and 10 MPa at 1.76 kg/h to obtain enriched extracts in comparison with simple pressing of the peels. The extracts were analyzed in detail by gas chromatography and mass spectrometry (GC-FID/MS). Seven volatiles were found with simple pressing, with monoterpene limonene as predominant (88.2 %), while other abundant compounds were β-myrcene (1.7 %), linalyl acetate (1.8 %) and 7-methoxy-8-(2-formyl-2-methylpropyl)coumarin (2.8 %). SC-CO₂ extraction provided enriched profiles of volatiles and semi-volatiles with respect to oxygenated monoterpene and sesquiterpene as well as coumarin derivatives for all the samples due to the high penetration inside plant materials and solvent power of SC-CO₂ that is known for SFE method [1,2]. Monoterpene hydrocarbons dominated in all the samples, with limonene as predominant compound (54.3 %). The principal oxygenated monoterpenes were linalool (5.9 %), α-terpineol (0.7 %), linalyl acetate (5.0 %), geranyl acetate (0.4 %), (Z)-citral (0.5 %) and (E)-citral (0.7 %). Coumarin derivatives were identified by SC-CO₂ extraction among significant compounds. Isogeijerin (7-methoxy-6-(3-methyl-2-oxobutyl)-2H-1-benzopyran-2-one) dominated (11.2 %). Scoparone (6,7-dimethoxycoumarin) was present with lower abundance (0.1 %). As well as bergapten (0.7 %), osthole (7-methoxy-8-(3-methyl-2-butenyl)coumarin; 0.9 %) and 7-methoxy-8-(2-formylpropyl)coumarin (0.2 %).

The research was founded by HRZZ project NaPro-Flav (No. 8547).

References:

- [1] A. Capuzzo, M.M. Maffei, A. Occhipinti, *Molecules* 18 (2013) 7194–7238.
- [2] B. Mira, M. Blasco, A. Berna, S. Subirats, J. *Supercrit. Fluids* 14 (1999) 95–104.

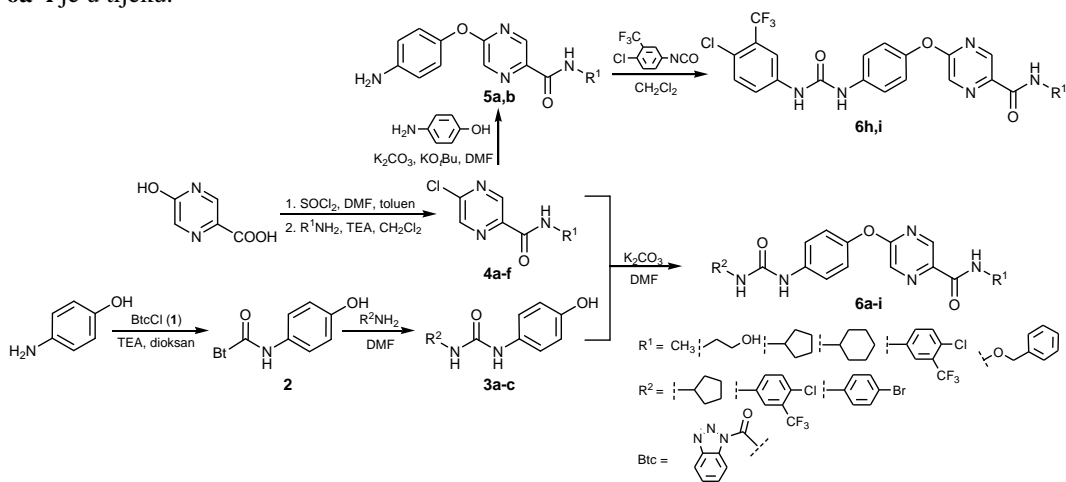
SINTEZA NOVIH PIRAZINSKIH ANALOGA SORAFENIBA

SYNTHESIS OF NOVEL PYRAZINE SORAFENIB ANALOGUES

Zrinka Rajić Džolić, Ivana Perković, Branka Zorc

Sveučilište u Zagrebu, Farmaceutsko-biokemijski fakultet, A. Kovačića 1, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: bzorc@pharma.hr

Sorafenib je noviji citostatik, inhibitor više kinaza uključenih u staničnu proliferaciju i preživljavanje [1]. U ovom radu opisana je sinteza pirazinskih analoga sorafeniba **6a-i**. Početni spoj u sintezi je 5-hidroksi-2-pirazinkarboksilna kiselina, koja se pomoću tionil-klorida, te kasnije odgovarajućeg amina, prevodi u amide **4a-f**. Amidi **4a-f** korišteni su za pripremu difenil-urea u dva različita sintetska puta. Prema prvoj metodi, amidi **4c,d** prevedeni su u eter-amide **5a,b**, koji u reakciji s 4-klor-3-(trifluormetil)fenil izocijanatom daju odgovarajuće difenil-uree **6h,i**. U drugom sintetskom putu korištena je benzotriazolna metoda [2]: klorid 1-benzotriazolkarboksilne kiseline (**1**) reagira s *p*-aminofenolom te nastaje odgovarajući benzotriazolid **2**, koji u idućoj reakciji s aminima daje uree **3a-c**. U posljednjem sintetskom koraku uree **3a-c** reagiraju s amidima **4a-f** i daju konačne produkte **6a-i**. Strukture sintetiziranih spojeva potvrđene su uobičajenim spektroskopskim metodama (IR, ^1H i ^{13}C NMR, MS). Ispitivanje citostatskog djelovanja spojeva **6a-i** je u tijeku.



Literatura:

- [1] S. Wilhelm, C. Carter, M. Lynch, T. Lowinger, J. Dumas, R.A. Smith, B. Schwartz, R. Simantov, S. Kelley, *Nat. Rev. Drug Discov.* 5 (2006) 835–844.
- [2] B. Zorc, Z. Rajić Džolić, I. Butula, *Croat. Chem. Acta* 85 (2012) 595–602.

DENZITOMETRIJSKO ODREĐIVANJE KLOGENATNE KISELINE I FLAVONOIDNIH GLIKOZIDA U DVANAEST VRSTA RODA *HYPERICUM* L.

DENZITOMETRIC DETERMINATION OF CHLOROGENIC ACID AND FLAVONOID GLYCOSIDES IN TWELVE SPECIES OF *HYPERICUM* L. GENUS

Željko Maleš¹, Mirza Bojić², Kroatka Hazler Pilepić¹, Goran Benković³

¹Sveučilište u Zagrebu, Farmaceutsko-biokemijski fakultet, Zavod za farmaceutsku botaniku,
Schrottova 39, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: zmales@pharma.hr, khazler@pharma.hr

²Sveučilište u Zagrebu, Farmaceutsko-biokemijski fakultet, Zavod za farmaceutsku kemiju,
A. Kovačića 1, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: mbojic@pharma.hr

³Hrvatska agencija za lijekove i medicinske proizvode, Ksaverska cesta 4, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: goran.benkovic@halmed.hr

Vrste roda *Hypericum* L. sadrže niz farmakološki aktivnih sastavnica iz skupina flavonoida, fenolnih kiselina, naftodiantrona, floriglucina, trjeslovina i dr., što omogućuje primjenu ovih biljnih droga kao antidepresiva, antioksidansa, neuroprotektiva i antiinflamatorika [1]. U ovom radu određen je sadržaj klorogenatne kiseline te flavonoidnih glikozida kvercitrina, izokvercitrina, rutina i hiperozida tankoslojnom kromatografijom.

Analizirano je dvanaest vrsta roda *Hypericum*: *H. delphicum* Boiss & Heldr, *H. densiflorum* Pursh, *H. forrestii* N. Robson, *H. hircinum* L., *H. kouytchense* H. Lév., *H. linarifolium* Vahl,

H. oblongifolium Choisy, *H. olympicum* L., *H. patulum* Thunb. Ex Murray, *H. pseudohenryi* N. Robson, *H. triquetrifolium* Turra i *H. yezoense* Maxim. Uzorci su pripremljeni ekstrakcijom metanolom (1 g praška biljne droge na 10 mL metanola). Poredbene otopine klorogenatne kiseline i flavonoida pripremljene su otapanjem u metanolu (1 mg/mL). Odjeljivanje je provedeno primjenom mobilne faze etil-acetat : formijatna kiselina : acetatna kiselina : voda (100 : 11 : 11 : 26 V/V/V/V) na silikagelu GF₂₅₄. Ploče su nakon sušenja na zraku analizirane pomoću uređaja CAMAG TLC Scanner 3. Identifikacija je temeljena na faktorima zadržavanja i UV-Vis spektru *in situ*, a određivanje na osnovi kalibracijskih krivulja poredbenih otopina.

Klorogenatna kiselina dokazana je i određena u svim uzorcima, a sadržaj se kretao između 4 mg/g (*H. densiflorum*) i 20 mg/g (*H. pseudohenryi*). Kvercitrin je dokazan u 11 uzoraka, izokvercitrin u 10, hiperozid u sedam te rutin u šest uzoraka. Najveći sadržaj flavonoida zabilježen je u uzorcima sljedećih vrsta: *H. yezoense* (kvercitrin – 4 mg/g, izokvercitrin – 1 mg/g), *H. patulum* (rutin – 2 mg/g) i *H. linarifolium* (hiperozid – 2 mg/g).

Literatura:

- [1] Ž. Maleš, M. Plazibat, V. Bilušić Vundać, I. Žuntar, K. Hazler Pilepić, JPC-J. Planar Chromat. 17 (2004) 280–285.

ODREĐIVANJE PASIVNE PERMEABILNOSTI FLAVONOIDA NA IMOBILIZIRANIM UMJETNIM MEMBRANAMA HPLC METODOM

DETERMINATION OF PASSIVE PERMEABILITY OF FLAVONOIDS ON IMMOBILIZED ARTIFICIAL MEMBRANES BY HPLC

Mirza Bojić¹, Goran Benković², Hrvoje Rimac¹, Irena Žuntar¹, Željko Maleš¹

¹Sveučilište u Zagrebu, Farmaceutsko-biokemijski fakultet,
A. Kovačića 1, 10000 Zagreb, Hrvatska

e-mail: mbojic@pharma.hr, hrimac@pharma.hr, izuntar@pharma.hr, zmales@pharma.hr

²Hrvatska agencija za lijekove i medicinske proizvode,

Ksaverska cesta 4, 10000 Zagreb, Hrvatska

e-mail: goran.benkovic@halmed.hr

Flavonoidi su derivati bezno- γ -pirona s benzenskom jezgrom vezanom na položaju 2 ili 3. Raznolikosti ovoj skupini spojeva daje hidroksilacija osnovne jezgre te njihova metilacija i glikozidacija istih. Ova skupina spojeva pokazuje pozitivne učinke na zdravlje u vidu antibakterijskog, antivirusnog, fungistatskog, hepatoprotektivnog i imunomodulacijskog djelovanja. Osnovni problem koji ograničava značajniju primjenu flavonoida u praksi je njihova slaba topljivost. Posljedično za mnoge flavonoide nedostaju parametri koji opisuju njihovu apsorpciju, distribuciju, metabolizam i eliminaciju.

U ovom radu ispitana je pasivna permeabilnost 27 flavonoidnih aglikona na imobiliziranim umjetnim membranama s fosfatidilkolinom HPLC metodom. Ispitivanje je provedeno na IAM.PC.DD2 koloni (100×4,6 mm, 12 μ m) primjenom gradijentne metode (mobilna faza A – 0,05 M kalijev dihidrogenfosfat pH 3,0; mobilna faza B - metanol) sa sljedećim rasporedom (t / min, % B): (0, 5), (15, 80), (20, 80), (21, 5), (25, 5). Detekcija je provedena UV-detektorom na valnoj duljini $\lambda = 280$ nm. [1]

Rezultat je iskazan kao logaritamska vrijednost faktora zadržavanja ($\log k_{IAM}$). Najniže $\log k_{IAM}$ pokazuju fisetin (0,696), eriodiktiol (0,702) i daidzein (0,736) dok najviše vrijednosti pokazuju lipofilniji metilirani derivati kao što su pinocembrin-7-metileter (0,980), apigenin-trimetileter (0,950) i krizin-dimetileter (0,941).

Kako vrijednosti $\log k_{IAM}$ dobro koreliraju s prolazom tvari kroz *stratum corneum* kože kao i krvno-moždanu barijeru tako rezultati ovog istraživanja doprinose boljem razumijevanju pasivne permeabilnosti (pasivnog prolaza) flavonoida kroz membranu značajnog u procesima apsorpcije, raspodjele, metabolizma i eliminacije.

Literatura:

- [1] K. Valko, C. My Du, C.D. Bevan, D.P. Reynolds, M.H. Abraham, J. Pharm. Sci. 89 (2000) 1085–1096.

**TESTIRANJE SPOSOBNOSTI HVATANJA SUPEROKSID
RADIKALA HLAPLJIVIM SPOJEVIMA BILJAKA
RODA CENTAUREA****SUPEROXIDE RADICAL SCAVENGING PROPERTIES OF
VOLATILE COMPOUNDS FROM PLANTS OF
CENTAUREA GENUS**

Olivera Politeo, Ivana Brahović, Ivana Carev

Faculty of Chemistry and Technology, Teslina 10, 21000 Split, Croatia

e-mail: olivera@ktf-split.hr

Exogenous chemical and endogenous metabolic processes in the human body or in food system might produce highly reactive free radicals, especially oxygen derived radicals, which are capable of oxidizing biomolecules, resulting in cell death and tissue damage. Oxidative damages play a significantly pathological role in human diseases such as cell damage, cancer, rheumatoid arthritis, atherosclerosis and aging. Superoxide anion radical ($O_2^{\bullet-}$) is one of the most important and biologically relevant ROS radicals in living organisms. This radical formed in aerobic cells due to electron leakage from the electron transport chain. Superoxide radicals ($O_2^{\bullet-}$) are also formed by activated phagocytes such as monocytes, macrophages, eosinophils and neutrophils and the production of $O_2^{\bullet-}$ is an important factor in the killing of bacteria by phagocytes. In living organisms, $O_2^{\bullet-}$ is removed by the enzymes called superoxide dismutases (SOD). However, antioxidant supplements or foods containing antioxidants may be used to help the human body reduce oxidative damage. Antioxidants have been widely used as food additives to provide protection against oxidative degradation of foods. Therefore, antioxidants play a very important role in the food industry. Synthetic antioxidants, such as butylated hydroxyanisole (BHA), butylated hydroxytoluene (BHT) and tertbutylhydroquinone (TBHQ) are widely used in the food industry, but BHA and BHT have suspected of being responsible for liver damage and carcinogenesis. Therefore, the development and utilization of more effective antioxidants of natural origin are desired.

The aim of this investigation was to test superoxide anion scavenging activity of volatile compounds isolated from Centaurea plants using a new method, we named WST method. In this method, pyrogallol (1,2,3-hydroxybenzene) was used as $O_2^{\bullet-}$ generating system and as well as WST-1 (2-(4-iodophenyl)-3-(4-nitrophenyl)-5-(2,4-disulfophenyl)-2H-tetrazolium sodium salt) which can be reduced by superoxide anion radical to a stable water-soluble formazan with a high absorbance at 450 nm. In presence of antioxidant a scavenging of radicals as well as a lower absorbance were registered.

Results were showed a good a superoxide anion scavenging activity of volatile compounds from plants of Centaurea genus in comparison to a well known antioxidant-Vitamin C. The strongest activity was showed a *C. spinosociliata* essential oil (Kozjak, Split) with 70.3 % inhibition of superoxide anion generation, while the lowest activity was showed a *C. ragusina* essential oil (Palagruža Island) with 43.5 % inhibition.

Reference:

- [1] C. Xu, S. Lu, Z. Liu, F. Song, S. Liu, Anal. Chim. Acta 793 (2013) 53–60.

**IN VITRO BIOLOŠKA PRETRAGA ETERIČNIH ULJA
DAMAŠĆANSKE CRNJIKE (*NIGELLA DAMASCENA* L.) I
CRNOG KUMINA (*NIGELLA SATIVA* L.) KAO INHIBITORA
ACETILKOLINESTERAZE: TANKOSLOJNA
KROMATOGRAFIJA *VERSUS* MIKROTITARSKA METODA**

**IN VITRO SCREENING OF ESSENTIAL OILS RAGGED LADY
(*NIGELLA DAMASCENA* L.) AND BLACK CUMIN (*NIGELLA
SATIVA* L.) AS ACETYLCHOLINESTERASE INHIBITORS:
THIN LAYER CHROMATOGRAPHY *VERSUS*
MICROPLATE METHOD**

Azra Đulović, Franko Burčul, Mila Radan

Sveučilište u Splitu, Kemijsko-tehnološki fakultet, Teslina 10, 21000 Split, Hrvatska
e-mail: mradan@ktf-split.hr

Strukturna raznolikost prirodnih spojeva predstavlja dragocjen biološki potencijal u nastojanju da se razviju novi lijekovi. Alzheimerova bolest predstavlja najučestaliji oblik demencije u svijetu. Trenutno su inhibitori kolinesteraza još uvijek najbolja farmakoterapija.

GC-MS analizom dobiven je uvid u najzastupljenije spojeve u kemijskim sastavima eteričnih ulja. *N. damascena* sadrži β -elemen (57 %), α -selinen (22 %) te selin-3,7(11)-dien (6,9 %). *N. sativa* sadrži *p*-cimen (30,2 %), karvakrol (7,3 %) i timokinon (1,3 %).

Usporedbom inhibicijske aktivnosti za oba ulja metodom po Ellmanu vidljivo je da ulje *N. damascena* posjeduje veći inhibicijski potencijal (77 %) u odnosu na ulje *N. sativa* (7 %). Inhibicijske aktivnosti pojedinog ulja povezane su s njihovim kemijskim sastavom. TLC bioautografijom potvrđeno je da je za inhibicijski učinak *N. damascena* zaslužan β -elemen.

Usporedbom ovih dviju metoda može se zaključiti da je Ellmanova metoda pogodna za brzo i kvantitativno utvrđivanje inhibicije acetilkolinesteraze (AChE); dok je TLC bioautografska metoda pogodna za kvalitativno određivanje AChE u kompleksnim smjesama kao što su eterična ulja. Zbog svog međusobnog nadopunjavanja obje metode daju korisne uvide u mehanizam i karakterizaciju inhibicije AChE, kako smjesa tako i čistih komponenti.

NOVI DERIVATI IZOINDOLINA: SINTEZA, MEHANIZAM I KRISTALNA STRUKTURA

NOVEL ISOINDOLINE DERIVATIVES: SYNTHESIS, MECHANISM AND CRYSTAL STRUCTURE

Irena Sović¹, Vladimir Stilinović², Grace Karminski-Zamola¹

¹Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Zavod za organsku kemiju, Marulićev trg 20, 10000 Zagreb, Hrvatska

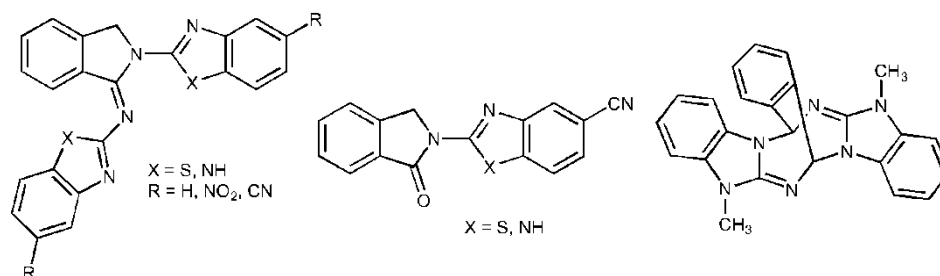
e-mail: isovic@fkit.hr, gzamola@fkit.hr

² Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek,

Horvatovac 102a, 10000 Zagreb, Hrvatska

e-mail: vstilinovic@chem.pmf.hr

Derivati izoindolina su vrlo interesantna skupina heterocikličkih spojeva zbog širokog spektra upotrebe, kako u medicini tako i u različitim industrijama poput proizvodnje boja i herbicida. Prisutni su u mnogim prirodnim i sintetskim spojevima te pokazuju široki spektar biološkog djelovanja, između ostalog i antitumorsko djelovanje. U našem prethodnom radu opisali smo sintezu i antitumorsko djelovanje 1-(*N*-aril-imino)-2-aril-izoindolina, gdje su spojevi priređeni klasičnom reakcijom ftalaldehida i supstituiranih anilina ili amino-piridina [1,2]. Međutim, reakcijom ftalaldehida sa bicikličkim heterocikličkim aminima kao što su derivati 2-aminobenzotiazola i 2-aminobenzimidazola, izolirani su različiti produkti, ovisno o reakcijskim uvjetima i supstituentima na heterocikličkim jezgrama. Nekim novim spojevima određena je kristalna struktura. Pretpostavljen je mehanizam nastajanja produkata.



Literatura:

- [1] I. Sović, V. Stilinović, B. Kaitner, S. Kraljević Pavelić, M. Bujak, K. Čuljak, P. Novak, G. Karminski-Zamola, *J. Mol. Struct.* 1006 (2011) 259–265.
- [2] I. Sović, S. Kraljević Pavelić, E. Markova-Car, N. Ilić, R. Nhili, S. Depauw, M.-H. David-Cordonnier, G. Karminski-Zamola, *Eur. J. Med. Chem.* 87 (2014) 372–385.

**CIKLIČKA I DIFERENCIJALNA PULSNA VOLTAMETRIJA
KOMPLEKSA SCHIFFOVE BAZE S BAKROM****CYCLIC AND DIFFERENTIAL PULSE VOLTAMMETRIC
BEHAVIOUR OF SCHIFF BASE COMPLEX WITH COPPER**

Anamarija Šter, Irena Kuliš, Vedrana Sesar, Maja Karnaš,
Martina Medvidović-Kosanović

J.J. Strossmayer University of Osijek, Department of Chemistry,
Cara Hadrijana 8A, HR-31000 Osijek, Croatia

e-mail: aster@kemija.unios.hr, karnasmaja@gmail.com, mmkosano@kemija.unios.hr

Oxido-reduction properties of a Schiff base complex with copper were investigated by cyclic voltammetry and differential pulse voltammetry. Measurements were conducted in a three electrode voltammetric cell in a non-aqueous media. Glassy carbon was used as a working electrode, platinum wire as counter electrode and non-aqueous Ag/Ag⁺ electrode as a reference electrode. Inert atmosphere was accomplished by system purging with high purity argon Ar 5 ($\phi_{Ar} = 99.999\%$), before each measurement.

Cyclic voltammograms revealed one oxidation and one reduction peak of the investigated Schiff base complex with copper ($E_{p,a} = 0.042$ V and $E_{p,k} = -0.350$ V), which both increased with increasing concentration ($c = 1.0 \cdot 10^{-4}$ mol dm⁻³ ... $2.7 \cdot 10^{-4}$ mol dm⁻³) and scan rate ($v = 25$... 300 mV/s). The results have shown that the oxidation process controlled by diffusion. [1]. High ΔE_p value (392 mV) suggests that, during electron transfer, considerable stereochemical reorganization of the coordination sphere occurs [2]. Differential pulse voltammetry showed one oxidation peak $E_{p,a} = -0.075$ V, which also increased with increasing concentration of the Schiff base complex with copper.

References:

- [1] E. Ukpong, C. Obadimo, Int. J. Electrochem. Sci. 9 (2014) 4405–4412.
- [2] R. Balamurugan, M. Palaniandavar, M.A. Halcrow, Polyhedron 25 (2006) 1077–1088.

**DIREKTNO POTENCIOMETRIJSKO ODREĐIVANJE
PENICILAMINA KORIŠTENJEM BAKROVE IONSKO-
SELEKTIVNE ELEKTRODE****DIRECT POTENTIOMETRIC DETERMINATION OF
PENICILLAMINE BY USING COPPER ION-SELECTIVE
ELECTRODE**

Ante Prkić, Tina Vukušić, Josipa Giljanović

Sveučilište u Splitu, Kemijsko-tehnološki fakultet, Zavod za analitičku kemiju,
Teslina 10/V, 21000, Split, Hrvatska
e-mail: prkic@ktf-split.hr

Opisana je metoda direktnog potenciometrijskog određivanja penicilamina (PEN) korištenjem komercijalno dostupne bakrove ionsko-selektivne elektrode. Ispitivanja su se provodila u acetatnom puferu pri pH = 4. Radna elektroda ispitana je na odziv osnovnih iona, bakrove(II) katione te na PEN. Opisana metoda zasniva se na mjerenju koncentracije PEN-a iz farmaceutika bez prethodne obrade. Reakcija koja se odvija jest reakcija atoma sumpora iz tiolne skupine PEN-a s bakrovim(II) kationima na površini membrane. Predložena metoda ima prednosti u odnosu na neke druge dostupne metode [1–3] jer je jeftina, jednostavna i relativno brza. Krivulja umjeravanja navedene metode glasi $E = -(39,12 \pm 0,36) \cdot \log c(\text{PEN}) - (175,44 \pm 1,49)$ s koeficijentom korelacije 0,9990. Za opisanu metodu utvrđeno je linearno dinamičko područje određivanja PEN-a od $1,23 \cdot 10^{-6}$ do $1,00 \cdot 10^{-2}$ mol L⁻¹ s granicom dokazivanja od $1,10 \cdot 10^{-6}$ mol L⁻¹. Izmjerene koncentracije PEN-a u farmaceuticima su u jako dobrom slaganju s deklariranim vrijednostima. Zabilježeno je standardno odstupanje metode u rasponu od 4,00 do 6,49 % i iskoristivost u rasponu od 97,69 do 101,67 %.

Literatura:

- [1] Nj. Radić, J. Komljenović, D. Dobčnik, Croat. Chem. Acta 73 (2000) 263–277.
- [2] X. Yang, H. Yuan, C. Wang, X. Su, L. Hu, D. Xiao, J. Pharmaceut. Biomed. 45 (2007) 362–366.
- [3] A. Martinović, Nj. Radić, Acta Chim. Slov. 56 (2009) 503–506.

OPTIMIZACIJA EKSTRAKCIJE U ČVRSTOJ FAZI PRI ODREĐIVANJU OSTATAKA PESTICIDA U CRNIM VINIMA

SOLID PHASE EXTRACTION OPTIMIZATION FOR THE DETERMINATION OF PESTICIDES IN RED WINE

Maja Pelajić¹, Dubravka Vitali Čepo²

¹Hrvatski centar za poljoprivredu hranu i selo, Zavod za zaštitu bilja,
Rim 98, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: maja.pelajic@hcphs.hr

²Sveučilište u Zagrebu, Farmaceutsko – biokemijski fakultet,
Domagojeva 2, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: dvitali@pharma.hr

Određivanje ostataka pesticida u vinima predstavlja izazov obzirom na to da je vino složen uzorak u čiji sastav ulaze prirodni organski spojevi koji mogu utjecati na fizikalno-kemijska svojstva pesticida te time neposredno i na njihovu izolaciju. Iz navedenog slijedi da je priprava uzorka ključni korak u analitičkim postupcima određivanja ostataka pesticida u uzorcima vina. Većina novijih istraživanja temelji se na optimizaciji parametara već utvrđenih postupaka pripreme uzorka obzirom da postojeće metode nisu jedinstvene za velik broj složenih uzoraka. Djelotvornost primijenjene metode pripreme uzorka pri određivanju pesticida ovisi, uz matricu uzorka i o fizikalno-kemijskim svojstvima pesticida. Prema novijim literaturnim navodima, primjenom ekstrakcije u čvrstoj fazi postiže se bolja iskoristivost, manja potrošnja organskih otapala, kraće vrijeme pripreme uzorka, bolja selektivnost, specifičnost i ponovljivost, te niža granica određivanja u odnosu na klasične metode pripreme uzorka kao što je ekstrakcija otapalom [1–6].

U ovom radu opisana je optimizacija ekstrakcije u čvrstoj fazi i primjena analitičke metode određivanja 25 pesticida u crnim vinima vezanim sustavom plinska kromatografija-spektrometrija masa. Pri optimizaciji ekstrakcije u čvrstoj fazi ispitan je utjecaj vrste sorbensa, mase sorbensa, pH uzorka, volumena uzorka, vrste i volumena otapala za ispiranje, vrste i volumena otapala za eluiranje, te volumena otapala za injektiranje. Za navedene pesticide određene su granice dokazivanja i granice određivanja, obnovljivost, ponovljivost, iskoristivost te linearna područja. Rezultati dobiveni analizom vina sa vinorodnih regija Republike Hrvatske pokazali su zadovoljavajuću primjenjivost metode pri analizi realnih uzoraka.

Literatura:

- [1] A. Economou, H. Botitsi, S. Antoniou, D. Tsipi, J. Chromatogr. A 1216 (2009) 5856–5867.
- [2] R. Fontana, I. Rodriguez, M. Ramil, J.C. Altamirano, R. Cela, J. Chromatogr. A 1218 (2011) 2165–2175.
- [3] G.J. Soleas, J. Yan, K. Hom, D.M. Goldberg, J. Chromatogr. A 882 (2000) 205–212.
- [4] I. Carpinteiro, M. Ramil, I. Rodríguez, R. Cela, J. Chromatogr. A 1217 (2010) 7484–7492.
- [5] J.J. Jimenez, J.L. Bernal, M.J. del Nozal, L. Toribio, E. Arias, J. Chromatogr. A 919 (2001) 147–156.
- [6] J.W. Wong, M.G. Webster, C.A. Halverson, M.J. Hengel, K.K. Ngim, S.E. Ebeler, J. Agric. Food. Chem. 51 (2003) 1148–1161.

UTJECAJ MATRICE UZORKA NA ODREĐIVANJE OSTATAKA PESTICIDA U UZORCIMA VINA PLINSKOM KROMATOGRAFIJOM-SPEKTROMETRIJOM MASA

EVALUATION OF MATRIX EFFECT IN THE DETERMINATION OF PESTICIDES IN WINE BY GAS CHROMATOGRAPHY-MASS SPECTROMETRY

Maja Pelajić¹, Dubravka Vitali Čepo²

¹Hrvatski centar za poljoprivredu hranu i selo, Zavod za zaštitu bilja,
Rim 98, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: maja.pelajic@hcphs.hr

²Sveučilište u Zagrebu, Farmaceutsko – biokemijski fakultet,
Domagojeva 2, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: dvitali@pharma.hr

Jedan od najčešćih problema koji se javljaju kod izolacije analita iz uzorka je utjecaj matrice uzorka na analitički rezultat. Tijekom pripreme uzorka tvari prisutne u uzorku mogu ekstrahirati zajedno sa analitom što rezultira prigušenjem ili povećanjem instrumentalnog odziva analita. Prema literaturnim navodima polarni spojevi, spojevi koji u svojoj strukturi sadrže određene heterocikličke skupine, te drugi pojedini spojevi skloni su promjenama instrumentalnog odziva u plinskoj kromatografiji kad se analiziraju u uzorcima i za njih je značajan utjecaj matrice uzorka na analitički rezultat. Utjecaj matrice uzorka osobito je važan pri određivanju niskih koncentracija analita jer su ostale tvari u uzorku često prisutne u znatno većim koncentracijama u odnosu na analit. S ciljem postizanja djelotvornosti cjelokupnog analitičkog postupka važno je procijeniti utjecaj matrice uzorka na analitički rezultat kako bi se on mogao svesti na najmanju moguću mjeru [1–5].

U ovom radu ispitan je utjecaj matrice uzorka na analitički rezultat pri određivanju pesticida u crnim i bijelim vinima. Za procjenu i izračun matrice uzorka na instrumentalni odziv plinskog kromatografa korištena je usporedba podataka dobivenih linearnom regresijom za pesticide u uzorcima vina i čistom otapalu. Uz navedeni pristup korištena je i metoda procjene matrice uzorka po Matuszewskom [5]. Prema navedenoj metodi procjenjuje se ukupna djelotvornost analitičkog postupka na temelju podataka dobivenih za pesticide u vinima dodanim prije ekstrakcije, poslije ekstrakcije i čistom otapalu.

Literatura:

- [1] A. Economou, H. Botitsi, S. Antoniou, D. Tsipi, J. Chromatogr. A 1216 (2009) 5856–5867.
- [2] R. Fontana, I. Rodríguez, M. Ramil, J.C. Altamirano, R. Cela, J. Chromatogr. A 1218 (2011) 2165–2175.
- [3] I. Carpinteiro, M. Ramil, I. Rodríguez, R. Cela, J. Chromatogr. A 1217 (2010) 7484–7492.
- [4] J.J. Jimenez, J.L. Bernal, M.J. del Nozal, L. Toribio, E. Arias, J. Chromatogr. A 919 (2001) 147–156.
- [5] B.K. Matuszewski, M.L. Constanzer, C.M. Chavez-Eng, Anal.Chem. 75 (2003) 3019–3030.

SINTEZA FTALIMIDNIH DERIVATA ADAMANTANSKIH AMINOKISELINA

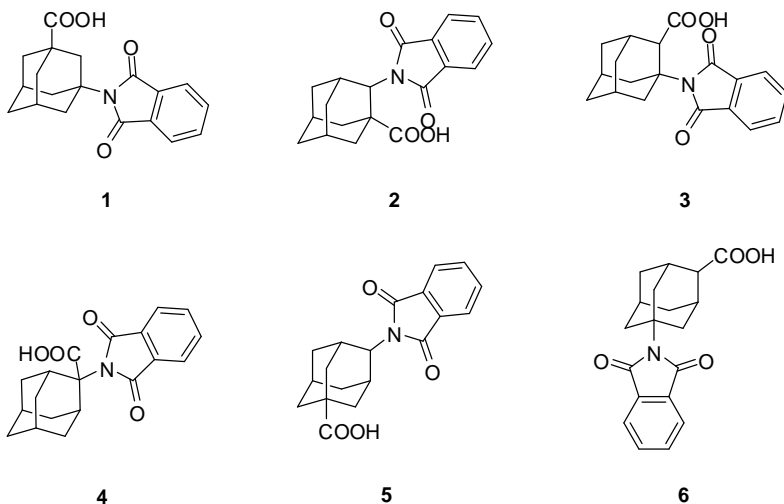
SYNTHESIS OF PHTHALIMIDE DERIVATIVES OF ADAMANTYLAMINO ACIDS

Leo Mandić, Kata Mlinarić-Majerski, Nikola Basarić

Ruđer Bošković Institute, Department of Organic Chemistry and Biochemistry,
Bijenička cesta 54, 10000 Zagreb, Croatia
e-mail: lmandic@irb.hr, majerski@irb.hr, nbasaric@irb.hr

Adamantane is a very important pharmacophore that has been found in different classes of biologically active compounds.[1] Its derivatives activated by phthalimide chromophore can be photochemically transformed to more complex polycyclic molecules with potential biological activity.[2]

We have recently reported the synthesis of 3-phthalimidoadamantane-1-carboxylic acid (**1**) and investigation of its photochemical reactivity in the reaction of photodecarboxylation.[3] In continuation of our research on the synthesis of unnatural adamantylamino acids and their photochemical reactivity, we have prepared a series of adamantylphthalimide derivatives **2–6**. The molecules are designed to probe for the efficiency of photoinduced intramolecular electron transfer from the carboxylate to the phthalimide in the triplet excited state. Herein we report the synthesis and structural characterization of unnatural adamantane amino acids and their corresponding phthalimide derivatives **2–6**.



References:

- [1] L. Wanka, K. Iqbal, P.R. Schreiner, *Chem. Rev.* 113 (2013) 3516–3604.
- [2] M. Horvat, K. Mlinarić-Majerski, N. Basarić, *Croat. Chem. Acta* 83 (2010) 179–188.
- [3] M. Horvat, K. Mlinarić-Majerski, A. G. Griesbeck, N. Basarić, *Photochem. Photobiol. Sci.* 10 (2011) 610–617.

**SVOJSTVA MEĐUPOVRŠINE CERIJEV(IV) OKSID / VODENA
OTOPINA ELEKTROLITA****SURFACE PROPERTIES OF CERIUM(IV) OXIDE / AQUEOUS
ELECTROLYTE SOLUTION INTERFACE**Sanela Mutka¹, Danijel Namjesnik², Tajana Preočanin²¹PLIVA CROATIA Ltd., Generics Research and Development,
Prilaz baruna Filipovića 25, 10000 Zagreb, Croatia
e-mail: sanela.mutka@pliva.com²Faculty of Science, Department of Chemistry,
Horvatovac 102a, 10000 Zagreb, Croatia

When colloid particles and nanoparticles come in contact with aqueous electrolyte solution, the ions between solution and interface are redistributed, the amphoteric surface groups are protonated and deprotonated and the electric interfacial layer is formed. Surface properties of colloid particles and nanoparticles depend on surface structure, electric interfacial layer formation and surface reactions.

Cerium(IV) oxide nanoparticles are used in various branches of industry due to their specific properties, as catalysts, in fuel cells and in medicine as oxidizing and reducing agents. Synthesis of cerium(IV) oxide nanoparticles is relatively simple and particles of controlled shape and size can be prepared. Nanoparticles of cerium(IV) oxide are synthesized by hydrolysis of cerium(III) nitrate hexahydrate [1] and purified of residual ions. For characterization of synthesized nanoparticles transmission electron spectroscopy (TEM), dynamic light scattering (DLS), X-ray diffraction (XRD) and specific surface analysis (BET) were used.

Surface properties of cerium(IV) oxide are determined experimentally. The influence of pH and electrolyte concentration on surface properties of synthesized cerium(IV) oxide nanoparticles is investigated. Electrokinetic potential and isoelectric point of cerium(IV) oxide nanoparticles are determined by electrophoresis method. Surface charge density is determined by acid-base potentiometric titrations and mass titrations [2]. Surface potential of cerium(IV) oxide planes is determined by potentiometric titrations using single crystal electrodes containing cerium(IV) oxide of different orientations.

Thermodynamic parameters (equilibration constants) which describe surface reactions are calculated from experimental data. Surface complexation model was used [3].

References:

- [1] H.-I. Chen, H.-Y. Chang, *Ceram. Int.* 31 (2005) 795–802
- [2] T. Preočanin, N. Kallay, *Croat. Chem. Acta* 71 (1998) 1117–1125
- [3] M. Nabavi, O. Spalla, B. Cabane, *J. Colloid Interf. Sci.* 160 (1993) 459–471

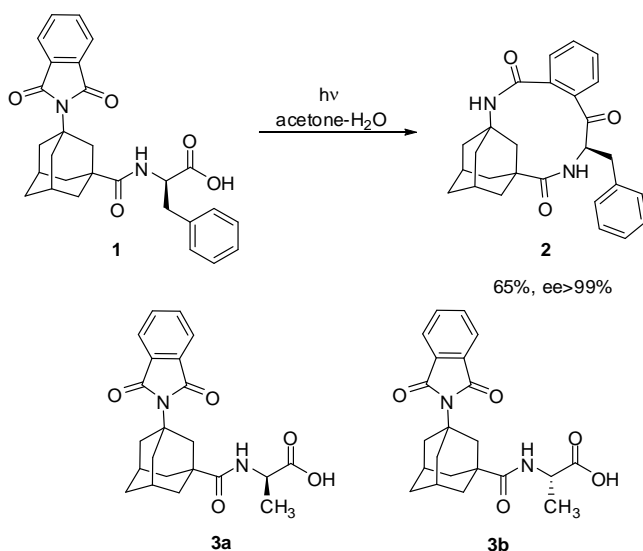
MEMORIJA KIRALNOSTI U FOTOCIKLIZACIJI ALANINSKIH DERIVATA ADAMANTILFTALIMIDA

MEMORY OF CHIRALITY IN PHOTOCYCLIZATION OF ALANINE DERIVATIVES OF ADAMANTYLPHthalimIDE

Zlatan Spahić, Margareta Sohora, Nikola Basarić, Kata Mlinarić-Majerski

Ruder Bošković Institute, Department of Organic Chemistry and Biochemistry,
Bijenička cesta 54, 10000 Zagreb, Croatia

e-mail: zlatan.spahic1@gmail.com, Margareta.Sohora@irb.hr, nbasaric@irb.hr, majerski@irb.hr



Within the scope of investigation of photochemical reactivity of different adamantane derivatives activated by phthalimide chromophore [1] we turned our attention to the photodecarboxylative cyclizations of oligopeptides [2], and discovered that photocyclization of phenylalanine dipeptide **1** proceeds in good yields (65 %) and very high enantioselectivity (ee > 99 %) to macrocyclic product **2**. The result was explained by memory of chirality [3].

To test the scope of the enantioselective photocyclization, new dipeptide analogues have to be prepared and the enantioselectivity in the photocyclization reaction investigated. In particular, the emphasis is given to determine the influence of the amino acid residue of dipeptide on the memory of chirality. Herein we report the synthesis and structural characterization of two new alanine dipeptides **3a** and **3b**, and investigation of their photochemical reactivity.

References:

- [1] M. Horvat, K. Mlinarić-Majerski, N. Basarić, *Croatia Chem. Acta* 83 (2010) 179–188.
- [2] Sohora, T. Šumanovac Ramljak, K. Mlinarić-Majerski, N. Basarić, *Croatia Chem. Acta* 87 (2015) 431–446.
- [3] T. Šumanovac Ramljak, M. Sohora, I. Antol, D. Kontrec, N. Basarić, K. Mlinarić-Majerski, *Tetrahedron Lett.* 55 (2014) 4078–4081.

POVRŠINSKI POTENCIJAL RAZLIČITIH KRISTALNIH PLOHA CERIJEVOG(IV) OKSIDA U VODENOJ OTOPINI ELEKTROLITA

SURFACE POTENTIAL OF DIFFERENT CRYSTAL PLANES OF CERIUM(IV) OXIDE IN AQUEOUS ELECTROLYTE SOLUTION

Danijel Namjesnik¹, Sanela Mutka², Tajana Preočanin¹, Nikola Kallay¹

¹ Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek, Zavod za fizikalnu kemiju, Horvatovac 102a, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: danijel.namjesnik@chem.pmf.hr

²Pliva Hrvatska d.o.o., Prilaz baruna Filipovića 25, 10000 Zagreb, Hrvatska

Upotreba elektroda od monokristala metalnih oksida [1] omogućava određivanje površinskog potencijala pojedinih kristalnih ploha. Na međupovršini metalni oksid – vodena otopina elektrolita dolazi do formiranja električki nabijenih površinskih skupina i nastajanja električnog međupovršinskog sloja [2]. Svaka kristalna ploha metalnog oksida određena je svojom kristalnom strukturom, odnosno metalnim atomima okruženim s različito koordiniranim atomima kisika [3] što uzrokuje karakteristična termodinamička svojstva površinskih skupina, odnosno električna svojstva te plohe. U realnim sustavima (koloidne čestice i nanočestice) kristalne plohe od kojih je građena čestica nisu odvojene nego su električki izravno spojene kroz sam kristal. U kontaktu čestice s vodenom otopinom elektrolita uspostavlja se zajednički potencijal čija se vrijednost nalazi između vrijednosti potencijala pojedinih ploha kristala. Eksperimentalno je uočeno je da pojedine plohe mogu dominirati, odnosno više doprinijeti tom zajedničkom potencijalu [4].

Cerijev(IV) oksid dostupan je u obliku nanočestica i kao monokristali s plohama različitih kristalnih orijentacija. Izradom monokristalnih elektroda [111] i [100] cerijeva(IV) oksida ispitao se utjecaj pH vodene otopine elektrolita na površinski potencijal te dvije kristalne plohe cerijeva(IV) oksida. Direktnim spajanjem ove dvije monokristalne elektrode mjereno je i njihov zajednički potencijal u ovisnosti o pH vodene otopine elektrolita.

Iz izmjerenih vrijednosti površinskih potencijala procijenjen je utjecaj pojedine plohe na uspostavljanje ravnoteže, a rezultati su uspoređeni i s površinskim svojstvima nanočestica cerijeva(IV) oksida.

Literatura:

- [1] N. Kallay, Z. Dojnović, A. Čop, J. Colloid Interf. Sci. 286 (2005) 610–614.
- [2] N. Kallay, T. Preočanin, D. Kovačević, J. Lützenkirchen, E. Chibowski, Croat. Chem. Acta 83 (2010) 357–370.
- [3] T. Hiemstra, W. H. Van Riemsdijk, J. Colloid Interf. Sci. 179 (1996) 488–508.
- [4] N. Kallay, T. Preočanin, M. Sapunar, D. Namjesnik, Surf. Innovations 2 (2014) 142–150.

**UKLANJANJE ENROFLOKSACINA IZ OTPADNIH VODA
SORPCIJOM NA KOMINU GROŽĐA****ENROFLOXACINE REMOVAL FROM WASTEWATER BY
SORPTION ON GRAPE MARC**

Danijela Ašperger¹, Ivana Tomaz², Marija Gavranić¹, Barbara Prišlin¹,
Luna Maslov², Jasminka Karoglan Kontić², Sandra Babić¹

¹University of Zagreb, Faculty of Chemical Engineering and Technology, Department of Analytical Chemistry, Marulićev trg 20, 10000, Zagreb, Hrvatska

e-mail: diva@fkit.hr

²University of Zagreb, Faculty of Agriculture, Department of Viticulture and Enology, Svetošimunska 25, 10000, Zagreb, Hrvatska

e-mail: itomaz@agr.hr

The presence of pharmaceuticals in different environmental compartments becomes an interesting subject of scientific research, with hundreds of investigations conducted. Numerous pharmaceuticals have been found in European and American waters at concentrations ranging from several nanograms to several micrograms per liter. The main sources of pharmaceuticals in water are industrial and municipal water treatment systems, which are not adequate to remove such small molecules in very low concentrations. So, classical wastewater treatment processes are not efficient for removal of so called emerging contaminants like pharmaceuticals, personal care products and endocrine disrupting chemicals including hormones. Many studies have shown that coagulation, flocculation, precipitation and biological processes are ineffective for removing many dissolved organic contaminants, such as pharmaceuticals, especially the antibiotics. Therefore, in this paper sorption on grape marc was used as alternative method for removal of enrofloxacin (ENRO) from aqueous solution. ENRO is a fluoroquinolone antibiotic, widely used in poultry production for respiratory and enteric bacterial infections treatment, so it is widely present in water. Its core structure is a dihydroquinoline or 4-quinolone ring. It is lipophilic structure with low molecular weight, allowing tissue penetration.

The influences of the initial ENRO concentration, contact time and temperature on adsorption performance were experimentally verified by a batch method. The kinetic data were analyzed using the pseudo-first-order and pseudo-second-order kinetic models. The equilibrium data were fitted to the three adsorption isotherm models: Freundlich, Langmuir and Dubinin–Radushkevich. Linear and non-linear methods were used for comparing the best fitting of the isotherms. The values of the thermodynamic parameters (ΔG° , ΔH° , ΔS°) were calculated using adsorption equilibrium constant obtained from the Langmuir isotherm.

This study shows that grape marc can be an important low-cost adsorbent for ENRO removal.

**ELEKTROKEMIJSKA SVOJSTVA NEKIH
KLOGROGENSKIH KISELINA****ELECTROCHEMICAL PROPERTIES OF SOME
CHLOROGENIC ACIDS**

Ivana Tomac, Marijan Šeruga

University of Osijek, Faculty of Food Technology, Department of Applied Chemistry and Ecology,
Franje Kuhača 20, HR-31000 Osijek, Croatia
e-mail: itomac@ptfos.hr

Chlorogenic acids (CGAs) are one of the groups of polyphenolic compounds widely distributed in different plant materials. Chemically, CGAs are family of different esters formed between (–)-quinic acid and certain *trans*-cinnamic acids, most commonly caffeic, ferulic and *p*-coumaric acids. In this work, the electrochemical properties of six important chlorogenic acids (CGAs) isomers: three caffeoylquinic acids, CQAs (5-CQA, 4-CQA, 3-CQA) and three dicaffeoylquinic acids (3,4-diCQA, 3,5-diCQA, 4,5-diCQA) were studied by square-wave voltammetry (SWV) and compared with the electrochemical behaviour of caffeic acid (CFA), precursor of investigated CGAs. The study reveals that electrochemical properties of investigated CGAs strongly depend on their chemical structures and electronic properties, particularly on electron-donating effect of –OH and –CH=CH– groups, and a strong electron-withdrawing effect of ester (–COOR) group presented in their structures. SWV measurements show that electrochemical oxidation/reduction of CGAs at a glassy carbon electrode (GCE) is reversible, pH-dependent, two electron-two proton process. The oxidation/reduction processes occurred on the catechol moiety (*ortho*-dihydroxyl groups) in the structure of CGAs molecules. The oxidation product(s) relatively strongly adsorb on the GCE surface, especially at higher concentration of CGAs. The electrochemical behaviour of 5-CQA was studied more in detail. It was observed that the anodic peak current of 5-CQA show maximum in solution of pH 7, due to the maximum concentration of 5-CQA[–] anion at this pH value. The electrode reaction proceeded in the solution of 5-CQA is diffusion controlled process. The anodic peak current of 5-CQA show linear relationship with the concentration in the concentration range 5–50 μmol L^{–1}, with low limit of detection (LOD) of 7.7·10^{–7} mol L^{–1}. Therefore, SWV can be used as a very sensitive and selective method for determination of CQAs content (and also CGAs content) in different samples.

References:

- [1] M. Namazian, H.R. Zare, *Electrochim. Acta* 50 (2005) 4350–4355.
- [2] P.J. Eravuchira, R.M. El-Abassy, S. Deshpande, M.F. Matei, S. Mishra, P. Tandon, N. Kuhnert, A. Materny, *Vib. Spectrosc.* 61 (2012) 10–16.
- [3] S. Mishra, P. Tandon, P.J. Eravuchira, R.M. El-Abassy, A. Materny, *Spectrochim. Acta A* 104 (2013) 358–367.
- [4] M. Šeruga, I. Tomac, *Int. J. Electrochem. Sci.* 9 (2014) 6134–6154.

**RAZVOJ KINETIČKE SPEKTROFOTOMETRIJSKE METODE
ZA ODREĐIVANJE CISTEINA, PENICILAMINA,
TIOPRONINA I GLUTATIONA, KAO ČISTE TVARI I U
FARMACEUTSKIM PRIPRAVCIMA**

**DEVELOPMENT OF KINETIC SPECTROPHOTOMETRIC
METHOD FOR DETERMINATION OF CYSTEINE,
PENICILLAMINE, TIOPRONIN AND GLUTATHIONE IN
PURE FORM AND IN PHARMACEUTICAL FORMULATIONS**

Lea Kukoč – Modun, Maja Biočić, Njegomir Radić

Sveučilište u Splitu, Kemijsko-tehnološki fakultet, Zavod za analitičku kemiju,
Laboratorij za spektroskopiju i senzore, Teslina 10/V, 21000 Split, Hrvatska
e-mail: lkmodun@gmail.com

Tiolni spojevi (RSH), sumporni analozi alkoholu, su važni stanični antioksidansi, a zbog njihovog značaja u biološkim sustavima, prehrambenoj i farmaceutskoj industriji, sve je veći interes za razvojem novih metoda njihovog određivanja. U ovom radu prikazan je razvoj kinetičke metode određivanja biološki i farmakološki značajnih tiolnih spojeva: cisteina, penicilamina, glutationa i tiopronina. Kinetičke metode analize imaju znatno bolju selektivnost od klasičnih metoda analize, budući da se analitički signal bilježi u kinetičkom dijelu reakcije, te je odabirom reakcijskih uvjeta moguće postići značajnu razliku u brzini reakcije analita i interferirajućih vrsta.

Temelj za određivanje razmatranih tiola je njihovo redukcijsko djelovanje. Razvijena metoda se temelje na redoks-reakciji tiolnih spojeva (RSH) s kromogenim reagensom bakar(II) neokuproinom prilikom čega se bakar(II) neokuproin reducira u obojeni bakar(I) neokuproin kelatni kompleks, čija se apsorbancija bilježi pri 458 nm korištenjem Ulj-Vid. spektrofotometra. Kod razvijene kinetičke metode mjerenja korišten je jednostavan protočni sustav u kojem peristaltička crpka omogućava brzi i kontinuirani prolazak reakcijske otopine kroz protočnu ćeliju detektora, s ciljem neprekidnog praćenja promjene analitičkog signala (apsorbancije).

Prolazni (promjenjivi) signal bilježen u kinetičkom dijelu reakcije obrađen je korištenjem dviju računskih metoda, metode određenog vremena i metodom početne brzine, te su izračunane analitičke karakteristike predložene metode za pojedini analit: linearno dinamičko područje, granica određivanja, granica dokazivanja te Sandellova osjetljivost. Korištenjem rezultata mjerenja raspravljena je kinetika predloženih reakcija, te su za svaku od reakcija izračunane: brzina reakcije, konstanta brzine reakcije, red reakcije i energija aktivacije. Ispitan je utjecaj interferirajućih vrsta te je razvijena metoda primijenjena za određivanje razmatranih tiola u njihovim farmaceutskim pripravcima, sa izvrsnim slaganjem sa metodama analize koje preporučuje Pharmacopoeia.

**SINTEZA I RENDGENSKA STRUKTURNA ANALIZA
AMIDINO-SUPSTITUIRANIH 2-AMINOFENOLA**

**SYNTHESIS AND X-RAY STRUCTURAL ANALYSIS OF
AMIDINO-SUBSTITUTED 2-AMINOPHENOLS**

Livio Racané¹, Mario Cetina¹, Lucija Ptiček¹, Filip Topić², Kari Rissanen², Vesna Tralić-Kulenović¹

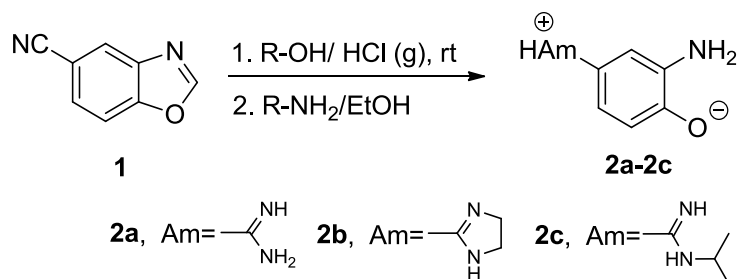
¹University of Zagreb, Faculty of Textile Technology, Department of Applied Chemistry,
Prilaz baruna Filipovića 28a, 10000 Zagreb, Croatia

e-mail: lracane@tff.hr, mario.cetina@tff.hr, lucija.pticek@tff.hr, vtralic@tff.hr

²University of Jyväskylä, Nanoscience Center, Department of Chemistry,
P.O. Box 35, 40014 Jyväskylä, Finland

e-mail: filip.f.topic@jyu.fi, kari.t.rissanen@jyu.fi

Amidino-substituted benzazole derivatives exhibit various biological activities and have been continuously studied by several research groups. In contrast to a great number of biologically active amidino-substituted benzimidazole and benzothiazole derivatives reported in recent literature, amidino-substituted benzoxazoles are still rare. The reason is lack of general method for their preparation, which would be based on the condensation reaction of amidino-substituted 2-aminophenoles, as the key intermediates, with carboxylic acids, carboxylic acid derivatives or aldehydes. Following the synthetic approach for the preparation of amidino-substituted 2-aminothiophenoles [1], we have successfully prepared different amidino-substituted 2-aminophenole from 5-cyanobenzoxazole by Pinner reaction:



Here, we report the synthesis of 5-cyanobenzoxazole (**1**) and amidino (**2a**), 2-imidazolylidene (**2b**), and *N*-isopropylamidino (**2c**) substituted 2-aminophenole isolated in zwitterionic form in high yields. The zwitterionic form of **2a** and **2b** was confirmed by X-ray structure analysis.

Reference:

- [1] L. Racané, V. Tralić-Kulenović, Z. Mihalić, G. Pavlović, G. Karminski-Zamola, *Tetrahedron* 64 (2008) 11594–11602.

ELEKTROKEMIJSKA KARAKTERIZACIJA HIDRAZIDA DIPIKOLINSKE KISELINE

ELECTROCHEMICAL CHARACTERISATION OF DIPICOLINIC ACID HYDRAZIDES

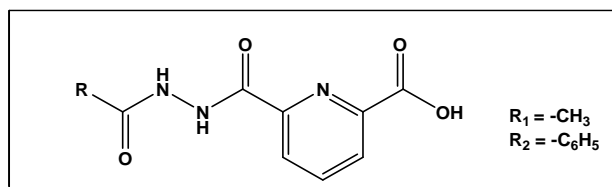
Martina Medvidović-Kosanović¹, Anita Blagus Garin¹, Franc Perdih²,
Anamarija Šter¹, Berislav Marković¹

¹University of Osijek, Department of Chemistry,
Cara Hadrijana 8/A, HR-31000, Osijek, Croatia
e-mail: mmkosano@kemija.unios.hr, ablagus@kemija.unios.hr,
aster@kemija.unios.hr, bmarkovi@kemija.unios.hr

²University of Ljubljana, Faculty of Chemistry and Chemical Technology,
Aškerčeva 5, PO Box 537, SI-1000 Ljubljana, Slovenia
e-mail: franc.perdih@fkkt.uni-lj.si

Dipicolinic acid hydrazides were investigated for their multidentate chelating properties, because they possess a large number of potential donor atoms and for their use in medicine and agriculture [1,2]. Oxido-reduction properties of prepared derivates of dipicolinic acid, Scheme 1, were investigated by cyclic and differential pulse voltammetry. Measurements were conducted in a three electrode voltammetric cell in a non-aqueous media. Glassy carbon was used as a working electrode, platinum wire as counter electrode and non-aqueous Ag/Ag⁺ electrode as a reference electrode. Inert atmosphere was accomplished by system purging with high purity argon Ar 5 ($\phi_{Ar} = 99.999\%$), before each measurement. All compounds were characterized by the elemental analyses, MS, IR and ¹H-NMR spectroscopy.

Cyclic voltammograms revealed one oxidation and one reduction peak of benzohydrazide of dipicolinic acid ($E_{p,a} = 0.25$ V and $E_{p,k} = -0.48$ V), which both increased with increasing concentration ($c = 3.3 \cdot 10^{-5}$ mol dm⁻³... $5.0 \cdot 10^{-4}$ mol dm⁻³) and scan rate ($v = 25 \dots 300$ mV/s). The results have shown that the oxidation process is quasi reversible and diffusion controlled. Differential pulse voltammetry showed one oxidation peak $E_{p,a} = 0.16$ V, which also increased with increasing concentration of the investigated compound. The oxidation peak decreased with successive scans which confirmed adsorption oxidation products of studied hydrazide on the glassy carbon electrode surface.



References:

- [1] C.K. Modi, A.S. Patel, B.T. Thaker, E-Journal of Chemistry 2 (1) (2005) 21–29.
- [2] M.A. Chun'an, C.H.U. Chengpu, X.U. Yinghua, Z. Hong, CIESC Journal 62 (9) (2011) 2405–2405.

**SINTEZA KARBAZOLNIH GVANIDINA,
NOVIH ANIONSKIH RECEPTORA**

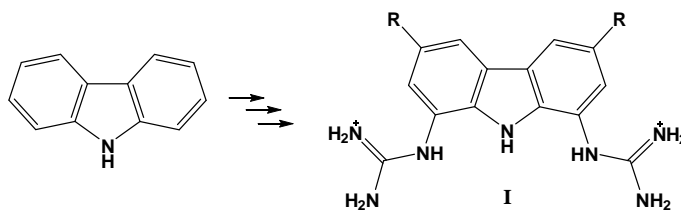
**SYNTHESIS OF CARBAZOLE GUANIDINES,
NOVEL ANION RECEPTORS**

Saša Opačak, Marina Šekutor, Kata Mlinarić-Majerski

Ruđer Bošković Institute, Division of Organic Chemistry and Biochemistry,
Bijenička cesta 54, 10000 Zagreb, Croatia
e-mail: sasaopacak@gmail.com, msekutor@irb.hr, majerski@irb.hr

Preparation of new anion receptors is an extensive research field of supramolecular chemistry due to the ubiquitous presence of anions in living organisms and in the environment. [1] Substituted carbazole derivatives proved to be especially interesting receptors since they can form complexes of different colours which enables easier detection and differentiation of anions. Examples of such compounds include carbazole-based urea derivatives which bind anions by forming hydrogen bonds between anions and the NH groups of carbazole and urea. [2]

The main goal of our current research is the synthesis of 1,8-bisguanidylcarbazoles **I** having various substituents on positions 3 and 6 of the carbazole moiety (R = Cl, Br, I, CN, OMe, alkyl, etc.). Variation of substituents on the aromatic rings changes the acidity of NH protons of the receptor, which in turn affects its ability to form hydrogen bonds.



The key precursor that was used for the condensation reactions of the carbazole fragment with the guanidine moiety is 1,8-diamino-3,6-dichlorocarbazole.[3] After optimizing this condensation reaction, other substituted carbazole guanidines will be prepared as well and their anion binding abilities studied.

References:

- [1] J.L. Sessler, P.A. Gale, W.-S. Cho, *Anion Receptor Chemistry*, RSC, Cambridge, 2006.
- [2] T.D. Thangadurai, N.J. Singh, I.-C. Hwang, J.W. Lee, R.P. Chandran, K.S. Kim, *J. Org. Chem.* 72 (2007) 5461–5464.
- [3] M.J. Chmielewski, M. Charon, J. Jurczak, *Org. Lett.* 6 (2004) 3501–3504.

SINTEZA NOVIH ADAMANTANSKIH PIROLKARBOKSIAMIDA

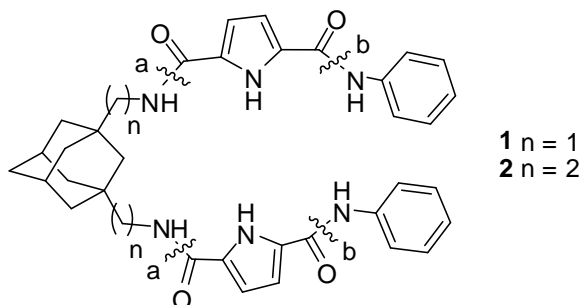
SYNTHESIS OF NOVEL ADAMANTANE PYRROLECARBOXYAMIDES

Mladena Glavaš, Marija Alešković, Kata Mlinarić-Majerski

Ruder Bošković Institute, Division of Organic Chemistry and Biochemistry,
Bijenička 54, 10000 Zagreb, Croatia

e-mail: mladena24@net.hr, marija.aleskovic@irb.hr, majerski@irb.hr

Designing pyrrole-based anion receptors combined with various hydrogen bond donor groups (amino, amide, guanidine, etc.) is a continuing challenge in the field of supramolecular chemistry [1]. Our previous investigation in the field included adamantane-dipyrrromethanes, receptors with acidic pyrrole NH proton and with additional hydrogen bond donor or electron withdrawing substituent [2]. Therefore, our next step is the combination of NH-amide groups and NH-pyrrole, thus designing receptors **1** and **2** that could bind anions in more competitive solvents. Additionally, we presume that the binding sites separated by various alkyl linkers (methyl or ethyl) on a rigid adamantane spacer would enable encapsulation of anions possessing different sizes and shapes, thus achieving anion selectivity. On the other hand, it is known that short pyrrole amides strongly bind to the minor groove of DNA, which was found to be a requirement for good antibacterial activity [3]. Furthermore, incorporation of a lipophilic unit surely can have an impact on biological activity and could facilitate potential antimicrobial application.



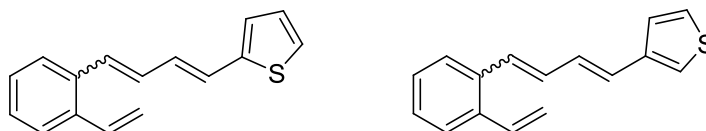
Herein we report the synthesis of new adamantane pyrrolocarboxyamides **1** and **2** starting from pyrrole, and implementation of two different amide coupling reactions as key steps.

References:

- [1] J.L. Sessler, P.A. Gale, W.-S. Cho, *Anion Receptor Chemistry*, RSC Publishing, Cambridge, 2006.
- [2] M. Alešković, N. Basarić, I. Halasz, X. Liang, W. Qin, K. Mlinarić-Majerski, *Tetrahedron* 69 (2013) 1725–1734.
- [3] N.B. Dyatkina, C.D. Roberts, J.D. Keicher, Y. Dai, J.P. Nadherny, W. Zhang, U. Schmitz, A. Kongpachith, K. Fung, A.A. Novikov, L. Lou, M. Velligan, A.A. Khorlin, M.S. Chen, *J. Med. Chem.* 45 (2002) 805–817.

**SINTEZA I FOTOKEMIJSKE TRANSFORMACIJE
2- I 3-[4-(2-VINILFENIL)BUTA-1,3-DIENIL]TIOFENA****SYNTHESIS AND PHOTOCHEMICAL
TRANSFORMATIONS OF 2- AND
3-[4-(2-VINYLPHENYL)BUTA-1,3-DIENYL]THIOPHENE**Ivana Šagud¹, Željko Marinić², Irena Škorić¹¹Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije,
Zavod za organsku kemiju, Marulićev Trg 19, 10000 Zagreb, Hrvatska²Institut Ruđer Bošković, NMR Centar, Bijenička cesta 54, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: isagud@fkit.hr

Unutar naše grupe napravljena je studija ponašanja raznih butadienskih derivata, gdje je energija potrebna za reakciju dovedena ili fotokemijski [1] ili termičkim putem [2,3]. Studirani butadienski derivati pokazali su raznoliko ponašanje u pobuđenom stanju pri čemu je izoliran i u potpunosti okarakteriziran veliki broj novih bicikličkih produkata. S obzirom da je biciklo[3.2.1]oktanski kostur prisutan u velikom broju biološki aktivnih spojeva izoliranih iz prirode [4] odlučili smo proširiti dosadašnja istraživanja. Kao jedan od smjerova daljnjeg istraživanja ovog širokog područja odlučili smo se za zamjenu benzenske jezgre heterocikličkom (tiofenskom) jezgrom.



U tu svrhu sintetizirani su 2- i 3-[4-(2-vinilfenil)buta-1,3-dienil]tiofeni. Razvijena su dva zasebna sintetska puta u svrhu povećanja ukupnog iskorištenja. S obzirom na sintezu nastaju dva izomera svakog spoja i to *cis,cis*- i *cis,trans*-izomer koji su razdvojeni i okarakterizirani. Također su provedena ispitivanja u pobuđenom stanju koja su dala uvid u ponašanje derivata i omogućila preparativne sinteze novih bicikličkih spojeva.

Literatura:

- [1] I. Kikaš, I. Škorić, M. Kovacs, L. Fodor, Ž. Marinić, K. Molčanov, B. Kojić-Prodić, O. Horvath, *J. Org. Chem.* 76 (2011) 8641–8657.
- [2] I. Škorić, F. Pavošević, Ž. Marinić, M. Šindler, M. Eckert-Maksić, M. Vazdar, D. Margetić *Org. Biomol. Chem.* 9 (2011) 6771–6778.
- [3] D. Vuk, Ž. Marinić, K. Molčanov, D. Margetić, I. Škorić *Tetrahedron* 70 (2014) 886–891.
- [4] D.C. Ericsson, L.E. Cuca, M. Sefkow, *J. Nat. Prod.* 72 (2009) 1245–1248.

FOTOKEMIJA 2/4/5-(2-VINILSTIRIL)OKSAZOLA

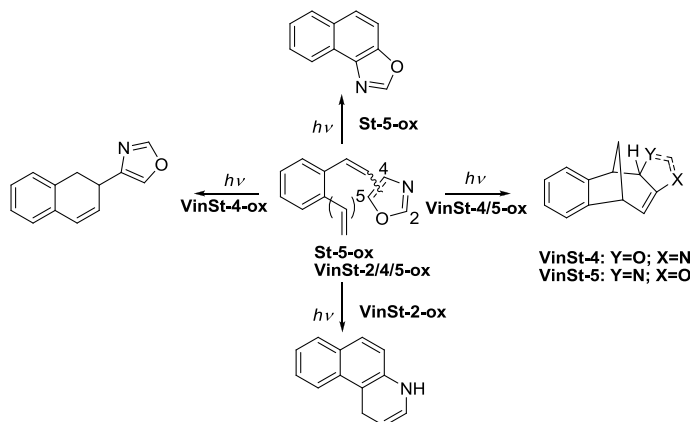
PHOTOCHEMISTRY OF 2/4/5-(2-VINYLSSTYRYL)OXAZOLES

Ivana Šagud¹, Željko Marinić², Marija Šindler-Kulyk¹

¹Zavod za organsku kemiju, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije,
Sveučilište u Zagrebu, Marulićev Trg 19, 10000 Zagreb, Hrvatska

²NMR Centar, Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: isagud@fkit.hr

Oksazoli spadaju u peteročlane aromatske spojeve s dva heteroatoma u jezgri, kisikom i dušikom, koji uvelike utječu na njihova svojstva. Oksazolske strukture se pojavljuju u velikom broju u prirodi prisutnih spojevaka koji pokazuju visoku biološku aktivnost [1, 2].



Novi 2-, 4 i 5-(2-vinilstiril)oksazoli sintetizirani su u svrhu istraživanja intramolekulskih reakcija u pobuđenom stanju. Zanjihovu pripremu razvijeni su i korišteni razni sintetski putevi koji su uključivali Wittigovu, Brederick-Gomperovu te Van Leusenovu reakciju. Položaj stilirne skupine bitno utječe na tijek fotokemijske reakcije i nastajanje različitih produkata. Osvjetljavanjem supstituiranih derivata oksazola, ovisno o supstituentima i njihovim položajima u jezgri, dobiveni su različiti hetero-policiklički spojevi kao što su naftoksazoli [3], fuzionirani oksazolo-benzobicyclo[3.2.1]heksadienski derivati [4] ili arilni derivati benzokinolina. Svi novi derivati okarakterizirani su modernim spektroskopskim metodama.

Literatura:

- [1] V.S.C. Yeh, *Tetrahedron* 60 (2004) 11995–12042.
- [2] P. Wipf, *Chem. Rev.* 95 (1995) 2115–2134.
- [3] I. Šagud, F. Faraguna, Ž. Marinić, M. Šindler-Kulyk, *J. Org. Chem.* 76 (2011) 2904–2908.
- [4] I. Šagud, S. Božić, Ž. Marinić, M. Šindler-Kulyk, *Beilstein J. Org. Chem.* 10 (2014) 2222–2229.

PM7 I DFT STUDIJ MEHANIZAMA HVATANJA SLOBODNIH RADIKALA MOKRAČNOM KISELINOM

PM7 AND DFT STUDY ON THE FREE RADICAL SCAVENGING MECHANISMS OF URIC ACID

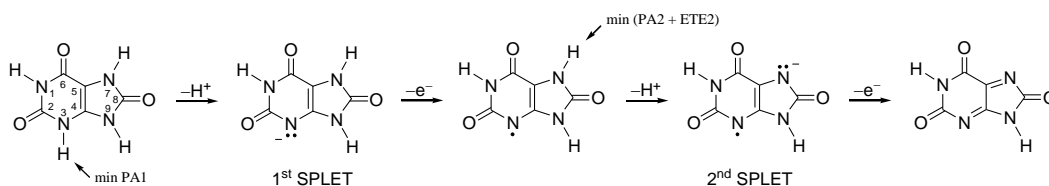
Ana Amić¹, Bono Lučić²

¹Josip Juraj Strossmayer University, Department of Biology,
Ulica cara Hadrijana 8A, 31000 Osijek, Croatia
e-mail: ana.amic@biologija.unios.hr

²Ruđer Bošković Institute, NMR Center, PO Box 180, 10002 Zagreb, Croatia
e-mail: lucic@irb.hr

It has been suggested that the rise in plasma antioxidant potency observed after the consumption of fruits and vegetables is not caused by the flavonoids (polyphenols), but is the consequence of increased uric acid levels. Polyphenol concentrations in human plasma are much lower ($< 5 \mu\text{M}$) than that of uric acid ($\sim 300 \mu\text{M}$) [1]. Uric acid is the product of purine metabolism with both beneficial and harmful effects on human health [2]. This endogenous antioxidant may protect against oxidative stress by free radical scavenging [3].

Reaction enthalpies related to hydrogen atom transfer (HAT), single electron transfer-proton transfer (SET-PT), and sequential proton loss electron transfer (SPLET) mechanisms were studied using MOPAC2012 COSMO PM7 and Gaussian 09 DFT/M05-2X/6-311++G(d,p) SMD methods in water as a solvent [4]. Due to the lowest values of proton affinity (PA) and electron transfer enthalpy (ETE) both methods indicate double SPLET mechanism as thermodynamically preferred process.



As the scavenging mechanisms are highly influenced by the properties of the scavenged free radical species, we used DFT method for calculating the free energy (ΔG) of reactions of uric acid with $\cdot\text{OH}$, $\cdot\text{OOH}$, $\cdot\text{OCH}_3$, $\cdot\text{O}-\text{O}-\text{CH}=\text{CH}_2$, $\text{O}_2^{\cdot-}$ and $\cdot\text{OOCCL}_3$ free radicals [5]. Exergonicity of double SPLET mechanism reactions in aqueous solution indicates that uric acid is efficient for scavenging of $\cdot\text{OH}$ and $\cdot\text{OOCCL}_3$ free radicals.

References:

- [1] P.C.H. Hollman, Arch. Biochem. Biophys. 559 (2014) 100–105.
- [2] Y.Y. Sautin, R.J. Johnson, Nucleos. Nucleot. Nucl. 27 (2008) 608–619.
- [3] C.X.C. Santos, E.I. Anjos, O. Augusto, Arch. Biochem. Biophys. 372 (1999) 285–294.
- [4] E. Klein, V. Lukeš, M. Ilčin, Chem. Phys. 336 (2007) 51–57.
- [5] J.R. Leon-Carmona, A. Galano, J. Phys. Chem. B 115 (2011) 15430–15438.

**STABILNOST I BIOFIZIKALNA SVOJSTVA VIRUSA
MUMPSA I OSPICA****STABILITY AND BIOPHYSICAL PROPERTIES OF
MUMPS AND MEASLES VIRUS**Dora Sviben^{1,2}, Beata Halassy^{1,2}, Dubravko Forčić^{1,2}, Marija Brgles^{1,2}¹University of Zagreb, Centre for Research and Knowledge Transfer in Biotechnology,
Rockefellerova 10, 10000 Zagreb, Croatia²Center of Excellence for Viral Immunology and Vaccines, CERVirVac, Rijeka, Croatia
e-mail: dsviben@unizg.hr

Mumps (MuV) and measles viruses (MeV) are nonsegmented, negative stranded RNA viruses of the family *Paramyxoviridae*, subfamily *Paramyxovirinae*. MuV and MeV are the cause of mumps and measles disease, both preventable by vaccination. MuV and MeV have ribonucleocapsid enveloped with lipid bilayer which is spiked with two glycoproteins responsible for cell recognition and virus entry into the host cell. Biophysical properties of MuV and MeV are still not well known and these are important in the basic research of these viruses and especially in vaccine production. The aim of this research was to investigate virus stability and infectivity at various pH and temperature conditions as well as to test the impact of various buffer solutions on MuV and MeV. Also, effects of ultrafiltration and ultracentrifugation on viruses were investigated. Concentrations of live MuV or MeV were determined by 50 % cell culture infective dose assay (CCID₅₀ assay) and the result of this assay is the virus titer. Size and concentration of virus particles were determined by Nanoparticle Tracking Analysis (NTA) using NanoSight instrument. Size and concentration of virus particles are of utmost importance since they provide insight into particle integrity and possible aggregation which is presumed to be one of factors causing loss of infectivity. Functionality of MuV glycoproteins under different pH conditions was additionally monitored by *in vitro* MuV capability to agglutinate guinea pig red blood cells. Although the size of MuV and MeV is reported to be up to 600 nm, our results so far indicate that filtration through 450 nm filter does not affect virus titers. Mean sizes of MuV and MeV measured by NTA method were 222.2 ± 9.83 and 185.7 ± 13.98 nm, and 90 % of particles were below 308 and 272 nm respectively. Pelleting of viruses by ultracentrifugation resulted in poor titer recoveries and this correlated with increasing ultracentrifugation time. On the other hand, lower centrifugation times did not effectively pellet the virus as shown by the number of virus particles in supernatant. Ultrafiltration on 100 kDa membranes (regenerated cellulose and PES) proved to be effective in virus concentration. Hemagglutination assay showed irreversible deleterious impact of extreme pH conditions on viruses and these conditions also induced changes in size. It can be concluded that MuV and MeV are of very delicate structure and easily lose infectivity in procedures aimed for their purification although their structural integrity remains intact.

ODREĐIVANJE *N*-ACETIL-*L*-CISTEINA I *N*-ACETIL-*L*-CISTEIN ETIL ESTERA PRIMJENOM SIA METODE SA SPEKTROFOTOMETRIJSKOM DETEKCIJOM

DETERMINATION OF *N*-ACETYL-*L*-CYSTEINE AND *N*-ACETYL-*L*-CYSTEINE ETHYL ESTER BY USING SIA METHOD WITH SPECTROPHOTOMETRIC DETECTION

Lea Kukoč-Modun¹, Dimitrios Tsikas², Maja Biočić¹,
Tomislav Kraljević^{1,3}, Njedomir Radić¹

¹Sveučilište u Splitu, Kemijsko-tehnološki fakultet, Zavod za analitičku kemiju,
Laboratorij za spektroskopiju i senzore, Teslina 10/V, 21000 Split, Hrvatska
e-mail: lkmodun@gmail.com

²Hannover Medical School, Institute of Clinical Pharmacology,
Carl-Neuberg-Str. 1, 30625 Hannover, Njemačka

³Sveučilište u Mostaru, Fakultet prirodoslovno-matematičkih i odgojnih znanosti,
Odsjek za kemiju, 88000 Mostar, Bosna i Hercegovina

N-acetil-*L*-cistein (NAC) je aminotiolni antioksidans koji se koristi kao mukolitička tvar te je djelotvoran protuotrov kod trovanja paracetamolom. Najnovija klinička istraživanja nisu potvrdila pretpostavljeni zaštitni utjecaj *N*-acetil-*L*-cisteina na organizam, u borbi protiv bolesti uzrokovanih oksidacijskim stresom [1]. Razlog tome bi mogla biti njegoova niska biodostupnost. Zbog navedenog Tsikas et al. [2] esterificirali su karboksilnu skupinu *N*-acetil-*L*-cisteina te sintetizirali aminotiolni spoj *N*-acetil-*L*-cistein etil ester (NACET) koji ima izražena lipofilna svojstva, što utječe na poboljšanje farmakokinetičkih svojstava [1]. Cilj ovog istraživanja je razvoj metode određivanja *N*-acetil-*L*-cisteina i *N*-acetil-*L*-cistein etil estera primjenom analize sa slijednim injektiranjem u protoku (Sequential injection analysis, SIA) uz spektrofotometrijski detektor.

Razvijena i vrednovana metoda zasniva se na redoks-reakciji u kojoj NAC ili NACET reduciraju Cu(II)-neokuproin u Cu(I)-neokuproin, čija se apsorbancija bilježi pri 458 nm. Računalno kontrolirana crpka (Cheminert M50), koja omogućava kretanje tekućine kroz sustav spregnuta je s više-pozicijskim ventilom s upravljačkim modulom. U postupku razvoja metode optimizirani su kemijski i protočni parametri: temperatura, pH-vrijednost, koncentracije reagensa, volumen petlje zadržavanja, dužina reaktora (reakcijske petlje), volumen i brzina protoka osnovne otopine, volumen injektiranja otopine standarda ili uzorka, volumen injektiranja reagensa, redosljed injektiranja. Odziv spektrofotometrijskog detektora bilježen je s učestalošću od 5 s⁻¹.

Temeljem eksperimentalnih podataka izračunane su analitičke karakteristike predložene metode za pojedini analit: linearno dinamičko područje, granica određivanja i granica dokazivanja. Ispitana je ponovljivost signala te utjecaj interferirajućih vrsta.

Literatura:

- [1] D. Giustarini, A. Milzani, I. Dalle-Donne, D. Tsikas, R. Rossi, *Biochem. Pharmacol.* 84 (2012) 1522–33.
- [2] D. Tsikas, S. Dehnert, K. Urban, A. Surdacki, H.H. Meyer., *J. Chromatogr. B* 877 (2009) 3442–55.

N-1 I C-5 SUPSTITUIRANI CITOZINSKI I URACILNI I C-6 SUPSTITUIRANI PIROLO[2,3-*d*]PIRIMIDINSKI DERIVATI: SINTEZA I BIOLOŠKA ISPITIVANJA

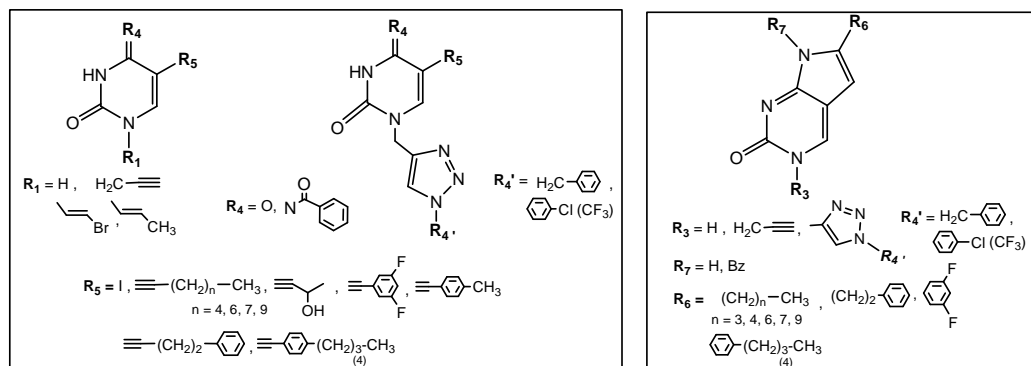
N-1 AND C-5 SUBSTITUTED CYTOSINE, URACIL AND C-6 SUBSTITUTED PYRROLO[2,3-*d*]PYRIMIDINE DERIVATIVES: SYNTHESIS AND BIOLOGICAL EVALUATION

Maja Stipković Babić¹, Ana Ratković¹, Moris Mihovilović¹, Mande Miošić¹, Livia Kurajica¹, Filip Blažeković¹, Marijana Jukić², Ljubica Glavaš-Obrovac², Silvana Raić-Malić¹, Tatjana Gazivoda Kraljević¹

¹University of Zagreb, Faculty of Chemical Engineering and Technology,
Department of Organic Chemistry, Marulićev trg 20, 10000 Zagreb, Croatia

²J.J. Strossmayer University of Osijek, Faculty of Medicine Osijek, Department of Medicinal
Chemistry, Biochemistry and Clinical Chemistry, Huttlerova 4, HR-31000 Osijek, Croatia

N-alkylated pyrimidine and pyrrolo[2,3-*d*]pyrimidine derivatives have a great role in modern medicine and have shown rather marked antitumor and antiviral activities [1]. The novel *N*-1 substituted and C-5 alkynylated *N*⁴-benzoylcytosine and uracil derivatives have been synthesized by *N*-alkylation of pyrimidine bases and subsequent Pd-catalysed Sonogashira cross-coupling reaction. *N*-1 triazolyl derivatives were afforded *via* 'click' reaction, while pyrrolo[2,3-*d*]pyrimidine derivatives were prepared by *in situ* *N*-heteroannulation of C-5 alkynylated derivatives. The novel compounds were evaluated against HeLa, CaCo-2, Raji and K562 tumor cell lines.



References:

- [1] T. Gazivoda Kraljević, M. Klika, M. Kralj, I. Martin-Kleiner, S. Jurmanović, A. Milić, J. Padovan, S. Raić-Malić, *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 22 (2012) 308–312.

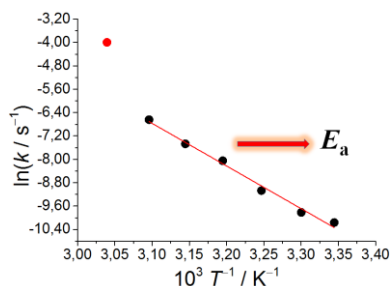
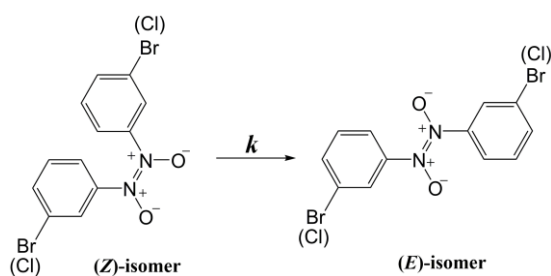
**MEHANIZAM TERMALNE E-Z IZOMERIZACIJE
3-HALOGENNITROZOBENZENA U ČVRSTOM STANJU**

**MECHANISM OF THERMALLY INDUCED SOLID-STATE E-Z
ISOMERIZATION OF 3-HALOGENNITROSOBENZENES**

Katarina Varga, Hrvoj Vančik

University of Zagreb, Faculty of Science and Mathematics, Department of Chemistry,
Horvatovac 102A, 10000 Zagreb, Croatia
e-mail: vancik@chem.pmf.hr

The study of interactions of organic molecules, reaction mechanisms and phase transitions in the solid state are fundamental for understanding the structural changes that occur at the molecular level. Especially rare chemical transformations in solid state are thermal *E-Z* isomerizations, because most of the literature about the solid *E-Z* isomerizations has been focused on photoreactions. In comparison with the photochemical reactions, the thermally induced chemical reactions in crystals were from the mechanistic viewpoint less investigated. In our previous works we have developed the approach to the study of the solid-state reaction mechanisms by using the dimerizations and dissociations of the aromatic C-nitroso compounds as models. [1] These nitroso molecules appear in solution prevalently as monomers that are in equilibrium with *E*- and *Z*-dimers (azodioxides). Since the azodioxide bond is relatively weak, the *E-Z* isomerization exclusively follows the pathway through the formation of the monomer intermediates. Direct “torsional” *E-Z* isomerization has not been observed as yet.



In this work we demonstrate that the azodioxide *Z-E* isomerization in the solid state can occur without the formation of the free nitroso molecule. The reaction is studied by measuring the kinetics of isomerizations of 3-chloro- and 3-bromonitrosobenzene at different temperatures and by analyzing corresponding activation parameters under different phase conditions.

Reference:

- [1] H. Vančik, Aromatic C-nitroso compounds, Springer Verlag, Dordrecht, Heidelberg, London, New York, 2013.

BIOREDUKCIJA AROMATSKIH ALDEHIDA I KETONA

BIOREDUCTION OF AROMATIC ALDEHYDES AND KETONES

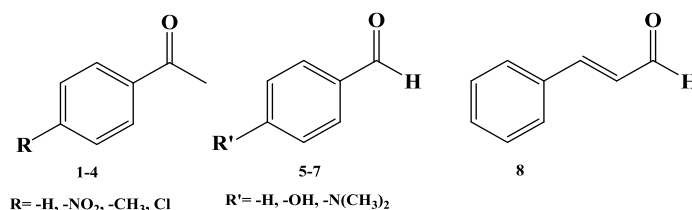
Dajana Gašo-Sokač^{1,2}, Mario Komar², Marija Štivojević²,
Valentina Bušić¹, Mirna Habuda-Stanić¹

¹Josip Juraj Strossmayer University of Osijek, Faculty of Food Technology Osijek,
Kuhačeva 20, HR-31000 Osijek, Croatia

²Josip Juraj Strossmayer University of Osijek, Department of Chemistry,
Cara Hadrijana 8/A, HR-31000 Osijek, Croatia

Plants have been considered as a potential source for catalytic biotransformation, and it is well established that crude preparations of certain common vegetables can serve as selective, high-yield reducing agents in organic synthesis. Several samples of whole plants were reported as sources of reductase activity with alcohol dehydrogenase systems such as apple (*Maluspumila*), carrot (*Daucuscarota*), cucumber (*Cucumissativus*), onion (*Allium cepa*), potato (*Solanumtuberosum*), and radish (*Raphanussativus*).

Experiments of biotransformations were carried using the aromatic carbonyl compounds **1–8** following previously described procedures, treating aldehydes and ketones with freshly slices of carrot (*Daucuscarota*), apple (*Maluspumila*), kohlrabi (*Brassica oleracea L gongylodes*) in aqueous solution. The products were analyzed by LC-MS. All tested carbonylic compounds were bioreduced yielding the corresponding alcohols with low to moderate yields. This is the first time that the biotransformation of carbonyl compounds have been successfully achieved using *Brassica oleracea L gongylodes*.



**ODJELJIVANJE ENANTIOMERA *N*-SUPSTITUIRANIH
2-HIDROKSIIMINOACETAMIDA I INTERAKCIJE
S KOLINESTERAZAMA****ENANTIOSEPARATION OF *N*-SUBSTITUTED
2-HYDROXYIMINOACETAMIDES AND INTERACTIONS
WITH CHOLINESTERASES**

Nikola Maraković¹, Anamarija Knežević², Vladimir Vinković², Zrinka Kovarik¹,
Goran Šinko¹

¹Institut za medicinska istraživanja i medicinu rada, Ksaverska cesta 2,
10001, Zagreb, Republika Hrvatska
e-mail: nmarakovic@imi.hr

²Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, 10000, Zagreb, Republika Hrvatska
e-mail: anamarija.knezevic@irb.hr

Acetylcholinesterase (AChE; EC 3.1.1.7) and butyrylcholinesterase (BChE; EC 3.1.1.8) play an important role in the neurotransmission and biotransformation of xenobiotics. Reversible AChE inhibitors are being used in the medical treatment of Alzheimer's disease. Also, organophosphorus (OP) nerve agents acting as an irreversible AChE inhibitors are a persistent threat to the general population because of their use as warfare agents in armed conflicts and terrorist attacks. The current therapy in cases of OP nerve agent poisoning includes the reactivation of AChE by quaternary pyridinium oximes. Cholinesterases (ChEs) are also known for displaying stereoselectivity toward reversible inhibitors and OP nerve agents. Therefore, we have designed and synthesized four chiral *N*-substituted 2-hydroxyiminoacetamides in racemic form with an aim to develop new reactivators of OP nerve agent-inhibited ChE. *N*-substituted 2-hydroxyiminoacetamides were prepared from previously reported 1-phenyl-allylamine. The presumed peripheral site-binding moiety ranged from an azide group to functionalized heterocycles connected with central *N*-(1-phenylpropyl)-2-hydroxyiminoacetamide scaffold *via* a 1,2,3-triazole ring. All racemic *N*-substituted 2-hydroxyiminoacetamides reversibly inhibited cholinesterases with clear preference for binding to BChE and reversible inhibition constants ranging from 45 $\mu\text{mol/L}$ to 245 $\mu\text{mol/L}$ for AChE and from 0.3 $\mu\text{mol/L}$ to 115 $\mu\text{mol/L}$ for BChE. To study the stereoselectivity of cholinesterases, we separated the enantiomers of *N*-substituted 2-hydroxyiminoacetamides using chiral HPLC with very good to excellent enantiomeric excess (88 % to 99 %). The absolute configuration of the enantiomers was determined by comparing their retention times with *N*-substituted 2-hydroxyiminoacetamides prepared from (*S*)-1-phenyl-allylamine. The enzymatic resolution of the racemic 1-phenyl-allylamine was performed using lipase B from *C. antarctica* (CaLB).

This work was supported in part by the Croatian Science Foundation (project 4307).

**STUDIJ UČINAKA PRIRODNIH ANTIOKSIDANSA NA
PROCESE U MODELNOM LIPIDNOM SUSTAVU****A STUDY OF THE ANTIOXIDATIVE EFFECTS OF NATURAL
COMPOUNDS ON THE PROCESSES IN MODEL
LIPID SYSTEM**

Ivana Tartaro Bujak, Branka Mihaljević

Institut Ruđer Bošković, Bijenička 54, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: itartaro@irb.hr, mihozeg@irb.hr

Lipidna peroksidacija i geometrijska izomerizacija na dvostrukoj vezi višenezasićenih masnih kiselina su dva važna procesa potaknuta radikalima lokaliziranim na S-atomu koji se normalno generiraju u živim organizmima. Navedeni procesi uzrokuju trajnu promjenu strukture lipida kao gradivnih komponenata staničnih membrana i kao posljedicu brojne poremećaje njenih normalnih funkcija.

Ova dva konkurentna procesa proučavana su u jednostavnom modelnom lipidnom sustavu pripremljenim dodatkom linolne kiseline (LiH), neionskog surfaktanta (Tween-20) i 2-merkptoetanolu [1]. Istražen je utjecaj dodatka askorbinske kiseline, α -tokoferola odnosno resveratrola na procese lipidne peroksidacije, s posebnom pažnjom usmjerenom i na pojavu procesa geometrijske izomerizacije koja do sada nije bila praćena paralelno s peroksidacijom lipida. Navedeni procesi inducirani su γ -zračenjem modelnih lipidnih sustava u kontroliranim uvjetima u kojima su tiilni radikali bile primarne inicijalne čestice. Za analizu izomera metilnog estera LiH upotrebljena je plinska kromatografija [2], dok je za kvantitativno određivanje hidroperoksida LiH korištena spektrofotometrijska feritiocijanatna metoda [3].

Utvrđeno je da u uvjetima ravnoteže s kisikom antioksidansi s većim afinitetom prema vodi učinkovito hvataju peroksilne radikale nastale u lančanom procesu lipidne peroksidacije, ali i da sudjeluju u reakciji s tiilnim radikalima, te na taj način istovremeno imaju i anti-izomerizirajuće svojstvo.

Ova istraživanja su pokazala da pojedini antioksidansi štite strukturu lipida od djelovanja slobodnih radikala, a efikasnost zaštite od lipidne peroksidacije i geometrijske izomerizacije ovisi o lokalizaciji antioksidansa u odnosu na granicu faza voda/lipid u modelnom sustavu.

Literatura:

- [1] B. Mihaljević, I. Tartaro, C. Ferreri, C. Chatgililoglu, *Org. Biomol. Chem.* 9 (2011) 3541–3548.
- [2] C. Ferreri, S. Kratzsch, O. Brede, B. Marciniak, C. Chatgililoglu, *Free Radical Bio. Med.* 38 (2005) 1180–1187.
- [3] B. Mihaljević, B. Katušin-Ražem, D. Ražem, *Free Radical Bio. Med.* 21 (1996) 53–63.

**ANALIZA TRIAZINSKIH I FENILUREA-HERBICIDA U TLU
MIKROVALNOM EKSTRAKCIJOM I TEKUĆINSKOM
KROMATOGRAFIJOM****ANALYSIS OF TRIAZINE AND PHENYLUREA HERBICIDES
IN SOIL BY MICROWAVE-ASSISTED EXTRACTION AND
LIQUID CHROMATOGRAPHY**

Gordana Mendaš¹, Iva Habinovec², Vlasta Drevenkar¹, Marija Dvorščak¹, Sanja Fingler¹, Sanja Stipičević¹, Želimira Vasilčić¹

¹Institute for Medical Research and Occupational Health,
Ksaverska c. 2, HR-10000 Zagreb, Croatia
e-mail: gmendas@imi.hr

²University of Zagreb, Faculty of Science, Department of Chemistry,
Horvatovac 102A, HR-10000 Zagreb, Croatia
e-mail: iva.habinovec@chem.pmf.hr

A microwave-assisted extraction procedure was designed for the extraction of phenylurea herbicides isoproturon, chlortoluron, diuron and linuron, triazine herbicide terbuthylazine, and its degradation product deethylterbuthylazine from soil. The sample preparation was optimized for final analysis by high-performance liquid chromatography with a UV diode array detector. The limit of detection for all the analytes in standard mixture prepared in deionized water was 5 ng ml⁻¹, whereas the limit of quantification was 18 ng ml⁻¹. The effects of the extraction solvent, temperature, and water content in soil on microwave extraction efficiency of triazines and phenylurea herbicides from soil were investigated by analysing spiked soil samples. The analytes were added to a forest soil in mass fractions ranging from 93 to 113 ng g⁻¹. The best results were achieved by extraction of soil with solvent mixture $\psi(\text{acetone}, n\text{-hexane}) = 1:1$ at 60 °C and at soil water content of 20 %. The extraction efficiency from Cmrok wet soil was 84 % for isoproturon, 80 % for chlortoluron, 60 % for diuron, 85 % for linuron, 93 % for terbuthylazine, and 95 % for deethylterbuthylazine. Extraction efficiency and reproducibility of triazine and phenylurea herbicides with $\psi(\text{acetone}, n\text{-hexane}) = 1:1$ at 60 °C was also tested by extracting analytes from two agricultural dry and wet soils to which they were added at different mass fraction levels ranging from 37 to 45 ng g⁻¹, from 93 to 113 ng g⁻¹, and from 374 to 450 ng g⁻¹. The extraction efficiency of analytes was not dependent on their mass fractions in soil. The recoveries ranged from 72 % for isoproturon and diuron to 79 % for deethylterbuthylazine with relative standard deviation between 7 and 10 %. The limit of detection for all of the analytes in soil was 10 ng g⁻¹.

SPECIFIČNO PREPOZNAVANJE LEKTINA KONKANAVALINA A I MANOZIL-LIPOKONJUGATA NA POVRŠINI LIPOSOMA

SPECIFIC RECOGNITION OF THE LECTINE CONCANAVALINE A AND MANNOSYL-LIPOCONJUGATES ON LIPOSOME SURFACE

Adela Štimac¹, Jelena Trmčić Cvitaš², Leo Frkanec²,
Oliver Vugrek², Ruža Frkanec¹

¹Sveučilište u Zagrebu, Centar za istraživanje i prijenos znanja u biotehnologiji,
Rockefellerova 10, 10000 Zagreb, Hrvatska,
e-mail: astimac@unizg.hr

²Institut Ruđer Bošković, Bijenička 54, 10000 Zagreb, Hrvatska

Dizajnirani su i sintetizirani mono-, di- i tetramanozilirani lipidni konjugati koji se sastoje od jedne, dvije i četiri molekule manoze vezanih različitom poveznicom na molekulu palmitinske kiseline ili distearoil-fosfatidiletanolamina. Kao poveznice šećernog i lipidnog djela korištene su molekule polietilen glikola, L-lizina, metil-(*R*)-3-hidroksi-2-metilpropionata i *N*-Cbz-aminoetanol. Sintetizirani amfifilni manozilirani lipidni konjugati ugrađeni su u liposome s ciljem pripreme površinski manoziliranih liposoma za studiranje površinskog prepoznavanja i proučavanja utjecaja multivalentnosti na afinitet i specifično prepoznavanje lektina, konkanavalina A. U prethodnim istraživanjima pokazali smo da se manozilirani adamantanski derivati mogu, koristeći molekulu adamantana, ugraditi u lipidni dvosloj dok je manozila izložena na površini liposoma što omogućuje interakcije sa specifičnim lektinima [1]. Poznato je da su interakcije između ugljikohidrata i lektina slabog afiniteta, ali one se mogu pojačati višestrukim interakcijama multivalentnih glikokonjugata s lektinima (klaster-efekt) [2]. Veličina i naboj manoziliranih liposoma ispitani su metodom dinamičkog raspršenja svjetlosti (engl. *dynamic light scattering*, DLS). Istraživanje interakcije manoziliranih liposoma s lektinom, konkanavalinom A provedeno je metodom kvarcne kristalne mikrovage (engl. *quartz crystal microbalance*, QCM) te praćenjem povećanja optičke gustoće liposomske suspenzije uslijed agregacije liposoma. Pokazano je da konkanavalin A specifično prepoznaje liposome s ugrađenim manozil-lipokonjugatima. Također je pokazano da afinitet konkanavalina A za manozil-lipokonjugate raste s porastom broja molekula manoze u molekuli lipokonjugata.

Literatura:

- [1] A. Štimac, S. Šegota, M. Dutour Sikirić, R. Ribić, L. Frkanec, V. Svetličić, S. Tomić, B. Vranešić, R. Frkanec, *BBA-Biomembrane* 1818 (2012) 2252–2259.
- [2] N. Jayaraman, K. Maiti, K. Naresh, *Chem. Soc. Rev.* 42 (2013) 4640–4656.

SINTETSKE STRATEGIJE PRIPRAVE PEPTIDNIH INTERKALATORA

SYNTHETIC STRATEGIES FOR THE PREPARATION OF PEPTIDE BASED INTERCALATORS

Josipa Matić, Tamara Šmidlehner, Filip Šupljika,
Marijana Radić Stojković, Ivo Piantanida

Institut Ruđer Bošković, Bijenička 54, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: jmatic@irb.hr

Novel phenanthridine based fluorophores [1] functionalized via peptide backbone are prepared using two strategies: classical or solution-phase methods and by solid-phase peptide synthesis (SPPS; Figure 1). [2] The advantage of solid-phase synthesis is easy preparation of small peptide libraries. In development of molecular probes, peptide intercalators have a prominent role while they combine unique features of both interacting species. In our case, phenanthridine moiety serves as an anchor to biological target but also as a good fluorescent reporter group for DNA, RNA and proteins. The length of the peptide linker combined with properties of different aromatic moieties attached offers additional interaction possibilities. The aim is to develop fluorescent probes with tunable properties that specifically interact with DNA, RNA and proteins which could lead to development of sensors and new drug candidates.

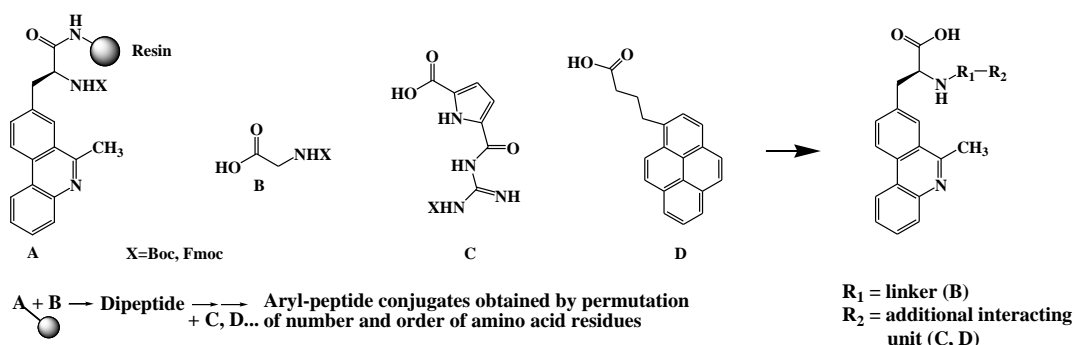


Figure 1. General procedure of solid phase synthesis with fluorophore amino acid (A) and selected amino acids (B, C, D)

Financial supports from the Croatian Science Foundation (grant no. 1477) and FP7-REGPOT-2012-2013-1, grant agreement number 316289 – InnoMol are gratefully acknowledged.

References:

- [1] L.-M. Tumor, M. Radić Stojković, I. Piantanida, Beilstein J. Org. Chem. 10 (2014) 2930–2954.
- [2] M. Dukšić, D. Baretić, V. Čaplar, I. Piantanida, Eur. J. Med. Chem. 45 (2010) 2671–2676.

RAČUNALNO PROUČAVANJE MEHANIZMA REDUKCIJE NITROBENZENA

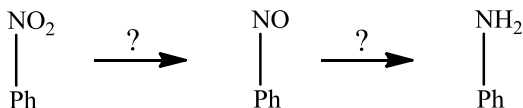
A COMPUTATIONAL STUDY OF THE NITROBENZENE REDUCTION MECHANISM

Marko Tomin¹, Igor Rončević², Zlatko Mihalić²

¹Institut Ruđer Bošković, Bijenička 54, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: marko.tomin@irb.hr

²Prirodoslovno-matematički fakultet; Kemijski odsjek, Horvatovac 102a, 10000 Zagreb, Hrvatska e-mail: ironcevic@chem.pmf.hr, mihalic@chem.pmf.hr

Lately, nitrobenzene, nitrosobenzene and their derivatives have received a significant amount of attention in modern solid-state and polymer chemistry [1,2]. The identification of mechanistic pathways in the reduction of nitrobenzene is very important for the understanding of the reactivity of nitrosoaromatics. Although the available data suggests a free-radical mechanism, a detailed energetic and structural characterization of all intermediates is yet to be found.



Using computational methods, we studied the reduction pathway of nitrobenzene to aniline in a protic environment. Due to the complexity of this $6e^-/6H^+$ mechanism, a framework for direct comparison of redox and non-redox reactions was devised. ω B97-XD/may-cc-pVTZ level of theory gave the best results with the MUE of 0.75 kcal/mol when compared to experimental data. Since some reaction intermediates generated in parallel reactions (for example, from PhNO_2H^+ and PhNO_2^- to PhNO_2H) have been experimentally confirmed, all possible elementary steps were taken into the consideration.

We calculated Gibbs energies of all investigated intermediates and proposed a mechanism in good agreement with experimental observations. Also, our lowest energy pathway provides an explanation for the evident difficulty in obtaining nitrosobenzene by direct reduction of nitrobenzene [3], as well as the lack of experimental data on reduction intermediates between hydroxyaniline and aniline.

References:

- [1] I. Halasz, I. Biljan, P. Novak, E. Meštrović, J. Plavec, G. Mali, V. Smrečki, H. Vančik, J. Mol. Struct. 918 (2009) 19–25.
- [2] A. Maganjić, I. Šolić, S. Milovac, I. Halasz, I. Biljan, H. Vančik, J. Phys. Org. Chem. 27 (2014) 177–182.
- [3] H. Vančik, Aromatic C-nitroso Compounds, Springer, Dordrecht, 2013.

**UTJECAJ TEMPERATURE I KONCENTRACIJE
ELEKTROLITA NA STVARANJE POLIELEKTROLITNIH
VIŠESLOJEVA I KOMPLEKSA U OTOPINI****TEMPERATURE AND ELECTROLYTE CONCENTRATION
INFLUENCE ON FORMATION OF POLYELECTROLYTE
MULTILAYERS AND COMPLEXES IN SOLUTION**

Jasmina Salopek, Josip Požar, Davor Kovačević

Faculty of Science, Department of Chemistry, Division of Physical Chemistry,
Horvatovac 102a, 10000 Zagreb, Croatia
e-mail: jsalopek@chem.pmf.hr

The formation of polyelectrolyte multilayers of polyallylammonium cation (PAH) and polystyrenesulfonate anion (PSS) was investigated in aqueous solutions of NaClO_4 at 25 °C and 40 °C by means of quartz crystal microbalance with dissipation monitoring (QCM-D). The obtained results showed that there was no significant difference between total adsorbed mass of polyelectrolytes at 25 °C and 40 °C (8 layers deposited in $0.5 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaClO}_4$). However, change in electrolyte concentration from 0.1 mol dm^{-3} to 0.5 mol dm^{-3} led to the difference in the amount of positively charged polyelectrolyte incorporated into multilayers. At lower concentration of salt, the amount of adsorbed PAH was lower than PSS, but at higher concentration, the amount of adsorbed PAH became much larger than PSS. This is in accordance with DLS results for aggregation of positive colloid complexes which showed that there was no aggregation of complexes at 0.1 mol dm^{-3} and the same concentration of PAH as in QCM-D experiments. Spectrophotometric study of the supernatant in 1:1 reaction mixture of PAH and PSS was also performed at different temperatures and NaClO_4 concentration. Results showed that equilibration in the system was very slow, but it was considerably affected by increasing temperature and ionic strength of solution. For instance, at 60 °C in $2 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaClO}_4$, equilibrium was reached within 24 hours. Also, when the ionic strength in solution was higher, there was more pronounced asymmetric incorporation of polyelectrolytes in the product of reaction in solution which is in accordance with asymmetric incorporation of polyelectrolytes into multilayers.

NUKLEOFUGALNOST KARBONATA

NUCLEOFUGALITY OF CARBONATES

Mirela Matić, Bernard Denegri, Olga Kronja

University of Zagreb, Faculty of Pharmacy and Biochemistry,
Ante Kovačića 1, 10000 Zagreb, Croatia
e-mail: mmatic@pharma.hr

The leaving group abilities (nucleofugalities), defined by nucleofuge-specific parameters (N_f and s_f), were determined for a series of aromatic and aliphatic carbonates from solvolysis rate constants of X,Y-substituted benzhydryl carbonates in a series of aqueous ethanol mixtures by applying the linear free energy relationship (LFER) equation (1).

$$\log k (25\text{ }^\circ\text{C}) = s_f (E_f + N_f) \quad (1)$$

In this correlation equation k is the solvolysis first-order rate constant, s_f (slope of the correlation line) and N_f (negative intercept on the abscissa) are the nucleofuge-specific parameters, whereas E_f represents the electrofugality parameter of variously substituted benzhydrylium electrofuges. [1] N_f parameters can be employed for comparing heterolytic reactivities of diverse types of leaving groups in a wide range of reactivity. Furthermore, combining previously determined parameters in equation (1), the duration of a particular solvolytic reaction can be estimated. [1–4]

The applicability of quantum-chemical model reaction presented in Scheme 1 (M06-2X method) has been examined for determination of N_f parameters of both aromatic and aliphatic carbonates (including HCO_3^-). A very good correlation between experimental and calculated reactivities makes possible to extend the nucleofugality scale significantly.

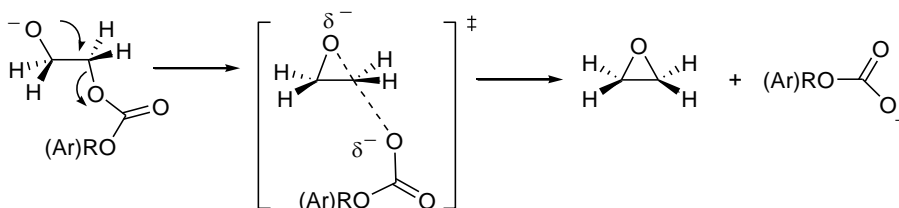


Figure 1. Model reaction.

References:

- [1] N. Streidl, B. Denegri, O. Kronja, H. Mayr, *Acc. Chem. Res.* 43 (2010) 1537–1549.
- [2] M. Matić, B. Denegri, O. Kronja, *J. Org. Chem.* 77 (2012) 8986–8998.
- [3] M. Matić, B. Denegri, O. Kronja, *Eur. J. Org. Chem.* (2014) 1477–1486.
- [4] B. Denegri, M. Matić, O. Kronja, *Org. Biomol. Chem.* 12 (2014) 5698–5709.

**UTJECAJ „MIJEŠANIH“ STAKLOTVORACA NA
STRUKTURNA I ELEKTRIČNA SVOJSTVA
Li₂O–(B₂O₃)–P₂O₅–GeO₂ STAKALA**

**THE INFLUENCE OF MIXED GLASS FORMER EFFECT ON
STRUCTURAL AND ELECTRICAL PROPERTIES OF
Li₂O–(B₂O₃)–P₂O₅–GeO₂ GLASSES**

Kristina Sklepić¹, Petr Mošner², Ladislav Koudelka², Andrea Moguš-Milanković¹

¹Institut Ruder Bošković, Bijenička c. 54, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: ksklepic@irb.hr

²University of Pardubice, Faculty of Chemical Technology,
Department of General and Inorganic Chemistry, 53210 Pardubice, Czech Republic

U posljednje vrijeme od posebnog su interesa istraživanja novih staklenih i keramičkih materijala zbog njihove primjene kao kruti elektroliti u baterijama [1,2]. Posebna pažnja pridaje se poboljšanju stabilnosti i učinkovitosti litijevih baterija. Novija istraživanja upućuju na poboljšana električna svojstva čvrstih staklenih elektrolita. Jedan od takovih sustava su stakla koja pokazuju „efekt miješanih staklotvoraca“ gdje zamjena jednog staklotvorca drugim uz stalan udio nositelja naboja uzrokuje značajan porast ionske vodljivosti [3].

U ovom istraživanju proučavana su strukturna i električna svojstva dvije serije stakala, ternarnih: 40Li₂O–(60-x)P₂O₅–xGeO₂, x=0-25 i kvaternih 40Li₂O–10B₂O₃–(50-x)P₂O₅–xGeO₂, x=0-20. Radi se o ionski vodljivim staklima kod kojih promjene strukture izazvane postepenim povećanjem udjela GeO₂ u strukturi stakla uzrokuju promjene električne provodnosti. U obje je serije stakala udio nositelja naboja, litijevih iona, konstantan pa su istraživane promjene električnih svojstava isključivo posljedica strukturnih promjena izazvanih dodatkom germanijevog oksida.

Strukturne su promjene u istraživanim serijama stakala praćene Ramanovom spektroskopijom dok su električna svojstva analizirana impedancijskom spektroskopijom u širokom frekvencijskom i temperaturnom području. Iz Ramanovih je spektara vidljivo da uvođenje GeO₂ uzrokuje depolimerizaciju fosfatnih lanaca što dovodi do stvaranja Ge-O-P i Ge-O-B veza. Navedene strukturne promjene imaju za posljedicu povećanje električne provodnosti za tri odnosno dva reda veličine ovisno o sastavu stakla.

Ova istraživana stakla koja sadrže litijeve ione imaju velik potencijal za primjenu kao kruti elektroliti u litijevim baterijama i važno je daljnje istraživanje na ovim sustavima zbog njihove povećane ionske vodljivosti i značajnijeg prijenosa naboja unutar materijala.

Literatura:

- [1] N.J. Dudney, Glass and ceramic electrolytes for lithium and lithium-ion batteries in lithium batteries: Science and technology, Springer, New York, 2003.
- [2] A. Moguš-Milanković, K. Sklepić, H. Blažanović, P. Mošner, M. Vorokhta, L. Koudelka, J. Power Sources 242 (2013) 91–98.
- [3] D. Larink, H. Eckert, J. Phys. Chem. C, 116 (2012) 26162–26176.

IZOTIOCIJANATI KAO INHIBITORI ACETILKOLINESTERAZE I NJIHOVI IZVORI U DIVLJE RASTUĆIM BILJKAMA REPUBLIKE HRVATSKE

ISOTHIOCYANATES AS ACETYLCHOLINESTERASE INHIBITORS AND THEIR SOURCES FROM CROATIAN WILD-GROWING PLANTS

Franko Burčul¹, Ivana Generalić Mekinić², Azra Đulović³, Iva Kardum³,
Jasna Brekalo³, Diana Stojanov³, Mirko Ruščić⁴, Gina Rosalinda De Nicola⁵,
Sabine Montaut⁶, Patrick Rollin⁷, Ivica Blažević³

¹University of Split, Faculty of Chemistry and Technology, Department of Biochemistry,
Teslina 10/V, 21000 Split, Croatia
e-mail: franko@ktf-split.hr

²University of Split, Faculty of Chemistry and Technology,
Department of Food Technology and Biotechnology, Teslina 10/V, 21000 Split, Croatia
e-mail: gene@ktf-split.hr

³University of Split, Faculty of Chemistry and Technology, Department of Organic Chemistry,
Teslina 10/V, 21000 Split, Croatia
e-mail: azra0405@yahoo.com, iva.tinkerbelle@gmail.com, jasna17brekalo@hotmail.com,
stojanov@net.hr, blazevic@ktf-split.hr

⁴University of Split, Faculty of Sciences, Department of Biology,
Teslina 12/V, 21000 Split, Croatia
e-mail: mrus@pmfst.hr

⁵Consiglio per la Ricerca e la sperimentazione in Agricoltura - Centro di Ricerca per le Colture
Industriali (CRA-CIN), Via di Corticella 133, I-40128 Bologna, Italy
e-mail: ginarosalinda.denicola@entecra.it

⁶Laurentian University, Department of Chemistry and Biochemistry, Biomolecular Sciences
Programme, 935 Ramsey Lake Road, Sudbury, ONP3E 2C6, Canada
e-mail: smontaut@laurentian.ca

⁷ICOA-UMR 7311, Université d'Orléans, B.P. 6759, F-45067 Orléans Cedex 2, France
e-mail: patrick.rollin@univ-orleans.fr

Glucosinolates (GLs) stand as molecular tags of the plant order Brassicales [1–5]. Via their hydrolysis products, mostly isothiocyanates (ITCs) and nitriles, GLs are known to be responsible for diverse biological activities such as anticarcinogenic, antimicrobial, and others. Those strikingly bio-relevant thiosaccharidic secondary metabolites are found without exception in all 16 families of the order Brassicales. All known GLs (*ca.* 130 molecules) display a remarkable structural homogeneity based on a hydrophilic β -D-glucopyrano unit, which bears a *O*-sulfated anomeric (*Z*)-thiohydroximate function connected to a rather hydrophobic side chain. Depending on plant species, the constitution of R is the sole structural variant, in which diversified aliphatic, arylaliphatic or indolic arrangements can be found. Extraction and purification of fair amounts of GLs from suitable plant species that contain high concentrations of a single or a small number of GLs represent one of the most used sources of these compounds. Thus, the GL quantitative and

qualitative investigation including mostly GC-MS, HPLC-DAD and HPLC-MS techniques is an ongoing research activity and new structures are documented. Our group investigated plants wild-growing in Croatia which included many edible, medicinal and endemic ones, such as *Alyssoides utriculata* (L.) Medik. [1], *Arabis turrita* L., *Aurinaria leucadea* (Guss.) K. Koch [2,3], *Aurinaria sinuata* (L.) Grieseb [3], *Brassica botteri* Vis., *Capsella rubella* Reut., *Degenia velebitica* Degen Hayek [4], *Diploptaxis eruroides* (L.) DC, *Fibigia triquetra* (DC.) Boiss. ex Prantl, *Lunaria annua* L. [5], *Peltaria alliacea* Jacq. These plants represent sources of various GLs which include aliphatic ones, mostly thiofunctionalized (glucoerucin, glucoraphanin, glucoberberoin, glucoalyssin, glucocamelinin, glucoarabin, 9-methylsulfonylnonyl GL), olefinic (sinigrin, gluconapin, glucobrassicinapin) and branched (glucoputranjivin) ones, while *D. eruroides* contained arylaliphatic gluconasturtiin.

One of the most common forms of neurodegenerative disorders, affecting many elderly people, is Alzheimer disease (AD). Inhibition of acetylcholinesterase (AChE) serves as a strategy for the treatment of AD (as well as some other neurological diseases), and various natural products, such as alkaloids, flavonoids, terpenes, etc. have long been recognized as such inhibitors. Information on ITCs, the main degradation products of GLs, as AChE inhibitors are rare to non-existent. AChE inhibitory activity measurements were carried out by using the slightly modified Ellman method [1,6,7]. Nine pure aliphatic and aromatic ITCs were tested and six of them showed very good inhibition from 60 % to 99 % at concentrations of 136 $\mu\text{g}/\text{mL}$, showing a potential for treatment of AD.

References:

- [1] I. Blažević, F. Burčul, M. Ruščić, J. Mastelić, *Chem. Nat. Compd.* 49 (2013) 374–378.
- [2] I. Blažević, A. Radonić, M. Skočibušić, G.R. De Nicola, S. Montaut, R. Iori, P. Rollin, J. Mastelić, M. Zekić, A. Maravić, *Chem. Biodivers.* 8 (2011) 2310–2321.
- [3] I. Blažević, G.R. De Nicola, S. Montaut, P. Rollin, *Nat. Prod. Commun.* 8. (2013) 1463–1466.
- [4] G.R. De Nicola, I. Blažević, S. Montaut, P. Rollin, J. Mastelić, *J. Chem. Biodivers.* 8 (2011) 2090–2096.
- [5] I. Blažević, T. Maleš, M. Ruščić, *Chem. Nat. Compd.* 49 (2014) 1154–1157.
- [6] I. Generalić Mekinić, F. Burčul, I. Blažević, D. Skroza, D. Kerum, V. Katalinić, *Nat. Prod. Commun.* 8 (2013) 471–474.
- [7] M. Jukić, F. Burčul, I. Carev, O. Politeo, M. Miloš, *Nat. Prod. Res.* 26 (2012) 1703–1707.

AMINO SUPSTITUIRANI BENZIMIDAZO [1,2-*a*]KINOLINI KAO FLUORESCENTNI pH SENZORI

AMINATED BENZIMIDAZO[1,2-*a*]QUINOLINES AS FLUORESCENT pH SENSORS

Ema Horak¹, Svjetlana Krištafor¹, Nataša Perin²,
Marijana Hranjec², Ivana Steinberg¹

¹University of Zagreb, Faculty of Chemical Engineering and Technology,
Department of General and Inorganic Chemistry, Marulićev trg 19, 10000 Zagreb, Croatia

²University of Zagreb, Faculty of Chemical Engineering and Technology,
Department of Organic Chemistry, Marulićev trg 20, 10000 Zagreb, Croatia
e-mail: ivana.murkovic@fkit.hr

The design and development of small molecules for (chemo)sensing applications is of great current interest in organic chemistry and sensing technology [1]. Heterocyclic molecules are able to change their photophysical properties when selective recognition of an anionic/cationic substrate occurs. A great variety of heterocyclic molecules have been employed for the development of optical sensors where the benzimidazole unit is one of the most important key building block. Fluorescent sensing probes that respond to pH or metal ions are foundation for development of chemical sensors for a range of necessary applications in biomedical diagnostics, cell biology and environmental monitoring.

In this work the photophysical and acid-base properties of amino substituted benzimidazo[1,2-*a*]quinolines have been studied [2]. Novel compounds are presented as potential pH sensitive probes. Most compounds show strong fluorescence in visible spectral range ($\lambda = 500$ nm) and drastic changes in respective photophysical properties associated with their protonation-deprotonation equilibria. These attractive findings were used as the basis for development of novel polymer based sensing materials with excellent optical sensor properties. For example, strong decrease of fluorescence intensity and wavelength shift of the immobilised compound **1** occurs on its exposure to acidic solution (Figure 1).

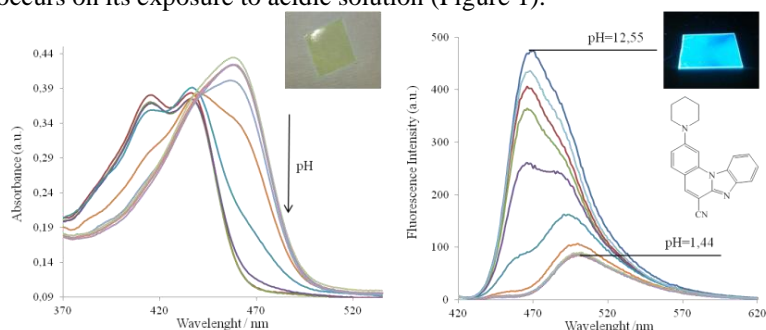


Figure 1. Strong decrease of fluorescence of the immobilised 2-piperidinylbenzimidazo[1,2-*a*]quinoline-6-carbonitrile dye due to protonation.

References:

- [1] X.D. Wang, O. S. Wolfbeis, *Anal. Chem.* 85 (2) (2013) 487–508.
- [2] N. Perin, M. Hranjec, G. Pavlović, G. Karminski-Zamola, *Dyes Pigments* 91 (2011) 79–88.

SINTEZA CIKLIČKIH PEPTIDA S UGRAĐENOM MURAMINSKOM KISELINOM NA ČVRSTOM NOSAČU

SOLID PHASE SYNTHESIS OF CYCLIC PEPTIDES CONTAINING MURAMIC ACID

Kristina Vlahoviček-Kahlina, Andreja Jakas

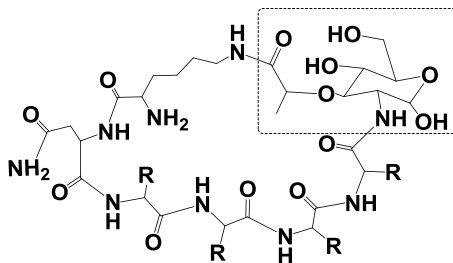
Institut Ruđer Bošković, Bijenička c. 54, 10000 Zagreb, Hrvatska

Ugljikohidrati smješteni na površini stanice posreduju u mnogim biološkim procesima koji uključuju stanično prepoznavanje te su odgovorni za zaštitu stanice odnosno organizma. Priprava glikopeptida kao potencijalnih lijekova temelji se na mogućnosti da jedna molekula istovremeno ostvari i peptid-ugljikohidrat i ugljikohidrat-ugljikohidrat interakcije.

Peptidi su spojevi od velike važnosti za čitav niz imunoloških i neuroloških procesa. Njihov razvoj prema komercijalnom lijeku je vrlo zanimljiv, izazovan, ali i dugotrajan proces. Peptidi nisu pogodni za primjenu u terapijske svrhe jer podliježu proteolitičkom djelovanju peptidaza, velikih su molekulskih masa i imaju polarni karakter što otežava njihov transport kroz staničnu membranu i krvno-moždanu granicu, a njihova fleksibilnost omogućava interakciju s različitim receptorima što rezultira nepoželjnim nuspojavama.

Potreba za modifikacijom peptida dovela je i do njihove ciklizacije. Ciklizacija peptida povećava njihovu biološku aktivnost, enzimatsku stabilnost i rigidnost konformacije. Pretpostavlja se da će uvođenje šećerne aminokiseline (*engl.* sugar amino acid, SAA) zbog ugljikohidrat-ugljikohidrat interakcije pridonijeti dovođenju glikopeptida do zadanog cilja gdje može iskazati svoju biološku aktivnost. Nadalje, uvođenje šećerne aminokiseline utjecat će na konformaciju peptida, a time i receptorsku aktivnost i selektivnost.

Sintetizirana je knjižnica cikličkih peptida i njihovih linearnih analoga s muraminskom kiselinom (Mur) na različitim položajima u odnosu na biološki aktivnu sekvencu Leu-Ser-Lys-Leu (LSKL). Sinteza glikopeptida provedena je na čvrstom nosaču (*engl.* solid phase peptide synthesis, SPPS) korištenjem standardne Fmoc-strategije.



ODREĐIVANJE VEZNIH DOMENA RIBOSOMSKOG PROTEINA L12 VAŽNIH U STVARANJU KOMPLEKSA SA SERIL-tRNA-SINTETAZOM POMOĆU FLUORESCENCIJSKE SPEKTROMETRIJE

FLUORESCENCE APPROACH FOR DETERMINATION OF RIBOSOMAL L12 PROTEIN BINDING DOMAINS INVOLVED IN INTERACTION WITH SERYL-tRNA SYNTHETASE

Vlatka Godinić Mikulčić, Igor Sviben, Jasmina Rokov-Plavec, Ita Gruić-Sovulj

Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek, Zavod za biokemiju,
Horvatovac 102A, Zagreb, Hrvatska

e-mail: vgodinic@chem.pmf.hr, svibach@gmail.com, rokov@chem.pmf.hr, gruic@chem.pmf.hr

Protein synthesis in the cell is performed by large macromolecular machines called ribosomes. A general feature of the ribosomes is the large subunit stalk protuberance which consists of 4–6 copies (2–3 dimers) of ribosomal protein L12 (P1) attached to r-protein L10 (P0). Recently, it was reported that seryl-tRNA synthetase (SerRS) interacts with L12 protein in order to recycle tRNA^{Ser} molecules in archaeon *Methanothermobacter thermautotrophicus* [1]. Ribosomal L12 proteins feature three structural domains; the N-terminal domain (NTD) responsible for dimer formation and binding to the ribosome, a central hinge region (linker), and a C-terminal region. The C-terminal region, composed of 18 amino acids, is involved in binding of elongation factors during translation. Since the C-terminal region of L12 is highly negatively charged as tRNA, it is plausible that SerRS binds to this region.

We exploited the intrinsic tryptophan SerRS fluorescence to study the interaction with L12 which does not contain tryptophans. Excitation wavelength was fixed at 295 nm, and the emission spectra were recorded from 300 to 420 nm. SerRS emission spectra show L12 concentration-dependent intensity enhancement ($\lambda_{\max} = 335$ nm) corresponding to a binding event ($K_d(\text{SerRS:L12}) = (129 \pm 14.2)$ nM). The determined affinity of the L12 deletion variant lacking 18 C-terminal amino acids (L12 Δ C18) was 5-fold lower ($K_d = (540 \pm 79.1)$ nM) relative to the wild-type. This indicates that L12 NTD also participates in binding to SerRS. Interestingly, L12 mutant with linker shortened by one amino acid (L12 Δ C18 Δ A66) has compensatory effect on binding and the K_d was restored to (235 ± 14.6) nM. It thus appears that a loose disordered full-length L12 linker destabilizes L12 NTD:SerRS interface. We hypothesize that the C-terminal region positions the linker in a specific orientation upon binding of full-length L12 to SerRS. In accordance, we detected the binding of SerRS to the isolated free-standing C-terminal peptide (p18) confirming our hypothesis that a part of the SerRS:L12 interface involves interactions with C-terminal region as a second binding site for SerRS. These results show that L12 protein is exposing more than one binding site for SerRS because both N- and C-terminal region of L12 can contribute to the binding of SerRS.

Next we established an approach in which guanidine hydrochloride (GnHCl)-induced denaturation of a L12:SerRS complex is used to compare the stability of SerRS as a free protein or in the complex with L12. Tryptophan (Trp) fluorescence experiments report directly on the environment of the 22 Trp residues in dimeric SerRS. Upon complete unfolding, SerRS emission

spectra show a red shift in emission wavelength maxima (λ_{max}) from ~335 nm to 355 nm. Denaturation curves over the range 0–4 M GdnHCl indicate a striking difference in stability of non-complexed and complexed SerRS. The GdnHCl concentration required to obtain 50 % protein denaturation (midpoint of transition) of non-complexed SerRS was 1.0 M, whereas the observed midpoint of transition for the protein in a complex was 1.9–2.0 M. Thus, L12 apparently protects SerRS from chemical denaturation. Finally, we determined the following K_d values (nM) for the L12:SerRS complex 129 ± 14.2 , 205 ± 23.2 , 379 ± 17.0 , 126 ± 17.6 in the presence of 0.03, 0.3, 0.5 and 1 M sodium chloride, respectively. Stability of the L12:SerRS complex was not significantly perturbed in the presence of high NaCl concentrations. *Methanothermobacter thermautotrophicus* is a moderate halophile and requires high osmolarity for normal growth and methanogenesis. Our data agree with observation that other archaeal complexes formed by SerRS [2] can function optimally at high intracellular salt concentrations.

References:

- [1] V. Godinic-Mikulcic, J. Jaric, B. Greber, V. Franke, V. Hodnik, G. Anderluh, N. Ban, I. Weygand-Durasevic, *Nucleic Acids Res.* 42 (2014) 5191–5201.
- [2] V. Godinic-Mikulcic, J. Jaric, C.D. Hausmann, M. Ibba, I. Weygand-Durasevic, *J. Biol.Chem.* 286 (2011) 3396–3404.

FLUOROFOROM OBILJEŽENI DERIVATI NUKLEOBAZA FLUOROPHORE-TAGGED NUCLEOBASE DERIVATIVES

Dijana Saftić, Biserka Žinić, Marijana Radić Stojković,
Lidija-Marija Tumir, Ivo Piantanida

Ruđer Bošković Institute, Bijenička cesta 54, 10000 Zagreb, Croatia
e-mail: dsaftic@irb.hr

Novel 1,4-disubstituted-1,2,3-triazole pyrimidines were synthesized applying the copper(I)-catalysed azide-alkyne cycloaddition (CuAAC) (Figure 1) [1]. Beside intrinsically fluorescent triazole ring (well-known pharmacophore), various substituents (originating from different azide precursors) additionally enable a wide range of applications of new derivatives [2]. For instance, 1,2,3-triazole ring can noncovalently interact with DNA/RNA by hydrogen bonding and aromatic stacking interactions and spectrophotometrically report on small structural differences of DNA as well as RNA secondary structure [3]. Novel triazole-nucleobase derivatives were prepared as amino acids with both, N- and C- enabled coupling, which allows easy and versatile incorporation into large variety of novel oligopeptides for various applications [5,6]. Furthermore, triazole-nucleobase was combined with phenanthridine (Figure 1), later added with the aim to increase DNA/RNA affinity and contribute to the spectrophotometric recognition, thus yielding dual-fluorescence reporter conjugate.

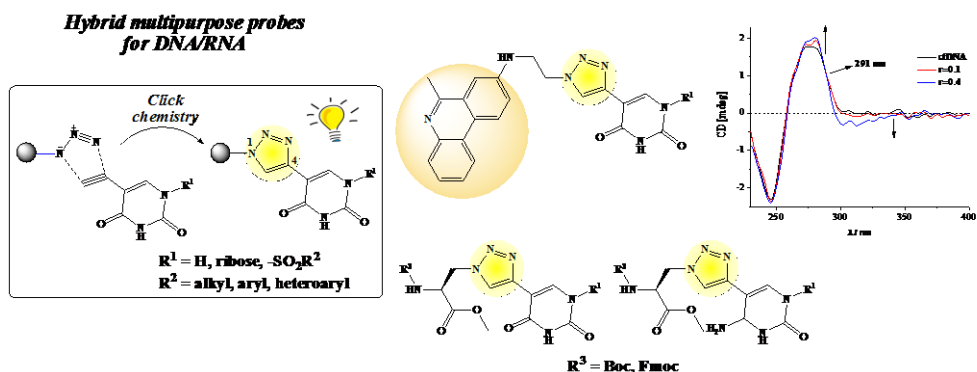


Figure 1.

References:

- [1] Croatian Science Foundation, Grant No. 1477
- [2] J.-F. Lutz, Z. Zarafshani, *Adv. Drug Deliv. Rev.* 60 (2008) 958–970.
- [3] E. Trinquet, G. Mathis, *Mol. Biosyst.* 2 (2006) 381–387.
- [4] M. Radić Stojković, P. Piotrowski, C. Schmuck, I. Piantanida, *Org. Biomol. Chem.* 13 (2015) 1629–1633.
- [5] M. Dukšić, D. Baretić, I. Piantanida, *Acta Chim. Slov.* 59 (2012) 464–472.

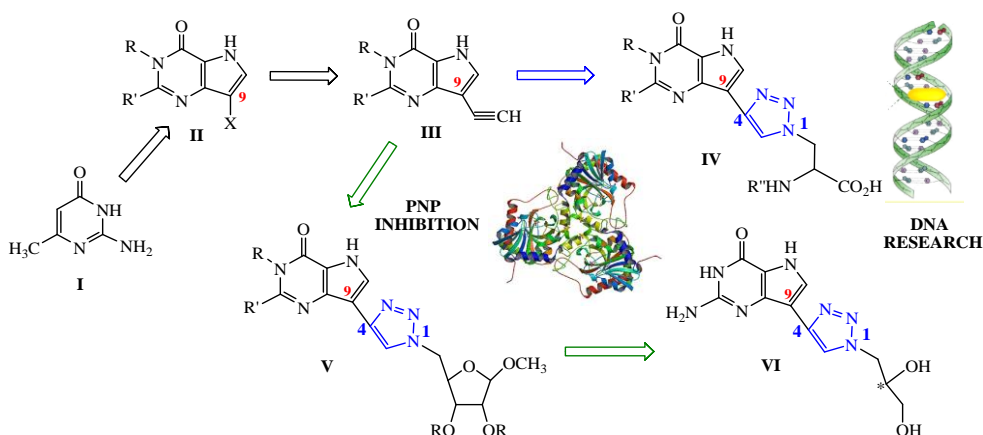
SINTEZA TRIAZOLNIH DERIVATA 9-DEAZAGVANINA KAO VIŠENAMJENSKIH PROBA

SYNTHESIS OF 9-DEAZAGUANINE TRIAZOLE DERIVATIVES AS MULTIPURPOSE PROBES

Željka Ban, Biserka Žinić, Ivo Piantanida

Ruđer Bošković Institute, Bijenička 54, 10000 Zagreb, Croatia
e-mail: zeljka.ban@irb.hr

Novel derivatives that incorporate 9-deazaguanine linked via a triazole ring to a sugar or amino acid derivatives were synthesized as potential inhibitors of Purine nucleoside phosphorylase (PNP), antitumor agents and highly selective probes for the sensing of nucleic acid secondary structures [1].



Following the most commonly used approach for the formation of the pyrrole ring from pyrimidine **I**, novel 9-deazaguanine (9-DG) derivatives **II** were synthesized and transformed to **III** by Sonogashira coupling reaction. Copper(I)-catalyzed azide-alkyne cycloaddition (CuAAC) between **III** and ribose or serine derivatives gave 1,4-disubstituted triazole derivatives **IV** and **V**, as well as optically active aliphatic 9-DG derivative **VI** (scheme).

The use of click chemistry allows the *N*-1-substituent of the 1,2,3-triazole ring to be easily varied, through the use of different azides, which enables tuning of the electronic and optical properties of the nucleobase analogues.

Reference:

- [1] Croatian Science Foundation, Grant No. 1477.

**POLIMORFI 2-AMINO-4-METILPIRIDINIJEVA
SALICILATA – SINTEZA I STRUKTURA****POLYMORPHS OF 2-AMINO-4-METHYLPYRIDINE
SALICYLATE – SYNTHESIS AND STRUCTURE**

Neven Golenić, Ivan Ilić, Tomislav Piteša, Dominik Cinčić

Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek,
Horvatovac 102a, 10000 Zagreb, Republika Hrvatska
e-mail: dominik@chem.pmf.hr

Salicilna kiselina jedna je od poznatijih farmakološki aktivnih tvari koja se u organizam najčešće unosi u obliku derivata acetilsalicilne kiseline, aspirina. U ovome radu pripravljena je sol salicilne kiseline s 2-amino-4-pikolinom koja kristalizira u dva polimorfna oblika. Triklinski oblik (Forma I) prethodno je već opisan u literaturi te su njegovi strukturni podatci iznađeni u bazi strukturnih podataka Cambridge Structural Database (CSD) [1,2]. Za monoklinski oblik (Forma II) dobiveni su jedinični kristali te mu je određena kristalna i molekulska struktura metodom rendgenske difrakcije na jediničnom kristalu. Oba polimorfa izučavana su metodom difrakcije rendgenskih zraka na praškastom uzorku i diferencijalnom pretražnom kalorimetrijom. Asimetrična jedinka oba polimorfa sadrži dvije deprotonirane molekule salicilne kiseline i dvije protonirane molekule

2-amino-4-metilpiridina. Kationi i anioni međusobno su povezani vodikovim vezama vrste $N-H\cdots O$ i stvaraju prstenasti motiv $R_2^2(8)$. Forma I kristalizira u prostornoj grupi P-1, a ioni u kristalu međusobno su povezani vodikovim vezama vrste $N-H\cdots O$ u diskretne komplekse koji se sastoje od četiri ionska para. Kompleksi su nadalje povezani u tri dimenzije vodikovim vezama vrste $C_{ar}-H\cdots O$. U kristalima Forme II, koja kristalizira u prostornoj grupi P21/c, ionski parovi međusobno su povezani u lance vodikovim vezama vrste $N-H\cdots O$ koji se nadalje povezuju u tri dimenzije vodikovim vezama vrste $C_{ar}-H\cdots O$.

Metodom mljevenja potpomognutim kapljevinom te metodom starenja izučavana je mogućnost nastajanja oba polimorfna oblika. Pokazalo se da je Formu I moguće izolirati samo kristalizacijom iz otopine i to u smjesi s Formom II dok su svi mehanokemijski pokusi rezultirali fazno čistim kristalima Forme II.

**Literatura:**

- [1] F.H. Allen, Acta Crystallogr. B 58 (2002) 380–388.
- [2] M. Hemamalini, H.-K. Fun, Acta Crystallogr. E 66 (2010) o2151–o2152.

KONTROLA POLIMORFIZMA SCHIFFOVE BAZE U MEHANOKEMIJSKOJ REAKCIJI I SINTEZI IZ OTOPINE

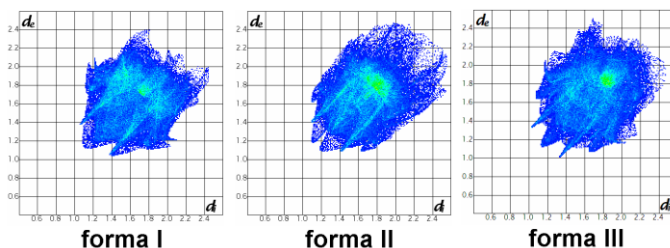
POLYMORPHISM CONTROL IN MECHANOCHEMICAL AND SOLUTION SYNTHESIS OF A SCHIFF BASE

Marija Zbačnik, Ivana Nogalo, Dominik Cinčić

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

Imini izvedeni iz *o*-hidroksi aromatskih aldehida i ketona dobri su modelni spojevi pri izučavanju keto-enolne tautomerije, fotokromizma i termokromizma te su naveliko strukturno izučavani u posljednjih dvadesetak godina [1].

U ovome radu izučavana je Schiffova baza dobivena kondenzacijom *o*-vanilina i 3-aminoacetofenona koja kristalizira u tri polimorfna oblika, ovisno o udjelu vode u otapalu (etanolu) i temperaturi kristalizacije. Pripravljene polimorfe opisane su FTIR spektroskopijom, diferencijalnom pretražnom kalorimetrijom, termogravimetrijom te difrakcijom rendgenskih zraka na praškastom uzorku i jediničnom kristalu. Forma I tali se pri 103 °C, forma II pri povišenoj temperaturi (iznad 80 °C) prelazi u formu I koji se tali pri 118 °C. U atmosferi para etanola, pri sobnoj temperaturi, forma II prelazi u formu I, dok druga dva polimorfa ne mijenjaju oblik. Dva polimorfa od tri moguće je pripremiti metodom mljevenja. Pokazana je mogućnost usmjeravanja supramolekulskog povezivanja molekula, produkta kovalentne sinteze, prema željenom kristalnom obliku. Forma I pripravljena je metodom mljevenja krutih reaktanata bez prisustva kapljevine ili uz dodatak katalitičke količine etanola. Forma III dobivena je metodom mljevenja krutih reaktanata uz prisustvo kristala klica forme III. U kristalima sva tri polimorfa, molekule imina su u enol-imino obliku, konformacijski su različite te se međusobno povezuju vodikovim vezama vrste C–H···O.



Literatura:

- [1] A. Blagus, D. Cinčić, T. Friščić, B. Kaitner, V. Stilinović, *Maced. J. Chem. Chem. Eng.* 29 (2010) 117–138.

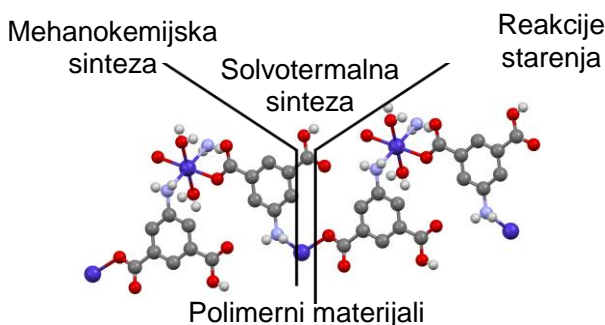
SINTEZA METALOORGANSKIH POLIMERA 5-AMINOIZOFTALNE KISELINE METODAMA STARENJA I MLJEVENJA

SYNTHESIS OF METALORGANIC POLYMERS OF 5-AMINOISOPHTHALIC ACID BY AGING AND GRINDING METHODS

Juraj Nikolić, Vinko Nemeč, Dominik Cinčić

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

U sklopu ovog istraživanja proučavani su metaloorganski polimeri 5-aminoizoftalne kiseline s cinkom i kobaltom(II) iz odgovarajućih acetata i oksida. Navedene vrste sintetizirane su u solvotermalnim uvjetima te mehanokemijski i starenjem. Mehanokemijska sinteza je sinteza uz pomoć mehaničke sile koja se provodi u mlinovima i tarionicima. Do sada je poznato više mehanokemijskih metoda: suho mljevenje, mljevenje potpomognuto tekućinom te mljevenje potpomognuto ionima i tekućinom [1]. Metoda starenja (engl. *accelerated aging*) je nova, energetska nezahtjevna metoda sinteze spojeva prilikom koje je jedini parametar od izuzetnog značenja vrijeme. Karakteristika reakcija starenja je da se usitnjena smjesa reaktanata treba ostaviti u parama nekog otapala, najčešće vode, određeno vrijeme [2]. Zbog iznimno blagih sintetskih uvjeta mnogi ih svrstavaju u metode "zelene kemije". Obje sintetske metode pokazale su se izuzetno prikladne za sintezu izučavanih polimernih materijala kao suprotnost solvotermalnoj sintezi. Dobiveni praškasti produkti proučavani su metodama difrakcije rendgenskih zraka na polikristalnom uzorku, termogravimetrije i infracrvene spektroskopije.



Literatura:

- [1] T. Friščić, D.G. Reid, I. Halasz, R.S. Stein, R.E. Dinnebier, M.J. Duer, *Angew. Chem. Int. Edit.* 49 (2010)712–715.
- [2] M.J. Cliffe, C. Mottillo, R.S. Stein, D.K. Bučar, T. Friščić, *Chem. Sci.* 3 (2012) 2495–2500.

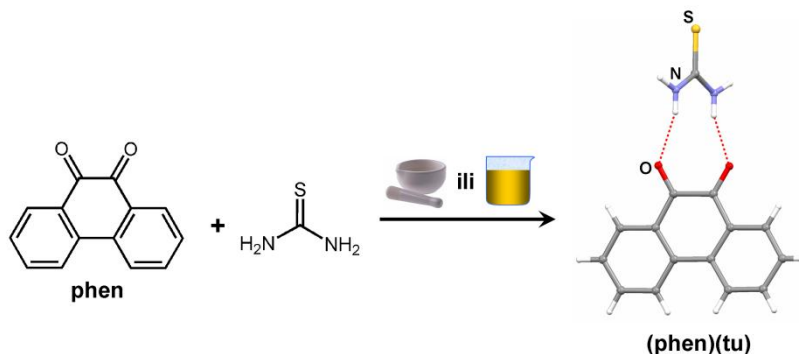
**KOKRISTALIZACIJA
9,10-FENANTRENKINONA I TIOUREE
COCRYSTALLIZATION OF
9,10-PHENANTHRENEQUINONE AND THIOUREA**

Nikola Škvorc, Vinko Nemeč, Dominik Cinčić

Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek,
Horvatovac 102a, 10 000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: dominik@chem.pmf.hr

U kristalnom inženjerstvu osnovni uvjet za ciljanu sintezu višekomponentnih molekularnih krutina jest poznavanje interakcija koje molekule povezuju u kristalnoj slagalini. To su sustavi u kojima dominiraju usmjerene interakcije koje su predvidljive, imaju definiranu geometriju, a ponajviše ih poznajemo kao vodikove i halogenske veze [1,2].

9,10-fenantrenkinon je policiklički aromatski spoj koji sadrži dvije karbonilne skupine i koji se ponajviše koristi u koordinacijskoj kemiji kao kelatirajući ligand s metalima [3]. U ovome radu mehanokemijskom sintezom izučavana je mogućnost nastajanja višekomponentnih kristala 9,10-fenantrenkinona s odabranim donorima halogenske i vodikove veze: 1,4-dijodtetrafluorbenzenom, *N*-bromsukcinimidom, *N*-jodsukcinimidom, ureom, tioureom, dimetiltioureom, 2-aminofenolom i benzen-1,2-diaminom. Svi produkti mehanokemijskih pokusa opisani su metodom difrakcije rendgenskih zraka na praškastom uzorku. Termička svojstva ispitana su termogravimetrijom i diferencijalnom pretražnom kalorimetrijom u struji dušika. Za kokristal 9,10-fenantrenkinona i tiouree dobiveni su jedinični kristali te mu je određena kristalna i molekulska struktura metodom rendgenske difrakcije na jediničnom kristalu.



Literatura:

- [1] D. Braga, F. Grepioni, Making Crystals by Design, WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2007.
- [2] G.R. Desiraju, Angew. Chem. Int. Edit. 46 (2007) 8342–8356.
- [3] F.H. Allen, Acta Crystallogr. B 58 (2002) 380–388.

KOKRISTALIZACIJA FENAZINA S DONORIMA VODIKOVE I HALOGENSKE VEZE

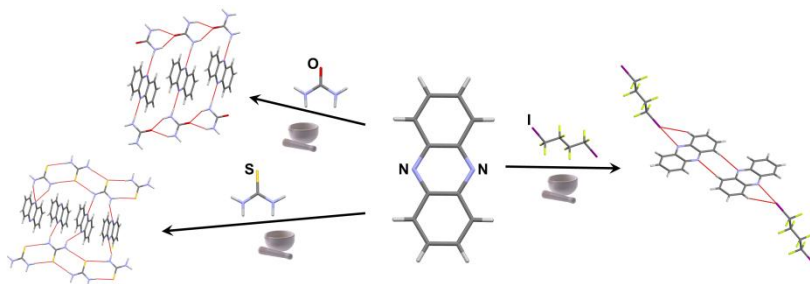
COCRYSTALLIZATION OF PHENAZINE WITH HYDROGEN AND HALOGEN BOND DONORS

Katarina Lisac, Vinko Nemec, Dominik Cinčić

Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek,
Horvatovac 102a, 10 000 Zagreb, Republika Hrvatska
e-mail: dominik@chem.pmf.hr

Fenazin je policiklički aromatski spoj koji se, kao i njegovi derivati, koristi u sintezi boja [1]. Boja takovih spojeva u čvrstom stanju ponajviše ovisi o njihovoj strukturi, ali je također izrazito uvjetovana morfologijom i veličinom kristala te načinom slaganja molekula u kristalu. Takovim materijalima može se ugoditi boja kokristalizacijom odnosno stvaranjem višekomponentnog kristala u kojem su molekule jedne komponente supramolekulski povezane s molekulama druge komponente kristala. Prema dostupnoj literaturi i rezultatima pretraživanja baze strukturnih podataka (Cambridge Structural Database) [2] pronađeno je samo 7 skupova podataka koji pripadaju višekomponentnim kristalima fenazina povezanih halogenskom vezom te 56 skupova podataka za kokristale s vodikovom vezom.

U ovome je radu mehanokemijskom sintezom te kristalizacijom iz otopine izučavana mogućnost nastajanja kokristala fenazina s odabranim donorima halogenske i vodikove veze: *N*-bromsukcinimidom, *N*-jodsukcinimidom, 1,4-dijod-1,1,2,2,3,3,4,4-oktafluorbutanom, sukcinimidom, ureom, tioureom i dimetiltioureom. S navedenim donorima izučavana je mogućnost nastanka kokristala u stehiometrijskim omjerima 1:1, 1:2 i 2:1, ovisno o donorskom potencijalu molekula donora. Pripravljene spojevi opisani su FTIR spektroskopijom, diferencijalnom pretražnom kalorimetrijom te difrakcijom rendgenskih zraka na praškastom uzorku i jediničnom kristalu.



Literatura:

- [1] Y. Enomoto, S. Tokita, J. Photopoly. Sci. Technol. 18 (2005) 117–120.
- [2] F.H. Allen, Acta Crystallogr. B 58 (2002) 380–388.

PRIPRAVA I KARAKTERIZACIJA RAZLIČITIH FARMAKOLOŠKIH OBLIKA DONEPEZILA

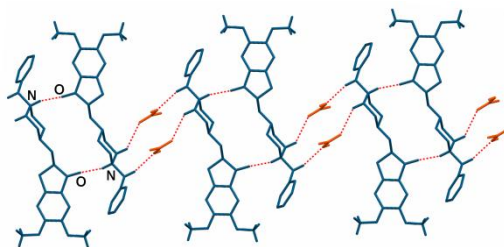
PREPARATION AND CHARACTERIZATION OF DIFFERENT PHARMACOLOGICAL FORMS OF DONEPEZIL

Marcela Gašparić, Dominik Cinčić

Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek,
Horvatovac 102a, 10 000 Zagreb, Republika Hrvatska
e-mail: dominik@chem.pmf.hr

Donepezil je piperidinski inhibitor acetilkolinesteraze koji se koristi kao lijek za ranu fazu Alzheimerove bolesti. Dobro prodire u središnji živčani sustav gdje inhibira enzime koji razlažu neiskorišteni acetilkolin [1]. Na tržištu dolazi u obliku donepezilovog klorida, pod trgovačkim imenom Aricept®, kao racemična smjesa dvaju enantiomera koji imaju gotovo identična farmakološka svojstva [2].

Pripravljene su soli donepezila sa dušičnom i perklornom kiselinom te su izučavane, kao i polazni spoj donepezilov klorid, metodom difrakcije rendgenskih zraka na praškastom uzorku, termogravimetrijom i razlikovno-pretražnom kalorimetrijom. Za nitratnu i perklornu sol metodom difrakcije rendgenskog zračenja na jediničnom kristalu iznađena je molekulska i kristalna struktura, te je ista dovedena u vezu s njihovim termičkim svojstvima. Analizirani su supramolekulski strukturni motivi koje ostvaruju molekule donepezila i uspoređeni su s dosad poznatim solima u bazi strukturnih podataka [3]. Karakterizacija čvrstog stanja uzoraka napravljena je kvantitativnim određivanjem topljivosti u vodi pri sobnoj temperaturi te ispitivanjem stabilnosti pri uvjetima različite relativne vlažnosti zraka.



Literatura:

- [1] Y. Kawakami, A. Inoue, T. Kawai, M. Wakita, H. Sugimoto, A. J. Hopfinger, *Bioorg. Med. Chem.* 4 (1996) 1429–1446.
- [2] H. Sugimoto, H. Ogura, Y. Arai, Y. Iimura, Y. Yamanishi, *Jpn. J. Pharmacol.* 89 (2002) 7–20.
- [3] F.H. Allen, *Acta Crystallogr. B* 58 (2002) 380–388.

**POTENCIOMETRIJSKO ODREĐIVANJE KATIONSКИH
TENZIDA U TEKUĆIM DEZINFICIJENSIMA****POTENTIOMETRIC DETERMINATION OF CATIONIC
SURFACTANTS IN LIQUID DISINFECTANTS**

Maja Karnoš, Nera Marjanović, Mateja Drulak, Marija Jozanović,
Milan Sak-Bosnar, Nikola Sakač

Josip Juraj Strossmayer University of Osijek, Department of Chemistry,
Cara Hadrijana 8a, HR-31000, Osijek, Hrvatska
e-mail: mhorvat2@kemija.unios.hr

Cationic surfactants have significant importance and are extremely effective for some specific uses because of their peculiar properties. They are used as softening agents, bactericides, corrosion inhibitors, flotation collectors, sterilizers and disinfectants. Due to the wide area of application, considerable interest for the application of cationic surfactants-sensitive electrodes has been seen in recent years.

Cationic surfactants can be determined in environmental samples using ion-sensitive field effect transistor (ISFET) devices [1], flow injection analysis [2], spectrofluorimetry and spectrophotometry [3], etc. Recently, there was presented a series of potentiometric surfactant sensors using a combination of PVC and other types of plasticizers [4,5].

In this work, a sensitive potentiometric surfactant sensor based on a highly lipophilic dimethyldioctadecylammonium- tetraphenylborate ion pair and bis(2-ethylhexyl) phthalate and PVC (2:1) as plasticizers were used as the end-point detector in ion-pair potentiometric surfactant titrations. Concentration of cationic surfactant was determined in several commercial disinfectant formulations. The known addition methodology was used for determination of the surfactant with considerably lower concentration in the mixture.

Literatura:

- [1] L. Campanella, L. Aiello, C. Colapicchioni, M. Tomassetti, *Anal. Lett.* 30 (1997) 1611–1629.
- [2] K. Agrawal, G. Agnihotri, K. Shrivastava, G.L. Mundhara, K.S. Patel, P. Hoffmann, *Microchim. Acta* 147 (2004) 273–278.
- [3] S. Li, S. Zhao, *Anal. Chim. Acta* 501 (2004) 99–102.
- [4] D. Madunić-Čačić, M. Sak-Bosnar, O. Galović, N. Sakač, R. Matešić-Puač, *Talanta* 76 (2008) 259–264.
- [5] G.A.E. Mostafa, *J. Pharm. Biomed. Anal.* 41 (2006) 1110–1115.

IN VITRO KARAKTERIZACIJA PROTEIN NOSAČ-AMINOKISELINSKE-HIDROKSILAZE ACDB OVISNE O FLAVIN-MONONUKLEOTID-OKSIDOREDUKTAZI**IN VITRO CHARACTERIZATION OF AN FMN-OXIDOREDUCTASE-DEPENDENT AMINOACYL-CARRIER PROTEIN HYDROXYLASE ACDB**

Vesna Simunović¹, Andrew Truman², Ivana Weygand-Đurašević^{1,†},
Ita Gruić Sovulj¹

¹Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek,
Horvatovac 102A, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: vesna.simunovic@chem.pmf.hr

²John Innes Center, Norwich NR4 7UH, Ujedinjeno Kraljevstvo

† died April 7 2014.

We are interested in deciphering the biochemical function of a new family of bacterial paralogs of atypical seryl-tRNA synthetases from methanogenic Archea that transfer an amino acid to a carrier protein instead onto a transfer RNA (tRNA). Curiously, in addition to the switch in the type of the acceptor macromolecule, amino acid:carrier protein (aa:Cp) ligases display alteration and relaxation in the substrate specificity, such that amino acid:Cp ligase from *Agrobacterium tumefaciens* preferentially activates alanine, whereas serine and glycine are activated to a 100-fold lesser extent [1].

In addition to a aa:Cp ligase and its cognate carrier protein, comprehensive bioinformatic analysis of aa:Cp ligase gene neighborhoods has revealed an additional highly conserved open reading frame (ORF) in a great number of species that largely belong to the Alpha- and Beta-Proteobacteria. This ORF is invariably located between the genes coding for carrier protein and aa:Cp ligase and encodes for a protein with a conserved fold of acyl-CoA dehydrogenase that bind flavin cofactors, designated AcdB. However, initial experiments have failed to detect alanine dehydrogenase/oxidase activity. Cofactor binding studies using thermophoresis have indicated that AcdB shows dissociation constant (K_d) toward flavine mononucleotide (FMN) in the high micromolar range whereas no binding affinity toward flavin adenine dinucleotide (FAD) was detected. Based on these results, we speculated that AcdB may be an aminoacyl, carrier protein-bound monooxygenase/hydroxylase whose activity depends on the FMN-oxidoreductase for a supply of FMNH₂ reducing equivalents.

To test this premise, we have reconstituted the initial steps of the aa:Cp ligase pathway by using liquid chromatography coupled to the time of flight mass spectrophotometer (LC-TOF-MS). Changes in the molecular mass of the carrier protein upon the transfer of the amino acid from the aa:Cp ligase to the phosphopantoyl (Ppant) arm of the Cp were analyzed allowing us for the first time detection of Cp forms loaded with up to three amino acids (alanine, glycine or serine). To ascertain whether additional aminoacylation events take place on the Ppant arm of the Cp, or elsewhere on the protein, Cp forms carrying mono-, or di- aminoacyl substrates were

subjected to MS-MS fragmentation, providing a firm evidence that the aminoacyl substrates were attached to the P_{antarm} of the Cp. Following the addition of purified AcdB and EasA, a well-characterized NADPH:FMN oxidoreductase from *Aspergillus fumigatus* involved in the biosynthesis of ergot alkaloids [2], several novel peaks displaying an increase of 16 mass units compared to the mass of carrier protein loaded with one, two or three alanines were detected. Interestingly, in addition to hydroxylating alanine, AcdB also hydroxylates serine or glycine(s) attached to the Cp. Together, our data argue that: *i*) AcdB, like aa:Cp-ligase, has a relaxed substrate specificity *ii*) AcdB hydroxylates only one of the amino acids irrespective of the number of aminoacylations per Cp *iii*) hydroxylation of alanine does not take place at C-3, leading to the formation of serine. Current experiments are underway that should clarify exactly which atom undergoes hydroxylation.

References:

- [1] M. Mocibob, N. Ivic, S. Bilokapic, T. Maier, M. Luic, N. Ban, I. Weygand-Durasevic, Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A. 107 (2010) 14585–90.
- [2] J.Z. Cheng, C.M. Coyle, D.G. Panaccione, S.E. O'Connor, J. Am. Chem. Soc. 132 (2010) 1776–1777.

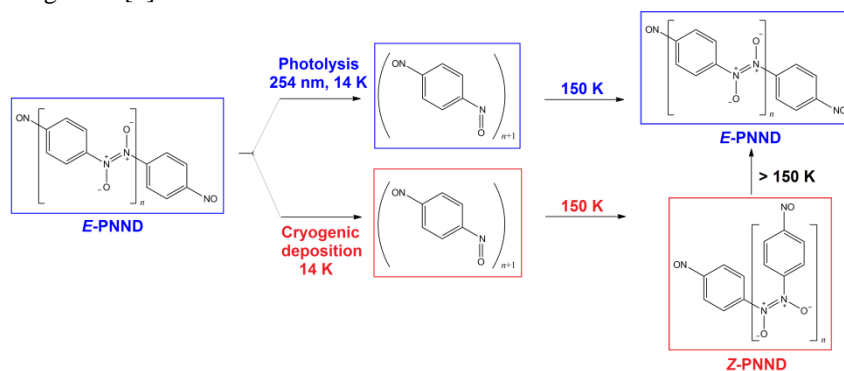
POLIMERIZACIJA I DEPOLIMERIZACIJA 1,4-DINITROZOBENZENA

POLYMERIZATION AND DEPOLYMERIZATION OF 1,4-DINITROSOBENZENE

Petar Bibulić, Igor Rončević, Katarina Varga, Zlatko Mihalić, Hrvoj Vančik

Faculty of Science, Department of Chemistry, Horvatovac 102a, 10000, Zagreb, Croatia
e-mail: pbibulic@chem.pmf.hr

Polymerization of 1,4-dinitrosobenzene was examined to gain a deeper understanding of solid-state reactions. The experimental part included the study of depolymerization and low temperature polymerization of 1,4-dinitrosobenzene in the solid state by IR spectroscopy. [1] The dissociation of azodioxide bonds was induced either by 254 nm UV irradiation at cryogenic temperatures or by sublimation. Monomers start to form azodioxy bonds at around 150 K. While *E*-polymers were obtained from monomers prepared by UV photodissociation, *Z*-forms were detected in samples prepared by sublimation and subsequent deposition on a CsI surface. Because *Z*-forms isomerize to more stable *E*-polymers above 150 K, these isomers are probably kinetically stabilized by interactions with alkali halide surface. Since polymerization is accompanied by phase transition, a non-linear Avrami-Erofeev kinetic analysis was utilized to determine kinetic parameters. [2] The results suggest a one-dimensional phase growth, as was expected for a linear polymer. The structure of oligomers was also studied computationally. DFT methods were used for shorter polymers, while longer ones were calculated by Fragment Molecular Orbitals method. Both methods suggest helical *E*-conformations to be the most stable, with a full helix turn after 38 Å. Lower stability of *Z*-isomers is explained by electrostatic repulsions between oxygen atoms which are spaced much more closely than in *E*-isomers. Since FMO method shows good correlation with the DFT results and is much faster, we find it suitable for theoretical study of similar polymers and further investigation. [3]



References:

- [1] N.P. Hacker, *Macromolecules* 26 (1993) 5937–5942.
- [2] M. Avrami, *J. Chem. Phys.* 7 (1939) 1103–1112.
- [3] M.S. Gordon, D.G. Fedorov, S.R. Pruitt, L.V. Slipchenko, *Chem. Rev.* 112 (2012) 632–672.

ESTEROLITIČKA AKTIVNOST *N*-SUPSTITUIRANIH PRIDINIJEVIH-4-OKSIMA

ESTEROLYTIC ACTIVITY OF *N*-SUBSTITUTED PYRIDINIUM-4-OXIMES

Igor Picek¹, Robert Vianello², Paulo Zekan¹, Blaženka Foretić¹

¹Faculty of Medicine, University of Zagreb, Šalata 3, Zagreb, 10000, Croatia
e-mail: ipicek@mef.hr

²Ruđer Bošković Institute, Bijenička cesta 54, Zagreb, 10000, Croatia
e-mail: robert.vianello@irb.hr

The pyridinium oximates, possessing a heteroatom with an unshared electron pair adjacent to the oxy-anionic nucleophilic center are well known α -nucleophiles that exhibit a much higher reactivity than common oxygen nucleophiles of similar basicity. This so-called α -effect makes them especially effective esterolytic agents involved in the reactivation of inhibited acetylcholinesterase [1], or catalysts which mimic the catalytic mode of hydrolases, as well as excellent Michael donors in nucleophilic additions. [2]

To provide new insights into the origin of the prominent esterolytic reactivities we combined kinetic and computational study to investigate reactions of selected pyridinium oximates with acetylthiocholine in aqueous solution (Figure 1).

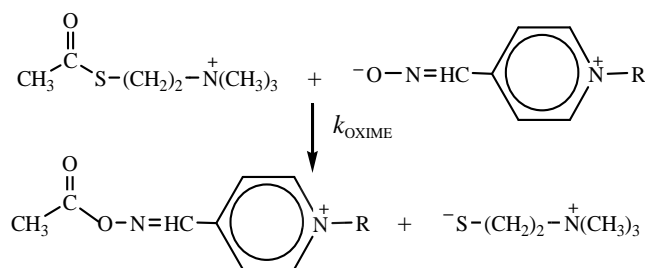


Figure 1. Investigated esterolytic reaction.

The kinetic parameters and free energy profiles for the reactions have been determined and enabled us to provide the structure-reactivity correlations.

References:

- [1] G. Šinko, M. Čalić, Z. Kovarik, FEBS Lett. 580 (2006) 3167–3172.
- [2] I. Picek, R. Vianello, P. Šket, J. Plavec, B. Foretić, J. Org. Chem. 80 (2015) 2165–2173.

**STVARANJE SUPRAMOLEKULSKIH MEMBRANA
MEĐUDJELOVANJEM FACIJALNOG BIOAMFIFILNOG
ANIONA S KATIONIMA KONVENCIONALNIH AMFIFILA,
METALNIM KATIONIMA ILI KELIRAJUĆIM LIGANDOM**

**BIOINSPIRED SUPRAMOLECULAR MEMBRANES
FORMATION BY INTERACTIONS OF FACIAL
BIOAMPHIPHILIC ANION WITH CONVENTIONAL
AMPHIPHILIC CATIONS, METAL CATIONS, OR
CHELATING LIGAND**

Tea Mihelj, Vlasta Tomašić

Ruder Bošković Institute, Bijenička c. 54, HR-10002 Zagreb, Croatia
e-mail: Tea.Mihelj@irb.hr, Vlasta.Tomasic@irb.hr

Molecular self-assembly is a process in which molecules spontaneously organize into ordered assemblies by noncovalent intermolecular forces. Inspired by biological systems, the design of supramolecular membranes, liquid crystals and solid-state structures, which could be applied in biomaterials design and preparation, is studied on the basis of large cholate steroidal anion (Ch^-), characterized by facial amphiphilicity, and unconventional self-aggregation (micellization) properties. Three types of complexes: catanionic, metalloamphiphilic, and host-guest complex are synthesized, and their tendency to form supramolecular membranes is examined.

Various experimental techniques are used: CHN analysis, NMR, IR spectroscopy, DSC, X-ray diffraction (WAXD and SAXD), microscopy (POM and SEM), and DFT calculations.

Solid catanionic amphiphiles are synthesized by the interaction of sodium cholate (NaCh) and different quaternary ammonium salts, by varying the number of *n*-dodecyl chains on the ionic group (n_c), and the number of ionic groups (n_h) in molecule. The room temperature (RT) structure of catanionics is atypical bilayer, and smectic at higher temperatures. The dependence of polymorphic and mesomorphic properties, thermodynamic parameters and bilayer thickness on n_c and n_h is studied. The investigation of the assembling modes of oppositely charged surfactants in catanionic forms is of great interest because different geometry, architecture and other related single surfactant abilities provide the possibility to design various resultant supramolecular structures of amphotropic properties.

Metalloamphiphiles are synthesized by the interaction of NaCh with Ag(I), Ca(II), Ba(II) or La(III) salts, and also by neutralization of Ag(I) oxide or Ca(II) hydroxyde with cholic acid. Interaction of Ch^- and metal cations at higher concentrations results with gelation, and bidentate coordination of Ch^- .

Addition of NaCh into the 18C6 ether cavity forms host-guest complex. The RT phase of addition complex is bilayered, while mesophase formed at higher temperatures is cholesteric.

**ODREĐIVANJE NIKLA U N-METIL PIPERAZINU
POMOĆU ICP-MS**

**DETERMINATION OF NICKEL IN
N-METHYL PIPERAZINE BY ICP-MS**

Nataša Župančić, Denis Bešić, Ernest Meštrović

PLIVA CROATIA Ltd., Member of TEVA Group,
Prilaz baruna Filipovića 25, HR-10000 Zagreb, Croatia
e-mail: natasa.zupancic@pliva.com

N-methyl piperazine (NMP) is used as intermediate in organic synthesis not only in pharmaceutical industry but also pesticides, dyes, plastics and other industries. The objective of this study was to assess the suitable method for determination of nickel elemental impurity present in NMP using inductively coupled plasma mass spectrometry (ICP-MS).

ICP-MS is capable of detecting metals and several non-metals in a sample at concentrations as low as one part in 10^{-12} (part per trillion, ppt). This is achieved by ionizing the sample with inductively coupled plasma and then using a mass spectrometer to separate and quantify those ions. Our goal was to optimize the process for mineralization in order to achieve good method recovery (70–150 %), RSD (≤ 20 %) and quantitation limit (≤ 0.5 J*). Proposed specification limit of Ni in NMP sample was NMT $10 \mu\text{g g}^{-1}$ (10 ppm).

**ODREĐIVANJE TRAGOVA ŽELJEZA POMOĆU
SPEKTROMETRIJE MASA S INDUKTIVNO SPREGNUTOM
PLAZMOM – SAVLADAVANJE KONTAMINACIJA,
MATIČNIH I POLIATOMSKIH INTERFERENCIJA**

**Fe DETERMINATION BY INDUCTIVELY COUPLED PLASMA
MASS SPECTROMETRY – OVERCOMING
CONTAMINATION, MATRIX AND POLYATOMIC
INTERFERENCES**

Irena Raič, Denis Bešić, Ernest Meštrović

PLIVA Croatia Ltd., Prilaz baruna Filipovića 25, 10000 Zagreb, Croatia
e-mail: irena.raic@pliva.com

Due to the fact that iron is common in any environment, including the laboratory equipment, tools and inventory, analysis of iron traces is a great challenge for analytical chemists, especially in cases when active pharmaceutical ingredient samples are analyzed.

This study was conducted to determine Fe contamination and to provide an adequate method for wet etching of supposedly clean laboratory glassware. The glassware is washed and rinsed by the usual methods (detergent, HNO₃, and distilled water). Iron adheres to glassware and is removed only by washing the glassware with a combination of acids (with Aqua Regia and also with a combination of HCl : H₂O₂ : deionized water at ratio of 1 : 1 : 5).

Sometimes noticed variability in Fe determinations could possibly be attributed to Fe contamination on glassware. Our data showed that glassware should be washed with an appropriate acid mixture before subsequent determinations of Fe.

Although ICP-MS is a powerful multi-element analytical technique, it does suffer from some well-documented spectral interferences, which can be especially problematic when complex and variable samples are analyzed. These interferences are major reason that less abundant isotopes of Fe are utilized in their respective analyses, which directly results with lower sensitivity and thus higher detection limit. The use of helium collision mode provides a unique mode of operation, in which all the isotopes become detectable.

This study provides an adequate method for overcoming contamination, matrix and polyatomic interferences and presents parameters of a method for successful Fe determination using ICP-MS helium collision gas mode.

**PROCJENA MOBILNOSTI ELEMENATA U TRAGOVIMA U
ŠUMSKIM TLIMA MEDVEDNICE**

**ASSESSMENT OF MOBILITY OF THE TRACE ELEMENTS IN
SOILS FROM THE MEDVEDNICA MOUNTAIN FORESTS**

Vibor Roje, Marin Dujmović, Ivan Perković,
Darko Bakšić, Nikola Pernar

University of Zagreb, Faculty of Forestry, Svetošimunska cesta 25, HR-10002 Zagreb, Hrvatska
e-mail: vroje@sumfak.hr

Soil is the most loaded part of the forest ecosystem in the context of the input of the harmful substances which includes trace metals and metalloids (hereinafter: 'metals'). The interaction of a trace element (as a pollutant) with soil and its mobility depend on the characteristics of soil and on the chemical properties of the element. The parameters which mostly affect the metal-soil interaction are soil acidity (pH), soil organic matter content and redox-potential of the soil. Research of the metal content in soil is mainly focused on the assessment of the mobility of the metals analyzed. More precisely, researchers want to know if there is a possibility that metal(s) investigated been absorbed by plants through its roots and thus enter the food chain.

In the literature is described a lot of methods applied with a purpose to assess mobility of the metals in soils. Generally speaking, such protocols are based on the metal extraction by mild extractants (*e.g.* water, barium nitrate, ammonium chloride, weak acids, *etc.*) and consequent determination of the trace elements by mean of some sensitive technique [1,2].

This communication shows the results of the analysis of the selected trace elements in composite samples of a topsoil from the Medvednica Mountain (near Zagreb, Croatia). Extraction is done by water, at room temperature. *Ca* 1 g of each sample was mixed with 10 mL of deionized water and was shaken on the orbital shaker during 24 h. After the samples were filtered (0.45 μm), the concentration values of the selected elements in the extracts were determined by inductively coupled plasma – atomic spectrometry (ICP-AES).

References:

- [1] A. Sahuquillo, A. Rigol, G. Rauret, Trends Anal. Chem. 22 (2003) 152–159.
- [2] P.S. Fedotov, W. Kördel, M. Miró, W.J.G.M. Peijnenburg, R. Wennrich, P.-M. Huang, Crit. Rev. Environ. Sci. Technol. 42 (2012) 1117–1171.

**ELEMENTI U TRAGOVIMA U ŠUMSKIM TLIMA
MEDVEDNICE – PSEUDO-UKUPNI UDJEL****TRACE ELEMENTS IN SOILS FROM THE MEDVEDNICA
MOUNTAIN FORESTS – PSEUDO-TOTAL FRACTION**

Vibor Roje, Juraj Rončević, Josip Župan, Ivan Perković,
Darko Bakšić, Nikola Pernar

University of Zagreb, Faculty of Forestry, Svetošimunska cesta 25, HR-10002 Zagreb, Hrvatska
e-mail: vroje@sumfak.hr

Soil is an important indicator of the terrestrial ecosystems status. Thus, by the inspection in the chemistry of a soil, it is possibly to assess a status of soil, *i.e.* eventual contamination, degradation *etc.* Metals and metalloids are present in soil naturally, but can arrive there also by anthropogenic activities. In the latter case, elevated levels of the elements in soil can be observed. Interaction of a trace element with soil and its mobility depend on the characteristics of soil and on the chemical properties of the element. Soil characteristics which mostly affect the metal-soil interaction are soil acidity (pH), soil organic matter content and redox-potential of the soil. Metals (and metalloids) mass fraction in soils is usually determined after the elements in traces have been transferred into a solution. Amongst many described methodological approaches applied for transformation of the analytes from soil to solution, the methods based on the application of *aqua regia* for digestion of the soil samples are the most pronounced ones [1,2].

This presentation shows the results of the analysis of the selected trace elements in soil samples that originate from the Medvednica Mountain (near Zagreb, Croatia). The soil samples vary upon their acidity. The digestion of the soil samples was done by *aqua regia* in the microwave digestion system (~ 0.1 g sample / 10 mL *aqua regia*). Mixtures obtained after the digestion procedure were diluted to 100 mL in volumetric flasks, centrifuged, and further diluted (10 ×). Such solutions were measured by mean of atomic emission spectrometry with inductively coupled plasma (ICP-AES).

This work was financially supported by the Development Fund of the University of Zagreb. The results and conclusions are given by authors and do not necessarily reflect the opinion of the University.

References:

- [1] V. Roje, Chem. Spec. Bioavail. 22 (2010) 135–139.
- [2] S. Melaku, R. Dams, L. Moens, Anal. Chim. Acta 543 (2005) 117–123.

**POVEĆANJE TOPLJIVOSTI LAMOTRIGINA
PRIPRAVOM KOKRISTALA****ENHANCEMENT OF SOLUBILITY OF LAMOTRIGIN
VIA COCRYSTALIZATION**

Edislav Lekšić, Dražen Čavuzić

PLIVA Hrvatska d.o.o., Prilaz baruna Filipovića, 10000 Zagreb, Hrvatska,
edislav.leksic@pliva.com, drazen.cavuzic@pliva.com

Crystallization of drugs with pharmaceutical acceptable coformers presents a tool for modification their physical property. About 60 % of APIs show low water solubility that can be a reason for giving up in early stage of development. Lamotrigine [1], an antiepileptic drug, exhibits solubility of only 0.17 mg/ml at 25 °C, therefore preparation of cocrystal with pharmaceutically acceptable conformer, e.g. additive vanillin can alter its physical properties. A cocrystal lamotrigine:vanillin, was firstly discovered by DSC technique, while single crystals were prepared from acetone. Scale up of cocrystals was shown to be complex due to the lamotrigine potential for solvates formation. Batch of crystals were prepared by solvent assisted grinding technique using ethyl acetate while regular solvent crystallizations resulted in physical mixtures. Prepared cocrystals show significantly better water solubility in comparison to lamotrigine itself as it was determined by UV spectroscopy.

Reference:

- [1] B. Sridhar, K. Ravikumar, Acta Cryst. C65 (2009) 460-464.

3-HIDROKSI-1-(*p*-HIDROKSIFENIL)-2-METILPIRIDIN-4-ON KAO KOMPLEKSIRAJUĆI REAGENS ZA VANADIJ(V)

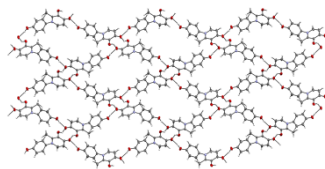
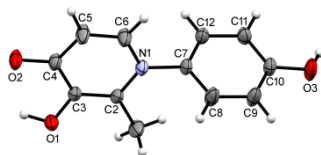
3-HYDROXY-1-(*p*-HYDROXYPHENYL)-2-METHYLPYRIDIN- 4-ONE AS COMPLEXING REAGENT FOR VANADIUM(V)

Cvito Markov, Vesna Petrović Peroković, Željka Car, Biserka Prugovečki,
Vladislav Tomišić, Astrid Gojmerac Ivšić, Srđanka Tomić

Sveučilišta u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek,
Horvatovac 102a, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: zcar@chem.pmf.hr

Derivati piridin-4-ona dobri su kompleksirajući reagensi što ih čini potencijalnim terapeutičima [1] kao i reagensima pogodnim za ekstrakciju i spektrofotometrijsko određivanje metalnih iona [2,3]. U biološkim sustavima vanadij je često prisutan u koordinacijskim kompleksima, pa proučavanje njegovih interakcija s piridinonima doprinosi razumijevanju mehanizama akumulacijskih procesa vanadija u organizmu.

U ovom radu opisana je priprava 3-hidroksi-1-(*p*-hidroksifenil)-2-metilpiridin-4-ona (HH), u jednom koraku iz polaznog maltola (3-hidroksi-2-metilpiran-4-ona) i *p*-hidroksianilina. Sintetiziranom piridinonskom derivatu određene su protonacijske konstante ravnoteže te molekulska i kristalna struktura. Spoj kristalizira u monoklinskom sustavu, u prostornoj grupi $P2_1/n$. U kristalnoj strukturi molekule se povezuju $O1-H1\cdots O2[-x,-y,-z]$ ($d(O1\cdots O2)=2.6733(12)$ Å) i $O3-H3\cdots O2[3/2+x,1/2-y,1/2+z]$ ($d(O3\cdots O2)=2.6733(12)$ Å) vodikovim vezama tvoreći neprekinutu 2D mrežu. Unutar molekule prisutne su $O1-H1\cdots O2$ ($d(O1\cdots O2)=2.7656(12)$ Å) vodikove veze.



Spektrofotometrijskim mjerenjima ispitana je reakcija HH i vanadija(V). U kiseloj vodenoj otopini nastaje ružičasti kompleks s maksimumom apsorpcije pri 507 nm u kojem je odnos V(V) : HH = 1 : 2. Intenzitet apsorpcije povećava dodatak etanola. Nastali V(V)–HH kompleks može se ekstrahirati u kloroform uz hipsokromni pomak apsorpcijskog maksimuma.

References:

- [1] M.A. Santos, S.M. Marques, S. Chaves, *Coord. Chem. Rev.* 256 (2012) 240–259.
- [2] A. Gojmerac Ivšić, V. Tomišić, Ž. Car, B. Prugovečki, S. Tomić, *J. Mol. Struct.* 990 (2011) 237–243.
- [3] V. Petrović Peroković, A. Gojmerac Ivšić, Ž. Car, S. Tomić, *Croat. Chem. Acta* 87 (2014) 103–109.

SELEKTIVNA PRIPRAVA ADAMANTANSKIH I MANOZNIH DERIVATA *N*-ARIL SUPSTITUIRANIH 3-HIDROKSIPIRIDIN-4-ONA

SELECTIVE SYNTHESIS OF ADAMANTYLATED AND MANNOSYLATED *N*-ARYL SUBSTITUTED 3-HYDROXYPYRIDIN-4-ONES

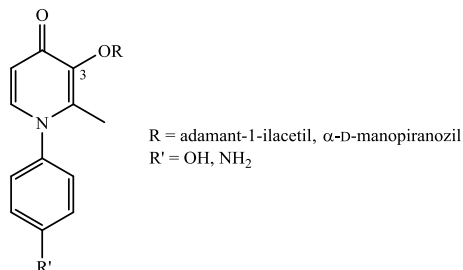
Rahela Zadavec, Vesna Petrović Peroković, Željka Car, Srđanka Tomić

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

N-alkil i *N*-aril supstituirani 3-hidroksipiridin-4-oni (3,4-HP), skupina heterocikličkih organskih spojeva, poznati su bidentatni kelatori brojnih metala (Fe(III), Al(III), V(V) i dr.). Njihov kelirajući učinak temelj je mnogih istraživanja, bilo da je riječ o sintezi i ispitivanju terapijskog učinka njihovih derivata [1] ili spektrofotometrijskom određivanju metalnih iona [2].

U našem se laboratoriju zadnjih godina bavimo sintezom *N*-aril supstituiranih 3,4-HP s različitim supstituentima u *para* i *meta* položaju arilnog prstena. Daljnje strukturne modifikacije temeljnih piridinonskih struktura usmjerene su ka: a) uvođenju manozne podjedinice u svrhu ispitivanja antiadhezijskog učinka testom inhibicije hemaglutinacije [3] i b) uvođenju lipofilne podjedinice, primjerice adamantanske, u svrhu ispitivanja antitumorskog učinka.

U ovom radu opisana je priprava novih adamantanskih i manoznih derivata 3,4-HP (slika 1). Temeljne piridinonske strukture s *p*-aminofenilom i *p*-hidroksifenilom skupinom na dušikovom atomu nisu bile pogodne za regioselektivno vezanje adamantanske i manozne podjedinice na hidroksilnu skupinu na položaju 3. Stoga je za pripravu *p*-aminofenilnih derivata korišten 3,4-HP s *p*-nitrofenilnim supstituentom na dušikovom atomu, dok je za pripravu *p*-hidroksifenilnih derivata korišten 3,4-HP s acetilom zaštićenom hidroksilnom skupinom u *para* položaju *N*-arilnog dijela molekule.



Slika 1. Općenita strukturna formula adamantanskih i manoznih derivata 3,4-HP.

Literatura:

- [1] M. A. Santos, S. M. Marques, S. Chaves, *Coord. Chem. Rev.* 256 (2012) 240–259.
- [2] V. Petrović Peroković, A. Gojmerac Ivšić, Ž. Car, S. Tomić, *Croat. Chem. Acta* 87 (2014) 103–109.
- [3] Ž. Car, T. Hrenar, V. Petrović Peroković, R. Ribić, M. Seničar, S. Tomić, *Chem. Biol. Drug Des.* 84 (2014) 393–401.

POLIMERIZACIJA FUMARAMIDNIH ORGANOGELETORA

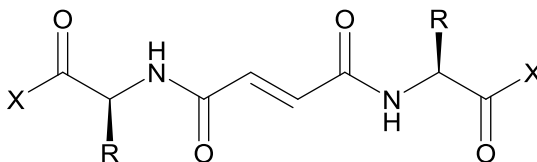
POLYMERISATION OF FUMARAMIDE ORGANOGELEATORS

Leo Frkanec, Milan Jokić, Janja Makarević, Nataša Šijaković Vujičić

Institut Ruđer Bošković, Zavod za organsku kemiju i biokemiju, Laboratorij za supramolekularnu i nukleozidnu kemiju, Bijenička 54, Zagreb, Hrvatska
e-mail: frkanec@irb.hr

Ispitivanje supramolekulskih gelova dovelo je do razvoja prepoznatljivog područja u kemiji materijala s naglaskom na samoorganizirajuće meke materijale. Imaju veliku mogućnost specifične primjene u različitim područjima, kao što su farmaceutska, prehrambena ili kozmetička industrija, organska nanoelektronika, stanično i tkivno inženjerstvo, plastična kirurgija i sl. Zbog velike raznolikosti gelatorske mreže posebno su poželjni kao templat kod pripreve anorganskih nanocjevčica, odnosno nano-poroznih polimernih materijala. Polimerizacijom se mogu poboljšati mehanička svojstva supramolekulskih gelova, ali i pripremiti specifične polimerne materijale slične morfologije koja se pojavljuje u gelskoj mreži. Da bi došlo do „solid-state“ reakcije unutar gelske mreže potrebno je zadovoljiti posebne uvjete kod samoorganizacije organogelatora. To se posebno odnosi na udaljenost atoma koji ulaze u reakciju i na položaj reagirajućih funkcionalnih skupina.

Našu pažnju smo usmjerili na sintezu, ispitivanje gelatorskih svojstava te posebno na mogućnost polimerizacije fumaramidnih aminokiselinskih derivata. Priredili smo derivate Leu, Val, Phe i Phg fumaramida s jednom (kada je X = OH, OMe, NH₂) ili dvije (kada je X = vinilni ester) polimerizirajuće skupine. Većina od ispitanih fumaramida su dobri organogelatori. Detaljno je ispitana samoorganizacija uspješnih gelatora te njihova polimerizacija inducirana γ -zračenjem. Dokazali smo da male promjene u strukturi spoja uzrokuju specifičnu samoorganizaciju preko nekovalentnih interakcija, a povezano s time zapaženo je i nastajanje polimernih materijala ili odsustvo polimerizacije. Iako smo dobili polimerne produkte kod derivata sa jednom polimerizirajućom skupinom (npr. iz ValOH fumaramid / H₂O gela nastaju mikrosfere, iz PheOMe fumaramid / EtOH gela nastaju kratke polimerne niti), samo kod organogelatora s dvije polimerizirajuće funkcionalne skupine došlo je do uspješne „solid-state“ reakcije bez narušavanja morfologije gelske mreže.



R = *i*-Pr, *i*-Bu, Ph, Bzl; X = OH, OMe, NH₂, OCH=CH₂

SINTEZA I KOMPLEKSACIJSKA SVOJSTVA AROMATSKIH DIUREA I FENANTROLINSKOG DITOPIČNOG RECEPTORA

SYNTHESIS AND COMPLEXATION PROPERTIES OF AROMATIC DIUREAS AND PHENANTROLINE DITOPIC RECEPTOR

Dajana Barišić¹, Nikola Cindro¹, Nikola Bregović¹, Leo Frkanec²,
Krunoslav Užarević³, Vladislav Tomišić¹

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

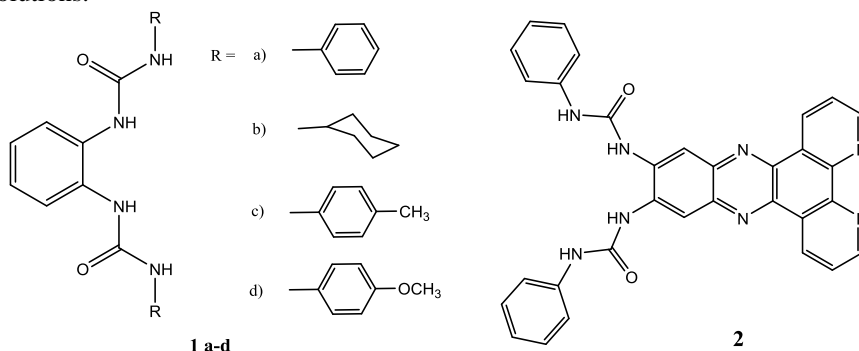
²Ruđer Bošković Institute, Laboratory of Supramolecular and Nucleoside Chemistry,
Bijenička cesta 54, 10000 Zagreb, Croatia

³Ruđer Bošković Institute, Laboratory for Chemical Kinetics and Atmospheric Chemistry, Bijenička
cesta 54, 10000 Zagreb, Croatia
e-mail: ncindro@chem.pmf.hr

The design of molecules which are capable to recognize and bind target anions is a vibrant area of modern research. Systematic research of anion coordination during the last few decades introduced a vast number of receptors for negatively charged species, mainly based on the binding functionalities equipped with hydrogen bond donors.

The urea group is often used in such receptors due to its stability in acidic environment and the ability to form strong hydrogen bonds with certain anions. However, it has become evident that compounds containing a single urea moiety lack selectivity and rather rarely allow specific anion recognition. On the other hand, by linking two urea moieties via benzene, rigidity of the binding site is induced and significant increase in selectivity towards anions and stability of corresponding complexes can be achieved.

In this work we have synthesized new phenyl diurea receptors (1a-d) and investigated both steric and resonance effects of the substituents on their complexation properties. Further on, a ditopic receptor (**2**) comprising the phenantroline moiety, which is capable of cation coordination, coupled with the diurea anion binding site was designed and studied. In addition to the possibility of ion-pair binding, presence of phenantroline introduces fluorescence properties of the receptor, which is a key feature for detection of species at low concentrations and enables quantitative studies of such solutions.



SAMOORGANIZACIJA TRIPEPTIDNIH HIDROGELATORA KAO MODELA AGREGIRANJA A β -PROTEINA

SELF-ASSEMBLY OF TRIPEPTIDE HYDROGELATORS AS A MODEL OF A β -PROTEINS AGGREGATION

Tihomir Pospišil, Leo Frkanec, Mladen Žinić

Ruder Bošković Institute, Laboratory of Supramolecular and Nucleoside Chemistry,
Bijenička 54, 10000 Zagreb, Croatia
email: tpospis@irb.hr

Alzheimer's disease is characterized by the extracellular fibrillar deposits of the 39-42 amino acid amyloid- β proteins (A β). It was shown that the KLVFF fragment of A β -peptide is responsible for the formation of amyloid fibrils. The self-assembly phenomena of the low molecular weight peptides into supramolecular gels show resemblance to amyloid- β protein aggregation and hence may serve as a simple model for A β -aggregation which could enable design of new aggregation inhibitors.

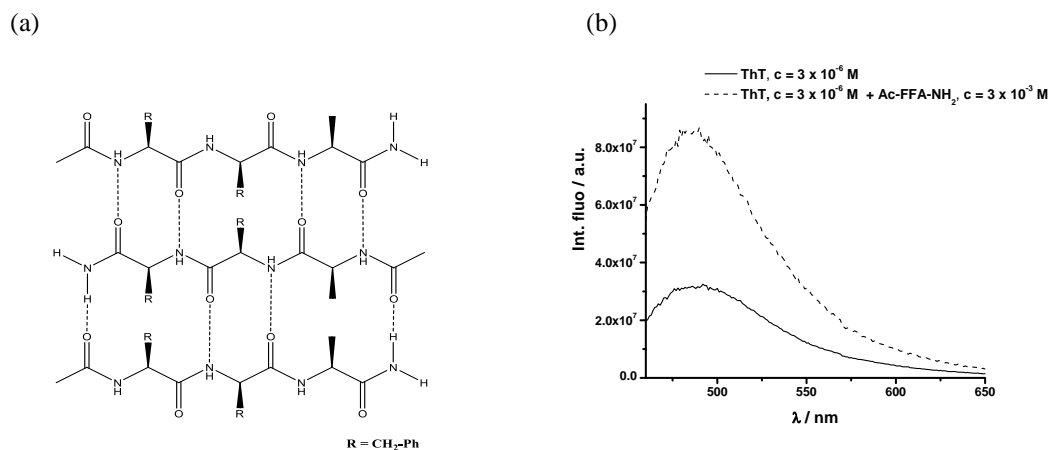


Figure 1. (a) Antiparallel β -sheet hydrogen-bonding in Ac-FFA-NH₂ hydrogel aggregates and (b) Fluorescence spectra showing Thioflavin T binding to gelator aggregates.

We have synthesized a series of new tripeptide gelators incorporating amino acids present in the A β -protein KLVFF fragment denoted responsible for the protein aggregation. Prepared peptides were tested for gelation of water and organic solvents. Organisation in gel assemblies at the supramolecular level and gel morphology was determined by using spectroscopic methods (¹H-NMR, FTIR) and electronic microscopy (TEM). Tripeptide derivative (Ac-FFA-NH₂) was capable to self-assembly into hydrogel at physiological pH. Figure 1 shows possible antiparallel β -sheet hydrogen-bonding motifs of Ac-FFA-NH₂ in the hydrogel. The aggregated tripeptide binds with conjugated dyes – Thioflavin T and Congo Red representing common reagents for determining specific amyloid fibrillation.

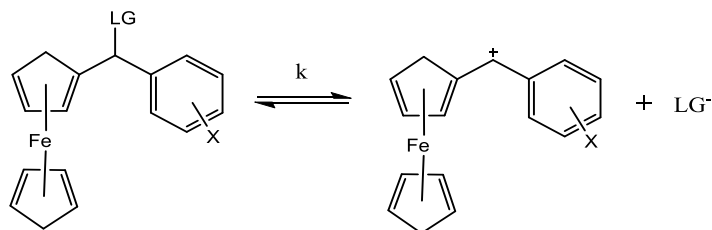
ELEKTROFUGALNOST NEKIH FEROCENILBENZILNIH KATIONA

ELECTROFUGALITIES OF SOME FERROCENYLBENZYL CATIONS

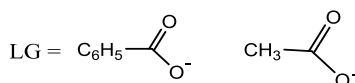
Marijan Marijan, Sandra Jurić, Mirela Matić, Bernard Denegri, Olga Kronja

University of Zagreb, Faculty of Pharmacy and Biochemistry,
A. Kovačića 1, 10000 Zagreb, Croatia

Electrofugalities of ferrocenylbenzyl cations have been derived from the S_N1 solvolysis rate constants of corresponding ferrocenylbenzyl acetates and benzoates by applying the LFER equation: $\log k = s_f(E_f + N_f)$ in which: k is a first-order rate constant for S_N1 reaction, s_f (slope of the $\log k / E_f$ correlation line) and N_f (nucleofugality; negative intercept on the abscissa) are nucleofuge specific parameters, and E_f is the electrofugality parameter. [1–3] Nucleofugality parameters (N_f and s_f) of benzoate and acetate in various solvents, including acetone and acetonitrile, [4–6] and appropriate kinetics information have been used for calculating E_f values.



1. X = 3-Br
2. X = 4-Br
3. X = 3-Cl
4. X = 4-Cl
5. X = 3-F



Due to ability of the ferrocene moiety to efficiently stabilize positive charge, ferrocenylbenzyl cations constitute a group of very powerful electrofuges in comparison with similar benzhydryl electrofuges.

References:

- [1] N. Stredl, B. Denegri, O. Kronja, H. Mayr, *Acc. Chem. Res.* 43 (2010) 1537–1549.
- [2] B. Denegri, A. Streiter, S. Jurić, A. R. Ofial, O. Kronja, H. Mayr, *Chem. Eur. J.* 12 (2006) 1648–1656.
- [3] B. Denegri, A.R. Ofial, S. Jurić, A. Streiter, O. Kronja, H. Mayr, *Chem. Eur. J.* 12 (2006) 1657–1666.
- [4] M. Matić, B. Denegri, O. Kronja, *J. Org. Chem.* 77 (2012) 8986–8998.
- [5] H.F. Schaller, H. Mayr, *Angew. Chem.* 120 (2008) 4022–4025.
- [6] H.F. Schaller, A.A. Tishkov, X. Feng, H. Mayr, *J. Am. Chem. Soc.* 130 (2008) 3012–3022.

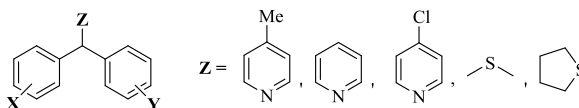
NUKLEOFUGALNOSTI NEUTRALNIH IZLAZNIH SKUPINA U 80% VODENOM ACETONITRILU

NUCLEOFUGALITIES OF NEUTRAL LEAVING GROUPS IN 80% AQUEOUS ACETONITRILE

Sandra Jurić, Mirela Matić, Bernard Denegri, Marijan Marijan, Olga Kronja

University of Zagreb, Faculty of Pharmacy and Biochemistry,
A. Kovačića 1, 10000 Zagreb, Croatia

Nucleofugalities of tetrahydrothiophene, dimethylsulfide and pyridine in 80 % aq. acetonitrile have been derived from the S_N1 solvolysis rate constants of the corresponding X,Y-benzhydryl derivates (**1-10**) by applying the LFER equation: $\log k = s_f (E_f + N_f)$, in which: k is a first-order rate constant for S_N1 reaction, s_f (slope of the $\log k/E_f$ correlation line) and N_f (nucleofugality; negative intercept on the abscissa) are nucleofuge specific parameters, and E_f is the electrofugality parameter. [1]



1. X = 4-OMe, Y = 4-OMe
2. X = 4-OMe, Y = 4-OPh
3. X = 4-OMe, Y = 4-Me
4. X = 4-OMe, Y = H
5. X = 4-Me, Y = 4-Me
6. X = 4-Me, Y = H
7. X = 4-F, Y = H
8. X = H, Y = H
9. X = 4-Cl, Y = H
10. X = 3-Cl, Y = H

It has been found that the changes of the N_f parameters of neutral leaving groups [2–4] with the solvent composition are in an opposite direction compared to those obtained for anionic leaving groups, [5,6] *i.e.* N_f values decrease as the polarity (water content) of the solvent increases. Although, acetonitrile constitutes a polar aprotic solvent and good cation solvator that has the ability to solvate charged substrates more efficiently than polar protic solvents in the reactant ground state, relative differences in N_f values of neutral leaving groups are similar as in protic aqueous solvents.

References:

- [1] N. Streidl, B. Denegri, O. Kronja, H. Mayr, *Acc. Chem. Res.* 43 (2010) 1537–1549.
- [2] S. Jurić, B. Denegri, O. Kronja, *J. Org. Chem.* 75 (2010) 3851–3854.
- [3] S. Jurić, B. Denegri, O. Kronja, *J. Phys. Org. Chem.* 25 (2012) 147–152.
- [4] S. Jurić, O. Kronja, *J. Phys. Org. Chem.* (2015) *in press*. DOI: 10.1002/poc.3412.
- [5] M. Matić, B. Denegri, O. Kronja, *J. Org. Chem.* 77 (2012) 8986–8998.
- [6] M. Matić, B. Denegri, O. Kronja, *Eur. J. Org. Chem.* (2014) 1477–1486.

UTJECAJ SOLVATACIJE NA KOMPLEKSIRANJE ALKALIJSKIH KATIONA S KETONSKIM DERIVATOM KALIKS[4]ARENA

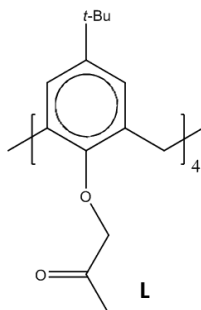
SOLVATION EFFECT ON THE COMPLEXATION OF ALKALI-METAL CATIONS WITH CALIX[4]ARENE KETONE DERIVATE

Ivana Nikšić-Franjić¹, Josip Požar¹,
Ivana Borilović¹, Leo Frkanec², Vladislav Tomišić¹

¹Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek,
Zavod za fizikalnu kemiju, Horvatovac 102a, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: vtomistic@chem.pmf.hr

²Institut Ruđer Bošković, Zavod za organsku kemiju i biokemiju,
Laboratorij za supramolekularnu i nukleozidnu kemiju, Bijenička cesta 54, 10000 Zagreb, Hrvatska

U okviru ovog rada sustavno je istražen utjecaj otapala na ravnoteže reakcija kompleksiranja ketonskog derivata kaliks[4]arena supstituiranog na donjem obodu (**L**) s alkalijским kationima. Kompleksiranje je proučavano UV-Vis spektrometrijskim i izotermnim mikrokolorimetrijskim titracijama u etanolu (EtOH), metanolu (MeOH), *N*-metilformamidu (NMF), *N,N*-dimetilformamidu (DMF) te dimetilsulfoksidu (DMSO). Određene su konstante stabilnosti odgovarajućih kompleksa stehiometrije 1:1, kao i pripadajuće termodinamičke reakcijske veličine. Na temelju određenih termodinamičkih funkcija otapanja liganda i literaturnih podataka za katione, izračunane su Gibbsove energije transfera svih sudionika reakcije.



Kaliksaren **L** veže Na^+ u svim istraženim otapalima te K^+ u metanolu. Ostale katione ne veže ili su konstante stabilnosti kompleksa preniske za njihovo pouzdano određivanje. Stabilnost kompleksa NaL^+ što se tiče otapala pada u nizu: $\text{EtOH} > \text{MeOH} > \text{NMF} > \text{DMF} > \text{DMSO}$. Na razlike u stabilnosti kompleksa NaL^+ najviše utječe entropijski doprinos Gibbsovoj energiji reakcije kompleksiranja, koji je nepovoljan u svim otapalima. Veća stabilnost NaL^+ u odnosu na KL^+ u metanolu uglavnom je posljedica negativnije $\Delta_r H^\circ$ u slučaju reakcije nastajanja tog kompleksa. Sve reakcije kompleksiranja entalpijski su kontrolirane, a procesi otapanja su endotermni. Ligand je s termodinamičkog stajališta podjednako solvatiran u svim otapalima, osim u *N,N*-dimetilformamidu, gdje je solvatiran najjače. Stoga se razlike u stabilnosti kompleksa u većini otapala mogu protumačiti samo na temelju solvatacije kationa i kompleksa.

ZNAČAJ tRNA-OVISNOG POPRAVKA POGREŠKE PRIJE PRIJENOSA AMINOKISELINE KOD EUKARIOTSKE IZOLEUCIL-tRNA-SINTETAZE

SIGNIFICANCE OF THE PRE-TRANSFER EDITING PATHWAY IN EUKARYOTIC ISOLEUCYL-tRNA SYNTHETASE

Nikolina Šošćarić, Nevena Cvetešić, Morana Dulić,
Mirna Biluš, Ita Gruić-Sovulj

University of Zagreb, Faculty of Science, Department of Chemistry,
Horvatovac 102a, 10000 Zagreb, Croatia
e-mail: nsostaric1@chem.pmf.hr

Cellular proteins arise at ribosomes whereby the genetic information given by mRNA is translated into the amino acid sequence. Amino acids participate in this process covalently attached at the 3'-end of the cognate tRNA. Ester bond formation between each amino acid and cognate tRNA pair is catalyzed by a specific aminoacyl-tRNA synthetase (aaRS). Accuracy of aminoacylation is crucial for the faithful protein synthesis. Certain aaRSs are incapable of distinguishing cognate and non-cognate amino acids with high accuracy in the synthetic reaction alone. To prevent errors in translation, these enzymes have developed complex hydrolytic proofreading activities. Proofreading may occur through hydrolysis of the aminoacyl-adenylate (pre-transfer editing) or hydrolysis of the aminoacyl-tRNA (post-transfer editing). Pre-transfer editing is typically catalysed by the enzyme's synthetic active site in the absence of tRNA, however this activity may be significantly enhanced within the aaRS:tRNA complex (tRNA-dependent pre-transfer editing) [1]. Isoleucyl-tRNA synthetase (IleRS) is one of the error prone aaRSs, as it activates the non-cognate valine (Val) only 200 times less efficiently than the cognate isoleucine (Ile) [2]. This enzyme possesses a large appended hydrolytic domain which hosts the post-transfer editing activity. Besides that, *Escherichia coli* IleRS also exerts tRNA-dependent pre-transfer editing, an idiosyncratic activity of IleRS which may contribute up to 30 % of total IleRS proofreading activity [2,3]. It was recently discovered that Tyr59 is the main determinant of tRNA-dependent pre-transfer editing by *E. coli* IleRS[3]. Intriguingly, Tyr59 was found to be conserved among prokaryotic IleRSs, but in the enzymes of eukaryotic origin it is replaced by either threonine or phenylalanine. This prompted us to question whether eukaryotic IleRSs lost the tRNA-dependent pre-transfer editing pathway.

Saccharomyces cerevisiae IleRS (ScIleRS) was chosen as a model enzyme for kinetic characterization of the eukaryotic IleRS. It was shown that it discriminates valine and isoleucine similarly poor as the *E. coli* counterpart and therefore needs proofreading activity to preserve translational fidelity. To obtain high amounts of pure ScIleRS, its production was optimised in *E. coli*. Three variants of the fusion enzyme were overexpressed in *E. coli* under various experimental conditions. Extensive protocol for ScIleRS purification was developed to ensure high purity of the enzyme for kinetic characterization. We showed that ScIleRSs overexpressed in *E. coli* and in *S. cerevisiae* exhibit identical kinetic properties. These results justify heterologous overexpression of ScIleRS in *E. coli* in order to obtain large amounts of pure enzyme. Preliminary

results with *E. coli* tRNA^{Ile} also suggest that ScIleRS does not exhibit tRNA-dependent pre-transfer editing. These results have intriguing evolutionary implications as tRNA-dependent pre-transfer editing may represent a remnant of primordial editing activity present only in the bacterial-type of IleRS. Purification of *S. cerevisiae* tRNA^{Ile} via complementary biotinylated oligonucleotides and verification of these results with the homologous tRNA^{Ile} is underway in our laboratory.

References:

- [1] J.J. Perona, I. Gruic-Sovulj, *Top. Curr. Chem.* (2013) 1–42.
- [2] M. Dulic, N. Cvetesic, J.J. Perona, I. Gruic-Sovulj, *J. Biol. Chem.* 285 (2010) 23799–23809.
- [3] M. Dulic, J.J. Perona, I. Gruic-Sovulj, *Biochemistry* 53 (2014) 6189–6198.

BAKROVI(II) KOMPLEKSI S METILIMIDAZOLNIM LIGANDIMA KAO INHIBITORIMA KOROZIJE

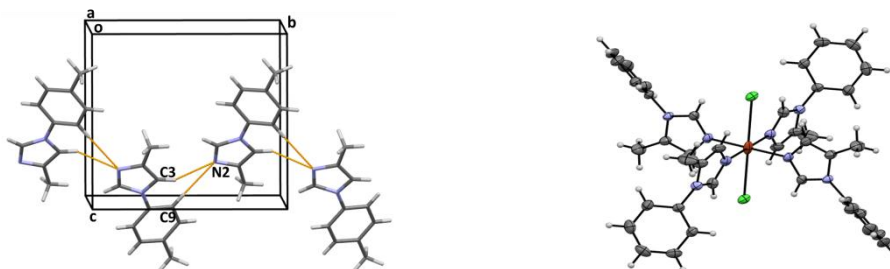
COPPER(II) COMPLEXES WITH METHYLIMIDAZOLE LIGANDS AS CORROSION INHIBITORS

Robert Katava¹, Gordana Pavlović¹, Ana Dunja Mance²,
Helena Otmačić Ćurković²

¹Tekstilno-tehnološki fakultet, Prilaz baruna Filipovića 28a, 10000, Zagreb, Hrvatska
e-mail: robert.katava@ttf.hr, gordana.pavlovic@ttf.hr

²Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Marulićev trg 20, 10000, Zagreb, Hrvatska
e-mail: admance@fkit.hr, hotmac@marie.fkit.hr

Povećanjem zagađenja zraka javljaju se oštećenja dijelova električnih uređaja kao posljedica atmosferske korozije bakra i njegovih legura. Takve materijale moguće je zaštititi uporabom inhibitora korozije iz reda derivata imidazola [1,2], te se u tom smislu istražuju koordinacijski potencijali derivata imidazola kao liganada u kompleksima bakra.



Slika 1. Fragment kristalne strukture 4-metil-1-(*p*-tolil)imidazola s C-H...N vodikovim vezama (lijevo) i molekulska struktura $[\text{CuCl}_2(\text{C}_{10}\text{H}_{10}\text{N}_2)_4]$ kompleksa (desno)

U okviru ovog istraživanja određena je rendgenskom difrakcijom na jediničnom kristalu struktura 4-metil-1-(*p*-tolil)imidazola čije je pakiranje u jediničnoj ćeliji prikazano na slici 1. (lijevo). Reakcijom CuCl i 1-fenil-5-metilimidazola priređen je kompleks $[\text{CuCl}_2(\text{C}_{10}\text{H}_{10}\text{N}_2)_4]$. Kation Cu^{2+} koordiniran je u ekvatorijalnoj ravnini s četiri neutralna liganda preko bazičnog dušikovog atoma 1-fenil-5-metilimidazola. Oktaedarska geometrija upotpunjena je s dva kloridna iona koji se nalaze u aksijalnom položaju (slika 1. desno).

Literatura:

- [1] H. Otmačić, E. Stupnišek-Lisac, *Electrochim. Acta* 48 (2003) 985–991.
- [2] K. Marušić, H. Otmačić-Ćurković, H. Takenouti, A.D. Mance, E. Stupnišek-Lisac, *Chem. Biochem. Eng. Q.* 21 (2007) 71–76.

SINTEZA KLORINA CIKLOADICIJAMA FEOFORBIDA A I NJEGOVIH DERIVATA

SYNTHESIS OF CHLORINS BY CYCLOADDITIONS OF PHEOPHORBIDE A AND ITS DERIVATIVES

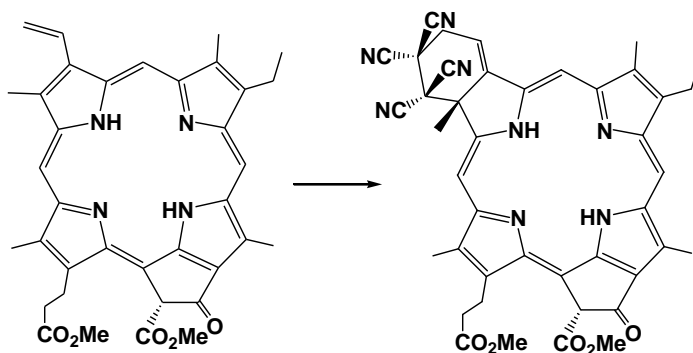
Anamarija Briš¹, Željko Marinić², Zhi-Long Chen³, Davor Margetić¹

¹Ruder Bošković Institute, Division of Organic Chemistry and Biochemistry, Laboratory for Physical-organic Chemistry, Bijenička c. 54, 10000 Zagreb, Croatia

²Ruder Bošković Institute, Center for NMR, Bijenička c. 54, 10000 Zagreb, Croatia

³Donghua University, College of Chemistry, Chemical Engineering and Biotechnology, 2999 North Renmin Road, Shanghai, 201620, P. R. China

The Diels-Alder reactions were exploited in the preparation of novel long wavelength chlorin photosensitizers for photodynamic therapy [1]. Styryl group and furan carboxamide substituents were used as diene components in [4+2] cycloaddition functionalizations [2]. We have shown that pheophorbide a could be effectively functionalized by cycloaddition reactions using conventional and nonconventional reaction conditions (MW irradiation [3] and high pressure [4]).



References:

- [1] R. Bonnett, *Chem. Soc. Rev.* 24 (1995) 19–33.
- [2] A. Briš, Ž. Marinić, Z.-L. Chen, D. Margetić, *Synlett* 26 (2015). DOI: 10.1055/s-0034-1380176.
- [3] D. Margetić, *Microwave Assisted Cycloaddition Reactions*, Nova Science, New York 2011.
- [4] D. Margetić, *High Pressure Cycloaddition Reactions in the Synthesis of Biologically Relevant Heterocycles*, in G. Brahmachari (ed.), *Green Synthetic Approaches for Biologically Relevant Heterocycles*, Elsevier, Amsterdam, 2015, 409–435.

HIJERARHIJA MEĐUMOLEKULSKIH INTERAKCIJA U TERNARNIM KOMPLEKSIMA KADMIJA(II)

HIERARCHY OF INTERMOLECULAR INTERACTIONS IN TERNARY COMPLEXES OF CADMIUM(II)

Nives Matijaković, Boris-Marko Kukovec, Ivan Kodrin, Marijana Đaković

University of Zagreb, Faculty of Science, Department of Chemistry,
Horvatovac 102a, Zagreb, Croatia,
e-mail: nivesmatijakovic@gmail.com

Design of new materials with desired physical properties is still a highly challenging task as it relies on a very delicate balance of a range of non-covalent interactions. Therefore, to be in a position to tailor a specific/desired property necessitates a much improved understanding of the competition and balance between various non-covalent interactions. [1]

In this study we have examined systems equipped with several supramolecular functionalities with intention to firstly map out their structural landscape and report on the hierarchy of supramolecular interactions. We opted for the amide moieties, inorganic halides/pseudohalides and aromatic systems, as all the selected functionalities have their supramolecular behavior already well documented. However, the literature data on their supramolecular behavior in multi-component systems are scarce. [2]

Therefore, we report on a series of halide/pseudohalide complexes of cadmium(II) with secondary amides, their synthesis, crystallization techniques employed, spectral characterization, electronic and thermal properties. Although the single crystal X-ray structure analysis revealed supramolecular building blocks of various dimensionalities (from monomeric, trimeric and tetrameric units to polymeric chains), the dimeric supramolecular motif designed by a $R^2_2(8)$ graph-set descriptor appeared to be the synthon of choice in majority of systems under study (Figure 1).

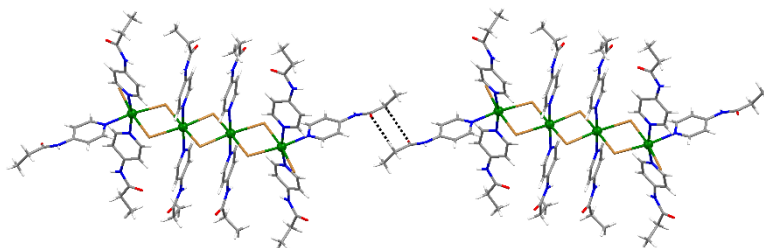


Figure 1. Neighbouring molecules of tetrameric complex, $[Cd_4Br_8(4-propy)_{10}]$, linked by two hydrogen bonds of C–H...O type forming supramolecular $R^2_2(8)$ ring motifs.

References:

- [1] C.B. Aakeröy, N.R. Champness, C. Janiak, *CrystEngComm* 12 (2010) 22–47.
- [2] H.F. Allen, W.D.S. Motherwell, *Acta Crystallogr. B* 58 (2002) 380–388.

TITRACIJE KATIONSКИH I AMFOTERNИH POVRŠINSKI AKTIVNIH TVARI PRIMJENOM VISOKO-OSJETLJIVOG POTENCIOMETRIJSKOG SENZORA

TITRATIONS OF CATIONIC AND AMPHOTERIC SURFACTANTS USING HIGH-SENSITIVE POTENTIOMETRIC SENSOR

Dubravka Madunić-Čačić¹, Maja Aničić¹,
Ivana Steinberg²

¹Saponia, Chemical, Pharmaceutical and Foodstuff Industry,
Matije Gupca 2, HR-31000 Osijek, Croatia
e-mail: dubravka.madunic-cacic@saponia.hr

²Faculty of Chemical Engineering and Technology, Marulićev trg 19,
HR-10000 Zagreb, Croatia

Cationic surfactants are extremely effective for some specific uses because of their peculiar properties. Their positive charge allows them to adsorb on negatively charged substrates, while most solid surfaces are at neutral pH. This capacity confers to them an antistatic behavior and a softening action for fabric and hair rinsing. The positive charge enables them to operate as flotation collectors, hydrophobating agents, corrosion inhibitors, and solid particle dispersants. Many cationic surfactants are also used as bactericides to clean and asepsify surgery hardware, to formulate heavy-duty disinfectants for domestic and hospital and industrial use, particularly dairy and beverage industries.

Determination of the cationic surfactants by two-phase titration using lauryl sulfate as a titrant, suffers from a lot of drawbacks which can be overcome by the use of ion-selective electrodes (ISE) as indicators in potentiometric surfactant titration based on reaction with an oppositely charged ion (ion-pair formation) [1,2]. Buschmann and Schulz [3] proposed a method for the potentiometric titration of cationic and zwitterionic surfactants with sodium tetraphenylborate (NaTPB) which is more lipophilic than lauryl sulfate, and should be preferred if short-chain quaternary ammonium compounds (QACs) shall be titrated.

In this investigation the charged-carrier based ISE [4] with enhanced sensitivity for cationic surfactants, developed from the previously explored neutral-based ISE for ionic surfactants [5–7] was used as indicator. Standard solution of sodium tetraphenylborate ($c = 4 \text{ mmol L}^{-1}$) was used as a titrant. Sensor was tested on QACs, esterquats, silicone quat, betaine (amphoteric) and amine oxide (nonionic type surfactant). In case of silicone quat *Tego Polish Additive Q 70* (Evonik Industries AG) used in formulations of cleaning and care products for floorings, titration should be performed at $\text{pH} = 2$. In complex formulation containing interferents like nonionic surfactant, for the sake of accuracy determination should be performed by standard addition using cetylpyridinium chloride as a standard (Figure 1).

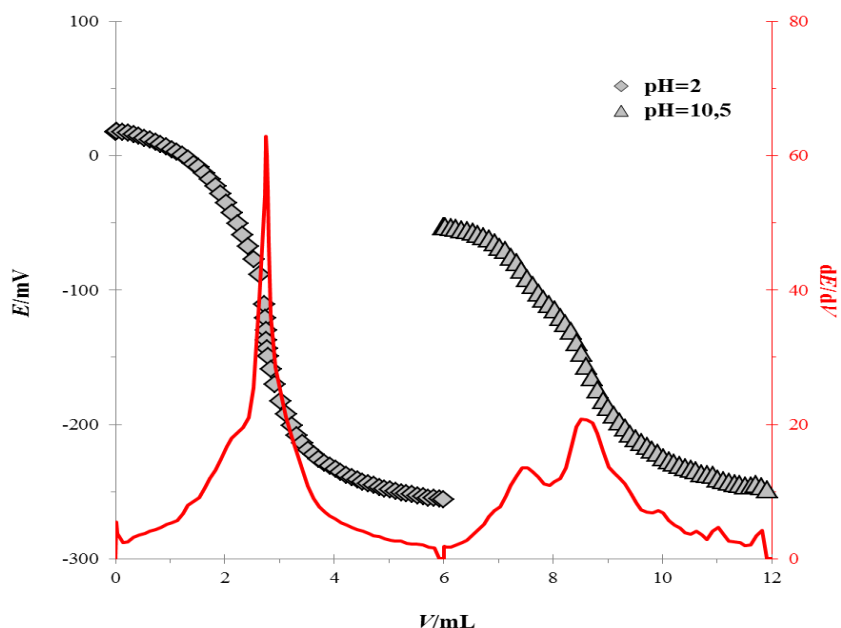


Figure 1. Titration curves and their corresponding first derivatives of silicone quat *Tego Polish Additive Q 70* (Evonik Industries AG) using self-made charged-carrier based cationic surfactant ISE and sodium tetraphenylborate ($c = 4 \text{ mmol L}^{-1}$) as a titrant.

References:

- [1] ISO 2271:1989 Surface active agents - Detergents - Determination of anionic-active matter by manual or mechanical direct two-phase titration procedure, International Organization for Standardization, Geneva, Switzerland.
- [2] H. Waldhoff, R. Spilker, Handbook of Detergents. Part C. Analysis, Marcel Dekker, 2005.
- [3] N. Buschmann, R. Schulz, Tenside Surf. Det. 29 (1992) 128–130.
- [4] E. Bakker, P. Bühlmann, E. Pretsch, Talanta 62 (2004) 843–860.
- [5] D. Madunić-Čačić, M. Sak-Bosnar, R. Matešić-Puač, Z. Grabarić, Sens. Lett. 6 (2008) 339–346
- [6] D. Madunić-Čačić, M. Sak-Bosnar, O. Galovic, N. Sakač, R. Matešić-Puač, Talanta 76 (2008) 259–264
- [7] M. Samardžić, M. Sak-Bosnar, D. Madunić-Čačić, Talanta 83 (2011) 789–794.

**ODREĐIVANJE ONEČIŠĆENJA UPLC-MS METODOM
NASTALA DEGRADACIJOM NEPAFENAKA**

**DETERMINATION OF DEGRADATION IMPURITIES IN
NEPAFENAC BY UPLC-MS**

Mislav Runje¹, Nina Vojčić¹, Željka Dujmić Vučinić¹, Irena Krizmanić¹,
Ernest Meštrović¹, Sandra Babić²

¹Pliva Hrvatska TAPI R&D, Prilaz baruna Filipovića 25, Zagreb, Hrvatska
e-mail: mislav.runje@pliva.com

²Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Marulićev trg 19, Zagreb,
Hrvatska
e-mail: sbabic@pierre.fkit.hr

The degradation studies were performed on Nepafenac active pharmaceutical ingredient in order to qualify potential degradation impurities.

Degradation products of Nepafenac formed under different forced conditions have been identified using LC-PDA and LC-MS techniques. Nepafenac was subjected to forced degradation under the conditions of hydrolysis, photolysis, oxidation, dry and wet heat, in accordance with the International Conference on Harmonization [1,2].

Using ESI product ion scan, mass measurement was performed on the protonated molecular ion, and its result confirms the theoretical elemental composition of unknown impurities: Impurity RRT 0.92 at $m/z = 285$ $[M+H]^+$, Impurity RRT 1.11 at $m/z = 253$ $[M+H]^+$ and Impurity RRT 1.78 at $m/z = 521$ $[M+H]^+$. The degradation pathway of the Nepafenac in acid and based hydrolysis as well as in oxidation is proposed.

References:

- [1] International Conference on Harmonisation, Validation of Analytical Procedures: Text and Methodology, Q2 (R1), Geneva, 2005.
- [2] International Conference on Harmonisation, Photo Stability Testing of New Drug Substances and Products, Q1B, IFPMA, Geneva, 1996.

**VALIDACIJA UPLC METODE ZA ODREĐIVANJE
ONEČIŠĆENJA U NEPAFENAKU****VALIDATION OF UPLC METHOD FOR DETERMINATION
OF IMPURITIES IN NEPAFENAC**

Mislav Runje¹, Nina Vojčić¹, Željka Dujmić Vučinić¹, Irena Krizmanić¹,
Ernest Meštrović¹, Sandra Babić²

¹Pliva Hrvatska TAPI R&D, Prilaz baruna Filipovića 25, Zagreb, Hrvatska
e-mail: mislav.runje@pliva.com

²Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Marulićev trg 19, Zagreb, Hrvatska
e-mail: sbabic@pierre.fkit.hr

Nepafenac is described chemically as 2-amino-3-benzoylbenzeneacetamide manufactured as a 0.1% suspension for topical ophthalmic use [1] and it belongs to group of nonsteroidal anti-inflammatory drugs (NSAID).

A novel stability indicating reverse phase ultra-performance liquid chromatographic (UPLC) method has been developed for determination of Nepafenac along with six impurities, which are 2-aminobenzophenone, Cl-thionepafenac, Thionepafenac, Cl-Nepafenac, Hydroxy Nepafenac and Cyclic Nepafenac, and validated as per ICH recommendations [2]. The developed LC method is validated with respect to specificity, LOD, LOQ, linearity, precision, accuracy and robustness.

The % RSD of Nepafenac during the method precision study was within 2.0% and the % RSD values of the area of 2-aminobenzophenone, Cl-thionepafenac, Thionepafenac, Cl-Nepafenac, Hydroxy Nepafenac and Cyclic Nepafenac in the related substance method precision study were within 5.0%. The resolution between Nepafenac and six potential impurities is found to be greater than 2.0. Regression analysis shows as R-value (correlation coefficient) is greater than 0.999 for Nepafenac and all impurities. This method is capable to detect the impurities of Nepafenac at a level of 0.003% with respect to test concentration of 1.0 mg/mL.

The developed UPLC method is stability indicating which can be used to carry out the analysis of Nepafenac in routine analysis of production samples and stability samples.

References:

- [1] D.A. Gamache, G. Graff, M.T. Brady, J.M. Spellman, J.M. Yanni, *Inflammation*. 24 (4) (2000) 357–370.
- [2] International Conference on Harmonisation, “Validation of Analytical Procedures: Text and Methodology,” Q2 (R1), Geneva, 2005.

1,2,3-TRIAZOLNI DERIVATI L-ASKORBINSKE KISELINE I NJIHOVA ANTIOKSIDATIVNA SVOJSTVA

1,2,3-TRIAZOLE APPENDED L-ASCORBIC ACID WITH ANTIOXIDANT PROPERTIES

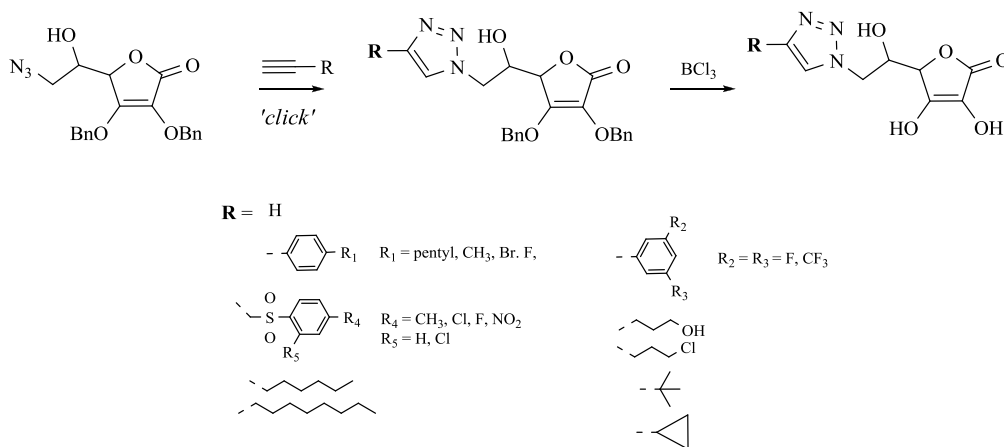
Ines Cazin¹, Ivana Kovačić¹, Andrijana Meščić¹,
Višnja Stepanić², Silvana Raić-Malić¹

¹University of Zagreb, Faculty of Chemical Engineering and Technology,
Department of Organic Chemistry, Marulićev trg 20, 10000 Zagreb, Croatia
e-mail: sraic@fkit.hr

²Ruđer Bošković Institute, Division of Molecular Medicine,
Bijenička cesta 54, 10000 Zagreb, Croatia

1,2,3-Triazoles have attracted considerable attention in recent years because of their wide range of biological activities against various viruses, malignant cells, microorganisms and their inhibitory activities against several enzymes [1]. Furthermore, since the discovery of vitamin C, the number of its known biological functions is continually expanding. Various pyrimidines and purines containing L-ascorbic acid exhibited significant antiproliferative effects against malignant human tumour cell lines [2]. Vitamin C is an electron donor, and this property accounts for its known functions, such as antioxidant activities in humans.

A series of 1,4-disubstituted 1,2,3-triazole derivatives of L-ascorbic acid have been synthesized as nucleoside mimetics in which the 1,2,3-triazole motif acts as a nucleobase surrogate while L-ascorbic acid mimics the sugar. Antitumor activity of the aforementioned compounds and the influence of the substituent at the C-4 of the triazole ring on the radical scavenging capacity will be examined.



References:

- [1] S. Raić-Malić, A. Meščić, *Curr. Med. Chem.* 22 (12) (2015), 1462–1499.
- [2] T. Gazivoda, M. Šokcevic, M. Kralj, L. Šuman, K. Pavelic, E. De Clercq, G. Andrei, R. Snoeck, J. Balzarini, M. Mintas, S. Raic-Malic, *J. Med. Chem.* 50 (2007) 4105–4112.

DERIVATI PURINSKIH BIOIZOSTERA I PIRIMIDINA S 1,2,3-TRIAZOLOM KAO FARMAKOFOROM

1,2,3-TRIAZOLE PHARMACOPHORE-BASED DERIVATIVES OF PURINE BIOISOSTERES AND PYRIMIDINES

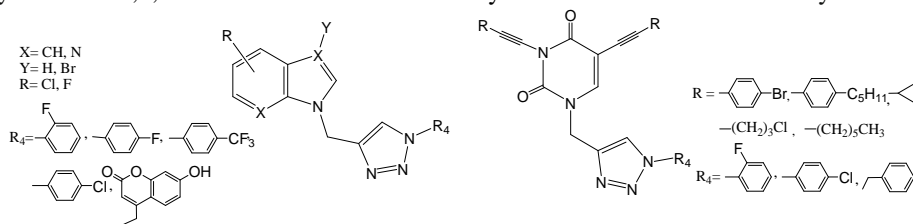
Tomislav Gregorić¹, Andrea Bistrović¹, Andrea Tomljenović Paravić²,
Mirela Sedić², Sandra Kraljević Pavelić²,
Tatjana Gazivoda Kraljević¹, Silvana Raić-Malić¹

¹University of Zagreb, Faculty of Chemical Engineering and Technology,
Department of Organic Chemistry, Marulićev trg 20, 10000 Zagreb, Croatia
e-mail: sraic@fkit.hr

²University of Rijeka Department of Biotechnology,
Radmile Matejčić 2, 51000 Rijeka

Introduction of a 1,2,3-triazole ring into nucleosides to improve their bioactivity for antitumor or antiviral applications has become wide spread. The click chemistry reactions of nucleosides and nucleotides have found wide application in lead identification and lead optimization procedures in drug design. The 1,2,3-triazole unit may be considered as a surrogate of the amide group because it has H-bond acceptor capacity, distance between substituents and dipolar properties similar to the peptide bond.

Keeping into consideration the biological potency of 1,2,3-triazolo-nucleosides [1, 2] and in our continuous endeavor toward the synthesis of pharmacologically active molecules, we designed the synthesized 1,2,3-triazole embedded *N*-heterocycles in order to evaluate their cytostatic activities.



The target regioselective 1,4-disubstituted 1,2,3-triazole derivatives were prepared by the Cu-catalyzed alkyne-azide cycloaddition (CuAAC). Linear alkyl chain, substituted aromatic moiety and cyclopropyl ring were introduced as alkynyl substituents at C-5 and N-3 of pyrimidine core using palladium catalysed cross-coupling Sonogashira reaction.

Evaluations of cytostatic activities of the synthesized compounds are currently underway.

References:

- [1] S. Raić-Malić, A. Meščić, *Curr. Med. Chem.* 22 (12) (2015), 1462–1499.
- [2] S. Krištafor, A. Bistrović, J. Plavec, D. Makuc, T. Martinović, S. Kraljević Pavelić, S. Raić-Malić, *Tetrahedron Lett.* 56 (2015) 1222–1228.

INTERFERENCIJA Zn^{2+} S *N*-SULFONILPIRIDINSKIM DERIVATIMA

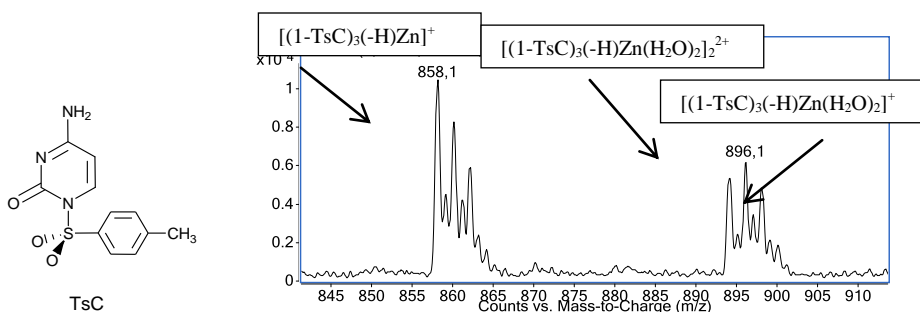
Zn^{2+} INTERFERENCES WITH *N*-SULFONYLPYRIDINE DERIVATIVES

Renata Kobetić¹, Valentina Ključarić², Josipa Matić¹, Dijana Saftić¹, Željka Ban¹,
Biserka Žinić¹

¹Institut Ruđer Bošković, Bijenička 54, Zagreb, Hrvatska
e-mail: rkobetic@irb.hr

²HVU "Petar Zrinski", Ilica 256 b, Zagreb, Hrvatska

The aim of this report is to present the ESI MS results of the non-covalent interaction of sulfonamide derivatives of cytosine nucleobase (very good antitumor agent - the inhibitory effect on enzymes that play an important role in the metabolism of tumor cells) with biologically important metal cations since the cells growing media consists of a significant amount of dissolved different salts. Although all components of the media are prone to interact with the agent, the metal ions (Na^+ , K^+ , Ca^{2+} , Mg^{2+} , Zn^{2+} , Fe^{2+}) were in focus in this study. Two ligands *N*-1-(*p*-toulenesulfonyl)cytosine, 1-TsC, **1**, and *N*-1-(methanesulfonyl)cytosine, 1-MsC, **2**, as well as their copper (II) complexes: mononuclear complex $Cu(1-TsC-N3)_2Cl_2$, **3** containing 1-TsC, **1** as ligand and $Cu(1-MsC-N3)_2Cl_2$ **4** containing 1-MsC, **2** as ligand were studied. The study elaborated the stability of ligands **1**, **2** and copper complexes **3**, **4** in solutions (DMSO/MeOH or H_2O or ACN and DMF/ MeOH or H_2O or ACN) and possible non-covalent interaction. In cases in which comparisons can be made, the gas-phase results show unexpectedly strong analogies to those observed in the condensed phase. For example the interaction of Zn^{2+} with ligands **1**, **2** or copper complexes **3**, **4** produced a variety of complex ions as a result of its affinity towards both O and N as ligands. We observed the formation of monometal Zn^{2+} complexes (e.g. signal observed at m/z 858 assigned as $[(1-TsC)_3(-H)Zn]^+$) and mixed ligand dimetal complexes that included water molecules in the structures of complexes (e.g. signal observed at m/z 894 assigned as $[(1-TsC)_3(-H)Zn(H_2O)_2]_2^{2+}$). The interferences of Zn^{2+} ions with copper complexes **3** and **4** were observed. Therefore, the interferences of potential drug and metal ions could be predicted before pursuing the biological studies.



KARAKTERIZACIJA CERAMIDA PRISUTNIH U HUMANOM EPIDERMISU PRIMJENOM LC-ESI-MS

CHARACTERIZATION OF CERAMIDES PRESENT IN HUMAN EPIDERMIS BY LC-ESI-MS

Irena Đapić¹, Lidija Brkljačić², Ivone Jakaša¹, Sanja Kežić³, Renata Kobetić⁴

¹Laboratorij za analitičku kemiju, Zavod za kemiju i biokemiju, Prehrambeno-biotehnološki fakultet, Zagreb, Hrvatska

²Laboratorij za kemiju ugljikohidrata, peptida i glikopeptida, Zavod za organsku kemiju i biokemiju, Institut Ruđer Bošković, Zagreb, Hrvatska

³Coronel Institute of Occupational Health, Academic Medical Center, University of Amsterdam, Amsterdam, Netherlands

⁴Laboratorij za supramolekularnu i nukleozidnu kemiju, Zavod za organsku kemiju i biokemiju, Institut Ruđer Bošković, Zagreb, Hrvatska

Along with cholesterol and free fatty acids, ceramides (CER) are one of main lipid classes present in human stratum corneum (HSC). Recently it has been found that CER chain length might indicate impaired skin barrier in atopic dermatitis. Thus, CER profiling in HSC gives better insight into skin barrier status but large number and structural diversity of CER species present in HSC make their analysis challenging.

Due to the lack of commercial standards, CER class was isolated from human epidermis by different solvent extractions and separated from other lipid classes by solid phase extraction. [1] ESI-MS characterization of isolated CER class demonstrated rich mass spectra confirming variety of CER current in epidermis. Due to complexity of CER class in human epidermis, 3 synthetic CER belonging to classes NP and AP were chosen for detailed research by LC-ESI-MS. Collision induced dissociation (CID) in positive ionisation mode at low energies (5 and 10 eV) yield $[M+H-H_2O]^+$ fragmentation products. CID at higher energies (20 and 30 eV) gave better insight into sphingosine chain structure showing fragmentation products formed after amide bond cleavage or water loss with main signal at m/z 282. RP-LC-ESI-MS analysis of isolated CER and 3 synthetic CER on few columns using multiple reaction monitoring showed complex chromatograms demonstrating number and heterogeneity of individual CER present in skin.

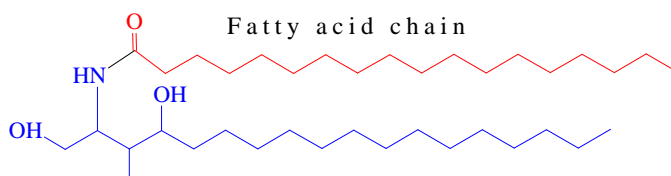


Figure 1. Structure of ceramide that belongs to class NP.

Reference:

- [1] I. Popa, L.H. Thuy, B. Colsch, D. Pin, H. Gatto, M. Haftek, J. Portoukalian, Arch. Dermatol. Res. 302 (2010) 639–644.

1. SIMPOZIJ STUDENATA KEMIČARA**1ST CROATIAN CHEMISTRY STUDENT SYMPOSIUM**

Loren Ban, Nea Baus, Nikola Bedeković, Tomislav Begušić, Ingrid Gregorović, Ivan Ilić, Karolina Kolarić, Ana Mikelić, Ana Milas, Tomislav Piteša, Kristina Smokrović, Edi Topić, Ana Vlašić

Hrvatsko kemijsko društvo, Horvatovac 102a, 10000, Zagreb, Hrvatska
e-mail: sshkd@hkd.hr

Simpozij studenata kemičara (SiSK) projekt je Studentske sekcije Hrvatskog kemijskog društva osmišljen po načelu "studenti za studente", a namijenjen je studentima preddiplomskih i diplomskih studija koji se bave znanstvenim radom u području teorijske i primijenjene kemije. Cilj projekta jest povezati studente kemije s različitim fakulteta iz cijele Hrvatske te im putem kratkog usmenog izlaganja omogućiti prezentiranje znanstvenih projekata u kojima sudjeluju.



U subotu 25. 10. 2014. na Kemijskom odsjeku Prirodoslovno-matematičkog fakulteta održan je prvi Simpozij studenata kemičara na kojem je sudjelovalo oko 130 studenata s više fakulteta Sveučilišta u Zagrebu (PMF, FBF, PBF, FKIT) te s Odjela za kemiju, Sveučilišta u Osijeku. U sklopu jednostavnog simpozija održana su 4 predavanja i 20 kratkih usmenih izlaganja. Pitanjima sudionika su uz većinu izlaganja pokrenute kvalitetne i zanimljive znanstvene rasprave.

Organizacijski odbor Simpozija, sastavljen od studenata preddiplomskog i diplomskog sveučilišnog studija kemije pri Kemijskom odsjeku PMF-a, vrlo je profesionalno organizirao skup što je prepoznato i podržano ne samo od strane Hrvatskog kemijskog društva i Kemijskog odsjeka PMF-a, već i od značajnog broja studenata, sponzora i donatora. Takva svestrana podrška obećava uspjeh ovom projektu i jamči stvaranje tradicije okupljanja studenata kemije s različitih fakulteta i sveučilišta iz cijele Hrvatske.

B

**KEMIJSKO I BIOKEMIJSKO
INŽENJERSTVO
*CHEMICAL AND BIOCHEMICAL
ENGINEERING***

KEMOINFORMACIJSKA ANALIZA MODELA PROŠIRENIH VALENCIJA I MOLEKULSKIH DESKRIPTORA

CHEMOINFORMATIC ANALYSIS OF THE EXTENDED VALANCE AND MOLECULAR DESCRIPTOR MODELS

Želimir Kurtanjek

Sveučilište u Zagrebu, Prehrambeno-biotehnološki fakultet,
Pierottijeva 6, 10000 Zagreb, Hrvatska,
e-mail: zkurt@pbf.hr

In this work are compared information “content” of the extended valance model based on graph theory and sets of two and three dimensional molecular descriptors [1–2]. The analysis is based on two levels. On the first level is comparative analysis based on internal and external correlation between “scores” in multidimensional spaces of the first and second order valance, or molecular signature space, and 630 molecular descriptors. On the second level applied are singular value decompositions for reduction of the signature and the descriptor spaces up to the significance level of $p = 0.05$. The selected level of significance is presumed to be in coherence with experimental data of molecule physical and chemical properties. The obtained singular vectors are the basis for development of single molecule properties and are also extended to binary systems, such as octanol-water partition coefficients of simple organic compounds [3]. Linear and nonlinear model structures are applied. Tested linear structure multivariate models are principal component regression and partial least squares, while models with nonlinear structures are neural networks and decision trees. The main focus is determination of the main factors extracted from molecular signatures and descriptors.

References:

- [1] V.A. Dev, N.G. Chemmangattuvalappil, M.R. Eden, Structure Generation of Candidate Reactants Using Signature Descriptors, in J. Klemeš, F. Friedler, P. Mizsey (Eds.), Proceedings of 24th European Symposium on Computer Aided Process Engineering – ESCAPE 24, Hungarian Chemical Society, Budapest, 2014.
- [2] D.P. Visco, R.S. Pophale, M.D. Rintoul, J.L. Falon, J. Mol. Graph. Mod. 20 (2002) 429–438.
- [3] J. Sangster, J. Phys. Chem. Ref. Data 18 (3) (1989) 1111–1227.

BIOLOŠKA OBRADA RAFINERIJSKIH OTPADNIH VODA U RAZLIČITIM REKTORSKIM SUSTAVIMA

THE BIOLOGICAL TREATMENT OF RAFINERY WASTEWATERS IN DIFFERENT REACTOR SYSTEMS

Lucija Foglar, Dunja Margeta, Sanja Papić, Katica Sertić-Bionda

Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije,
Savska cesta 16, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: lfoglar@fkit.hr, dmargeta@fkit.hr, spapic@fkit.hr, kserti@fkit.hr

Porast proizvodnje goriva, maziva i ostalih energenata zbog povećane potrebe za energentima, doprinosi i porastu prisutnosti otpadnih rafinerijskih spojeva u vodama i okolišu. Zbog dokazane štetnosti, zakonske regulative i očuvanja okoliša, ovi spojevi se moraju ukloniti iz otpadnih voda prije ispuštanja u vodoprijemnike. U ovom radu je opisana biološka obrada rafinerijskih otpadnih voda uz primjenu različitih rektorskih sustava. U preglednom dijelu je opisana provedba procesa biološke obrade sa suspendiranim i imobiliziranim mikroorganizmima u različitim rektorima s prikazom utjecaja procesnih parametara na tijek procesa biološke obrade. Prema literaturnim podacima, prisutnost različitih mikroorganizama, ulazno organsko opterećenje (UOO) i hidrauličko vrijeme zadržavanja (Hvz) značajno utječu na učinkovitost procesa biološke obrade. Sukladno tome, primjena pogodnih mikroorganizama i odabir optimalnih uvjeta provedbe procesa u rektorskim sustavima s imobiliziranim stanicama mikroorganizama omogućuje učinkovito uklanjanje štetnih organskih tvari prisutnih u rafinerijskim otpadnim vodama.

**RAVNOTEŽA KAPLJEVINA–KAPLJEVINA
TROKOMPONENTNOG SUSTAVA IONSKA KAPLJEVINA
[bzmim][Tf₂N] – PIRIDIN – UGLJIKOVODIK**

**LIQUID–LIQUID EQUILIBRIA FOR THE TERNARY SYSTEM
IONIC LIQUID [bzmim][Tf₂N] – PYRIDINE – HYDROCARBON**

Marko Rogošić, Vedran Kojić, Aleksandra Sander

University of Zagreb, Faculty of Chemical Engineering and Technology,
Marulićev trg 20, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: mrogosic@fkit.hr

Because of its lower energy requirements, extraction as a method of separation has been the target of much research recently. Due to their physical properties, ionic liquids (IL) have shown application in extracting organic nitrogen and sulfur components from hydrocarbon liquid fuels. In this paper liquid–liquid equilibria in four ternary systems were determined. Ionic liquid used in this experiment was [bzmim][Tf₂N] (1-benzyl-3-metylimidazolium bis(trifluorometylsulfonyl)imide). Pyridine was a representative of nitrogen-containing organic components and four hydrocarbons were *n*-hexane, *n*-heptane, *i*-octane and toluene, respectively. The binodal curves were experimentally determined at 25 °C and 101325 Pa with turbidimetric titration method, whereby the compositions were determined gravimetrically. Tie-lines were determined by splitting the unstable three-component systems into two phases, and measuring the refractive index of the hydrocarbon-rich phase. The phase compositions were determined using previously prepared calibration curves. IL-rich phase compositions were then determined by mass balance. Experimental tie-line data were described with NRTL and UNIQUAC activity coefficient models, with satisfactory agreement. UNIQUAC model was found to perform slightly better. The results points to potential application of investigated IL in extraction of nitrogen compounds from hydrocarbon (fuel) mixtures.

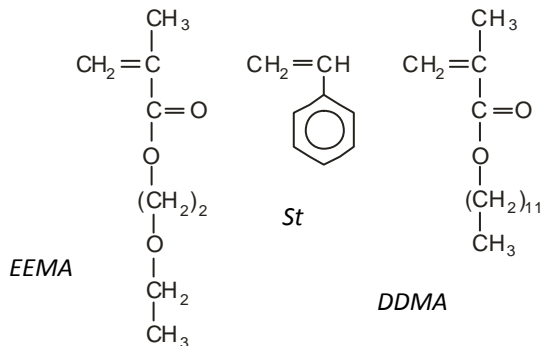
**RADIKALSKA KOPOLIMERIZACIJA I KOPOLIMERI
 2-ETOKSIETIL-METAKRILATA SA STIRENOM I
 DODECIL-METAKRILATOM**

**RADICAL COPOLYMERIZATION AND COPOLYMERS OF
 2-ETHOXYETHYL METHACRYLATE WITH STYRENE AND
 DODECYL METHACRYLATE**

Elvira Vidović, Fabio Faraguna, Valentina Siuc, Ante Jukić

Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije,
 Marulićev trg 19, 10000 Zagreb, Hrvatska
 e-mail: evidov@fkit.hr

Sintetizirani su kopolimeri i istražena je kinetika slobodno-radikalске kopolimerizacije etoksietil-metakrilata (EEMA) sa stirenom (St) i dodecil-metakrilatom (DDMA). Reakcije su provedne u otopini toluena, izotermno (70 °C) i do malih konverzija (< 10 mas. %), u širokom području sastava (između sastavnih homopolimera, svakih 10 mol. %). Kao inicijator korišten je tert-butil peroksi 2-etil heksanoat (0,01 mol dm⁻³).



Omjeri kopolimerizacijskih reaktivnosti monomera određeni su linearnom metodom prema Kelen-Tüdösu (K-T) i nelinearnom metodom po Tidwell-Mortimeru (T-M) i iznose: $r_1 = 0,746$ i $r_2 = 0,957$ (K-T), $r_1 = 0,781$ i $r_2 = 1,169$ (T-M) za DDMA/EEMA sustav i $r_1 = 0,574$ i $r_2 = 0,603$ (K-T) i $r_1 = 0,612$ i $r_2 = 0,631$ za St/EEMA sustav. Slijedi da je kopolimerizacija EEMA s DDMA bliska idealnoj, dok za onu sa St postoji mala, ali ipak zamjetljiva sklonost ka stvaranju alternirajućeg kopolimera. Sastav kopolimera potreban za prethodne izračune određen je ¹H NMR spektroskopijom. Kopolimerima su također određene raspodjele i prosjeci molnih masa (SEC), toplinska postojanost (TGA) i fazni prijelazi, odnosno staklište (DSC). Kopolimeri s EEMA upotrebljavaju se u medicini, a kopolimerizacija s EEMA provodi se i radi poboljšanja mješljivosti i funkcionalizacije polimernih matrica u kompozitnim materijalima.

**FORMULACIJA AGRIKULTURNE TVARI
PRIMJENOM GRANULIRANJA U FLUIDIZIRANOM SLOJU S
DONJIM RASPRŠIVANJEM**

**FORMULATION OF AGRICULTURAL SUBSTANCE
USING BOTTOM-SPRAY FLUID-BED GRANULATION**

Krunoslav Žižek, Antonija Odak, Renata Pavlina

Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije,
Marulićev trg 20, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: kzizek@fkit.hr

U ovome je radu sagledano mokro granuliranje u fluidiziranom sloju kao moguća procesna tehnologija za pripremu pogodne formulacije agrikulturne tvari EKO – RAST za poboljšanje svojstava tla. Dodatne ulazne struje materijala u procesu su zrak i vezivo čiji je kolektiv kapljica dodavan donjim raspršivanjem.

Studij fenomena okrupnjavanja usmjeren je k pronalaženju uvjeta provedbe procesa i svojstava ulaznih struja materijala koji će sinergističkim djelovanjem upravljati mikro- i mezorazinskim događajima na povoljan i željeni način, te time rezultirati kolektivom postojećih okrupnjenih jedinki, granula.

Detektirane promjene svojstva kolektiva jedinki, raspodjele veličina čestica s vremenom kontaktiranja kolektiva kapljica veziva i fluidiziranog sloja čvrste tvari ukazuju na odmak fizičke pretvorbe EKO – RASTa u procesu granuliranja.

Proces sadržane pretvorbe tvari je modeliran mehanističkim pristupom, primjenom populacijske bilance. Pristup modeliranja populacijskom bilancom u ovome radu podrazumijeva ispitivanje mogućnosti primjene 1-D populacijske bilance u diskretiziranom obliku te Size-Independent Kernel (SIK) modela koalescencije u predviđanju stvarnih promjena u svojstvu partikulskog sustava (raspodjeli veličina čestica) tijekom procesa granuliranja.

Primijenjeni pristup ukazuje u određenoj mjeri na zastupljenost pojedinih mehanizama u procesu granuliranja. Metodom optimizacije, očitovanom u minimiziranju ukupne sume kvadratnih odstupanja, procijenjen je karakterističan procesni parametar, konstanta brzine koalescencije. Time je kvantificirana kinetika fizičke pretvorbe agrikulturne tvari.

INTEGRACIJA SUSTAVA VODIKA U PROCESIMA PRERADE NAFTE

INTEGRATION OF HYDROGEN SYSTEMS IN PETROL REFINERY

Ljubica Matijašević¹, Marija Petrić²

¹Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije,
Marulićev trg 19, 10000 Zagreb, Hrvatska,
e-mail: ljmatij@fkit.hr

²INA d.d, Avenija Većeslava Holjevca 10, 10000, Zagreb, Hrvatska,
e-mail: marija.petric@ina.hr

U industriji prerade nafte vodik je resurs od ključne važnosti za proizvodnju naftnih derivata zadovoljavajućih ekoloških značajki. Koristi se u procesima hidroobrade čija je uloga poboljšanje kakvoće međuprodukata u preradi nafte i konačnih proizvoda. Visoka cijena proizvodnje i skladištenja vodika stvaraju potrebu za djelotvornim načinom upotrebe vodika, za zadovoljenje rafinerijskih potreba i ekonomičan rad rafinerija. Osim toga, trendovi prerade težih nafti i povećanja cijene sirove nafte dodatan su motiv rafinerijama za racionalno upravljanje tokovima vodika.

Dobro upravljanje vodikom znači i maksimalno iskorištenje vodika unutar rafinerijskog sustava vodika kojeg čine procesi u kojima vodik nastaje i oni u kojima se vodik troši. Uvidom u postojeću distribucijsku mrežu tokova vodika pristupa se integraciji sustava vodika, kako bi se osiguralo što bolje iskorištenje vodika. U tom smislu primjenjuju se sustavske metode, *pinch* analiza i metode matematičkog programiranja temeljene na superstrukturi.

U ovom radu prikazana je metodologija i rješavanje problema integracije sustava vodika u procesima prerade nafte, na primjeru sustava vodika u Rafineriji nafte Sisak. *Pinch* analizom određena je minimalna potrebna količina vodika za rad mreže tokova vodika. Provedena je optimizacija mreže razvojem matematičkog modela temeljenog na superstrukturi, s obzirom na minimalne ukupne operativne troškove. Proračun je proveden uporabom optimizacijskog programskog sustava *GAMS*, pri čemu je optimizacijski problem definiran kao problem nelinearnog programiranja. Izrađen je i prijedlog unaprjeđenja mreže tokova vodika, uvođenjem dodatne jedinice za pročišćavanje vodika. Analizirane su i uspoređene tri izvedbe sustava vodika.

**OKSIDATIVNI ENZIMI ZA RAZGRADNJU BOJILA U
OTPADNIM VODAMA TEKSTILNE INDUSTRIJE**

**OXIDATIVE ENZYMES IN REMOVAL OF DYES FROM
TEXTILE WASTEWATERS**

Iva Rezić¹, Damir Oros^{2,3}, Martina Kolarić², Daniel Kracher³, Sven Mujadžić^{2,3},
Natalia Pankiewicz^{1,3}, Tonči Rezić², Roland Ludwig³

¹Sveučilište u Zagrebu, Tekstilno-tehnološki fakultet,
Prilaz baruna Filipovića 28a, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: iva.rezic@ttf.hr

²Sveučilište u Zagrebu, Prehrambeno-biotehnološki fakultet,
Pierottieva 6, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: trezic@pbf.hr

³BOKU - University of Natural Resources and Life Sciences,
Muthgasse 18/2; 1190 Vienna, Austria
e-mail: roland.ludwig@boku.ac.at

The textile industry is one of the biggest polluters of the environment, with significant consumption of water resources, energy and chemicals. Moreover, the processing of wastewaters from the textile industry is very complex, and the costs of these processes are very high. The main objective of this work was to select the most effective enzymes for wastewater treatment, as well as to detect dyes from different chemical groups which are mostly suitable for the enzymatic treatment and decolorization in the wastewaters of textile industry. 186 textile dyes were tested in reactions with six oxidative reductive enzymes (two laccases, lytic polysaccharide monooxygenase, cellobiose dehydrogenase, horseradish peroxidase and glucose oxidase), under different reaction conditions. The kinetics of pre-selected dyes and enzymes, as well as the toxicological properties of those dyes, were determined in batch reactions which were optimized by statistical method of the design of the experiment with regard to the concentrations of dyes, enzymes, temperature and pH values, and then scaled down to the microreactor levels. With the goal to perform scaling down to the level of micro-bioreactor, we have designed three prototypes of microreactors: *i*) microreactors produced in the workshop from two different materials and *ii*) printed by 3D printer. Results of reactions in microreactors were compared with the results achieved in the tubular and batch microreactor systems. All microreactors' prototypes were tested in the laboratory, using two enzymes and four different dyes. Studies have shown that the concentration of adsorbed oxygen measured in a microreactor system showed a linear increase with increasing flow rate. Decolorization of the *Direct blue 78* dye in microreactors with and without aeration using laccase caused a 50 % decrease in the decolorization speed, while in the tubular microreactor with aeration, the decolorization speed exponentially decreased by 80 %. Those results should serve as a basis for the development of the wastewater treatment processes as well as for other enzymatic applications which are advantageous from an environmental and economical point of view.

KARAKTERIZACIJA DOLOMITNOG VAPNA KAO BAZNOG REAGENSA ZA TALOŽENJE $Mg(OH)_2$ IZ MORSKE VODE

CHARACTERIZATION OF DOLOMITIC LIME AS BASED REAGENT FOR THE PRECIPITATION $Mg(OH)_2$ FROM SEAWATER

Jelena Jakić, Miroslav Labor, Vanja Martinac

Sveučilište u Splitu, Kemijsko-tehnološki fakultet, Teslina 10/V, 21000, Split, Hrvatska
e-mail: nina@ktf-split.hr

Proces dobivanja magnezija iz morske vode uključuje taloženje magnezijeva hidroksida, koji nastaje reakcijom magnezijevih soli prisutnih u morskoj vodi s odgovarajućim baznim reagensom, kao što je kalcinirani dolomit. Dolomit je dvojni karbonat kalcija i magnezija i nalazi se u prirodi kao konstituent karbonatnih stijena. Žarenjem dolomit prelazi u dolomitno vapno koje se potom može koristiti kao taložno sredstvo. Kalcinacija dolomita vrši se u rotacijskoj peći pri temperaturi 950-1000 °C. Toplinska razgradnja dolomita odvija se u dva stupnja [1,2]. Proces kalcinacije vodi se do potpunog raspada karbonata. Nedovoljno kalciniran ili pak pretjerano kalciniran dolomit ulazi u talog magnezijeva hidroksida kao onečišćenje i pokazuje znatno slabiju reaktivnost. Svrha ovog rada je provesti karakterizaciju uzorka dolomita s lokacije Đipalo-Sinj s ciljem utvrđivanja njegovih fizikalno kemijskih karakteristika primjenom kemijske, TG/DTG-DTA i FTIR analize. Raspodjela veličine čestica u uzorku određena je primjenom metode prosijavanja.

Rezultati granulometrijske analize aproksimirani su LN-funkcijom raspodjele. Kemijska analiza ukazuje da je ispitivani dolomit sastava 31,07 mas. % CaO i 21,42 mas. % MgO te gubitak žarenja 47,27 %. Sadržaj primjesa nije značajnije izražen: $Al_2O_3 = 0,0487$ mas. %, $Fe_2O_3 = 0,0371$ mas. % i $SiO_2 = 0,057$ mas. %. Sastav dolomita dobiven kemijskom analizom potvrđen je TG/DTG-DTA toplinskom analizom. Rezultati FTIR analize uzorka dolomita potvrđuju da se radi o dolomitu, a karakteristične apsorpcijske vrpce uočene su kod 2524,69; 1821,68; 880,82 i 728,97 cm^{-1} . FTIR analize dolomitnog vapna dobivenog žarenjem dolomita pri 950 °C potvrđuju dvostupanjsku reakciju raspada dolomita, a karakteristične FTIR vrpce uočene su kod 875,81 i 1418,40 cm^{-1} . Karakteristična FTIR vrpca kod 551,06 cm^{-1} ukazuje da je u uzorku prisutan MgO [3]. LN-funkcija raspodjele zahtijeva razvoj dvoparametarske LN-funkcije u četveroparametarsku. Minimalna veličina čestica iznosi 0,0225 mm, dok maksimalna veličina čestica iznosi 0,180 mm. Specifična površina jedinice mase (S_m) iznosi 68,69 $m^2 kg^{-1}$. Dobiveni rezultati ukazuju da se dolomitno vapno s lokacije Đipalo-Sinj može upotrijebiti kao taložno sredstvo pri dobivanju magnezijeva hidroksida iz morske vode.

Literatura:

- [1] V.B.K. Shahraki, B. Mehrabi, R. Dabiri, J. Min. Metall. 45 (2009) 35–44.
- [2] S. Gunasekaran, A. Anbalagan, Bull. Mater. Sci. 30 (2007) 339–344.
- [3] J. Ji, W. Balsam, J. E. Damuth, J. Chen, Mar. Geol. 258 (2009) 60–68.

KVALITATIVNA I KVANTITATIVNA ANALIZA SLOBODNIH AMINO KISELINA U GLJIVAMA

QUALITATIVE AND QUANTITATIVE ANALYSIS OF FREE AMINO ACIDS IN MUSHROOMS

Amra Alispahić, Aida Šapčanin, Emina Ramić, Alema Dedić, Mirsada Salihović,
Mirha Pazalja

University of Sarajevo, Faculty of Pharmacy, Zmaja od Bosne 8 - Kampus,
71000 Sarajevo, Bosnia and Herzegovina
e-mail: ida@bih.net.ba

Newly interests for free amino acids have been peaked at its positive effects on immune system responsiveness to infection, blood-pressure reduction, relaxation, neuroprotection and modulation of chemotherapy. The aim of this study was to determine the free amino acids in dry boletus mushroom, champignon white, champignon brown, oyster mushroom and shitake commercially available from bosnian marketplaces by the simple, fast and economical methods. The qualitative analysis of free amino acids was performed by thin layer chromatography (TLC) method. The quantitative analysis of free amino acids was performed by spectrophotometric method (UV/Vis). 1.0 ml of supernatant of each mushroom was added to 0.5 ml of phosphate buffer solution (pH 8.04) and 0.5 ml of 2 % ninhydrin solution containing 0.8 mg/ml of $\text{SnCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$. The mixtures were placed on a boiling water bath until the color was changed and then samples were quickly cooled with cold water, and adjusted to 25 ml with distilled water. The absorbance of these blue-purple products was measured after 10 min. The results showed that the highest content of free amino acids was found in dry boletus mushroom (*Boletus edulis*) 0.471 mg/g and the lowest content was found in brown champignon (*Agaricus bisporus* var. *Avellaneus*) 0.285 mg/g.

Keywords: mushrooms, free amino acids, spectrophotometric (UV/Vis) method, thin layer chromatography (TLC) method

**UKUPNI FENOLI, ANTOCIJANINI I ANTIOKSIDATIVNA
AKTIVNOST ODABRANIH JESTIVIH BILJAKA**

**TOTAL PHENOLS, ANTHOCYANINS AND ANTIOXIDANT
ACTIVITY OF SELECTED EDIBLE PLANTS**

Aida Šapčanin, Amra Alispahić, Alema Dedić, Emina Ramić,
Mirsada Salihović, Mirha Pazalja

University of Sarajevo, Faculty of Pharmacy, Zmaja od Bosne 8 - Kampus,
71000 Sarajevo, Bosnia and Herzegovina
e-mail: ida@bih.net.ba

Recent studies have shown the importance of different edible plants in a healthy diet and to prevent degenerative diseases caused by oxidative stress. To consider the importance of polyphenolic compounds and its presence in the selected edible plants, the total antioxidant activity of edible plants from Bosnian market were determined. Total phenolic content was estimated spectrophotometrically as galic acid equivalents (GAE/g) according to the Folin-Ciocalteus method. Total anthocyanine content was analysed by pH differential spectrophotometric method at 525 and 700 nm. The radical scavenging activity (RSA) of edible plants was determined by DPPH assay. The analysis revealed that the total phenol contents showed major values ranged from 1.44 mg GAE/g in fennel to 92.49 mg GAE/g of fresh samples in black Turkish tea. The anthocyanine content was expressed as mg cyanidin-3-glucoside equivalents per g of fresh sample, and showed the highest content in corn salad 2.338 mg/g and the lowest was in asparagus 0.134 mg/g. The percent of inhibition was in the range from 5.93 for fennel leaves to 80.37 for asparagus. We observed antioxidant activity in several edible plants and our results point out their importance in the diet.

Keywords: edible plants, total phenol content, total anthocyanine content, antioxidant activity

**STEREOSELEKTIVNA SINTEZA KIRALNIH 1,2-DIOLA IZ
(S)-2-HIDROKSIPROPIOFENONA POMOĆU ALKOHOL I
GLICEROL DEHIDROGENAZA UZ
REGENERACIJU KOENZIMA**

**STEREOSELECTIVE SYNTHESIS OF CHIRAL 1,2-DIOLS
FROM (S)-2-HYDROXYPROPIOPHENONE BY ALCOHOL
AND GLYCEROL DEHYDROGENASES WITH
COENZYME REGENERATION**

Anera Švarc¹, Davor Valinger², Đurđa Vasić-Rački¹, Ana Vrsalović Presečki¹

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

²Sveučilište u Zagrebu, Prehrambeno-biotehnološki fakultet,
Pierottijeva ulica 6, 10000 Zagreb, Hrvatska

The study describes enantioselective reduction of (*S*)-2-hydroxypropiophenone ((*S*)-2-HPP) to (1*S*, 2*S*)-1-phenylpropane-1,2-diol ((1*S*, 2*S*)-1-PPD) mediated by alcohol dehydrogenase (*Lb*ADH) from *Lactobacillus brevis* and (1*R*, 2*S*)-1-phenylpropane-1,2-diol ((1*R*, 2*S*)-1-PPD) by glycerol dehydrogenase (GDH) from *Cellulomonas* sp.. As these dehydrogenases require the presence of NADH, the coenzyme regeneration was performed with formate dehydrogenase (FDH) from *Candida boidinii*.

The chiral 1,2-diol syntheses combined with coenzyme regeneration were carried out in repetitive batch reactors. Fresh (*S*)-2-HPP substrate was added three times during the repetitive experiments.

All three enzymes were kinetically characterized and the kinetics of all reactions was determined. Based on results kinetic models for synthesis of both chiral 1,2-diols for systems with and without coenzyme regeneration were developed and then combined with reactor mass balance equations. The proposed mathematical models were validated in a batch reactor. The developed models were in good agreement with the experimental data.

For the system without coenzyme regeneration the equilibrium conversions of 60 % and 34 % using *Lb*ADH and GDH, respectively, were achieved. With coenzyme regeneration complete (*S*)-2-HPP conversions using both enzymes were achieved.

Keywords: alcohol dehydrogenase, glycerol dehydrogenase, coenzyme regeneration, (*S*)-2-hydroxypropiophenone, mathematical modeling

UTJECAJ DODATKA ŠEĆERA I AUTOHTONE STARTER KULTURE NA KVALITETU I SIGURNOST SLAVONSKOG KULENA

INFLUENCE OF ADDITION OF SUGARS AND AUTHENTIC STARTER CULTURE ON THE QUALITY AND SAFETY OF SLAVONIAN KULEN

Krešimir Mastanjević¹, Jadranka Frece², Dragan Kovačević¹

¹Sveučilište Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku, Prehrambeno-tehnološki fakultet Osijek,
Kuhačeva 20, 31000, Osijek, Hrvatska
e-mail: kresimir.mastanjevic@ptfos.hr

²Sveučilište u Zagrebu, Prehrambeno-biotehnološki fakultet,
Pierottijeva 6, 10000, Zagreb, Hrvatska
e-mail: jgoreta@pbf.hr

U radu je ispitan utjecaj dodatka, iz kulena izolirane i karakterizirane, autohtone bakterijske starter kulture (ASK) na proces fermentacije i kvalitetu Slavenskog kulena proizvedenog prema tradicionalnom tehnološkom postupku i recepturi. Autohtona bakterijska starter kultura bila je pripremljena kao liofilizirana smjesa ($w/w = 1/1$) krioprotektora obranog mlijeka u prahu i bakterijskih kultura sljedećeg sastava: *Lactobacillus plantarum* 1K, u koncentraciji od $1 \cdot 10^9$ – $1 \cdot 10^{10}$ cfu/g, *Staphylococcus carnosus* 4K1, u koncentraciji od $1 \cdot 10^8$ – $1 \cdot 10^9$ cfu/g i *Staphylococcus carnosus* 12ST, u koncentraciji od $1 \cdot 10^8$ – $1 \cdot 10^9$ cfu/g. Pripremljeno je tri skupine uzoraka Slavenskog kulena: referentni uzorci bez dodatka ASK-a i šećera, uzorci s ASK-om i 0,8% glukoze te uzorci s ASK-om i 0,8 % maltodekstrina. U različitim proizvodnim fazama provedene su fizikalno-kemijske, mikrobiološke i senzorske analize te kontinuirano mjerene pH vrijednosti. Rezultati provedenih analiza pokazali su da dodatak autohtone starter kulture te 0,8 % glukoze i maltodekstrina u odnosu na referentni uzorak Slavenskog kulena, skraćuju vrijeme fermentacije i zrenja, a već nakon 3 mjeseca zrenja postižu optimalna senzorska svojstva bez promjene mirisa, okusa, boje i teksture specifične za Slavonki kulen, odnosno referentni uzorak proizveden prema tradicionalnoj recepturi. Veća koncentracija bakterija mliječne kiseline (BMK) te postignute niže vrijednosti pH uzoraka s dodatkom ASK-a i glukoze (pH = 4,42), odnosno ASK-a i maltodekstrina (pH = 4,52) tijekom procesa fermentacije u odnosu na referentni uzorak (pH = 5,3), povećava sigurnost i trajnost Slavenskog kulena.

**ZAMJENA JEDNE AMINOKISELINE U AKTIVNOM MJESTU
HOMOLOGA SERIL-TRNA-SINTETAZE ZNAČAJNO
MIJENJA NJEGOVU SPECIFIČNOST PREMA SUPSTRATU**

**SUBSTITUTION OF A SINGLE ACTIVE SITE AMINO ACID
DRASTICALLY ALTERS THE SUBSTRATE SPECIFICITY OF
A SERYL-TRNA SYNTHETASE HOMOLOGUE**

Aleksandra Maršavelski¹, Sonja Lesjak², Marko Močibob²,
Ivana Weygand-Đurašević², Sanja Tomić¹

¹Department of Physical Chemistry, Rudjer Boskovic Institute,
Bijenička cesta 54, 10000, Zagreb, Croatia

²Department of Chemistry, Faculty of Science, University of Zagreb,
Horvatovac 102a, 10000 Zagreb, Croatia
e-mail: slesjak@chem.pmf.hr

A homologue of methanogenic type seryl-tRNA synthetase (SerRS), the *Bradyrhizobium japonicum* glycine:[carrier protein] ligase 1 (BjGly:CP ligase 1) has been recently discovered and characterized. The physiological role of this intriguing enzyme as well as the metabolic pathway it participates in remains unknown. A Surprising feature of this homologue is a switch in substrate specificity, as compared to the SerRS it originates from. While SerRS exclusively activates and transfers serine to the cognate tRNA, thus supplying the ribosome with serylated tRNA for protein biosynthesis, BjGly:CP ligase 1 activates and transfers glycine to the phosphopantetheine group of a small carrier protein. The switch in amino acid specificity, to a small aliphatic amino acid like glycine, is surprising in a context of other aaRS homologues, known to rarely change their amino acid specificity. Besides, the enzyme shows low activity in the presence of alanine, but is incapable of activating serine. The detailed computational study aiming to address this unexpected switch toward recognition of the small aliphatic amino acids, revealed the A281G BjGly:CP ligase 1 mutant as the most promising candidate with reconstituted catalytic activity toward the larger substrates. The A281G mutation was predicted to increase the active site, allowing both alanine and serine to establish important hydrogen bonds within the active site, and to adopt an optimal orientation for the reaction. The results were tested by *in vitro* kinetic analysis of the produced A281G BjGly:CP ligase 1 mutant. We found that indeed the A281G substitution greatly affects the enzyme specificity and allows efficient activation of both polar and small aliphatic amino acids (serine, glycine and alanine), confirming predictions and conclusions based on molecular dynamics simulations.

KINETIKA SUŠENJA SFERIČNIH ČESTICA U SUŠIONIKU S FLUIDIZIRANIM SLOJEM

FLUID BED DRYING KINETICS OF SPHERICAL PARTICLES

Tomislav Penović¹, Justyna Ulatowska², Aleksandra Sander¹

¹University of Zagreb, Faculty of Chemical Engineering and Technology
Marulićev trg 19, Zagreb, Croatia,
e-mail: tpenovic@fkit.hr, asander@fkit.hr

²Poznan University of Technology, M. Skłodowska-Curie Square 5, Poznan, Poland
e-mail: just.ulatowska@gmail.com

Fluid bed drying kinetics of catalyst spheres has been investigated in this work. Commercial catalyst HYDROBON S-9, with an average particle size of 1.85 mm, was chosen as the material for examining fluid bed drying kinetics. Drying experiments were carried out in a laboratory fluid bed dryer at different drying air velocities, air temperatures and different catalyst bed heights. Drying kinetics data was collected by measuring air properties (relative humidity and temperature) at the dryer's outlet at different time intervals. Specific surface area and the porosity of catalyst spheres were determined. Also the preliminary experiments included the determination of the minimal and terminal fluidization velocities which represent the fluidization operating range.

Results showed that drying air temperature, velocity and catalyst bed height influence the drying kinetics significantly. Higher drying rates are achieved at higher drying air temperatures, suitable hydrodynamic conditions and by decreasing the catalyst bed height. Page mathematical model was used to approximate experimental drying kinetics data. Mass transfer coefficients have been evaluated using the kinetic equation. The evaluated model parameters and mass transfer coefficients have been correlated with process conditions.

OBLAGANJE U FLUIDIZIRANOM SLOJU WURSTER TEHNOLOGIJOM

FLUID-BED COATING WITH WURSTER INSERT

Gordana Matijašić, Krunoslav Žižek, Matija Gretić, Ana-Maria Đumbir, Tanja Havaić, Maja Bokulić

Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije,
Marulićev trg 19, 10000 Zagreb, Hrvatska,
e-mail: gmattijas@fkit.hr

Oblaganjem u proizvodnji farmaceutika unapređuju se terapijska, tehnološka i marketinška svojstva pojedinih lijekova. Iako je oblaganje u bubnju češće u farmaceutskoj industriji, fluidizirani sloj nailazi na veliku primjenu zbog svojih prednosti koje se očituju u dobroj ujednačenosti sloja (filma) na tableti te mogućnošću oblikovanja kvalitete filma odabirom procesnih uvjeta i načina raspršivanja otopine za oblaganje. Dva su ključna kriterija pri ocjeni kvalitete oblaganja: ujednačenost debljine filma na površini tablete i ujednačena obloženost svih tableta. Značajna odstupanja u navedenim kriterijima uzrokuju odbacivanje cijele šarže proizvoda. Optimiranje procesa oblaganja i predviđanje ujednačenosti oblaganja predstavlja važan segment ove tehnologije.

U ovom radu sagledan je proces oblaganja placebo tableta primjenom Wursterove tehnologije fluidiziranog sloja. Korištena su dva oblika tableta mikrokristalinične celuloze, a oblagane su otopinama komercijalnog sredstva za oblaganje Advantia™ Prime i hidroksipropilceluloze. Kako bi se dobio kolektiv tableta visoke ujednačenosti oblaganja filmom, pokusi su provedeni uz različite protoke i koncentracije otopina za oblaganje te pri različitim temperaturama sušenja. Navedene varijable značajno utječu na proces raspršivanja i veličinu formirane kapljice što može dovesti do različitih mehanizama oblaganja.

Istraživanje je pokazalo da se pri odabiru procesnih uvjeta niti jedan od faktora kvalitete ne smije promatrati samostalno, već treba tražiti optimum koji će dati najveću učinkovitost uz istovremeno mali udio loše obloženih tableta i malu vrijednost faktora varijabilnosti oblaganja. Pokazalo se da je učinkovitost oblaganja veća za okrugle tablete i to pri nižim temperaturama i manjim protocima. Povećanjem mase sredstva za oblaganje povećava se i udio loše obloženih tableta, a posebno za oblaganje duguljastih tableta HPC-om. Ujednačenost oblaganja svih tableta prikazana je faktorom varijabilnosti koji se smanjuje povećanjem Reynoldsove značajke kapljice sredstva za oblaganje. SEM mikrografije površine, specifična površina i raspodjela veličina pora potvrdile su da se oblaganje odvija površinskim mehanizmom. Oblaganjem je ispunjen primarni cilj zaštite tabletno jezgre, a Advantia™ Prime pokazala se kao znatno učinkovitije sredstvo za oblaganje.

**KATALITIČKA OKSIDACIJA POLIFENOLA UZ
Cu-MCM-22 I Cu-MCM-36 ZEOLITNE KATALIZATORE**
**CATALYTIC OXIDATION OF POLYPHENOLS OVER
Cu-MCM-22 AND Cu-MCM-36 ZEOLITE CATALYSTS**

Karolina Maduna Valkaj^{1,2}, Vesna Tomašić¹, Narendra Kumar², Stanka Zrnčević¹,
D.Yu. Murzin²

¹Faculty of Chemical Engineering and Technology, Marulicev trg 19, HR-10000 Zagreb, Croatia
e-mail: kmaduna@fkit.hr, ytomas@fkit.hr

²Åbo Akademi University, Biskopsgatan 8, FI 20500 Turku-Åbo, Finland
e-mail: dmurzin@abo.fi

The olive oil processing industry consumes high quantities of fresh water and produces highly polluted olive oil mill wastewater (OOMW) where polyphenols such as tyrosol and phenolic acids are commonly found. These compounds makes the OOMW phytotoxic and biorefractory in nature and unsusceptible to the direct biological treatment. Catalytic wet peroxide oxidation process (CWPO) is one of the methods that can be used for reducing the toxicity of OOMW in practice under mild conditions with low energy consumption.

Large pore microporous MCM-22 and mesoporous MCM-36 zeolite have already been successfully tested as catalysts in a number of reactions [1]. By incorporating an active transition metal cation such as copper, these zeolites should exhibit good catalytic behavior in the oxidation of the large phenolic molecules. A series of layered MCM-22 precursors with SiO₂/Al₂O₃ ratios of 30, 50 and 100 were synthesized in autoclaves with rotation mode and calcined to produce microporous Na-MCM-22 zeolites. Mesoporous Na-MCM-36 zeolites were prepared of by swelling and pillaring of layered MCM-22 precursors. Copper was introduced in the zeolite by postsynthesis ion exchange of the MCM-22 and MCM-36 zeolites proton forms with copper nitrate solutions. The synthesized catalysts were characterized by N₂ physisorption, XRD, SEM, TEM, TPD-CO₂ and FTIR-Pyridine desorption. The successful structural conversion of the microporous MCM-22 to a mesoporous MCM-36 material was confirmed by XRD resulting in the significant increase in the specific surface area and pore volume.

In this study, the influence of SiO₂/Al₂O₃ ratio and metal content in the parent zeolite catalysts on their physical, chemical and catalytic properties was investigated. The activity and stability of prepared catalysts was tested in the catalytic wet peroxide oxidation of model olive oil mill wastewater containing tyrosol, 4-hydroxyphenylacetic, caffeic, vanillic, p-coumaric and t-cinnamic acids. The oxidation reactions were carried out in a batch reactor at different temperatures, catalyst loadings and initial concentrations of hydrogen peroxide. During the reactions the content of polyphenols and hydrogen peroxide was monitored. The stability of the catalysts was evaluated by comparison of the fresh and spent catalysts, as well as by monitoring the extent of copper leaching into the reaction mixture.

References:

- [1] M. Kåldström, N. Kumar, T. Heikkilä, D.Y. Murzin, Appl. Cat. A-Gen. 397 (2011) 13–21.

RAZVOJ METALNOG MONOLITNOG KATALIZATORA/REAKTORA ZA OKSIDACIJU TOLUENA

DEVELOPMENT OF METALLIC MONOLITH CATALYST/REACTOR FOR TOLUENE OXIDATION

Kristina Babić¹, Marina Duplančić¹, Karolina Maduna Valkaj^{1,2}, Vesna Tomašić¹

¹University of Zagreb, Faculty of Chemical Engineering and Technology,
Marulićev trg 19, HR-10000 Zagreb, Croatia
e-mail: vtomas@fkit.hr

²Åbo Akademi University, Biskopsgatan 8, FI 20500 Turku-Åbo, Finland

Razvoj i primjenu monolitnih katalizatora/reaktora uvjetovali su brojni problemi koji se javljaju pri provođenju heterogenih katalitičkih procesa u reaktorima s nepokretnim slojem katalizatora, suspenzijskim i ostalim izvedbama višefaznih reaktorima (npr. pad tlaka kroz katalitički sloj, otpori prijenosu tvari unutra pojedinih faza ili na granici faza, složena hidrodinamika i sl.). Monolitni katalizatori i/ili reaktori primjer su sustava u kojem nestaju uobičajene razlike između katalizatora i reaktora s obzirom na razinu djelovanja. Metalni monoliti pokazuju brojne prednosti u odnosu na keramičke monolite, kao što su: postojanje vrlo tankih stijenki što dovodi do velike geometrijske površine te malenog ukupnog obujma i mase, bolja mehanička otpornost i veća toplinska vodljivost, mogućnost dodatnih strukturiranja unutar kanala što znatno utječe na poboljšanje turbulencije i omogućava bolji prijenos tvari i topline i sl. Međutim, ključan problem prilikom njihove pripreme je postizanje zadovoljavajuće adhezije katalitičkog sloja na metalni monolitni nosač i prihvatljive mehaničke stabilnosti u promjenljivim uvjetima rada.

Cilj ovog rada bila je priprava metalnog monolitnog katalizatora i testiranje njegovih katalitičkih značajki pri provedbi katalitičke oksidacije toluena. Toluene je izabran kao reprezentativni aromatski spoj zbog njegove štetnosti i prisutnosti u različitim antropogenim izvorima emisija. Kao katalitički aktivna komponenta pripremljen je miješani oksid mangana i nikla primjenom metode usporednog taloženja. Razvijena je metoda nanošenja katalitički aktivne komponente na Al/Al₂O₃ metalne pločice prethodno anodizirane u oksalnoj kiselini. Katalitička oksidacija toluena na metalnom monolitnom katalizatoru/reaktoru provedena je pri različitim radnim uvjetima. Na temelju provedenih kinetičkih eksperimenata predložen je kinetički model reakcije i procijenjeni su parametri modela. Također je provedena usporedba rezultata dobivenih uporabom praškastog Mn-Ni katalizatora i odgovarajućeg oksidnog sloja nanesenog na metalni monolitni nosač. Na temelju dobivenih rezultata očekuje se da će pripremljeni metalni monolitni katalizator pokazivati slična svojstva pri oksidaciji ostalih predstavnika hlapljivih organskih spojeva te odgovarajućih smjesa takvih spojeva.

EKOLOŠKI PRIHVATLJIVA OTAPALA U PROCESU SEPARACIJE ORGANSKIH SPOJEVA

SEPARATION OF ORGANIC COMPOUNDS WITH ECO-FRIENDLY SOLVENTS

Aleksandra Sander, Anamarija Slivar, Barbara Žuteg,
Jasna Prlić Kardum, Marko Rogošić

Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije,
Marulićev trg 19, 10000 Zagreb, RH
e-mail: asander@fkit.hr

Za separaciju kapljevutih smjesa različitih organskih spojeva često se koristi ekstrakcija kapljevina–kapljevina. Najznačajniji korak pri razvoju takvog procesa je odabir odgovarajućeg selektivnog otapala. S obzirom na to da je većina komercijalnih otapala ekološki neprihvatljiva, velik se broj istraživanja bavi razvojem novih otapala. Tijekom posljednjeg desetljeća u porastu je broj radova u kojima se istražuje mogućnost primjene ionskih kapljevina kao selektivnih otapala u procesima ekstrakcije kapljevina–kapljevina. Ionske kapljevine, zahvaljujući zanemarivom tlaku para i sposobnosti otapanja različitih vrsta materijala, svrstavaju se u tzv. zelena otapala. Međutim, velik broj ionskih kapljevina ipak ne zadovoljava većinu principa zelene kemije, posebice onih vezanih za sporedne produkte, iskorištenje sirovina i toksičnost, te se istraživanja usmjeravaju prema eutektičkim smjesama. Eutektičke smjese posjeduju svojstva slična ionskim kapljevinama, ali i zadovoljavaju sve uvjete ekološki prihvatljivih otapala. U svrhu odabira selektivnog otapala koje u najvećoj mjeri zadovoljava zahtjeve procesa, osim ravnoteže potrebno je poznavati fizikalno-kemijska svojstva komponentata višefaznog sustava.

U ovom su radu eksperimentalno određene ravnoteže kapljevina–kapljevina sljedećih sustava: *n*-heksan–piridin–otapalo, *n*-heksan–toluen–otapalo te toluen–*n*-butanol–otapalo. Kao selektivno otapalo odabrane su dvije eutektičke smjese: kolin-klorid / urea i kolin-klorid / glicerol u istom molnom omjeru (1:2). Kako se ekstrakcija provodi pri sobnim uvjetima, pri 25 °C izmjerena su sljedeća fizikalna svojstva: gustoća, viskoznost, indeks loma, električna i toplinska vodljivost, pH te udio vode kao nečistoće. Uz solvent-odnos $S = 1$ provedena je šaržna ekstrakcija, a na temelju efikasnosti ekstrakcije, koeficijenta raspodjele te izmjerenih fizikalnih svojstava odabrano je najpovoljnije otapalo za pojedinu separaciju.

UVEĆANJE SUŠIONIKA S FLUIDIZIRANIM SLOJEM KONUSNE GEOMETRIJE

SCALE-UP OF CONICAL FLUIDBED DRYER

Aleksandra Sander, Margarita Bužančić, Ana Klobučić,
Ana Petračić, Tomislav Penović

Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije,
Marulićev trg 19, 10000 Zagreb, RH
e-mail: asander@fkit.hr

Uvećanje procesa definira se kao metodologija razvoja komercijalnog uređaja na temelju podataka dobivenih u laboratorijskom mjerilu pri čemu je potrebno definirati procesne parametre koji će rezultirati željenim rezultatom neovisno o veličini uređaja. Postoje procesi za koje se mogu koristiti postojeći kriteriji uvećanja ili primijeniti dimenzijska analiza. Međutim, kada geometrijska sličnost ne osigurava dinamičku, toplinsku i koncentracijsku sličnost, kao što je slučaj sa sušenjem, mjerenja je potrebno provesti u barem dva mjerila te na temelju stečenih saznanja definirati kriterij uvećanja. Sušenje je veoma složen proces tijekom kojeg se istovremeno odvijaju procesi prijenosa količine gibanja, topline i tvari. Kaotično gibanje čestica u sušioniku s fluidiziranim slojem često rezultira neujednačenim hidrodinamičkim uvjetima, koji ovise i o veličini uređaja. Za definiranje kriterija uvećanja sušionika s fluidiziranom sloju neophodno je poznavanje utjecaja uvjeta provedbe procesa na kinetiku sušenja, što uključuje provođenje velikog broja eksperimenata i matematičko modeliranje kinetike sušenja. Pri tome je važno naglasiti da se izvedeni kriterij uvećanja može primijeniti na istraživani sustav i odgovarajuće radne uvjete.

U ovom je radu istražena kinetika sušenja sferičnih čestica. Mjerenja su provedena u dva geometrijski slična sušionika s fluidiziranim slojem konusne geometrije. Faktor uvećanja iznosi 4,6. Eksperimentalno je određena minimalna brzina fluidizacije u oba sušionika. Istražen je utjecaj veličine sušionika, visine mirujućeg sloja čestica, temperature i brzine strujanja zraka na kinetiku sušenja kao i konstante sušenja, parametre Pageovog modela te efektivni difuzijski koeficijent i koeficijent prijenosa tvari odnosno parametre II Fickovog zakona. Sušene su sferične čestice Al-Ni katalizatora različitih veličinskih frakcija. Česticama je određena gustoća, tvrdoća te raspodjela veličina pora. Na temelju raspodjele veličina pora zaključeno je da se vlaga kroz unutrašnjost čestica uglavnom prenosi difuzijskim mehanizmom. Minimalna brzina fluidizacije raste s porastom visine mirujućeg sloja čestica, veličinom čestica te je manja u sušioniku većih dimenzija. Kinetika sušenja uspješno je opisana Lewisovim i Pageovim modelom te II Fickovim zakonom. Brzina sušenja je veća pri višim temperaturama i brzinama strujanja zraka te manjim visinama mirujućeg sloja čestica. Uvjeti koji povećavaju brzinu sušenja rezultiraju višim vrijednostima procijenjenih parametra modela.

DODATAK POMOĆNE KOMPONENTE U ŠARŽNOJ KRISTALIZACIJI MEMANTIN HIDROGENSULFATA

ADDING OF ADDITIVE IN BATCH CRYSTALLIZATION OF MEMANTINE HYDROGENSULFATE

Martina Hrkovac¹, Mihaela Tuksar², Jasna Prlić Kardum¹, Miroslav Žegarac²,
Ernest Meštrović²

¹Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Marulićev trg 20, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: mhrkovac@gmail.com

²PLIVA Hrvatska d.o.o, Prilaz baruna Filipovića 29, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: Mihaela.Tuksar@pliva.com

Istražen je utjecaj procesnih parametara te dodatak različitih pomoćnih komponenti (antiotapalo i cjepivo) na termodinamiku i kinetiku kristalizacije, a posljedično i na polimorfizam te granulometrijska svojstva memantin hidrogensulfata. Dodatak pomoćnih komponenti u sustav ima ciljani efekt na tijek procesa kristalizacije, a razumijevanje interakcija između dodataka i komponente koja kristalizira važno je za sve procese s kojima se susrećemo u laboratoriju te u mnogim industrijama [1]. Neovisno o načinu provođenja kristalizacije, ključno za dobivanje željene raspodjele veličine kristala su cijepljenje i održavanje takvog stupnja prezasićenosti da se postigne maksimalna brzina rasta kristala [2]. Dok se cjepljenjem lakše kontrolira dobivanje željene kristalne forme, postoji velika opasnost od unošenja dodatnih nečistoća u sustav što osobito dolazi do izražaja u industrijskoj praksi.

Memantin hidrogensulfat je alternativna sol memantin hidrokloridu, farmaceutske djelatne tvari, koja pokazuje aktivnost u liječenju Alzheimerove bolesti, a kristalizira u dvije polimorfne strukture (S1 i S2). U ovom je istraživanju provedena šaržna kristalizacija memantin hidrogensulfata hlađenjem iz čistog 2-propanola bez i s uključenim ultrazvukom te kristalizacija iz 2-propanola uz dodatak antiotapala (aceton, etilacetat, n-heptan) i cjepiva unutar metastabilne zone. Ispitan je utjecaj ultrazvučnog zračenja oko točke nukleacije te njegovo djelovanje tijekom čitavog procesa.

Posebna pažnja posvećena je pravilnom odabiru otapala za ispiranje dobivenog produkta s obzirom da to može znatno utjecati na strukturu, granulometrijska svojstva i čistoću produkta. Kristali memantin hidrogensulfata ispirani su vodom, acetonom te hladnim 2-propanolom. U konačnici je provedeno sušenje produkta u atmosferskom sušioniku i u sušioniku s infracrvenim zračenjem, a iz dobivenih rezultata određena je kinetika sušenja. Raspodjela veličina kristala memantin hidrogensulfata određena je čestičnim analizatorom metodom laserske difrakcije, a oblik je praćen svjetlosnim mikroskopom uzorkovanjem tijekom procesa. Primjenom odgovarajućih jednadžbi opisana je kinetika procesa kristalizacije memantin hidrogensulfata.

Literatura:

- [1] A.S. Myerson, Handbook of Industrial Crystallization, Butterworth & Heinemann, Oxford, 2002.
- [2] J.W. Mullin, Crystallisation, Butterworths & Co., London, 1972.

SINTEZA ALDOLNOG PRODUKTA, PREKURSORA D-FAGOMINA

SYNTHESIS OF ALDOL ADDUCT, PRECURSOR OF D-FAGOMINE

Martina Sudar, Zvezdana Findrik Blažević, Đurđa Vasić-Rački

University of Zagreb, Faculty of Chemical Engineering and Technology,
 Savska cesta 16, 10000 Zagreb, Croatia
 e-mail: msudar@fkit.hr

A novel cascade reaction for the production of aldol adduct (3*S*,4*R*)-6-[(benzyloxycarbonyl)amino]-5,6-dideoxyhex-2-ulose, a precursor of D-fagomine, was studied in this work. D-Fagomine was found to have inhibitory activity against mammalian intestinal glucosidase and galactosidase [1], and is useful in reducing the risks of developing insulin resistance and of becoming overweight [2].

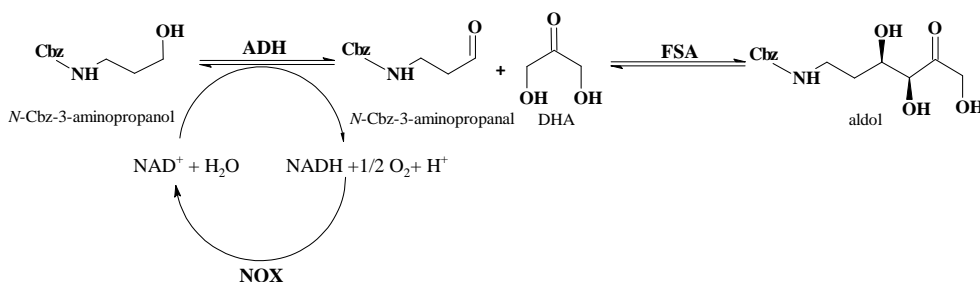


Figure 1 Reaction scheme.

The strategy devised consisted of the simultaneous use of three enzymes: horse liver alcohol dehydrogenase (ADH) used for the oxidation of *N*-Cbz-3-aminopropanol to *N*-Cbz-3-aminopropanal, D-fructose-6-phosphate aldolase (FSA) variant A129S for the aldol addition of dihydroxyacetone to *N*-Cbz-3-aminopropanal, and a third enzyme; NADH oxidase (NOX) for coenzyme NAD⁺ regeneration (Fig 1). This cascade presents an interesting way to obtain aldol adduct using stable starting and readily available materials such as aminoalcohols. The reaction resulted in 76 % yield on aldol adduct.

References:

- [1] J.A. Castillo, J. Calveras, J. Casas, M. Mitjans, M.P. Vinardell, T. Parella, T. Inoue, G.A. Sprenger, J. Joglar, P. Clapés, *Org. Lett.* 8 (2006) 6067–6070.
- [2] S. Amézqueta, E. Galán, I. Vila-Fernández, S. Pumarola, M. Carrascal, J. Abian, L. Ribas-Barba, L. Serra-Majem, J.L. Torres, *Food Chem.* 136 (2013) 1316–1321.

METODE PROČIŠĆAVANJA IONSKIH KAPLJEVINA PURIFICATION OF IONIC LIQUIDS

Jasna Prlić Kardum, Tajana Milin

Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Marulićev trg 19, 10000, Zagreb, Hrvatska
e-mail: jprlic@fkit.hr

U posljednje vrijeme sve se veća pažnja posvećuje očuvanju okoliša te su zbog toga postavljaju i sve stroži zahtjevi za smanjenjem sumporovih spojeva u motornim gorivima. Procesom hidrodesulfurizacije uklanjaju se sumorni i dušikovi spojevi iz goriva, međutim, takav proces je skup i ekološki neprihvatljiv jer zahtjeva rad pri visokim temperaturama i tlakovima. Kapljevinska ekstrakcija pomoću ionskih kapljevina posebno je interesantna alternativa hidrodesulfurizaciji s obzirom da je ekstrakcija proces koji se može provoditi u blagim radnim uvjetima, ali i zbog izuzetnih svojstava ionskih kapljevina kojima se zamjenjuju tradicionalna hlapiva otapala. O ionskim kapljevinama često se govori kao o obećavajućim otapalima za čiste procese i zelenu kemiju [1,2].

Uspješnost ekstrakcijskog procesa, procjenjuje se i na temelju posljednjeg stupnja ovog procesa, regeneracije otapala. Zbog svojstva nehlapivosti ionskih kapljevina te hlapljivosti komponenata otopljenih u njoj, moguće je nakon ekstrakcije sumpora iz goriva, kao metodu regeneracije ionskih kapljevina, odabrati vakuum isparavanje. Nakon ekstrakcije sumporovih spojeva iz dizelskog goriva, a zbog visoke temperature vrelišta, dibenzotiofen zaostaje u pročišćenoj ionskoj kapljevinu. Kako bi ionsku kapljevinu bilo moguće ponovno koristiti, potrebno je dibenzotiofen ukloniti odgovarajućim otapalima. Stoga je provedbom višestupnjevite kapljevinske ekstrakcije istražena učinkovitost uklanjanja zaostalog dibenzotiofena iz ionskih kapljevina [C₅mim][Tf₂N] i [C₆mmPy][Tf₂N] pri različitim solvent odnosima, s odabranim otapalima (toluena, n-dodekana te n-heksadekana). Mjerenja su provedena u laboratorijskom šaržnom ekstraktoru opremljenom s mehaničkim miješalom. Analiziran je utjecaj masenog omjera ionske kapljevine i otapala te broja stupnjeva ekstrakcije na učinkovitost ekstrakcije dibenzotiofena iz ionske kapljevine, kao i optimum potrošnje otapala.

Rezultati istraživanja pokazuju da se najbolja učinkovitost ekstrakcije postiže upotrebom n-dodekana. Utvrđeno je da se povećanjem masenog omjera kao i stupnja ekstrakcije kod svakog sustava povećava i udio ekstrahirane komponente. Kako se odabir otapala mora temeljiti osim na ekološkom aspektu na ekonomskom, određena je specifična potrošnja otapala. Specifična potrošnja otapala manja za manje solvent odnose iako se ista separacija postiže u više stupnjeva.

Literatura:

- [1] P.E. Rakita, Challenges to the Commercial Production of Ionic Liquids, in: R.D. Rogers, K.R. Seddon (Eds.), *Ionic Liquids as Green Solvents*, ACS Symposium Series, vol. 856, American Chemical Society, Washington, D.C., 2003, 32–40.
- [2] R.D. Rogers, K.R. Seddon, *ACS Symposium Series*, vol. 818, American Chemical Society, Washington D.C., 2002.

USPOREDBA RAZLIČITIH KINETIČKIH MODELA DRUGOG REDA PRI MODELIRANJU KINETIKE IONSKE IZMJENE BAKRA NA ZEOLITU NaX

COMPARISON BETWEEN DIFFERENT SECOND-ORDER KINETIC MODELS AND MODELLING ION EXCHANGE KINETICS OF COPPER ON ZEOLITE NaX

Sandra Svilović, Renato Stipišić, Davor Rušić, Nenad Kuzmanić

Sveučilište u Splitu, Kemijsko-tehnološki fakultet, Zavod za kemijsko inženjerstvo,
Teslina 10/V, 21000 Split, Hrvatska

Katalizatori na osnovi zeolita i bakra kao aktivne komponente imaju izuzetno široku primjenu u procesnom inženjerstvu. Za njihovu uspješnu pripremu nužno je poznavanje utjecaja različitih parametara na brzinu ionske izmjene kao i kinetički model izmjene. Stoga je u ovom radu ispitan utjecaj koncentracije bakra na brzinu ionske izmjene u kinetičkom području te je izvršena usporedba različitih kinetičkih modela s dobivenim eksperimentalnim podacima.

Eksperimentalna kinetička ispitivanja provedena su na sustavu bakar - sintetski zeolit NaX u kotlastom reaktoru pri temperaturi od 306 K i pri konstantnoj brzini miješnja ($N = 240$ okr/min). Otopine bakra različitih koncentracija pripravljene su otapanjem bakrovog(II) nitrata u destiliranoj vodi, dok je srednja veličina čestica korištenog zeolita iznosila 0,08 mm.

Analizom eksperimentalnih podataka utvrđeno je da vrijeme potrebno za uspostavu ravnoteže, kao i kapacitet izmjene iona rastu porastom početne koncentracije bakra u otopini. Izmjena iona bakra u početnom periodu je izuzetno brza, nakon čega se može okarakterizirati postupnom do uspostave ravnoteže. Analiza eksperimentalno dobivenih kinetičkih podataka provedena je metodom nelinearne regresije za tri različita kinetička modela: Hoovov, Blanchardov i Ritchiev model. Jako dobro slaganje uočeno je kod sva tri modela s obzirom da svi korišteni modeli pretpostavljaju da je reakcija izmjene bakra na NaX zeolitu reakcija drugog reda tj. da se dva iona natrija zamjenjuju jednim ionom bakra. Premda Hoovov i Blanchardov model pokazuju relativno dobro slaganje s eksperimentalnim podacima, ipak su neznatno lošiji od Ritchieva modela koji je inače razvijen za proces sorpcije na heterogenoj površini kakvom se i površina zeolita NaX može smatrati.

BIOTRANSFORMACIJA STIRENA U (S)-STIREN OKSID U ŠARŽNOM BIOREAKTORU

BIOTRANSFORMATION OF STYRENE TO (S)-STYRENE OXIDE IN A BATCH BIOREACTOR

Nikola Pandurić, Bruno Zelić

Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije,
Marulićev trg 19, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: panduric@fkit.hr

Biotransformaciju lako dostupnog stirena u (S)-stiren oksid moguće je provesti uz dobivanje produkta s enantiomeričkom čistoćom većom od 99 % u živim stanicama bakterije *Pseudomonas* sp. VLB120ΔC [1]. Ova genetski modificirana bakterija posjeduje genetski kod enzima stiren monooksigenaze koji je karakteriziran kao flavin-zavisna monooksigenaza, odnosno enzimatski sustav sastavljen od monooksigenaze koju podržava reduktaza [2]. Metabolizam ove bakterije omogućava joj rast u prisustvu organskih otapala i toksičnih supstrata ili produkata [3] što ju čini izuzetno zanimljivom za industrijsku primjenu i upotrebu u dvofaznim sustavima voda-organsko otapalo.

Biotransformacija stirena u (S)-stiren oksid provedena je u šaržnom bioreaktoru u dvofaznom sustavu vodena faza – bis(2-etilheksil) ftalat u omjeru 2:1. Kao vodena faza korištena je sintetska podloga za uzgoj mikroorganizama M12 s dodatkom fosfatnog pufera ($c_{\text{pufer}} = 0,1 \text{ mol/dm}^3$). Bis(2-etilheksil) ftalat je organsko otapalo koje je korišteno kao izvor supstrata stirena te za odvođenje toksičnog produkta (S)-stiren oksida iz vodene faze. Eksperimenti su provedeni pri velikoj početnoj koncentraciji glukoze ($\gamma_{\text{glukoza},0} = 40 \text{ g/L}$) u puferiranoj sintetskoj podlozi M12 mediju pri konstantnoj temperaturi ($T = 30 \text{ }^\circ\text{C}$) i pH-vrijednosti (pH = 7). Proveden je niz eksperimenata pri različitim početnim koncentracijama stirena u organskoj fazi od 200, 400 i 800 mmol/dm³. Najveća konverzija stirena postignuta je pri najmanjoj početnoj koncentraciji stirena u organskoj fazi pri čemu je iskorištenje stiren oksida na stirenu iznosilo $Y_{\text{SO/S}} = 68,98 \%$. Najveća ostvarena koncentracija stirena u organskoj fazi iznosila je $c_{\text{SO, org}} = 226,19 \text{ mmol/dm}^3$. Biotransformacija stirena u (S)-stiren oksid opisana je jednostavnim matematičkim modelom procesa, a rezultati simulacije pokazali su dobro slaganje s eksperimentalnim podatcima.

Literatura:

- [1] S. Panke, B. Witholt, A. Schmid, M.G. Wubbolts, Appl. Environ. Microbiol. 64 (1998) 2032–2043.
- [2] K. Otto, K. Hofstetter, M. Röthlisberger, B. Witholt, A. Schmid, J. Bacteriol. 186 (2004) 5292–5302.
- [3] D. Kuhn, B. Bühler, A. Schmid, J. Ind. Microbiol. Biotechnol. 39 (2012) 1125–1133.

OPTIMIZACIJA DVOSTUPANJSKIH MEMBRANSKI SUSTAVA ZA IZDVAJANJE CO₂ IZ DIMNIH PLINOVA

OPTIMIZATION OF TWO-STAGE MEMBRANE SYSTEM FOR CO₂ CAPTURE FROM FLUE GAS

Ana Arias¹, Miguel Mussati^{1,2}, Nicolás Scenna¹, Sergio Mussati^{1,2}

¹CAIMI - Centro de Aplicaciones Informáticas y Modelado en Ingeniería - UTN,
 FRRO - Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional Rosario,
 Zeballos 1346, S2000BQA Rosario - Argentina

²INGAR (CONICET-UTN) - Instituto de Desarrollo y Diseño - Avellaneda 3657
 S3002GJC Santa Fe - Argentina

e-mail: anamarisaarias@gmail.com, mmussati@santafe-conicet.gov.ar,
nscenna@yahoo.com.ar, mussati@santafe-conicet.gov.ar

Membranes have been successfully applied for several gas and/or liquid separations and purifications. They involve low cost and high energy-efficiency. However, only few articles address with the study of the potential application of membranes for CO₂ capture. This work deals with the optimization of a two-stage membrane system for CO₂ capture (Fig. 1). Using a NLP model, the optimization problem stated as follows:

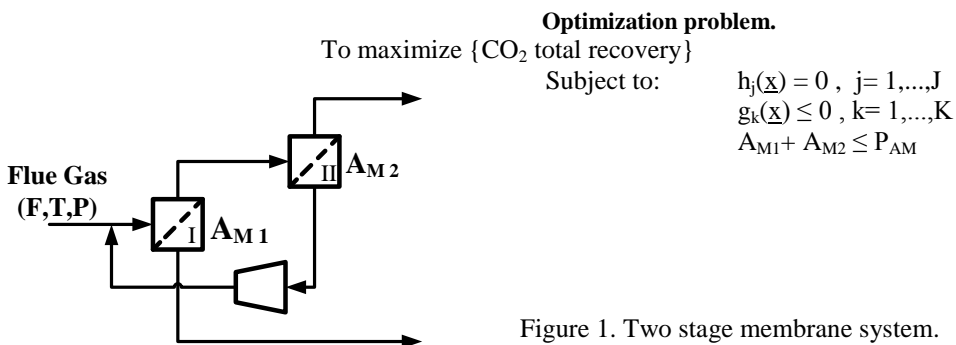


Figure 1. Two stage membrane system.

where \underline{x} denotes the vector of continuous variables (pressures, compositions, flow-rates, membrane areas, power consumption) which are simultaneously optimized. $h_j(\underline{x})$ refers to equality constraints (momentum and mass balances) and $g_k(\underline{x})$ represents a set of inequality constraints defined in order to circumscribe a feasible operating region. Given the flue gas specification (composition, temperature and flow-rate), the optimal design task involves the determination of the operating conditions and how the total membrane area P_{AM} should be allocated in the first (A_{M1}) and second stage (A_{M2}) to maximize the CO₂ total recovery. Optimizations are performed for a wide range of P_{AM} . The model is implemented into General Algebraic Modeling System (GAMS), which is a high-level modeling system for mathematical programming and optimization. A detailed discussion of the optimization results is presented.

**UKLANJANJE CO₂ IZ ISPUŠNIH PLINOVA BRZIM
POSTUPKOM ADSORPCIJE S PROMJENJIVIM TLAKOM –
ISTRAŽIVANJE PARAMETARSKE OSJETLJIVOSTI**

**RAPID PRESSURE SWING ADSORPTION PROCESS FOR CO₂
SEPARATION FROM EXHAUST GASES –
A PARAMETRIC STUDY**

Ana Arias¹, Miguel Mussati^{1,2}, Nicolás Scenna¹, Sergio Mussati^{1,2}

¹CAIMI - Centro de Aplicaciones Informáticas y Modelado en Ingeniería - UTN,
FRRosario, Zeballos 1346, S2000BQA Rosario - Argentina.

²INGAR (CONICET-UTN) - Instituto de Desarrollo y Diseño - Avellaneda 3657
S3002GJC Santa Fe - Argentina.

e-mail: anamarisaarias@gmail.com, mmussati@santafe-conicet.gov.ar,
nscenna@yahoo.com.ar, mussati@santafe-conicet.gov.ar

Since the fossil fuel combustion will still be the dominant contributor to the global energy matrix, much attention should be paid to mitigate the associated greenhouse gases emissions. Despite of the fact that rapid pressure swing adsorption (RPSA) processes have been largely used for the separation of different gas mixtures, its application for CO₂ capture from flue gasses has not been intensively studied. Because of RPSA simplicity and shorter cycle time, its productivity generally is much greater than in a conventional PSA process, operating at comparable product purity and recovery values. On the other hand, the main disadvantage of this process is its higher energy consumption, compared to PSA.

In this work, a parametric study of RPSA applied for CO₂ capture from flue gasses using a commercial zeolite 13X as adsorbent is presented. The RPSA model, described by a set of partial and nonlinear differential equations is implemented and solved in gPROMS, an equation oriented software tool. Simulation results are presented in order to show how the main operating variables (pressure, temperature and feed composition) and dimensions of the adsorption columns (length and diameter) affect the main process performance indicators, such as CO₂ purity in the exhaust stream and overall CO₂ recovery.

RAZVOJ MODELA ZA PROCJENU SADRŽAJA AROMATA NA TEMELJU MALIH SKUPOVA PODATAKA

MODEL DEVELOPMENT BASED ON SMALL DATASETS FOR AROMATIC CONTENT ESTIMATION

Matija Cvetnić, Željka Ujević Andrijić, Ivan Mohler, Nenad Bolf

Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije
Marulićev trg 19, 10000, Zagreb, Hrvatska
e-mail: mcvetnic@fkit.hr

U rafinerijskim postrojenjima ključne procesne veličine kao što su sastavi procesnih struja i svojstva proizvoda mjere se pomoću procesnih analizatora. Budući da su procesni analizatori često nedostupni, ključna svojstva moraju se određivati rijetkim i dugotrajnim laboratorijskim analizama.

U ovome radu prikazana je usporedba više modela softverskih senzora razvijenih na temelju malog skupa dostupnih eksperimentalnih podataka. Podaci su dobiveni iz laboratorijskih analiza procjene sadržaja aromatskih ugljikovodika u rafinerijskom postrojenju.

Softverski senzori razvijeni su primjenom viševeličinske linearne regresije, viševeličinske adaptivne regresije te primjenom neuronskih mreža (mreža temeljenih na funkcijama s kružnom osnovicom i višeslojnih perceptronskih mreža). Kod razvoja neuronskih mreža za generiranje dodatnih skupova podataka primijenjena je *bootstrap* metoda reempliranja.

Na skupu podataka za vrednovanje modela najbolje rezultate pokazali su modeli razvijeni pomoću neuronske mreže. Viševeličinski linearni model pokazao je nešto lošije vladanje. Model razvijen metodom viševeličinske adaptivne regresije pokazao zadovoljavajućim i primjenjivim za procjenu sadržaja aromata.

C

MATERIJALI
MATERIALS

**ZAŠTITNA SVOJSTVA SAMOORGANIZIRAJUĆIH
MONOSLOJEVA STEARINSKE KISELINE DOBIVENIH
RAZLIČITIM METODAMA FORMIRANJA****THE PROTECTIVE PROPERTIES OF SELF-ASSEMBLED
MONOLAYERS OF STEARIC ACID PREPARED BY
DIFFERENT APPLICATION METHODS**

Ekatarina Kristan¹, Katarina Marušić², Zana Hajdari¹, Helena Otmačić Ćurković¹

¹Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Marulićev trg 19, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: ekristan@fkit.hr

²IRB, Zavod za kemiju materijala, Bijenička cesta 54, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: kmarusic@irb.hr

Korozija metalnih konstrukcija uzrokuje znatne gospodarske štete i onečišćenja okoliša. Stoga se ulažu znatna sredstva u razvoj novih ekološki prihvatljivih metoda zaštite metalnih konstrukcija, posebice u prirodnim sustavima, kao što je morska voda. Jedna od ekološki prihvatljivih metoda zaštite je modifikacija metalne površine tankim uređenim organskim filmovima stearinske kiseline, tzv. samoorganizirajućim monoslojevima. Oni se formiraju adsorpcijom kiseline na površinu oksidom prekrivenog metala, pri čemu dolazi do kiselinsko-bazne reakcije između metalnog oksida i kiseline koju prati samoorganizacija alkilnih lanaca stearinske kiseline. Na taj način nastaje vrlo tanki, kompaktni zaštitni film na površini metala, koji sprječava penetraciju molekula vode i agresivnih iona na metalnu površinu.

Formiranje monoslojeva se najčešće provodi metodom uranjanja (*dip-coating*), međutim, ova metoda relativno dugo traje te se njome troše velike količine radnih otopina. Stoga je potrebno ispitati i druge potencijalne metode nanošenja tankih filmova koje bi se mogle koristiti u praksi, kao što je elektrokemijska metoda te metoda prskanja. Glavni cilj ovog rada je ispitati djelotvornost zaštite ugljičnog čelika različitim metodama formiranja barijernih filmova stearinske kiseline: metodom uranjanja, elektrokemijskom metodom te metodom prskanja. Ispitivanja zaštitnih svojstava monoslojeva stearinske kiseline na površini ugljičnog čelika provedena su u simuliranoj morskoj vodi (3 %-tna otopina NaCl) elektrokemijskim metodama: metodom Tafelove ekstrapolacije i elektrokemijske impedancijske spektroskopije, te metodama analize površine: metodom mjerenja kontaktnog kuta, kojom je ispitana hidrofobnost površine, te Fourier transformacijskom infracrvenom spektroskopijom (FTIR), kojom je dokazan način vezanja stearinske kiseline na površinu metala.

Zahvala:

Ovi materijali temelje se na radu koji je financirala Nacionalna zaklada za znanost, visoko školstvo i tehnološki razvoj Republike Hrvatske pod brojem 09.01/253.

**TOPLINSKA STABILNOST MJEŠAVINA PHB/PEO
PRIPREMLJENIH EKSTRUDIRANJEM****THERMAL STABILITY OF PHB/PEO BLENDS PREPARED BY
EXTRUSION**

Miće Jakić, Nataša Stipanelov Vrandečić, Matko Erceg, Irena Krešić

Kemijesko-tehnološki fakultet, Teslina 10/V, 21000 Split, Hrvatska
e-mail: mjakic@ktf-split.hr

Poli(3-hidroksibutirat) (PHB) je potpuno biorazgradljiv alifatski poliester koji je zahvaljujući potpunoj biorazgradljivosti i neotrovnosti posebno prikladan za izradu proizvoda za jednokratnu uporabu, a danas najveću primjenu pronalazi u medicini [1]. Usljed slabe toplinske stabilnosti pri temperaturama preradbe, naglašene krutosti, krutosti i visoke cijene u odnosu na konvencionalnu plastiku PHB do danas nije našao širu komercijalnu primjenu. Jedan od načina poboljšanja navedenih nedostataka je priprema mješavina PHB-a s biorazgradljivim polimerima [2]. Zahvaljujući biokompatibilnosti i mješljivosti s PHB-om, poli(etilen-oksid) (PEO) je idealan polimer za poboljšanje navedenih nedostataka PHB-a. PEO je relativno jeftin, vodotopljivi i biorazgradljiv polimer. Pokazuje izvrsnu preradljivost i dobra mehanička svojstva [3].

Mješljivost i toplinska svojstva mješavina PHB/PEO već su istraživani u literaturi [4–7]. Budući se talište PEO-a (57–76 °C) značajno razlikuje od tališta PHB-a (180 °C), većina autora istraživane mješavine pripremali su otapanjem u zajedničkom otapalu (najčešće kloroform) i lijevanjem filma iz otopine. U ovom radu mješavine PHB/PEO pripremljene su miješanjem polimernih prahova u laboratorijskom ekstruderu pri 180 °C. Toplinska razgradnja ovako pripremljenih mješavina istraživana je dinamičkom termogravimetrijom u temperaturnom području 50–500 °C. Toplinska stabilnost mješavina procijenjena je na osnovi karakteristika termogravimetrijskih (TG) i diferencijalnih termogravimetrijskih (DTG) krivulja: temperatura početka razgradnje (T_{onset}), temperatura pri kojoj polimer izgubi 5 % početne mase ($T_{5\%}$), temperatura pri maksimalnoj brzini razgradnje (T_{max}), maksimalna brzina razgradnje (R_{max}), gubitak mase (Δm) i ostatna masa (m_f). Iz TG krivulja snimljenih pri različitim brzinama zagrijavanja izračunate su aktivacijske energije toplinske razgradnje primjenom Friedmanove i Flynn-Wall-Ozawa metode. Oblik krivulje ovisnosti aktivacijske energije o konverziji daje uvid u složenost procesa razgradnje mješavina PHB/PEO.

Literatura:

- [1] S. Godbole, S. Gote, M. Latkar, T. Chakrabarti, *Biores. Technol.* 86 (2003) 33–37.
- [2] G.R. Saad, H. Seliger, *Polym. Degrad. Stab* 83 (2004) 101–110.
- [3] Z. Luo, J. Jiang, *Polymer* 51 (2010) 291–299.
- [4] S.H. Park, S.T. Lim, T.K. Shin, H.J. Choi, M.S. Jhon, *Polymer* 42 (2001) 5737–5742.
- [5] M.J.K. Chee, J. Ismail, C Kummerlowe, H.W. Kammer, *Polymer* 43 (2002) 1235–1239.
- [6] H. Yang, L. Ze-Sheng, H. Qian, Y. Yang, X. Zhang, C. Sun, *Polymer* 45 (2004) 453–457.
- [7] C. Zhijiang, H. Chengwei, Y. Guang, *Polym. Degrad. Stab.* 96 (2011) 1602–1609.

**UTJECAJ OTPADNOG MATERIJALA NA HIDRATACIJU
PORTLAND CEMENTA I MEHANIČKA SVOJSTVA
OČVRSLIH PORTLAND CEMENTNIH PASTI**

**EFFECTS OF WASTE MATERIALS ON PORTLAND CEMENT
HYDRATION AND MECHANICAL PROPERTIES OF
HARDENED PORTLAND CEMENT PASTES**

Damir Barbir, Pero Dabić, Ana Lisica

Sveučilište u Splitu, Kemijsko-tehnološki fakultet, Teslina 10/V, 21000 Split, Hrvatska,
e-mail: dbarbir@ktf-split.hr

U radu je ispitivan utjecaj mulja iz pogona pocinčavanja i prirodnog zeolitnog tufa na hidrataciju portland cementa. Sastav i mehanička svojstva hidratiziranih cementnih pasti su određeni termogravimetrijskom metodom (TG/DTG) i određivanjem tlačnih i savojnih čvrstoća.

Termogravimetrijska analiza je pokazala da dodatak mulja smanjuje sadržaj kalcijeva hidroksida uslijed reakcije cinka i drugih komponenti iz mulja s produktima hidratacije, posebno portlanditom. Djelomičnom zamjenom cementa prirodnim zeolitnim tufom uslijed pucolanske reakcije, troši se nastali kalcijev hidroksid uz istovremeno povećanje sadržaja kemijski vezane vode.

Uzorci s dodatcima mulja i zeolita pokazali su manje tlačne i savojne čvrstoće u odnosu na referentne uzorke bez dodataka. S obzirom na granične vrijednosti tlačnih čvrstoća prema standardu za ovu vrstu cementa, mulj se može dodati do iznosa od 5 mas. %, dok se smjesa mulja i zeolita može dodati do 10 mas. % u odnosu na masu portland cementa.

MORFOLOGIJA I MEHANIČKA SVOJSTVA IPP/SiO₂ KOMPOZITA MODIFICIRANIH S METALOCENSKIM KOPOLIMERIMA POLIPROPILENA

THE MORPHOLOGY AND MECHANICAL PROPERTIES OF IPP/SiO₂ COMPOSITES MODIFIED WITH METALLOCENE PROPYLENE-BASED COPOLYMERS

Andela Pustak¹, Matjaž Denac², Irina Pucić¹, Iztok Švab³,
Vojko Musil², Ivan Šmit¹

¹Ruder Bošković Institute, Department of Materials Chemistry,
Bijenička 54, 10000 Zagreb, Croatia

²University of Maribor, FEB Maribor, Institute of Technology,
Razlagova 14, 2000 Maribor, Slovenia

³ISOKON, Mestni trg 5a, 3210 Slovenske Konjice, Slovenia
e-mail: apustak@irb.hr, matjaz.denac@uni-mb.si

The morphology of iPP/SiO₂ 96/4 composites modified with metallocene propylene-based copolymers m-EPR has been studied with optical and scanning electron microscopy while mechanical properties were investigated with tensile and impact measurements. The addition of four silica fillers differed in size (micro vs. nanosilica) and surface properties (hydrophilic vs. hydrophobic, e.g. polar vs. non-polar) enabled the comparison of different effects of filler (e.g. nucleation effect investigated with differential scanning calorimetry) on polymer matrix. Two elastomeric m-EPR1 and m-EPR2 polypropylene-based copolymers with different viscosity were added as impact modifiers and compatibilizers in range 0-20 vol % per hundred composite parts of iPP/SiO₂ 96/4 composites.

Silica fillers and m-EPR elastomers affect the spherulite growth in the iPP matrix by two opposite, competitive effects: nucleation effect of filler and solidification effect of elastomer. Final morphology of ternary polymer composites is the result of filler and elastomers influence on polymer matrix but also the result of their mutual interactions and interactions with the matrix [1].

The addition of all silica grades affected crystallization and decreased the spherulite size in the iPP matrix as well as transformed well-developed spherulitic morphology to the morphology with irregular spherulitic grains. Although filler particle size played important role in spherulite growth, surface modification of considered silica fillers exhibited stronger influence on spherulite size than size of silica particles.

The differential scanning calorimetry (DSC) investigations of binary iPP/SiO₂ composites [2] showed that silica fillers with active polar surfaces (like S-120 and A-200 fillers with hydroxyl groups and A-R7200 with methacryl groups) have strong nucleation ability. Increased crystallization temperatures T_c and decreased supercooling affect $\Delta T = T_m - T_c$ are related to stronger nucleating effect of filler. Accordingly, nucleation ability of non-polar microsilica S-D17 is supposed to be lower due to better miscibility/compatibility of nonpolar S-D17 surfaces with iPP chains than silicas with polar surfaces. Analogous supercooling behavior was also observed in ternary iPP/SiO₂/m-EPR composites what implies negligible effect of m-EPR elastomer on crystallization temperature T_c . This fact could be explained by prevailing of separated morphology

of the iPP/SiO₂/m-EPR composites observed by scanning electron microscopy (in which dispersed filler particles exhibited undisturbed nucleation ability despite of 20 vol% added m-EPR elastomers).

The optical microscopy results showed that in ternary polymer composites solidification effect of both m-EPR elastomers did not overcome the nucleation effect of silica filler like in our previous investigation with styrenic-block copolymers [3,4]. The spherulites in iPP/SiO₂/m-EPR composites with microsilica S-120 and nanosilica A-200 are irregular with diffuse boundaries and grain-like morphology. Scanning electron microscopy revealed mainly separated morphology with rather rare interaction between dispersed filler and elastomers particles in these composites. This fact indicated better interaction between the propylene-based m-EPR copolymer and polypropylene matrix than m-EPR copolymers with silica fillers.

The composites iPP/SiO₂/m-EPR with treated surfaces (microsilica S-D17 and nanosilica A-R7200) formed combined morphology consisting of separated and multiple inclusion morphology observed in SEM micrographs. The m-EPR elastomers exhibited stronger recovering effect in spherulite grow (observed by polarizing optical microscopy) in these composites due to lesser nucleation effect of treated silica particles. Accordingly, solidification effect of both elastomers (especially m-EPR2 with lower viscosity) partly prevailed the nucleation effect of silicas with treated surfaces (microsilica S-D17 and nanosilica A-R7200).

Tensile properties investigation of iPP/SiO₂ composites modified with m-EPR elastomer showed that Young's modulus steadily rised with increased filler content due to reinforcing effect of filler [2,5] while the addition of m-EPR elastomers to the iPP/SiO₂ composite reduced composite stiffness. The addition of m-EPR elastomers to the iPP/SiO₂ composites caused general decrease of tensile strength at break σ_b values. Ternary composites with treated filler S-D17 exhibit somewhat lower σ_b values than those ones with other fillers, probably as a result of the weakest nucleation ability and consequently larger spherulites.

The m-EPR elastomers, especially m-EPR1 with longer macromolecules, improved significantly impact properties of all iPP/SiO₂/m-EPR composites. The morphology with small spherulites or irregular grains in composites with hydrophilic silica fillers (S-120 and A-200) which exhibit strong nucleability seems to affect impact properties additionally.

Presented results confirmed improved toughening of the iPP/SiO₂ composites by m-EPR elastomers as very good impact modifiers but also indicated that the role of m-EPR as compatibilizers is not truly fulfilled in this composites like expected and predicted.

References:

- [1] B. Pukanszky, Polyolefin Composites: Interfacial Phenomena and Properties, in C. Vasile (ed.) Handbook of Polyolefins, Dekker, New York, 2000.
- [2] A. Pustak, I. Pucić, M. Denac, I. Švab, J. Pohleven, V. Musil, I. Šmit, J. Appl. Polym. Sci. 128 (5) (2013) 3099–3106.
- [3] A. Pustak, M. Denac, M. Leskovic, I. Švab, V. Musil, I. Šmit, J. Appl. Polym. Sci. 132 (6) (2015) 41486–41498.
- [4] A. Pustak, M. Denac, M. Leskovic, I. Švab, V. Musil, I. Šmit, Polym. - Plast. Technol. (2015) DOI: 10.1080/03602559.2014.979495
- [5] A. Pustak, M. Leskovic, M. Denac, I. Švab, J. Pohleven, M. Makarovič, V. Musil, I. Šmit, J. Reinf. Plast. Compos. 33 (9) (2014) 851–861.

**ISPITIVANJE STABILNOSTI VODENIH DISPERZIJA
NANOČESTICA TiO₂ PRIMJENJIVIH U
ZAŠTITI OD KOROZIJE**

**TESTING THE STABILITY OF AQUEOUS DISPERSIONS TiO₂
NANOPARTICLES APPLICABLE IN
CORROSION PROTECTION**

Antonio Ivanković¹, Ana-Maria Županić¹, Nikolina Šandrak¹,
Mario Vitek¹, Sanja Martinez¹

¹Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije,
Marulićev trg 19, p.p.177, HR-10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: aivakov@fkit.hr

U ovom radu ispitana je mogućnost dobivanja vodenih disperzija nanočestica TiO₂ koje se mogu primijeniti u svrhu zaštite od korozije. Disperzijama je dodavan disperzant kako bi se spriječila tendencija prema stvaranju aglomerata i agregata nanočestica te posljedičnom taloženju, odnosno kako bi se osigurala stabilnost disperzije. Formulacije su priređene s različitim količinama nanočestica (0,1–10 g/100 ml) i pri različitim pH vrijednostima disperzije. Cilj je dobiti vodorazrjeđivi premaz koji ne sadrži organska otapala, te nije štetan za ljudsko zdravlje i okoliš.

U radu su korištene nanočestice TiO₂, srednjeg promjera čestice 23 nm. Vremenska stabilnost vodenih disperzija nanočestica TiO₂ praćena je spektrofotometrijskom metodom mjerenja apsorbancije u vidljivom dijelu spektra. Ispitana je djelotvornost zaštite od korozije koju pružaju prevlake nastale uranjanjem bakrenih uzoraka u disperzije i sušenjem na zraku, te izlaganjem 3,5 % otopini NaCl tijekom 7 dana. Ispitana je i fotokatalitička aktivnost nanosenog sloja mjerenjem korozijskog potencijala u vremenu uz periodično osvjtljavanje pločice UV lampom. Sastav patine na bakru ispitan je ATR-FTIR analizom.

**UPOTREBLJIVOST UZORKA PERLE U SPEKTROMETRIJI
RENDGENSKIH ZRAKA****USABILITY MELTED SAMPLES (GLASS DISK) FOR
X-RAY EMISSION SPECTROMETRY**Vjera Novosel – Radović¹, Nikol Radović², Franjo Šafar¹¹Željezara Sisak, 44000 Sisak, Hrvatska²Sveučilište u Zagrebu, Geodetski fakultet, Kačićeva 26, 10000 Zagreb, Hrvatskae-mail: nradovic@geof.hr

Za analizu spektrometrijom emisije rendgenskih zraka, uzorci praha se pripremaju tehnikom izravnog oblikovanja u briket (s i/ili bez veziva) ili taljenja [1]. Tijekom vremena, pri uporabi standardnih uzoraka praha pripremljeni tehnikom taljenja zapažena je promjena u izmjerenim vrijednostima relativnog intenziteta analitičkih linija u odnosu na početne vrijednosti. Za iznalaženje uzroka uporabljeni su model uzorci pripremljeni iz standardnog uzorka visokopećne troske 367 BCS. Usitnjeni uzorci u WC priključku mlina za usitnjavanje i homogenizaciju, tipa Spex (10 min) su homogenizirani smjesom topitelja ($\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7$: Li_2CO_3 : LaO u omjeru 100 : 10 : 5) u polielilenskom priključku (25 min) u omjeru 1 : 100. Homogenizirana smjesa je taljena u grafitnom lončiću, ravnoga dna, vlastite izrade [2], u komornoj peći na 1100 °C, 25 minuta. Dobivena talina postepeno je hladena na zraku i pohranjena u eksikator. Mjerenje relativnog intenziteta analitičkih linija CaK_α , SiK_α i FeK_α izvršeno je izravno, te nakon stajanja uzorka perle u eksikatoru 6, 12 i 18 mjeseci, na poluautomatskom rendgenskom spektrometru, tipa *Philips* (anoda Au, 20 mA/ 45 KV). Za svako mjerenje pripremljena su tri uzorka. Svaki uzorak je mjeren sukcesivno 10 puta. Poslije svakog mjerenja uzorci su istraženi i na pretražnom elektronskom mikroskopu, tipa *Joel* u snopu odbijenih elektrona. Dobiveni rezultati obrađeni su matematički, primjenom programa *Statistica*. Rezultati ukazuju na promjenu izmjerenih vrijednosti relativnih intenziteta stajanjem uzorka perle u odnosu na početna mjerenja. Prema rezultatima pretražne elektronske mikroskopije zapažene promjene u izmjerenim intenzitetima posljedica su nastalih mikrostrukturnih promjena uzrokovanih stajanjem i utjecaju zračenja tijekom mjerenja [3].

Literatura:

- [1] R.E. Van Grieken, A.A. Markovicz, Handbook of X-Ray Spectrometry, Marcel Dekker Inc, New York, 2002.
- [2] V. Novosel – Radović, Da. Maljković, R. Domitrović, X-Ray Spectrom. 12 (1983) 8–10.
- [3] K. Ohls, Z. Anal. Chem. 286 (1977) 36–40.

**PRIPRAVA I KARAKTERIZACIJA TITANATNIH
NANOCIJEVI****THE PREPARATION AND CHARACTERIZATION OF
TITANATE NANOTUBES**Iva Minga¹, Vilko Mandić¹, Ivan Brnardić², Stanislav Kurajica¹¹Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije,
Marulićev trg 19, 10000 Zagreb, Hrvatska²Sveučilište u Zagrebu, Metalurški Fakultet, Aleja narodnih heroja 3, 44103 Sisak, Hrvatska

Due to unique one-dimensional structures, nanotubes have become one of the most important research subjects in nanotechnology. Among the nanotubular materials that have been prepared, titanate nanotubes have attracted a lot of attention due to cheap fabrication, advantageous properties and potential usage in a wide variety of applications. In this work various properties of titanate nanotubes prepared in our laboratory were characterized.

Titanate nanotubes were prepared from TiO₂ powder (P25) via hydrothermal processing in 10 M NaOH at reaction temperature of 135 °C for 72 h, followed by HCl rinsing. The properties of prepared nanotubes were investigated in detail by various analytic techniques such as X-ray diffraction (XRD), Fourier transformed infra-red spectroscopy (FTIR), differential thermal analysis combined with thermo-gravimetric analysis (DTA/TGA), field emission scanning electron microscopy (FESEM), adsorption-desorption N₂ isotherms and UV-Vis diffuse reflectance spectroscopy (DRS). Although for hydrothermally synthesized nanotubes hydrogen trititanate (H₂Ti₃O₇) structure is usually reported, XRD data revealed the crystal structure of the nanotubes is analogous to that of H₂Ti₂O₅·H₂O (ICDD PDF No. 47-0124). The broad and weak diffraction peaks reveal the nanoscale character of obtained material. The peak at 9.75 °2θ corresponding to d = 906 nm could be attributed to nanotubes interlayer spacing. The nanotubes FTIR spectrum exhibit bands due to hydroxyl groups and water molecules as well as Ti–O vibrations. TGA curve showed mass loss in interval from room temperature to 200 °C of about 18 % comprising removal of adsorbed, intercalated and molecular water. FESEM images displayed strongly aggregated nanotubes with approximate diameter of 10 nm. Specific surface area and pore structure of the prepared material were determined from the N₂ desorption isotherm. It was established that the material is mesoporous having specific surface area of 84.89 m² g⁻¹. The nanotubes band-gap energy of 3.4 eV was determined on the basis of DRS data using Tauc's plot. This value is blue shifted in comparison to the band-gap value usually reported for anatase, which is probably caused by quantum size effects.

**KARAKTERIZACIJA LEGURA S PRISJETLJIVOŠĆU
OBLIKA NA BAZI BAKRA****CHARACTERIZATION OF CU-BASED SHAPE MEMORY
ALLOYS**

Tamara Holjevac Grgurić¹, Mirko Gojić¹, Dragana Živković², Ana Kostov³,
Stjepan Kožuh¹

¹University of Zagreb, Faculty of Metallurgy, Aleja narodnih heroja 3, 44100 Sisak, Hrvatska
e-mail: tholjev@simet.hr

²University of Belgrade, Technical faculty, V.J. 12, 19210 Bor, Serbia
e-mail: dzivkovic@tf.bor.ac.rs

³Minning and Metallurgy Institute, Zeleni bulevar 35, 19210 Bor, Serbia
e-mail: ana.kostov@irmbor.co.rs

The practical importance of shape memory alloys is based on their properties such as shape memory effect, pseudoelasticity and damping capacity [1]. Such properties are consequence of the thermoelastic martensitic transformation and depend on crystal structures of the phases involved in transition. Cu-based alloys are very attractive for practical application due to their low cost and good shape memory properties [2,3]. β -phase region, that is dominant for martensitic transformation, is stable for binary Cu-Al alloys in compositions of 20–30 wt.% of aluminium, but it could be broadened by the addition of manganese or some other third element [4,5]. The addition of Mn to Cu-Al alloys allows obtaining martensitic structure with lower content of aluminium, what means decreased degree of order of β -parent phase that leads to better ductility and elongation of alloy. In this work, the results of microstructure and transition temperatures of as-cast and quenched Cu-16 at.%Al-10at.%Mn were presented. The results of DSC analysis showed martensitic transformation at -20 °C. The influence of different heat-treatment temperatures on the martensitic transformation were discussed.

References:

- [1] C.A. Canbay, Z. Karagoz, F. Yakuphanoglu, Acta Phys. Pol. A 125 (2014) 1163–1166.
- [2] C.A. Canbay, S. Ozgen, Z.K. Genc, Appl. Phys. A 117 (2014) 767–771.
- [3] T. Omori, N. Koeda, Y. Sutou, R. Kainuma, K. Ishida, Mat. Trans. 48 (11) (2007) 2914–2918.
- [4] M.R. Rezvani, A. Shokuhfar, Mat. Sci. Eng. A 532 (2012) 282–286.
- [5] Q. Wang, D. Lu, C. Cui, N. Yan, Q. Wang, Phys. Status Solidi A 209 (2) (2012) 277–282.

**PRIPREMA I KARAKTERIZACIJA DVOSLOJNIH
POLI(VINIL-KLORIDNIH) NANOKOMPOZITA****PREPARATION AND CHARACTERIZATION OF TWO
LAYER POLY(VINYL-CHLORIDE) NANOCOMPOSITES**

Ljerka Kratofil Krehula¹, Mihaela Pokos¹, Stjepko Krehula², Vanja Gilja¹,
Lucija Foglar¹, Zlata Hrnjak-Murgić¹

¹Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Marulićev trg 19, 10000 Zagreb, Hrvatska

²Institut „Ruđer Bošković“, Bijenička cesta 54, 10000 Zagreb, Hrvatska

Aktivna polimerna ambalaža za pakiranje hrane doprinosi njezinu očuvanju i kvaliteti. Dvoslojni ambalažni materijali pružaju veće, dodatne mogućnosti razvoja materijala kroz unos aktivnih tvari kao što su nanočestice metala i metalnih oksida. U tom slučaju aktivne se tvari unose samo u jedan ambalažni sloj čime ne dolaze u direktan dodir s hranom, a znatno unapređuju ciljano svojstvo propusnosti, a time i zaštite hrane.

Istraživanje aktivne polimerne ambalaže provedeno je na više različitih vrsta dvoslojnih polimernih nanokompozita poli(vinil-klorid)/polikaprolakton (PVC/PCL) s dodatkom aktivne tvari titanovog dioksida (TiO_2) ili TiO_2 modificiranog srebrnim ionima. Na PVC je nanesen premazni sloj polikaprolaktone u kojem su dispergirane navedene aktivne tvari. Ovakvi dvoslojni polimerni nanokompozitni PVC/PCL filmovi pripremljeni su sa svrhom dobivanja ambalažnih materijala smanjene propusnosti na UV zračenje i povećanog antimikrobnog djelovanja. Pripremljeni nanokompoziti okarakterizirani su termogravimetrijskom analizom (TGA), UV-Vis spektroskopijom, rendgenskom difrakcijom u prahu (XRD) i pretražnom elektronskom mikroskopijom (SEM).

Rezultati su pokazali da PVC/PCL dvoslojni filmovi s dodanim aktivnim tvarima imaju bolja mehanička svojstva u odnosu na čisti PVC/PCL film, a toplinska svojstva su im neznatno narušena. Nadalje, rezultati su pokazali da TiO_2 poboljšava UV blokirajuća svojstva materijala te da dodatak srebra povećava svojstvo apsorpcije UV zračenja titanovog dioksida.

SINTEZA REDUCIRANOG GRAFEN OKSIDA KEMIJSKIM PUTEM

SYNTHESIS OF REDUCED GRAPHENE OXIDE BY CHEMICAL METHODS

Denis Sačer¹, Iva Šrut Rakić², Milivoj Plodinec³, Davor Čapeta⁴, Suzana Sopčić¹,
Davor Antičić¹, Zoran Mandić¹, Marijana Kraljić Roković¹

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

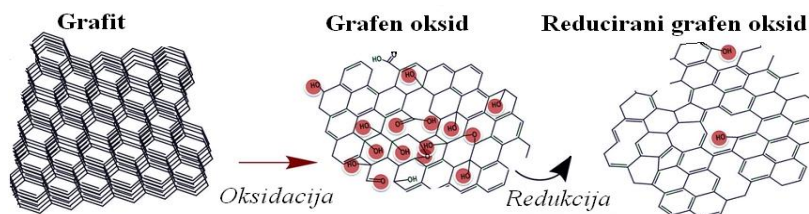
²Institut za fiziku, Bijenička cesta 46, 10000 Zagreb, Hrvatska

³Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, 10000 Zagreb, Hrvatska

⁴Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno matematički fakultet,
Bijenička cesta 32, 10000 Zagreb, Hrvatska

Materijali na bazi ugljika značajni su zbog male cijene, široke primjene te relativno inertne elektrokemijske i elektrokatalitičke aktivnosti za čitav niz redoks reakcija. Grafen je materijal debljine jednog atoma sa sp^2 povezanim ugljikovim atomima u dvodimenzionalan sloj. Zbog odličnih električnih, mehaničkih i temperaturnih svojstava njegova je primjena moguća u polimernim kompozitima, sensorima, tranzistorima, vodljivim polimernim materijalima i biomedicini. Grafen je moguće dobiti kemijskim putem iz grafita pri čemu u prvom koraku nastaje grafen oksid (GO). Grafen oksid dobiven na ovaj način je monosloj ugljika sa visokim udjelom kisika. Za razliku od grafena, GO zbog prisutnosti defekata unutar strukture materijala ima smanjenu električnu vodljivost, ali se odlikuje dobrom topljivošću u vodenom mediju. Ključni proces u istraživanju i primjeni grafena je redukcija kojom je moguće GO prevesti u grafen i na taj način obnoviti strukturu i svojstva grafena.

U ovom radu dobiven je grafen iz grafita kemijskom metodom te su određena svojstva nastalih produkata. Grafit je preveden u grafen oksid korištenjem sumporne i dušične kiselina te $KClO_3$ (Staudenmaierova metoda, slika 1), a dobiveni produkt je ultrazvučno raslojen do GO. Potom su odabrani optimalni uvjeti pri kojima dolazi do redukcije GO u grafen. Dobiveni produkti su okarakterizirani korištenjem cikličke voltametrije, UV-vis spektroskopije, FTIR spektroskopije, mikroskopa atomskih sila, Ramanove spektroskopije i skenirajuće elektronske mikroskopije. Cilj ove procedure je bio dobiti uzorak grafena kod kojeg su u procesu redukcije GO uklonjene kisikove funkcionalne skupine te postignut visok stupanj električne vodljivosti uz što manju aglomeraciju uzorka. Grafen dobiven na ovaj način je korišten u pripravi aktivnih materijala za superkondenzatore.



Slika 1. Shema kemijske sinteze reduciranog grafen oksida.

DIELEKTRIČNA SVOJSTVA STAKLENIH IONOMERA

DIELECTRIC PROPERTIES OF GLASS IONOMER CEMENTS

Ana Šantić¹, Marina Čalogović¹, Luka Pavić¹, Jadranko Gladić², Zlatko Vučić²,
Davorin Lovrić², Katica Prskalo³, Bernard Janković³, Zrinka Tarle³, Andrea
Moguš-Milanković¹

¹Institut Ruđer Bošković, Bijenička c. 54, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: asantic@irb.hr

²Institut za fiziku, Bijenička c. 46, 10000 Zagreb, Hrvatska

³Sveučilište u Zagrebu, Stomatološki fakultet, Gundulićeva 5, 10000 Zagreb, Hrvatska

Stakleni su ionomeri dentalni materijali s dugom i intenzivnom uporabom u restaurativnoj stomatologiji. To su dvokomponentni materijali koji se umrežavaju kiselo-baznom reakcijom između aluminofluorosilikatnih staklenih čestica (jedna komponenta) i vodene otopine poliakrilne kiseline (druga komponenta). U novije vrijeme brojna su istraživanja usmjerena na razvoj hibridnih dentalnih materijala koji sadrže staklene ionomere i dodatnu komponentu kao što je to npr. smola. Takvi, smolom modificirani stakleni ionomeri sadrže i fotosenzitivnu komponentu te kod njih proces umrežavanja uz kiselo-baznu reakciju uključuje i polimerizaciju koja se aktivira osvjetljavanjem svjetlom određene valne duljine.

U ovom istraživanju korištena su dva konvencionalna staklena ionomera komercijalnih imena Fuji IX Fast i Ketac Molar te smolom modificirani stakleni ionomer komercijalnog imena Fuji II LC. Procesi umrežavanja u ovim materijalima praćeni su dielektričnom spektroskopijom u širokom frekvencijskom području (1 Hz – 1 MHz) na sobnoj temperaturi i digitalnom laserskom interferometrijom.

Promijene realnog i imaginarnog dijela dielektrične permitivnosti s vremenom za Fuji IX Fast i Ketac Molar pokazuju tri područja s različitim kinetikom koja su povezana s različitim stadijima kiselo-bazne reakcije. Posebno je interesantno što prva faza koja traje 12 min kod Fuji IX Fasta odnosno 49 min kod Ketac Molara završava naglim smanjenjem dielektričnih parametara što se objašnjava trenutnim nastajanjem mikro-pukotina zbog naglog skupljanja materijala tijekom umrežavanja. S druge strane, promjene dielektričnih parametara tijekom umrežavanja kod Fuji II Fasta pokazuju brzu reakciju u početnom stadiju (prvih par minuta) nakon koje slijedi sporo i postepeno umrežavanje kao posljedica kompeticije kiselo-bazne reakcije i svjetlosno aktivirane polimerizacije.

**ELEKTRIČNA I DIELEKTRIČNA SVOJSTVA
B₂O₃–Fe₂O₃–P₂O₅ STAKALA****ELECTRICAL AND DIELECTRIC PROPERTIES OF
B₂O₃–Fe₂O₃–P₂O₅ GLASSES**Luka Pavić¹, Hüseyin Ertap², Mevlüt Karabulut², Andrea Moguš-Milanković¹¹Institut Ruđer Bošković, Bijenička c. 54, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: lpavic@irb.hr²Kafkas University, Department of Physics, 36100 Kars, Turkey

Fosfatna stakla koja sadrže Fe₂O₃ pokazuju elektronsku provodnost koja se opisuje *modelom malog polarona*, a rezultat je preskoka elektrona s Fe²⁺ na Fe³⁺ ione [1]. Električna provodnost i dielektrična svojstva serije stakala $x\text{B}_2\text{O}_3-(40-x)\text{Fe}_2\text{O}_3-60\text{P}_2\text{O}_5$ ($x = 0-20$ mol %) istraživana su impedancijskom spektroskopijom u širokom frekvencijskom (od 0,01 Hz do 1 MHz) i temperaturnom području (od 303 do 523 K).

Istosmjerna provodnost je proporcionalna koncentraciji polarona koja je ovisna o udjelu Fe₂O₃ te prosječnoj udaljenosti između iona željeza. Kompleksna dielektrična permitivnost je također istraživana kao funkcija frekvencije i temperature te je uočeno temperaturno ovisno relaksacijsko ponašanje. Povezanost relaksacijskih parametara i električne provodnosti ukazuje da električna provodnost ovisi o kretanju polarona između različito udaljenih iona željeza. Za pojedina su stakla primjećena odstupanja od Summerfieldovog skaliranja [2,3] provodnosti te spektara dielektrične permitivnosti. Navedena nepodudaranja su uzrokovana lokalnim strukturnim neredom i/ili relaksacijom tijekom dodatka B₂O₃ u ranoj fazi kao i ugradnjom BO₄ tetraedara u fosfatne lance [4].

Literatura:

- [1] A. Šantić, A. Moguš-Milanković, *Croat. Chem. Acta* 85 (2012) 245–254.
- [2] B. Roling, A. Happe, K. Funke, M.D. Ingram, *Phys. Rev. Lett.* 78 (1997) 2160–2163.
- [3] B. Roling, *Solid State Ionics* 105 (1998) 185–193.
- [4] A. Moguš-Milanković, L. Pavić, H. Ertap, M. Karabulut, *J. Am. Ceram. Soc.* 95 (2012) 2007–2014.

**KARAKTERIZACIJA PE/PCL DVOSLOJNIH AMBALAŽNIH
FILMOVA MODIFICIRANIH NANOČESTICAMA****CHARACTERIZATION OF PE/PCL MULTILAYER
PACKAGING FILMS MODIFIED BY NANOPARTICLES**

Antonija Kruljac¹, Leon Mihić¹, Zvonimir Katančić¹, Anita Ptiček Siročić², Zlata Hrnjak-Murgić¹

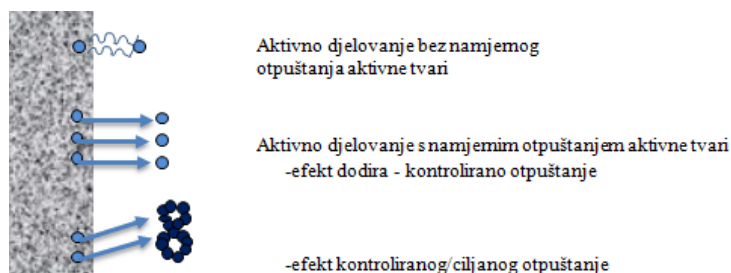
¹Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije,
Marulićev trg 19, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: katancic@fkit.hr

²Geotehnički fakultet, Hallerova aleja 7, 42000 Varaždin, Hrvatska

Razvoj novih ambalažnih polimernih materijala znatno doprinosi očuvanju kvalitete upakirane hrane. Posebno je značajan razvoj polimerne aktivne ambalaže koja ostvaruje zadane ciljeve budući da dodatak aktivnih tvari ciljano unaprjeđuje jedno ili više svojstvo, primjerice smanjenje propusnosti vodene pare, kisika ili svjetla.

U radu su pripremljeni dvoslojni polietilen/polikaprolakton (PE/PCL) ambalažni filmovi uz dodatak nanočestica cinkovog oksida (ZnO) i magnetita (Fe₃O₄). Nanočestice su u sloj PCL-a dodane direktno u otopinu polimera ili kroz prethodno sintetizirani bionanokompleks, koji je dobiven ugradnjom nanočestica u molekulu mliječnog proteina kazeina. Ovakvi PE/PCL filmovi pripremljeni su s ciljem dobivanja ambalažnog materijala smanjene propusnosti vodene pare uz zadržavanje dobrih mehaničkih svojstava.

Rezultati su pokazali da se povećanjem udjela nanočestica podjednako smanjuje propusnost vodene pare kod obje vrste uzoraka (sa i bez bionanokompleksa). Mehanička svojstva uzoraka bez bionanokompleksa pokazala su da nije došlo do značajnijeg pogoršanja svojstava dok su uzorci kod kojih su nanočestice unesene putem kompleksa pokazali znatno bolja mehanička svojstva.



Slika 1. Shema dvaju različitih vrsta materijala aktivne ambalaže; namjernih i nenamjernih migracija.

USPOREDBA TALOŽNIH DIJAGRAMA BIOMINERALIZIRAJUĆIH SOLI, KALCIJEVIH KARBONATA I KALCIJEVIH FOSFATA

COMPARISON OF PRECIPITATION DIAGRAM OF BIOMINERAL SALTS, CALCIUM CARBONATES AND CALCIUM PHOSPHATES

Lara Štajner, Branka Njegić Džakula, Jasminka Kontrec, Tonko Dražić,
Darija Jurašin, Maja Dutour Sikirić, Damir Kralj

Institut Ruđer Bošković, Bijenička c. 54, 10000 Zagreb, Hrvatska

Istraživanje uvjeta nastajanja kalcijevih karbonata i kalcijevih fosfata važno je prvenstveno zbog njihove uloge u procesu biomineralizacije, no nije zanemariva ni njihova uloga u geologiji, oceanologiji, ekologiji te u različitim industrijskim procesima. Iako su ta dva biominerala različita po svojoj biološkoj ulozi (karbonati su glavna anorganska komponenta mineraliziranih tkiva beskralježnjaka, a fosfati kralježnjaka), procesi njihova nastajanja i transformacije "*in vivo*", ali i "*in vitro*" podliježu sličnim pravilima i iskazuju sličan obrazac. Naime, kalcijevi karbonati i kalcijevi fosfati pojavljuju se u nizu različitih čvrstih faza, amorfni ili kristalnih, metastabilnih i stabilnih, pri čemu je uloga nestabilnih modifikacija djelomično nerasvijetljena. [1,2]

Cilj je ovih istraživanja istražiti početne uvjete taloženja kalcijevih karbonata i kalcijevih fosfata u području koncentracija relevantnih za biomineralizaciju tih soli u tipičnim biološkim sustavima te kritički usporediti tako dobivene podatke. Taloženje kalcijevih karbonata i kalcijevih fosfata rađeno je u sustavima u kojima su otopine reaktanata miješane pri strogo kontroliranim hidrodinamičkim i termodinamičkim uvjetima (početna prezasićenost, pH, temperatura, ionska jakost). Proces je kontinuirano praćen mjerenjem koncentracije tijekom vremena, a čvrsta faza je odijeljena filtriranjem. Talog je analiziran IR spektroskopijom te svjetlosnom mikroskopijom.

U taložnim dijagramima su određene granice taloženja te koncentracijska područja u kojima nastaju pojedine modifikacije kalcijevih karbonata, odnosno fosfata. Za sustav kalcijevih fosfata je utvrđeno da u cijelom koncentracijskom području, nakon jednog sata, transformacijom primarno nastalog amornog kalcijevog fosfata, nastaju kalcijev hidrogenfosfat dihidrat, oktakalcijev fosfat i/ili apatiti. Pri sličnim uvjetima prezasićenosti, u sustavima kalcijevih karbonata nastaje pretežito vaterit, dok je samo u uskom području taložnog dijagrama nastala smjesa vaterita i kalcita.

Literatura:

- [1] N.A.J.M. Sommerdijk, G. de With, Chem. Rev. 108 (2008) 4499–4550.
- [2] S. Dorozhkin, Calcium orthophosphates: Applications in Nature, Biology and Medicine, Pan Stanford Publishing, Singapore, 2012.

UTJECAJ ALANINA, ASPARAGINSKE KISELINE I LIZINA NA TALOŽENJE KALCIJEVIH KARBONATA I KALCIJEVIH FOSFATA

INFLUENCE OF ALANINE, ASPARTIC ACID AND LYSINE ON PRECIPITATION OF CALCIUM CARBONATES AND CALCIUM PHOSPHATES

Lara Štajner, Branka Njegić Džakula, Jasminka Kontrec,
Nikolina Nekić, Darija Jurašin, Maja Dutour Sikirić, Damir Kralj

Institut Ruđer Bošković, Bijenička c. 54, 10000 Zagreb, Hrvatska

Međupovršine kristala biomineralizirajućih soli kalcijevih karbonata i fosfata u dodiru s vodenom otopinom predstavljaju izrazito složeni heterogeni sustav u kojem je prisutan velik broj otopljenih ionskih vrsta i površinskih kompleksa. Pri tome, obje soli iskazuju izuzetan kemijski afinitet spram otopljenih organskih molekula koje sadrže polarne funkcionalne grupe, karboksilnu ili hidroksilnu. U procesu biomineralizacije proteini su glavna organska komponenta ekstracelularne otopine u kojoj se zbiva kristalizacija. Uobičajene strategije istraživanja utjecaja proteina na nastajanje kalcijevih fosfata i karbonata temelje se, bilo na korištenju izoliranih proteina iz mineraliziranog tkiva ili na korištenju njihovih sintetskih analoga, koji po aminokiselinskom sastavu i sekundarnoj strukturi nalikuju prirodnom materijalu. Takva su istraživanja, iako daju važne informacije o utjecaju pojedinog proteina, nepotpuna upravo zbog nepoznate uloge pojedinih aminokiselina. [1,2]

Cilj ovog rada bio je istražiti utjecaj tri strukturno različite aminokiseline (alanin (Ala), lizin (Lys) i asparaginska kiselina (Asp)) na kinetiku taloženja te sastav nastale čvrste faze karbonatnih i fostatnih soli. Pri fiziološkim uvjetima Ala je neutralan, Lys je pozitivno, a Asp je negativno nabijen. Istraživanja su provedena pri biološki relevantnim uvjetima (početna prezasićenost, pH, temperatura, ionska jakost) odgovarajućim za kalcijeve karbonate te fosfate i uz različiti dodatak odabrane aminokiseline. Kinetike taloženja kontinuirano su praćene mjerenjem promjene sastava otopine tijekom vremena, a nastala čvrsta faza je karakterizirana pomoću IR spektroskopije te svjetlosne mikroskopije.

Istraživanja su pokazala da u sustavima kalcijevih fosfata i kalcijevih karbonata dodatak Asp u ispitivanom koncentracijskom području uzrokuje značajne promjene, dok je djelovanje Lys i Ala znatno manje izraženo.

Literatura:

- [1] B. Njegić Džakula, Lj. Brečević, G. Falini, D. Kralj, *Cryst. Growth Des.* 9 (2009) 2425–2434.
- [2] M. Sikirić, V. Babić-Ivančić, O. Milat, H. Fueredi-Milhofer, *Langmuir* 16 (2000) 9261–9266.

KRISTALIZACIJA CaCO_3 U ALGINATNOM HIDROGELU UZ DODATAK NABIJENIH AMINOKISELINA**CRYSTALIZATION OF CaCO_3 IN ALGINATE HYDROGEL WITH THE ADITION OF CHARGED AMINOACIDS**Iva Buljan, Andreja Gajović, Jasminka Kontrec, Damir Kralj

Institut Ruđer Bošković, Bijenička 54, 10000, Zagreb, Hrvatska

CaCO_3 je jedan od najraširenijih minerala koji se pojavljuje u tri različita polimorfa (vaterit, aragonit i kalcit) te nekoliko hidratnih formi. Osim geoloških oblika, kalcijev karbonat se u prirodi pojavljuje i kao važan biominerala, pri čemu je morfologija takvih kristala dominantno kontrolirana prisutnim bioorganskim molekulama. U živim organizmima se kristalizacija kalcijeva karbonata zbiva unutar gelirajuće matrice koja zadrži proteine, a tako stvoreni kristali zadovoljavaju niz različitih strukturnih i funkcionalnih potreba organizma [1]. Fallini et al. [2] su istražili kristalizaciju tri polimorfa CaCO_3 u hitinskom gelu te su zaključili da prezasićenost unutar zatvorenog mikro prostora određuje položaj i polimorfni sastav kristala.

U ovom su radu prikazana istraživanja kristalizacije kalcijeva karbonata u gelirajućoj organskoj matrici te uz dodatak različitih količina aminokiselina za koje se pretpostavlja da imaju značajnu ulogu u strukturi proteina relevantnih za biomineralizaciju. Taložni modelni sustav predstavljale su kuglice alginatnog hidrogela, pripremljene ionotropskim geliranjem uz dodatak kalcijevih iona te aminokiselina s različitim nabijenim funkcionalnim skupinama (alanin, lizin, asparaginska kiselina). Kuglice alginatnog hidrogela su mineralizirane kontroliranom difuzijom karbonatnih iona. Ovisno o stupnju umrežavanja alginata, prezasićenosti te dodatku različitih aminokiselina, nastali su polimorfi kalcijeva karbonata različite morfologije. Uzorci gela i mineraliziranog kalcijeva karbonata su liofilizirani te karakterizirani IR i Raman spektroskopijom, termogravimetrijom, kao i mikroskopski.

Literatura:

- [1] S. Mann, *Biominalization: Principles and Concepts in Bioinorganic Materials Chemistry*, 2nd ed., Oxford University Press, New York, 2001.
- [2] G. Falini, S. Fermani, A. Ripamonti, *J. Inorg. Biochem.* 91 (2002) 475–480.

D

OBRAZOVANJE
EDUCATION

P 135

**KORIŠTENJEM KENOGRAMA DO BOLJEG
RAZUMIJEVANJA NASTAVNIH SADRŽAJA ORGANSKE
KEMIJE U OSNOVNOJ ŠKOLI**

**USING KENOGRAMS TO ACHIEVE BETTER
UNDERSTANDING OF ORGANIC CHEMISTRY
CONTENTS IN PRIMARY SCHOOLS**

Dražen Crnčec

OŠ Sveti Martin na Muri, Trg Svetog Martina 4, 40313 Sveti Martin na Muri, Hrvatska
e-mail: dcrncec1@gmail.com

Osnovna škola predstavlja obveznu razinu odgoja i obrazovanja kojoj je funkcija stjecanje širokog općeg odgoja i obrazovanja. U svim dokumentima koji se tiču obrazovanja težište se premješta s programa i nastavnika na učenika te na njegov razvoj i postignuća. Upravo stoga, svrha poučavanja prirodoslovnog područja je da učenici steknu prirodoslovnu pismenost, odnosno kompetencije koje ih uvode u znanstveni način razmišljanja što im omogućuje razumijevanje prirode te zakonitosti koje u njoj vladaju.

Kemija u osnovnoj školi prvenstveno je usmjerena na kemijska znanja potrebna za svakodnevni život, a učenje kemije treba pridonositi razvoju logičkog i kreativnoga mišljenja. Učenici se s nastavnim sadržajima i temeljnim spoznajama organske kemije susreću u osmom razredu osnovnoškolskog obrazovanja. Cilj ovog rada jest kritički promotriti mogućnosti korištenja kenograma u proučavanju strukture i svojstava acikličkih ugljikovodika s obzirom da trenutno važeći redovni program ne koriste taj oblik prikazivanja organskih spojeva, dok u zadacima za školska te županijska natjecanja kenogrami često budu prisutni.

**ODRAZ MENDELJEJEVOG PERIODNOG SUSTAVA
ELEMENTATA U HRVATSKOJ KEMIJI**

**REFLECTION OF MENDELEEV'S PERIODIC TABLE OF
ELEMENTS IN CROATIAN CHEMISTRY**

Vanja Flegar, Snježana Paušek-Baždar

¹Hrvatska akademija znanosti i umjetnosti, Odsjek za povijest prirodnih i matematičkih znanosti,
Ante Kovačića 5, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: vanja@hazu.hr

U radu će se izložiti analiza podataka o recepciji Mendeljejevog periodnog sustava elemenata od njegova prvog spominjanja u hrvatskoj kemijskoj literaturi, sve do sredine 20. stoljeća. Farmaceut, kemičar i sveučilišni profesor Julije Domac objavio je udžbenik *Anorganska kemija za više razrede realnih gimnazija i realka* (Zagreb, 1901.) u kojem se nalazi prvi temeljiti opis periodnog sustava elemenata, njegovo tumačenje i tabelarni prikaz. Nakon njega i ostali hrvatski kemičari (Franjo Šandor, Fran Bubanović, Vladimir Njegovan i drugi) šire i promiču Mendeljejev novouređeni sustav kemijskih elemenata. No, za prihvaćanje i promicanje tog sustava u hrvatskoj kemijskoj i znanstvenoj sredini najzaslužniji je bio Gustav Janeček, sveučilišni profesor svih kemijskih predmeta na novoutemeljenom Mudroslovnom fakultetu Sveučilišta u Zagrebu. Mendeljejev periodni sustav Janečeku je bio središte predavanja iz opće i anorganske kemije, a opsežno ga je protumačio i u svom udžbeniku *Kemija I opći dio* (Zagreb, 1919.). Kako je u to doba Janeček bio redoviti član Hrvatske akademije znanosti i umjetnosti, a neko vrijeme njezin predsjednik i predstojnik njezina Matematičko-fizičkog razreda, on je na sjednici tog razreda 1908. godine održao nezaboravno predavanje o Dimitriju Ivanoviču Mendeljejevu i njegovu otkriću. U tom predavanju, Janeček je pored temeljitog prikaza periodnog sustava elemenata, upozorio na recepciju tog dostignuća u europskoj kemiji, kojemu nije dovoljno iskazano zasluženo priznanje. Osobito je istaknuo znanje, intuiciju i inovativnost u Mendeljejevom pristupu i odao mu zaslužnu počast, istaknuvši da se vrijednost periodnog sustava kontinuirano potvrđuje u svijetlu novih kemijskih spoznaja. Zahvaljujući Gustavu Janečeku Hrvatska akademija znanosti i umjetnosti je odala priznanje Mendeljejevom kemijskom dostignuću tako što ga je izabrala za svog počasnog člana (5. prosinca 1882.). To je bilo prvo europsko priznanje Mendeljejevu, stoga što ga Ruska carska akademija nije izabrala za svog redovitog člana, a Kraljevsko društvo u Londonu ga je izabralo tek 1890. godine.

PREDNOSTI VIZUALIZACIJE U POUČAVANJU ZNANSTVENOG SADRŽAJA

BENEFITS OF VISUALIZATION IN TEACHING SCIENTIFIC CONTENT

Snježana Smerdel

Srednja škola Plitvička jezera, Zagrebačka 2, 53230, Korenica, Hrvatska
e-mail: ssmerdel@gmail.com

Tijekom druge polovice prošlog stoljeća glavni cilj znanstvenog obrazovanja promijenio se iz stvaranja znanstvenih stručnjaka u znanstvenu pismenost za svakog građanina. Predavači su utvrdili da tradicionalno poučavanje i učenje, čiji je fokus na usvajanju znanstvenih koncepata i razvijanju znanstvenih vještina, nije dovoljno za postizanje tog obrazovnog cilja. [1] Iako se ne podcjenjuje učenje čistog znanstvenog sadržaja, znanstveno obrazovanje ne bi trebalo biti samo prijenos tog sadržaja. Tako se zanemaruju procesi istraživanja i znanstvenog načina razmišljanja čime se mogu razvijati sofisticiranije vještine razmišljanja i zaključivanja korisne za rješavanje problema i u svakodnevnom životu. [2] Razumijevanje učenika osnovnih i srednjih škola često je ograničeno različitim miskonceptima pa je primjena vizualizacije u poučavanju znanstvenih sadržaja mogući doprinos dubljem razumijevanju apstraktnih koncepata kao što su u kemiji geometrija i polarnost molekula. [3]

Radi proširivanja znanja o primjeni vizualizacije u nastavi, u izlaganju su prezentirani rezultati istraživanja dobiveni uspoređivanjem metoda poučavanja korištenjem vizualizacije s tradicionalnim metodama, koje uključuju PowerPoint prezentacije, dijagrame ili crteže. Analiziraju se različiti aspekti vizualizacije dostupne za nastavu prirodoslovnih predmeta: virtualni laboratoriji, animacije bio-organskih molekula (BioORA) i modeli.

Rezultati istraživanja iz predmetnih područja kao što su kemija, fizika i biologija pokazuju da se korištenjem različite vizualizacije u nastavi smanjuje kognitivno opterećenje učenika, olakšava smisljeno učenje te omogućuje fokusiranje na važne parametre i koncepte. Njihove su zasluge višestruke: dostupnost uređaja, jednostavnost korištenja, vizualizacija pojava te interakcija s učenicima u kreativnom kontekstu učenja. [2] Slijedom toga, spomenuti vizualni alati danas su u stanju unaprijediti koncepte učenja te njihov doprinos znanstvenom obrazovanju ne treba previdjeti. Kada koristiti vizualizaciju, kako i na koje načine ovisi o percepciji nastavnika i njegovoj nastavničkoj praksi, ali i o svrsi za koju se određeni alat koristi.

Literatura:

- [1] National Research Council, National science education standards, National Academy Press, Washington, 1996.
- [2] S. Chen, *Comput. Educ.* 55 (2010) 1123–1130.
- [3] C.-Y. Wang, L.H. Barrow, *Res. Sci. Educ.* 41 (2011) 561–586.

ULOGA POKUSA I MODELA U RADU S UČENICIMA S PRIMJERENIM PROGRAMOM OBRAZOVANJA

THE ROLE OF EXPERIMENTS AND MODELS IN THE WORK WITH STUDENTS WITH APPROPRIATE EDUCATIONAL PROGRAM

Mihaela Vrbnjak Grđan

VI. osnovna škola Varaždin, Dimitrija Demetra 13, 42000 Varaždin, Hrvatska
e-mail: mihaela.vrbnjak@gmail.com

Kemija je znanost o tvarima i njihovim kemijskim promjenama, a učenici će promjene najlakše upamtiti, a zatim i razumjeti na temelju vlastitog iskustva, odnosno pokusa koji su sami načinili. Nastava treba uvijek započeti s točno određenim ciljem – riješiti neki problem ili dobiti odgovor na neko pitanje. U kemiji se problemi najčešće rješavaju pokusom ili demonstracijom modela. Osnovna zadaća modela je dati trodimenzionalnu sliku građe molekula, kristalne strukture ili nekog uređaja [1]. Učenicima s primjerenim programom obrazovanja (ADHD, slabovidnost i autizam) potrebno je dati dovoljno vremena da pokus izvedu, a tijekom pokusa potrebno je postavljati kratka pitanja koja će pomoći učeniku da dođe do točnog zaključka i potiču učeničku pozornost. Crtanje bilježaka na temelju demonstriranog modela ili izvedenog pokusa su obavezne jer crtajući promatrani model ili rezultat pokusa učenik ga bolje i uspješnije shvaća [2].

Neki od postupaka individualizacije za učenike s primjerenim programom obrazovanja su: *koristiti kombinirane metode u radu (vizualne, pisane, praktične); tolerirati nemir u klupi, omogućiti kretanje, osmisliti aktivnosti te osmisliti "rezervna" ponašanja kod velike potrebe za kretanjem; pružati podršku pri upotrebi modela ili praktičnog rada; trenirati socijalne vještine u skupinama (grupni rad); poticati razvoj usmjeravanja pažnje; razvijati koncentraciju; poticati samostalnost rada učenika.*

Izrada individualiziranoga odgojno-obrazovnog programa temelji se na procjeni sposobnosti, interesa i potreba učenika te procjeni područja koja treba razvijati kod učenika s posebnim potrebama. Etape izradbe individualiziranoga programa su: inicijalna procjena, određivanje nastavnih predmeta i sadržaja, razine usvajanja sadržaja, vremenske dimenzije (kratkoročni i dugoročni ciljevi i zadatci), izbor metoda, postupaka, sredstava i pomagala te praćenje i ocjenjivanje postignuća učenika. Praktični rad i izrada ili demonstracija modela su metode kojima učenici s primjerenim programom obrazovanja najbolje usvajaju nove koncepte, a pomažu im i kod razvijanja samostalnosti, te im produljuje pažnju [3].

Literatura:

- [1] M. Sikirica, Metodika nastave kemije – priručnik za nastavnike kemije, Školska knjiga, Zagreb, 2002.
- [2] M. Vicić, Metodika odgojno obrazovnog i rehabilitacijskog rada za djecu i mladež s mentalnom retardacijom, Hrvatsko društvo defektologa, 1996.
- [3] Nastavni plan i program za osnovnu školu, Ministarstvo znanosti obrazovanja i športa, Zagreb, 2006. (temeljem čl. 22 Zakona o osnovnom školstvu, „Narodne novine“ broj 59/90., 26/93., 27/93., 29/93., 7/94., 59/01. i 76/05.)

O PRIMJENI KONCEPTNIH MAPA U NASTAVI KEMIJE U OSNOVNOJ ŠKOLI

ABOUT THE APPLICATION OF CONCEPT MAPS IN CHEMICAL EDUCATION IN PRIMARY SCHOOL

Ines Javornicki, Meliha Zejnilagić-Hajrić, Ines Nuić

Univerzitet u Sarajevu, Prirodno-matematički fakultet, Odsjek za hemiju,
Zmaja od Bosne 33-35, 71000 Sarajevo, Bosna i Hercegovina
e-mail: inesj@bih.net.ba, mzejnilagic@pmf.unsa.ba, ividovic@pmf.unsa.ba

U nastavi kemije još uvijek prevladavaju tradicionalni oblici rada i nastavne metode čiji je osnovni cilj puko usvajanje nastavnog gradiva. Savladavanje nastavnog gradiva vrlo često rezultira samo usvajanjem još više novih informacija i činjenica. Međutim, samo usvajanje znanja je niži nivo obrazovanja. Usvojeno znanje s primjenom u stvarnom životu predstavlja cilj kojem teži suvremena nastava kemije.

Metoda aktivnog učenja s primjenom konceptualnih mapa kao nastavnog sredstva je sve više prisutna u suvremenoj nastavi kemije. Imajući to na umu, primijenili smo konceptualne mape u nastavi kemije u osmome razredu osnovne škole u jednome odjeljenju, dok je drugo odjeljenje poučavano na uobičajeni način. Ispitanici su bili učenici osmoga razreda iz dviju devetogodišnjih osnovnih škola sa sarajevskoga područja, koji su dragovoljno sudjelovali. Tradicionalni način obrade pojmova kiselina, baze i soli primijenjen je u kontrolnoj skupini, dok su u drugom odjeljenju (eksperimentalna skupina) isti pojmovi obrađeni primjenom konceptualnih mapa dizajniranih za potrebe ovog istraživanja. Dobiveni rezultati su na strani eksperimentalne skupine i potvrđuju postavljenu hipotezu o učinkovitosti ovog nastavnog sredstva. Izračunom t-testa dodatno je potvrđena postavljena hipoteza jer je pokazano da postoji statistički značajna razlika u postignućima na testu znanja između ovih dviju skupina. Pored navedenoga, rezultati pružaju uvid i u pisanje i razumijevanje kemijskih jednažbi, shvaćanja važnosti kemije kao nastavnog predmeta i njene prisutnosti u svakodnevnom životu.

ISKUSTVO KAO ČIMBENIK USPJEŠNOSTI NASTAVE KEMIJE

EXPERIENCE AS A FACTOR IN SUCCESSEFULL CHEMISTRY EDUCATION

Marina Luetić¹, Roko Vladušić², Mia Ožić²

¹III. gimnazija, Matice hrvatske 11, 21000, Split, Hrvatska
e-mail: marinaluet@gmail.com

²Prirodoslovno-matematički fakultet, Teslina 12, 21000, Split, Hrvatska
e-mail: vladusic@pmfst.hr, mia.t.ozic@gmail.com

U Hrvatskoj se budući nastavnici kemije uglavnom obrazuju na Prirodoslovno-matematičkim fakultetima prema sadržajno sličnim programima. Ono što se fakultetskim obrazovanjem ne može izgraditi (barem ne u dovoljnoj mjeri) nadoknađuje se tijekom rada u školi. De Jong i van Driel [1] su nakon rada s budućim nastavnicima kemije zaključili kako se *učenje kroz poučavanje*, integrirano u početnu fazu programa, pokazalo efikasnim načinom podizanja svijesti o konkretnim poteškoćama poučavanja i učeničkog razumijevanja. Abell [2] je analizom većeg broja radova uočila da nastavničkoj populaciji nedostaje znanja o učeničkim koncepcijama prirodoslovlja, ali i da se to znanje povećava s nastavnim iskustvom. Iz prethodnog je očito, a trebalo bi biti i logično, da su nastavnici s dužim angažmanom u sustavu obrazovanja kompetentniji od nastavnika početnika. Ovu smo spoznaju željeli provjeriti uspoređujući rezultate rada iskusne nastavnice s rezultatima studenata koji su nastavu odrađivali u okviru kolegija Metodika nastave kemije. Nastavnica je u jednom razredu nastavni sadržaj obrađivala u frontalnom obliku rada koristeći metode usmenog izlaganja, a u drugom se fokusirala na programirane pisane materijale. Studenti su imali slobodu u osmišljavanju i provedbi nastavnog procesa. Nakon provedenog Levenovog testa za homogenost varijance na predtestu utvrdili smo da je pretpostavka o homogenosti grupa (razreda) narušena. Stoga je proveden Kruskal-Wallisov test. Njime su utvrđeni statistički značajno bolji rezultati učenika koje je poučavala nastavnica kemije u odnosu na one koje su poučavali studenti. S obzirom na okolnosti provedbe istraživanja, vrijednost i značajnost rezultata moramo uzeti s rezervom. S druge strane, čak i uz deficit uvjetovan ograničenjem slobode u organizaciji nastave, veće kompetencije iskusnog nastavnika kemije u odnosu na početnike nedvojbeno su potvrđene.

Literatura:

- [1] O. De Jong, J. van Driel, IJSME 2 (2004) 477–491.
- [2] S.K. Abell, Research in science teacher knowledge, in S. Abell, N. Lederman (eds.), Handbook of research on science education, Lawrence Erlbaum Associates, Mahwah, USA, 2007, 1105–1149.

**PORAST METODIČKOG ZNANJA O KEMIJSKIM VEZAMA
KAO REZULTAT KONCEPTUALNIH PROMJENA****THE GROWTH OF PEDAGOGICAL CONTENT KNOWLEDGE
ABOUT CHEMICAL BONDS AS RESULT OF CONCEPTUAL
CHANGES**

Roko Vladušić, Mia Ožić

Prirodoslovno-matematički fakultet, Teslina 12, 21000, Split, Hrvatska
e-mail: vladusic@pmfst.hr, mia.t.ozic@gmail.com

Kompetentan nastavnik mora znati (znanstveni) sadržaj svog predmeta, a potom i kako taj sadržaj preoblikovati u skup povezanih činjenica i postupaka koji će rezultirati razumijevanjem. Upravo taj proces transformacije znanja sadržaja, u našem slučaju znanja kemije, u znanje kemije za poučavanje, Shulman [1] je nazvao Metodičkim znanjem sadržaja (kemije). U ovom smo istraživanju proučavali razumijevanje konceptata kovalentne i ionske veze. Uzorak su činili studenti 2. godine nastavničkog smjera Biologija-kemija s Prirodoslovno-matematičkog fakulteta Sveučilišta u Splitu. U dva su navrata popunjavali Upitnik o razumijevanju koncepta kovalentne veze i Upitnik o razumijevanju koncepta ionske veze. Između prvog i drugog testiranja, studenti su raspravljali o znanstveno prihvaćenim i alternativnim razumijevanjima kemijskog vezivanja te održali nastavu o kemijskim vezama u 1. razredu 3. splitske gimnazije. Zanimalo nas je hoće li te dvije intervencije utjecati na porast Metodičkog znanja o kemijskim vezama. Učinke smo mjerili na dva načina: (1) Analizom razumijevanja konceptata kemijskih veza poučavanih učenika i usporedbom s rezultatima onih koje su poučavali drugi nastavnici i (2) Analizom razumijevanja konceptata kemijskih veza studenata (poučavatelja). U ovom ćemo radu prikazati rezultate potonje (2.) analize. S obzirom da smo uspoređivali dva seta opažanja na istom zavisnom (malobrojnom, N=16) uzorku upotrijebili smo Wilcoxonov test sume rangova. Rezultati ukazuju da su nezavisne varijable rezultirale porastom razumijevanja konceptata ionskog i kovalentnog vezivanja. Iako je završnim testiranjem kod određenog broja studenata utvrđena postojanost alternativnih promišljanja, pomak prema znanstveno prihvaćenom konceptualiziranju uglavnom je pozitivnog smjera, a u slučajevima pojedinih čestica, i statističkog značaja.

Literatura:

- [1] L.S. Shulman, Harvard Educ. Rev. 57 (1987) 1–22.

UPORABA UDŽBENIKA TIJEKOM OSNOVNOŠKOLSKE NASTAVE KEMIJE

USING CHEMISTRY TEXTBOOKS DURING PRIMARY SCHOOL CHEMICAL EDUCATION

Anja Biruški¹, Nenad Judaš²

¹Osnovna škola Sesvetska Sopnica, Sopnička 69, 10360, Sesvete
e-mail: anja.biruski@gmail.com

²Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek,
Zavod za opću i anorgansku kemiju, Horvatovac 102a, 10000, Zagreb, Hrvatska
e-mail: judas@chem.pmf.hr

Možemo li učiti kemiju bez udžbenika? Čemu danas uopće služe udžbenici i kakvi trebaju biti? Ovaj rad predstavlja istraživanje o uporabi udžbenika tijekom osnovnoškolske nastave kemije [1–3]. Istraživanje je napravljeno s uzorkom od 198 osnovnoškolskih nastavnika kemije. Ispitanici su samostalno i neovisno jedan o drugome odgovorili na 7 pitanja otvorenog tipa koja su se ticala načina uporabe udžbenika i popratnih nastavnih materijala, načinu odabira udžbenika i njihovih pozitivnih i negativnih karakteristika. Na pitanja je trebalo dati sažete odgovore. Odgovori ispitanika su prema sadržaju razvrstani u različite kategorije. Ispitanici su prema mjestu zaposlenja razvrstani u tri skupine (Slavonija, Središnja Hrvatska i Dubrovnik). Skupina Slavonija obuhvaća nastavnike iz Osječko-baranjske, Vukovarsko-srijemske i Brodsko-posavske županije. Središnja Hrvatska obuhvaća nastavnike iz Koprivničko-križevačke, Varaždinske, Sisačko-moslavačke i Zagrebačke županije i Grada Zagreba. Skupina Dubrovnik obuhvaća nastavnike iz dubrovačke-neretvanske županije. Utvrđeno je da nastavnici udžbenike i nastavne materijale rabe na različite načine. Stoga bi tržište trebalo ponuditi više alternativnih udžbenika, umjesto više usporednih. Nadalje, analiza nedvojbeno pokazuje da je korektnost postupka odabira udžbenika dvojbena.

Literatura:

- [1] Zakon o udžbenicima za osnovnu i srednju školu, http://narodne-novine.nn.hr/clanci/sluzbeni/2010_03_27_644.html (preuzeto 09.10.2013.)
- [2] V. Poljak, Didaktičko oblikovanje udžbenika i priručnika, Školska knjiga, Zagreb, 1980.
- [3] M. Matijević, Udžbenik u novom medijskom okruženju, Školska knjiga, Zagreb, 2004.

CILJEVI OSNOVNOŠKOLSKE NASTAVE KEMIJE – STAVOVI PRAKTIČARA

GOALS OF PRIMARY SCHOOL CHEMICAL EDUCATION – PRACTICIONER OPINIONS

Aleksandar Meštrić¹, Nenad Judaš²

¹II. osnovna škola Varaždin, Augusta Cesarca 10, 42000 Varaždin
e-mail: aleksandar.mestric@windowslive.com

²Zavod za opću i anorgansku kemiju, Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet,
Sveučilište u Zagrebu Horvatovac 102a, 10 000, Zagreb, Hrvatska
e-mail: judas@chem.pmf.hr

Provedeno je anketno ispitivanje nastavnika kemije osnovnih škola u Hrvatskoj. Anketiran je ukupno 241 nastavnik, od čega su njih 198 bili osnovnoškolski nastavnici kemije. Ispitanici su, prema vlastitom mišljenju, trebali odabrati glavne obrazovne ishode osnovnoškolske nastave kemije i pri tome ih razvrstati u dvije skupine: a) obrazovni ishodi koji su važni za daljnje učenje kemije i b) obrazovni ishodi koji su važni za opću kemijsku kulturu. Zamijećeno je da mnogi nastavnici obrazovne ishode definiraju na danas neprikladan način te je očito potrebno više poraditi na tim sadržajima tijekom njihovog stručnog usavršavanja.

Ukupno je sakupljeno 1746 obrazovnih ishoda koje su praktičari naveli kao one koji su važni za daljnje učenje kemije. Ti ishodi razvrstani su u 56 glavnih kategorija i 75 potkategorija.

Obrazovnih ishoda koje su praktičari naveli kao važne za sve ostalo u životu bilo je 964, a razvrstani su u 59 kategorija. Analiza pokazuje da je mišljenje nastavnika (praktičara) vrlo raspršeno i da se njihovi stavovi malo preklapaju. Dodatno, analiza pokazuje da stavovi praktičara nisu u najboljem skladu s ciljevima i obrazovnim ishodima koji su navedeni u kemijskome *Nastavnom planu i programu za osnovnu školu* [1,2].

Literatura:

- [1] Nastavni plan i program za osnovnu školu, Ministarstvo znanosti, obrazovanja i športa; Zagreb, 2006.
- [2] D. Gjukić, Kritičnost nastavnika kemije prema različitim tvrdnjama i stručnim sadržajima, Zagreb, 2013.

E

ZAŠTITA OKOLIŠA
ENVIRONMENT PROTECTION

ČELIČANSKA ELEKTROPEĆNA TROSKA KAO POBOLJŠIVAČ TLA I SREDSTVO ZA POPRAVAK KISELOSTI TLA U POLJOPRIVREDI

STEELMAKING ELECTRIC ARC FURNACE SLAG AS A SOIL CONDITIONER AND A MEANS FOR CORRECTING SOIL ACIDITY IN AGRICULTURE

Tahir Sofilić¹, Milan Poljak², Ivan Brnardić¹, Boris Lazarević²,
Ankica Rađenović¹

¹Sveučilište u Zagrebu, Metalurški fakultet, Aleja narodnih heroja 3, 44010 Sisak, Hrvatska
e-mail: sofilic@simet.hr

²Sveučilište u Zagrebu, Agronomski fakultet, Svetošimunska cesta 25, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: mpoljak@agr.hr

S obzirom na našu obvezu gospodarenja otpadom utemeljenom na tzv. bez-deponijskom konceptu, nužno je istražiti sve mogućnosti iskorištavanja proizvodnih otpada, te u potpunosti napustiti praksu njihovog odlaganja na odlagališta. Ovo je i dovelo do intenziviranja istraživanja i razvoja alternativnih rješenja zbrinjavanja proizvodnih otpada i pronalaženja novih rješenja na principima održivog razvoja, pa tako i troska iz proizvodnje čelika elektropečnim postupkom, s obzirom na učešće u ukupnim količinama svih vrsta proizvodnog otpada iz ovog procesa, zauzima posebno značajno mjesto.

U okviru dosadašnjih istraživanja mogućnosti uporabe elektropečne troske u drugim industrijskim granama, u RH se posebna pozornost posvetila mogućnosti njene uporabe u proizvodnji asfaltnih mješavina za potrebe cestogradnje umjesto prirodnih mineralnih agregata. Međutim, u procesima obrade troske za ovu namjenu, drobljenjem i usitnjavanjem, nastaje i frakcija krupnoće zrna < 2 mm, koja kao takva nije posebno interesantna za graditeljstvo. S obzirom na kemijski sastav čeličanskih troski iz procesa proizvodnje ugljičnih čelika u kojima prevladavaju CaO (30–35 %), SiO₂ (10 %) i MgO (13 %), nametnula se potreba ispitati podobnost ove granulometrijske frakcije troske za kalcifikaciju tla tj. njene uporabe kao poboljšivača poljoprivrednog tla odnosno sredstva za popravak kiselih tala. Pošto je prekomjerna kiselost tla ograničavajući čimbenik koji u velikoj mjeri određuje učinkovitost svih biljno-uzgojnih zahvata na većinom kiselim poljoprivrednim tlima u RH, to primjena adekvatnih vapnenih materijala, u okviru cjelovitog rješavanja problema gospodarenja poljoprivrednim tlima, zauzima jedno od ključnih mjesta.

Kako je jedan od najznačajnijih čimbenika pri odabiru sredstva za kalcifikaciju u praksi, uz fizikalno-kemijske karakteristike, svakako i njegova cijena, to je u svrhu iznalaženja jeftinijih rješenja, a ujedno novog načina zbrinjavanja ovog proizvodnog otpada, ispitana podobnost čeličanske elektropečne troske kao poboljšivača poljoprivrednog tla i sredstva za popravak kiselog tla.

**POLICIKLIČNI AROMATSKI UGLJIKOVODICI U TLU
JAVNIH DJEČJIH PARKOVA SARAJEVA****POLYCYCLIC AROMATIC HYDROCARBONS IN SOIL
FROM PUBLIC CHILD PARKS OF SARAJEVO**

Mirsada Čakal¹, Aida Šapčanin^{1,2}, Željko Jaćimović³,
Ekrem Pehlić⁴, Gordan Jančan⁵

¹Univerzitet u Sarajevu, Mašinski fakultet, Vilsonovo šetalište 9,
Sarajevo, Bosna i Hercegovina,
e-mail: mirsada.cakal@gmail.com

²Univerzitet u Sarajevu, Farmaceutski fakultet, Zmaja od Bosne 8,
Sarajevo, Bosna i Hercegovina,
e-mail: ida@bih.net.ba

³Univerzitet u Bihaću, Biotehnički fakultet, Luke Marjanovića bb,
Bihać, Bosna i Hercegovina,
e-mail: ekrem_pehlic@yahoo.com

⁴Univerzitet Crne Gore, Prirodno-matematički fakultet, Džordža Vašingtona bb,
Podgorica, Crna Gora,
e-mail: zeljkoj@ac.me

⁵CHEMILAB d.o.o. Center za raziskovalne dejavnosti in laboratorijske storitve,
Dunajska cesta 238E, Ljubljana, Slovenia,
e-mail: gordan.jancan@chemilab.si

Najrasprostranjenija grupa organskih polutanata u životnoj sredini su policiklični aromatski ugljikovodici (PAH). Zbog dugog perioda degradacije u životnoj sredini i toksičnog djelovanja PAH-ovi spadaju u grupu perzistentnih organskih zagađivača. PAH-ovi i njihovi produkti degradacije predstavljaju toksične organske spojeve, čija se količina u životnoj sredini mora pratiti uz primjenu odgovarajućih postupaka za njihovu degradaciju i eliminaciju iz okruženja. PAH-ovi su prisutni u svim dijelovima biosfere, ali najveće koncentracije izmjerene su u tlu. Cilj rada bio je odrediti koncentraciju 16 PAH-ova koje Europska Unija propisuje kao važne pokazatelje zagađenja životne sredine: naftalen, acenaftilen, acenaften, fluoren, fenantren, antracen, fluoantrene, piren, benzo(a) antracen, krizen, benzo(b) fluoranten, benzo(k) fluoranten, benzo(a) piren, indeno(1,2,3-cd) piren, dibenzo(a,h) antracen, benzo (g,h,i) perilen u uzorcima tla javnih dječjih igrališta primjenom metode plinske kromatografije - spektrometrije masa (GC/MS). Također, je određena koncentracija polikloriranih bifenila (PCB). Uzorci tla sa javnih dječjih parkova uzeti su u proljeće i jesen 2014. Najveća ukupna količina svih PAH-ova (Σ PAHs) iznosi 7,983 mg/kg. U usporedbi sa vrijednostima PAH-ova u tlima urbanih sredina širom svijeta, ukupne razine PAH-ova u ovom radu su niske, ali ipak premašuju dozvoljene vrijednosti propisane od strane Europske Unije za maksimalne koncentracije u urbanim sredinama. U uzorcima tla javnih dječjih igrališta dominiraju fluoranten, piren i benzo (b) fluoranten, koji su vjerojatno posljedica emisija iz automobila i izgaranja fosilnih goriva.

Ključne riječi: policiklični aromatski ugljikovodici (PAH), tla javnih dječjih parkova, plinska kromatografija - spektrometrija masa (GC/MS).

**SADRŽAJ TEŠKIH METALA U TLU JAVNIH DJEČJIH
PARKOVA SARAJEVA****HEAVY METALS CONTENT IN SOIL FROM PUBLIC CHILD
PARKS OF SARAJEVO**

Mirsada Čakal¹, Aida Šapčanin^{1,2}, Željko Jaćimović³,
Ekrem Pehlić⁴, Gordan Jančan⁵

¹Univerzitet u Sarajevu, Mašinski fakultet, Vilsonovo šetalište 9,
Sarajevo, Bosna i Hercegovina,
e-mail: mirsada.cakal@gmail.com

²Univerzitet u Sarajevu, Farmaceutski fakultet, Zmaja od Bosne 8,
Sarajevo, Bosna i Hercegovina,
e-mail: ida@bih.net.ba

³Univerzitet u Bihaću, Biotehnički fakultet, Luke Marjanovića bb,
Bihać, Bosna i Hercegovina,
e-mail: ekrem_pehlic@yahoo.com

⁴Univerzitet Crne Gore, Prirodno-matematički fakultet, Džordža Vašingtona bb,
Podgorica, Crna Gora,
e-mail: zeljkoj@ac.me

⁵CHEMILAB d.o.o. Center za raziskovalne dejavnosti in laboratorijske storitve,
Dunajska cesta 238E, Ljubljana, Slovenia,
e-mail: gordan.jancan@chemilab.si

Teški metali kao polutanti u životnoj sredini predstavljaju ozbiljan zdravstveni i ekološki problem. Zagađenje tla teškim metalima ima direktan utjecaj na zdravlje djece. Najvažniji razlog je što djeca prilikom igre stavljaju prljave prste i igračke u usta i tako u svoj organizam unose više zemljišta u odnosu na odrasle ljude. Parkovi i dječja igrališta su omiljeni izbor za igru, vježbanje i boravak na svježem zraku i trebaju biti sigurna utočišta za djecu. Sadržaj potencijalno toksičnih elemenata u tlima dječjih javnih parkova vrlo je značajna komponenta zdravlja i kvalitete življenja djece u gradu. Cilj ovoga rada bio je procijeniti ukupni sadržaj teških metala: Cd, Pb, Hg, As, Cr, Ni, Cu, B, Co i Mo u uzorcima tla javnih dječjih parkova u Sarajevu. Uzorci su uzeti u sezonama proljeće i jesen u 2014. godini. Uzorci tla analizirani su na ukupni sadržaj teških metala upotrebom spektrometrije masa s induktivno spregnutom plazmom (ICP-MS). Dobiveni rezultati za ukupni sadržaj teških metala Cd, Pb, Hg, As, Cr, Ni, Cu, B, Co i Mo uspoređeni su s međunarodnim smjernicama kvalitete tla. Ukupni sadržaj Cd, Pb, Hg, As, Cr, Ni, Cu, B, Co i Mo u tlima javnih dječjih parkova nije prelazio dopuštene vrijednosti definirane međunarodnim smjernicama. Ukupni sadržaj teških metala bio je veći u jesen nego u proljeće.

Ključne riječi: teški metali, tla javnih dječjih parkova, spektrometrija masa s induktivno spregnutom plazmom (ICP-MS)

UTJECAJ pH VRIJEDNOSTI I ELEKTRIČNE VODLJIVOSTI NA PRISUTNOST MEZOFILNIH BAKTERIJA U PROČIŠĆENOJ VODI KOJA SE KORISTI ZA LABORATORIJSKE ANALIZE

EFFECT OF pH AND ELECTRICAL CONDUCTIVITY ON THE PRESENCE OF MESOPHILIC BACTERIA IN PURIFIED WATER USED FOR THE LABORATORY ANALYSES

Anita Rakić¹, Lucija Foglar²

¹Nastavni zavod za javno zdravstvo Splitsko-dalmatinske županije,
Vukovarska 46, 21 000 Split, Hrvatska,
e-mail: anita.rakic@nzjz-split.hr

²Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije,
Zavod za industrijsku ekologiju, Marulićev trg 19, 10 000 Zagreb, Hrvatska,
e-mail: lfoglar@fkit.hr

Vodu iz vodoopskrbnog sustava koja se koristi za rad u laboratoriju, dodatno se pročišćava destilacijom, reverznom osmozom, ionskom izmjenom ili elektrodeionizacijom. Zbog sve veće preciznosti i osjetljivosti aparata kao i niskih granica detekcije analitičkih metoda u laboratorijskom radu, destilirana voda sve češće se zamjenjuje s vodom veće analitičke čistoće. Cilj ovoga rada je bio odrediti utjecaj fizikalno-kemijskih pokazatelja na prisutnost mezofilnih bakterija u uzorcima vode tipa 2 analitičke čistoće (prema ASTM standardu). Navedeni standard za vodu tipa 2 obuhvaća sljedeću specifikaciju: električna vodljivost < 1 $\mu\text{S}/\text{cm}$ pri 25 °C, sadržaj organske tvari TOC < 50 $\mu\text{g}/\text{L}$, bakterijski sadržaj < 10 cfu/mL. Fizikalno-kemijska ispitivanja obuhvaćala su određivanje pH vrijednosti [1] i električne vodljivosti [2], a mikrobiološka analiza određivanje aerobnih mezofilnih bakterija uzgojenih pri 37 °C [3].

U ovome radu je obrađeno 100 uzoraka voda uzetih iz razvodne mreže sustava za pročišćavanje vode koja se koristi za laboratorijske analize. Testiranjem normaliteta raspodjele podataka za pH i električnu vodljivosti (Kolmogorov-Smirnov test) je dokazana normalna raspodjela, te se za određivanje povezanosti fizikalno-kemijskih pokazatelja s prisutnošću mezofilnih bakterija koristio Pearsonov koeficijent korelacije (r) koji se izražava pomoću statističke značajnosti (P). Statistička obrada rezultata je pokazala značajnu povezanost pH vrijednosti ($r = 0,324$ i $P = 0,005$) i električne vodljivosti ($r = 0,551$ i $P = 0,000$) s prisutnošću mezofilnih bakterija. Na temelju dobivenih rezultata je dokazano da porast pH i električne vodljivosti iznad vrijednosti 7,48 odnosno 0,47 $\mu\text{S}/\text{cm}$ značajno doprinosi većoj prisutnosti aerobnih mezofilnih bakterija uzgojenih pri 37 °C.

Literatura:

- [1] Kakvoća vode – Određivanje pH vrijednosti, HRN EN ISO 10523:2012.
- [2] Kakvoća vode – Određivanje električne vodljivosti, HRN EN 27888:2008.
- [3] Kakvoća vode – Brojenje uzgojenih mikroorganizama – Broj kolonija nacjeppljivanjem na hranjivi agar, HRN EN ISO 6222:2000.

OZON U PRIZEMNOM SLOJU ATMOSFERE IZNAD PARKA PRIRODE KOPAČKI RIT, NACIONALNOG PARKA PLITVIČKA JEZERA I OTOKA VISA

OZONE IN THE ATMOSPHERIC BOUNDARY LAYER IN THE NATURE PARK KOPAČKI RIT, NATIONAL PARK PLITVICE LAKES AND ISLAND OF VIS

Kristina Forgić, Lea Mandić, Sanela Višek, Elvira Kovač-Andrić

Sveučilište J.J. Strossmayera, Odjel za kemiju,
Cara Hadrijana 8/A, 31000 Osijek, Hrvatska,
e-mail: eakovac@kemija.unios.hr

U Hrvatskoj su, s obzirom na geografski položaj, na relativno malim udaljenostima različiti uvjeti u zraku te su iz tog razloga odabrane tri mjerne postaje. Park prirode Kopački rit, u sjeveroistočnom dijelu kontinentalne Hrvatske, sa susjednim gradom Osijekom predstavlja zanimljiv primjer međusobnog utjecaja urbanog i ruralnog (močvarnog) područja [1]. Druga mjerna postaja su Plitvička jezera; najveći, najstariji i najposjećeniji Nacionalni park u planinskom području Hrvatske. Ovaj Nacionalni park Velebit klimatski razdvaja od primorske regije. Treća mjerna postaja je otok Vis koji je dosta udaljen od kontinenta i ostalih otoka te je izložen jačem vjetru nego drugi jadranski otoci.

Dobiveni podatci o satnim koncentracijama ozona mjerenih tijekom 2013. godine analizirani [2,3] su uzimajući u obzir i meteorološke parametre. Na otoku Visu nije izražen dnevni hod koncentracije ozona kao kod ostale dvije mjerne postaje. Izmjerene prosječne vrijednosti koncentracija ozona ne prelaze graničnu vrijednost i iznose 51,64 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ u Kopačkom ritu; 62,23 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ u Plitvičkim jezerima te 89,84 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ na otoku Visu. Procijenjen je utjecaj prisutnog ozona na vegetaciju te je pomoću indikatora fotokemijskog onečišćenja procijenjena kakvoća zraka na mjernim postajama.

Literatura:

- [1] E. Kovač-Andrić, V. Gvozdić, H. Muharemović, *Croat. Chem. Acta* 86 (2013) 109–115.
- [2] E. Kovač-Andrić, G. Šorgo, N. Kezele, T. Cvitaš, L. Klasinc, *Environ. Monit. Assess.* 165 (2010) 577–583.
- [3] E. Kovač-Andrić, V. Gvozdić, G. Herjavić, H. Muharemović, *Environ. Sci. Pollut. Res.* 20 (2013) 5106–5113.

**MASENE KONCENTRACIJE PAU ZA VRIJEME POŽARA U
POSTROJENJU CENTRA ZA RECIKLAŽU OTPADA****PAH MASS CONCENTRATIONS DURING A FIRE AT A
WASTE RECYCLING FACILITY**

Ivana Jakovljević, Gordana Peh nec, Vladimira Vadić

Institut za medicinska istraživanja i medicinu rada,
Ksaverska cesta 2, 10000, Zagreb Hrvatska,
e-mail: ijakovljevic@imi.hr

Policiklički aromatski ugljikovodici (PAU) čine rasprostranjenu skupinu onečišćenja zraka. Nastaju uslijed nepotpunog sagorijevanja organskih tvari, za vrijeme industrijskih procesa, te kao posljedica prirodnih procesa, npr. šumskih požara. PAU s dva ili tri aromatska prstena postojani su u plinovitoj fazi te njihova koncentracija u zraku raste s porastom temperature. PAU s više aromatskih prstena nalaze se u zraku uglavnom vezani na čestice.

U ovom radu mjerena je koncentracija policikličkih aromatskih ugljikovodika tijekom akcidenta u postrojenju za sakupljanje i preradu industrijskih otpadaka C.I.O.S. u Zagrebu, Jankomir. Gdje je 14. 04. 2014. izbio požar u otvorenom skladištu Centra za reciklažu. Mjerenja su provedena na tri mjerna mjesta: Prilaz baruna Filipovića (mjerno mjesto A), u sklopu tvornice Utenzilija (mjerno mjesto B), te na Institutu za medicinska istraživanja i medicinu rada (mjerno mjesto C). Mjerno mjesto A nalazilo se oko 5,5 km zračne udaljenosti od tvornice C.I.O.S., mjesto B bilo je udaljeno 0,5 km, dok je mjesto C bilo udaljeno oko 9 km zračne linije. Uzorci su sakupljeni tijekom 24 h na filter papir. Analiza je rađena kromatografijom visoke djelotvornosti (HPLC) sa fluorescentnim detektorom promjenjivih valnih duljina ekscitacije i emisije. Određivani su fluoranten (Flu), piren (Pir), benzo(a)antracen (BaA), krizen (Kri), benzo(b)fluoranten (BbF), benzo(k)fluoranten (BkF), benzo(a)piren (BaP), dibenzo(a,h)antracen (DahA), benzo(ghi)perilen (BghiP), indeno(1,2,3-cd)piren (IP). Koncentracije PAU na mjernom mjestu A i C nisu pokazivale nikakvo odstupanje zbog incidenta koji se dogodio dok je na mjernom mjestu B, koje je bilo najbliže mjestu požara, bio jasno vidljiv porast koncentracija PAU. Srednja dnevna vrijednost za BaP je iznosila 2,99 ng/m³, a najviša vrijednost zabilježena je za krizen – 8,07 ng/m³. Premda su tijekom incidenta na mjernom mjestu B izmjerene više vrijednosti BaP u odnosu na prethodne dane, njihove razine nisu bile zabrinjavajuće jer se znatno veće vrijednosti BaP uobičajeno bilježe na mjernom mjestu C tijekom ogrjevne sezone u zimskom periodu godine.

**PREGLED TOPLINSKIH VRIJEDNOSTI MULJEVA S
RAZLIČITIH UREĐAJA ZA PROČIŠĆAVANJE OTPADNIH
VODA U REPUBLICI HRVATSKOJ**

**OVERVIEW OF NET CALORIFIC VALUES OF SLUDGES AT
DIFFERENT WASTE WATER TREATMENT PLANTS IN
CROATIA**

Mirela Jukić, Sandra Siročić, Marija Janković,
Ivana Hrga, Adela Krivohlavek

Nastavni zavod za javno zdravstvo „Dr. Andrija Štampar“,
Mirogojska 16, 10 000 Zagreb, Hrvatska,
e-mail: mirela.jukic@stampar.hr

Mulj se definira kao preostali, obrađeni ili neobrađeni dio mulja iz uređaja za pročišćavanje otpadnih voda. Cilj rada je ukazati na mogućnost zbrinjavanja mulja termičkom obradom te korištenje mulja kao jedno od mogućih izvora alternativnih goriva. Prikazat će se toplinske vrijednosti muljeva s različitih pročišćivača otpadnih voda u Hrvatskoj i ovisnost toplinske vrijednosti o drugim ispitivanim parametrima (% suhe tvari, % gubitka žarenjem pri 550 °C, % pepela pri 800 °C i % ukupne organske tvari). Toplinska vrijednost je količina topline koja se oslobađa izgaranjem jedinice mase mulja spaljivanjem u struji kisika u kalorimetrijskom sistemu pri konstantnom volumenu. Određuje se najviša toplinska vrijednost, a rezultati se izražavaju u kJ/kg ili J/g. Prema nazivu i vrijednosti, razlikujemo gornju i donju toplinsku vrijednost. U praksi se mulj spaljuje pri konstantnom (atmosferskom) tlaku pri čemu se voda ne kondenzira nego se s dimnim plinovima ukloni kao para. Stoga se primjenjuje donja toplinska vrijednost koja je rezultat najviše toplinske vrijednosti umanjene za energiju kondenzacije koja je uložena za kondenzaciju vode sadržanoj u samom uzorku i vode nastale u reakciji spaljivanja.

Toplinska vrijednost analiziranih muljeva mjerena je na kalorimetru Calorimeter System C 7000 „IKA WERKE“, prema metodi HRN EN 15170:2010. Dobivene toplinske vrijednosti analiziranih muljeva kreću se u rasponu od negativnih do 13000 J/g, postotak suhe tvari od 25 % do 27 %, postotak gubitka žarenjem od 40 % do 80 %, postotak pepela od 5 % do 13 % i ukupni organski ugljik od 25 % do 40 %. Dobiveni rezultati mogu poslužiti kao osnova za jednu od mogućnosti zbrinjavanja mulja i njegove energetske uporabe.

**ANALIZA VREMENSKOG TRENDA, SEZONALNOSTI I
MEĐUSOBNIH ODNOSA FIZIKALNIH,
FIZIKALNO-KEMIJSKIH I ANORGANSKIH
EKO-KEMIJSKIH PARAMETARA NA DUNAVU U SRBIJI**

**THE ANALYSIS OF TIME TREND, SEASONALITY AND
CORRELATIONS OF THE PHYSICAL,
PHYSICAL-CHEMICAL AND INORGANIC ECO-CHEMICAL
PARAMETERS OF THE DANUBE RIVER IN SERBIA**

Ivana Lautarević¹, Bojana Milovanović²

¹Gradska uprava Zaječar, Trg Oslobođenja 1, 19000 Zaječar, Srbija,
e-mail: ivanall7@gmail.com

²Tehnička škola Drvo Art, Cara Dušana 23, 11000 Beograd, Srbija,
e-mail: bbokimilovanovic@gmail.com

This paper presents the analysis of the following eco-chemical parameters: temperature, electric conductivity, pH value, dry matter, suspended matter, free carbon dioxide, m-2p-alkalinity, cations calcium and magnesium. All meters for the foregoing parameters were conducted on the Danube's flow through the territory of the Republic of Serbia in the time span 1992 – 2006. For the sake of statistical data processing and reliable findings, linear regression, autocorrelation and method of principal component analysis were employed. According to the researches' results, it was established, for some parameters, the existence of the linear time trend on almost every part of the Danube's flux. On the other hand, for the remaining of the parameters, the spousal of the trend was procrastinated due to the disability of performing sufficient number of measurements and the actuality of extreme values. In cases, where the time trend was not registered, a canonic seasonal pattern was identified. The application of principal component analysis was able to obtain a successful identification of the hidden structures and to contract the original data set to only five factors in the upper, and partially in middle flux of the river of Danube. The scientific contribution of this research is determined by the fact that it was concluded that the analysis of the foregoing parameters along with its correlations, and the application of proper methods, were able to foreseen its changes over a period of time, and that further has direct implications on the eco-chemical configuration of the Danube's water.

**KAPACITET KOMPLEKSIRANJA IONA BAKRA U
DRENAŽNOJ VODI HIDROMELIORIRANOG TLA****COMPLEXATION OF COPPER IONS IN DRAINAGE WATER
OF HYDROAMELIORATED SOIL**Kristijan Vidović¹, Marta Plavšić², Palma Orlović-Leko¹¹Rudarsko-geološko-naftni fakultet, Pierottijeva 6, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: vidovic.kristijan88@gmail.com²Institut Ruđer Bošković, Zavod za istraživanje mora i okoliša,
Bijenička 54, 10000 Zagreb, Hrvatska

U radu su prikazani rezultati preliminarnog mjerenja kapacitet kompleksiranja za bakar (KKM) u filtriranoj procjednoj vodi, uzorkovanoj na melioracijskom pokusnom polju u srednjoj Posavini. Mjerenje je provedeno metodom voltametrijе s anodnim otapanjem (ASV). Analizom podataka metodom po Ružiću [1], uz pretpostavku da se prisutni ligandi i ioni metala vežu u omjeru 1:1, određen je kapacitet kompleksiranja (L_T) izražen kao $\text{mol M}^{2+} \text{ dm}^{-3}$. Količina iona bakra koji se vežu na prirodno prisutnu organsku tvar (kapacitet kompleksiranja) mjera je količine aktivnih liganda u uzorku. Bakar je esencijalan element, rasprostranjen u prirodi a ujedno je u prirodnim vodama nađen do 99 % kompleksiran sa organskom tvari [2]. Mjerenja su pokazala da se ioni bakra kompleksiraju s prisutnim organskim ligandima u ispitivanim uzorcima. Dobiveni kapaciteti kompleksiranja za drenažne vode nalazi se između 0,104 i 0,477 $\mu\text{mol Cu}^{2+} \text{ dm}^{-3}$. Dodatna informacija o značajkama organskih liganada može se dobiti normaliziranjem vrijednosti kapaciteta kompleksiranja na vrijednosti topljivog organskog ugljika (eng. Dissolved Organic Carbon, DOC) u istim uzorcima (L_T/DOC) [3,4]. Navedena karakterizacija upućuje na količinu organskih liganada koji mogu kompleksirati u odnosu na ukupnu prisutnu organsku tvar. Postignute vrijednosti nalaze se u rasponu od 0,001–0,0003. Utvrđeno je da je dio prisutne organske tvari u uzorcima površinski aktivan. Normaliziranjem L_T na količinu površinski aktivnih tvari (PAT) čija je koncentracija izražena kao ekv. mg/L Tritona-X-100, izvršena je dodatna karakterizacija organskih liganada. Te vrijednosti su bile između 0,385 i 1,325.

Literatura:

- [1] J. Ružić, *Anal. Chim. Acta* 140 (1982) 99–113.
- [2] P.J.M. Buckley, C.M.G van den Berg, *Mar. Chem.* 19 (1986) 281–296.
- [3] R.F.C. Mantoura, *Organo-metallic interactions in natural waters*, in E.K. Duursma, R. Dawson (eds.), *Marine Organic Chemistry*, Elsevier Oceanography Series, vol. 31, Elsevier, Amsterdam, 1981, 179–223.
- [4] M. Scoullou, M. Plavšić, S. Karavoltos, *Mar. Chem.* 86 (2004) 51–63.

RAZLIČITE METODE ODREĐIVANJA SADRŽAJA SUMPORA U TLU REGIJE ZENICE

DIFFERENT DETERMINATION METHODS OF SULFUR CONTENT IN THE SOIL OF ZENICA REGION

Marina Mitrović, Helena Filipović, Alema Mrković, Muzafera Ramović

Federalni zavod za agropedologiju, Dolina 6., 71000 Sarajevo, Bosna i Hercegovina

Sumpor je rasprostranjen element u prirodi. U tlu potječe iz matičnih stijena gdje se nalazi pretežno u obliku sulfida, a gdje se njihovom razgradnjom oslobađa i oksidira. Također, sumpor se akumulira u tlu i taloženjem iz atmosfere gdje se nalazi kao SO_2 ili H_2S . Suvišak sumpora može se javiti u blizini industrijskih zona s velikom emisijom sumpora u atmosferu.

Ovaj rad bavi se usporedbom rezultata određivanja sadržaja elementarnog sumpora u uzorcima tla primjenom dviju različitih metoda. Gravimetrijskom metodom sumpor se određuje taloženjem, iz kisele otopine pomoću BaCl_2 , u vidu BaSO_4 . Mikrovalnom digestijom, pomoću smjese kiselina i odgovarajućeg temperaturnog programa, određivanje sumpora se vrši na ICP-OES-u emisijskom spektrometrijskom analizom.

Uzorci tla u kojima je određen sadržaj elementarnog sumpora uzeti su na širem području grada Zenice u Federaciji BiH. Ekosustavi regije Zenice su nekoliko desetljeća bili pod utjecajem visokih emisija prašine i SO_2 i drugih zagađivača.

Ključne riječi: sumpor, tlo, induktivno spregnuta plazma, mikrovalna digestija

**FOTOKATALITIČKA RAZGRADNJA SALICILNE KISELINE
SA SUSPENDIRANIM I IMOBILIZIRANIM TiO_2 I Ag/TiO_2 U
RAZLIČITIM TIPOVIMA FOTOREAKTORA****PHOTOCATALYTIC DEGRADATION OF SALICYLIC ACID
WITH SUSPENDED AND IMMOBILIZED TiO_2 AND Ag/TiO_2 IN
DIFFERENT TYPES OF PHOTOREACTORS**

Ivana Grčić, Jasmin Pađan, Bojan Plavac, Sanja Papić

Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije,
Marulićev trg 19, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: spapic@fkit.hr

Razvoj poluvodičke fotokatalize i njena primjena na području zaštite okoliša naglašeni su posljednjih godina. Primjenom ove napredne oksidacijske tehnologije može se postići djelomična ili potpuna mineralizacija velikog broja različitih toksičnih i teško biološki razgrađivih organskih spojeva prisutnih u vodi. Od poluvodičkih fotokatalizatora najviše je istraživana i primjenjivana TiO_2 zbog njegove jake oksidacijske sposobnosti, kemijske i termičke stabilnosti, ne-toksičnosti i niske cijene. No, problemi koji predstavljaju ograničenje njegovoj primjeni u industrijskoj praksi su sljedeći: separacija iz obrađene vode i ograničeno područje fotoaktivnosti za primjenu u uvjetima Sunčevog zračenja [1]. U ovom radu istraživana je primjena procesa TiO_2 fotokatalize za razgradnju salicilne kiseline kao modelnog aromatskog onečišćivala u vodi. Eksperimenti su provedeni u tri tipa fotoreaktora s recirkulacijom: anularnom, pločastom i cilindričnoj ćeliji. Kao izvor zračenja korištena je lampa koja simulira Sunčevo zračenje i lampa koja emitira vidljivo svjetlo. TiO_2 je dopiran srebrom radi proširenja fotokatalitičke aktivnosti u području valnih duljina vidljivog spektra. Eksperimenti su provedeni sa suspendiranim fotokatalizatorom i imobiliziranim na staklene mrežice i PVC. Djelotvornost procesa ustanovljena je na temelju stupnja razgradnje i mineralizacije salicilne kiseline. Određene su konstante brzine reakcije oksidativne razgradnje salicilne kiseline u sva tri reaktorska sustava. Najveća djelotvornost postignuta je sa suspendiranim fotokatalizatorom u cilindričnoj ćeliji. Očekivano, sintetizirani Ag/TiO_2 je pokazao nešto bolju fotokatalitičku aktivnost, u usporedbi s TiO_2 , u uvjetima simuliranog Sunčevog zračenja.

Literatura:

- [1] M.N. Chong, B. Jin, C.W.K. Chow, C. Saint, Water Res. 44 (2010) 2997–3027.

**POSTOJANI ORGANOKLOROVI SPOJEVI U TLU
NACIONALNOG PARKA "PLITVIČKA JEZERA"
I GRADA VARAŽDINA**

**PERSISTENT ORGANOCHLORINE COMPOUNDS IN SOIL
OF PLITVICE LAKES NATIONAL PARK
AND THE CITY OF VARAŽDIN**

Marija Dvorščak¹, Želimira Vasilić¹, Sanja Fingler¹, Gordana Mendaš¹, Sanja Stipičević¹, Vlasta Drevenkar¹, Dinko Vujević², Zvezdana Stančić²

¹Institute for Medical Research and Occupational Health,
Ksaverska c. 2, HR-10000 Zagreb, Croatia
e-mail: msambolec@imi.hr

²University of Zagreb, Faculty of Geotechnical Engineering,
Hallerova aleja 7, HR-42000 Varaždin, Croatia
e-mail: dinko.vujevic@gfv.hr

Organochlorine (OC) pesticides and polychlorinated biphenyls (PCBs) are widespread, highly persistent, and hydrophobic environmental pollutants. They strongly bind to soil/sediment particles, which then may become secondary sources of environmental pollution and animal and human exposure.

We studied the occurrence and mass fractions of OC pesticides and PCBs in 16 surface soils collected at four sites within the protected area of the Plitvice Lakes National Park and 16 soils collected at urban and suburban sites of the city of Varaždin. The soils were analysed for 15 pesticides [hexachlorobenzene (HCB), hexachlorocyclohexane isomers (α -, β -, and γ -HCH), DDT-type compounds (4,4'-DDT, 4,4'-DDE, 4,4'-DDD, 2,4'-DDT), aldrin, dieldrin, endrin, isodrin, heptachlor, heptachlor epoxide, α -endosulfan] and 17 PCBs including seven indicator congeners (no. 28, 52, 101, 118, 138, 153, 180). The air-dried samples were extracted with 1 : 1 acetone : *n*-hexane mixture using a microwave-assisted extraction procedure. The extracts were analysed by gas chromatography with electron capture and mass spectrometric detection.

Unlike soils from Plitvice, where PCBs were not detected at quantifiable levels in any of the samples, the Varaždin soils contained from one up to nine PCB congeners in a total mass fraction of 0.22 $\mu\text{g kg}^{-1}$ to 5.88 $\mu\text{g kg}^{-1}$. The most frequently detected pesticide compounds at both locations were 4,4'-DDE, HCB, γ -HCH, and 4,4'-DDT. The highest pesticide mass fraction in the Plitvice soils (35.17 $\mu\text{g kg}^{-1}$) was measured for dieldrin (not detected in any Varaždin soil) and in Varaždin soils for 4,4'-DDE (5.66 $\mu\text{g kg}^{-1}$). The sum of DDT-type compound mass fractions was significantly higher in Varaždin (0.61 to 14.7 $\mu\text{g kg}^{-1}$, median 2.31 $\mu\text{g kg}^{-1}$) than in Plitvice (0.10 to 2.60 $\mu\text{g kg}^{-1}$, median 0.94 $\mu\text{g kg}^{-1}$) soils. In most soil samples, the 4,4'-DDE/4,4'-DDT ratio was higher than one indicating an old input of 4,4'-DDT, which was largely converted to 4,4'-DDE. The predominance of γ -HCH over α -HCH in soils at both locations may be a consequence of the locally preferred usage of the former isomer formulation in the past (banned in Croatia more than a decade ago), but also of the new inputs to surface soil via atmospheric transport from remote areas.

UTJECAJ TEMPERATURE NA PROCESSE U VODAMA PLITVIČKIH JEZERA

INFLUENCE OF TEMPERATURE ON THE PROCESSES IN THE PLITVICE LAKES WATERS

Andreja Sironić, Jadranka Barešić, Nada Horvatinčić

Institut Ruđer Bošković, Bijenička 54, 10000 Zagreb, Hrvatska

U posljednjih 30 godina zabilježeno je povećanje temperature zraka od $\sim 1,5$ °C na postaji Zagreb, Grič, odnosno ~ 1 °C na Plitvičkim jezerima [1]. Promjena u temperaturi zraka utječe na godišnju srednju vrijednost temperature površinske vode Plitvičkih jezera što može uzrokovati promjene u ekosustavu jezera [2,3]. U svrhu praćenja tih promjena na Plitvičkim jezerima uspoređeni su: temperatura vode, pH, koncentracije otopljenog kisika, kalcija i hidrogenkarbonata te indeks zasićenja CaCO_3 (I_{sat}) u nizvodnom toku jezera na 4 lokacije za dva vremenska razdoblja: 1982.–1984. [2] i 2011.–2014. godine (Tablica 1.).

Tablica 1. Rasponi srednjih vrijednosti mjerenih parametara u vodama Plitvičkih jezera za dva vremenska razdoblja.

Mjereni parametri	1982. –1984.	2011. –2014.
t / °C	8,9–12,2	9,1–14,3
pH	8,2–8,3	8,1–8,3
$[\text{O}_2]$ / mg l ⁻¹	10,4–11,2	9,5–10,6
$[\text{HCO}_3^-]$ / mmol l ⁻¹	3,8–4,5	4,2–4,8
$[\text{Ca}^{2+}]$ / mmol l ⁻¹	1,2–1,6	1,5–1,7
I_{sat}	4,7–5,3	5,8–7,9

Godišnja srednja vrijednost temperature vode viša je za sve lokacije u drugom razdoblju. Razlika se povećava nizvodno, od 0,2 °C (3,7 km od izvora) do 2,1 °C (10,5 km od izvora), što je trend od 0,27 °C km⁻¹. Također je porasla koncentracija kalcija i hidrogenkarbonata u cijelom nizvodnom toku, dok je pH vrijednost ostala uglavnom nepromijenjena. Nešto niža koncentracija kisika u drugom razdoblju može biti posljedica intenzivnijeg raspada organske tvari od fotosintetske aktivnosti.

I_{sat} je viši za drugo razdoblje za sve lokacije, što je posljedica povišenja srednje vrijednosti temperature vode te povećanja koncentracija kalcija i hidrogenkarbonata. Mjereni parametri pokazuju da je u zadnjih 30 godina zbog globalne promjene temperature zraka došlo do manjih promjena u procesima u vodama Plitvičkih jezera, koji značajno ne ugrožavaju proces sedrenja, ali pokazuju osjetljivost na bilo kakve promjene u okolišu.

Literatura:

- [1] J. Barešić, Doktorski rad, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb, 2009.
- [2] D. Srdoč, N. Horvatinčić, B. Obelić, I. Krajcar, A. Sliepčević, *Carsus Iugoslaviae* (Krš Jugoslavije) 11(1985) 101–204.
- [3] J. Barešić, N. Horvatinčić, Z. Roller–Lutz, *Isot. Environ. Health. Studies* 47 (2011) 316–329.

**UTJECAJ KEMIJSKE MODIFIKACIJE NA STRUKTURNA
SVOJSTVA AKTIVNIH UGLJENA****EFFECT OF CHEMICAL MODIFICATION ONTO
STRUCTURAL CHARACTERISTICS OF
ACTIVATED CARBONS**

Mirna Habuda-Stanić¹, Dajana Gašo-Sokač¹, Maja Ergović Ravančić²,
Mario Šiljeg³, Marija Nujic¹

¹Josip Juraj Strossmayer University of Osijek, Faculty of Food Technology Osijek,
Franje Kuhača 20, Osijek, Croatia

²University of Applied Sciences in Požega, Department of Food Technology,
Vukovarska 17, Požega, Croatia

³University of Zagreb, Faculty of Geotechnical Engineering,
Hallerova aleja 7, Varaždin, Croatia

⁴Vodovod-Osijek d.o.o., Poljski Put 1, Osijek, Croatia

Activated carbons are one of the most used adsorption materials in drinking water treatment produced from carbonaceous materials by two different processes: physical and chemical activation. The physical activation implies material pyrolysis at temperature up to 900 °C and activation of formed char using nitrogen or argon at high temperature while the chemical activation implies carbonization of chemically impregnated carbonaceous material which provides a large surface area able to adsorb many water contaminants. The efficiency and adsorption capacities of activated carbons depend on their physical and chemical structure. Recent studies showed that additional chemical modification of activated carbon's surface by strong oxidizing agents and subsequent chemical impregnation increased selectivity of activated carbons for some water contaminants such as arsenic, fluorides, nitrate, lead, etc.

This study investigated the effect of chemical modification onto structural characteristics of four commercially available activated carbons obtained from different carbonaceous materials. Activated carbons were oxidized using conc. H₂O₂, conc. HNO₃ and mixture of conc. HNO₃ and conc. H₂SO₄. Effects of chemical modification onto adsorbents surface and structure of used activated carbons were determined using Fourier Transform Infrared Spectrometry (FTIR) and Thermal Gravimetric Analysis (TGA).

**MOGUĆNOST PRIMJENE KERAMIČKIH
ULTRAFILTRACIJSKIH MEMBRANA PRI OBRADI
OTPADNE VODE IZ PROCESA MERCERIZACIJE TEKSTILA
U SVRHU REKUPERACIJE OTPADNE LUŽINE**

**APPLICATION OF CERAMIC ULTRAFILTRATION
MEMBRANES IN THE TREATMENT OF TEXTILE
MERCERIZATION WASTEWATER FOR CAUSTIC
SODA RECOVERY**

Maĳa Zebić Avdićević, Slaven Dobrović

Fakultet strojarstva i brodogradnje, Ivana Lučića 5, 10000, Zagreb, Hrvatska
e-mail: maja.zebic@fsb.hr

Otpadne vode tekstilne industrije pripadaju skupini najviše onečišćenih voda u industrijskom sektoru. Mogućnost rekuperacije vode i pomoćnih radnih tvari iz otpadne vode je vrlo važna zbog sve stroĳih zakonskih propisa kvalitete otpadnih voda za ispuštanje u sustav javne odvodnje. Mercerizacija je jedan od postupaka koji se provodi pri obradi tekstila prije bojenja, a obuhvaća tretman tekstila sa 25 % otopinom natrijevog hidroksida uz dodatak 3–4 % sredstva za umekšavanje (anionskih i neionskih surfaktanta). Tekstilna vlakna nakon mercerizacije su čvršća, sjajnija, a proces bojanja je efikasniji. Mercerizirani tekstil se ispiru vrućom i hladnom vodom, pri čemu nastaje veća količina vruće alkalne otpadne vode koju je, ukoliko se uklone suspendirane tvari, moguće ponovno upotrijebiti.

Membranske tehnologije imaju sve veću primjenu u procesima obrade voda, a karakterizirane su mogućnošću selektivne separacije onečišćujućih tvari. Keramičke ultrafiltracijske membrane su kemijski, termički i mehanički otporne i moguće ih je primijeniti za potrebe obrade otpadnih voda povišene temperature i visoke ili niske pH vrijednosti.

Ispitana je mogućnost primjene tri ultrafiltracijske keramičke membrane različitog MWCO: 500, 2 i 1 kDa pri obradi realne industrijske otpadne vode iz procesa mercerizacije tekstila u svrhu smanjenja količine nastale otpadne vode i rekuperacije natrijevog hidroksida. Pokusi su provedeni pomoću laboratorijskog membranskog sustava uz *cross-flow* filtraciju i potpunu recirkulaciju retentata. Membranski sustav je opremljen pretvornicima tlaka i temperature spojenim na PLC jedinicu, a protok permeata je određen gravimetrijski na temelju kumulativne mase permeata pomoću analitičke vage spojene na računalo. Tijekom pokusa praćena je promjena transmembranskog tlaka i fluksa permeata. Učinkovitost pročišćavanja otpadne vode procijenjena je na temelju fizikalno-kemijske analize sirove vode i permeata. Ispitan je utjecaj brzine strujanja ulazne vode na permeabilnost ispitanih membrana i učinkovitost separacije suspendiranih tvari i ukupnog organskog ugljika.

**PRIMJENA PMF METODE ZA ODREĐIVANJE
IZVORA PM₁₀ U RIJECI**

**APPLICATION OF PMF RECEPTOR MODEL FOR SOURCE
APPOINTMENT OF PM₁₀ IN RIJEKA, CROATIA**

Boris Mifka¹, Ana Alebić-Juretić^{1,2}

¹Medicinski fakultet, Braće Branchetta 20, 51000, Rijeka, Hrvatska
e-mail: borismfk@gmail.com

²Nastavni Zavod za javno zdravstvo, Krešimirova 52a, 51000, Rijeka, Hrvatska
e-mail: ana.alebic@zjzpzg.hr

Praćenje kvalitete zraka u Rijeci započelo je početkom sedamdesetih, u vrijeme izgradnje novih industrijskih pogona na području Kostrene i Bakarskog zaljeva (novi pogoni rafinerije nafte, termoelektrana, koksara) te su mjerenja onečišćenja zraka bila usmjerena prema njma, koji su tvorili 95 % emisija SO₂ i NO_x [1]. Pomorski promet bio je zanemaren, tako da je prvi katastar emisija uključujući pomorski promet napravljen tek 2008. [2] u vrijeme kad su neki industrijski pogoni bili već zatvoreni ili pri zatvaranju. Ovim katastrom utvrđeno je da je udio pomorskog prometa cca 20 % u emisiji NO_x i 10 % u emisiji PM₁₀. MED projektom POSEIDON predviđena je usporedba kako emisija iz luke tako i utvrđivanje glavnih izvora onečišćenja zraka na grada četiri luke obuhvaćene projektom: Brindizi, Patras, Venecije i Rijeke. U tu svrhu korišten je PMF receptor model na postojećim rezultatima mjerenja onečišćenja zraka lebdećim česticama PM₁₀ u Rijeci. U analizu su uzeti podaci koncentracija PM₁₀, Cd, Pb, Cu, Zn, Fe, Cl⁻, NO₃⁻, SO₄²⁻, NH₄⁺, Na⁺, K⁺, Ca²⁺ and Mg²⁺ za 2008. i 2010. Rezultati PMF modela ukazuju na 5 glavnih izvora/faktora onečišćenja uzraka u Rijeci: izgaranje biomase, sekundarni anorganski aerosoli (SIA), metalna industrija, morski aerosoli i čestice tla/ceste. Raspodjela udjela pojedinih faktora je različita u analiziranim godinama. U 2008. dominiraju izgaranje biomase, SIA i čestice tla/ceste sa cca 25 %, te morski aerosoli s 13, i metalna industrija s 8 %. U 2010. godini dominirajući faktor su SIA (35 %), metalna industrija i morski aerosoli (cca 20 %) te izgaranje biomase i čestice tla/ceste (cca 13 %). U 2010. godini došlo je do značajnog smanjenja emisija SO₂ na širem području grada Rijeke, što bi moglo opravdati smanjenje udjela izgaranja biomase, ali ne i porast udjela SIA, osim ako oni nisu rezultat pojačanog udjela daljinskog transporta na riječkom području. Za dobivanje detaljnije analize udjela pojedinih izvora na onečišćenje zraka u Rijeci biti će potrebna daljnja ciljana mjerenja kako bi se obuhvatilo više karakterističnih elemenata pojedinih izvora.

Literatura:

- [1] A. Alebić-Juretić, Environ. Pollut. 154 (3) (2008) 439–447.
- [2] ARDADIS: Technical assistance on the development of cost-efficient emission reduction measures for the port of Rijeka (HR_08_001), Project report (Final); Project number-11-004750/version C/14-02-2011.; Antwerpen, Belgija, 201

**SPEKTROFOTOMETRIJSKO ODREĐIVANJE I
MULTIVARIJANTNA ANALIZA NUTRIJENATA U
ESTUARIJU RIJEKE ZRMANJE**

**SPECTROPHOTOMETRIC DETERMINATION AND
MULTIVARIATE ANALYSIS OF NUTRIENTS IN THE
ZRMANJA ESTUARY**

Maša Buljac¹, Goran Olujić², Marija Bralić¹, Nenad Periš³, Mirjana Čurlin⁴

¹University of Split, Faculty of Chemistry and Technology,
Department of Environmental Chemistry, Teslina 10/V, 21000 Split, Croatia
e-mail: masa@ktf-split.hr

²Hydrographic Institute of the Republic of Croatia,
Zrinsko-Frankopanska 161, 21000 Split, Croatia
e-mail: goran.olujic@hhi.hr

³Teaching Public Health Institute of Split-Dalmatia County,
Department of Health Ecology, Vukovarska 46, 21000 Split, Croatia
e-mail: nenad.peris1@gmail.com

⁴Faculty of Food Technology and Biotechnology, Department of Process Engineering,
Pierottijeva 6, 10000 Zagreb, Croatia
e-mail: mcurlin@pbf.hr

In this work are presents, for the first time, spectrophotometric determination and detailed analysis of spatial and seasonal distribution of nutrients in the Zrmanja estuary. For the study period were obtained the average concentrations of nutrients: for orthosilicate from 7.98–12.35 mmol/m³, for nitrites 0.11–0.12 mmol/m³, for nitrates 5.81–11.27 mmol/m³, for ammonia 0.75–1.57 mmol/m³ and for orthophosphate 0.03–0.07 mmol/m³. The highest concentrations of orthosilicate and nitrate were recorded during the increased river flow. Phosphorous was the limiting element in the Zrmanja estuary, while the concentrations of orthophosphate through all four seasons were lower than 0.1 mmol/m³. The relationship between determined parameters was established using the multivariate analysis (Spearman's correlation coefficient and Cluster analysis).

The purpose of this study is to demonstrate the influence of the sea on the distribution of the determined parameters and their impact on the ecosystem in oligotrophic estuary.

**UTJECAJ IONA OLOVA I INSEKTICIDA IMIDAKLOPRIDA
NA SASTAV STANICA KVASCA KAO MODELNOG
ORGANIZMA U IZUČAVANJU ETIOPATOGENEZE
NEURODEGENERATIVNIH BOLESTI**

**THE IMPACT OF LEAD IONS AND INSECTICIDE
IMIDACLOPRID ON THE COMPOSITION OF YEAST CELLS
AS MODEL ORGANISM IN THE STUDY OF
NEURODEGENERATIVE DISEASES ETIOPATHOGENESIS**

Martina Barbarić, Nermina Mumiši, Gordana Čanadi Jurešić,
Branka Blagović, Čedomila Milin

Medicinski fakultet Sveučilišta u Rijeci, Braće Branchetta 20, 51000 Rijeka, Hrvatska
e-mail: branka.blagovic@medri.uniri.hr

Industrijalizacija je dovela do povećane upotrebe predmeta koji sadrže teške metale što predstavlja ozbiljnu prijetnju za okoliš, a time i za zdravlje čovjeka. Čak i niske koncentracije teških metala štetne su za čovjeka jer se putem zraka i hrane apsorbiraju i nakupljaju u organima, a neki, poput olova, najviše u središnjem živčanom sustavu. Zbog sve raširenije upotrebe i pesticidi predstavljaju prijetnju za ljudsko zdravlje. Neonikotinoidi su relativno nova vrsta insekticida koji učinkovito suzbijaju nametnike uz istovremeno relativno nisku toksičnost za sisavce. Istraživanja su pokazala da se njihova toksičnost očituje u povećanoj proizvodnji reaktivnih kisikovih spojeva u organizmu, a poznato je da velike količine ili nedovoljno učinkovito uklanjanje reaktivnih kisikovih spojeva dovodi do oksidacijskog stresa i posljedično do oštećenja lipida, proteina i nukleinskih kiselina. Višestruko nezasićene masne kiseline, koje živčani sustav sadrži u visokim koncentracijama, naročito su osjetljive na takve spojeve u čijem prisustvu podliježu peroksidaciji, zbog čega dugotrajno izlaganje neonikotinoidima i za ljude predstavlja opasnost. Zbog navedenog, pretpostavlja se da teški metali i pesticidi utječu i na razvoj neurodegenerativnih bolesti, u koje spada i multipla skleroza, koja za Hrvatsku predstavlja poseban problem zbog žarišta u Gorskom kotaru i Istri.

U cilju istraživanja mogućeg utjecaja teških metala i pesticida na razvoj neurodegenerativnih bolesti, u ovom radu korišten je kvasac *Saccharomyces cerevisiae* kao modelni organizam. Istražene su promjene koje u njegovom lipidnom sastavu te proteomu njegovih organela izazivaju ioni olova i insekticid imidakloprid prisutni u podlozi za uzgoj. U istraživanjima je korišten olovov(II) nitrat, $Pb(NO_3)_2$, u koncentracijama 5–25 $\mu\text{mol/L}$ podloge što je usporilo rast kvasca za 20–28 % u odnosu na kontrolni uzorak. U sastavu masnih kiselina tretiranih uzoraka uočene su samo blage promjene. Imidakloprid je korišten u koncentracijama 25–250 $\mu\text{g/mL}$ podloge. U svim tretiranim uzorcima povećan je udio C_{18} -kiselina, pogotovo $C_{18:1}$ na račun C_{16} -kiselina. U citoplazmatskim membranama nisu uočene značajne promjene u ekspresiji proteina, dok je u proteomu mitohondrija enzim sukcinat dehidrogenaza bio značajno više ekspimiran. U uzorcima citosola s mikrosomima najznačajniji porast u aktivnosti određen je za Cu, Zn-superoksid dismutazu, enzim odgovoran za zaštitu kvasca od oksidacijskog stresa, te za proteinsku disulfid izomerazu. U nastavku istraživanja primijenit će se više koncentracije iona olova i odrediti sastav ostalih lipidnih vrsta kako cijelih stanica kvasca tako i pojedinih organela.

OPTIMIZACIJA PROCESA ELEKTROKEMIJSKOG IZDVAJANJA BAKRA: UTJECAJ BRZINE MIJEŠANJA U KLORIDNOM MEDIJU pH=3

OPTIMIZATION OF ELECTROCHEMICAL COPPER RECOVERY PROCESS: EFFECT OF THE STEERING SPEED IN CHLORIDE MEDIUM OF pH=3

Noura Touabi^{1,2}, Sanja Martinez¹, Moussa Bounoughaz²

¹University of Zagreb, Faculty of Chemical Engineering and Technology, Department of Electrochemistry, Marulićev trg 19, Zagreb, Croatia
e-mail: sanja.martinez@fkit.hr

²University M'Hammed Bougara Boumerdes/Team electro polymerization & Corrosion, Laboratory of Forming and Treatment off fibrous polymers, UMBB, Boumerdes, 3500, Algeria
e-mail: ntouabi86@yahoo.fr, Moussa_bounoughaz@yahoo.fr

The wastewater pollution by heavy metals remains today one of the important problems to solve in the industrialized countries. Various conventional methods are used to remove these metals. In the present work, the effect of the steering speed on copper recovery by electrodeposition from synthetic medium of pH = 3 has been studied. In order to optimize electrodeposition and facilitate recovery, we have used a chloride electrolyte [1].

Copper was deposited potentiostatically on a graphite electrode with graphite auxiliary electrode and saturated calomel electrode as a reference.

Cyclic voltammetry, electrochemical impedance spectroscopy and chronoamperometry were used to characterize the kinetics of nucleation and electroplating of copper deposits. The study of the effect of the scanning rate on cyclic voltammograms in the presence and absence of agitation shows that the copper was deposited under diffusion control in quasi reversible process with partial oxidation of bulk deposited copper.

Characterization of the deposits formed at different stirring speeds was done by scanning electron microscopy (SEM), Fourier transform infrared spectroscopy (FTIR) and X-ray diffraction (XRD). The quality of the deposits obtained depended strongly on agitation. Our goal was to obtain copper deposit which was easily removable from the cathode due to a dendritic growth mechanism in the presence of chlorides ions.

Excellent copper removal percentage and the current efficiency of the deposition, equal to 94 % and 99 % respectively, have been obtained at a steering speed of 1500 rpm [2].

Literatura:

- [1] C. Gabrielli, P. Moçotéguy, H. Perrot, R. Wiart, J. Electroanal. Chem. 572 (2004) 367–375.
- [2] A.S. Pilla, M.M.E. Duarte, C.E. Mayer, J. Appl. Electrochem. 30 (2000) 831–838.

**HRVATSKO-KINESKA SURADNJA NA SEKUNDARNIM
ORGANSKIM AEROSOLOVIMA**

**CHINESE-CROATIAN COOPERATION ON SECONDARY
ORGANIC AEROSOL RESEARCH**

Glenda Herjavić¹, Leo Klasinc¹, Min Hu², Keding Lu², Yuanhang Zhang²

¹Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, HR 10002 Zagreb
e-mail: klasinc@irb.hr

²Peking University, College of Environmental Sciences and Engineering
e-mail: yhzhang@pku.edu.cn

Cooperation between Ruđer Bošković Institute and Peking University on atmospheric pollution problems informally exists since the 1990s through membership of LK and YHZ from the two Institutions in the IUPAC Commission for Atmospheric Chemistry and later its Division of Chemistry and the Environment (DCE). A bilateral Chinese-Croatian scientific project on „Ozone pollution index and National air quality standards“ 2008–2010 was successfully finished, final reports submitted to the authorities and presented also at 21. Meeting of Croatian Chemists in Trogir. The cooperation indicated that the main culprit for development of photochemical air pollution are secondary organic aerosols. A joint IUPAC technical report on Bibliometric analysis of research on secondary organic aerosols documented that clearly [1]. We thus submitted a new bilateral research project between our Institutions on Secondary organic aerosols that was approved for 2014–2015 and will inform here on its progress.

Reference:

- [1] J. Li, Y. Zhang, M. Veber, P.H. Wine, L. Klasinc. Pure Appl. Chem. 85 (2013) 1241–1255.

RAZVOJ OPTIMALNOG MODELA UMJETNIH NEURONSKIH MREŽA ZA PREDVIĐANJE EMISIJA STAKLENIČKIH PLINOVA PREMA PROJEKCIJAMA SEKTORSKE POTROŠNJE ENERGIJE

DEVELOPMENT OF OPTIMAL ARTIFICIAL NEURAL NETWORK MODEL FOR GREENHOUSE GAS EMISSIONS PREDICTION ACCORDING TO SECTORAL ENERGY CONSUMPTION PROJECTIONS

Tomislav Strahovnik¹, Mirjana Novak², Šime Ukić²,
Marko Rogošić², Tomislav Bolanča²

¹Hrvatska energetska regulatorna agencija, Ulica Grada Vukovara 14, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: tstrahovnik@hera.hr

²Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije,
Marulićev trg 19, 10000 Zagreb, Hrvatska
e-mail: mirnovak@fkit.hr

Energija je jedna od osnovnih komponenti u procesu gospodarskog razvoja neke države jer omogućava gospodarski razvoj kroz pružanje najosnovnijih usluga koje održavaju gospodarske aktivnosti kao i poboljšanje kvalitete života ljudi.

Poznata je činjenica kako postoji međuovisnost energije, gospodarstva i okoliša, odnosno između potrošnje energije, cijene energije i emisija stakleničkih plinova. U današnje vrijeme zbog negativnih utjecaja na okoliš i povezanosti s energetske i gospodarskim razvojem, predviđanje emisija stakleničkih plinova dobiva sve veću pozornost pri planiranju i izradi nacionalnih gospodarskih razvojnih strategija. Predmet ovog rada je pronalaženje i razvoj optimalnog modela predviđanja emisija stakleničkih plinova s obzirom na realne projekcije sektorske potrošnje energije u Republici Hrvatskoj do 2020., odnosno do 2030. U radu će se u obzir uzeti samo potrošnja energije u energetske sektoru, koji se sastoji od podsektora: industrija, promet, kućanstva, usluge, poljoprivreda i graditeljstvo, a predstavlja emisije stakleničkih plinova koje nastaju isključivo izgaranjem fosilnih goriva. Za razvoj optimalnog modela predviđanja testirat će se dvije najčešće korištene arhitekture umjetnih neuronskih mreža, višeslojne perceptronske mreže (MLP) i mreže s radijalnim baznim funkcijama (RBF). Projekcije sektorske potrošnje energije za ciljanu godinu odredit će se ekstrapolacijom procijenjenih realnih godišnjih stopa rasta iz temeljne projekcije preuzetih iz Strategije energetske razvitka Republike Hrvatske [1], te bi se predložio novi Optimistični scenarij prema kojem bi u 2020. neposredna potrošnja energije iznosila 302,82 PJ, a u 2030. 410,54 PJ. Na osnovi procijenjenih realnih godišnjih stopa rasta potrošnje energije koje su za 20% umanjene u odnosu na stope iz temeljnog scenarija iz Strategije u razdoblju do 2020., a u razdoblju od 2021. do 2030. za 30% umanjene u odnosu na stope iz temeljnog scenarija, te je predložen novi Razvojni scenarij prema kojem bi u 2020. neposredna potrošnja energije iznosila 292,67 PJ, a u 2030. 376,43 PJ. Kao ulazni podaci u modele umjetnih neuronskih mreža koristile bi se projekcije sektorske potrošnje energije, a izlazne vrijednosti bile bi emisije stakleničkih plinova.

Provedenim istraživanjem, a na osnovu dobivenih rezultata može se zaključiti kako je model umjetnih neuronskih mreža temeljen na radijalnim baznim funkcijama (RBF) pouzdaniji od

modela s višeslojnim perceptronom (MLP). Predviđene emisije stakleničkih plinova primjenom modela umjetnih neuronskih mreža s radijalnim baznim funkcijama (RBF) pokazuju manje pogreške te da je navedeni model pouzdan. Rezultati dobiveni modelom umjetnih neuronskih mreža s radijalnim baznim funkcijama (RBF) ukazuju na ovisnost o sektorskoj potrošnji energije te da se može primjeniti za određivanje budućih razina emisija stakleničkih plinova.

Literatura:

- [1] Hrvatski sabor, Strategija energetskeg razvitka Republike Hrvatske, NN 130/09.

RAZGRADNJA FARMACEUTIKA U VODI UV-A/TiO₂ PROCESOM

DEGRADATION OF PHARMACEUTICALS IN WATER BY UV-A/TiO₂ PROCESS

Daria Juretić¹, Marin Kovačić¹, Hrvoje Kušić¹, Urška Lavrenčić-Štangar²,
Ana Lončarić Božić¹

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

²University of Nova Gorica, Laboratory for Environmental Research,
Vipavska 13, 5000 Nova Gorica, Slovenia

Voda je jedan od osnovnih resursa nužnih za život, no unatoč svijesti o njezinoj važnosti, količine dostupne pitke vode kontinuirano se smanjuju kao posljedica onečišćenja. Industrijske i komunalne otpadne vode opterećene su različitim organskim i anorganskim onečišćivačima te se moraju obraditi prije ispuštanja u prirodne prijemnike sukladno zakonskoj regulativi (NN 80/13). Iako obrađene vode u pravilu zadovoljavaju zakonske propise, nakon obrade mogu zaostati male koncentracije različitih postojećih onečišćivača (farmaceutici, pesticidi, itd) koje predstavljaju opasnost za okoliš i ljudsko zdravlje. Farmaceutici podrazumijevaju široki spektar spojeva sa raznim djelovanjima, te su kao takvi prisutni svakodnevno u našem životu. Zbog velike upotrebe te neodgovornog odlaganja, farmaceutici dospijevaju u okoliš i prirodne vode. Glavni put ulaska humanih farmaceutika u vodeni okoliš je njihovo izlučivanje nakon primjene te unošenje u komunalne otpadne vode, pri čemu su se uređaji za obradu komunalnih otpadnih voda pokazali su se nedovoljno djelotvorni za uklanjanje velikog broja farmaceutika [1]. Diklofenak, nesteroidni protuupalni lijek, je jedan od prvih farmaceutika identificiranih u prirodnim vodama te se redovito nalazi u efluentima uređaja za obradu komunalnih voda. Stoga je uključen na „Watch“ listu unutar Okvirne direktive o vodama (2013/39/EU) kako bi se pratilo i ustanovilo njegovo potencijalno štetno djelovanje na ekosustav i ljudsko zdravlje. Sukladno tome, nameće se potreba za razvojem održivih i ekološki prihvatljivih metoda za uklanjanje farmaceutika i drugih onečišćivača koji zaostaju nakon obrade konvencionalnim metodama.

U ovom radu istraživana je učinkovitost naprednog oksidacijskog procesa UV-A/TiO₂ za uklanjanje diklofenaka iz vode. Glavne prednosti primjene TiO₂ u fotokatalitičkoj obradi voda vežu se uz njegovu visoku aktivnosti i relativno nisku cijenu. Nasuprot tome, ograničenja procesa obrade su vezana uz uklanjanje nanočestica nakon te aglomeraciju tijekom obrade. Stoga je u ovom istraživanju korišten imobilizirani sloj fotokatalizatora nano-TiO₂ [2] uz UV-A zračenje. Istraživana je učinkovitost same obrade u ovisnosti o procesnim parametrima pH, koncentracija oksidansa (H₂O₂) te debljini sloja fotokatalizatora uz pomoć dizajna eksperimenata u kombinaciji sa metodom odzivnih površina.

Literatura:

- [1] H. Yu, E. Nie, J. Xu, S. Yan, W. J. Cooper, W. Song., *Water Res.*, 47 (2013) 1909–1918.
- [2] M. Tasbihi, M. Kete, A. M. Raichur, N. Novak Tušar, U. Lavrenčić Štangar, *Environ. Sci. Pollut. Res* 19 (2012) 3735-3742.

**PRIMJENA NAPREDNIH OKSIDACIJSKIH PROCESA UZ
NANOČESTICE ZA RAZGRADNJU DIKLOFENAKA U
VODENOM MEDIJU****APPLICATION OF NANOPARTICLES INADVANCED
OXIDATION PROCESSES FOR THE DEGRADATION OF
DICLOFENAC IN WATER MATRIX**

Marin Kovačić¹, Subhan Salaeh¹, Daria Juretić¹, Hrvoje Kušić¹, Urška Lavrenčić-Štangar², Ana Lončarić Božić¹

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

²University of Nova Gorica, Laboratory for Environmental Research,
Vipavska 13, 5000 Nova Gorica, Slovenia

Rješavanje problema onečišćenja voda jedno je od glavnih pitanja zaštite okoliša sa ciljem očuvanja zdravlja ljudi i ekosustava. U novije vrijeme, u otpadnim vodama i prirodnim prijemnicima identificirane su postojane kemijske tvari iz grupe farmaceutika, sredstva za zaštitu bilja te industrijskih kemikalija, koje imaju potencijalno negativan utjecaj na okoliš. Obzirom da se vrste i količine ovih onečišćivala u vodenom okolišu kontinuirano povećavaju, nameće se potreba za razvojem i primjenom učinkovitih naprednih tehnologija za obradu voda. Tehnologije obrade voda temeljene na naprednim oksidacijskim procesima (Advanced oxidation processes, AOPs) omogućavaju razgradnju postojanih organskih onečišćivala, prevodeći ih u biorazgradive spojeve ili mineralizirajućih ih do CO₂ i H₂O.

U ovom radu je istraživana primjena fotokatalitičkih naprednih oksidacijskih procesa uz korištenje nanočestica za obradu vode koja sadrži diklofenak, nesteroidni protuupalni lijek, koji je kao jedan od prvih farmaceutika uključen na „Watch“ listu unutar Okvirne direktive o vodama (2013/39/EU). Glavna ograničenja fotokatalitičkih procesa uz nano-TiO₂ su: (i) niska aktivnost pod sunčevim zračenjem, (ii) aglomeracija tijekom obrade i (iii) separacija nakon obrade. Stoga je u ovom radu istraživana primjena nanokompozitnog fotokatalizatora na bazi nano-TiO₂ i željezom modificiranog sintetskog zeolita ZSM-5 tipa (FeZ) u imobiliziranom sloju uz simulirano sunčevo zračenje („solar“). Aktivnost pripremljenog nanokompozitnog fotokatalizatora procijenjena je usporedbom konverzije diklofenaka u sustavima solar/TiO₂ i solar/TiO₂-FeZ. Korištenjem dizajna eksperimenata u kombinaciji sa metodom odzivnih površina istraživana je utjecaj procesnih parametara na učinkovitost oba istraživana procesa.

PREDSTAVLJANJE UDŽBENIKA
PROMOTION OF TEXTBOOK

PU 1

UVOD U ANALITIČKU KEMIJU
INTRODUCTION TO ANALYTICAL CHEMISTRY

Autori:

Njegomir Radić, Lea Kukoč – Modun

Sveučilište u Splitu, Kemijsko-tehnološki fakultet, Zavod za analitičku kemiju,
Teslina 10/V, 21000 Split, Hrvatska
e-mail: lkmodun@gmail.com

Recenzenti:

prof. emer. dr. sc. Marija Kaštelan–Macan¹
prof. dr. sc. Tomislav Bolanča¹
prof. dr. sc. Zoran Grubač²

¹Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije

²Sveučilište u Splitu, Kemijsko-tehnološki fakultet

Analitička kemija je neovisno o širini i slojevitosti svoje primjene u osnovi usmjerena prema utvrđivanju sastava uzorka i određivanju udjela pojedine komponente u uzorku. U sveučilišnoj nastavi poglavlja analitičke kemije tradicionalno su grupirana u različite nastavne cjeline uobičajeno pod nazivima: kvalitativna analiza, kvantitativna analiza, instrumentalne tehnike i metode... Razvijanje analitičkog signala, kvalitativnog ili kvantitativnog, često se zasniva na kemijskim reakcijama odnosno homogenim ili(i) heterogenim ravnotežama. Kada analitički signal nastaje kao posljedica uspostavljanja kemijske ravnoteže uobičajeno se koristi termin: kemijska analiza. Kod primjene instrumentalnih tehnika i odgovarajućih metoda formiranju analitičkog signala nužno ne mora prethoditi kemijska reakcija.

Građa ovog udžbenika pokriva temeljne sadržaje analitičke kemije namijenjene studentima preddiplomskih studija na kojima se analitička kemija predaje na sveučilišnoj razini u odgovarajućem obimu. U osnovnom konceptu udžbenik slijedi suvremeni prikaz analitičke kemije po uzoru na europski sveučilišni udžbenik [1], prema kojemu se kvalitativni i kvantitativni aspekt analitičke kemije ne tumače odvojeno, nego objedinjuju kod izlaganja kroz: homogene i heterogene ravnoteže te kinetičke metode.

U ovom udžbeniku, nakon uvodnih poglavlja u kojima je dat prikaz kemijske stehiometrije, obrada rezultata mjerenja te osnovne osobine elektrolita, razmatrana je kemijska ravnoteža s naglaskom na analitičku primjenu. U okviru poglavlja kemijska ravnoteža uveden je pojam vertikalnog dijagrama od značaja za kvalitativna predviđanja dominirajućih kemijskih vrsta u složenim analitičkim sustavima, pri zadanim eksperimentalnim uvjetima. Slijedeća poglavlja knjige obrađuju homogene kemijske ravnoteže od posebnog značaja za analitičku kemiju kao što su: kiselo-bazne ravnoteže, ravnoteže nastajanja kompleksa te oksidacijsko-redukcijske ravnoteže. Svaka od navedenih ravnoteža obrađena je na način da su razmatrane njene osobnosti te analitička iskoristivost, pri čemu je korištenjem dostupnih podataka računana potpunost razmatrane ravnoteže bez utjecaja ili uz utjecaj paralelnih reakcija. Procjena stupnja potpunosti reakcije u realnim

uvjetima uz prisutnost mogućih interferirajućih vrsta značajan je korak kod optimiranja uvjeta za razvijanje kvantitativnog analitičkog signala. Saznanja o pojedinoj homogenoj ravnoteži, nadograđena su u narednom poglavlju teorijskim razmatranjem mogućnosti titrimetrijskih (volumetrijskih) određivanja odabranog analita, kod čega ta dva susjedna poglavlja čine jednu zajedničku kvalitativno-kvantitativnu cjelinu, što olakšava svrsishodno povezivanje te usvajanje nastavne građe. Svako poglavlje popraćeno je primjerima rješavanja analitičkih problema te kod titrimetrijskih određivanja računalnim i grafičkim simuliranjem krivulja titracije kao i teorijskim razmatranjem izbora povoljnog indikatora za indiciranje završne točke titracije. Kod tumačenja analitičke iskoristivosti kemijskih ravnoteža, uz teorijska razmatranja, dati su i primjeri razmatranih ravnoteža u ljudskome organizmu i okolišu.

Istim pristupom razmatranja kroz sljedeća poglavlja obrađene su i heterogene ravnoteže od većeg značaja za analitičku kemiju: ravnoteža između čvrste, slabo topljive tvari i njenih iona, ravnoteža vrste između dviju faza – ekstrakcija, kromatografija, izmjena iona. Svodeći kvalitativna dokazivanja i kvantitativna određivanja na istu vrstu kemijske reakcije, nakon poglavlja o razmatranju složenosti ravnoteža slabo topljive tvari slijede poglavlja kvantitativne analitičke primjene: gravimetrijske metode analize i taložne titracije. I kod prikaza analitičke iskoristivosti heterogenih ravnoteža pojedino poglavlje popraćeno je primjerima rješavanja analitičkih problema te, kod titrimetrijskih određivanja, računalnim i grafičkim simuliranjem krivulja titracije kao i teorijskim razmatranjem izbora povoljnog indikatora za indiciranje završne točke titracije. Zasebno poglavlje posvećeno je kinetičkim metodama u analitičkoj kemiji.

Udžbenik Uvod u analitičku kemiju zauzima 700 stranica, a podijeljen je na 19 poglavlja i priloge. U posebnom digitalnom prilogu udžbeniku nalaze se postupci rješavanja postavljenih zadataka te ostali numerički i grafički podatci korisni za nastavno korištenje udžbenika.

Literatura:

- [1] R. Kellener, J.M. Mermet, M. Otto, M. Valcarcel, H.M. Widmer, *Analytical Chemistry*, 2nd ed., Wiley-VCH, Weinheim, 2004.

KAZALO AUTORA
AUTHOR INDEX

A

Alebić-Juretić A.....	261
Aleksić M.	95
Alešković M.	124
Alispahić A.	198, 199
Amić A.	127
Andričić B.....	53
Aničić M.	180
Antonić D.	228
Arias A.....	214, 215
Ašperger D.....	118

B

Babić K.	206
Babić S.....	118, 182, 183
Bakšić D.	164, 165
Ban L.	188
Ban Ž.	149, 186
Barbarić M.....	263
Barbir D.....	220
Barešić J.....	258
Barišić D.	170
Basarić N.	114, 116
Bates R.W.....	44
Baus N.	188
Bedeković N.	188
Begušić T.....	188
Benković G.....	105, 106
Benković T.	97
Bešić D.	162, 163
Biba R.	98
Bibulić P.	159
Biluš M.	175
Biočić M.	120, 129
Biruški A.....	243
Bistrović A.....	185
Bjelopetrović A.....	78
Blagović B.	263
Blagus Garin A.....	122
Blažeković F.	130
Blažević I.....	142
Bojić M.	105, 106
Bokulić M.....	204
Bolanča T.....	266

Bolf N.	216
Borilović I.....	174
Bošković P.....	100
Bounoughaz M.	264
Brahović I.	107
Bralić M.	262
Bregović N.....	170
Brekalo J.....	142
Brgles M.	128
Briš A.....	178
Briški F.	67
Brkljačić L.....	187
Brnardić I.....	225, 246
Brueckler F.M.....	54
Budiša N.	88
Buljac M.	262
Buljan I.	234
Bunjevac J.	95
Burčul F.	108, 142
Bušić V.	132
Bužančić M.....	208

C

Car Ž.	167, 168
Carev I.	107
Cazin I.	184
Cetina M.	121
Chen Z.-L.	178
Cinčić D.....	54, 150, 151, 152, 153, 154, 155
Cindro N.	54, 170
Crnčec D.....	236
Cusack S.	60
Cvetešić N.	60, 175
Cvetnić M.	216

Č

Čakal M.	247, 248
Čalogović M.	229
Čanadi Jurešić G.....	263
Čapeta D.	228
Čavuzić D.	166
Čurlin M.	262

Ć

Ćosić M.65

D

Dabić P.220
 De Nicola G.R.142
 Dedić A.198, 199
 Dejanović I.64
 Denac M.221
 Denegri B.140, 172, 173
 Dobrović S.260
 Dražić T.232
 Drevenkar V.135, 257
 Drulak M.156
 Družić J.103
 Dujmić Vučinić Ž.182, 183
 Dujmović M.164
 Dulić M.175
 Duplančić M.206
 Dutour Sikirić M.232, 233
 Dvorščak M.135, 257

Đ

Đaković M.179
 Đapić I.187
 Đulović A.108, 142
 Đumbir A.-M.204

E

Erceg M.53, 219
 Ergović Ravančić M.259
 Ertap H.230
 Eterović D.100

F

Falini G.38

Faraguna F.74, 193
 Ferhatović Hamzić L.73
 Filipović H.255
 Findrik Blažević Z.210
 Fingler S.135, 257
 Flegar V.237
 Foglar L.191, 227, 249
 Forčić D.128
 Foretić B.160
 Forgić K.250
 Frece J.201
 Frkanec L.73, 136, 169, 170, 171, 174
 Frkanec R.63, 136

G

Gajović A.234
 Gajović S.73
 Galić N.97
 Gašo-Sokač D.132, 259
 Gašparić M.155
 Gavranic M.118
 Gazivoda Kraljević T.130, 185
 Generalić Mekinić I.142
 Gilja V.227
 Giljanović J.111
 Gladić J.229
 Glavaš M.124
 Glavaš-Obrovac Lj.130
 Glažar S.A.80
 Godinić Mikulčić V.146
 Gojić M.226
 Gojmerac Ivšić A.167
 Golenić N.150
 Grčić I.256
 Gredičak M.90
 Gregorić T.185
 Gregorović I.188
 Gretić M.204
 Gruić Sovulj I.157
 Gruić-Sovulj I.60, 146, 175
 Gugić M.103

H

Habazin S.....	54
Habinovec I.....	135
Habuda-Stanić M.....	132, 259
Hajdari Z.....	218
Halassy B.....	128
Hameršak Z.....	66
Havaić T.....	204
Hazler Pilepić K.....	105
Herjavić G.....	265
Holjevac Grgurić T.....	226
Horak E.....	94, 144
Horvatinčić N.....	258
Hranjec M.....	94, 95, 144
Hrga I.....	252
Hrkovac M.....	209
Hrnjak-Murgić Z.....	227, 231
Hu M.....	265
Husetović V.....	75

I

Ilić I.....	150, 188
Ivanković A.....	223

J

Jaćimović Ž.....	247, 248
Jakas A.....	145
Jakaša I.....	187
Jakić J.....	197
Jakić M.....	219
Jakovljević I.....	251
Jančan G.....	247, 248
Janković B.....	229
Janković M.....	252
Jansen H.....	64
Javornicki I.....	240
Jednačak T.....	101
Jerković I.....	102, 103
Jokić M.....	169
Jokić S.....	103
Jozanović M.....	156
Judaš N.....	54, 243, 244

Jukić A.....	74, 193
Jukić M.....	130, 252
Jungwirth P.....	35
Jurašin D.....	232, 233
Juretić D.....	268, 269
Jurić S.....	172, 173

K

Kačunić A.....	65
Kallay N.....	117
Karabulut M.....	230
Kardum I.....	142
Karminski-Zamola G.....	95, 109
Karnaš M.....	110, 156
Karoglan Kontić J.....	118
Katančić Z.....	231
Katava R.....	177
Kežić S.....	187
Kišić A.....	99
Klasinc L.....	265
Klobučić A.....	208
Ključarić V.....	186
Knez Ž.....	37
Knežević A.....	133
Kobetić R.....	186, 187
Kodrin I.....	179
Kojić V.....	192
Kolarić K.....	188
Kolarić M.....	196
Komar M.....	132
Kontrec D.....	97
Kontrec J.....	232, 233, 234
Kostov A.....	226
Koudelka L.....	141
Kovač-Andrić E.....	250
Kovačević D.....	139, 201
Kovačić I.....	184
Kovačić M.....	268, 269
Kovarik Z.....	45, 133
Kožuh S.....	226
Kracher D.....	196
Kragol G.....	89
Kralj D.....	232, 233, 234
Kraljević Pavelić S.....	185
Kraljević T.....	129
Kraljić Roković M.....	228
Kranjac M.....	102

Kratofil Krehula Lj.	227
Krehula S.	227
Krešić I.	219
Kristan E.	218
Krištafor S.	144
Krivohlavek A.	252
Krizmanić I.	182, 183
Kronja O.	140, 172, 173
Kruljac A.	231
Kučić D.	67
Kukoč – Modun L.	120, 271
Kukoč-Modun L.	129
Kukovec B.-M.	96, 179
Kuliš I.	110
Kumar N.	205
Kurajica L.	130
Kurajica S.	52, 225
Kurtanjek Ž.	190
Kušić H.	268, 269
Kuzmanić N.	65, 212

L

Labor M.	197
Lautarević I.	253
Lavrenčić Štangar U.	51
Lavrenčić-Štangar U.	268, 269
Lazarević B.	246
Le Lann J.-M.	36
Lekšić E.	166
Lesjak S.	202
Lež T.	78
Lijić T.	78
Lisac K.	154
Lisica A.	220
Lončarić Božić A.	69, 268, 269
Lovinčić Kraljević Z.	69
Lovrić D.	229
Lovrić M.	73
Lu K.	265
Lučić A.	96
Lučić B.	127
Ludwig R.	196
Luetić M.	241

M

Maduna Valkaj K.	205, 206
Madunić-Čačić D.	69, 180
Majerić Elenkov M.	66
Makarević J.	169
Maleš Ž.	105, 106
Mali G.	41
Mance A.D.	177
Mandić L.	114, 250
Mandić V.	225
Mandić Z.	48, 228
Maraković N.	133
Margeta D.	191
Margetić D.	178
Marić Zerdun I.	81
Marijan M.	172, 173
Marijanović Z.	102, 103
Marinić Ž.	125, 126, 178
Marjanović N.	156
Markić S.	42
Markov C.	167
Marković B.	56, 122
Maršavelski A.	202
Martinac V.	197
Martinez S.	223, 264
Martinis O.	58, 75
Marušić K.	218
Maslov L.	118
Mastanjević K.	201
Matić J.	137, 186
Matić M.	140, 172, 173
Matijaković N.	179
Matijašević LJ.	195
Matijašić G.	204
Matković-Čalogović D.	98
Matutinović Z.	78
McNally T.	40
Medvidović-Kosanović M.	110, 122
Meglić K.	78
Mendaš G.	135, 257
Merkaš M.	96
Mesić H.	54
Meščić A.	184
Meštrić A.	244
Meštrović E.	78, 101, 162, 163, 182, 183, 209
Mifka B.	261
Mihalić Z.	138, 159

Mihaljević B.	134
Mihelj T.	161
Mihić L.	231
Mihovilović M.	130
Mikelić A.	188
Mikleušević A.	66
Milas A.	188
Miličević A.	93
Milin Č.	263
Milin T.	211
Milovanović B.	253
Miljanić S.	62
Minga I.	225
Miošić M.	130
Mitrović M.	255
Mlinarić-Majerski K.	114, 116, 123, 124
Močibob M.	202
Moguš-Milanković A.	141, 229, 230
Mohar B.	46, 99
Mohler I.	216
Molčanov K.	54, 78
Montaut S.	142
Mošner P.	141
Mrković A.	255
Mrvoš-Sermek D.	82, 84
Mujadžić S.	196
Mumiši N.	263
Musil V.	221
Mussati M.	214, 215
Mussati S.	214, 215
Mutka S.	115, 117

N

Namjesnik D.	115, 117
Nekić N.	233
Nemec V.	152, 153, 154
Nikolić J.	152
Nikšić-Franjić I.	174
Nogalo I.	151
Novak M.	266
Novak P.	101
Novak Tušar N.	51
Novosel – Radović V.	224
Nuić I.	80, 240
Nujić M.	259

NJ

Njegić Džakula B.	232, 233
------------------------	----------

O

Odak A.	194
Olujić G.	262
Olujić Ž.	64
Opačak S.	123
Orlović-Leko P.	254
Oros D.	196
Otmačić Čurković H.	177, 218
Ožić M.	241, 242

P

Pađan J.	256
Palencia A.	60
Pandurić N.	213
Pankiewicz N.	196
Papa L.	78
Papić S.	191, 256
Parlov Vuković J.	101
Paušek-Badždar S.	237
Pavić L.	229, 230
Pavličić I.	98
Pavlina R.	194
Pavlović G.	177
Pazalja M.	198, 199
Pehlić E.	247, 248
Pehnec G.	251
Pelajić M.	112, 113
Penović T.	203, 208
Perdih F.	122
Perin N.	94, 144
Perinović S.	53
Periš N.	262
Perković I.	104, 164, 165
Pernar N.	164, 165
Petračić A.	208
Petrić M.	195
Petrović Peroković V.	167, 168
Piantanida I.	137, 148, 149
Picek I.	160

KAZALO AUTORA / AUTHOR INDEX

Piteša T.	150, 188
Plavac B.	256
Plavec J.	34
Plavljaniin S.	94
Plavšić M.	254
Plazl I.	47
Plodinec M.	228
Pokos M.	227
Politeo O.	107
Poljak M.	246
Popović Z.	96, 98
Pospišil T.	73, 171
Požar J.	139, 174
Preočanin T.	115, 117
Prišlin B.	118
Prkić A.	111
Prlić Kardum J.	207, 209, 211
Prskalo K.	229
Prugovečki B.	167
Ptiček L.	121
Ptiček Siročić A.	231
Pucić I.	221
Pulić I.	98
Pustak A.	221

R

Racané L.	121
Radan M.	108
Radić Nj.	120, 129, 271
Radić Stojković M.	137, 148
Radonić A.	102
Radović N.	224
Radenović A.	246
Raič I.	163
Raić-Malić S.	130, 184, 185
Rajić Džolić Z.	104
Rakić A.	249
Ramić E.	198, 199
Ramović M.	255
Raos N.	93
Rast S.	46
Ratković A.	130
Rep V.	95
Rezić I.	196
Rezić T.	196
Ribić R.	63

Rimac H.	106
Rissanen K.	121
Rogošić M.	192, 207, 266
Roje M.	103
Roje V.	164, 165
Rokov-Plavec J.	146
Rollin P.	142
Rončević I.	138, 159
Rončević J.	165
Runje M.	182, 183
Rupčić Petelinc S.	83
Ruščić M.	142
Rušić D.	212
Rušić M.	65

S

Sačer D.	228
Saftić D.	148, 186
Sakač N.	156
Sak-Bosnar M.	156
Salaeh S.	269
Salihović M.	198, 199
Salopek J.	139
Sander A.	192, 203, 207, 208
Scenna N.	214, 215
Schreiner P.R.	86
Sedić M.	185
Sertić-Bionda K.	191
Sesar V.	110
Sikirica M.	54
Simunović V.	157
Siročić S.	252
Sironić A.	258
Siuc V.	193
Sklepić K.	141
Slivar A.	207
Smerdel S.	238
Smokrović K.	188
Smrečki N.	96, 98
Sofilić T.	246
Sohora M.	116
Sokol V.	100
Sopčić S.	228
Sović I.	95, 109
Spahić Z.	116
Srdović Z.	94

Stančić Z.	257
Steinberg I.	144, 180
Stepanić V.	184
Stephan M.	46, 99
Stilinović V.	78, 109
Stipanelov Vrandečić N.	219
Stipičević S.	135, 257
Stipišić R.	212
Stipković Babić M.	130
Stojanov D.	142
Strahovnik T.	266
Sudar M.	210
Sviben D.	128
Sviben I.	146
Svilović S.	212

Š

Šafar F.	224
Šagud I.	125, 126
Šahnić D.	101
Šakić D.	68
Šandrak N.	223
Šantić A.	229
Šapčanin A.	198, 199, 247, 248
Šarić L.	79
Šegota S.	71
Šekutor M.	123
Šeruga M.	119
Šijaković Vujičić N.	169
Šiljeg M.	259
Šimičić S.	82
Šindler-Kulyk M.	126
Šinko G.	133
Škorić I.	125
Škvorc N.	84, 153
Šmidlehner T.	137
Šmit I.	221
Šonjić P.	68
Šoštarić N.	175
Šrut Rakić I.	228
Štajner L.	232, 233
Šter A.	110, 122
Štimac A.	136
Štivojević M.	132
Šuligoj A.	51
Šupljika F.	137

Šuša M.	95
Švab I.	221
Švarc A.	200

T

Tandarić T.	68
Tarle Z.	229
Tartaro Bujak I.	134
Tišma M.	50
Tomac I.	119
Tomašević B.	57
Tomašić V.	161, 205, 206
Tomaz I.	118
Tomić S.	63, 167, 168, 202
Tomin M.	138
Tomšić V.	97, 167, 170, 174
Tomljenović Paravić A.	185
Topić E.	188
Topić F.	121
Touabi N.	264
Tralić-Kulenović V.	121
Trivić D.	57
Trmčić Cvitaš J.	136
Truman A.	157
Tsikas D.	129
Tuksar M.	209
Tumir L.-M.	148
Turčinović D.	77

U

Ujević Andrijić Ž.	216
Ukić Š.	266
Ulatowska J.	203
Užarević K.	170

V

Vadić V.	251
Valinger D.	200
Vančik H.	131, 159
Varga K.	131, 159
Varga M.	79

KAZALO AUTORA / AUTHOR INDEX

Vasić-Rački Đ.....	200, 210
Vasilić Ž.....	135, 257
Vianello R.....	160
Vicković I.....	56
Vidović E.....	74, 193
Vidović K.....	254
Vinković V.....	133
Višek S.....	250
Višnjevac A.....	78
Vitali Čepo D.....	112, 113
Vitek M.....	223
Vladušić R.....	55, 241, 242
Vlahoviček-Kahlina K.....	145
Vlašić A.....	188
Vojčić N.....	182, 183
Vrbnjak Grđan M.....	76, 239
Vrbnjak M.....	54
Vrček V.....	68, 76
Vrsalović Presečki A.....	200
Vučić Z.....	229
Vugrek O.....	136
Vujević D.....	257
Vukojević Medvidović N.....	49
Vuković Domanovac M.....	67
Vukušić T.....	111

W

Weiss J.....	39
Weygand-Đurašević I.....	157, 202

Z

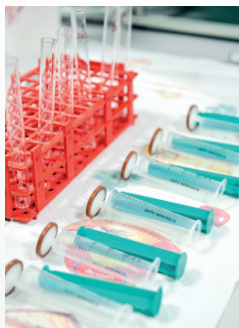
Zadavec R.....	168
Zbačnik M.....	151
Zdjelarević B.....	83
Zebić Avdičević M.....	260
Zejnlagić-Hajrić M.....	240
Zekan P.....	160
Zelić B.....	213
Zhang Y.....	265
Zorc B.....	104
Zrnčević S.....	205

Ž

Žegarac M.....	209
Žgela M.....	77
Žinić B.....	148, 149, 186
Žinić M.....	171
Živković D.....	226
Žižek K.....	194, 204
Žuntar I.....	106
Župan J.....	165
Župančić N.....	162
Županić A.-M.....	223
Žuteg B.....	207
Žužek S.....	83

ZLATNI SPONZOR
GOLDEN SPONSOR

VEĆ GENERACIJAMA ZNANJE VRAĆAMO ZAJEDNICI.



TEVA

PLIVA

PLIVA, TO SU LJUDI POSVEĆENI ZDRAVLJU.

www.pliva.hr

SREBRNI SPONZOR
SILVER SPONSOR



Potpuna rješenja u laboratorijskoj i procesnoj analitici

- Sustavi za demi in ultra čistu vodu
- Kromatografske kolone
- Centrifuge
- Spektrofotometri
- PH metri
- Filteri za šprice
- Kromatografske vijale
- Membranska filtracija
- Vage
- Elektroforeza
- Pipete
- Opća laboratorijska oprema

Kontakt na telefon: 01/ 655 01 06 ili na e-mail: info@labena.hr

 **FOSS** **ELGA** **eppendorf** **OLYMPUS** **Thermo**

BRONČANI SPONZORI
BRONZE SPONSORS

Dokazano najbolja...



INA

KemLab



LABOGENE

BOECO
Germany

Protecting your
laboratory environment
LABCONCO

ThermoFisher
SCIENTIFIC

nive

GILSON®

bioan
Medical-Biological
Research & Technologies

Prodaja i servis laboratorijske opreme

www.kemolab.hr

kemolab@kemolab.hr

tel./fax. 01/6605 233

SPONZORI
SPONSORS





IZDAVAČ | *Published by*

Hrvatsko društvo kemijskih inženjera i tehnologa | 2015.
ISBN: 978-953-6894-54-3