

reaktor IDEJA 2

službeno glasilo Studentske sekcije HDKI-ja | vol 6

prosinac 2021.

Od samoga početka, ljudi su imali razne ideje, filozofije, vjerovanja, provodili su pokuse i istraživanja kako bi mitove približili stvarnosti. Ljudi su kroz znanost proučili kakvog ga znamo, postoji zbog uspjeha koja je privukla njihovu pozornost u svoj posao, pomogli su im različitim izumima, učini Aristotel je bio genijal se biologijom, zoolo znanje u različitim tekstova sačuvar normu za daljn tek u zajedni znanstvenika koji su se pobili u teoriji i u praksi. Bavio se običnim, praktičnim problemima, koji su bili primjenjivani na mnogim

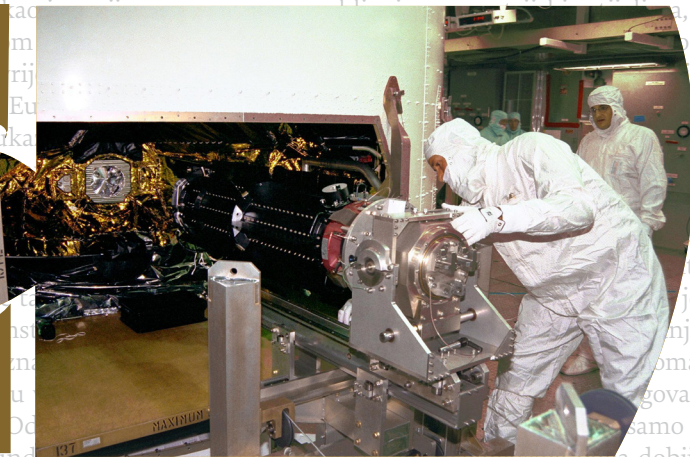


IZUMIRANJE PČELA

STR. 3

NUKLEARNE (ATOMSKE) BATERIJE

STR. 12



nomopolarni motor i otkrio elektromagnetsku indukciju. Dokazao je da mijenjanjem magnetskog polja dobijemo električno polje (Faradayev zakon). Konstruirao je i električni dinamo što je preteča modernog generatora. Niemu u čast fizička jedinica za kapacitet nazvana je izumitelj i tehničar. Tesla na usavršavanju telegrafski aparat, kvadrat izum je i žarulja s niti od životnog vijeka američko bila je poljska kemičarka, p svojom marljivošću i radnim zajedničkom radu sa svojim zvali i majkom atomske bom ratištu tijekom Prvog svjetsko je od trovanja radijacijom. Lo kao znanost i dokazao je da ve riješio problem koji je zbunjivao v vinskome talogu, dolazi do čudnog et

BOLEST MINAMATA

STR. 17



ISSN 2584-6884
e-ISSN 2459-9247
Zagreb



Želite li svaki mjesec znati što se događa
na području kemijskog inženjerstva i općenito STEM području?

I uz to učiniti našu struku sjajnom?

To i mi želimo, ali smo tek studenti i zato to ne možemo učiniti sami.

Da bismo Vam svaki mjesec približili svježe informacije,
treba nam velika pomoć!

Podržite rad Studentske sekcije donacijom

Hrvatsko društvo kemijskih inženjera i tehnologa,
Berislavićeva 6/I, 10000 Zagreb.
OIB: 22189855239
IBAN: HR5323600001101367680,
Zagrebačka banka

Molimo da u opisu plaćanja navedete da je donacija namijenjena Studentskoj sekciji.
Hvala!

Reaktor ideja – više od studentskog časopisa.



MINISTARSTVO ZNANOSTI I OBRAZOVANJA

www.mzo.hr





Urednici *Reaktora ideja*

Dragi čitatelji,

ponosno Vam predstavljamo prosinački broj *Reaktora ideja*.

Pisali smo o raznim temama iz područja znanosti i inženjerstva. Posvetili smo se i zanimljivostima o svijetu koji nas okružuje. Kako bi svijet izgledao bez pčela i koliko se puta staklo može profitabilno reciklirati samo su neka od zanimljivih pitanja ovog broja.

Ostalo pročitajte u nastavku!

Nadamo se da ćete u ovim stranicama pronaći nešto zanimljivo i korisno.

Želimo Vam sve najbolje za nadolazeće blagdane te sretnu i uspješnu 2022. godinu.

S poštovanjem,

Dubravka Tavra,
glavna urednica

IMPRESSUM

Reaktor ideja

Uredništvo:

Berislavićeva ul. 6/I,
10 001 Zagreb
Tel: +385 95 827 9310
Faks: +385 1 487 2490
e-pošta: studenti@hdki.hr

Glavna urednica:

Dubravka Tavra
(dtavra@fkit.hr)

Urednici rubrika:

Samanta Tomičić
Lucija Volf
Dora Ljubičić
 Hrvoje Tašner

Grafička priprema:

Dubravka Tavra
Samanta Tomičić
Lucija Volf
Dora Ljubičić
 Hrvoje Tašner

Lektorice:

Helena Bach-Rojecky
Sofija Kresić

ISSN 2584-6884

e-ISSN 2459-9247

Vol. 6 Br. 2, Str. 1–23

Izlazi mjesečno (kroz akademsku godinu)
Časopis sufinancira Ministarstvo znanosti i obrazovanja
Republike Hrvatske, Zagreb

Zagreb,
prosinac, 2021.

SADRŽAJ

Kemijska posla.....	1
Znanstvenik.....	6
Boje inženjerstva.....	15
Scinfluencer.....	20





KEMIJSKA POSLA

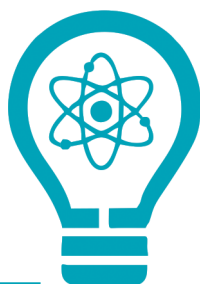
1. 12. – svjetski dan borbe protiv AIDS-a

Dora Ljubičić (FKIT)

Nalazimo se usred pandemije nemajući na umu da već više od tri desetljeća traje pandemija koja je odnijela desetke milijuna života i s kojom živi 38 milijuna ljudi – pandemija HIV-a. Unatoč tome, ne priča se dovoljno o toj pandemiji, stigmatizira se i još se uvijek šire lažne informacije. Bolest koju uzrokuje virus HIV-a je sindrom stečene imunodeficiencije (engl. *Acquired immunodeficiency syndrome – AIDS*).

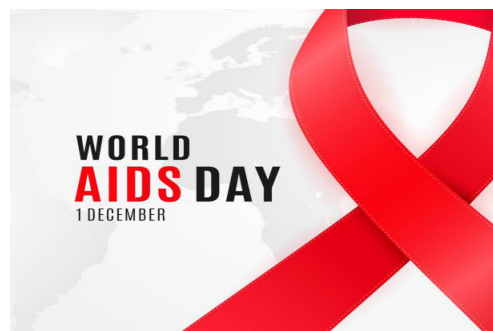
Svjetski dan borbe protiv AIDS-a obilježava se 1. prosinca svake godine. Taj dan omogućava ljudima diljem svijeta ujedinjenje u borbi protiv HIV-a, pružanje potpore ljudima koji žive s virusom i sjećanje na one koji su preminuli od posljedica AIDS-a. Obilježava se još od 1988. godine, što ga čini prvim svjetskim danom zdravlja.¹ Zašto je potrebno obilježavanje ovakvog dana, kako je nastao virus HIV-a te kako se borimo protiv njega?

Istraživači su 1999. pronašli u tijelu čimpanze soj SIV-a (virus imunodeficiencije kod majmuna) koji je gotovo identičan HIV-u kod ljudi. Nakon što su to otkrili, dokazali su da su čimpanze izvor HIV-a te da



je virus u jednom trenutku prešao s čimpanza na ljude. Pitanje je, na koji način?

Najprihvaćenija teorija je „teorija lovca“, gdje je SIV prenesen na ljude kao rezultat ubijanja i jedenja čimpanzi ili ulaska virusa u lovčeve posjekotine tijekom lova. Inače bi se lovčevu tijelo borilo protiv virusa, ali se virus u nekoliko navrata adaptirao u svom domaćinu i postao HIV-1.



Slika 1 – Svjetski dan AIDS-a

Postoje četiri glavne grupe soja HIV-a: M, N, O i P. Svaka grupa ima svoj drugačiji genetski sastav. To podupire teoriju lovca jer svaki put dok je SIV prenesen s čimpanze na čovjeka, razvio bi se na malo drugačiji način u ljudskom tijelu i proizveo nešto drugačiji soj. Ovo objašnjava postojanje više sojeva HIV-a. Najproučavaniji soj HIV-a je HIV-1, grupa M,

čiji soj je raširen diljem svijeta i zaslužan je za većinu trenutnih HIV infekcija.²

Godine 1959. u uzorku krvi čovjeka nađen je HIV na području Kinshase – današnje Demokratske republike Kongo. Postoje brojni prethodni slučajevi gdje su uzroci smrti upućivali na oportunističke infekcije za koje sada znamo da su prouzročene HIV-om, ali ovo je bio prvi potvrđeni slučaj.



~1921: Patient zero



60,000,000 infections

Slika 2 – Shema nastanka HIV-a

Područje Kinshase prepuno je prometnih veza, poput cesta, željeznica i rijeka, a u vrijeme kada se HIV krenuo širiti, u porastu je bila seksualna trgovina. Visok postotak migranata i seksualna trgovina mogu objasniti kako se HIV proširio duž tih infrastrukturnih ruta. Do 1980. polovica infekcija u DR Kongo bili su na područjima izvan Kinshase, što upućuje na širenje pandemije.

Šezdesetih godina prošlog stoljeća subtip soja M HIV-1 došao je do Haitija. U to se vrijeme mnogo Haićana, koji su radili u kolonijalnoj DR Kongo, vratilo na Haiti. Oni su pretrpjeli teški rasizam, stigmiju i diskriminaciju jer ih se izvorno smatralo odgovornima za širenje pandemije. HIV-1 subtip M najviše je geografski rasprostranjen subtip HIV-a na svijetu. Do 2014. godine ovaj subtip uzrokovao je 75 milijuna infekcija.

Ljudi često krivo zaključuju da je HIV započeo 1980-ih u SAD-u, ali tada su zapravo tek postali svjesni njegova postojanja i službeno je priznat kao novo zdravstveno stanje. Prvotno je virus nazivan raznim imenima koja su bile povezana uz homoseksualne muškarce, no znanstvenici su potvrdili da se virus širi i među drugim populacijama. S obzirom na to da se virus prenosi krvlju, mnogo je korisnika droga koje se unose intravenozno i hemofiličara bilo zaraženo. Godine 1982. bolest je nazvana AIDS.

Dakle, HIV je virus koji uzrokuje AIDS. To je virus humane imunodeficiencije, a naziv je dobio od kratice engleskog izraza „Human Immunodeficiency Virus”. Izaziva uništavanje imunološkog sustava te dovodi do pojave različitih bolesti. AIDS je krajnji i najteži stadij zaraze, tj. skupina bolesti koje se javljaju uzrokovane

teškim oštećenjem imunološkog sustava. Uz takva oštećenja i najlakše bolesti mogu biti kobne, pa npr. osoba može umrijeti od obične prehlade. AIDS je kratica od engleskog naziva „Acquired Immunodeficiency Syndrome”, koja znači sindrom stečenog nedostatka imuniteta. Tri su načina prijenosa HIV-a: izravni unos krvi zaražene osobe u organizam nezaražene osobe (najčešće dijeljenjem pribora za intravenozno ubrizgavanje droga, nezaštićeni spolni odnos sa zaraženom osobom te sa zaražene majke na dijete tijekom trudnoće, poroda i dojenja).³

Ključna godina u borbi protiv HIV-a bila je 1996. jer je tada započeto liječenje pacijenata zaraženih HIV-om antivirusnim tabletama zvanim HAART. HAART je vrlo djelotvorno antiretrovirusno liječenje (engl. *Highly Active Antiretroviral Treatment*). To je kombinacija triju ili više lijekova kojima je cilj dugoročno sprečavanje umnožavanja HIV-a i omogućavanje oporavka imunološkog sustava.⁴ Od tada je došlo do znatnog pada mortaliteta i komorbiditeta povezanih uz HIV. Ako se na vrijeme započne antiretrovirusna terapija zaraženih osoba, one žive svoj očekivani životni vijek bez nastanka AIDS-a i ostalih oportunističkih infekcija, stoga su bitna redovita testiranja.



Slika 3 – U = U

Liječenje infekcije je učinkovito i danas postoje znanstveni dokazi da nemjerljiva količina HIV-a u krvi znači da se virus ne može prenijeti, čak i u slučaju nezaštićenog spolnog odnosa. N = N znači nemjerljiv = nezaražan (engl. U = U *undetectable=untransmissible*). To znači da osobe koje imaju infekciju i koje redovito dnevno uzimaju antiretrovirusnu terapiju prema preporuci liječnika, a koja smanjuje količinu virusa u njihovom tijelu na nemjerljive razine, postignu i održavaju tu nemjerljivu razinu HIV-a u krvi šest mjeseci, ne postoji rizik prijenosa HIV-a. Kada je količina HIV-a u krvi osobe koja uzima terapiju toliko niska da se ne detektira testom za mjerenje količine virusa u krvi, kažemo da osoba ima nemjerljivu količinu virusa.⁵

Također, ove su godine odobrene antiretrovirusne injekcije u SAD -u, Europskoj uniji, Kanadi i Ujedinjenom Kraljevstvu. Funkcioniraju isto kao i tablete, osim što se ova terapija provodi svakih mjesec do dva umjesto uzimanja tableta svaki dan u isto vrijeme jer terapija ostaje duže u organizmu. Neki kažu da im je ovaj način liječenja puno lakši od svakodnevnog uzimanja tableta.⁶

Iako postoji učinkovita terapija protiv HIV-a, nije svima na svijetu jednako dostupna. Zato je u zapadnoj i



KEMIJSKA POSLA

srednjoj Africi epidemija HIV-a problem koji ne samo da još uvijek postoji, već ga je i potrebno hitno riješiti. Rani pomaci u borbi protiv HIV-a nisu pretočeni u trajni napredak koji je napravljen u drugim dijelovima supsaharske Afrike. Prošle godine zabilježeno je 150 000 smrtnih slučajeva koji su vezani uz AIDS u toj regiji te 200 000 novih slučajeva zaraze HIV-om. Također, svaki tjedan više od 1000 adolescentica i mladih žena u dobi od 15 do 24 godine zarazi se virusom HIV-a u toj regiji. Više od jednog milijuna ljudi u zapadnoj i centralnoj Africi čeka na početak liječenja HIV-a koje spašava živote, a samo 35 % djece koji žive s HIV-om u tom području prima terapiju. Statistika je poražavajuća i ova epidemija ne smije se zanemariti. Pozitivno je to što su u listopadu u Ugandi započeli terapiju s antiretrovirusnim injekcijama na zaraženim osobama, a uskoro započinju u južnoj Africi i Keniji.

Cjepiva su, bez sumnje, najmoćnije oružje društva protiv virusnih infekcija, no zašto onda još uvijek nemamo cjepivo protiv HIV-a? Biološka svojstva koja je HIV razvio čine razvoj uspješnog cjepiva vrlo teškim. HIV je razvio sposobnost generiranja i toleriranja mnogih mutacija u svojim genetskim informacijama. Posljedica toga je ogromna količina varijacija među sojevima virusa, čak unutar jedne jedinice. HIV je, osim toga, razvio nevjerojatnu sposobnost da se zaštiti od prepoznavanja. Unatoč tome svemu, nedavno je pronađen novi način izrade cjepiva. Postoji nekoliko cjepiva u fazi testiranja, pa vjerujemo da će neko od njih uskoro biti i odobreno.

Danas je postignut značajan napredak u liječenju HIV-a, postoje zakoni koji štite ljude koji žive s HIV-om i općenito znamo puno više o virusu. Unatoč tome, ljudi nastavljaju obolijevati od virusa jednostavno zbog toga što ne znaju kako zaštititi sebe i druge, a stigma i diskriminacija ostaju stvarnost za mnoge koji žive s ovim stanjem. Svjetski dan borbe protiv AIDS-a bitan je jer podsjeća javnost i vladu da HIV nije nestao te da je od egzistencijalne važnosti prikupljanje novca, povećanje svjesnosti, borba protiv predrasuda i u krajnjem slučaju poboljšanje obrazovanja.

Literatura

1. <https://www.worldaidsday.org/> (pristup 15. 12. 2021.)
2. <https://www.avert.org/professionals/history-hiv-aids/origin> (pristup 15. 12. 2021.)
3. <https://huhiv.hr/hiv-i-aids-u-hrvatskoj-europi-i-svijetu/> (pristup 15. 12. 2021.)
4. Mocroft, A. (2004). Starting highly active antiretroviral therapy: why, when and response to HAART. *Journal of Antimicrobial Chemotherapy*, 54(1), 10 – 13
5. <https://preventionaccess.org/> (pristup 15. 12. 2021.)
6. <https://www.theguardian.com/society/2021/nov/18/new-hiv-jabs-taken-two-months-apart-hailed-as-huge-step-forward> (15. 12. 2021.)
7. <https://theconversation.com/hiv-aids-vaccine-why-dont-we-have-one-after-37-years-when-we-have-several-for-covid-19-after-a-few-months-160690> (pristup 15. 12. 2021.)



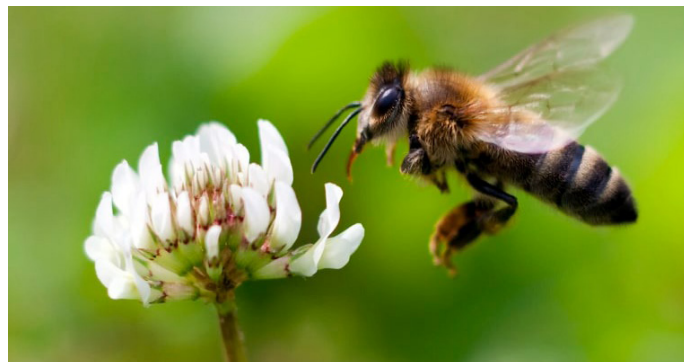
Izumiranje pčela

Petra Vukovinski (FKIT)

Industrija pčela jedna je od važnijih industrija za gospodarstvo. U poljoprivrednom poslu, primarna uloga pčela je oprašivanje biljaka. Znanstvenici su nedavno govorili o izumiranju kopnenih, kao i morskih životinja zbog onečišćenja, porasta temperature te gubitka staništa. Najveća opasnost s kojom se ljudi suočavaju jest gubitak globalne populacije pčela.

Naglim promjenama u iskorištavanju zemlje, urbanom razvoju te prekomjernom poljoprivredom, došlo je do značajnih gubitaka staništa pogodnih za oprašivače. Rigorozna posljedica je upravo gubitak izvora hrane, koji su pčelama potrebni za pravilnu i uravnoteženu prehranu. Trend u padu, tj. izumiranju pčela počeo je nakon Drugog svjetskog rata, kada su se izgubile ogromne livade divljeg cvijeća koje su bile stanište mnogih pčela.

Još jedan od razloga izumiranja pčela su klimatske promjene. Kako zime postaju toplije i vlažnije, godišnja doba se „isprepliću“ te postoji mogućnost da se neke životinjske vrste nađu na krivom mjestu u određeno vrijeme. Znanstvenici su počeli otkrivati da promjene klime mogu ometati ponašanje pčela u gniježđenju i pojavljivanju nakon zime. Posljedica nepravilnog pojavljiva-



Slika 1 – Oprašivanje

vanja godišnjih doba je i cvatnja biljaka na koje se pčele oslanjaju kao izvor hrane. Na primjer, stabla jabuke mogu cvati u različito vrijeme od aktivnosti pojavljivanja pčela. To bi značilo da pčele imaju manje hrane, a stabla se ne oprašuju niti daju plodove.

Čak i kada se pravilno upotrebljavaju, pesticidi mogu naštetiti pčelama. Znanstvenici su otkrili da izloženost pčela pesticidima može smanjiti sposobnost pčela za navigaciju i razmnožavanje. Pesticidi su dizajnirani da ubijaju neželjene štetočine, no njihova toksična svojstva i široka upotreba štete korisnim kukcima kao što su pčele. Neonikotinoidi su posebno štetna skupina pesticida štetnih za pčele. Kada se pčela hrani peludom ili nektarom koji sadrži pesticide, izravno se može

utjecati na njihov središnji živčani sustav. To se odražava na zadatke o kojima pčele ovise kako bi preživjele npr. hranjenje, razmnožavanje te potraga za staništem.

Izumiranje pčela nije samo lokalni problem, već i globalni zbog toga što dolazi do narušavanja prirodne ravnoteže u ekosustavu. Biljke mogu koristiti razne oprašivače, ali mnoge najuspješnije oprašuju pčele. Osim biljaka, mnoge životinje, poput ptica pčelarica, izgubile bi svoj plijen u slučaju izumiranja, a to bi također utjecalo na prirodne sustave i mreže hrane.

Što se tiče poljoprivrede, gubitak pčela dramatično bi promijenio ljudske prehrambene sustave, ali ne bi vjerojatno doveo do gladi. Većina ljudskih kalorija još uvijek dolazi iz žitarica, koje se oprašuju vjetrom i stoga na njih ne utječu pčelinje populacije. Mnogo voća i povrća, međutim, oprašuje se kukcima i ne bi se moglo uzgajati u tako velikim razmjerima, ili tako jeftino, bez pčela. Borovnice i trešnje, na primjer, oslanjaju se na pčele za do 90 % oprašivanja. Iako je ručno oprašivanje mogućnost za većinu usjeva voća i povrća, ono je nevjerojatno zahtjevno i skupo. Sićušni robotski oprašivači dronovi razvijeni su u Japanu, ali su i dalje pretjerano skupi za cijele voćnjake ili polja cvijeća.

Bez pčela, dostupnost i raznolikost svježih proizvoda znatno bi se smanjila, a ljudska prehrana bi patila.

Kako bi se riješio problem izumiranja pčela, ono što svatko od nas može napraviti je osigurati stanište pčela kod kuće. Predlaže se postavljanje vrtova za pčele u vlastitim domovima. Sadnjom biljaka koje su bogate polenom i nektarom osiguravate stanište i hranu za pčele. Još jedno od rješenja je izbjegavanje pesticida u vrtovima. Umjesto pesticida predlaže se uporaba organskih proizvoda i komposta kao pomoć obogaćivanja tla.

Drveće nije samo izvrstan izvor hrane za pčele već i bitno stanište. Lišće drveća i smola pružaju materijal za gniježđenje pčela. Uz rastuće krčenje šuma i razvoj,

možete pomoći u jačanju staništa pčela brigom za drveće i pridruživanjem projektima za sadnju drveća u vašem području, ukoliko oni postoje.

Kupujte lokalni i sirovi med od svojih lokalnih pčelara. Izbjegavajte med koji se prodaje na veliko ili u supermarketu osim ako niste sigurni u njegovo porijeklo i kvalitetu. Uvijek je najbolje kupiti na tržnici kako biste mogli upoznati svog pčelara te provjeriti izvornost meda, odnosno je li med prirodan ili možda patvoreni.

Što još možete napraviti jest kada za pčele. Čak i ako imate samo mali balkon, možete postaviti mali bazen za vodu za pčele tijekom toplog ljetnog dana. Stavite nekoliko kamenčića i plutajući čep na vodu kako se pčele ne bi utopile. Iako svakodnevno pčele izumiru, svatko od nas, pa makar malim i neznatnim promjenama može uvelike pomoći sitnim oprašivačima, pčelama.



Slika 2 – Kada za pčele

Literatura

1. <https://friendsoftheearth.uk/nature/what-are-causes-bee-decline> (pristup 03. 12. 2021.)
2. <https://www.britannica.com/story/what-causes-lunar-and-solar-eclipses> (pristup 8. 12. 2021.)
3. <https://thebeeconservancy.org/10-ways-to-save-the-bees/> (pristup 9. 12. 2021.)



Slika 3 – Izbor hrane sa pčelama (lijevo) i bez pčela (desno)



COP26 – kakvi su zaključci?

Dubravka Tavra (FKIT)

Nije nepoznata činjenica kako se posljednjih godina politika sve više „boja“ zelenom bojom. Gotovo pa nema strategije bilo koje političke opcije i vani i u Hrvatskoj koja u sebi ne sadrži dio posvećen zaštiti okoliša, a najčešće od svega se spominju klimatske promjene i borba protiv njih. Trend je postao takav, i za dobar odnos sa zajednicom svakako je plus biti ekološki osviješten.

Konferencije o klimatskim promjenama na europskoj i svjetskoj razini postale su nužne. Kyoto sporazum (prihvaćen 2005.), Stochlomska konvencija (prihvaćena 2001.), Pariški sporazum (prihvaćen 2016.) neke su od ključnih prekretnica u borbi protiv klimatskih promjena. Sada im se pridružuje i COP26, nedavno održana Konferencija Ujedinjenih naroda o klimatskim promjenama 2021., u Škotskoj, Glasgou.

Više od 100 zemalja pridružilo se SAD-u i koaliciji predvođenoj EU-om kako bi do 2030. smanjili emisiju metana za 30 % u odnosu na razinu iz 2020., što je značajan korak prema ograničavanju jednog od glavnih krivaca klimatskih promjena.

Naravno, bitno je za napomenuti kako se Kina, Rusija i Indija, koje pripadaju 10 najvećih proizvođača metana u svijetu, nisu pridružile ovoj koaliciji, ali Amerika ovaj put je.

Naglašavalo se i isključivanje upotrebe ugljena i fosilnih goriva. Za Hrvatsku je to bila jedna od značajnijih tema jer je donesena odluka o zatvaranju termoelektrane Plomin. Iako to lokalno stanovništvo smatra iznimnim udarom na gospodarstvo i, očekivano, protivi se toj odluci, to je praktički bila gotova odluka već par godina. No, Hrvatska bi trebala umjesto toga omogućiti nova radna mjesta u sektoru zaštite okoliša i novih, zelenih tehnologija.

Barem se tome nadamo.



Slika 1 – Konferencija u Glasgou

Među ključnim inicijativama bilo je sljedeće: povećanje sredstava za zemlje u razvoju s ciljem borbe protiv klimatskih promjena, pokretanje globalne obveze smanjenja emisija metana i dovršetak Pariškog pravilnika.

Znanstvenici su proglasili ovo desetljeće presudnim za borbu protiv globalnog zagrijavanja. Svakako se najviše naglašavao cilj da se zagrijavanje planeta do kraja stoljeća ograniči na 1,5 stupnjeva Celzijevih u odnosu na predindustrijsko doba. Granica je sada oštro postavljena, jer se već nagađalo da će se „olabaviti“ na 2 stupnja.

Na susretu u Glasgou zemlje su učinile niz koraka koji će dodatno usporiti emisije, poput pakta o smanjenju emisija metana te onaj o zaustavljanju deforestacije, koji je potpisao i Brazil, dom amazonijskih ‘pluća svijeta’. Postiglo se još odluka i dogovora s istim ciljem – ublažavanja klimatskih promjena. Iako je sve i dalje na dobrovoljnoj razini, čini se da pomaka zaista ima i da se ide u dobrom smjeru.

Literatura

- <https://ukcop26.org/> (pristup 16. 12. 2021.)
- <https://www.un.org/en/climatechange/cop26> (pristup 16. 12. 2021.)



ZNANSTVENIK

I Supravodljivost

Lucija Volf (FKIT)



Jeste li se ikada zapitali na kojem principu radi najbrži vlak na svijetu – Shanghai Maglev, koji može dostići brzinu od čak 600 km/h. U praktičnoj primjeni vlak postiže 350 km/h za 2 min, a nakon toga postignuta je maksimalna brzina rada od 431 km/h.¹

Ovaj japanski vlak radi na principu supravodljivih magneta, koji mogu proizvesti veća magnetska polja od svih nama poznatih „normalnih“ elektromagneta. Supravodljivi magneti koriste se i u medicini, u magnetskoj rezonanci (MR). Snažni „normalni“ magneti te jačine, rastopili bi metale uslijed razvijanja topline, a supravodiči su materijali kod kojih nema električnog otpora, odnosno ispod određene kritične temperature postižu stanje savršene vodljivosti. Drugim riječima, kada bi se primijenila električna struja na supravodljivu žicu povezanu u krug, ta struja bi nastavila beskonačno protjecati bez potrebe za ulaganjem dodatnog napona. Fenomen supravodljivosti prvi puta je uočio nizozemski znanstvenik Heike Kamerlingh Onnes, 1911. godine, koji je primijenio električnu struju kroz uzorak žive ohlađene na 4,2 K (–269 °C). Otkrio je da

električni otpor u živi potpuno nestaje, što znači da nema gubitka energije. Materijal koji postiže ova fenomenalna fizikalna svojstva, ispod svoje kritične temperature, nazvao je supravodič i 1913. godine dobio Nobelovu nagradu za fiziku zahvaljujući tom otkriću.²



Slika 1– Japanski Maglev vlak - najbrži vlak na svijetu¹

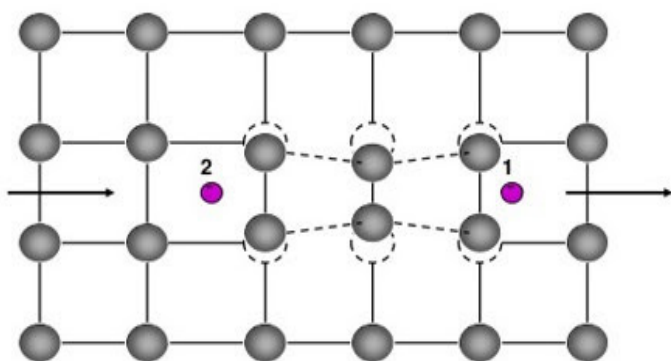
U normalnim uvjetima kada električna struja protječe materijalom koji nije ohlađen ispod svoje kritične temperature, elektroni se sudaraju sa atomima u kristalnoj rešetki i gube dio svoje energije što uzrokuje zagrijavanje materijala.

Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) teorija je 1957. godine po prvi puta objasnila fenomen supravodljivosti na semi mikroskopskoj razini. Na višim temperaturama, atomi kristalne rešetke metala sve više vibriraju uzrokujući sve više energetske gubitke uslijed sudara čestica, što rezultira sve većim otporom. Vibracije rešetke se smanjenjem temperature mogu smanjiti, no ne mogu se u potpunosti zaustaviti jer će prema Heisenbergovom principu neodređenosti, uvijek postojati određena količina gibanja (slika 2).^{2,3}

$$\Delta\chi\Delta\rho \geq \frac{\hbar}{2}$$

Slika 2 – Jednadžba Heisenbergovog principa neodređenosti³

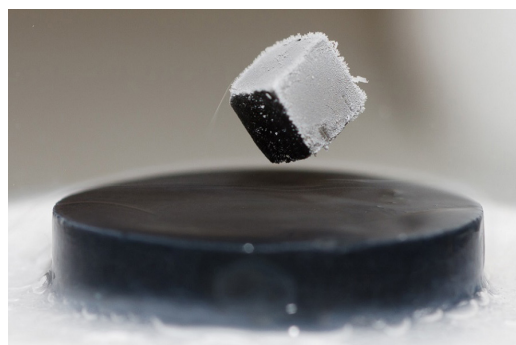
Cooper je otkrio da su elektroni u supravodiču, ako je postignuta dovoljno niska temperatura, grupirani u parove (engl. *Cooper pairs*) te da je njihovo kretanje u korelaciji. U supravodičima energetski procjep (engl. *band gap*) između valentne i vodljive vrpce predstavlja količinu energije potrebnu za razbijanje Cooper para. Kada se elektron kreće kroz kristalnu rešetku metala, privlači pozitivne ione, što rezultira područjem veće pozitivne gustoće naboja koja na sebe privlači još jedan elektron suprotnog spina. Elektroni pripadaju skupini fermiona, njihov spin može biti +1/2 ili -1/2 i prema Paulijevom principu isključenja dva elektrona ne mogu imati sve jednake kvantne brojeve. Međutim, prilikom formiranja Cooper para smatra se da dva elektrona suprotnog spina stvaraju „kompozitne bozone“, odnosno čestice sa cjelobrojnim spinom koje ne slijede Paulijev princip isključenja. Skup Cooper parova koji se nalaze u istom najnižem energetske stanju zove se Bose-Einsteinov kondenzat i može provoditi električnu struju uslijed negativnog naboja, ali ne može izgubiti energiju jer već okupira najnižu energetske razinu.^{4,5}



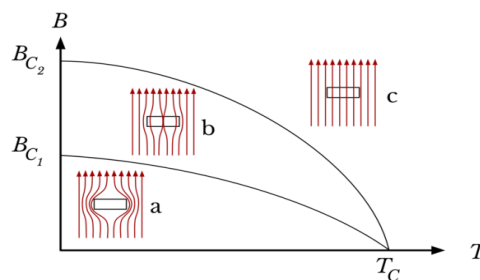
Slika 3 – Grafički prikaz Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) teorije i kretanje Cooper para⁴

Problem kod supravodiča jest što je temperatura za postizanje Bose-Einsteinovog kondenzata, za većinu materijala toliko niska da onemogućava njihovu široku primjenu. Godine 2020. postignuta je supravodljivost u C-S-H spoju na temperaturi od 15 °C, no ovaj eksperiment zahtijeva iznimno visoke tlakove od 267 GPa pa otežava uporabu u praktičnoj primjeni.⁶

Još jedno zanimljivo svojstvo supravodiča je Meissnerov učinak, odnosno izbacivanje magnetskog polja kada se ohladi ispod kritične temperature. Ukoliko se primjeni magnetsko polje, ono će podići supravodič i uzrokovati njegovu levitaciju (slika 4). Upravo ovo svojstvo omogućava njihovu primjenu u najbržem vlaku na svijetu.⁷



Slika 4 – Prikaz Meissnerovog učinka, donji materijal je supravodljiv metal ohlađen ispod kritične temperature pomoću tekućeg dušika, a gornji materijal koji levitira je magnet⁷



Slika 5 – Prikaz silnica magnetskog polja za supravodič tipa I (a), supravodič tipa II (b) i za materijal koji se ponaša kao normalan vodič (c)⁷

Trenutno je primjena supravodiča tipa I (niskotemperaturnih) i dalje ograničena zbog ekstremno niskih kritičnih temperatura, a svojstva supravodiča tipa II (visokotemperaturnih) se ne mogu objasniti pomoću BCS teorije, stoga i dalje ostaju misterij mnogim znanstvenicima.

Literatura

- <https://www.tsunagujapan.com/japans-new-maglev-shinkansen-bullet-train/> (pristup 16.12.2021.)
- <https://www.livescience.com/superconductor> (pristup 16.12.2021.)
- <https://www.britannica.com/science/BCS-theory> (pristup 16.12.2021.)
- <http://zoefact.com/assign/science/physics/about-bcs-theory.html> (pristup 16.12.2021.)
- <https://www.britannica.com/science/Bose-Einstein-condensate> (pristup 16.12.2021.)
- Elliot Snider, Nathan Dasenbrock-Gammon, Raymond McBride, Mathew Debessai, *Room-temperature superconductivity in a carbonaceous sulfur hydride*, *Nature*, 586, pages 373–377 (2020.)
- <http://www.supraconductivite.fr/en/index.php?p=supra-levitation-meissner> (pristup 16.12.2021.)
- <https://www.miniphysics.com/meissner-effect-art-of-levitation.html> (pristup 16.12.2021.)

Dizajn MAO inhibitora računalskim metodama; koja je uloga računalne kemije u razvoju novih lijekova?

Lucija Vrban (BioTech-Rijeka)

Kako računalni kemičari sudjeluju u procesu dizajna novih lijekova i koja je njihova snaga? Iako je računalna kemija grana kemije koja je već gotovo pola stoljeća neizostavan dio racionalnog dizajna lijekova, i dalje je njezina uloga u samom procesu mnogima nepoznanica. Cilj ovog članka je objasniti, korak po korak, proces dizajna novih lijekova računalskim metodama na realnom problemu enzima odgovornog, između ostalog, za metabolizam monoaminskih neurotransmitera.¹

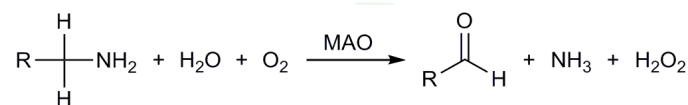
Monoamin-oksidaze (MAO) obitelji su flavoenzima odgovornih za metabolizam širokog spektra endogenih (monoaminski neurotransmiteri poput serotonina, dopamina, adrenalina i noradrenalina) i egzogenih monoamina (monoamini uneseni hranom poput tiramina). Brza inaktivacija monoaminskih neurotransmitera ključna je za održavanje sinaptičke funkcije te svaka trajna promjena u njihovom metabolizmu može dovesti do psihijatrijskih i neuroloških poremećaja. S obzirom na to da neurotransmiteri kontroliraju naše emocije, pažnju, kontrolu kognitivnih i motoričkih funkcija, njihova ravnoteža od esencijalne je važnosti za normalnu funkciju mozga i u konačnici cijelog organizma. Promijenjena funkcija MAO enzima u centralnom živčanom sustavu implicirana je u mnogim psihijatrijskim i neurološkim poremećajima uključujući depresiju, Parkinsonovu i Alzheimerovu bolest, shizofreniju, podložnost razvoju ovisnosti, poremećaju pažnje i prehrane, migrenama, paničnim poremećajima, različitim fobijama poput socijalne fobije i agorafobije te graničnog poremećaja ličnosti.¹

Starija životna dob je kod mnogih od navedenih poremećaja jedan od rizičnih faktora njihove incidencije, a s obzirom na to da je udio starije populacije u konstantom porastu zbog poboljšanih uvjeta života i pristupačnijeg javnog zdravstva, neurodegenerativne bolesti su u 2016. godini bile peti po redu globalni uzrok smrti. Svake tri sekunde u svijetu netko oboli od demencije, te je u 2020. godini više od 55 milijuna ljudi živjelo s njom. Ovaj broj će se udvostručiti svakih 20 godina, što rezultira brojkom od 78 milijuna u 2030. godini, odnosno 139 milijuna u 2050. godini. Ovakve alarmirajuće brojke ukazuju na nužnost razvika novih lijekova koji bi ciljali uzrok ili barem simptome neurodegenerativnih oboljenja.² Osim toga, najnovija istraživanja ukazuju da i neurološki simptomi koji prate SARS-CoV-19 infekciju imaju podlogu u poremećaju metabolizma neurotransmitera.³

Razvatak lijeka započinje identifikacijom biološkog sustava od interesa, a MAO enzim otkrila je još 1928. godine Mary Bernheim te je prvotno nazvan tiramin oksidaza. Kao i većina enzima zaduženih za obavljanje oksidativno-reduktivnih reakcija, nalazi se na vanjskoj membrani mitohondrija.¹

MAO enzim postoji u dvije izoforme u ljudskom tijelu; MAO A i MAO B. MAO A nalazi se u centralnom živčanom sustavu, gastrointestinalnom traktu, jetri, placenti i plućnom vaskularnom endotelu. MAO B se, s druge strane, većinski nalazi u centralnom živčanom sustavu i to u hipotalamusu, striatumu i globusu pallidusu. Štoviše, više od 80 % MAO enzima u mozgu B je izoforme. Izoforme dijele 70 % primarne aminokiselinske strukture, dok je 85 % aminokiselina slično, međutim njihova aktivna mjesta pokazuju različiti afinitet vezanja supstrata i inhibitora. Aktivno mjesto MAO B izoforme dvodijelno je, a sastoji se od ulazne šupljine i supstratne šupljine sveukupnog volumena približnog 800 Å³, dok je aktivno mjesto izoforme A jednodijelno, manjeg volumena približnog 550 Å³.⁴

MAO enzim oksidira monoaminske supstrate pritom stvarajući odgovarajući aldehid, amonijak (u slučaju tercijarnog amina) ili supstituiran amin (u slučaju sekundarnog amina) te vodikov peroksid prema jednadžbi prikazanoj na slici 1.



Slika 1 – Mehanizam oksidacijske katalize MAO B enzima⁵

Flavin adenin dinukleotid (FAD), kofaktor koji se nalazi u aktivnom mjestu MAO enzima, zaslužan je za katalitičku aktivnost enzima, pritom prelazeći u reduktivnu formu FADH₂. FAD je esencijalan za katalitičku aktivnost MAO enzima te je najpopularnija meta lijekova koji djeluju na MAO enzime. Katalitički mehanizam uključuje prijenos vodika sa supstrata na FAD u koraku koji određuje ukupnu brzinu reakcije, no priroda vodika koji prelazi tijekom desetljeća postala je kontroverzna tema. Nekoliko je mehanizama predloženo uključujući radikalski (prelazi H•), nukleofilni polarni mehanizam (prelazi H⁺) te hidridni mehanizam koji uključuje prijelaz hidrida (H⁻). Računalskim metodama dobiveni termodinamički i kinetički parametri hidridne apstrakcije vodika sa Cα supstrata na N5 atom FAD kofaktora enzima, predloženi od strane Vianella i sur., u izvrsnom su slaganju s eksperimentalno dobivenim rezultatima te predstavljaju najizgledniji katalitički mehanizam MAO enzima.⁴

Prevelika aktivnost MAO B enzima dovodi do stvaranja reaktivnih kisikovih vrsta koje uzrokuju mitohondrijalnu štetu koju prati oštećenje i disfunkcija



neurona, u konačnici rezultirajući neurodegenerativnim poremećajima. Zbog navedenog, lijekovi koji ciljaju MAO enzime ih inhibiraju, te se nazivaju MAO inhibitori (MAOI).

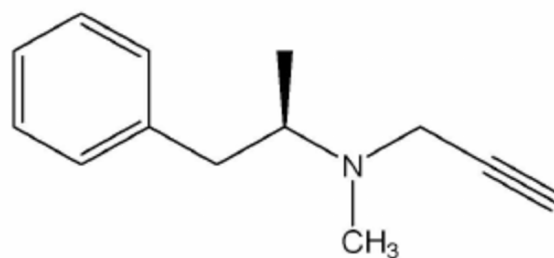
Kao što je slučaj kod mnogih znanstvenih otkrića, MAOI su otkriveni slučajno. Naime, izoniazid bio je lijek koji se koristio za liječenje tuberkuloze. Međutim, 1952. godine ustanovljeno je da su pacijenti koji su ujedno bolovali i od depresije imali olakšane simptome. Tada je prvi put prepoznat potencijal MAOI kao antidepresiva. Iako su prvi antidepresivi, iproniazid, te kasnije razvijeni fenelzin, pozitivno utjecali na simptome depresije, s vremenom su povučeni s tržišta zbog nefrotoksičnosti, hepatotoksičnosti i svoje neselektivne naravi. Naime, neselektivni ireverzibilni MAOI inhibiraju obje MAO izoforme dovodeći do nakupljanja egzogenih, hranom unesenih amina u tijelo poput tiramina iz vina, čokolade ili sira, što može dovesti do opasnih i potencijalno fatalnih nuspojava poput nesanice, nemirnosti, povišenog krvnog tlaka, intrakranijalnih krvarenja i "efekta sira" (engl. *cheese effect*) koji dovodi od hipertenzivne krize koja može rezultirati smrću.⁶

Razvitak MAOI je potom krenuo u smjeru selektivnih inhibitora za pojedinu izoformu te je 1996. godine na američko tržište pušten selegilin (poznat i kao L-deprenil), potom 2006. godine razagilin.⁷

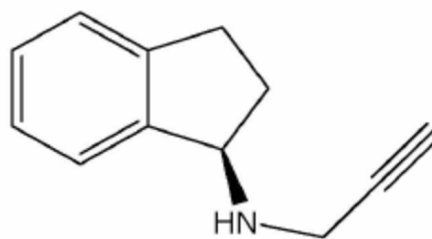
Oba inhibitora selektivni su ireverzibilni inhibitori MAO B temeljeni na katalitičkom mehanizmu, te im se struktura može razdijeliti na propagilaminsku jezgru bogatu elektronima, etilni, aaminski te aromatski dio. Selegilin i razagilin stvaraju kovalentni adukt s FAD kofaktorom onemogućujući daljnju katalitičku aktivnost enzima. Oba inhibitora djeluju dvojako; 1. produljuju poluživot dopamina u nigrostrijatalnom putu i 2. sprječavaju nastanak oksidativne štete degradacijom monoamina. Na taj način simptomi deplecije dopamina ublažuju se i poboljšava se kvaliteta života bolesnika. Danas se češće koristi razagilin zbog manjeg broja nuspojava koje izaziva. Naime, selegilin se u organizmu metabolizira u L-metamfetamin, potom u L-amfetamin koji inhibira transport dopamina vezikulama što dovodi do autooksidacije dopamina u citoplazmi i dodatnog izvora reaktivnih kisikovih vrsta. Zbog amfetaminskog metabolita, selegilin uzrokuje nesanicu, smanjeni apetit i nemirnost, a u većim dozama gubi selektivnost. Razagilin se metabolizira u 1-aminoindan koji djeluje neuroprotektivno, te ima slične nuspojave poput selegilina, ali puno manjeg intenziteta. Međutim, njegovo vezanje nije toliko farmakodinamski povoljno kao vezanje selegilina. U visokim dozama, oba lijeka inhibiraju i MAO A, stoga je i dalje potrebna posebna prehrana tijekom uzimanja ovih lijekova.¹

Zbog velike prevalencije i konstantnog rasta broja oboljelih od neurodegenerativnih bolesti postoji pritisak za razvitkom novih selektivnih, ireverzibilnih i mehanizmom temeljnih inhibitora MAO enzima boljeg farmakološkog profila. Ovom problematikom bavi se znanstvena grupa Laboratorija za računalni dizajn i

sintezu funkcionalnih materijala na Institutu Ruder Bošković pod vodstvom dr. sc. Roberta Vianella, u kojoj izrađujem diplomski rad.



Selegiline (Deprenyl)



Rasagiline

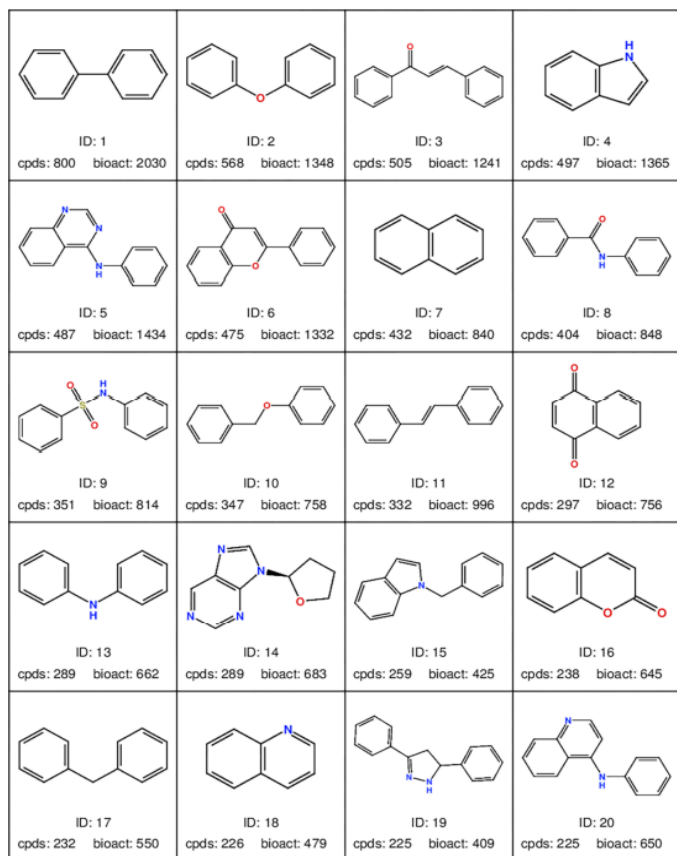
Slika 2 – Strukture propagilaminskih inhibitora MAO B enzima; selegilina i razagilina¹

Često viđen pristup razvoja novih selektivnih ireverzibilnih inhibitora MAO enzima uključuje mijenjanje farmakofornih skupina na već postojećim inhibitorima poput klogilina ili razagilina. Međutim, zbog neuspješnosti ovog pristupa u smislu plasiranja boljih inhibitora naspram postojećih, za ovaj znanstveni problem usvojen je pristup koji kreće od hidrofobnih, aromatskih komponenti koje će potom biti spajane s propagilaminskom jezgrom; farmakoforom koji se pokazao kao esencijalan dio najnovije generacije inhibitora MAO B.⁸

Aktivno mjesto MAO B izrazito je hidrofobnog karaktera te je prepoznatljivo po tzv. 'aromatskom kavezu' kojeg čine dva tirozina i flavinski kofaktor FAD. Dakle, potrebno je bilo pronaći aromatske komponente koje bi hidrofobno interagirale s aromatskim prstenovima tirozina.⁴

Odabiru hidrofobnih komponenti od velike koristi bio je rad u kojem je na osnovi vremenski ovisne statističke analize određena popularnost temeljnih struktura (engl. *scaffold*).⁹ Temeljna struktura osnovni je dio molekule u seriji molekula u čijoj se strukturi pojavljuje. Parametri koji su uzeti u obzir za određivanje popularnosti broj su molekula koji sadržavaju određenu strukturu, broj različitih biotestova kojima su članovi pojedine strukture podvrgnuti i medijan faktora utjecaja časopisa u kojima su molekule s određenom strukturom objavljene. Osim popularnosti, proučeni su i PAINS (engl. *pan-assay interference compounds*) trendovi i trendovi

u bioaktivnosti. Spomenute analize su ukazale na 20 aromatskih kostura koji su bili korišteni kao aromatski dijelovi u dizajnu novih inhibitora MAO B enzima.



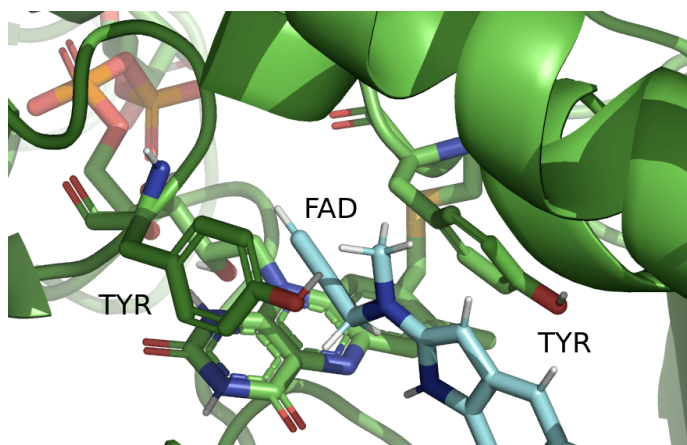
Slika 3 – Prikaz 20 temeljnih struktura koje su imale najveći kumulativni broj pojavljivanja u ChEMBL20 bazi molekula⁹

Početna točka bila je struktura MAO B enzima visoke rezolucije (1,7 Å) u kompleksu s *N*-metil-1-aminoindanom skinuta s PDB-a (engl. *Protein Data Bank*). Tijekom predprocesiranja uklonjene su sve molekule vode i molekule koje nisu dio proteina, te su dodani vodici koristeći *dock prep* dodatak u Chimeri.

Nakon odabira hidrofobnih aromatskih kostura, provedeno je skriptom bazirano grupno molekulsko pristajanje (engl. *batch molecular docking*) na MAO B enzim. Molekulsko pristajanje bavi se opisom načina kako dvije molekularne strukture međusobno pristaju, u ovom slučaju kako i ako aromatski prstenovi probijaju put sve do MAO B aktivnog mjesta. Put do aktivnog mjesta pronašli su kosturi 3, 4, 9, 10, 11, 16, 17, 19 i 20 prikazani na Slici 4. Osim prikazanih kostura, put do aktivnog mjesta pronašao je i dodatni prsten identičan kosturu 16 osim u izboru heteroatoma; kisik unutar prstena zamijenjen je dušikom. Nakon provedenog molekuskog pristajanja samih kostura, provedena je nadogradnja kostura s propagilaminskom jezgrom, dijelom koji je temeljna struktura već postojećih inhibitora, koristeći etilensku poveznicu (engl. *linker*) u programu PyMOL. Potom je na svakom slobodnom mjestu na kosturu prstena nadodana ili metilna ($-CH_3$) skupina ili atom vodika ($-H$) te je ponovljena ista procedura. Na temelju orijentacije molekula unutar 'aromatskog kaveza' i vrijednosti slobodne Gibbsove energije vezanja, dva krucijalna

faktora u procjenjivanju efektivnosti pristajanja, izbor je sužen na sveukupno 7 različitih liganada. Identična procedura provedena je za selegilin i razagilin kao kontrolnih molekula.

U drugoj fazi odabrani ligandi su predprocesirani koristeći AmberTools21 te su podvrgnuti simulaciji molekularne dinamike (MD) koristeći softverski paket GROMACS. Molekulsko pristajanje ne opisuje gibanje molekula i proteina od interesa pri fiziološkim uvjetima te se MD metode koriste kako bi se takvo gibanje opisalo. Sustav liganda s kartezijskim koordinatama dobivenim molekulskim pristajanjem i proteina stavljen je u kockastu simulacijsku kutiju dimenzija otprilike 10 Å ispunjenu molekulama vode i 10 iona natrija kako bi sustav bio nabojem neutralan. Provedena je minimizacija sustava koristeći algoritam strmog spuštanja (engl. *steepest descent*), potom ekvilibracija koristeći NVT ansambl gdje je uvedena konstanta temperatura od 310 K i NPT ansambl gdje je uveden konstantan tlak u iznosu 1 atm koristeći integrator žabe u skoku (engl. *leap-frog*) u trajanju od 250 ps. Svim teškim atomima sustava gibanje je tijekom minimizacije i ekvilibracije bilo ograničeno kako bi se minimizacija i ekvilibracija lakše provele te potom potpuno relaksirano u preostalim fazama simulacije. Minimizacija i ekvilibracija sustava provode se s ciljem osiguravanja da je sistem od interesa simuliran bez nepravilnih geometrija, neprirodnih kuteva ili energija kako bi bio što sličniji opisu prirodnog sustava. Konačno, provedene su MD simulacije u trajanju od 300 ns koristeći superračunalo Bura, što je razuman vremenski razred za opis vezanja liganda na aktivno mjesto i popratnih promjena unutar aktivnog mjesta proteina. MD simulacije potom su vizualizirane u programu VMD kako bi se provjerio položaj i orijentacija liganada na aktivnom mjestu te eliminirali ligandi koji su izašli iz samog veznog mjesta, s obzirom da je to indicacija neodgovarajućeg afiniteta naspram veznog mjesta. Nakon sprovedene MD simulacije, evaluirana je slobodna ukupna Gibbsova energija vezanja te doprinos svake pojedine aminokiseline proteina na vezanje liganada pomoću *g_mmpbsa* paketa. Informacija o doprinosu svake aminokiseline vezanju izrazito je vrijedna informacija kod modifikacije liganada, ali i odabira aminokiselina za daljnju kvantno-mehaničku analizu. Na temelju spomenute analize, izbor potencijalnih inhibitora sužen je na samo tri liganda; dvije varijacije liganada nastalog od kostura 4 i jednu varijaciju dodatno analiziranog kostura. Identična procedura provedena je za kontrolne spojeve; selegilin i razagilin. Navedeni ligandi imali su optimalni položaj i orijentaciju, usporedivu ili bolju energiju vezanja od kontrola te prvih 10 identičnih aminokiselina po doprinosu energiji vezanja kao kod kontrolnih spojeva. Kod svakog liganda i kontrola, najveći doprinos energiji vezanja imao je, očekivano, flavinski kofaktor FAD. Usporedive energije vezanja s kontrolama i doprinosi aminokiselina potvrda su točnosti i preciznosti korištene metodologije. Također, dobivene relativne razlike energija vezanja selegilina i razagilina skoro pa savršeno odgovaraju eksperimentalno dobivenim vrijednostima. Nakon MD simulacija, dobiven je uvid u termodinamički profil vezanja kandidata inhibitora.

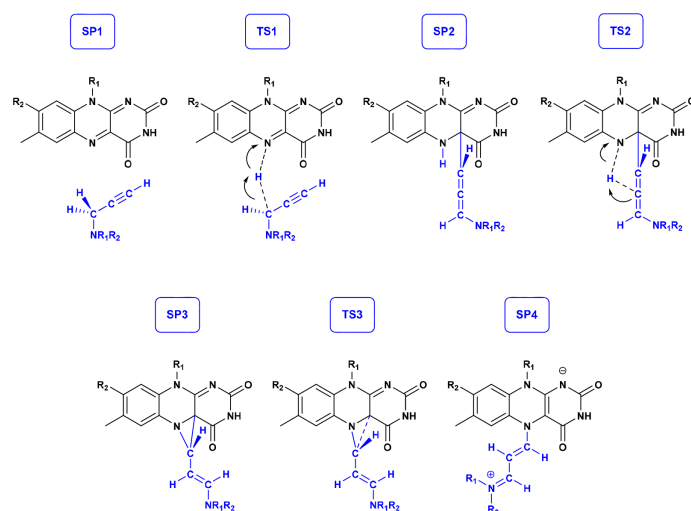


Slika 4 – Aromatski kavez aktivnog mjesta MAO B enzima s vezanim novo-dizajniranim ligandom vizualiziran u program PyMOL

Završna faza bit će kvantno-mehanički (QM) izračun kemijske reaktivnosti odabranih liganada u klasteru aminokiselina koje najviše doprinose vezanju koristeći softverski paket Gaussian i superračunalo Isabella. Fokus će biti stavljen, u kontrastu na MD simulacije, na samo aktivno mjesto enzima kako bi se поближе objasnio mehanizam inhibicije flavinskog kofaktora pomoću novo-dizajniranih kandidata inhibitora te dobili odgovarajući kinetički i termodinamički parametri reakcije inaktivacije. Upotrijebljeni klaster sastoji se od liganda, FAD-a i odabranih aminokiselina koje se nalaze u neposrednoj blizini flavinskog kofaktora, što ukupno daje oko 180 atoma za svaki izračun. Predprocesiranje odvit će se u programu Avogadro u kojem se terminalne amino i karboksilne skupine odabranih aminokiselina zamjenjuju s vodikom kako bi se fizički odvojile od ostatka proteina. Korišteni DFT (engl. *density functional theory*) funkcional za optimizaciju geometrija i izračun frekvencija gibanja bit će hibridni M062X, a bazni set 6-31G(d), što predstavlja razumni kompromis između željene točnosti i mogućnosti provedivosti računa s obzirom na veličinu promatranog sustava. Kako bi se u obzir uzele i elektrostatske interakcije na većim udaljenostima te polarizacijski efekt ostatka proteina, korišten je CPCM model (engl. *conductor-like polarisable continuum model*) s vrijednosti dielektrične konstante 4 zbog visoke hidrofobnosti aktivnog mjesta, dok drugi parametri odgovaraju čistoj vodi.

Procedura se sastoji od prvotne optimizacije klastera te identifikacije najpovoljnije geometrije reaktanata (tj. geometrije s najnižom ukupnom energijom), potom približavanja atoma vodika s propagilaminske jezgre na reaktivni N5 dušik na FAD-u kako bi se dobio što bolji prijedlog prijelaznog stanja za tu reakciju. Slijedi optimizacija i potvrda dobivenog prijelaznog stanja provjeravajući postojanje negativne, imaginarne vibracijske frekvencije, koja opisuje gibanje spomenutog vodika s inhibitora na flavinski kofaktor te daje potvrdu točno pronađenog prijedloga prijelaznog stanja. Potom se provodi IRC (engl. *intrinsic reaction coordinate*)

procedura u smjeru reaktanata i produkata kojoj je cilj pronaći put od prijelaznog stanja koje predstavlja točku s najvišom energijom na reakcijskom putu od reaktanata do produkata pojedine reakcije. Navedeni postupak ponavlja se za sve reakcijske korake koji vode od inhibitora vezanih u aktivnom mjestu enzima (reakcijski kompleks) do inaktiviranog enzima kroz ostvarenu kovalentnu vezu inhibitor-FAD (koveleentni adukt). Dobiveni rezultati služe da se računalnim metodama definira potpuni reakcijski mehanizam inhibicije MAO B enzima kandidatima inhibitora. Slijedi usporedba energija reaktanata, prijelaznog stanja, svih identificiranih intermedijera i produkata te računanja potrebne kinetičke energije aktivacije, koja daje informaciju o zahtjevnosti reakcije, te termodinamičke reakcijske energije, koja ukazuje na izvedivost reakcije u fiziološkim uvjetima.



Slika 5 – Mehanizam inhibicije MAO B enzima propagilaminskim inhibitorom¹

Usporedbom termodinamičkih i kinetičkih parametara analiziranih liganada i kontrolnih molekula razagilina i selegilina, cilj je dobiti inhibitor koji je značajno bolji od postojećih lijekova. Reverzibilni inhibitori za sada ne pokazuju obećavajuće rezultate *in vivo*, te je naglasak i dalje na ireverzibilnim, mehanizmom baziranim selektivnim inhibitorima jer upravo oni pokazuju najveću specifičnost u inhibiciji i samim time smanjuju mogućnost pojave nuspojava kao što je bio slučaj kod neselektivnih inhibitora. Također, što je inhibitor specifičniji, odnosno selektivniji, postoji manja šansa od gubitka selektivnosti povećanjem terapijske doze.¹

Snaga računalne kemije nedvojbeno je u procesu razvitka novih lijekova u smislu ubrzanja samog procesa, predviđanja vezanja potencijalnih lijekova na metu od interesa i identifikacije potencijalnih kandidata s odgovarajućom farmakološkom aktivnosti. Rezultati računalnih metoda znatno pomažu u svim fazama dizajna novih lijekova (od identifikacije receptora ili enzima do dizajna i optimizacije potencijalnih kandidata) te ubrzavaju i smanjuju trošak razvoja novih lijekova. Sam

značaj računalne kemije u ovom polju dodatno se pojačao zadnjih desetljeća zbog ubrzanog razvoja algoritama i računalne arhitekture koja omogućuje sve kompleksnije

i točnije izračune u realnom vremenu. Budućnost racionalnog dizajna novih lijekova bit će obilježena utjecajem i doprinosima računalne kemije.

Literatura

1. T. Tandarić, *Računalno istraživanje mehanizma ireverzibilne inhibicije enzima monoamin-oksidge B* (2021) (November 11, 2021)
2. ADI - Dementia statistics (pristup 14.12.2021)
3. L. Hok, H. Rimac, J. Mavri, R. Vianello, *COVID-19 Infection and Neurodegeneration: A Potential Link Revealed by Computational Simulations*. 27th Croatian Meeting of Chemists and Chemical Engineers (27HSKIKI) // Book of Abstracts (2021)
4. R. Vianello, J. Mavri, *EVB simulation of the catalytic activity of monoamine oxidases: from chemical physics to neurodegeneration. Theory and applications of the empirical valence bond approach: from physical chemistry to chemical biology*, 199–231 (2017.)
5. T. Tandarić, R. Vianello, *Computational Insight into the Mechanism of the Irreversible Inhibition of Monoamine Oxidase Enzymes by the Antiparkinsonian Propargylamine Inhibitors Rasagiline and Selegiline*. ACS Chem. Neurosci. 10, 3532–3542 (2019.)
6. C. T. Ramachandrai, N. Subramanyam, K. J. Bar, G. Baker, V. K. Yeragani, *Antidepressants: From MAOIs to SSRIs and more*. Indian J Psychiatry 53, 180–182 (2011.)
7. D. S. Knudsen Gerber, *Selegiline and rasagiline: twins or distant cousins?* Consult Pharm 26, 48–51 (2011.)
8. F. T. Zindo, J. Joubert, S. F. Malan, *Propargylamine as functional moiety in the design of multifunctional drugs for neurodegenerative disorders: MAO inhibition and beyond*. Future Med Chem 7, 609–629 (2015).
9. B. Zdrzil, R. Guha, *The Rise and Fall of a Scaffold: A Trend Analysis of Scaffolds in the Medicinal Chemistry Literature*. J Med Chem 61, 4688–4703 (2018).

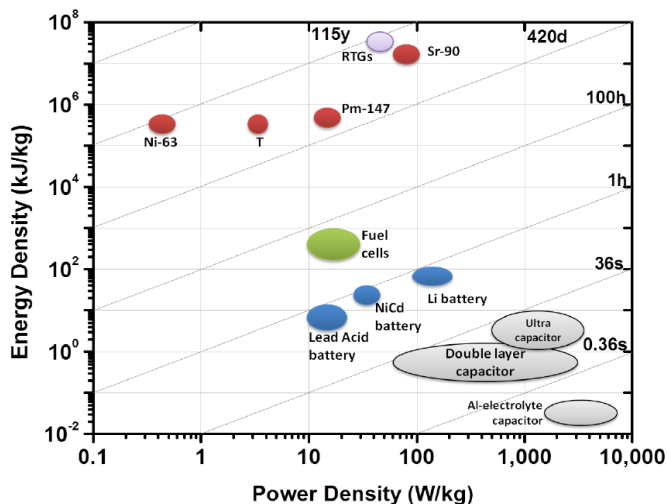


“Nuklearne (atomske) baterije”

Hrvoje Tašner (FKIT)

Atomske baterije su uređaji koji pretvaraju energiju oslobođenu radioaktivnim raspadom u električnu energiju. Za razliku od nuklearnih reaktora kod kojih dolazi do kontrolirane lančane reakcije, nuklearne baterije iskorištavaju prirodni kontinuirani raspad radioaktivnog materijala za proizvodnju električne energije. Pritom se iskorištava energija oslobođena alfa i beta raspadom.¹

Na razvoju atomskih baterija radi se posljednjih stotinjak godina. Jedan od glavnih razloga za njihov razvoj je dugovječnost ovog tipa izvora energije. Pošto vijek trajanja atomske baterije ovisi samo o vremenu poluzivota primijenjenog radioaktivnog materijala, životni vijek nuklearnih baterija broji se u desetljećima. Osim dugo radnog vijeka gustoća energije atomskih baterija veća je od tradicionalnih elektrokemijskih pretvornika energije. Međutim, gustoća snage je lošija od elektrokemijskih izvora energije. Nadalje, učinkovitost pretvorbe energije je razmjerno loša. Prosječno iskorištenje pretvorbe energije je oko 10 %, no ono varira ovisno o tipu atomske baterije. Velika prednost atomskih baterija je mogućnost rada u veoma različitim i izazovnim okolišnim uvjetima te u širokom rasponu temperatura. Primjerice, atomske baterije mogu se koristiti i u vakuumu svemira ali i u okolišu pod visokim tlakom poput dna oceana. Atomske baterije praktičke su i sa strane zaštite okoliša. Naime, kao izvor energije atomskih baterija može se primijeniti iskorišteno nuklearno gorivo iz nuklearnih elektrana. Iskorišteno gorivo je radioaktivno što ga čini problematičnim za zbrinjavanje. Primjenom iskorištenog goriva u atomskim baterijama rješava se problem



Slika 1 – Usporedba gustoće energije i snage atomskih baterija te ostalih elektrokemijskih pretvornika energije²

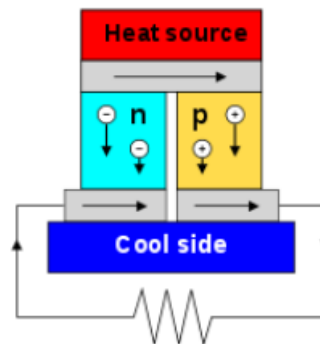
zbrinjavanja iskorištenog goriva te se dobiva dodatna količina energije.

S obzirom na način pretvorbe energije radioaktivnog raspada u električnu energiju nuklearne baterije dijele se na termalne pretvornike i netermalne pretvornike. Netermalne atomske baterije još se dijele na pretvornike s direktnom izvorom naboja, pretvornike s direktnom pretvorbom te pretvornike s indirektnom pretvorbom.²

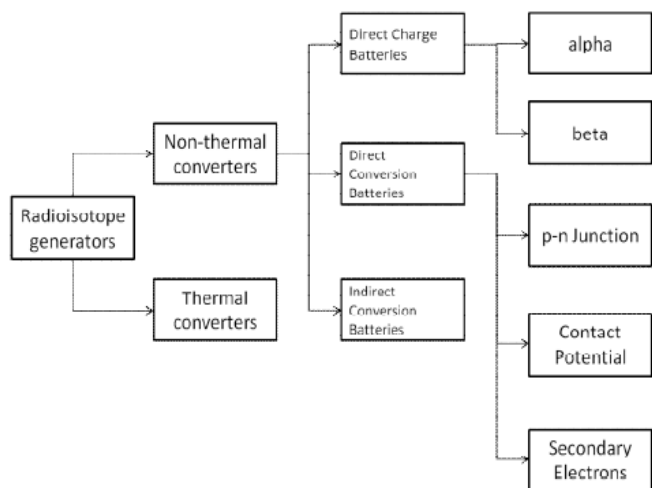
Radioizotopni termoelektrični generator (RTG) koristi termočlanak za proizvodnju električne energije. Ovo su jednostavni uređaji koji se sastoje od radioaktivnog goriva kao izvora topline i termočlanka koji toplinu pretvara u električnu energiju. U termočlanku do toka struje dolazi zbog razlike u temperaturi krajeva članka. Zagrijavanjem jedne strane termočlanka atomi i elektroni



na vrućoj strani članka imaju više energije nego na hladnoj strani članka. Atomi su čvrsto vezani u kristalnoj rešetci te se samo vibriraju u njoj, dok su elektroni vodičkih i poluvodičkih materijala slobodni te se mogu kretati kroz kristalnu rešetku. Zbog toga elektroni s više energije napuštaju vrući kraj članka te se kreću prema hladnom kraju gdje se nakupljaju. Time dolazi do razdvajanja naboja odnosno do pojave razlike potencijala između vrućeg i hladnog dijela članka. Spajanjem članka na vanjski strujni krug dolazi do toka struje.^{3,4}



Slika 3 – Shema termočlanka načinjenog od n- i p-tipa poluvodiča⁴

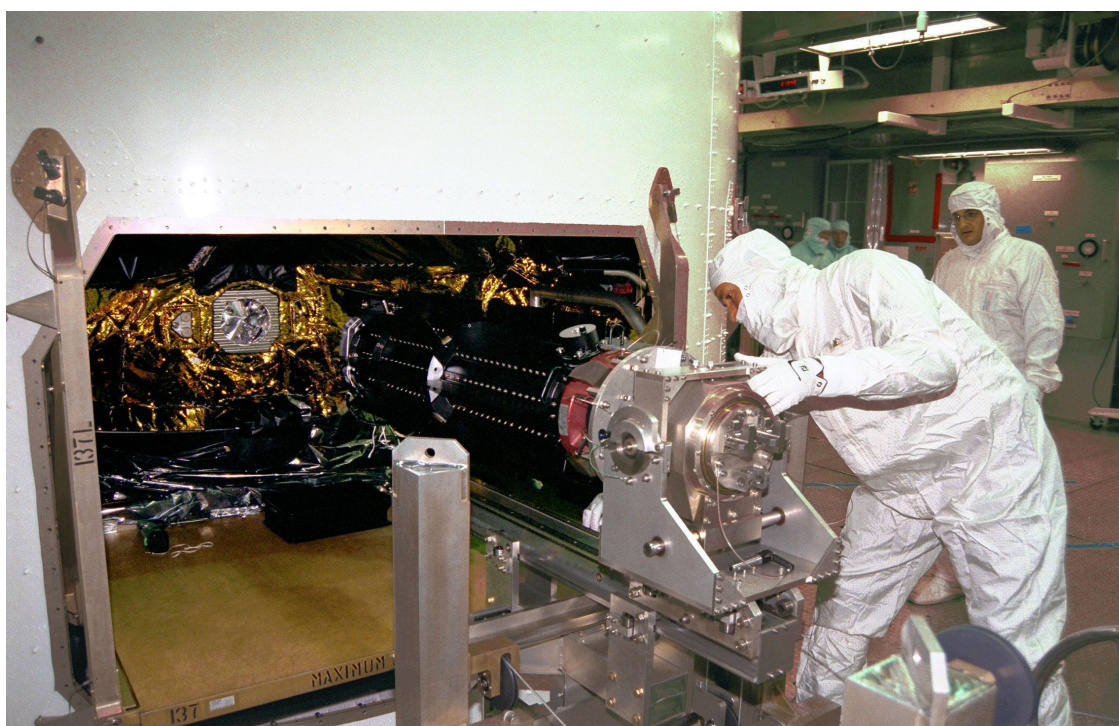


Slika 2 – Podjela atomskih baterija³

Odličan primjer koji dokazuje pouzdanosti RTG-a su svemirske letjelice Voyager I i II koje preko 40 godina održavaju komunikaciju sa Zemljom i šalju podatke o dubokom svemiru. Također, posljednji NASA-in rover na Marsu Perseverance pogonjen je RTG-om koji proizvodi

110 W električne i 2000 W toplinske energije. Najkraći očekivani životni vijek Curiosity-a je 14 godina.

Kod indirektnih pretvornika, alfa i beta čestice nastale radioaktivnim raspadom pogadaju radioluminescentni materijal poput fosfora. Kada alfa ili beta čestice pogode radioluminescentni materijal dolazi do otpuštanja fotona te nastali fotoni zatim gađaju fotonaponski članak te konačno dobivamo napon. Pošto je količina nastalih fotona razmjerno mala potrebno je koristiti posebne fotonaponske članke koji rade pri niskom intenzitetu svijetla. Također, spektar fotona koji nastaju pobudom radioluminescentnog materijala treba odgovarati apsorpcijskom spektru materijala fotočlanka. Fotočlanci za atomske baterije izrađeni su od poluvodičkih materijala poput GaP, GaAs, AlGaAs i drugih. U posljednje vrijeme radi se na novim radioluminescentnim materijalima mnogi od kojih su nanostrukturirani. Nedostatak ovog tipa atomske baterije je nisko iskorištenje od samo 2 %. Međutim teorijsko iskorištenje je otprilike 25 % stoga postoji mnogo mogućnosti za napredak.^{4,5}



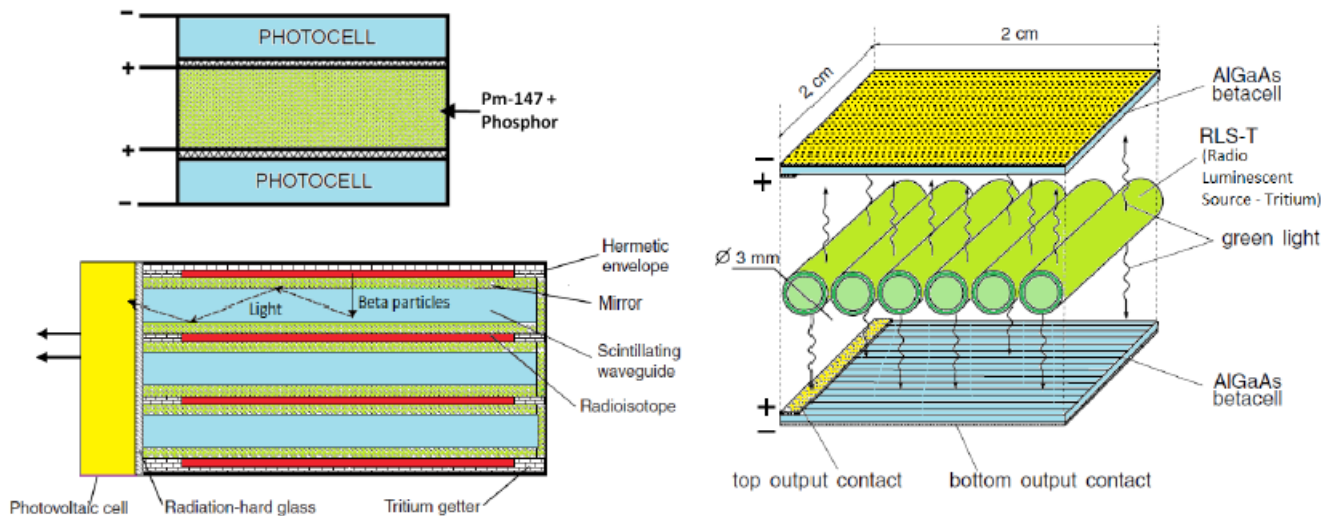
Slika 4 – NASA-in radioizotopni termoelektrični generator⁵

Kod direktnih pretvornika čestice nastale radioaktivnim raspadom izravno se iskorištavaju za dobivanje napona. Za to se koriste metode betavoltaičkog efekta, razlike potencijala na kontaktu kao i sekundarne emisije s ozračene površine. Betavoltaički princip je sličan fotovoltaičkom efektu. Kod fotovoltaičkog efekta dolazi do pojave napona uzrokovane apsorpcijom fotona u poluvodičkom članku dok se kod betavoltaičkom beta čestice, odnosno elektroni nastali radioaktivnim raspadom, pogađaju poluvodički članak pri čemu dolazi do pojave napona. Kao i kod indirektnih pretvornika do sada su eksperimentalno postignute niske učinkovitosti, no potencijal za unaprjeđenje je velik. Primjena nanostrukturiranih materijal obećavaju poboljšanje učinkovitosti pretvorbe. Jedno od područja primjene gdje su se betavoltaički članci pokazuju izniman potencijal su *on-chip* baterije dugo životnog vijeka.⁶

Pretvornici i direktnim izvorom naboja iskorištavaju alfa i beta čestice nastale radioaktivnim raspadom za dobivanje električne struje bez pobuđivanja poluvodičkog elementa ili radioluminescentnog materijala. Prva atomska baterija koju je Moseley demonstrirao jeo 1913. bila je upravo ovog tipa. Moseleyva baterija sastojala se od metalne sfere unutar koje je bio smješten radioaktivni materijal te sfera i radioaktivni materijal nisu bili u električnom kontaktu. Nabijene čestice nastale radioaktivnim raspadom pogađale se metalnu sferu te

je došlo do pojave razlike potencijala i struje. Moseleyva baterija mogla je generirati 150 kV napona pri 0,01 nA. Dobivena struje bila je u praktičnom smislu zanemariva, no ovaj pokus demonstrirao je mogućnost dobivanja električne energije iz radioaktivnih materijala bez lančane reakcije. Pretvornici s direktnim izvorom naboja ne mogu ostvariti struju iskoristivu za makroskopsku primjenu, ali je dobivena struja dovoljna za pogonjenje MEM (mikro elektromehaničkih) sustava. MEM-ovi su već sada iznimno rašireni u svakodnevnoj uporabi primjerice kao akcelerometri u pametnim telefonima. Uparivanje atomske baterije s otvara brojne nove mogućnosti za razvoj MEM-ova i njihovu još širu primjenu.⁷

Iako su atomske baterije poznate više od 100 godina njihov razvoj i primjena bila je ograničena tehnološkim razvojem ostalih tehnologija potrebnih za njihovu izradu i primjenu. To više nije slučaj te na razvoju i komercijalizaciji atomskih baterija u posljednje vrijeme vrlo aktivno radi. Pouzdanost atomskih baterija dokazana je na primjeru RTG-a koji su tehnički najmanje zahtjevni tip atomske baterije. Ova tehnologija nudi potencijalno rješenje za zbrinjavanje i naknadno iskorištavanje radioaktivnog otpada. Dugotrajnost i robusnost nuklearnih baterija čini ih savršenima kao izvor energije izoliranim lokacija i u okolišnim zahtjevnim okolišni uvjetima.⁸



Slika 5 – (gore lijevo) Shema atomske baterije s indirektnom pretvorbom s radioizotopom Pm-147 te fosforom kao radioluminescentnim materijalom. (desno) Shema članka kod kojeg su radioluminescentni izvor nanocjevčice punjene tricijem. (dolje lijevo) Shema članka s vodičem valova za povećanje iskorištenja emitirane svjetlosti.⁷

Literatura

1. *Atomic Batteries: Energy from Radioactivity*, Suhas Kumar, Department of Electrical Engineering, Stanford University, Stanford, CA 94305, USA, 2015 DOI:10.4172/2325-9809.1000144
2. <http://171.67.100.116/courses/2017/ph241/park-j1/> (pristup 19.12.2021.)
3. *Nuclear battery: a source of environmentally friendly energy*, Olukayode Lawrence Ayodele, Kazeem Oladele Sanusi, Mohamed Tariq Kahn, Cape Peninsula University of Technology, Cape Town, South Africa, 2019 DOI 10.1108/JEDT-02-2017-0011
4. Furlong, Richard R.; Wahlquist, Earl J. (1999). "U.S. space missions using radioisotope power systems" (PDF). *Nuclear News*. 42 (4): 26–34
5. <http://large.stanford.edu/courses/2013/ph241/jiang1/> (pristup 19.12.2021.)
6. <https://www.edn.com/thermocouples-simple-but-misunderstood/> (pristup 19.12.2021.)
7. Pollock, Daniel D. (1991). *Thermocouples: Theory and Properties*. CRC Press. pp. 249–. ISBN 978-0-8493-4243-1.
8. "Mars Exploration: Radioisotope Power and Heating for Mars Surface Exploration" (PDF). NASA/JPL. 18 April 2006. Retrieved 7 September 2009.



BOJE INŽENJERSTVA

Koncentrirana solarna energija (concentrated solar power)

Luka Marijan Alešković(KTF)

„Zrcalo, zrcalo, prijatelju moj. Tko je najveći izvor energije u sustavu mom?“, Sunce.

Sunčeva energija koja dostigne Zemlju u razdoblju od jednog sata je veća od godišnje potrošnje energije cijelog svijeta!¹ Zašto onda ne bismo još više koristili tu „besplatnu“ energiju? Ako bi se samo 1 % pustinje Sahare iskoristilo za CSP (engl. *Concentrated solar power*) elektranu, to bi bilo dovoljno za opskrbu energije cijelog svijeta.²

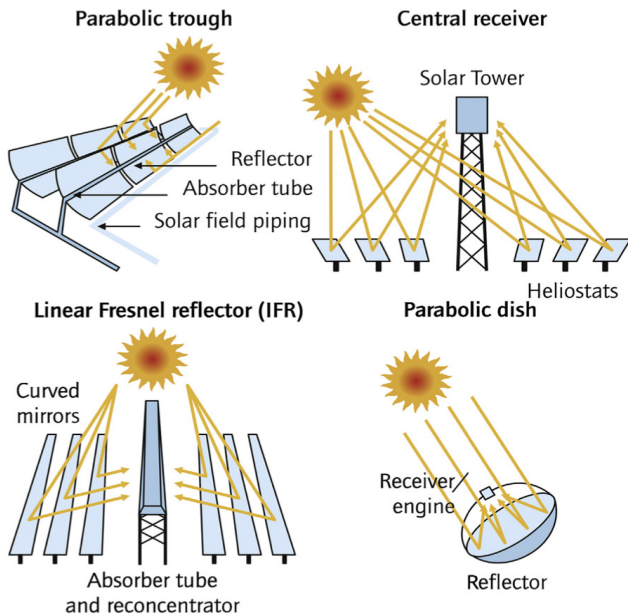
Svi smo čuli za solarne članke, na tržištu su već preko 40 godina i njihova cijena pada. Kod solarnih članaka nailazimo na drugi problem, a to je pohrana energije. Solarni članci proizvode električnu energiju sve dok Sunčeva svjetlost dopijeva do Zemljine površine. U slučaju kada potražnja



električne struje nije velika, višak energije se pohranjuje u baterijama. Danas se solarni članci najčešće kombiniraju s litij-ionskim baterijama. Međutim, pohrana energije u obliku topline je jeftiniji i učinkovitiji izbor od konvencionalnih električnih baterija. Također, rudarenje litija štetno je za okoliš. CSP tehnologija nudi pohranu energije u obliku topline.

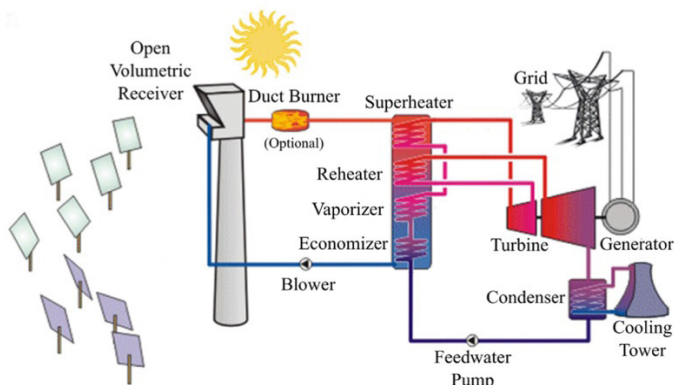
Jeste li ikada probali zapaliti komadić papira ili slame pomoću povećala i Sunčeve svjetlosti? Ako jeste, onda već sada možete predočiti kako funkcionira CSP. Za razliku od solarnih članaka koji koriste energiju fotona za dobivanje električne struje, CSP sistemi koriste toplinu Sunčeve svjetlosti, odnosno elektromagnetskih valova. Komercijalna CSP tehnologija se može podijeliti u četiri skupine: Fresnelovi kolektori (engl. *linear Fresnel reflector*), parabolični kolektori (engl. *parabolic trough collector*), sunčevi tornjevi (engl. *central receiver*) i sunčevi tanjuri (engl. *parabolic dish*).³ Najveća prednost *Linear Fresnel reflector*-a bila bi niska cijena.

Parabolic dish sustavi mogu generirati električnu struju bez spajanja na električnu mrežu. *Fresnel reflector* i *parabolic dish* sustavi čine manje od 4 % ukupne tehnologije CSP-a. Najveći udio čine parabolični kolektori, oko 80 %.³



Slika 1 – Podjela CSP tehnologije

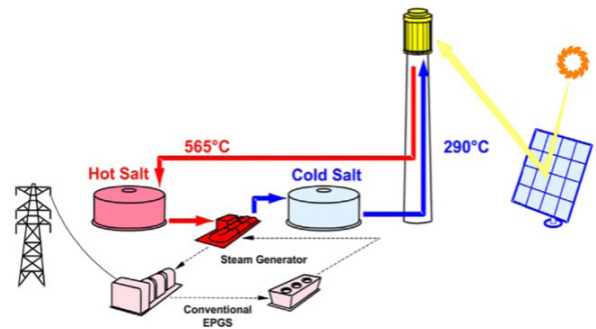
Tornjevi sa središnjim prijemnikom imaju dvije glavne prednosti naspram ostalih tehnologija. Prva je ta da kada se koristi toranj sa središnjim prijemnikom moguće je instalirati veći broj heliostata, sukladno zakonima termodinamike. Heliostati su stakleni uređaji koji se kontinuirano okreću tako da usmjeravaju sunčevu svjetlost u jednu točku. Dakle, većim brojem heliostata se mogu postići veće vrijednosti temperature, iz čega slijedi veća toplinska učinkovitost. Moguća primjena toplinskih baterija je druga, ne manje bitna prednost tornjeva sa središnjim prijemnikom. Parabolični kolektori mogu sadržavati toplinske baterije, no oni imaju manji kapacitet od sunčanog tornja.⁷



Slika 2 – Direct solar system generator

Sustav središnjeg prijemnika sadrži pet glavnih komponenta: heliostate, prijemnik, izmjenjivače i prijenosnike topline, toplinski spremnik i kontrole za vođenje procesa.

Središnji prijemnik je visoki solarni toranj, oko njega se nalaze tisuće heliostata koji kontinuirano prate Sunce i rotiraju se tako da uvijek usmjeravaju Sunčevu svjetlost u žarište, odnosno vrh solarnog tornja. U vrhu tornja se nalazi fluid na koji se koncentriira toplina. Fluid zatim struji kroz izmjenjivač topline, isparava i pokreće turbine. Iz turbina se generira električna energija. Navedeni proces se zove engl. *Direct Solar Steam Generation* jer fluid struji



Slika 3 – Solarni toranj s dva toplinska spremnika

direktno u izmjenjivač topline/parni stroj. Za razliku od ostalih obnovljivih izvora energije, gdje uključivanje nekog oblika pohrane energije uvijek dovodi do većih investicijskih troškova i veće cijene električne struje, CSP sustavi s toplinskim spremnicima potencijalno su jeftiniji nego oni bez njih.³

Uporaba talina soli kao toplinskih baterija se pokazala uspješnom. Zbog njihovih fizikalnih svojstava: visoka temperatura vrelišta, visoki specifični toplinski kapacitet, visoka toplinska vodljivost i velika gustoća pri visokim tlakovima, rastaljene soli su dobar kandidat u cilju pohrane energije.⁴ Neki bi mogli reći da su taline soli na visokim temperaturama jako korodirajuće, ali u nedavnim istraživanjima je pokazano kako se korodiranje može izbjeći koristeći ispravnu leguru nehrđajućeg čelika.⁵ Nadalje, soli su jeftinije od sintetičkih ulja. Najupotrebljivija smjesa soli je natrijev (60 w%) i kalijev (40 w%) nitrat.

U Španjolskoj, blizu grada Ecija, tvrtka Torresol Energy ima solarnu elektranu nazvanu Gemasolar izlazne snage 19,9 MWel. Oni su prvi implementirali rastaljenu sol kao prijenosnik topline i medij toplinskog spremnika tako da su rabili *2-tank direct* koncept pohrane energije. Dok je elektrana u pogonu, rastaljena sol na temperaturi od oko 290 °C se dovodi iz hladnog spremnika do prijemnika gdje se zagrijava do 560 °C. Vruća rastaljena sol se odvodi u topli spremnik. Spremnici su toplinski izolirani kako bi se što više smanjio gubitak topline. Zbog svojeg svojstva pohrane topline do 15 sati, elektrana za vrijeme ljeta može biti u pogonu 24 sati dnevno. Električna struja se generira tako da se toplina iz rastaljene soli prenosi na drugi fluid (najčešće voda) koji isparava i pokreće turbine. Polje oko solarnog tornja visokog 140 m popunjeno je s 2650 heliostata. Najudaljeniji heliostat se nalazi 1km od središnjeg prijemnika.⁶

Problemi globalnog zatopljenja uzrokovani emisijama stakleničkih plinova, sigurnosni i ekonomski rizici povezani s nuklearnom energijom te oskudnost resursa zahtijevaju prijenos opskrbe energije na održive energetske sisteme. Sunce je naš najveći izvor energije. Količina energije koju Sunce konstantno emitira je nama praktički nepojmljiva. Zato trebamo ulagati još više u solarnu tehnologiju. Koncentrirana solarna elektrana proizvodnje 350 MW je energetska ekvivalentna 2,3 milijuna barela nafte.² CSP pruža energiju bez izgaranja ugljena ili naftnih derivata, dakle, bez onečišćenja. Također nema značajnog negativnog utjecaja na okoliš.



Slika 4 – Gemasolar, Španjolska

Jedino nastradaju znatizeljne ptice koje se nađu na vrhu solarnog tornja. Kratkotrajno izlaganje na 560 °C dovoljno je da ptica ugrine. Ono što razlikuje CSP od ostalih obnovljivih izvora energije je sposobnost tornja da radi u pogonu na dulja razdoblja. CSP tehnologija se primjenjuje u 22 različite države. Neke od negativnih strana bi bile velika zauzetost Zemljine površine zbog značajnog broja heliostata i cijena. Iz razloga što nema puno koncentriranih solarnih tornjeva, procjene cijena izgradnje i vođenja nisu još pouzdane. Usklađivanje

CSP-a i solarnih članaka bi moglo dovesti do jako pouzdanog generiranja električne struje. U 2018. godini, globalni instalirani kapacitet CSP tehnologije je bio 5500 MW.

Izvori

1. N. Armaroli, V. Balzani, Energy for a Sustainable World: From the Oil Age to a Sun-Powered Future, Wiley-VCH, Weinheim, Germany, 2011.
2. Advances in Renewable Energies and Power Technologies – Chapter 12 – Concentrating solar power - José J.C.S.Santos José C.E.Palacio Arnaldo M.M.Reyes MonicaCarvalho Alberto J.R.Freire Marcelo A.Barone
3. Pitz-Paal, Robert (2020). Future Energy || Concentrating Solar Power. , (), 413–430. doi:10.1016/B978-0-08-102886-5.00019-0
4. N.P. Siegel, R.W. Bradshaw, Thermophysical Property Measurement of Nitrate Salt Heat Transfer Fluids, 2011.
5. R.W. Bradshaw, S.H. Goods, Corrosion Resistance of Nickel-Base Alloys in Molten Alkali Nitrates, Sandia National Laboratories, Albuquerque, New Mexico, USA, 2000. SAND2000-8240.
6. <https://solarpaces.nrel.gov>
7. Kuravi, J. Trahan, D.Y. Goswami, M.M. Rahman, E.K. Stefanakos, Thermal energy storage technologies and systems for concentrating solar power plants



I Bolest Minamata

Sanda Keškić (FKIT)

Grad Minamata u Japanu prošaran je spomenicima koji obilježavaju sjećanje na žrtve industrijskog masovnog trovanja prije nekoliko desetljeća. Minamata bolest je najpoznatiji slučaj trovanja metil-živom, koja se kao nusprodukt proizvodnje acetaldehida ispuštala iz tvornice Chisso u zaljev Minamata.

Najveći problem bilo je ispuštanje žive iz tamošnje industrije proizvodnje plastičnih masa. Nakon svih teških događaja koji su uslijedili, naposljetku se uspostavilo da morski organizmi elementarnu živu preraduju u metil-živu, a ona je izrazito opasna zbog svoje lipofilnosti i dobre apsorpcije preko probavnog sustava.



Slika 1– Onečišćenje mora živom

Ribe, mekušci i školjke postupno su akumulirali metil-živu u organizme, a ljudi su te morske plodove konzumirali i kronično se trovali. Pored toga što su zaraženi pacijenti pokazivali znakove neuroloških bolesti poput parestezije, ataksije i dizartije, primijećeno je i čudno ponašanje domaćih životinja pa se govorilo i o „groznici mačjeg plesa“. Liječnik koji je radio za tvornicu Chisso pomiješao je otpadnu vodu s mačjom hranom i njome hranio mačke koje su se počele grčiti i bile paralizirane prije smrti.

Nakon dugog niza godina došlo je do podizanja svijesti u Japanu u kojem se provodi niz mjera u okviru pravnih sustava vezanih uz okoliš kako bi se spriječilo onečišćenje okoliša živom, čime se štiti ljudsko zdravlje i nastoji očuvati živi okoliš. U Japanu su standardi za emisiju prašine, sumpornih oksida i dušikovih oksida propisani Zakonom o kontroli onečišćenja zraka, međutim ne postoje usporedivi standardi za živu. Ipak, postizanje emisijskih standarda za glavne onečišivače zraka, posebno mjere za kontrolu dioksina pridonijeli su padu koncentracije žive u dimnom plinu. Studija je pokazala da je brzina uklanjanja žive iz dimnih plinova iz krutog otpada 46 spalionica poboljšana s 22 % prije uvođenja mjere kontrole dioksina na 96,7 % nakon uvođenja navedene mjere. Izvorna koncentracija žive u dimnom plinu od 0,047 mg/m³ je svedena na manje od 0,01 mg/m³.

Pored donošenja zakona koji uveliko doprinose zaštiti okoliša, inženjeri su ti koji raznovrsnim specifičnim



Slika 2– Usporedba distribucije lezija među odraslim i fetalnim slučajevima bolesti Minamata



Slika 3– Muzej Minamata

metodama sprovode riječi u djela. Neke od tih metoda podrazumijevaju smanjenje vađenja žive i potrošnje sirovina i proizvoda koji stvaraju ispuštanje žive te korištenje goriva i alternativa s niskim sadržajem žive kao što je prirodni plin umjesto ugljena i korištenje goriva sa sastavom koji olakšava kontrolu žive.

Koliko je Minamata važna i kako ne bi kao jedna od najvećih ekoloških katastrofa pala u zaborav, tome svjedoči otvorenje muzeja u kojem se godišnje obilježavaju ceremonije kako bi se prisjetili oboljelih i poginulih te

osvijestili važnost Minamate koja je ostavila trag više od 80 godina.

Izvori

1. <https://www.sciencedirect.com/topics/medicine-and-dentistry/minamata-disease>
2. <https://www.science.org/content/article/mysterious-chemical-found-dead-cats-brain-reopens-debate-over-mercury-poisoning>
3. <https://www.greenfacts.org/en/mercury/1-3/mercury-6.htm>

Studenti na terenu: CE-Z-AR d.o.o.

Dubravka Tavra (FKIT)

Ovog mjeseca studenti prve godine preddiplomskog studija Ekoinženjerstvo išli su u posjet tvrtki CE-Z-AR d. o. o. (CIOS grupacija) pod vodstvom doc. dr. sc. Zvonimira Katančića.

Ova grupacija poznata je kao vodeći hrvatski i regionalni tržišni lider u sakupljanju i obradi različitih otpadnih materijala, a najveća je privatna grupacija za gospodarenje otpadom. Dočekala su nas dvojica djelatnika te su nas proveli po terenu.

Glavna djelatnost CE-ZA-R-a, Centra za reciklažu, je prikupljanje, oporaba i trgovanje metalnim otpadom i ostalim otpadnim materijalima s pretežito metalnom komponentom. Nezaobilazan je i značajan strateški partner te vodeći sakupljač otpadnih materijala od brojnih partnera u gospodarskom sektoru, jedinicama lokalne uprave i građanstva.

CE-ZA-R d. o. o. kroz 17 suvremeno opremljenih radnih jedinica/reciklažnih centara, logistički povezanih cestovnim, željezničkim i brodskim prijevozom, osigurava visoku razinu pribave dovoljnih količina otpada za njihovu obradu, te uspješan plasman na međunarodnom tržištu u Europi i izvan EU.

CE-ZA-R godišnje sakuplja i obrađuje oko 400.000 tona različitih vrsta metalnog otpada te oko 70.000 tona nemetala.

U reciklažnom centru CE-ZA-R-a u Zagrebu u funkciji su i dva jedinstvena postrojenja u Hrvatskoj - postrojenje za obradu velikih rashladnih uređaja koje omogućava obradu velikih rashladnih uređaja i izvlačenja CFC spojeva (freona) u potpuno kontroliranim uvjetima, zadovoljavajući pri tom najviše standarde zaštite okoliša te postrojenje za usitnjavanje otpada tzv. šreder.

Iako nismo imali priliku vidjeti, na području južne industrijske zone u Sisku od 1954. godine djeluje ljevaonica čeličnih odljevaka jedina u Hrvatskoj koja proizvodi odljevke za brodogradnju, strojogradnju i vagonogradnju.

Na FKIT-u se provodi edukacija na sva četiri studija o održivom razvoju i primjeni načela zelene kemije u inženjerstvu. Naravno, na smjeru Ekoinženjerstvo, kao i što sama riječ navodi, najviše se pažnje posvećuje upravo tim temama.

Izazovno je osigurati nova, tehnološka rješenja koja će biti ekološki prihvatljiva. Isto tako, nije ni jednostavno smišljati rješenja za sanaciju već nastale štete u području industrije.

Ovo je bio dobar primjer za vidjeti kako se u praksi obavlja razdvajanje otpada koji se zatim može ponovno koristiti, ili u najgorem slučaju, odložiti. No, isto tako je bio i dobar pokazatelj kako Hrvatskoj nedostaje prostora za izradu postrojenja koje bi taj odvojeni otpad dalje obrađivale i imale financijske koristi od toga. Nažalost, Hrvatska za većinu tog otpada mora plaćati penale i prodavati drugim državama koje će to rado iskoristiti i zaraditi.



G.I.O.S.

GRUPA





SCINFLUENCER

Prirodni nuklearni reaktori

Lea Raos (FKIT)

Nuklearne reaktore koji su se prirodno formirali prije 2 milijarde godina u Gabonu grupa fizičara otkrila je još 1972. godine. Reaktori su se formirali zbog visoke koncentracije radioaktivnog izotopa ^{235}U .

Prirodni nuklearni reaktori nastaju kada podzemna voda preplavi mineralna nalazišta uranija i upravo tada započinje nuklearna reakcija. Toplina koja nastane tijekom nuklearne fisije omogućuje vodi da ispari kako bi usporila ili zaustavila reakciju. Novu pojavu fisije omogućuje novi prodor podzemne vode.

Nuklearna fisija je vrsta nuklearne reakcije. Ona nastaje cijepanjem atomske jezgre nekog kemijskog elementa na dva fisijska produkta.

Prirodni nuklearni reaktori Oklo pružaju bitne informacije o zadržavanju fisijskih produkata u nuklearnom otpadu. Radioaktivni elementi izlaze iz reaktorskog goriva u okoliš prilikom čega dolazi do



onečišćenja okoliša i velike opasnosti za zdravlje. Razumijevanje oslobađanja i zarobljivanja specifičnih radioaktivnih tragova u okoliš od iznimne je važnosti za dugoročno skladištenje nuklearnog otpada i ublažavanje nesreća reaktora.

Znanstvenici su proučavali migraciju fisijskih produkata u prirodnom nuklearnom reaktoru Oklo koristeći univerzalni spektrometar Naval Ultra Trace Isotop Laboratory (NAUTILUS). NAUTILUS je kombinacija sekundarnog ionskog

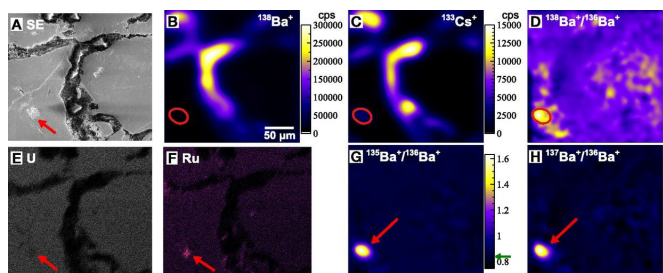


Slika 1 – Nalazište uranijeve rude u Oklu

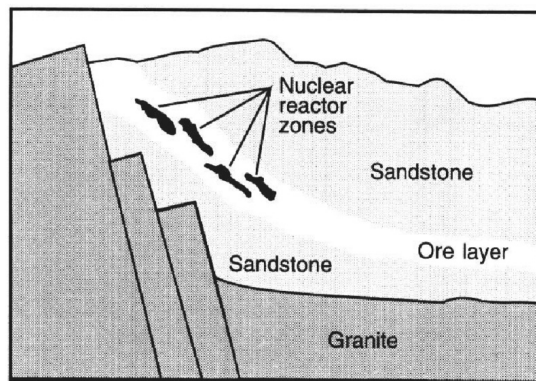
masenog spektrometra (SIMS) i jednostupanjskog akceleratorskog masenog spektrometra (SSAMS), koji omogućuje analizu uzoraka *in situ* na mikrometerskoj skali i bez molekularne izobare. Identificiran je $^{235}\text{U}/^{238}\text{U}$ u omjeru od $0,3655 \pm 0,0007\%$. Također, otkriveno je da su fisionogeni Cs i Ba zarobljeni metalnim/sulfidnim agregatima Ru ubrzo nakon zatvaranja reaktora. Oklo RZ 13 jedna je od najbolje očuvanih zona, što ga čini bliskim prirodnim analogom dugotrajnom skladištenju nuklearnog otpada i idealnim uzorkom u kojem se proučava zadržavanje i migracija produkata fisije.

Razumijevanje ponašanja radiogenog Cs u modernim reaktorima važno je budući da dva fisionogena izotopa, ^{135}Cs i ^{137}Cs , svaki čine 6 – 6,5 % ukupnog prinosa fisije, s vremenom poluraspada od 2,3 Ma odnosno 30,2 godine. Oni se raspadaju na stabilne izotope ^{135}Ba odnosno ^{137}Ba . Cezij je mobilan, a ^{137}Cs čini veliki dio aktivnosti reaktorskog otpada u vremenskoj skali od nekoliko generacija, dok ^{135}Cs ostaje aktivan dugo nakon toga. Ranije je identificirana prisutnost radiogenog Ba unutar RZ, što ukazuje da se diferencijacija između Ba i Cs dogodila 20 godina nakon kritičnosti i da su se fisionogeni ^{135}Ba i ^{137}Ba kemijski ponašali kao Cs.

RZ 13 poseban je RZ, koji je dobro očuvan duboko pod zemljom te je doživio najveće neutronske tokove



Slika 2 – Snimanje izotopa NAUTILUS-om



Slika 3 – Shema prirodnih nuklearnih reaktora u Oklu

tijekom kraćeg vremenskog razdoblja u odnosu na ostale reaktore. Radioaktivni produkti fisije uhvaćeni su u najaktivnijoj regiji od svih reaktora Oklo. Razumijevanje oslobađanja i sekvenciranja specifičnih radiogenih potpisa u okoliš je važno, a ovo otkriće pruža uvid u dugoročne i kratkoročne strategije umanjavanja nuklearnog otpada.

Uzorci prirodnih nuklearnih reaktora iz Okla dali su tijekom desetljeća obilje informacija o migraciji i skladištenju fisionogenih produkata, a na temelju nedavnih otkrića opravdana je daljnja istraga.

Literatura

1. <https://www.pnas.org/content/115/35/8676#F4> (pristup 18.12.2021.)
2. <https://www.science.org/content/article/natural-nuclear-reactor-explained> (pristup 18.12.2021.)
3. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0883292721001785> (pristup 18.12.2021.)
4. B<https://zir.nsk.hr/islandora/object/vuka:842/preview> (pristup 18.12.2021.)
5. <http://www.nemis.hr/index.php/nuklearne-reakcije/fisija.html> (pristup 18.12.2021.)

Povijest stakla

Hrvoje Tašner (FKIT)

Svakodnevno smo okruženi staklenim predmetima, od prozora preko zaslona do čaša i ukrasnih predmeta, te smo tolike naviknuti na staklo da ga smatramo sasvim jednostavnim i nimalo zanimljivim materijalom. No, stakla koja na okružuju veoma se razlikuju i prema svojstvima i po sastavu te su napredan materijal. Povijest stakla duga je tisućama godina te su stakla iz davnine gotovo neusporediva s današnjim i danas bi ih malo tko smatrao pravim staklima.

Gdje i kada je staklo prvi puta otkriveno nije poznato te je gotovo sigurno bilo slučajno. Vjerojatno su ga otkrile neke od najranijih civilizacija bliskog istoka poput Starog

Egipta ili civilizacije u Mezopotamiji. Rimski povjesničar Plinije Stariji donosi priču kako su Feničani slučajno otkrili staklo tako što im se, dok su pripremali hranu na plaži, posude, koje su postavili na blokove nitratnih soli, rastalilo i pomiješalo sa pijeskom. Tada je nastala prozirna tekućina odnosno staklo. Ova priča gotovo je sigurno netočna ali ipak govori o tome ao je otkriće stakla oduvijek bio misterij i slučajnost.¹

Čak 2500 godina pr.K. staklo je bilo rašireno na bliskom istoku. Isprava je imalo isključivo dekorativnu uporabu. Dobivalo se sinteritranjem silike i pustinske sode odnosno natrona. Za obojenje dodavane su različite soli željeza, bakra i mangana. Ta stakla bila su neprozirna te nije postojala želja niti pokušaji dobivanja prozirnog stakla.²

Razvoj stakala vjerojatno je pratio razvoj metalurgije i keramika pošto je su peći korištene za dobivanje metala

i keramike mogle biti korištene za dobivanje stakla. Iskustva stečena korištenjem metalurških peći zasigurno su pomogla pri dobivanju stakla.²

Puhanje stakala razvijeno je oko 2000 godina pr.K. vjerojatno na području današnje Sirije. Tehnika puhanja stakla omogućila je veću fleksibilnost u oblikovanju staklenih predmeta te se uporaba stakla od tada uvelike povećala i proširila. Tehnika puhanja stakla brzo se proširila po cijelom Rimskom Carstvu te su stakleni predmeti postali svakodnevnica kako za društvenu elitu tako i za puk. U rimskom dobu javila se i želja za dobivanjem prozirnog stakla. Kako bi se to postiglo nastojalo se ukloniti željezo i druge nečistoće u staklu.²



Slika 1 – Rimske staklene posude

Stakla rađena u zapadnom dijelu antičkog svijeta obično su bila soda-vapno-silikatnog sastava te se kao po sastavu ne razlikuju mnogo većine komercijalnih stakala. Sastojci za drevna stakla obično su bili pijesak sa plaža te su izvor sode i vapna obično bile ljušturice pomješane sa pijeskom i pepeo. Kvaliteta takvih stakala bila je loša, no dovoljna za tadašnju upotrebu. Sastav pa time i boja i kvaliteta stakala uvelike je ovisila o lokalitetu i dostupnim materijalima. Tako je većina stakla nađenih iz Srednjeg Vijeka tamno zelene, tamno smeđe ili gotovo crne boje.²

Razvojem civilizacije i postupnom rafinacijom sirovina poboljšavala se kvaliteta i čistoća stakla. Tako je nastavljena i potraga za prozirnim staklom. Malo se zna o razvoju stakala u srednjem vijeku, no ono što znamo je da je postojala želja za dobivanjem prozirnog stakla. U 17. stoljeću pojavljuju se i zanatski priručnici o pripremi stakala. U njima možemo pronaći kako se velika pažnja stavljala na pripremu sastojaka i odabir čistim materijal. Primjerice, naglasak se stavlja na pažljiv odabir kristala kvarca i 'bijelog kamena bez obojanih crnih i žutih žila'.²

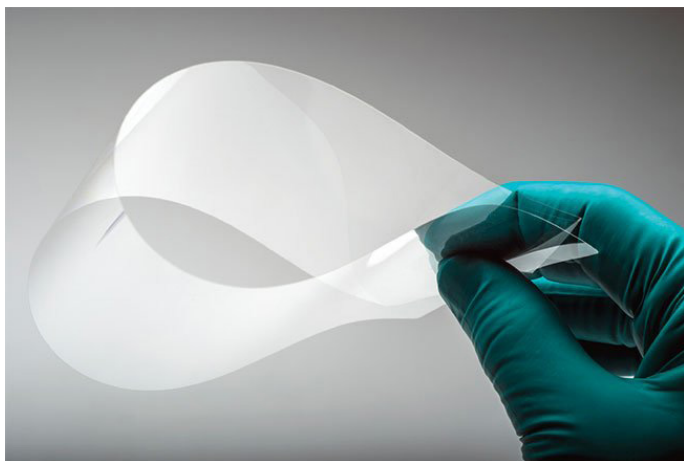
Iako se težilo dobivanju prozirnog stakla i obojena stakla bila su cijenjena. Soli bakra(II) davale su plavo-zelenkaste nijanse dok je nečistoće željeza i mangana bojale staklo u žuto-smeđu odnosno ljubičastu boju. Zbog svoje izražajne tamno plave boje, stakla s kobaltom bila su iznimno cijenjena. Stakla crvene boje, zbog lijepe boje i rijetkosti, bila su veoma skupa i tražena. Crvenu boju bilo je teško dobiti jer je za to bilo potrebno pripremiti koloid metala bakra ili zlata u staklu, što je postupak osjetljiv sastava stakla te način taljenja i hlađenja.²



Slika 2 – Ukrasna čaša crvene boje iz viktorijanskog doba

Značajna skupina stakala koja su se pojavila u 17. stoljeću su olovna stakla. U olovnim staklima vapno odnosno kalcij zamijenjen je s olovom. Olovo je dugo bilo manjinski sastojak stakla te se olovni oksid koristio kao fluks. Razvijena su u Engleskoj zbog problema s nabavom materijala iz inozemstva. Isprva olovna stakla bila su kemijski nestabilna i neotopna na vodu. No s vremenom ti su problemi riješeni i stabilno olovno staklo zbog svoje postojanosti i sjaja nazvano je olovno kristalno staklo. Olovno staklo imalo je bolja optička svojstva te se lakše obrađivalo u odnosu na tadašnjih soda-vapno-silikatnih stakala, što je bilo posebno važno izradu i razvoj teleskopa mikroskopa. Primjena ovih stakala omogućila je brži napredak znanosti poput astronomije i biologije.²

Razvojem znanosti došlo je i sve većim zahtjevima optičke uređaje postavilo se pitanje utjecaja sastava stakla na njegova svojstva, kao i utjecaja uvjeta izrade stakla. Tako je Michael Faraday, od 1825 do 1830, provodio istraživanja kojima je pokazao važnost korištenja platnenih lončića i homogenizacije sastojaka tijekom izrade stakla. Razvoj stakala doživio je nagli uspin u kasnom 18-om i početkom 19-og stoljeća kada su, kako bi se modificirala optička svojstva stakla, prvi puta korišteni elementi poput antimona, barija, bora, fosfora, cinka i kositra, berilija, kadmija, flura, litija, magnezija, molibdena, nikla, volframa, uranija i vanadija. Jedan od najzaslužnijih za taj napredak bio je William Veron Harcourt. On je prvi u staklima koristio berilij, kadmij, fluor, litij, magnezij, molibden, nikal, volfram, uranij i vanadij. Unatoč,



Slika 3 – Fleksibilno staklo

ponekom razvoju novih stakala potaknutom potrebom, do 19-og stoljeća nisu provedena sistematska istraživanja pripreme stakala.²

Velike zasluge za razvoj stakala u kasnom 19. stoljeću pripadaju njemačkim znanstvenicima Ernstu Abbeu, Ottu Schottu te Carlu Zeissu. Ovaj trojac surađivao je te su priređivali i preučavali velik broj stakala različitih sastava. Početni sastojci su im bili silika, soda, potaša,

vapno i olovni oksid. Te su umješavali 28 drugih elemenata. Proučavali su utjecaj dodatka i tehnike pripreme na svojstva dobivenih stakala. Primjerice našli su kako dodatak aluminijska, cinkova ili barijeva oksida povećava izdržljivost stakala.²

U 20-om i 21-om stoljeću razvijena je veliki broj stakala sa vrlo različitim svojstvima i primjenama. Točan sastav i tehnika proizvodnje strogo su čuvane tajne pogotovo za stakla posebnih primjena. Danas osim svakodnevnih predmeta poput prozora, vaza i čaša izrađuju i veoma precizni optički instrumenti, optička vlakna i različito laboratorijsko posuđe te mnogo toga drugoga. Svojstva modernih stakala vrlo su različita. Primjerice stakla obično smatramo čvrstima i krutima, razvijena u i savitljiva stakla. Nadalje, većina stakala su električni izolatori no staklo na pametnim telefonima je vodljivo.

Literatura


1. A World of Glass, ALAN MACFARLANE AND GERRY MARTIN, SCIENCE, 3 Sep 2004, Vol 305, Issue 5689, pp. 1407-1408 DOI: 10.1126/science.1093597
2. Perspectives on the History of Glass Composition, Charles Robert Kurkjian, William R. Prindle, January 2005 Journal of the American Ceramic Society 81(4):795 - 813, DOI:10.1111/j.1151-2916.1998.tb02415.x



ZANIMLJIVOSTI O RECIKLIRANJU STAKLA

- U svijetu se dnevno proizvede preko 500 milijuna staklenih boca
- Godišnje se baci gotovo 100 milijardi boca
- Potrebne su samo 3 staklene boce da bi se dobio 1 kg stakla kojeg možemo reciklirati
- S energijom koju uštedimo recikliranjem jedne jedine boce žarulja od 100 W može svijetliti 4 sata
- Staklo se može reciklirati neograničeno mnogo puta I moguće ga je 100% reciklirati





**SRETAN BOŽIĆ
I NOVA
GODINA!**

Studentska sekcija HDKI



SADRŽAJ
vol. 6, br. 2

KEMIJSKA POSLA

1. 12. – svjetski dan borbe protiv AIDS-a	1
Izumiranje pčela	3
COP26 – kakvi su zaključci?	5

ZNANSTVENIK

Supravodljivost	6
Dizajn MAO inhibitora računalnim metodama; koja je uloga računalne kemije u razvoju novih lijekova?	8
“Nuklearne (atomske) baterije”	12

BOJE INŽENJERSTVA

Koncentrirana solarna energija (<i>concentrated solar power</i>)	15
Bolest Minamata	17
Studenti na terenu: CE-Z-AR d. o. o.	18

SCINFLUENCER

Prirodni nuklearni reaktori	20
Povijest stakla	21

