

20. i 21.
veljače
2020.

**XIII. susret
mladih
kemijskih
inženjera**

www.fkit.unizg.hr/smlki

Fakultet
kemijskog
inženjerstva i
tehnologije

Hrvatsko
društvo
kemijskih
inženjera i
tehnologa

KNJIGA SAŽETAKA
Book of Abstracts

Zagreb, 20. i 21. 2. 2020.

HRVATSKO DRUŠTVO KEMIJSKIH INŽENJERA I TEHNOLOGA
FAKULTET KEMIJSKOG INŽENJERSTVA I TEHNOLOGIJE SVEUČILIŠTA U
ZAGREBU

XIII. SUSRET MLADIH KEMIJSKIH INŽENJERA
KNJIGA SAŽETAKA
Book of Abstracts
XIII Meeting of Young Chemical Engineers

Zagreb, 20. i 21. veljače 2020.

Izdavač / Published by

Hrvatsko društvo kemijskih inženjera i tehnologa
Croatian Society of Chemical Engineers

Za izdavača / For the publisher

Ante Jukić

Urednici / Editors

Igor Dejanović, Domagoj Vrsaljko, Krunoslav Žižek

Grafički urednik / Graphical editor

Zdenko Blažeković

Recenzenti / Reviewers

Matija Cvetnić
Igor Dejanović
Marina Duplančić
Petar Kassal
Zvonimir Katančić
Josipa Papac
Domagoj Vrsaljko
Krunoslav Žižek

Tekst pripremili / Text prepared by

AUTORI, koji su odgovorni za tekst sažetaka
AUTHORS, who are fully responsible for the abstracts

Priprema / Layout

Igor Dejanović, Zdenko Blažeković

ISBN 978-953-6894-71-0

Organizatori / Organizers

Hrvatsko društvo kemijskih inženjera i tehnologa / *Croatian Society of Chemical Engineers*
Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije Sveučilišta u Zagrebu / *Faculty of Chemical Engineering and Technology University of Zagreb*

Pokrovitelji / Under the Auspices of the

Ministarstvo znanosti i obrazovanja / *Ministry of Science and Education*
Sveučilište u Zagrebu / *University of Zagreb*
Akademija tehničkih znanosti Hrvatske / *Croatian Academy of Engineering*
Hrvatski inženjerski savez / *Croatian Engineering Association*

Znanstveno-organizacijski odbor / Scientific and Organizing Committee

Igor Dejanović, predsjednik / *Chair*
Katarina Mužina, organizacijski tajnik / *Secretarie*
Zdenko Blažeković
Matija Cvetnić
Marina Duplančić
Petar Kassal
Zvonimir Katančić
Josipa Papac
Kristina Sušac
Domagoj Vrsaljko
Krunoslav Žižek

Inozemni članovi / International Members of the Committee

Valerio Causin (ITA)
Ivar J. Halvorsen (NOR)
Geoffrey Waterhouse (NZ)

Sponzori / Sponsors

INA-Industrija nafte, d.d.
Pliva Hrvatska d.o.o.
Dechra – Genera d.d.
Xellia d.o.o.
KEFO d.o.o.
Agroproteinka d.d.
Alphachrom d.o.o.
KemoLab d.o.o.
MDPI ChemEngineering – Open access journal

Donatori / Donors

Labtim ADRIA d.o.o.
Obrnuta faza d.o.o.
Dr. sc. Sanja Slavica Matešić (privatna donacija)
Turistička zajednica grada Zagreba
Hrvatska turistička zajednica
Turistička zajednica Zagrebačke županije

Mjesto održavanja / Meeting Venue

Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Marulićev trg 20 HR-10 000 Zagreb /
University of Zagreb, Faculty of Chemical Engineering and Technology, Marulićev trg 20 HR-10 000 Zagreb,

UVODNIK

Kemijsko inženjerstvo jedan je od najvažnijih pokretača ekonomskog rasta u razvijenim društvima. U svim tehničkim znanostima pa tako i u kemijskom inženjerstvu, inovacije i promjene događaju se sve brže. Zbog toga je cjeloživotno obrazovanje i kontinuirano praćenje znanstveno-istraživačkih trendova postalo, ne samo važno, nego i neophodno za održanje struke u Hrvatskoj. Što je važno u svijetu, nastojali smo približiti kroz odabir nadasve zanimljivih plenarnih i pozvanih predavanja koja će održati renomirani stručnjaci iz Hrvatske i inozemstva.

Susret mladih kemijskih inženjera prvi put je održan u veljači 1996. na Fakultetu kemijskog inženjerstva i tehnologije Sveučilišta u Zagrebu i od tada se tradicionalno održava svake dvije godine. Zamišljen je kao skup na kojem mladi kemijski inženjeri, ali i oni iz srodnih struka, mogu steći prva iskustva u prezentaciji rezultata vlastitih istraživanja. S tim ciljem, sudjelovanje je oduvijek bilo besplatno za studente preddiplomskih i diplomskih studija. Ove godine održava se u svojem 13. izdanju, a na njemu sudjeluje preko 200 sudionika sa 149 radova, od kojih je 25 usmenih izlaganja. Nadamo se da ćemo organizacijom ovog susreta omogućiti mladim sudionicima iz Hrvatske, ali i šire, međusobno povezivanje i razmjenu ideja i realizaciju zajedničkih suradnji i istraživačkih projekata.

Kao poticaj, uz nagradu za najbolju postersku prezentaciju, ove godine uvedena je novost – nagrada za najbolju usmenu prezentaciju koju sponzorira ChemEngineering, časopis izdavača MDPI. U planu je i objava zbornika cjelovitih radova sa Susreta koji će biti objavljen u posebnom izdanju časopisa Kemija u industriji. Radovi će prije objavljivanja u zborniku proći standardni recenzentski postupak. Rok za slanje radova je 1. travnja 2020.

Svim sudionicima želim uspješan rad i ugodno druženje!

Igor Dejanović
Predsjednik Znanstveno-organizacijskog odbora

FOREWORD

Chemical engineering is one of the most important drivers of economic growth in developed societies. In all technical disciplines, and chemical engineering as well, innovations and changes accelerate. That is why life-long learning and adjusting to new trends became, not only important, but also essential for the future of chemical engineering in Croatia. We strived to highlight present and future trends in research and the industry through interesting plenary and invited lectures, given by renown experts from Croatia and abroad.

First Meeting of young chemical engineers took place in February 1996. on Faculty of chemical engineering and technology, University of Zagreb. Since then, it regularly takes place every two years. The Meeting was conceived as a conference where young chemical engineers, and engineers of related professions, can gain first experiences in presentig results of their research. With that in mind, participation in the Meeting was always free of charge for students of bachelor and master studies. This year, the Meeting is in its 13th edition, gathering over 200 participants with 149 presentations. We hope that this conference will enable young participants, from Croatia and abroad, to network, exchange ideas and realize cooperations and joint research projects.

As an incentive, this year we introduce a novelty – the best presentation award sponsored by ChemEngineering, an MDPI journal. Conference proceedings will be published in the special edition of the journal of Croatian society of chemical engines – Chemistry in Industry. Before the publication, the papers will pass the standard peer review process. Deadline for submission of full manuscripts is 1st April 2020.

I wish all the participants a pleasent and succesful conference!

Igor Dejanović
Chair of the Scientific and Organizing Committee

SADRŽAJ / CONTENTS

PROGRAM / PROGRAM

ČETVRTAK / THURSDAY.....	4
PETAK / FRIDAY.....	7
POSTERSKA IZLAGANJA / POSTER PRESENTATIONS.....	10

PLENARNA IZLAGANJA / PLENARY LECURES

Jens-Uwe Repke

TOWARDS INTENSIFIED AND SUSTAINABLE PROCESSES – A SYSTEMATIC APPROACH FOR IDENTIFICATION AND ANALYSIS OF PLANT DESIGN AND OPERATION	25
---	----

Žarko Olujić

SMANJIVANJE POTREBNE ENERGIJE I EMISIJA UGLJIKOVA DIOKSIDA U PROCESNIM INDUSTRIJAMA KROZ UNAPREĐENJE DESTILACIJSKE TEHNOLOGIJE REDUCING PROCESS INDUSTRY ENERGY DEMAND & CARBON DIOXIDE EMISSIONS THROUGH DISTILLATION TECHNOLOGY ADVANCES	26
---	----

POZVANA IZLAGANJA / INVITED LECTURES

Blaž Likozar

HOW CAN (MULTI-SCALE) MODELLING, SIMULATIONS AND ENGINEERING HELP BIO-REFINING?	28
---	----

Thomas Grützner

NEXT GENERATION SEPARATION UNITS – RESEARCH AT ULM UNIVERSITY	29
---	----

Ozren Wittine

KRAJ SVIJETA JE BLIZU! (ZA ŠARŽNE PROCESE) END OF THE WORLD IS NEAR! (FOR BATCH PROCESSES)	30
---	----

Franjo Jović

RIZICI I OPASNOSTI PRI PROVOĐENJU KEMIJSKIH REAKCIJA – PRIČA O SIGURNOSTI PROCESA CHEMICAL REACTION HAZARDS – STORY ABOUT PROCESS SAFETY.....	31
--	----

Jelena Macan

KERAMIČKI MATERIJALI IZ OTOPINE – PREDNOSTI I IZAZOVI CERAMICS FROM AQUEOUS SOLUTIONS – ADVANTAGES AND CHALLENGES	32
--	----

Irena Škorić

DIZAJN, SINTEZA I INHIBICIJA KOLINESTERAZA NOVIH OKSIMSKIH I AMINO-DERIVATA DESIGN, SYNTHESIS AND CHOLINESTERASE INHIBITORY PROPERTIES OF NEW AMINE AND OXIME DERIVATIVES	33
--	----

USMENA IZLAGANJA / ORAL PRESENTATIONS

Ulrich Preißinger, Goran Lukač, Igor Dejanović, Thomas Grützner <i>CONSIDERATIONS ON THE DESIGN OF A PILOT-PLANT-SCALE SIMPLIFIED MULTIPLE DIVIDING WALL COLUMN</i>	35
Nenad Zečević, Nenad Bolf DIGITALNI MODEL PRIMARNOG PARNOG REFORMINGA PRIRODNOG PLINA U PROIZVODNJI SINTEZNOG PLINA <i>DIGITAL TWIN MODEL OF PRIMARY STEAM REFORMER OF NATURAL GAS IN SYNGAS PRODUCTION</i>	36
Nevena Milčić, Marko Pranić, Martina Sudar, Zvezdana Findrik Blažević, Maja Majerić Elenkov KINETIČKA KARAKTERIZACIJA HALOGENHIDRIN-DEHALOGENAZE PRI SINTEZI FLUOROAROMATSKIH VICINALNIH AZIDOALKOHOLA <i>KINETIC CHARACTERIZATION OF HALOHYDRIN DEHALOGENASE IN THE SYNTHESIS OF FLUOROAROMATIC VICINAL AZIDOALCOHOLS</i>	37
Martina Sudar, Nevena Milčić, Marina Svetec Miklenić, Ivan-Krešimir Svetec, Maja Majerić Elenkov, Zvezdana Findrik Blažević PRIPREMA BIOCATALIZATORA <i>PREPARATION OF BIOCATALYSTS</i>	38
Darijo Šibalić, Anita Šalić, Bruno Zelić, Marina Tišma RAZVOJ TESTA ZA MJERENJE AKTIVNOSTI ENZIMA LIPAZE PORIJEKLOM IZ <i>Thermomyces lanuginosus</i> <i>DEVELOPMENT OF THE ASSAY FOR MEASUREMENT OF Thermomyces lanuginosus LIPASE ACTIVITY</i>	39
Edina Ibrić, Ajla Mandalović, Samela Selimović, Zvonimir Jažo, Zehrudin Osmanović EKSTRAKCIJA ETERIČNOG ULJA IZ SMREKE (<i>Juniperus communis</i>), KADULJE (<i>Salvia Officinalis L.</i>) I SMILJA (<i>Helichrysum italicum (Roth) G. Don</i>) <i>EXTRACTION OF ESSENTIAL OIL FROM SPRUCE (Juniperus communis), SAGE (Salvia officinalis L.) AND IMMORTELLE (Helichrysum italicum (Roth) G. Don)</i>	40
Lilla Virag, Róbert Bocsi, Dóra Rippelné Pethő <i>POLYLACTIC ACID-BASED GRANULE PROPERTIES FOR SOLVENT SORPTION AND RELEASE</i>	41
Ula Rozman, Andreja Žgajnar Gotvajn, Tina Skalar, Marija Zupančič, Tilen Turk, Gabriela Kalčikova <i>CHARACTERIZATION OF MICROPLASTIC PARTICLES USED IN MICROPLASTICS RESEARCH</i>	42
Sarah Mateša, Marija Marguš, Irena Ciglencečki VARIJABILNOST FIZIKALNO – KEMIJSKIH PARAMETARA U KEMOKLINI ROGOZNIČKOGA JEZERA <i>VARIABILITY OF PHYSICO-CHEMICAL PARAMETERS IN THE CHEMOCLINE OF ROGOZNICA LAKE</i>	43

Tamara Minović Arsić <i>SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF CARBON CRYOGEL AND CARBON CRYOGEL/CERIA COMPOSITE FOR ARSENIC(III) ADSORPTION FROM WATER SOLUTIONS</i>	44
Bahar Karadeniz, Krunoslav Užarević, Dijana Žilić, Senada Muratović <i>MECHANOCHEMICAL SYNTHESIS OF POLYMORPHIC METAL-ORGANIC FRAMEWORKS AND THEIR TOPOLOGY TRANSFORMATION</i>	45
Sara Krivačić, Luka Pavić, Andrea Moguš-Milanković, Ana Šantić <i>NISKA POKRETLJIVOST KALIJEVIH IONA U ŽELJEZNO FOSFATNIM STAKLIMA LOW MOBILITY OF POTASSIUM IONS IN IRON PHOSPHATE GLASSES</i>	46
David Bjelanović, Andrea Nesterović, Jelena Vukmirović, Ivan Stijepović, Marija Milanović, Vladimir Srdić <i>Bi_{0.5}Na_{0.5}TiO₃ PIEZOELEKTRIČNA KERAMIKA ZA UPOTREBU U PRIKUPLJANJU ENERGIJE DOBIJENA SINTEZOM U ČVRSTOJ FAZI Bi_{0.5}Na_{0.5}TiO₃ PIEZOELECTRIC CERAMICS FOR ENERGY-HARVESTING APPLICATIONS PREPARED BY SOLID STATE SYNTHESIS</i>	47
Lea Čolakić, Mateja Pisačić, Marijana Đaković <i>MEHANIČKI ODZIV KRISTALA KADMIJEVIH(II) HALOGENIDA S OKSIMSKIM DERIVATIMA PIRIDINA MECHANICALLY RESPONSIVE CRYSTALS OF CADMIUM(II) HALIDES WITH OXIME DERIVATIVES OF PYRIDINE</i>	48
Strahinja Janković, Sara Joksović, Andrea Nesterović, Ivan Stijepović, Marija Milanović, Vladimir V. Srdić <i>PREPARATION OF NANOCRYSTALLINE Bi_{0.5}Na_{0.5}TiO₃ THIN FILMS FOR MICROELECTRONIC APPLICATIONS</i>	49
Sara Joksović, Strahinja Janković, Ivan Stijepović, Jelena Vukmirović, Vladimir V. Srdić <i>THICKNESS CONTROL OF LaMnO₃ THIN FILMS PREPARED BY CSD/PAD TECHNIQUE</i>	50
Aleksa Kočišev, Mirjana Jovičić, Marija Milanović <i>THE INFLUENCE OF ZEOLITE ON THE PROPERTIES OF RUBBER COMPOSITES BASED ON THE NATURAL RUBBER</i>	51
Lucija Mandić, Anja Sadžak, Suzana Šegota <i>FUNCTIONALIZED MAGNETITE NANOPARTICLES FOR DRUG DELIVERY: SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION METHODS</i>	52
Sanja Renka, Luka Pavić, Petr Kalenda, Petr Mošner, Ladislav Koudelka, Ana Šantić <i>POLARONSKA VODLJIVOST U WO₃-P₂O₅ I MoO₃-P₂O₅ STAKLIMA POLARONIC CONDUCTIVITY IN WO₃-P₂O₅ I MoO₃-P₂O₅ GLASSES</i>	53
Tomislav Gojšić, Saša Opačak, Berislav Perić, Srećko Kirin <i>UNEXPECTED REACTIVITY OF PROPIOLIC ACID AND TRIAZOLES</i>	54
Dunja Ljubičić, Snežana Vučetić <i>IN-SITU EXAMINATION OF HISTORICAL PAINTINGS</i>	55

Mislav Matić, Ema Horak, Ivana Murković Steinberg FLUORESCENCIJSKI OPTIČKI SENZOR ZA DETEKCIJU Hg ²⁺ IONA NA BAZI DERIVATA BENZIMIDAZOLA <i>FLUORESCENCE OPTICAL SENSOR FOR Hg²⁺ ION DETECTION BASED ON BENZIMIDAZOLE DERIVATIVE</i>	56
Anja Bošnjaković, Ankica Sekovanić, Jasna Jurasović, Tatjana Orct, Antonija Sulimanec Grgec, Martina Piasek ODREĐIVANJE ELEMENATA U KOSI: ODABIR ODGOVARAJUĆE PROCEDURE PRANJA UZORKA <i>ELEMENT DETERMINATION IN HAIR: SELECTION OF THE SUITABLE SAMPLE WASHING PROCEDURE</i>	57
Mateja Toma, Valerije Vrčec REDOKS SVOJSTVA FEROCENOM SUPSTITUIRANIH NUKLEOBAZA <i>REDOX PROPERTIES OF FERROCENE-SUBSTITUTED NUCLEOBASES</i>	58
Darko Vušak, Biserka Prugovečki, Dubravka Matković-Čalogović OTAPALOM KONTROLIRANA SINTEZA HIDRATA KOMPLEKSNIH SPOJEVA BAKRA S GLICINOM I 2,2'-BIPYRIDINOM <i>SOLVENT CONTROLLED SYNTHESIS OF HYDRATES OF COPPER COMPLEX COMPOUNDS WITH GLYCINE AND 2,2'-BIPYDINE</i>	59

POSTERSKA IZLAGANJA / POSTER PRESENTATIONS

ANALIZA, SINTEZA I VOĐENJE PROCESA <i>PROCESS ANALYSIS, SYNTHESIS AND DESIGN</i>	61
BIOKEMIJSKO INŽENJERSTVO <i>BIOCHEMICAL ENGINEERING</i>	66
EKOINŽENJERSTVO <i>ENVIRONMENTAL ENGINEERING</i>	79
MEHANIČKI, TOPLINSKI I SEPARACIJSKI PROCESI <i>MECHANICAL, THERMAL AND SEPARATION PROCESSES</i>	104
REAKCIJSKO INŽENJERSTVO <i>REACTION ENGINEERING</i>	111
RAZVOJ MATERIJALA I PROIZVODA <i>MATERIALS AND PRODUCTS DEVELOPMENT</i>	123
PRIMIENJENA KEMIJA <i>APPLIED CHEMISTRY</i>	147
POKROVITELJI / AUSPICIES	191
SPONZORI / SPONSORS	192
DONATORI / DONATORS	198

PROGRAM
PROGRAM

MJESTO ODRŽAVANJA / VENUE

Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije / *Faculty of Chemical Engineering and Technology*, Zagreb,
Marulićev trg 20

PRIJAVA SUDIONIKA / REGISTRATION

Hodnik Velike dvorane – ulaz iz zgrade / *Hall A – entrance inside the building*

Četvrtak, 20. veljače 2020. | 08:00 – 17:00
Thursday, Feb 20, 2020

Petak, 21. veljače 2020. | 08:00 – 10:00
Friday, Feb 21, 2020

OTVARANJE SUSRETA / OPENING CEREMONY

Velika dvorana / *Hall A*

Četvrtak, 20. veljače 2020. | 09:00 – 10:00
Thursday, Feb 20, 2020

USMENA IZLAGANJA / ORAL PRESENTATIONS

Velika dvorana, prema rasporedu / *Hall A, according to timetable*

Četvrtak, 20. veljače 2020. | 10:00 – 16:45
Thursday, Feb 20, 2020

Petak, 21. veljače 2020. | 09:00 – 16:45
Friday, Feb 21, 2020

2

POSTERI / POSTERS

Predavaonica i hodnik – prvi kat, prema rasporedu /
Lecture room and hallway – first floor, according to timetable

Četvrtak, 20. veljače 2020. | 09:00 – 17:45 posteri broj | *poster numbers 1 – 58*
Thursday, Feb 20, 2020

Petak, 21. veljače 2020. | 09:00 – 13:30 posteri broj | *poster numbers 59 – 124*
Friday, Feb 21, 2020

Postere je potrebno postaviti na panoe na dan definiran rasporedom ujutro (8:00 – 9:00 h) i skinuti na kraju dana. / *Posters should be placed on boards in the morning (8:00 – 9:00 h) according to schedule and removed at the end of the day.*

POSTERSKA PRIOPĆENJA / POSTER PRESENTATIONS

Četvrtak, 20. veljače 2020. | 16:45 – 17:45 posteri broj | *poster numbers 1 – 58*
Thursday, Feb 20, 2020

Petak, 21. veljače 2020. | 12:15 – 13:15 posteri broj | *poster numbers 59 – 124*
Friday, Feb 21, 2020

Mole se autori da budu pokraj postera za vrijeme posterske sekcije. / *Authors are kindly invited to stand by their posters during poster session.*

DODJELA NAGRADA I ZATVARANJE SUSRETA / *CLOSING CEREMONY AND AWARDS*

Velika dvorana / *Hall A*

Petak, 21. veljače 2020. |

Friday, Feb 21, 2020

17:00 – 17:45

DOMJENAK / *BANQUET + PAUZA ZA KAVU / COFFEE BREAK*

Klub nastavnika – podrum / *The Faculty Club – basement*

ČETVRTAK, 20. veljače 2020.

THURSDAY, 20th February 2020

09:00 – 10:00 **Otvaranje Susreta / Opening ceremony**

Dvorana / Venue: Velika dvorana / Hall A

PLENARNO IZLAGANJE / PLENARY LECTURE

10:00 – 11:00 **Jens-Uwe Repke**

TOWARDS INTENSIFIED AND SUSTAINABLE PROCESSES – A SYSTEMATIC APPROACH FOR IDENTIFICATION AND ANALYSIS OF PLANT DESIGN AND OPERATION

Moderatori / Chairs: Igor Dejanović, Domagoj Vrsaljko

STANKA ZA KAVU / COFFEE BREAK

POZVANA IZLAGANJA / INVITED LECTURES

11:30 – 12:00 **Blaž Likozar**

HOW CAN (MULTI-SCALE) MODELLING, SIMULATIONS AND ENGINEERING HELP BIO-REFINING

12:00 – 12:30 **Thomas Grützner**

NEXT GENERATION SEPARATION UNITS – RESEARCH AT ULM UNIVERSITY

12:30 – 13:00 **Ozren Wittine**

*KRAJ SVIJETA JE BLIZU! (ZA ŠARŽNE PROCESE)
END OF THE WORLD IS NEAR! (FOR BATCH PROCESSES)*

Moderatori / Chairs: Igor Dejanović, Domagoj Vrsaljko

STANKA ZA KAVU / COFFEE BREAK

USMENA IZLAGANJA / ORAL PRESENTATIONS

Analiza, sinteza i vođenje procesa / Process analysis, synthesis and design

13:30 – 13:45 **Ulrich Preißinger**, Goran Lukač, Igor Dejanović, Thomas Grützner

CONSIDERATIONS ON THE DESIGN OF A PILOT-PLANT-SCALE SIMPLIFIED MULTIPLE DIVIDING WALL COLUMN

13:45 – 14:00 **Nenad Zečević**, Nenad Bolf

*DIGITALNI MODEL PRIMARNOG PARNOG REFORMINGA PRIRODNOG PLINA U PROIZVODNJI SINTEZNOG PLINA
DIGITAL TWIN MODEL OF PRIMARY STEAM REFORMER OF NATURAL GAS IN SYNGAS PRODUCTION*

Moderatori / Chairs: Domagoj Vrsaljko, Katarina Mužina

Biokemijsko inženjerstvo / Biochemical engineering

14:00 – 14:15 **Nevena Milčić**, Marko Pranić, Martina Sudar, Zvezdana Findrik Blažević, Maja Majerić Elenkov

*KINETIČKA KARAKTERIZACIJA HALOGENHIDRIN-DEHALOGENAZE PRI SINTEZI FLUOROAROMATSKIH VICINALNIH AZIDOALKOHOLA
KINETIC CHARACTERIZATION OF HALOHYDRIN DEHALOGENASE IN THE SYNTHESIS OF FLUOROAROMATIC VICINAL AZIDOALCOHOLS*

- 14:15 – 14:30** **Martina Sudar**, Nevena Milčić, Marina Svetec Miklenić, Ivan-Krešimir Svetec, Maja Majerić Elenkov, Zvezdana Findrik Blažević
PRIPREMA BIODOKALIZATORA
PREPARATION OF BIODOCALYSTS
- 14:30 – 14:45** **Darijo Šibalić**, Anita Šalić, Bruno Zelić, Marina Tišma
RAZVOJ TESTA ZA MJERENJE AKTIVNOSTI ENZIMA LIPAZE PORIJEKLOM IZ
Thermomyces lanuginosus
DEVELOPMENT OF THE ASSAY FOR MEASUREMENT OF Thermomyces lanuginosus
LIPASE ACTIVITY

Moderatori / Chairs: Domagoj Vrsaljko, Katarina Mužina

STANKA ZA KAVU / COFFEE BREAK

Mehanički, toplinski i separacijski procesi / Mechanical, thermal and separation processes

- 15:00 – 15:15** **Edina Ibrić**, Ajla Mandalović, Samela Selimović, Zvonimir Jažo, Zehrudin Osmanović
EKSTRAKCIJA ETERIČNOG ULJA IZ SMREKE (*Juniperus communis*), KADULJE (*Salvia officinalis* L.) I SMILJA (*Helichrysum italicum* (Roth) G. Don)
EXTRACTION OF ESSENTIAL OIL FROM SPRUCE (Juniperus communis), SAGE (Salvia officinalis L.) AND IMMORTELLE (Helichrysum italicum (Roth) G. Don)
- 15:15 – 15:30** **Lilla Virag**, Róbert Bocsi, Dóra Rippelné Pethő
POLYLACTIC ACID-BASED GRANULE PROPERTIES FOR SOLVENT SORPTION AND RELEASE

Moderatori / Chairs: Zvonimir Katančić, Matija Cvetnić

Ekoinženjerstvo / Environmental engineering

- 15:30 – 15:45** **Ula Rozman**, Andreja Žgajnar Gotvajn, Tina Skalar, Marija Zupančič, Tilen Turk, Gabriela Kalčikova
CHARACTERIZATION OF MICROPLASTIC PARTICLES USED IN MICROPLASTICS RESEARCH
- 15:45 – 16:00** **Sarah Mateša**, Marija Marguš, Irena Ciglencečki
VARIJABILNOST FIZIKALNO – KEMIJSKIH PARAMETARA U KEMOKLINI ROGOZNIČKOGA JEZERA
VARIABILITY OF PHYSICO-CHEMICAL PARAMETERS IN THE CHEMOCLINE OF ROGOZNICA LAKE
- 16:00 – 16:15** **Tamara Minović Arsić**
SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF CARBON CRYOGEL AND CARBON CRYOGEL/CERIA COMPOSITE FOR ARSENIC(III) ADSORPTION FROM WATER SOLUTIONS

Moderatori / Chairs: Zvonimir Katančić, Matija Cvetnić

Primijenjena kemija / Applied chemistry

- 16:15 – 16:30** **Bahar Karadeniz**, Krunoslav Užarević, Dijana Žilić, Senada Muratović
MECHANOCHEMICAL SYNTHESIS OF POLYMORPHIC METAL-ORGANIC FRAMEWORKS AND THEIR TOPOLOGY TRANSFORMATION

16:30 – 16:45 **Sara Krivačić**, Luka Pavić, Andrea Moguš-Milanković, Ana Šantić
NISKA POKRETLJIVOST KALIJEVIH IONA U ŽELJEZNO FOSFATNIM STAKLIMA
LOW MOBILITY OF POTASSIUM IONS IN IRON PHOSPHATE GLASSES

Moderatori / *Chairs*: Zvonimir Katančić, Matija Cvetnić

16:45– 17:45 **POSTERSKA PRIOPĆENJA / POSTER PRESENTATIONS**

Predavaonica i hodnik – prvi kat, prema rasporedu /
Lecture room and hallway – first floor, according to timetable

PETAK, 21. veljače 2020.

FRIDAY, 21st February 2020

PLENARNO IZLAGANJE / *PLENARY LECTURE*

09:00 – 10:00

Žarko Olujić

SMANJIVANJE POTREBNE ENERGIJE I EMISIJA UGLJIKOVA DIOKSIDA U
PROCESNIM INDUSTRIJAMA KROZ UNAPREĐENJE DESTILACIJSKE TEHNOLOGIJE
*REDUCING PROCESS INDUSTRY ENERGY DEMAND & CARBON DIOXIDE
EMISSIONS THROUGH DISTILLATION TECHNOLOGY ADVANCES*

Moderatori / Chairs: Igor Dejanović, Krunoslav Žižek

POZVANA IZLAGANJA / *INVITED LECTURES*

10:00 – 10:30

Franjo Jović

RIZICI I OPASNOSTI PRI PROVOĐENJU KEMIJSKIH REAKCIJA – PRIČA O
SIGURNOSTI PROCESA
CHEMICAL REACTION HAZARDS – STORY ABOUT PROCESS SAFETY

Moderatori / Chairs: Igor Dejanović, Krunoslav Žižek

PAUZA ZA KAVU / *COFFEE BREAK*

11:00 – 11:30

Jelena Macan

KERAMIČKI MATERIJALI IZ OTOPINE – PREDNOSTI I IZAZOVI
CERAMICS FROM AQUEOUS SOLUTIONS – ADVANTAGES AND CHALLENGES

11:30 – 12:00

Irena Škorić

DIZAJN, SINTEZA I INHIBICIJA KOLINESTERAZA NOVIH
OKSIMSKIH I AMINO-DERIVATA
*DESIGN, SYNTHESIS AND CHOLINESTERASE INHIBITORY PROPERTIES OF
NEW AMINE AND OXIME DERIVATIVES*

Moderatori / Chairs: Krunoslav Žižek, Marina Duplančić

USMENA IZLAGANJA / *ORAL PRESENTATIONS*

Razvoj materijala i proizvoda / *Materials and products development*

12:00 – 12:15

David Bjelanović, Andrea Nesterović, Jelena Vukmirović, Ivan Stijepović,
Marija Milanović, Vladimir Srdić

$\text{Bi}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{TiO}_3$ PIEZOELEKTRIČNA KERAMIKA ZA UPOTREBU U PRIKUPLJANJU
ENERGIJE DOBIJENA SINTEZOM U ČVRSTOJ FAZI
 *$\text{Bi}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{TiO}_3$ PIEZOELECTRIC CERAMICS FOR ENERGY-HARVESTING
APPLICATIONS PREPARED BY SOLID STATE SYNTHESIS*

12:15 – 12:30

Lea Čolakić, Mateja Pisačić, Marijana Đaković

MEHANIČKI ODZIV KRISTALA KADMIJEVIH(II) HALOGENIDA S OKSIMSKIM
DERIVATIMA PIRIDINA
*MECHANICALLY RESPONSIVE CRYSTALS OF CADMIUM(II) HALIDES WITH OXIME
DERIVATIVES OF PYRIDINE*

Moderatori / Chairs: Krunoslav Žižek, Marina Duplančić

12:30 – 13:30

POSTERSKA PRIOPĆENJA / *POSTER PRESENTATIONS*

Predavaonica i hodnik – prvi kat, prema rasporedu /

Lecture room and hallway – first floor, according to timetable

STANKA ZA KAVU / *COFFEE BREAK*

USMENA IZLAGANJA / *ORAL PRESENTATIONS*

Razvoj materijala i proizvoda / *Materials and products development*

- 14:00 – 14:15 **Strahinja Janković**, Sara Joksović, Andrea Nesterović, Ivan Stijepović, Marija Milanović, Vladimir V. Srdić
PREPARATION OF NANOCRYSTALLINE $Bi_{0.5}Na_{0.5}TiO_3$ THIN FILMS FOR MICROELECTRONIC APPLICATIONS
- 14:15 – 14:30 **Sara Joksović**, Strahinja Janković, Ivan Stijepović, Jelena Vukmirović, Vladimir V. Srdić
THICKNESS CONTROL OF $LaMnO_3$ THIN FILMS PREPARED BY CSD/PAD TECHNIQUE
- 14:30 – 14:45 **Aleksa Kočišev**, Mirjana Jovičić, Marija Milanović
THE INFLUENCE OF ZEOLITE ON THE PROPERTIES OF RUBBER COMPOSITES BASED ON THE NATURAL RUBBER
- 14:45 – 15:00 **Lucija Mandić**, Anja Sadžak, Suzana Šegota
FUNCTIONALIZED MAGNETITE NANOPARTICLES FOR DRUG DELIVERY: SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION METHODS
- 15:00 – 15:15 **Sanja Renka**, Luka Pavić, Petr Kalenda, Petr Mošner, Ladislav Koudelka, Ana Šantić
POLARONSKA VODLJIVOST U $WO_3-P_2O_5$ I $MoO_3-P_2O_5$ STAKLIMA
POLARONIC CONDUCTIVITY IN $WO_3-P_2O_5$ I $MoO_3-P_2O_5$ GLASSES

Moderatori / *Chairs*: Josipa Papac, Zvonimir Katančić

8

PAUZA ZA KAVU / *COFFEE BREAK*

Primijenjena kemija / *Applied chemistry*

- 15:30 – 15:45 **Tomislav Gojšić**, Saša Opačak, Berislav Perić, Srećko Kirin
UNEXPECTED REACTIVITY OF PROPIOLIC ACID AND TRIAZOLES
- 15:45 – 16:00 **Dunja Ljubičić**, Snežana Vučetić
IN-SITU EXAMINATION OF HISTORICAL PAINTINGS
- 16:00 – 16:15 **Mislav Matić**, Ema Horak, Ivana Murković Steinberg
FLUORESCENCIJSKI OPTIČKI SENZOR ZA DETEKCIJU Hg^{2+} IONA NA BAZI DERIVATA BENZIMIDAZOLA
FLUORESCENCE OPTICAL SENSOR FOR Hg^{2+} ION DETECTION BASED ON BENZIMIDAZOLE DERIVATIVE
- 16:15 – 16:30 Anja Bošnjaković, **Ankica Sekovanić**, Jasna Jurasović, Tatjana Orct, Antonija Sulimanec Grgec, Martina Piasek
ODREĐIVANJE ELEMENATA U KOSI: ODABIR ODGOVARAJUĆE PROCEDURE PRANJA UZORKA
ELEMENT DETERMINATION IN HAIR: SELECTION OF THE SUITABLE SAMPLE WASHING PROCEDURE
- 16:30 – 16:45 **Mateja Toma**, Valerije Vrček
REDOKS SVOJSTVA FEROCENOM SUPSTITUIRANIH NUKLEOBAZA
REDOX PROPERTIES OF FERROCENE-SUBSTITUTED NUCLEOBASES

16:45 – 17:00

Darko Vušak, Biserka Prugovečki, Dubravka Matković-Čalogović
OTAPALOM KONTROLIRANA SINTEZA HIDRATA KOMPLEKSNIH SPOJEVA
BAKRA S GLICINOM I 2,2'-BIPIRIDINOM
*SOLVENT CONTROLLED SYNTHESIS OF HYDRATES OF COPPER COMPLEX
COMPOUNDS WITH GLYCINE AND 2,2'-BIPYDINE*

Moderatori / *Chairs*: Krunoslav Žižek, Marina Duplančić

DODJELA NAGRADA I ZATVARANJE SKUPA / *AWARDS AND CLOSING CEREMONY*

Dvorana / *Venue*: Velika dvorana / *Hall A*

DOMJENAK / *Banquet*

Klub nastavnika – podrum / *The Faculty Club – basement*

POSTERSKA IZLAGANJA

POSTER PRESENTATIONS

ČETVRTAK, 20. veljače 2020.

THURSDAY, 20th February 2020

Analiza, sinteza i vođenje procesa / Process analysis, synthesis and design

- 1 **Srečko Herceg, Željka Ujević Andrijić, Nenad Bolf**
METODA POTPORNIH VEKTORA KAO SOFTVERSKI SENZORI NA PROCESU IZOMERIZACIJE
SUPPORT VECTOR MACHINE-BASED SOFT SENSORS IN THE ISOMERIZATION PROCESS
- 2 **Zvonimir Jukić, Ante Čović-Stanić**
MODELIRANJE I OPTIMIRANJE PROCESA PROIZVODNJE TEKUĆIH ORGANSKIH GNOJIVA NA
BILJNOJ BAZI
*MODELING AND OPTIMIZATION OF THE PRODUCTION PROCESS OF A PLANT BASIS LIQUID
ORGANIC FERTILIZERS*
- 3 **Goran Lukač, Ulrich Preißinger, Thomas Grützner, Igor Dejanović**
SIMULATING COMPLEX DISTILLATION SEQUENCES USING COMMERCIAL SIMULATORS
- 4 **Nikola Rimac, Željka Ujević Andrijić**
PREGLED METODA I RAZVOJ MODELA U PROGRAMSKOM JEZIKU PYTHON ZA PREPOZNAVANJE
I PREDVIĐANJE NASTAJANJA NASLAGA U INDUSTRIJSKIM IZMJENJIVAČIMA TOPLINE
*A REVIEW OF METHODS AND MODEL DEVELOPMENT IN PYTHON PROGRAMMING LANGUAGE
FOR FOULING DETECTION AND PREDICTION IN INDUSTRIAL HEAT EXCHANGERS*
- 5 **Veronika Žlabravec, Valentina Šimatović, Hrvoje Dorić, Nenad Bolf**
KALIBRACIJSKI MODEL ZA KONTINUIRANO PRAĆENJE RASPODJELE VELIČINE ČESTICA
CALIBRATION MODEL FOR CONTINUOUS PARTICLE SIZE DISTRIBUTION MONITORING

Biokemijsko inženjerstvo / Biochemical engineering

- 6 **Zoran Bila, Martin Češi, Marko Čombor, Ivana Čulo, Filip Grgić, Davor Valinger,
Maja Benković, Tamara Jurina, Ana Jurinjak Tušek, Jasenka Gajdoš Kljusurić**
USPOREDBA EMULZIFIKACIJE U ŠARŽNOM REAKTORU I MIKROREAKTORU – DVOFAZNI SUSTAV
ULJE-VODA
*COMPARISON OF BATCH AND MICROREACTOR EMULSIFICATION PROCESS – TWO PHASE
SYSTEM OIL - WATER*
- 7 **Ivona Čupić, Ana Novak, Iva Čukelj, Manuela Panić, Martina Andlar,
Ivana Radojčić Redovniković, Marina Cvjetko Bubalo**
PRIMJENA EUTEKTIČKIH OTAPALA U VALORIZACIJI OTPADA NARANČINE KORE
APPLICATION OF DEEP EUTECTIC SOLVENTS IN VALORISATION OF ORANGE PEEL WASTE
- 8 **Amila Dubravac, Meldina Omerčević, Mirnesa Zohorović, Emir Horozić,
Husejin Keran**
THE INFLUENCE OF CONTACT TIME IN REMOVING Cr(IV) IONS FROM WATER USING
LEMON PEEL AS LOW-COST ADSORBENT
- 9 **Čila Holpert, Anja Saveljić**
USPOREDBA RAZINE UREOLIZE IZMEĐU BAKTERIJSKIH SOJEVA IZOLIRANIH
IZ ALKALNIH PODRUČJA
*COMPARISON OF UREOLYSIS RATES BETWEEN BACTERIAL STRAINS ISOLATED
FROM ALKALINE SOILS*

- 10 **Anja Karatović, Sandra Remenar, Brigita Herout, Tamara Jurina, Davor Valinger, Maja Benković, Jasenka Gajdoš Kjusurić, Ana Jurinjak Tušek**
ANALIZA GLOBALNE OSJETILJOSTI KINETIČKIH PARAMETERA MODEL METABOLIZMA TRIPTOFANA
GLOBAL SENSITIVITY ANALYSIS OF TRYPTOPHAN METABOLISM MODEL KINETIC PARAMETERS
- 11 **Barbara Kolić, Dino Skendrović, Ana Vrsalović Presečki**
OPTIMIRANJE UVJETA IMOBILIZACIJE ALDOLAZE NA MEZOPOROZNU SILIKU
OPTIMISATION OF ALDOLASE IMMOBILIZATION ON MESOPOROUS SILICA
- 12 **Petra Marin, Nevena Milčić, Irena Dokli, Martina Sudar, Zvezdana Findrik Blažević, Maja Majerić Elenkov**
BIOKATALITIČKA AZIDOLIZA FLUORO-SUPSTITUIRANIH DERIVATA STIREN-OKSIDA
BIOCATALYTIC AZIDOLYSIS OF FLUORO-SUBSTITUTED STIREN-OXIDE DERIVATIVES
- 13 **Lela Martinaga, Katarina Komljenović, Ana Vrsalović Presečki, Iva Rezić**
KINETIKA I MEHANIZAM ENZIMATSKE SINTEZE NANOČESTICA ZLATA
KINETICS AND MECHANISM OF THE ENZYMATIC SYNTHESIS OF THE GOLD NANOPARTICLES
- 14 **Petra Pohanić, Lela Martinaga, Ana Vrsalović Presečki, Iva Rezić**
MODELIRANJE ENZIMATSKE SINTEZE NANOČESTICA SREBRA
MODELLING OF THE ENZYMATIC SYNTHESIS OF SILVER NANOPARTICLES
- 15 **Mia Radović, Manuela Panić, Ana Jurinjak Tušek, Marina Cvjetko Bubalo, Ivana Radojčić Redovniković**
STABILITY OF LIPASE IN NATURAL DEEP EUTECTIC SOLVENTS
- 16 **Dino Skendrović, Tomislav Rimac, Ana Vrsalović Presečki**
USPOREDBA UTJECAJA AKTIVACIJSKIH AGENSA NA EFIKASNOST I STABILNOST ALDOLAZE IMOBILIZIRANE NA MAGNETSKE NANOČESTICE
A COMPARISON OF ACTIVATING AGENTS FOR EFFICIENCY AND STABILITY OF ALDOLASE IMMOBILIZED ON MAGNETIC NANOPARTICLES
- 17 **Manuela Sovilj, Isidora Otašević**
BIOACTIVITY AND BIOAVAILABILITY OF RED PEPPER WASTE ENCAPSULATED BIOACTIVE COMPOUNDS AFTER IN VITRO GASTROINTESTINAL DIGESTION

Ekoinženjerstvo / *Environmental engineering*

- 18 **Danilo Bertagna Silva, Sandra Babić, Gianluigi Buttiglieri**
PHOTOREACTOR DESIGN FOR UV-LED PHOTOCATALYTIC DEGRADATION OF MICROPOLLUTANTS
- 19 **Barbara Bertović, Marija Vuković Domanovac**
BIOREMEDIJACIJA: ZELENI PRISTUP U OBRADI NAFTOM ONEČIŠĆENOG TLA
BIOREMEDIATION: A GREEN APPROACH FOR TREATMENT OF OIL CONTAMINATED SOIL
- 20 **Kristina Bule, Martina Miloloža, Dajana Kučić Grgić, Matija Cvetnić, Vesna Ocelić Bulatović**
ODREĐIVANJE TOKSIČNOSTI MIKROPLASTIKE S MIKROALGOM *Chlorella* sp.
DETERMINATION OF MICROPLASTICS TOXICITY WITH MICROALGAE Chlorella sp.
- 21 **Francis M. dela Rosa, Josipa Papac, Antonija Tomić, Marin Kovačić, Marijana Kraljić Roković, Hrvoje Kušić, Urška Lavrenčić Štangar, Ana Lončarić Božić**
FACILE PREPARATION OF TiO_2/Fe_2O_3 LAYERED COMPOSITE FILMS FOR SOLAR-DRIVEN PHOTOCATALYTIC DEGRADATION OF PHARMACEUTICALS

- 22 **Dorian Delić, Hana Duhaček, Stella Hamilton, Matija Cvetnić, Dajana Kučić Grgić, Viktorija Prevarić, Marija Sigurnjak, Šime Ukić, Marinko Markić, Tomislav Bolanča**
UKLANJANJE MIKROPLASTIKE NAPREDNIM OKSIDACIJSKIM PROCESIMA
MICROPLASTICS REMOVAL BY ADVANCED OXIDATION PROCESSES
- 23 **Valentina Gluščić, Martina Šilović Hujčić, Ivan Bešlić, Silvije Davila, Gordana Pehnec**
RAZINE VODIKOVOG SULFIDA, AMONIJAKA I MERKAPTANA U ZRAKU NA PODRUČJU CUPOVZ-a
LEVELS OF HYDROGEN SULPHIDE, AMMONIA AND MERCAPTANS IN THE AIR OF CUPOVZ AREA
- 24 **Emir Hodžić, Elma Alić, Emir Horozić**
MONITORING EMISIJA POLUTANATA NA PODRUČJU GRADA TUZLE
MONITORING OF POLLUTANTS EMISSIONS IN THE TUZLA CITY
- 25 **Sanja Ivanušić, Marin Ganjto, Monika Šabić Runjavec, Marija Vuković Domanovac**
SASTAV MIKROBNE ZAJEDNICE U POSTROJENJU ZA PROČIŠĆAVANJE KOMUNALNE OTPADNE VODA
COMPOSITION OF MICROBIAL COMMUNITIES IN MUNICIPAL WASTEWATER TREATMENT PLANT
- 26 **Ivana Jakovljević, Zdravka Sever Štrukil, Gordana Pehnec, Ivan Bešlić, Andrea Milinković, Saranda Bakija Alempijević, Sanja Frka**
USPOREDBA MASENIH KONCENTRACIJA PAU U PRIOBALNOM PODRUČJU SREDNJEG JADRANA I SREDIŠNJOJ HRVATSKOJ
COMPARISON OF MASS CONCENTRATIONS OF PAHs IN COASTAL AREA OF THE MIDDLE ADRIATIC AND MIDDLE CROATIA
- 27 **Klara Karadakić, Iva Ćurić, Davor Dolar**
UKLANJANJE BOJE IZ TEKSTILNE OTPADNE VODE ULTRAFILTRACIJSKIM MEMBRANAMA
COLOUR REMOVAL FROM TEXTILE WASTEWATER BY ULTRAFILTRATION MEMBRANES
- 28 **Peter Kočman, Simon Schnabl**
THE IMPACT OF CLIMATE CHANGE ON FOREST FIRE RISK
- 29 **Antonija Kovačević, Ema Lovrinčić, Martina Miloloža, Vesna Ocelić Bulatović, Dajana Kučić Grgić**
ISPITIVANJE EKOTOKSIČNOSTI MIKROPLASTIKE
DETERMINATION OF ECOTOXICITY OF MICROPLASTICS
- 30 **Jan Marčec, Mateo Topić, Petar Markužić, Ana-Maria Radovan, Lucija Radetić, Igor Jajčinović, Ivan Brnardić, Ivana Grčić**
PROČIŠĆAVANJE ZRAKA SOLARNOM FOTOKATALIZOM - RAZGRADNJA AMONIJAKA I METANA
SOLAR PHOTOCATALYSIS FOR AIR PURIFICATION - AMMONIA AND METHANE DEGRADATION
- 31 **Nevena Milčić, Zvezdana Findrik Blažević, Marija Vuković Domanovac**
FITOEKSTRAKCIJA I FITOSTABILIZACIJA TEŠKIH METALA
PHYTOEXTRACTION AND PHYTOSTABILIZATION OF HEAVY METALS

- 32 **Hrvoje Nikl, Matija Cvetnić, Tomislav Bolanča, Marko Rogošić**
MEĐULABORATORIJSKO USPOREDBENO MJERENJE KONCENTRACIJE O₂, CO, NO I SO₂ U
OTPADNOM PLINU
*INTER-LABORATORY COMPARISON MEASUREMENT OF CONCENTRATIONS OF O₂, CO, NO
AND SO₂ IN WASTE GASES*
- 33 **Josipa Papac, Marin Kovačić, Katarina Kljajić, Dorotea Piškor, Boštjan Žener,
Urška Lavrenčić Štangar, Hrvoje Kušić, Ana Lončarić Božić**
PHOTOCATALYTIC DEGRADATION OF OXYTETRACYCLINE IN WATER BY N-TIO₂
PHOTOCATALYST UNDER VISIBLE IRRADIATION
- 34 **Petra Penić, Karolina Kolarić, Ana Amić**
ISTRAŽIVANJE KVALITETE POVRŠINSKE VODE SLIVA KARAŠICE-VUČICE
ASSESSMENT OF SURFACE WATER QUALITY OF VUČICA-KARAŠICA RIVER
- 35 **Leja Pleško, Janez Cerar, Andreja Žgajnar Gotvajn, Gabriela Kalčikova**
*ENVIRONMENTALLY RELEVANT TOXICITY TESTING OF WATER-INSOLUBLE SURFACE
COATINGS*
- 36 **Lucija Radetić, Jan Marčec, Ana-Maria Radovan, Kristina Šimunković, Karlo Leskovar,
Kristina Tolić, Dragana Mutavdžić Pavlović, Ivana Grčić**
RAZGRADNJA MIKROONEČIŠĆIVALA U VODAMA SOLARNOM FOTOKATALIZOM U
TANKOM SLOJU
DEGRADATION OF MICROPOLLUTANT BY THIN-LAYER SOLAR PHOTOCATALYSIS
- 37 **Amin Samzadeh, Jelena Kovačić, Matija Cvetnić, Šime Ukić, Dajana Kučić Grgić, Viktorija
Prevarić, Marija Sigurnjak, Martina Miloloža, Tomislav Bolanča**
*ADVANCED OXIDATION PROCESSES FOR DEGRADATION OF ETODOLAC AND FEBUXOSTAT IN
WATER*
- 38 **Ivana Stojmilović, Monika Šabić Runjavec, Dubravka Čelig,
Zvezdana Findrik Blažević, Marija Vuković Domanovac**
IZOLACIJA SELEKTIRANIH MIKROBNIH KULTURA IZ TLA ONEČIŠĆENOG HERBICIDIMA
ISOLATION OF SELECTED MICROBIAL CULTURES FROM A HERBICIDE CONTAMINATED SOIL
- 39 **Antonija Tomić, Francis dela Rosa, Marin Kovačić, Hrvoje Kušić,
Ana Lončarić Božić**
*PHOTOCATALYTIC DEGRADATION OF PHARMACEUTICALS IN WATER: RESPONSE SURFACE
MODELING APPROACH*
- 40 **Juraj Vdović, Leo Dorogi, Ivan Pehar, Hrvoje Nikl, Marko Rogošić,
Tomislav Bolanča, Matija Cvetnić**
PERIODIČKA MJERENJA EMISIJA KONCENTRACIJA OTPADNOG PLINA CO, KRUTIH ČESTICA I
VLAGE IZ ASFALJNIH BAZA TVRKE STRABAG CROATIA D.O.O.
*PERIODIC MEASUREMENTS OF WASTE GAS EMISSIONS OF CO, PARTICULATE MATTER AND
MOISTURE CONCENTRATIONS FROM ASPHALT BASES OF COMPANY STRABAG CROATIA
D.O.O.*
- 41 **Anja Vehar, Nadja Hvala, Marjetka Levstek, Ana Kovačić, Ester Heath,
Marjetka Stražar, Andreja Žgajnar Gotvajn**
*DISINFECTION OF WASTEWATER WITH PERACETIC ACID – TOXICITY AND
MICROPOLLUTANT REMOVAL*

Mehanički, toplinski i separacijski procesi / *Mechanical, thermal and separation processes*

- 42 **Marija Banožić, Maja Matić, Silvija Šafranko, Ana-Marija Cikoš, Martina Jakovljević, Maja Molnar, Stela Jokić**
EKSTRAKCIJA BIOAKTIVNIH SPOJEVA IZ DUHANSKOG OTPADA PRIMJENOM EUTEKTIČKIH OTAPALA
EXTRACTION OF BIOACTIVE COMPOUNDS FROM TOBACCO WASTE USING DEEP EUTECTIC SOLVENTS
- 43 **Marina Gapit, Ema Pollak, Ana Petračić, Aleksandra Sander**
PROIZVODNJA BIODIZELA IZ OTPADNOG TALOGA KAVE
BIODIESEL PRODUCTION FROM WASTE COFFEE GROUNDS
- 44 **Anamarija Mitar, Damir Jakus, Ana Juričić, Dalibor Marjan, Jasna Prlić Kardum**
PRIPREMA TERAPEUTSKIH NISKOTEMPERATURNIH EUTEKTIČKIH OTAPALA (THEDES)
PREPARATION OF THERAPEUTIC DEEP EUTECTIC SOLVENTS (THEDES)
- 45 **Josipa Skočibušić, Gabriela Brnadić, Mirna Filakovac, Ivona Tomljanović, Joško Barbarić, Krunoslav Žižek**
POVEĆANJE TOPLJIVOSTI I BRZINE OSLOBAĐANJA LURASIDON-HIDROKLORIDA PRIMJENOM LIOFILIZACIJE
ENHANCING THE SOLUBILITY AND RELEASE RATE OF LURASIDONE HYDROCHLORIDE USING LYOPHILIZATION
- 46 **Jelena Šurlan, Teodora Cvanić, Nikola Maravić, Lidija Peić Tukuljac**
ADSORPCIJA MELASOTVORNIH METALA K I Na NA REZANCE ŠEĆERNE REPE
ADSORPTION OF K AND Na ON SUGAR BEET NOODLES
- 47 **Dominik Varga, Tea Barbaro, Ivona Lacko, Dario Tomić, Joško Barbarić, Krunoslav Žižek**
PRIPRAVA I KARAKTERIZACIJA RASPADLJIVIH TABLETA ZA USTA
PREPARATION AND CHARACTERIZATION OF ORALLY DISINTEGRATING TABLETS

Reakcijsko inženjerstvo / *Reaction engineering*

- 48 **Teja Antončič, Andreja Žgajnar Gotvajn**
DEGRADATION KINETICS OF SELECTED ANTIBIOTICS BY OZONE-BASED REACTIONS
- 49 **Matea Bačić, Anabela Ljubić, Martin Gojun, Anita Šalić**
KINETIČKI MODEL SINTEZE BIODIZELA KATALIZIRANE ENZIMOM LIPAZA
KINETIC MODEL OF BIODIESEL SYNTHESIS CATALYSED BY LIPASE
- 50 **Vladimir Cvetojević, Hrvoje Dragozet, Vanja Kosar**
ISTRAŽIVANJE HIDRODINAMIKE U RAZLIČITIM IZVEDBAMA ANULARNOG FOTOKATALITIČKOG REAKTORA
RESEARCH OF HYDRODYNAMICS IN VARIOUS DESIGNS OF AN ANNULAR PHOTO-CATALYTIC REACTOR
- 51 **Sara Čačko, Stella Hamilton, Lela Martinaga, Ana Vrsalović Presečki**
ISPITIVANJE UVJETA SINTEZE NANOČESTICA SREBRA UZ GLUKOZU
GLUCOSE MEDIATED SILVER NANOPARTICLE SYNTHESIS

- 52 **Martin Gojun, Tea Sokač, Anita Šalić**
PRIMJENA ULTRAFILTRACIJSKIH MEMBRANA ZA PROČIŠĆAVANJE BIODIZELA
APPLICATION OF ULTRAFILTRATION MEMBRANES FOR BIODIESEL PURIFICATION
- 53 **Stella Hamilton, Sara Čačko, Lela Martinaga, Ana Vrsalović Presečki**
ISPITIVANJE UVJETA SINTEZE NANOČESTICA ZLATA UZ GLUKOZU
GLUCOSE MEDIATED GOLD NANOPARTICLE SYNTHESIS
- 54 **Filip Kurt, Katarina Licht, Vanja Kosar**
NEIDEALNO STRUJANJE U MODELNIM CIJEVIMA
NON-IDEAL FLOW IN MODEL TUBES
- 55 **Milica Lukić, Dženan Suljić**
HYDROGEN PRODUCTION BY ELECTROLYSIS OF AQUEOUS SOLUTION OF
SODIUM HYDROXIDE
- 56 **Viktorija Medvarić, Katarina Lisac, Nikola Cindro i Dominik Cinčić**
UGAĐANJE REAKCIJSKIH UVJETA MEHANOKEMIJSKE SINTEZE
PERHALOGENIRANOG AZOBENZENA
*OPTIMIZING THE CONDITIONS OF MECHANOCHEMICAL SYNTHESIS OF
PERHALOGENATED AZOBENZENE*
- 57 **Antonela Sirovina, Kristina Liber, Marina Duplančić**
FOTOKATALITIČKA RAZGRADNJA NEONIKOTINOIDNIH INSEKTICIDA U UVJETIMA
SIMULIRANOG SUNČEVOG ZRAČENJA
*PHOTOCATALYTIC DEGRADATION OF NEONICOTINIOD INSECTICIDES UNDER SIMULATED
SOLAR RADIATION CONDITIONS*
- 58 **Ivna Vukić, Marija Lukić, Vladimir Dananić**
PRIPRAVA I KARAKTERIZACIJA ČESTICA CuO SINTETIZIRANIH U MILIREAKTORU
SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF CuO PARTICLES IN MILLIREACTOR

- 59 **Vendi Barbir, Kristina Tolić, Dragana Mutavdžić Pavlović, Ida Boček, Marijana Hranjec, Mislav Runje**
STABILNOST TRIMETOKSI SUPSTITUIRANOG KARBOKSAMIDA 2-AMINO BENZIMIDAZOLA S ANTIOKSIDATIVNIM I ANTIPROLIFERATIVNIM DJELOVANJEM
STABILITY OF TRIMETHOXY SUBSTITUTED 2-AMINO BENZIMIDAZOLE CARBOXAMIDE WITH ANTIOXIDATIVE AND ANTIPROLIFERATIVE ACTIVITY
- 60 **Mateja Belovari, Davor Nestić, Željka Ban, Dragomira Majhen, Zoran Džolić**
BIS(TRIAZOLYL PYRENE)-DERIVED PSEUDOPEPTIDES: SYNTHESIS, FLUORESCENCE PROPERTIES AND BIOLOGICAL ACTIVITY
- 61 **Katarina Bilić, Ivana Balić, Elvira Kovač-Andrić, Ana Amić**
ISTRAŽIVANJE PRIMJENE BILJNOG MATERIJALA KAO KISELO-BAZNOG INDIKATORA
STUDY OF PLANT MATERIAL AS ACID-BASE INDICATOR
- 62 **Andrej Biškup, Đani Škalamera**
SINTEZA POTENCIJALNOG ADJUVANTA ZA CJEPIVA – KONJUGATA QUILLAJA SAPONINA I DESMURAMIL-DIPEPTIDA
SYNTHESIS OF A POTENTIAL VACCINE ADJUVANT – CONJUGATE OF QUILLAJA SAPONIN AND DESMURAMYL DIPEPTIDE
- 63 **Ida Boček, Matej Kadić, Leonarda Vugrin, Nataša Perin, Borka Lončar, Marijana Hranjec**
SINTEZA I SPEKTROSKOPSKA SVOJSTVA BIOLOŠKI AKTIVNIH TETRACIKLIČKIH REGIOIZOMERA IMIDAZO[4,5-*b*]PIRIDINA
*SYNTHESIS AND SPECTROSCOPIC PROPERTIES OF BIOLOGICALLY ACTIVE TETRACYCLIC REGIOISOMERS OF IMIDAZO[4,5-*b*]PYRIDINES*
- 64 **Kristina Crnjac, Marija Ćurić, Petra Marketin, Anja Beč, Nataša Perin, Maja Cindrić, Marijana Hranjec**
SPECTROSCOPIC CHARACTERIZATION OF BENZIMIDAZOLE CONJUGATES AS SENSORS FOR METAL CATIONS AND pH DETECTION IN SOLUTIONS
- 65 **Matija Čulig, Vinko Nemec, Dominik Cinčić**
HALOGENSKA VEZA U SOLIMA SULFONSKIH KISELINA I HALOGENPIRIDINA
HALOGEN BONDING IN SALTS OF SULFONIC ACIDS WITH HALOPYRIDINES
- 66 **Josip Draženović, Antonija Ožegović, Danijela Mihelec, Željka Car, Đani Škalamera, Vesna Petrović Peroković, Rosana Ribić**
PRIPRAVA PROPARGILNOG DERIVATA DESMURAMIL-DIPEPTIDA
SYNTHESIS OF PROPARGYL DERIVATIVE OF DESMURAMYL DIPEPTIDE
- 67 **Ivan Džajić, Edvin Brusač, Mario-Livio Jeličić, Daniela Amidžić Klarić, Biljana Nigović, Nikša Turk, Ana Mornar**
OPTIMIRANJE PRIPREME KRVNE PLAZME ZA ODREĐIVANJE 5-METILTETRAHIDROFOLATA
OPTIMIZATION OF BLOOD PLASMA PREPARATION FOR 5-METHYLTETRAHYDROFOLATE ASSAY

- 68 **Azra Đulović, Nikolina Anđelković, Marijana Popović, Elma Vuko, Nada Bezić, Vedrana Čikeš Čulić, Ivica Blažević**
Sisymbrium officinale (L.) Scop: GLUCOSINOLATE PROFILE AND SYNTHESIS OF ISOPROPYL ISOTHIOCYANATE
- 69 **Iva Fereža, Kristina Tolić, Dragana Mutavdžić Pavlović**
UTJECAJ pH OTOPINE NA SORPCIJU KRIZOTINIBA NA ČESTICE TiO₂ U SUSPENZIJI
THE INFLUENCE OF pH VALUE ON SORPTION OF CRIZOTINIB ON TiO₂ PARTICLES IN SUSPENSION
- 70 **Franka Folo, Natalija Pantalon Juraj, Srećko I. Kirin**
Zn(II) I Cu(II) KOMPLEKSI KIRALNIH IMINODIACETAMIDNIH LIGANADA
Zn(II) AND Cu(II) COMPLEXES OF CHIRAL IMINODIACETAMIDE LIGANDS
- 71 **Boris Gomaz, Ivana Kekez, Dubravka Matković-Čalogović, Biserka Prugovečki**
KRISTALIZACIJA DERIVATA INZULINA
CRYSTALIZATION OF INSULIN DERIVATIVES
- 72 **Elena Gotal, Ana Amić**
ISTRAŽIVANJE ANTIOKSIDACIJSKOG POTENCIJALA ODABRANIH OKSADIAZOLA: HAT vs ET-PT
ASSESSMENT OF ANTIOXIDANT POTENTIAL OF SELECTED OXADIAZOLES: HAT vs ET-PT
- 73 **Emir Horozić, Amira Cipurković, Halid Junuzović, Melisa Ahmetović, Lejla Mekić**
FIZIČKO-KEMIJSKA KARAKTERIZACIJA I BIOAKTIVNOST KOMPLEKSA ODABRANIH BIOMETALA S 8-HIDROKSIKINOLINOM
PHYSICO-CHEMICAL CHARACTERIZATION AND BIOACTIVITY OF SELECTED BIOMETAL COMPLEXES WITH 8-HYDROXYQUINOLINE
- 74 **Karla Jagić, Darija Klinčić, Marija Dvorščak**
ODABIR OTAPALA ZA UČINKOVITU EKSTRAKCIJU POLIBROMIRANIH DIFENIL ETERA IZ UZORAKA KUĆNE PRAŠINE UZ POMOĆ MIKROVALOVA
SOLVENT SELECTION FOR EFFECTIVE EXTRACTION OF POLYBROMINATED DIPHENYL ETHERS FROM HOUSE DUST SAMPLES USING MICROWAVES
- 75 **Mario Komar, Fran Prašnikar, Maja Molnar**
A COMPARISON OF GREEN CHEMISTRY METHODS IN SYNTHESIS OF QUINAZOLINONE BASED SCHIFF BASES
- 76 **Marija Kos, Donata Jambriško, Nataša Perin, Maja Cindrić, Marijana Hranjec**
SYNTHESIS AND STRUCTURAL CHARACTERIZATION OF NOVEL POTENTIAL BIOLOGICALLY ACTIVE BENZIMIDAZOLE AMIDE DERIVATIVES
- 77 **Magdalena Kralj, Irena Sović, Ivan Halasz, Antonio Supina, Davor Čapeta**
MECHANOCHEMICAL SYNTHESIS OF GRAPHENE OXIDE FOR FABRICATION OF 3D GRAPHENE-BASED HYDROGEL/AEROGEL
- 78 **Ivona Krošl, Željka Ban, Stefanie Griesbeck, Todd B. Marder, Ivo Piantanida**
NOVI ANTRACENSKI ANALOG TRIARILBORAN FLUOROFORA U INTERAKCIJAMA S DNA, RNA I PROTEINIMA
NOVEL ANTHRACENE ANALOG OF TRIARYLBORANE FLUOROPHORE WITH DNA, RNA AND PROTEIN INTERACTIONS

- 79 **Kristina Kukrika, Danijela Ašperger**
ODREĐIVANJE TOKSIČNOSTI BAKTERIJOM *Vibrio fischeri* STANDARDNIH OTOPINA FARMACEUTIKA I PRIMJENA NA REALNE UZORKE
TOXICITY DETERMINATION BY Vibrio fischeri BACTERIA FOR STANDARD SOLUTIONS OF PHARMACEUTICALS AND APPLICATION TO REAL SAMPLES
- 80 **Livia Kurajica, Magdalena Ujević Bošnjak, Jurica Štiglić**
ORGANSKA TVAR I NUSPRODUKTI DEZINFEKCIJE U VODOOPSKRBNOM SUSTAVU PAKRAC-LIPIK
ORGANIC MATTER AND DISINFECTION BYPRODUCTS IN WATER SUPPLY SYSTEM PAKRAC-LIPIK
- 81 **Mirjana Lončar, Maja Molnar**
APPLYING GREEN METHODS IN SYNTHESIS OF BISCOUMARIN FROM 4-HYDROXYCOUMARIN
- 82 **Aleksandar Mandić, Darko Vušak, Biserka Prugovečki, Dubravka Matković-Čalogović**
SINTEZA I STRUKTURNA ANALIZA KOMPLEKSA KOBALTA(III) S PIPERIDIN-N-ACETAMIDOM I 2,2'-BIPYRIDINOM
SYNTHESIS AND STRUCTURAL ANALYSIS OF COBALT(III) COMPLEX WITH PIPERIDINE-N-ACETAMIDE AND 2,2'-BIPYRIDINE
- 83 **Mia Mesić, Leon Poljanić, Kristina Smokrović, Ivica Đilović, Dubravka Matković-Čalogović**
SYNTHESIS AND STRUCTURAL CHARACTERIZATION OF ORGANIC AND INORGANIC SALTS OF DABCO BETAINAMIDE DERIVATIVES
- 84 **Saša Opačak, Corentin Landais, Margareta Pernar, Anamarija Brozović, Srećko I. Kirin**
NOVEL RUTHENIUM AMIDE CONJUGATES AS POTENTIAL ANTICANCER COMPOUNDS
- 85 **Natalija Pantalon Juraj, Dominik Moreth, Robert Vianello, Ulrich Schatzschneider, Srećko I. Kirin**
EFFECT OF THE LINKER LENGTH AND AMIDE GROUP ORIENTATION ON CHIRAL BPA COMPLEXES OF Zn(II) AND Cu(II)
- 86 **Ena Pezić, Lucija Tarle, Dajana Mikić**
KOROZIJSKA ZAŠTITA BAKRA DUGOLANČANIM ORGANSKIM KISELINAMA
CORROSION PROTECTION OF COPPER WITH LONG-CHAIN ORGANIC ACIDS
- 87 **Leon Poljanić, Kristina Smokrović, Ivica Đilović, Dubravka Matković-Čalogović**
SYNTHESIS AND STRUCTURAL CHARACTERIZATION OF MIXED AMINO-ACID COMPLEXES OF COPPER(II)
- 88 **Irena Radić, Mislav Runje, Sandra Babić**
IDENTIFIKACIJA PUTEVA RAZGRADNJE PIMAVANSERIN LJEKOVITE DJELATNE TVARI
IDENTIFICATION OF DEGRADATION PATHWAYS OF PIMAVANSERIN ACTIVE PHARMACEUTICAL INGREDIENT
- 89 **Edi Radin, Marija Sigurnjak, Šime Ukić, Matija Cvetnić, Marko Rogošić, Tomislav Bolanča**
TOKSIČNOST FARMACEUTIKA U BINARIM SMJESAMA
TOXICITY OF PHARMACEUTICALS IN BINARY MIXTURES

- 90 **Valentina Rep, Helena Šimek, Martina Piškori, Petra Mišetić, Petra Grbčić, Jasna Padovan, Vesna Gabelica, Sandra Kraljević Pavelić, Silvana Raić-Malić**
KONJUGATI PURINA I PURINSKIH IZOSTERA S FEROCENOM: SINTEZA I BIOLOŠKA ISPITIVANJA
CONJUGATES OF PURINE AND PURINE ISOSTERES WITH FERROCENE: SYNTHESIS AND BIOLOGICAL EVALUATION
- 91 **Karla Ribičić, Biserka Žinić, Ivo Piantanida**
NOVI TRIPEPTID KOJI UČINKOVITO VEŽE BAKROV(II) ION I DVOLANČANU DNA
NEW TRIPEPTIDE WITH EFFICIENT BINDING OF COPPER(II) ION AND DOUBLE-STRANDED DNA
- 92 **Marija Sigurnjak, Edi Radin, Šime Ukić, Matija Cvetnić, Marko Rogošić, Tomislav Bolanča**
TOKSIČNOST BINARNIH SMJESA ALAKLORA, KLORFENVINFOSA, DIURONA I IZOPROTURONA
TOXICITY OF BINARY MIXTURES OF ALACHLOR, CHLORFENVINPHOS, DIURON AND ISOPROTURON
- 93 **Ivana Sokol, Mateja Novak, Helena Prpić, Marijan Orlović, Domagoj Drenjančević, Silvana Raić-Malić, Tatjana Gazivoda Kraljević**
SINTEZA, STRUKTURNA KARAKTERIZACIJA I ANTBAKTERIJSKA AKTIVNOST NOVIH BENZOTIAZOLNIH DERIVATA
SYNTHESIS, STRUCTURAL CHARACTERIZATION AND ANTIBACTERIAL ACTIVITY OF NOVEL BENZOTHAZOLE DERIVATIVES
- 94 **Tea Stipčić, Sunčica Roca, Lidija Barišić, Monika Kovačević**
SYNTHESIS AND CONFORMATIONAL ANALYSIS OF NOVEL TYPE OF FERROCENE PEPTIDOMIMETICS
- 95 **Marija Škrlec, Martin Kondža, Željani Maleš, Mirza Bojić**
INHIBICIJSKI UČINAK EKSTRAKATA PLANIKE (*Arbutus unedo* L.) NA ENZIMSKU AKTIVNOST CYP2C8
*INHIBITORY EFFECT OF STRAWBERRY TREE (*Arbutus unedo* L.) EXTRACTS ON THE CYP2C8 ENZYME ACTIVITY*
- 96 **Ana Vukovinski, Ana Grgičević, Irena Škorić**
SINTEZA NOVIH OKSIMSKIH DERIVATA BICIKLO[3.2.1]OKTADIENA KAO POTENCIJALNIH INHIBITORA KOLINESTERAZA
SYNTHESIS OF THE NEW OXIME DERIVATIVES OF THE BICYCLO[3.2.1]OCTADIENE AS POTENTIAL CHOLINESTERASE INHIBITORS
- 97 **Katarina Zelić, Ivan Duka, Tihana Vilović, Željani Maleš, Mirza Bojić, Božena Mitić, Dario Hruševar, Ana-Marija Domijan**
OKSIDACIJSKI STRES U KLIJANCIMA VRSTE *Sinapis alba* L. NAKON IZLOŽENOSTI EKSTRAKTU VRSTE *Impatiens glandulifera* Royle
*OXIDATIVE STRESS IN *Sinapis alba* L. SEEDLINGS EXPOSED TO *Impatiens glandulifera* Royle EXTRACT*
- 98 **Iva Zonjić, Marijana Radić Stojković, Andrea Bistrović Popov, Silvana Raić-Malić**
INTERAKCIJE DERIVATA BENZIMIDAZOLNIH AMIDA S DNA I RNA
DNA AND RNA INTERACTIONS OF BENZIMIDAZOLE AMIDINES

- 99 **Amila Zukić, Emir Horozić, Zahida Ademović, Jasmin Suljagić, Amra Džambić, Demir Bjelošević, Lamija Kolarević**
NOVI KOMPLEKSI TRANZICIJSKIH METALA S TENOILTRIFLUOROACETONOM: SINTEZA, SPEKTRALNA KARAKTERIZACIJA I IN VITRO BIOLOŠKA AKTIVNOST
NOVEL TRANSITION METAL COMPLEXES WITH TENOILTRIFLUOROACETONE: SYNTHESIS, SPECTRAL CHARACTERIZATION AND IN VITRO BIOLOGICAL ACTIVITY

Razvoj materijala i proizvoda / *Materials and products development*

- 100 **Emina Ema Alić, Magdalena Ondrušek, Ivana Katarina Munda, Stanislav Kurajica, Vilko Mandić**
SOL-GEL SINTEZA CERIJEVA(IV) OKSIDA
SOL-GEL SYNTHESIS OF CERIUM(IV) OXIDE
- 101 **Helena Berić, Paula Božek, Roko Blažic, Elvira Vidović**
PRIPRAVA SENZORA NA OSNOVI CELULOZE SA SVOJSTVOM EMISIJE IZAZVANE AGREGACIJOM
PREPARATION OF SENSORS BASED ON CELLULOSE WITH AGGREGATION-INDUCED EMISSION PROPERTIES
- 102 **Marin Božičević, Dominik Horvat, Filip Brleković, Nevenka Vrbos**
UTJECAJ LITIJEVH SOLI NA HIDRATACIJU PORTLAND CEMENTA
INFLUENCE OF LITHIUM SALTS ON PORTLAND CEMENT HYDRATION
- 103 **Ivan Karlo Cingesar, Ivan Sušec, Laura Šoić, Domagoj Vrsaljko**
UTJECAJ UVJETA OČVRŠĆIVANJA NA SVOJSTVA POLIAKRILATNIH SMOLA ZA STEREOLITOGRAFIJU
INFLUENCE OF CURING ON THE PROPERTIES OF POLYACRYLATE RESINS USED IN STEREOLITOGRAPHY
- 104 **Lucija Fiket, Kristina Sušac, Domagoj Vrsaljko**
PROIZVODNJA MIKROREAKTORA TEHNOLOGIJOM PROIZVODNJE RASTALJENIM FILAMENTOM
PRODUCTION OF MICROREACTORS BY FUSED FILAMENT FABRICATION TECHNOLOGY
- 105 **Emilija Fodor, Igor Letić, Marijana Đorđević, Dragana Šoronja-Simović**
SENSORY PERCEPTION AND NUTRITIVE VALUE OF GLUTEN-FREE BREAD ENRICHED WITH SUGAR BEET AND APPLE FIBRES
- 106 **Marija Fucak, Valentina Kamenar, Gabrijela Priščan, Zvonimir Katančić**
SINTEZA IMINA IZDVAJANJE BIOPOLIMERA HITINA IZ OTPADNIH OKLOPA RAKOVA
EXTRACTION OF CHITIN BIOPOLYMER FROM SHRIMP SHELL WASTE
- 107 **Vanja Gilja, Ana-Marija Vican, Ana Peršić, Ljerka Kratofil Krehula**
ISPITIVANJE UTJECAJA UV ZRAČENJA NA KOMPOZITE POLIETILENA S METALNIM OKSIDIMA
INFLUENCE OF UV RADIATION ON POLYETHYLENE METAL OXIDE COMPOSITES
- 108 **Nikola Jakupec, Vladimir Stilinović**
HALOGENSKA VEZA U HALOGENPIRIDINIJEVIM SOLIMA
HEKSACIJANOŽELJEZOVE(III) KISELINE
HALOGEN BONDS IN HALOGENOPYRIDINIUM HEXACYANOFERRATE (III) SALTS

- 109 **Mia Jurković, Darko Vušak, Biserka Prugovečki, Dubravka Matković-Čalogović**
1D I 2D POROZNE STRUKTURE BAKROVIH(II) KOMPLEKSA SA SARKOZINOM I
HETEROCIKLIČKIM BAZAMA
*1D AND 2D POROUS STRUCTURES OF NOVEL COPPER(II) COMPLEX COMPOUNDS WITH
SARCOSINE AND HETEROCYCLIC BASES*
- 110 **Katarina Ležaić, Darko Vušak, Biserka Prugovečki, Dubravka Matković-Čalogović**
UTJECAJ OTAPALA NA KRISTALIZACIJU U ČVRSTOM STANJU BAKROVIH(II) KOMPLEKSA S
L-TREONINOM I HETEROCIKLIČKIM BAZAMA
*INFLUENCE OF SOLVENT ON SOLID STATE CRYSTALLIZATION OF COPPER(II) COMPLEXES
WITH L-THREONINE AND HETEROCYCLIC BASES*
- 111 **Marin Liović, Vladimir Stilinović, Dominik Cinčić**
KOKRISTALIZACIJA TRIMETILFENILAMONIJEVOG JODIDA S PERFLUORIRANIM DONORIMA
HALOGENSKE VEZE
*COCRYSTALLIZATION OF TRIMETHYLPHENILAMMONIUM IODIDE WITH PEFLUORINATED
HALOGEN BOND DONORS*
- 112 **Jelena Luković, Marija Prekajski Đorđević, Tamara Minović-Arsić,
Branko Matović**
SINTERING AND CHARACTERIZATION OF TUNGSTEN BASED REFRACTORY COMPOSITES
- 113 **Maja Ljepović, Suzana Inić, Jasna Jablan, Ana-Marija Domijan**
JEDNOSTAVNA HPLC METODA ZA ODREĐIVANJE LIMUNSKJE KISELINE U VOĆNIM SOKOVIMA
U ZELENIH UVJETIMA
SIMPLE, GREEN HPLC ANALYSES OF CITRIC ACID IN FRUIT JUICES
- 114 **Đorđe Marić, Momčilo Krulj**
UTJECAJ DODATKA ETERIČNOG ULJA BOSILJKA NA KVALITETU SVJEŽIH KOBASICA
EFFECT OF BASIL ESSENTIAL OIL ON FRESH SAUSAGE QUALITY
- 115 **Monika Mihaljević, Ivana K. Munda, Katarina Mužina, Gordana Matijašić,
Goran Dražić, Stanislav Kurajica**
KINETIKA OKRUPNJAVANJA CERIJEVA(IV) OKSIDA DOPIRANOG MANGANOM
COARSENING KINETICS OF MANGANESE DOPED CERIA
- 116 **Valentina Martinez, Bahar Karadeniz, Krunoslav Užarević**
KONTROLIRANO I UČINKOVITO UKLAPANJE C₆₀-FULERENA UNUTAR SODALITNE
METAL-ORGANSKE MREŽE S MALIM APERTURAMA
*CONTROLLABLE AND HIGHLY EFFICIENT ENTRAPMENT OF C₆₀-FULLERENE IN SODALITE
MOF WITH SMALL APERTURES*
- 117 **Klara Perović, Katarina Belošević, Marin Kovačić, Hrvoje Kušić**
GRAFEN IZ PERSULFATOM INTERKALIRANOG GRAFITA
GRAPHENE OBTAINED FROM PERSULFATE INTERCATED GRAPHITE
- 118 **Mario Pipunić, Lucija Konjević, Fabio Faraguna, Ante Jukić**
UTJECAJ MOLEKULSKIH MEĐUDJELOVANJA NA SVOJSTVA MJEŠAVINA MINERALNIH I
OBNOVLJIVIH DIZELSKIH GORIVA
*EFFECT OF MOLECULAR INTERACTIONS ON PROPERTIES OF MINERAL AND RENEWABLE
DIESEL BLENDS*
- 119 **Marija Prekajski Đorđević, Jelena Luković, Tamara Minović-Arsić,
Svetlana Butulija, Branko Matović**
SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF AU DOPED TiO₂ NANOMETRIC POWDERS

- 120 **Luka Savić, Pierre-Alexis Mouthuy, Maja Somogyi Škoc**
ELECTROSPINNING TO IMPROVE MEDICAL TEXTILES - ARTIFICIAL LIGAMENT
- 121 **Lucija Štefan, Anamarija Rogina, Maja Pušić, Alan Ivković, Inga Marijanović, Marica Ivanković, Hrvoje Ivanković**
BIODEGRADABLE SCAFFOLDS FOR CARTILAGE CULTURE
- 122 **Barbara Štimac, Muhamed Sućeska**
RAZLIČITI UTJECAJI NA KONCENTRACIJE ŠTETNIH PLINOVITIH PRODUKATA DETONACIJE ANFO EKSPLOZIVA
DIFFERENT EFFECTS ON CONCENTRATIONS OF TOXIC GASEOUS DETONATION PRODUCTS OF ANFO EXPLOSIVE
- 123 **Mia Tominac, Klara Perović, Tayebah Sharifi, Hrvoje Kušić, Marijana Kraljić Roković**
TiO₂ AND TiO₂/SnS₂ APPLICATION IN PHOTOELECTROCHEMICAL DEGRADATION OF PHARMACEUTICAL COMPOUNDS
- 124 **Katarina Varzić, Jozefina Katić, Ankica Šarić, Ines Despotović, Mirela Leskovic, Marin Petković, Željka Petrović**
FUNKCIONALIZACIJA POVRŠINE TITANIJEVA DENTALNOG IMPLANTATA BIOAKTIVNIM PREVLAKAMA
FUNCTIONALIZATION OF TITANIUM DENTAL IMPLANT BY BIOACTIVE COATINGS

PLENARNA IZLAGANJA
PLENARY LECTURES

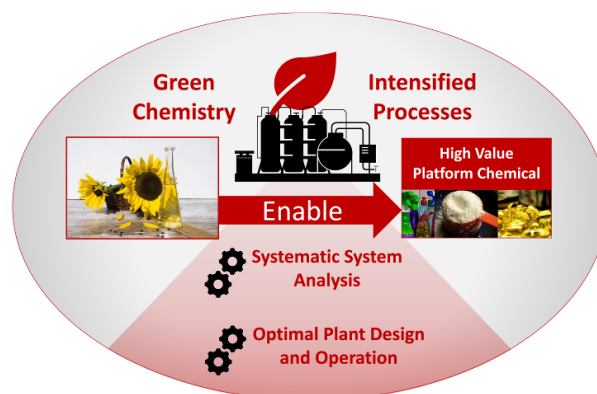
TOWARDS INTENSIFIED AND SUSTAINABLE PROCESSES – A SYSTEMATIC APPROACH FOR IDENTIFICATION AND ANALYSIS OF PLANT DESIGN AND OPERATION

Alberto Teixeira Penteadó, Tim Karsten, Markus Illner, Jens-Uwe Repke

Technische Universität Berlin, Process Dynamics and Operations Group, Berlin, Germany
Jens-Uwe.Repke@TU-Berlin.de

With the introduction of the 12 principles of green chemistry by Paul Anastas et. al., developments towards more sustainable chemical processes & products are perceivable in academia and industry [1]. Following these principles, process development & operation aim for the implementation of novel synthesis paths for sustainable feedstocks and waste prevention. Homogeneous and heterogeneous catalyses are important for the development of sustainable processes, since new synthesis routes involving renewable feedstocks can be unlocked and desirable features like highly atom efficient reactions are attainable. The created novel systems are often challenging, for which reason the industrial implication is impeded in many cases. Efficient methods are required to systematically identify relevant system phenomena and derive solution strategies to obtain enhanced technology readiness. In the study, two novel process concepts for which a systematic analysis and subsequent development of process design and operation strategies ensured a successful realization in mini-plant investigations. A key are simultaneously lab and mini-plant investigations and early stage model developments. As first case study, the homogeneously catalysed hydroformylation of long-chained substrates from renewable feedstocks is regarded. Through system analysis and development of optimal operation strategies, and dynamic real-time optimization, the complexity and operational challenges arising from these microemulsion systems are tackled. Developed strategies were tested in long-term continuous mini-plant runs, achieving a hydroformylation reaction performance with yield of 40 % and chemo-selectivity of 95 %. Secondly, the heterogeneously catalysed production of ethylene via Oxidative Coupling of Methane is investigated. The highly exothermic reaction enables the production of an essential platform chemical from natural gas as an alternative to the energy-intensive steam cracking of fossil feedstocks. However, its performance is still insufficient, therefore, novel reactor concepts are proposed using ceramic membranes as oxygen distributors to reduce the local partial pressure of O₂ without decreasing the overall O₂ feed and thus increase C₂ yield.

[1] Anastas, P., Eghbali, N., Chem. Soc. Rev. 2010, 39 (1), 301-312



SMANJIVANJE POTREBNE ENERGIJE I EMISIJA UGLJIČNOG DIOKSIDA U PROCESNIM INDUSTRIJAMA KROZ UNAPREĐENJE DESTILACIJSKE TEHNOLOGIJE

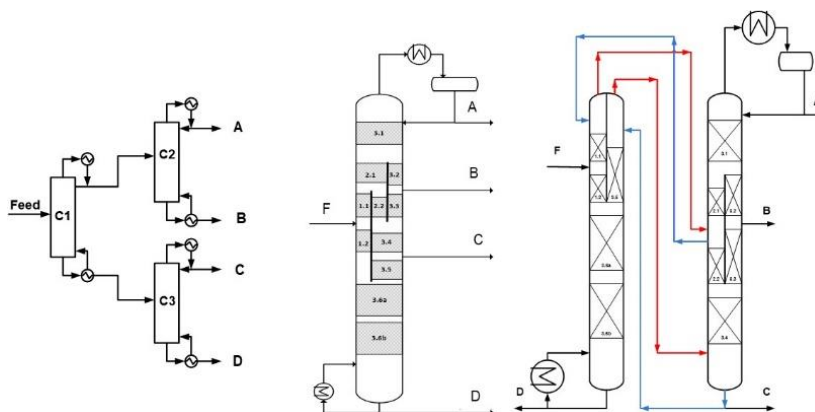
REDUCING PROCESS INDUSTRY ENERGY DEMAND & CARBON DIOXIDE EMISSIONS THROUGH DISTILLATION TECHNOLOGY ADVANCES

Žarko Olujic

The Hague, the Netherlands
zarko.olujic@hotmail.com

Rising carbon dioxide and other greenhouse gas concerns have brought renewed focus on the efficient use of energy in process industries. Distillation is the most effective and by far the most widely utilized separation process in refining, chemical and petrochemical industries. Unfortunately, by the virtue of its nature and scale of application distillation is both energy and capital intensive. Using this as main argument, academic community as well as policy makers and supporting legislation in most developed economies continue to refuse to recognize the actual state and needs of the process industries. Guided by expectations that in foreseeable future the bioconversions will become an industrially viable route for sustainable manufacture of biomass-based equivalents of fossil-based commodity chemicals, they continue to ignore distillation and are building on the hope that adsorptive and membrane separations, etc., based on new generation of advanced materials, will become key to industrial scale success in this respect. This is, however, doubtful, because distillation is the only separation method that can work adequately with quantities and qualities (purity) involved, and, certainly, replacing distillation, if possible at all, cannot happen overnight. Therefore, and due to its sheer scale of operation and considerable potential for energy saving/carbon dioxide emissions reduction, distillation remains to be an interesting and potentially highly rewarding “process intensification” research subject. Research and development effort so far has provided basis for technology improvements that could lead to significant reduction in the energy requirement of distillation columns and systems and related carbon dioxide emissions at affordable costs. There is no doubt that accelerated application of proven energy efficient distillation technologies could result in near future in a wide range of benefits. Related issues and methods to improve the sustainability of distillation are discussed, with emphasis on recent equipment advances that enable implementation of cost-efficient energy saving column configurations, such as dividing wall column shown schematically below*, both as new designs and retrofits.

*Source: H. Jansen, I. Dejanović, B. Kaibel, Ž. Olujic, Chemical Engineering 121 (2014) 8, 40-48.



POZVANA PREDAVANJA
INVITED LECTURES

HOW CAN (MULTI-SCALE) MODELLING, SIMULATIONS AND ENGINEERING HELP BIO-REFINING?

Blaž Likozar, Miha Grilc, Matej Huš, Ana Bjelić, Brigita Hočevar

National Institute of Chemistry, Department of Catalysis and Chemical Reaction Engineering, Hajdrihova 19, 1000 Ljubljana, Slovenia

blaz.likozar@ki.si

Despite its enormous potential to transform lignocellulosic biomass (lignin, cellulose and hemicellulose) into renewable sources of clean platform and high-value chemicals, biomass is only being used to produce chemicals on a small or demonstrative scale. A system similar to a petroleum refinery known as “biorefinery”, has been introduced to produce useful chemicals and fuels from biomass, which is expected to play an important role in achieving sustainability objectives in the near future. There are three types of biorefineries that are known as phase I, II and III, but only III is adaptable and flexible to processes and transforms the entire crop to useful products. Although the hemicellulose and cellulose fractions have numerous uses, this is not yet the case for lignin, which however has a great potential for the production of aromatic compounds¹⁻³. The use of multi-scale modelling and simulations helps to bridge the gap between inhomogeneous lignocellulosic feedstock and selectively obtained platform and value-added chemicals in chemo-catalytic biomass utilization by identifying the stable intermediates, transition states and reaction rates on the catalyst surface. The recent emergence of accessible computing power has made it possible to understand, optimize, tailor and redesign catalysts performance. Multiscale modelling is based on *ab initio* (quantum chemistry) calculations and builds up to the reactor level by through meso-scale modelling (kinetics), which gives a deeper insight into reaction mechanisms⁴⁻⁸. The bottom-up multiscale model is normally used in our process approach (Figure 1), where the inputs of the first-principle and the experimental data are incorporated into a reactor design. This allows the process to follow the desired path, including the selective synthesis of specific products from the raw bio-based starting material. On the other hand, process simulations improve the understanding of processes, which leads to an improvement in cost efficiency and enables model-based operation and control. It is therefore important for increased competitiveness of bio-refinery compared to conventional petro-based refinery.

- (1) Baskar, G.; Aiswarya, R.; Kalavathy, G.; Pandey, A.; Gnansounou, E.; Raman, J. K.; Kumar, R. P. In *Refining Biomass Residues for Sustainable Energy and Bioproducts*; Elsevier, 2020; pp 135–147.
- (2) Mussatto, S. I.; Dragone, G. M. In *Biomass Fractionation Technologies for a Lignocellulosic Feedstock Based Biorefinery*; Mussatto, S. I., Ed.; Elsevier: Amsterdam, 2016; pp 1–22.
- (3) Fernando, S.; Adhikari, S.; Chandrapal, C.; Murali, N. *Energy & Fuels* 2006, 20 (4), 1727–1737.
- (4) Huš, M.; Bjelić, A.; Grilc, M.; Likozar, B. *J. Catal.* 2018, 358, 8–18.
- (5) Hočevar, B.; Grilc, M.; Huš, M.; Likozar, B. *Appl. Catal. B Environ.* 2017, 218.
- (6) Šivec, R.; Grilc, M.; Huš, M.; Likozar, B. *Ind. Eng. Chem. Res.* 0 (ja), null.
- (7) Hočevar, B.; Grilc, M.; Huš, M.; Likozar, B. *Appl. Catal. B Environ.* 2017, 218, 147–162.
- (8) Grilc, M.; Likozar, B. *Chem. Eng. J.* 2017, 330, 383–397.

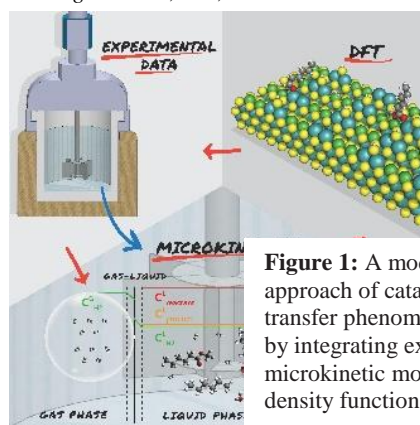


Figure 1: A modern investigation approach of catalytic reaction mechanisms, transfer phenomena and reaction kinetics, by integrating experimental work with microkinetic modelling, supported by density functional theory (DFT).

NEXT GENERATION SEPARATION UNITS – RESEARCH AT ULM UNIVERSITY

Thomas Grützner

Ulm University, Institute of Chemical Engineering, Thermal Process Engineering,
Germany Affiliation
thomas.gruetzner@uni-ulm.de

The European chemical industry faces many challenges. High wage costs, increasing competitive pressure, especially from Asia, high regulatory hurdles and expensive energy are just a few of them. In order to maintain the existing technological lead and secure competitiveness in the long term, enormous efforts are needed to optimize production processes and develop new, more efficient separation processes. For this reason, hybrid and intensified separation operations have become increasingly important in recent years. The research of the Laboratory for Thermal Process Engineering focuses on these questions. In this contribution, new developments in this context will be discussed. The further development from the very energy-efficient dividing wall columns to the multiple dividing wall columns is a focal point. The modelling and simulation, the design, the optimization as well as the operation of such plants are not trivial and connected with numerous questions to which we want to find answers with our research. The current state-of-art of the mentioned points will be discussed in greater detail, especially the modelling including robust initialization, the multi-criteria pareto optimization including the visualization of the results and first considerations regarding the design of a pilot-scale plant. A further topic is the application of additive manufacturing for separation units on a laboratory scale. These allow a tailor-made configuration for the specific separation task while simultaneously reducing the liquid holdup and ensuring scalability. We developed a modular construction system that allows us to design and scale laboratory columns including the packings and liquid distributors. Our optimization approach will be introduced and the chances and limitations of CFD simulations are discussed.



KRAJ SVIJETA JE BLIZU! (ZA ŠARŽNE PROCESSE)

END OF THE WORLD IS NEAR! (FOR BATCH PROCESSES)

Ozren Wittine

Pliva Hrvatska d.o.o., Prilaz baruna Filipovića 25, 10000 Zagreb, Hrvatska
ozren.wittine@pliva.com

Povijesno, farmaceutske tvrtke koriste kotlaste reaktore za proizvodnju aktivnih farmaceutskih spojeva u nizu koraka koji u cjelini čine jednu veliku proizvodnu šaržu. Kontinuirani procesi, s druge strane, čitavu proizvodnju vode u jednom neprekinutom toku. Zadnjih desetak godina farmaceutska proizvodnja bilježi primjetan trend ulaganja značajnih napora u razvoj kontinuirane proizvodnje ali su i dalje prisutni izazovi prilikom rada na komercijalno značajnim projektima. Ključne prednosti kontinuirane proizvodnje uključuju provođenje brže, sigurnije i/ili ekološki prihvatljivije reakcije koja se odvija pod strogo kontroliranim uvjetima u manjem prostoru u cilju dobivanja kvalitetnijeg proizvoda što direktno vodi do manjih troškova ukupnog procesa. Tijekom razvoja procesa izvodi se probir potencijalnih reakcija u kontinuiranim uvjetima u cijevnom reaktoru pri čemu se potencijalni kandidati dalje evaluiraju u Pilotnom R&D postrojenju. U tu svrhu, korišten je ATR („Agitated Tube Reactor“) reaktor, cijevni reaktor koji u svojoj unutrašnjosti sadrži dodatnu, slobodno gibajuću, perforiranu cijev prilikom čega se homogenost reakcijske smjese ostvaruje intenzivnim oscilatornim gibanjem. Uobičajeni cijevni reaktori dobro miješanje i homogenost reakcijske smjese ostvaruju vrlo brzim protocima te korištenjem nepokretnih unutrašnjih elemenata. Takva tehnička izvedba vodi do mogućih problema sa padom tlaka, dizajnom reaktora sa dugačkim cijevima (u cilju održavanja potrebnog vremena reakcije), smanjenom fleksibilnošću rada, blokiranjem reaktora sa krutim tvarima i mnogim drugim problemima. Dobiveni rezultati su pokazali da se ATR reaktor može uspješno koristiti prilikom razvoja kontinuiranih procesa uz minimalne probleme koji se javljaju u uobičajenim cijevnim reaktorima.

30



RIZICI I OPASNOSTI PRI PROVOĐENJU KEMIJSKIH REAKCIJA – PRIČA O SIGURNOSTI PROCESA

CHEMICAL REACTION HAZARDS – STORY ABOUT PROCESS SAFETY

Franjo Jović

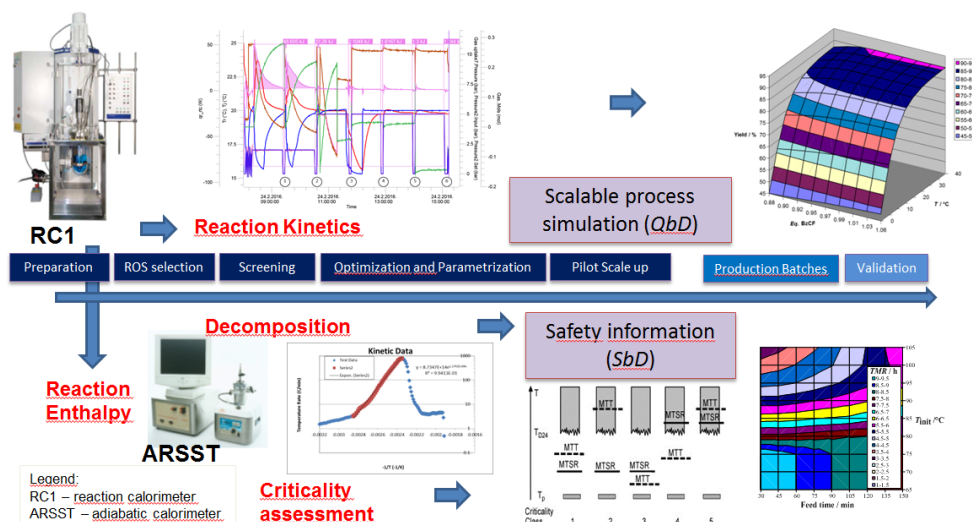
TAPI R&D Pilotno postrojenje, PLIVA Hrvatska d.o.o., Prilaz baruna Filipovića 25, 10000 Zagreb

franjo.jovic@pliva.com

Prilikom razvoja procesa sinteze djelatnih farmaceutskih tvari, sigurnost je iznimno bitan segment koji je potrebno dići na isti nivo kao i kvalitetu procesa (odnosno kvalitetu dobivenog proizvoda). Potrebna je pozornost tijekom razvoja unutarnje sigurnosti procesa, te projektiranju i izboru opreme koja mora izdržati sve nepredviđene situacije tijekom proizvodnje (*MTT*, maksimalna tehnička temperatura). Kalorimetrijska mjerenja omogućuju analizu procesa iz aspekta reakcijom generirane topline i akumulacije reagensa na temperaturi procesa (T_p), te otkrivanje potencijalno neželjenih reakcija na povišenim temperaturama, što omogućuje predviđanje i izbjegavanje ovakvih situacija. Za tu namjeru je oformljen laboratorij za sigurnosna ispitivanja procesa koji je sastoji od instrumenata koji omogućuju analizu toplinskih tokova. Na reakcijskom kalorimetru (*RC1*, *Metler Toledo*) se istražuje proces u normalnim reakcijskim uvjetima (adijabatski skok temperature željene reakcije, dT_{ad}), a u adijabatskom kalorimetru, (*ARSST*, *Fauske*) se istražuju neželjene sekundarne reakcije i/ili reakcije dekompozicije (temperatura dekompozicije, T_{dec}). Obradom podataka i rasporedom dobivenih vrijednosti maksimalne temperature sintetske reakcije ($MTSR = T_p + dT_{ad}$, T_{dec}) zaključuje se o kritičnosti procesa obzirom na sigurnost procesa, od sigurne klase 1, do nesigurne klase 5 (pri čemu je $MTSR > T_{dec}$), i koja zahtjeva promjenu samog procesa. Naprednim analizama u procesnim simulatorima (*DynoChem*) moguće je ostvariti cjelokupno predviđanje vremena do maksimalne brzine neželjene reakcije (*TMR*, time to maximum rate) u odnosu na procesni prostor i na taj način izbjeći sve potencijalno neželjene situacije.

31

TEVA API R&D Workflow of Proces Development & Safety Assesment (Phases I – III)



KERAMIČKI MATERIJALI IZ OTOPINE – PREDNOSTI I IZAZOVI

CERAMICS FROM AQUEOUS SOLUTIONS – ADVANTAGES AND CHALLENGES

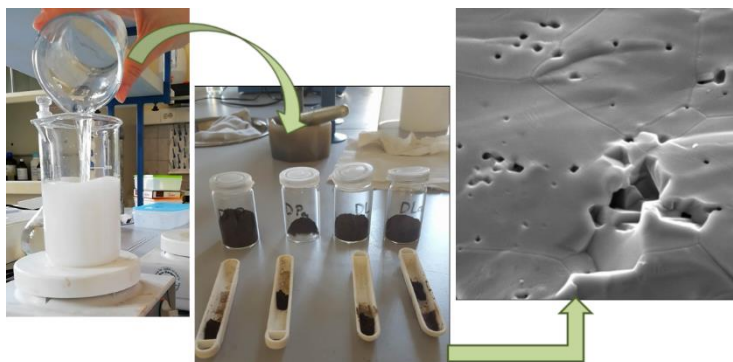
Jelena Macan

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

jmacan@fkit.hr

Keramički materijali tradicionalno se proizvode iz mineralnih sirovina pečenjem na visokim temperaturama. Razvoj tehnologije usmjerio je zanimanje na funkcionalnu keramiku, čija sofisticirana primjena nerijetko zahtijeva visoku kemijsku čistoću i kontroliranu morfologiju. Stoga su se kroz prošlo stoljeće razvijali novi pristupi pripravi keramičkih materijala. Prednost pripreve keramičkih materijala iz otopine vrlo je bliski kontakt polaznih tvari, bilo da se nalaze zajedno u homogenoj otopini, bilo da nastaje čvrsti međuprodukt homogen na nanometarskoj razini. Kratki difuzijski put stoga snižava temperaturu potrebnu za dobivanje ciljane keramike. Osnova sol-gel postupka reakcije su hidrolize i kondenzacije metalnih alkoksida ili soli u nevodenoj otopini, pri čemu nastaje homogeni gel koji se toplinski obrađuje da bi se dobio konačan keramički materijal. Postupak je vrlo fleksibilan i omogućuje pripravu keramičkih prevlaka i slojeva, vlakana i poroznih struktura. „Geliranje“ metalnih kompleksa rijetko doista uključuje nastajanja gela. Polazi se iz vodene otopine soli metala koji se žele ugraditi u keramiku, uz dodatak organskog liganda koji nakon iskuhavanja otopine tvori homogeni organometalni „gel“. Dalja toplinska obrada ne razlikuje se od one pravoga gela. Koprecipitacija također kreće iz vodene otopine, no čvrsti međuprodukt nastaje dodavanjem taložnog sredstva (karbonata, oksalata, lužine). Pri tom je nužno postići paralelno sutaloženje svih komponenata otopine kako bi se dobio homogeni talog. To nije uvijek moguće, što znatno ograničava primjenjivost postupka. Hidrotermalni postupak ne zahtijeva dodatnu toplinsku obradu čvrstog međuprodukta, već izravno daje ciljani produkt. Vodena otopina soli zagrijava se u visokotlačnoj posudi iznad vrelišta vode, čijim isparavanjem nastaje visoki tlak. Ako se koristi neko drugo otapalo, postupak se zove solvothermalnim. Da bi se ovim postupcima uistinu pripravio ciljani keramički materijal, potrebno je dobro poznavati i točno nadzirati utjecaj parametara pripreve. Postupci mogu biti vrlo osjetljivi na male promjene parametara, te će biti dani neki primjeri iz iskustva autora.

Ovaj je rad sufinancirala Hrvatska zaklada za znanost projektom IP-2018-01-5246 „Nanokompoziti s perovskitima za fotovoltaike, fotokatalizu i senzoriku“.



DIZAJN, SINTEZA I INHIBICIJA KOLINESTERAZA NOVIH OKSIMSKIH I AMINO-DERIVATA

DESIGN, SYNTHESIS AND CHOLINESTERASE INHIBITORY PROPERTIES OF NEW AMINE AND OXIME DERIVATIVES

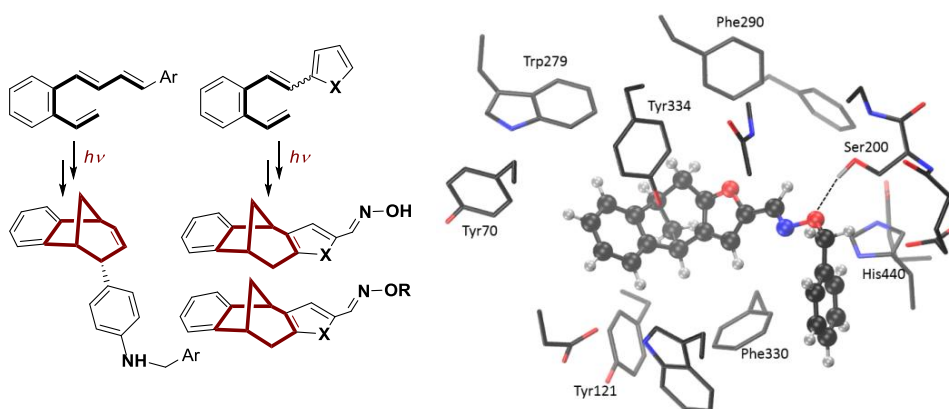
Irena Škorić

Sveučilište u Zagrebu Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije
Zavod za organsku kemiju, Marulićev trg 20, 10000 Zagreb
iskoric@fkit.hr

Biciklo[3.2.1]oktanski sustav, uobičajena podjedinica u mnogim prirodnim spojevima, najučinkovitije se priređuje u protočnom fotokemijskom reaktoru. Spojevi s biciklo[3.2.1]-skeletom predstavljaju skupinu snažnih inhibitora transportera dopamina i serotonina i imaju ključnu ulogu u liječenju bolesti središnjeg živčanog sustava (CNS), a najbolja farmakoterapija, zasada, su inhibitori enzima kolinesteraza. Oksimski i amino-derivati s biciklo[3.2.1]-skeletom razvijaju se kao potencijalni aktivni modulatori aktivnosti kolinesteraza, pri čemu se temeljem interpretacije bioloških podataka dolazi do prijedloga za dizajn novih spojeva za moguću medicinsku primjenu [1]. Računalnim metodama određuje se i relativna termodinamička stabilnost kompleksa koji nastaje smještanjem potencijalnog inhibitora u aktivno mjesto enzima [2].

Reference

- [1] Šagud, I.; Maček, N.; Grgičević, A.; Čadež, T.; Hodak, J.; Dragojević, M.; Lasić, K.; Kovarik, Z. *; Škorić, I. *, Design, synthesis and cholinesterase inhibitory properties of new oxazole benzylamine derivatives, *Journal of enzyme inhibition and medicinal chemistry* 35 (2020) 460-467.
[2] Ratković, A.; Pavlović, K.; Barić, D. *; Marinić, Ž.; Grgičević, I.; Škorić, I. *, Modeling and synthesis of novel oxime derivatives as potential cholinesterase inhibitors, *Journal of molecular structure* 1200 (2020) 127149-127149.



USMENA IZLAGANJA ***ORAL PRESENTATIONS***

DIGITALNI MODEL PRIMARNOG PARNOG REFORMINGA PRIRODNOG PLINA U PROIZVODNJI SINTEZNOG PLINA

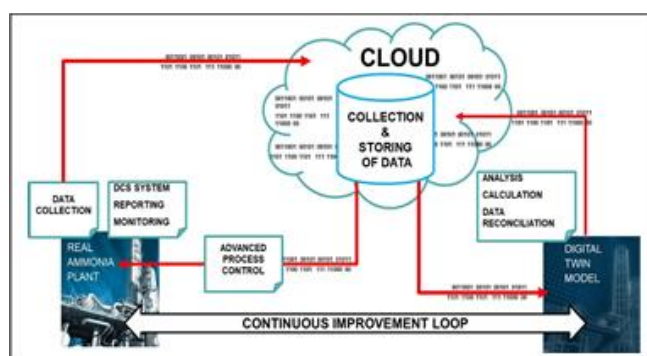
DIGITAL TWIN MODEL OF PRIMARY STEAM REFORMER OF NATURAL GAS IN SYNGAS PRODUCTION

Nenad Zečević, Nenad Bolf

Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Sveučilište u Zagrebu,
Savska cesta 16/5A, Zagreb
nenad.zecevic@sk.t-com.hr

Odgovarajuća optimizacija rada primarnog parnog reformera prirodnog plina pomoću digitalnog modela može značajno utjecati na učinkovitu ekonomsku izvedbu proizvodnje sinteznog plina. U suglasju s ciljevima Industrije 4.0 razvijen je digitalni dinamički model primarnog parnog reformiranja prirodnog plina koji je u mogućnosti koristiti realne procesne podatke tijekom proizvodnje sinteznog plina kako bi se postiglo maksimalno približenje kritičnim teoretskim procesnim parametrima u obliku izlaznog volumnog sadržaja metana te idealnoj ravnotežnoj izlaznoj temperaturi sinteznog plina. Dinamički digitalni model je u mogućnosti simulirati rad primarnog parnog reforminga prirodnog plina u stvarnom vremenu što mu omogućuje primjenu na industrijskom nivou. Glavni cilj digitalnog modela je uvid u rad primarnog parnog reformiranja prirodnog plina uz istovremeno prepoznavanje svih potencijalnih uskih grla u proizvodnji. Digitalni model, napravljen u programskom sustavu MATLAB/SIMULINK, prilagođen je određivanju svih kritičnih kinetičkih i termodinamičkih parametara, uzimajući u obzir prednosti i nedostatke ranije razvijenih dinamičkih modela. Kako bi se omogućila primjena u industrijskom postrojenju, razvijen je poseban računalni blok pomoću C MEX S-funkcije koji omogućava komunikaciju između modela i bilo koje komercijalne programske platforme zadužene za kontrolu regulacijske opreme u polju. Model je testiran s obzirom na realne procesne parametre tzv. „top-fired“ primarnog parnog reformera prirodnog plina u proizvodnji amonijaka te s obzirom na radne karakteristike dostupnih komercijalnih katalizatora. Rezultati modela mogu se koristiti kao osnova za primjenu naprednih sustava kontrole procesa čime se može ostvariti potencijalna ušteda u proizvodnji od 3 do 5 %. Osim navedenog rezultati modela mogu se koristiti za virtualno puštanje u rad i provjeru statusa procesne opreme prije njezinog stvarnog korištenja u cilju optimizacije starta postrojenja te poboljšanja prediktivnog održavanja opreme sukladno principu cjeloživotnog održavanja.

36



KINETIČKA KARAKTERIZACIJA HALOGENHIDRIN-DEHALOGENAZE PRI SINTEZI FLUOROAROMATSKIH VICINALNIH AZIDOALKOHOLA

KINETIC CHARACTERIZATION OF HALOHYDRIN DEHALOGENASE IN THE SYNTHESIS OF FLUOROAROMATIC VICINAL AZIDOALCOHOLS

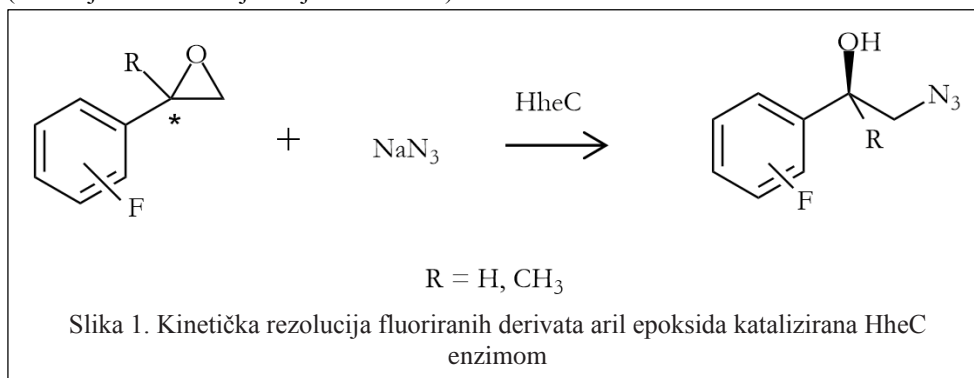
Nevena Milčić¹, Marko Pranić¹, Martina Sudar¹,
Zvezdana Findrik Blažević¹, Maja Majerić Elenkov²

¹Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije Sveučilišta u Zagrebu,
Marulićev trg 19, HR-10000 Zagreb

²Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54 HR-10000 Zagreb
nmilcic@fkit.hr

Sinteza fluoriranih derivata aromatskih spojeva je od sve većeg interesa u farmaceutskoj industriji i proizvodnji agrokemikalija. Ekološki prihvatljivija biokatalitička modifikacija jednostavnijih molekula koje već posjeduju C–F vezu privlačna je alternativa često skupoj i toksičnoj metalima kataliziranoj fluorinaciji molekula, posebice u slučaju upotrebe enantioselektivnih enzima kada se kao produkti dobivaju optički aktivne tvari. Halogenhidrin-dehalogenaze (HHDH) su industrijski relevantni enantioselektivni enzimi koji kataliziraju reverzibilnu dehalogenaciju vicinalnih halogenhidrina do epoksida. U ovom radu proučavane su reakcije otvaranja fluoroaromatskih epoksidnih prstenova u prisutnosti natrijevog azida katalizirane C tipom HHDH (HheC). Produkti, fluoroaromatski vicinalni azidoalkoholi, su vrijedni kiralni građevni blokovi sa širokim spektrom primjene u dizajnu i razvoju novih lijekova (slika 1). Razvoj svakog novog procesa mora biti vrlo brz, što se može postići primjenom matematičkog modeliranja. Stoga je u ovom radu provedena kinetička karakterizacija HheC enzima u prisutnosti pojedinih epoksida kako bi se pronašao sustav s najvećim potencijalom za enantioselektivnu pretvorbu visokog prinosa. Na temelju kinetičkih konstanti odabran je sustav za daljnju karakterizaciju i razvoj cjelovitog kinetičkog modela. Zbog niske topljivosti epoksida i utjecaja kemijske hidrolize u vodenom mediju istraživana je primjena vodeno-organskih sustava. Njihova primjenjivost ispitana je praćenjem aktivnosti enzima (divljeg tipa HheC i mutanta HheC-W4) u prisutnosti različitih koncentracija odabranih organskih otapala.

Rad je izrađen u okviru projekta „Enzimaska sinteza fluoriranih kiralnih građevnih blokova“ EnzyFluor (IP-2018-01-4493) financiranog sredstvima Hrvatske zaklade za znanost (voditeljica dr. sc. Maja Majerić Elenkov).



PRIPREMA BOKATALIZATORA

PREPARATION OF BIOCATALYSTS

Martina Sudar¹, Nevena Milčić¹, Marina Svetec Miklenić²,
Ivan-Krešimir Svetec², Maja Majerić Elenkov³, Zvezdana Findrik Blažević¹

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

²Sveučilište u Zagrebu, Prehrambeno-biotehnološki fakultet, Pierottijeva 6, Zagreb

³Institut Ruđer Bošković, Bijenička 54, Zagreb

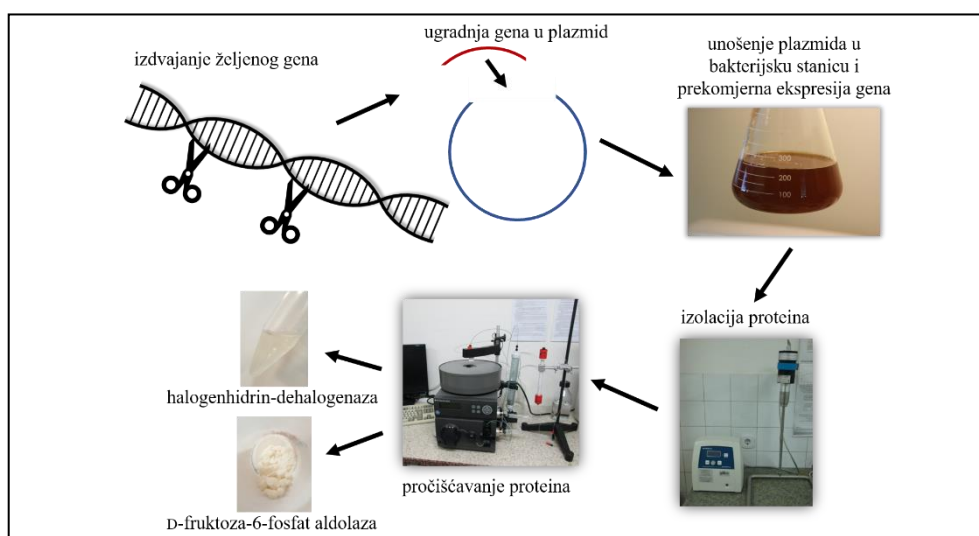
msudar@fkit.hr

Divlji sojevi mikroorganizama sadrže niske koncentracije enzima te ih nije moguće koristiti kao primarni izvor enzima za industrijsku primjenu. Sama izolacija enzima iz divljih sojeva mikroorganizama predstavlja mukotrpan posao koji obično rezultira slabim iskorištenjem. Primjena metoda genetičkog inženjerstva (tehnologije rekombinantne DNA) omogućuje značajno povećanje koncentracije postojećeg enzima u stanici, ali i proizvodnju enzima kojeg divlji soj uopće ne proizvodi [1]. Pritom se najčešće provodi prekomjerna ekspresija gena koji kodira za željeni enzim, a istovremeno je i moguće olakšati izolaciju i pročišćavanje enzima. Osim toga, metodama genetičkog inženjerstva moguće je željeni enzim učiniti pogodnijim za određeni industrijski proces, primjerice povećanjem njegove stabilnosti, aktivnosti, enantioselektivnosti i specifičnosti za određeni supstrat [1]. Stoga genetičko inženjerstvo značajno skraćuje vrijeme razvoja industrijskog katalizatora, te omogućava da se enzim prilagodi industrijskim zahtjevima, umjesto da se industrijski proces prilagođava enzimu [2,3]. Standardne tehnike molekularne biologije, koje će biti prezentirane u ovom radu, bile su korištene za pripremu novih biokatalizatora: halogenhidrin-dehalogenaze i D-fruktoza-6-fosfat aldolaze.

[1] Reetz, M. T. J Am Chem Soc. 2013, 135 (34), 12480-12496.

[2] Hammer, S. C. et al. Curr Opin Green Sustain Chem. 2017, 7, 23-30.

[3] Truppo, M. D. ACS Med Chem Lett. 2017, 8 (5), 476-480.



RAZVOJ TESTA ZA MJERENJE AKTIVNOSTI ENZIMA LIPAZE PORIJEKLOM IZ *Thermomyces lanuginosus*

DEVELOPMENT OF THE ASSAY FOR MEASUREMENT OF *Thermomyces lanuginosus* LIPASE ACTIVITY

Darijo Šibalić¹, Anita Šalić², Bruno Zelić², Marina Tišma¹

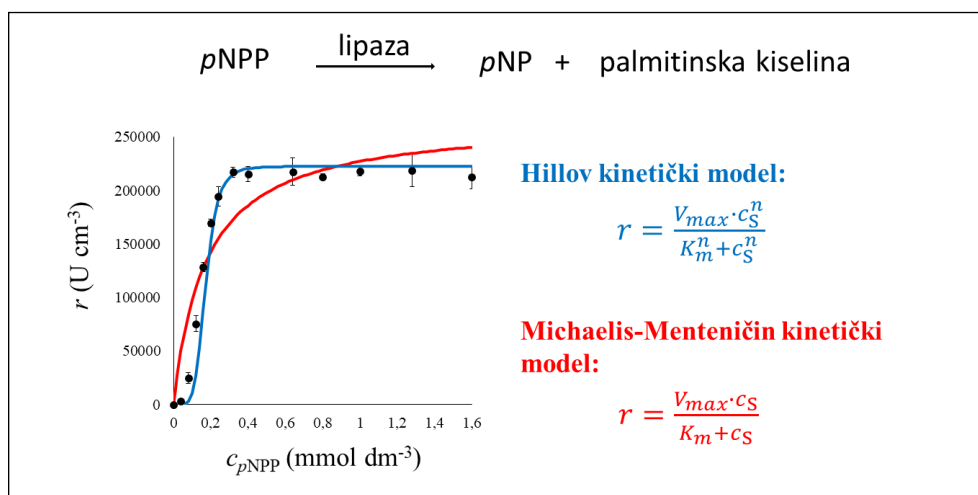
¹Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku, Prehrambeno-Tehnološki Fakultet Osijek,
HR-31000, Osijek

²Sveučilište u Zagrebu Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, HR-10000, Zagreb
dsibalic@ptfos.hr

Enzim lipaza katalizira hidrolizu u vodi netopivog estera *p*-nitrofenil palmitata (*p*NPP) u *p*-nitrofenol (*p*NP) na granicama faza (stabiliziranih emulgatorom) voda : organsko otapalo. U svrhu razvoja brzog i pouzdanog spektrofotometrijskog testa za mjerenje aktivnosti enzima lipaze porijeklom iz *Thermomyces lanuginosus* (TLL), u ovom radu ispitan je utjecaj pufera (pH = 7-10), 8 organskih otapala (acetonitril, metanol, izopropanol, etanol, 2-etoksietanol, DMSO, aceton i 1,4-dioksan) i 11 emulgatora (Arapska Guma, PEG 4000, PEG 6000, Triton X-45, Triton X-100, SDS, CTAB, Tween 20, Tween 40, Tween 80 i Span 80) na aktivnost enzima lipaze.

Hidrolitička aktivnost TLL mjerena je spektrofotometrijski kao dinamička promjena apsorbancije u vremenu pri valnoj duljini, $\lambda = 440$ nm. Maksimalna aktivnost enzima lipaze postignuta je pri sljedećim procesnim uvjetima: *a*) pH = 9 (50 mmol dm⁻³ Tris-HCl pufer); *b*) volumni udio acetonitrila u reakcijskoj smjesi 4% (*v/v*); *c*) maseni udio Arapske Gume 0,3% (*w/v*).

Za opis brzine reakcije korištena su i uspoređena dva kinetička modela: Michaelis-Menteničin kinetički model i Hillov kinetički model. Iz kinetičkih podataka ovisnosti volumne aktivnosti enzima o početnoj koncentraciji supstrata nelinearnom regresijom su procijenjeni parametri kinetičkih modela (Michaelis-Menteničin model: $K_m = 0,173 \pm 0,058$ mmol dm⁻³, $V_m = 266.593 \pm 26285$ U cm⁻³; Hillov model: $K_m = 0,173 \pm 0,010$ mmol dm⁻³, $V_m = 222.781 \pm 9112$ U cm⁻³). Potvrđeno je da se Michaelis-Menteničin kinetički model ne može koristiti za opis eksperimentalnih podataka hidrolize *p*NPP-a katalizirane enzimom lipaza porijeklom iz *T. lanuginosus*, odnosno da ove podatke bolje opisuje Hillov kinetički model.



EKSTRAKCIJA ETERIČNOG ULJA IZ SMREKE (*Juniperus communis*), KADULJE (*Salvia officinalis L.*) I SMILJA (*Helichrysum italicum (Roth) G. Don*)

EXTRACTION OF ESSENTIAL OIL FROM SPRUCE(*Juniperus communis*), SAGE (*Salvia officinalis L.*) AND IMMORTELLE (*Helichrysum italicum (Roth) G. Don*)

¹Edina Ibrić, ¹Ajla Mandalović, ²Samela Selimović, ³Zvonimir Jažo,
¹Zehrudin Osmanović,

¹Univerzitet u Tuzli, Tehnološki fakultet, Univerzitetska br. 8 75000 Tuzla, Bosna i
Hercegovina

²Univerzitet u Tuzli, Prirodno matematski fakultet u Tuzli., Univerzitetska br. 4 75000
Tuzla, Bosna i Hercegovina

³Sveučilišteu Splitu, kemijsko-tehnološki fakultet, Ul. Ruđera Boškovića 35, 21000, Split,
Hrvatska

ibric83@gmail.com

Uzorci samoniklih biljaka, kadulje (lat. *Salvia officinalis L.*), smilja (lat. *Helichrysum italicum (Roth) G. Don.*) i smreke (*Juniperus Communis*), sakupljeni su na području Hrvatske (Dalmacije) i Bosne i Hercegovine (Konjuh, Srebrenica, Majeвица i Romanija). Izolacija eteričnih ulja provedena je postupkom hidrodestilacije u modificiranoj aparaturi po Clevengeru. Pretražnom elektronskom mikroskopijom na biljnom tkivu uočene su i fotografirane žlijezde u kojima biljka skladišti eterično ulje. Kemijski sastav eteričnih ulja određen je spregnutom instrumentalnom tehnikom koja povezuje plinsku kromatografiju i spektrometriju masa (GC-MS). Eksperimentalnim istraživanjima se namjeravala utvrditi mogućnost ekstrakcije eteričnih ulja u cilju upotrebe u industrijske i medicinske svrhe.

40



POLYLACTIC ACID-BASED GRANULE PROPERTIES FOR SOLVENT SORPTION AND RELEASE

Lilla Virag, Róbert Bocsi, Dóra Rippelné Pethő

University of Pannonia, Institute of Chemical and Process Engineering
Hungary

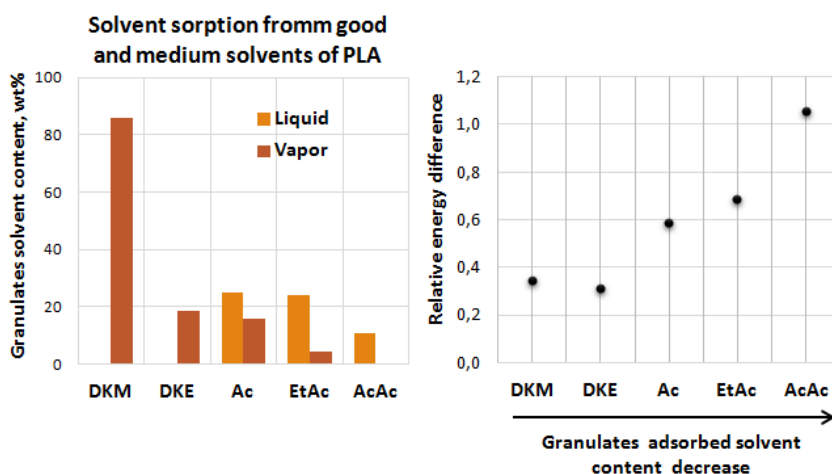
virag.lilla@almos.uni-pannon.hu

The importance of biodegradable polymers is continuously growing in industry. They are good choices to replace fossil-based polymers for packaging and medical applications. Polylactic acid (PLA) is one of them and is extensively used for applications in medical devices, medical implants, fibers of packaging containers, textiles. One of the important features of the PLA is its solubility properties and its interactions with different organic solvents. For example, dichloromethane is a good solvent, acetone and ethyl-acetate are medium solvents while alcohols are non-solvents of PLA.

In this experiment, the effect of 10 different organic solvents on PLA granulate is investigated. The PLA granulates were tested for adsorption from liquid and vapour phase of the solvent. The solvent release properties were investigated as well. The result shows that PLA from medium solvent, like acetone and ethyl-acetate, could adsorb more than 24 wt% solvent in a liquid phase solvent and in the case of acetone the adsorption is found more than 15 wt% in a vapour phase. The solvent adsorption from alcohols are lower (<5 wt%). In the release study, better solvents for PLA have a greater proportion remained in the polymer, except in the case of dichloromethane.

Results were compared with the solubility of the polymer characterized by the Hansen solubility parameters (*HSP*) and the Relative energy distance (*RED*) of the solvent. If HPS parameters for the solvent and the PLA are close to each other, the adsorbed amount of the solvent would be greater. Lower RED of the solvent results in a better sorption as well.

41



CHARACTERIZATION OF MICROPLASTIC PARTICLES USED IN MICROPLASTICS RESEARCH

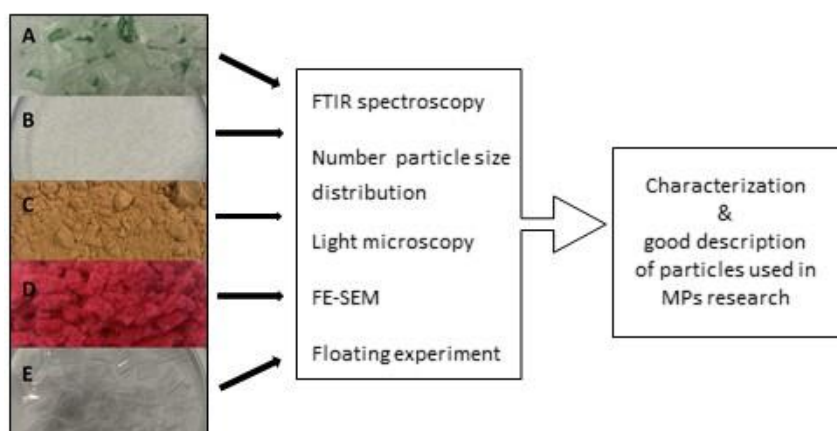
Ula Rozman, Andreja Žgajnar Gotvajn, Tina Skalar, Marija Zupančič,
Tilen Turk, Gabriela Kalčikova

Faculty of Chemistry and Chemical Technology, University of Ljubljana, Večna pot 113,
1000 Ljubljana, Slovenia
ula.rozman@fkkt.uni-lj.si

Microplastics (MPs) are defined as plastic particles smaller than 5 mm and have been recognized as one of the most widespread environmental pollutants. MPs can be categorized into two major groups; primary MPs are produced within the size range and used in personal care products, medicines and as industrial abrasives, and secondary MPs which are result from fragmentation of larger plastic items. Due to unlimited plastics applications, MPs are then made of various materials and it is expected that they significantly differ regarding their properties. Therefore, each type of MPs needs to be characterized to get the basic information about their properties before they are used in MPs research and their risk assessment is evaluated.

In this study, different types of MPs (named as A, B, C, D and E) were characterized using various methods. MPs A were fragments of shopping bag, B were microbeads extracted from personal care product, C were industrial MPs made of Bakelite, D were fibres from synthetic clothing and E were pieces from plastic bottle. Polymer composition for each type of MPs was determined with Fourier Transform Infrared spectroscopy (FTIR), where A and B were identified as polyethylene, D and E as polyethylene terephthalate and with MPs C material Bakelite, known as polyoxybenzylmethylenglycolanhydride was confirmed. The mean size of particles was 4293 μm , 149 μm and 7.6 μm for A, B and C, respectively. Additionally, the particle size needs to be determined for D and E. Shape and surface morphology of the MPs were observed with light microscope and field emission scanning electron microscope (FE-SEM). All particles were floating on water surface, expect for C that immediately sank.

Our results showed that MPs significantly differentiate among each other. They are made of various materials, they have different sizes, structures and they behave differently when they are in water. Therefore, it is essential to evaluate and describe their properties to fully understand their distribution, behaviour and fate in the environment.



VARIJABILNOST FIZIKALNO – KEMIJSKIH PARAMETARA U KEMOKLINI ROGOZNIČKOGA JEZERA

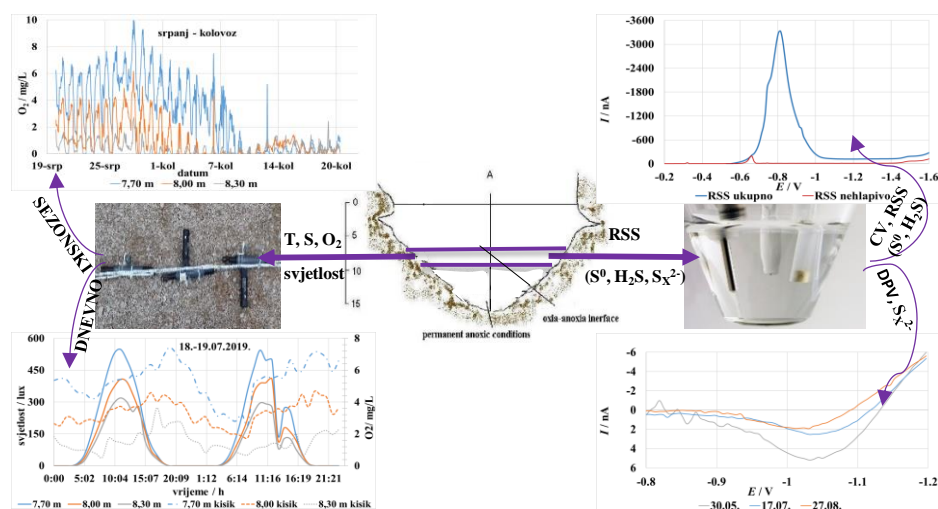
VARIABILITY OF PHYSICO-CHEMICAL PARAMETERS IN THE CHEMOCLINE OF ROGOZNICA LAKE

Sarah Mateša, Marija Marguš, Irena Ciglencečki

Division for Marine and Environmental Research, Ruđer Bošković Institute,
10000 Zagreb, Croatia;
Sarah.Matesa@irb.hr

Rogozničko jezero (RJ) ili Zmajevo oko je prirodno eutroficirano morsko jezero s izraženim meromiktičnim i euksinim svojstvima što ga čini jedinstvenim sustavom na obali Jadrana. Glavna karakteristika jezera je postojanje sezonske termohaline i kemijske stratifikacije vodenih slojeva u gornji oksični i donji anoksični sloj između kojih se formira sloj kemokline. U ovom radu praćena je promjena fizikalno-kemijskih parametara (koncentracija kisika, salinitet, intenzitet svjetlosti, temperatura) na vremenskoj (od srpnja do listopada 2019. u intervalima od jednog sata) i prostornoj skali (cca 50cm) u zoni kemokline. Rezultati mjerenja ukazuju kako promjene fizikalno-kemijskih parametara variraju ovisno o sezoni, te kako položaj i širina kemokline ovisi o meteorološkim i ekološkim uvjetima. Najizraženije promjene mjerenih parametara s najširoom zonom kemokline bile su zabilježene u srpnju, a razbijanje stratifikacije i nestajanje kemokline zabilježeno je u listopadu. Elektrokemijskim mjerenjima u zoni kemokline određivane su i koncentracije reduciranih sumpornih specija (RSS: elementarni sumpor, sulfid i polisulfidi) čija se ukupna koncentracija za razliku od specijacije u istraživanom razdoblju nije značajnije mijenjala. U listopadu s razbijanjem stratifikacije i miješanjem vodenih slojeva dolazi do pada ukupne koncentracije RSS, kao i gubitka signala koji ukazuju na prisutnost polisulfida.

Istraživanje je omogućeno potporom Hrvatske zaklade za znanost, IP-2018-01-1717, MARRES.

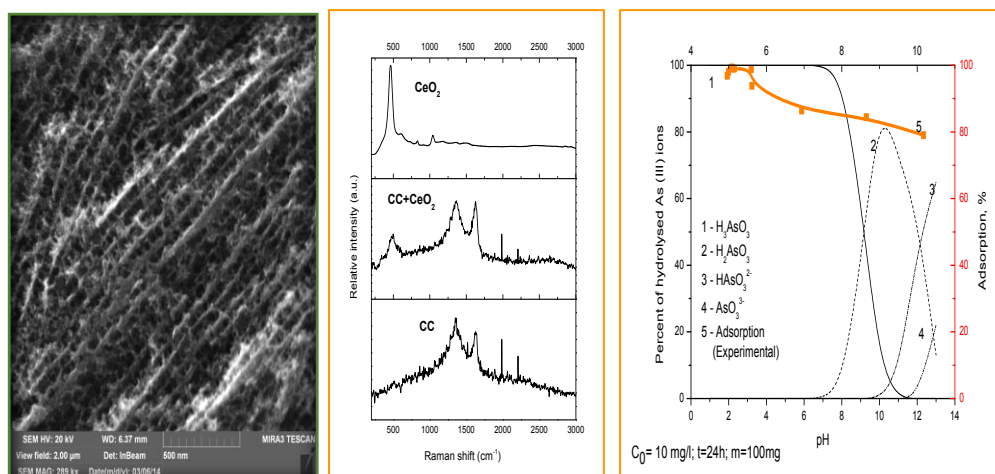


SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF CARBON CRYOGEL AND CARBON CRYOGEL/CERIA COMPOSITE FOR ARSENIC(III) ADSORPTION FROM WATER SOLUTIONS

Tamara Minović Arsić

Department for Materials Science, Vinča Institute for Nuclear Sciences, Belgrade, Serbia
tamaraminovic@vinca.rs

Synthesized materials carbon cryogel and carbon cryogel/ceria composite were characterized using following methods: nitrogen adsorption-desorption measurements, field emission scanning electron microscopy (FESEM), temperature programmed desorption (TPD), Raman spectroscopy and Fourier transform infrared spectroscopy (FTIR). Also, isoelectric point (IEP) and point of zero charge (PZC) were determined. Afterward the usage of these materials as arsenic(III) adsorbents was examined. Adsorption of As(III) ions on pure carbon cryogel and on carbon cryogel/ceria composite was investigated as a function of contact time, arsenic(III) concentration and solution pH. The adsorption mechanism of As(III) ions was discussed in view of arsenic(III) speciation and adsorbent PZC. From experimental data conclusions were brought that there is possibility for application of these novel adsorbents in water purification processes.



MECHANOCHEMICAL SYNTHESIS OF POLYMORPHIC METAL-ORGANIC FRAMEWORKS AND THEIR TOPOLOGY TRANSFORMATION

Bahar Karadeniz, Krunoslav Užarević, Dijana Žilić, Senada Muratović

Division of Physical Chemistry, Ruđer Bošković Institute, Zagreb, Croatia.

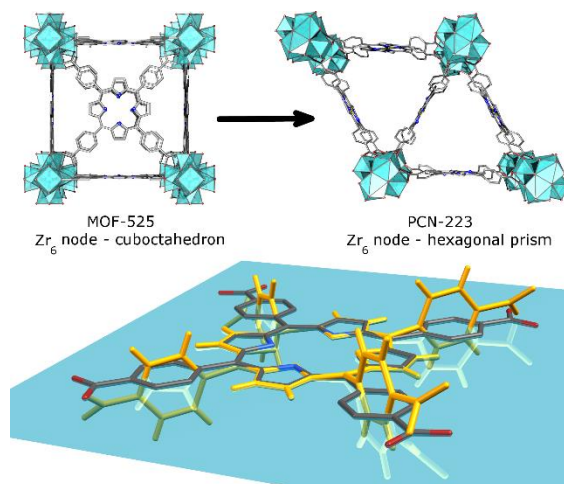
bahar.karadeniz@irb.hr

Metal organic frameworks (MOFs) are an important class of porous materials due to their exceptional chemical and structural tunability. MOFs based on zirconium clusters and carboxylic ligands solved the issues related to the stability and applicability of MOFs in real conditions. Zr-MOFs based on tetratopic ligands are particularly interesting because they occur in more topologies which can serve to tune their applicability. However, the preparation of their pure phases is still a challenge, and often these polymorphs occur in concomitant mixtures which are hard or impossible to separate.

Herein we present controlling the polymorphism in 12-coordinated porphyrin-based zirconium MOFs using liquid-assisted ball milling. Topology transfer from the pure cubic phase, MOF-525 (*ftw*), to pure hexagonal phase, PCN-223 (*shp*), were revealed using *in situ* monitoring by high energy powder x-ray diffraction. Electron spin resonance (ESR) data of these pure-phase MOFs revealed them as suitable candidates for advanced spintronics applications.¹

¹ Karadeniz, B.; Žilić, D.; Huskić, I.; Germann, L. S.; Fidelli, A. M.; Muratović, S.; Lončarić, I.; Etter, M.; Dinnebier, R. E.; Barišić, D.; Cindro, N.; Islamoglu, T.; Farha, O. K.; Friščić, T.; Užarević, K.. *J. Am. Chem. Soc.* 2019, *141*, 19214-19220.

*This work has been supported by IP-2018-01-3168 and PZS-2019-02-4129.



NISKA POKRETLJIVOST KALIJEVIH IONA U ŽELJEZNO FOSFATNIM STAKLIMA

LOW MOBILITY OF POTASSIUM IONS IN IRON PHOSPHATE GLASSES

Sara Krivačić,¹ Luka Pavić,² Andrea Moguš-Milanković,² Ana Šantić²

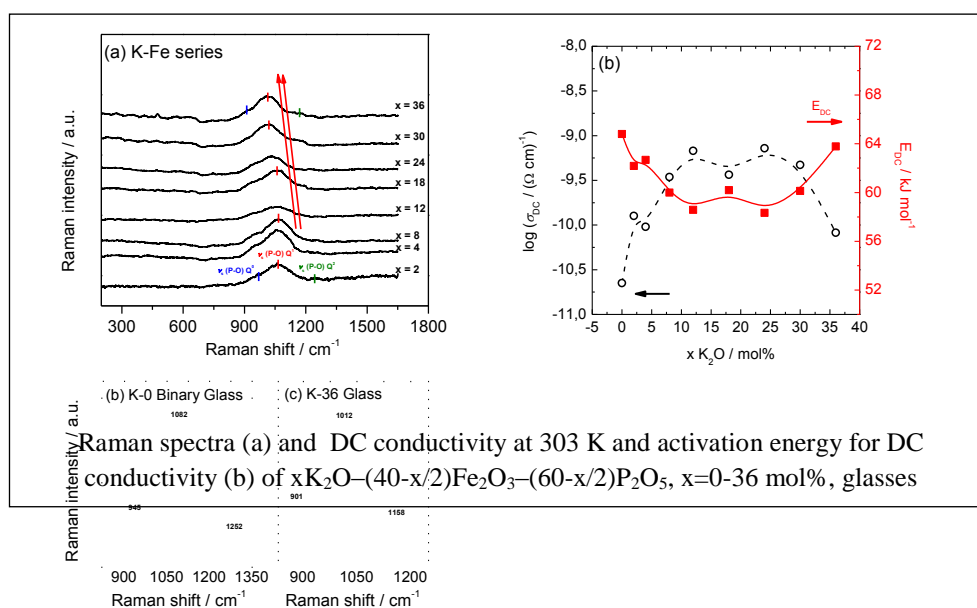
¹Faculty of Chemical Engineering and Technology, University of Zagreb, Marulićev trg 19,
10000 Zagreb, Croatia

²Division of Materials Chemistry, Ruđer Bošković Institute, Bijenička cesta 54, 10000
Zagreb, Croatia
skrivacic@fkit.hr

Iron phosphate glasses behave as typical semiconductors, exhibiting electronic (polaronic) conduction by polaron hopping from Fe^{2+} to Fe^{3+} ions. When alkali oxide is added to iron phosphate glass, the material is expected to display mixed ion-polaron conductivity with an ionic component being dependent on concentration and mobility of alkali ions. Such mixed conducting glasses are of interest as potential cathode materials in solid state batteries.

The aim of this study was to investigate electrical properties of glasses of the ternary system $x\text{K}_2\text{O}-(40-x/2)\text{Fe}_2\text{O}_3-(60-x/2)\text{P}_2\text{O}_5$, $x=0-36$ mol%. Glasses were prepared by classical melt-quenching technique and were characterised by Raman, Mössbauer and Impedance spectroscopy. All samples show pyrophosphate structure with a growing tendency for depolymerization with increasing K_2O content. The DC conductivity exhibits a broad flat maximum as K_2O gradually substitutes Fe_2O_3 and P_2O_5 . The observed conductivity trend could be related to the changes in the number density of polarons which depends on Fe_2O_3 and fraction of ferrous ions, indicating dominant polaronic conduction mechanism in all glasses. Potassium ions are weakly mobile in iron pyrophosphate glass network and have a negligible contribution in the electrical transport in these glasses even when their molar fraction is as high as 36 mol%.

46



Bi_{0.5}Na_{0.5}TiO₃ PIEZOELEKTRIČNA KERAMIKA ZA UPOTREBU U PRIKUPLJANJU ENERGIJE DOBIJENA SINTEZOM U ČVRSTOJ FAZI

Bi_{0.5}Na_{0.5}TiO₃ PIEZOELECTRIC CERAMICS FOR ENERGY-HARVESTING APPLICATIONS PREPARED BY SOLID STATE SYNTHESIS

David Bjelanović, Andrea Nesterović, Jelena Vukmirović, Ivan Stijepović,
Marija Milanović, Vladimir Srdić

University of Novi Sad, Faculty of Technology Novi Sad,
Bul. cara Lazara 1, 21000 Novi Sad, Serbia
bjelanovic.david@gmail.com

Many different types of piezoelectric materials are used in the electronic industry for devices such as motors, sensors, transducers and actuators. These devices exploit the piezoelectric properties, for example, by generating an electrical potential in response to a mechanical stress, or inversely. Considering performance, cost, simplicity of preparation and precursor availability, PbZrTiO₃ is the most used all-around piezoelectric material. However, because of lead toxicity for use in energy-harvesting technologies, lead-free piezoceramics with complex perovskite structure are being intensively researched globally for more than a few decades. Bismuth sodium titanate, Bi_{0.5}Na_{0.5}TiO₃ (abbreviated as BNT), is considered to be an excellent candidate as a key material of lead-free piezoelectric ceramics due to high ferroelectricity, high value of the Curie temperature, good remanent polarization and coercive field at the room temperature. Bismuth sodium titanate powders were prepared by conventional solid state synthesis. Metal oxides and salts of bismuth, sodium and titanium were used as starting materials. The powders were grinded, mixed with a binder then pressed into pellets. The resulting BNT pellets were calcinated and finally sintered at different temperatures in order to obtain material with high density and desired phase composition. Structure of the prepared BNT materials was investigated by using X-ray diffraction, scanning electron microscopy and dielectric measurements.

47

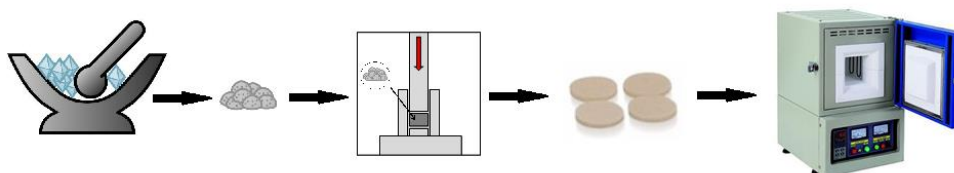


Figure 1. Schematic view of conventional solid state synthesis of BNT

MEHANIČKI ODZIV KRISTALA KADMIJEVIH(II) HALOGENIDA S OKSIMSKIM DERIVATIMA PIRIDINA

MECHANICALLY RESPONSIVE CRYSTALS OF CADMIUM(II) HALIDES WITH OXIME DERIVATIVES OF PYRIDINE

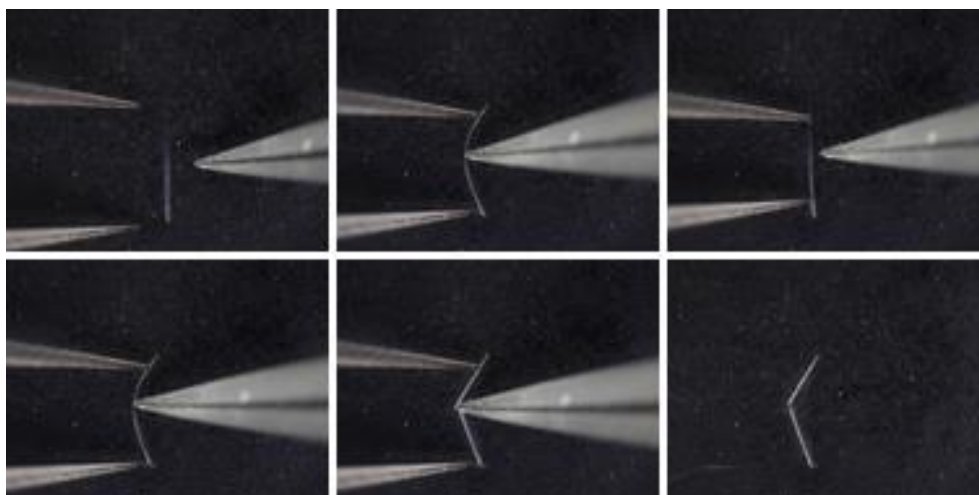
Lea Čolakić, Mateja Pisačić, Marijana Đaković

Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek, Zavod za opću i anorgansku kemiju,
Horvatovac 102a, Zagreb
icolakic@chem.pmf.hr

Jedan od osnovnih ciljeva kristalnog inženjerstva jest razumijevanje faktora koji utječu na usmjeravanje supramolekulskog povezivanja molekula prema željenom ishodu i omogućavanje kontrole ciljanih svojstava materijala. Dugo se smatralo da su kristali krte i neelastične tvari te da pod utjecajem vanjskog podražaja pucaju, no danas je poznat znatan broj savitljivih kristala od kojih je za neke opaženo da su dobri vodiči svjetlosti te stoga pokazuju potencijal za primjenu u proizvodnji optičkih vlakana. Većina savitljivih kristala po sastavu su organske tvari, međutim postoje dva literaturna izvora koja navode elastične metalo-organske sustave, te je u jednom pokazano da je, uvođenjem malih strukturnih promjena, stupanj elastičnog odziva kristala moguće i kontrolirati.

U ovom radu sintetizirana je serija koordinacijskih spojeva kadmijevih(II) halogenida s 3- i 4-piridinkarboksimskim ligandom. Kristalima priređenih spojeva ispitana je priroda mehaničkog odziva na primjenu vanjske mehaničke sile te je stupanj opaženog elastičnog odziva i kvantificiran. Uočeno je da se stupanj elastičnosti kristala može kontrolirati promjenom halogenidnog, ali i promjenom piridinkarboksimskog liganda. Također je utvrđeno da stupanj elastičnosti ovisi i o tome na koji par ploha igličastog kristala se mehanička sila primjenjuje. Opaženi fleksibilni odzivi korelirani su s jakošću i usmjerenošću međumolekulskih interakcija ostvarenih u kristalnim strukturama priređenih spojeva.

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



PREPARATION OF NANOCRYSTALLINE $\text{Bi}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{TiO}_3$ THIN FILMS FOR MICROELECTRONIC APPLICATIONS

Strahinja Janković, Sara Joksović, Andrea Nesterović,
Ivan Stijepović, Marija Milanović, Vladimir V. Srdić

University of Novi Sad, Faculty of Technology Novi Sad,
Bul. cara Lazara 1, 21000 Novi Sad, Serbia
strahhjan@gmail.com

Bismuth sodium titanate, $\text{Bi}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{TiO}_3$, (BNT) is one of the most investigated lead-free materials for piezoelectric applications. However, piezoelectric properties of BNT are much lower in comparison to that for lead zirconate titanate (PZT), which is still the most used piezomaterial. Toxicity of lead presents huge health and ecological problem, therefore the need for new lead-free materials is in growing. Ferroelectric and piezoelectric properties of BNT can be improved by addition of BaTiO_3 (BT). Processing of solid solutions of BNT-BT materials by conventional solid state synthesis has been one of the most important directions in a long time in terms of investigation of electroceramics. On the other hand, miniaturization of components in electronic industry has opened a new field of research, the investigation of ferroelectric thin films. One of the aims of this work was preparation of homogeneous, crack-free BNT and BNT-BT thin films by sol-gel method. Different combinations of precursors (metal salts) and organic solvents were used in order to obtain stable BNT solutions. Prepared transparent solutions of the pure bismuth sodium titanate and modified by barium titanate were deposited on previously cleaned substrates, and thermally treated up to 900 °C. Structure and morphology of prepared thin films were characterized by X-ray diffraction, Raman spectroscopy and scanning electron microscopy.

49



Figure 1. Schematic view of $\text{Bi}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{TiO}_3$ thin films preparation.

THICKNESS CONTROL OF LaMnO_3 THIN FILMS PREPARED BY CSD/PAD TECHNIQUE

Sara Joksović, Strahinja Janković, Ivan Stijepović,
Jelena Vukmirović, Vladimir V. Srdić

University of Novi Sad, Faculty of Technology Novi Sad,
Bul. cara Lazara 1, 21000 Novi Sad, Serbia
sara.joksovic57@gmail.com

In recent decades, miniaturization caused development of new technologies, and thin films have played the most important role in the advancement of microelectronics. The aim of this research was to prepare lanthanum-manganese (LaMnO_3) films with thickness up to 50 nm. In the last few decades, chemical solution deposition (CSD) has been the most useful method for the preparation of thin films by spin or dip-coating technique. In this work polymer-assisted deposition (PAD), as one of CSD techniques, was used for preparation of LaMnO_3 thin films. The advantages of the PAD method refer to the good possibility to control the film homogeneity and thickness, as well as a preparation of a monocrystalline thin layer, very important for application in advanced magnetic devices. In the first step of LaMnO_3 thin films fabrication it was essential to prepare stable precursor solutions suitable for their deposition by spin coating method. Stoichiometric amount of $\text{La}(\text{NO}_3)_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ and $\text{Mn}(\text{NO}_3)_2 \cdot x\text{H}_2\text{O}$ were dissolved in distilled water with addition of ethylenediaminetetraacetic acid (EDTA) and polyethylenimine (PEI). During the synthesis, concentration of LaMnO_3 and additives has been varied in order to find the optimal rheological parameters for deposition of thin films. The obtained solutions were deposited on previously cleaned silicon substrates and finally thermally treated up to 1000°C in order to produce LaMnO_3 thin films. Quality of the prepared thin film surfaces was observed by optical microscopy. Morphology and thickness of the LaMnO_3 thin films were investigated by scanning and transmission electron microscopy. Structure of the fabricated films was examined by X-ray analysis and spectroscopic techniques.

50

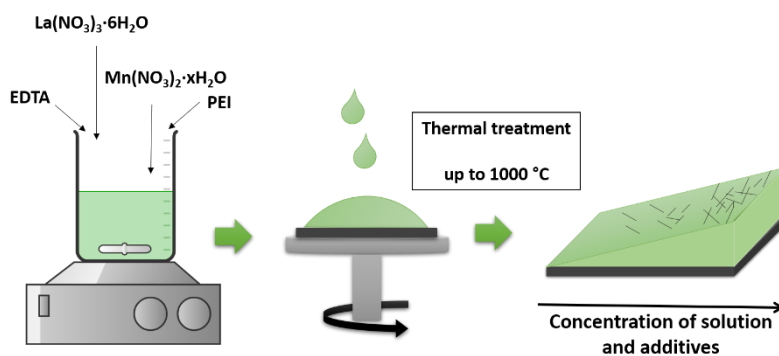


Figure 1. Schematic view of LaMnO_3 thin film preparation.

THE INFLUENCE OF ZEOLITE ON THE PROPERTIES OF RUBBER COMPOSITES BASED ON THE NATURAL RUBBER

Aleksa Kočišev, Mirjana Jovičić, Marija Milanović

University of Novi Sad, Faculty of Technology Novi Sad,
Bul. cara Lazara 1, 21000 Novi Sad, Serbia
alekozr@gmail.com

Natural rubber is an elastomer that is made from the latex of the milk colloid produced by rubber plants. Currently there is an increasing trend of synthetic rubber replacement with natural rubber due to the improved some quality properties as well as the appropriate environmental influence. Reinforcing of elastomers by the addition of various fillers has led to significant improvements in elastomer properties, therefore to the increase in potential for the specific applications. The aim of this work was to evaluate the physical and mechanical properties of natural rubber, where zeolite was used as a filler in addition to the basic ones. The mixture of natural rubber is masticated with different zeolite masses (0; 10; 20 and 30 phr), and afterwards vulcanized. The non-rotating rheometer determines the optimum vulcanization time as well as the time to start the vulcanization process. Hardness (Shore A hardness) was determined. Tensile strength, elastic modulus at 100% and 300%, elongation and elongation at break were measured on the rocker. Thermal characterization of vulcanized samples by DSC analysis was also performed. Determination of curing characteristics indicated that the minimum torque at 150 °C had higher magnitudes for the compounds with filler. The results obtained in this paper showed that values of the scorch time are decreased and the optimal time of crosslinking increased by increasing the zeolite content in the fillers mixture (Graph 1). Considering mentioned, it could be supposed that the fraction of occluded and trapped chains in the structure of elastomer are reinforced by zeolite. The elastomer containing the highest content of zeolite (30 phr) showed the highest value of the hardness by Shore A. Based on DSC results, it was assessed that the addition of zeolite had negligible effects on the glass transition temperature, registered at about -59 °C for all tested samples.

51

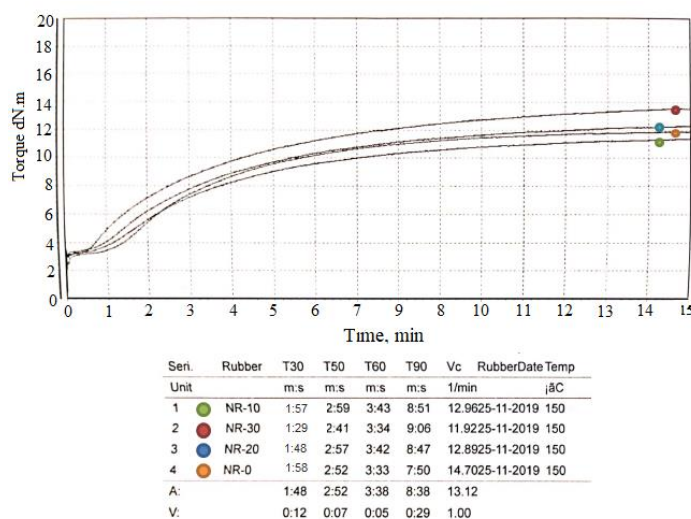


Figure 1 Curing curve of rubber composites based on the natural rubber with different amount of zeolite (NR-0 (0 phr zeolite), NR-10 (10 phr zeolite), NR-20 (20 phr zeolite) and NR-30 (30 phr zeolite))

FUNCTIONALIZED MAGNETITE NANOPARTICLES FOR DRUG DELIVERY: SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION METHODS

Lucija Mandić, Anja Sadžak, Suzana Šegota

Ruder Bošković Institute, Zagreb, Croatia

lucija.mandic@irb.hr

Magnetic nanostructured materials, especially Fe_3O_4 nanoparticles, have many potential applications ranging from nanoelectronics to biomedical applications. These nanoparticles are widely used in biomedical applications as a drug delivery, drug targeting, bio-separation techniques, contrast agents for the magnetic resonance imaging systems and as heating intermediates for the therapy of cancer or hyperthermia which is mainly attributed to their excellent optical, magnetic and biological characteristics. Iron oxide nanoparticles were synthesized by a solvothermal method. To enhance the surface functionality, the synthesized nanoparticles were stabilized by coating with polyethylene glycol (PEG-4000), a biodegradable and biocompatible polymer. Both bare and PEG-4000 coated iron oxide particles were characterized by various techniques (X-ray diffraction (XRPD), scanning electron microscopy (SEM), dynamic light scattering (DLS) and Fourier transform infrared spectroscopy (FTIR) to evaluate their structural, morphological and physico-chemical suitability for drug delivery applications. The results confirmed that the mesoporous magnetite nanoparticles could be an universal, stable and excellent material for drug delivery application.

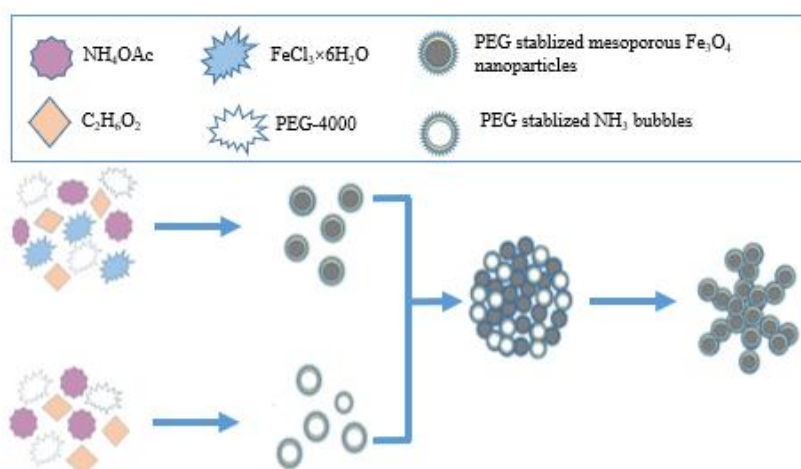


Figure 1. Schematic illustration of the synthesis of Fe_3O_4 nanoparticles

POLARONSKA VODLJIVOST U WO₃-P₂O₅ I MOO₃-P₂O₅ STAKLIMA

POLARONIC CONDUCTIVITY IN WO₃-P₂O₅ AND MOO₃-P₂O₅ GLASSES

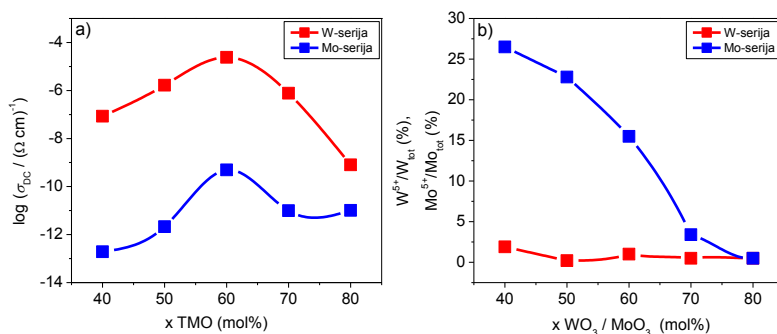
Sanja Renka¹, Luka Pavić¹, Petr Kalenda², Petr Mošner²,
Ladislav Koudelka², Ana Šantić¹

¹Laboratory for Functional Materials, Division of Materials Chemistry, Ruđer Bošković Institute, 10000 Zagreb, Croatia

²Department of General and Inorganic Chemistry, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, 53210 Pardubice, Czech Republic
srenka@irb.hr

Fosfatna stakla koja sadrže okside prijelaznih metala pokazuju polaronsku vodljivost kao rezultat preskoka elektrona s iona prijelaznog metala nižeg oksidacijskog stanja na ion višeg oksidacijskog stanja, a opisuje se modelom preskoka malog polarona (engl. *small polaron hopping*). Ovi materijali pokazuju veliki potencijal za primjenu u različitim elektrokemijskim uređajima te je istraživanje odnosa strukture i električkih svojstva važno za njihov razvoj i tehnološku implementaciju. Cilj istraživanja bio je odrediti faktore koji utječu na polaronsku vodljivost u binarnim xWO₃-(100-x)P₂O₅ i xMoO₃-(100-x)P₂O₅, x=40–80 mol% staklima. U tu svrhu, električna svojstva stakala istražena su impedancijskom spektroskopijom u širokom frekvencijskom (0.01 Hz – 10⁶ Hz) i temperaturnom (303 K – 513 K) području. Strukturne promjene nastale dodatkom WO₃ i MoO₃ praćene su Ramanovom spektroskopijom, a udjeli metala u različitim oksidacijskim stanjima određeni su metodom elektronske spinske rezonancije. Budući da W i Mo pripadaju istoj, VI grupi elemenata za očekivati je da WO₃-P₂O₅ i MoO₃-P₂O₅ stakla pokazuju slična kemijska i strukturna svojstva. Međutim, rezultati su pokazali značajno veću DC provodnost volframskih stakala od molibdenskih analognog sastava iako je udio W⁵⁺/W_{tot} bitno manji od Mo⁵⁺/Mo_{tot} (slika 1). Također, ovisnost DC provodnosti o udjelu WO₃ i MoO₃ nije linearna već pokazuje maksimalnu vrijednost na x(WO₃/MoO₃)=60 mol%. Opažene razlike i trendovi provodnosti posljedica su razlika u strukturi ovih stakala. Ramanovom spektroskopijom uočeno je klasteriranje WO₆ oktaedara koji se povezuju -W⁵⁺-O-W⁶⁺-O-W⁵⁺- mostovima i pogoduju bržem polaronskom transportu, dok se s druge strane, MoO₆ i MoO₄ poliedri ravnomjerno ugrađuju u fosfatnu mrežu. Pri visokim udjelima WO₃ opažen je pad provodnosti zbog male količine fosfatnih jedinica koje u kombinaciji s klasteriranjem volframskih jedinica stvaraju „*crystal-like*“ strukturu u kojoj je prijenos polarona otežan. Kod stakala koja sadrže MoO₃ porast DC provodnosti posljedica je porasta udjela metalnog oksida, dok je smanjenje provodnosti povezano s drastičnim padom udjela Mo⁵⁺/Mo_{tot}. Ovo istraživanje pokazalo je da polaronska vodljivost osim što ovisi o udjelu metalnog oksida i metala u nižem oksidacijskom stanju izrazito ovisi i o strukturi odnosno ugradnji različitih WO₃ i MoO₃ jedinica u fosfatnu mrežu.

53



Slika 1. Ovisnost (a) DC provodnosti na 303 K i (b) W⁵⁺/W_{tot} i Mo⁵⁺/Mo_{tot} o udjelu WO₃/MoO₃.

UNEXPECTED REACTIVITY OF PROPIOLIC ACID AND TRIAZOLES

Tomislav Gojšić, Saša Opačak, Berislav Perić, Srećko Kirin

Ruder Bošković Institute, Bijenička cesta 54, Zagreb
tomig8888@gmail.com

Peptide coupling reactions are one of the most well-known and ubiquitous reactions in chemical synthesis.¹ Among the more common reagents used for amide bond formation are triazole compounds, such as the TBTU/HOBT couple, HATU and others.¹ Propiolic acid is the simplest alkyne carboxylic acid and presents a logical choice for modification of pseudo peptide NH groups for pericyclic *click* reactions with azides.² Continuing our work on pseudo peptide³ we have aimed to prepare their *click* analogues. However, we have observed unexpected reactivity of propiolic acid in mild conditions of peptide bond formation (DCM, DIPEA, R.T.). In the performed reactions unusual products were isolated which were identified and characterised using spectroscopic methods (NMR, IR), x-ray crystallography and mass spectrometry. Reactions were conducted using different ratios of HOBT and TBTU, and both *N*-addition and *O*-addition of triazolic reagents to triple bond were observed. *N*-addition occurred in tandem with peptide coupling when unprotected propiolic acid was used; while in reactions with the ester of propiolic acid *O*-addition was observed. In these reactions both *Z*- and *E*-isomers were isolated. Structurally different products, formed by double addition of propiolic acid or its ester, were also isolated in some of the reactions. The goal of this research is to determine the scope of reactions of propiolic acid and triazole compounds and optimise reaction conditions in order to develop synthetically valuable reactions.

54

References:

- [1] C. A. G. N. Montalbetti, V. Falque, *Tetrahedron* 61 (2005) 45.
[2] H. Li, R. Aneja, I. Chaiken, *Molecules* 18 (2013) 8.
[3] S. Opačak, Z. Kokan, Z. Glasovac, B. Perić, S. I. Kirin, *Eur. J. Org. Chem.* (2019) 11.

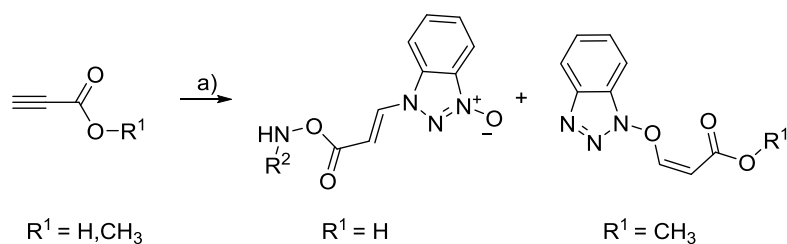


Figure 1: Addition of triazolic reagents to triple bonds of propiolic acid derivatives.

a) Reaction conditions: DCM, R.T., 3 days, H₂N-R², DIPEA, HOBT, TBTU.

IN-SITU EXAMINATION OF HISTORICAL PAINTINGS

Dunja Ljubičić, Snežana Vučetić

University of Novi Sad, Faculty of Technology,
Bul. cara Lazara 1, 21000 Novi Sad, Serbia
dunja.ljubcic97@gmail.com

The preservation of artefacts, monuments and archaeological sites frequently requires scientific analysis of historical materials in order to document their historic evidence, clarify deterioration processes, and specify conservation treatments. Non-destructive analytical techniques like Fourier-transform infrared spectroscopy (FTIR), X-Ray Fluorescence Spectrometry (XRF) and digital light microscopy are widely used to determine the composition and microstructure of the artefacts. The main goal of our investigation was to determine the painting technique (pigments and binder media) by using portable instruments available at the Laboratory for Materials in Culture Heritage at the Faculty of Technology Novi Sad, in order to facilitate future restoration and conservation efforts. Subjects of our studies were cultural heritage paintings: the icon on wood "St. Demetrius" painted by Hristifor Žefarović in 1737 from the Gallery of Matica srpska collection and the painting on the paper "Under the Helmet" by Peter Lubarda, from the period 1966-1968 from the collection of the Šumarice Memorial Park, Kragujevac. The paintings were examined in situ by non-invasive and non-destructive analytical techniques: FTIR, XRF and light microscopy. Based on the performed analyses, it was determined that the icon was painted in the painting technique known as egg tempera, which involves the mixing of (usually chicken) egg with powdered pigments. The presence of a protein binder was confirmed based on the FTIR spectrum with characteristic peaks of amide bonds in proteins. Also, the following pigments were identified: ultramarine, chalk and Prussian blue. The examination of the XX century painting "Under the Helmet" revealed the presence of mixture of binders based on polyvinyl acetate and alkyd binder. The identified pigments are titanium white, chalk (as a filler / white pigment) and Prussian blue. Microscopic examination gave an insight into the microstructure of the paintings. The presented results confirmed that the combination of different microscopy and spectroscopy techniques are crucial for deeper understanding of painting composition. Moreover, the presented results once again proved the value of collaboration between research laboratory and conservators on revealing essential facts for selection of restoration methodology in order to preserve valuable artworks.

55

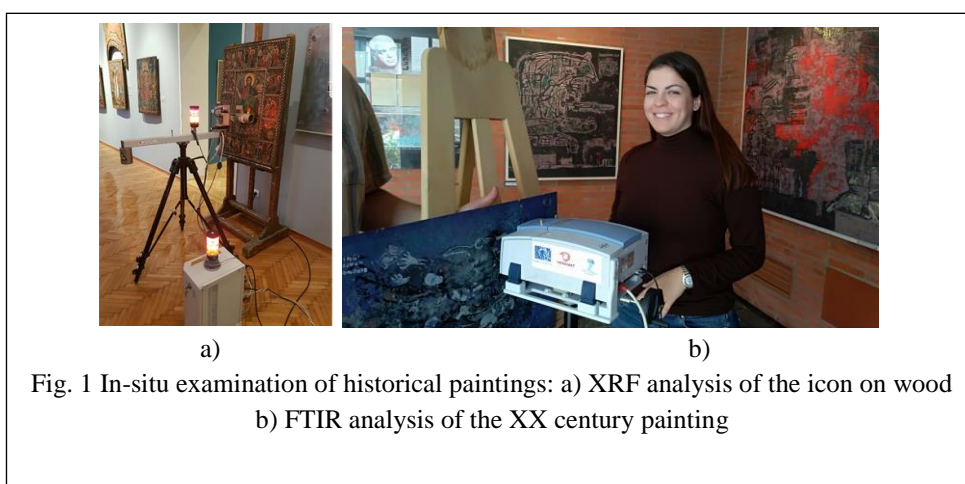


Fig. 1 In-situ examination of historical paintings: a) XRF analysis of the icon on wood
b) FTIR analysis of the XX century painting

FLUORESCENCIJSKI OPTIČKI SENZOR ZA DETEKCIJU Hg^{2+} IONA NA BAZI DERIVATA BENZIMIDAZOLA

FLUORESCENCE OPTICAL SENSOR FOR Hg^{2+} ION DETECTION BASED ON BENZIMIDAZOLE DERIVATIVE

Mislav Matić¹, Ema Horak², Ivana Murković Steinberg¹

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

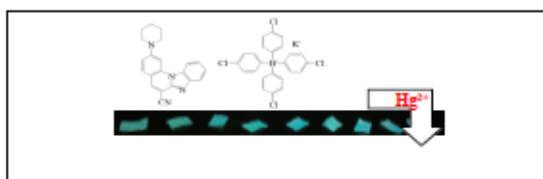
²Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, Zagreb, Hrvatska
mmatic@fkit.hr

Visoka osjetljivost pri detekciji analita, mogućnost više načina detekcije analita te neosjetljivost na elektromagnetske interferencije su prednosti koje su učinile fluorescencijske optičke senzore najraširenijom skupinom kemijskih optičkih senzora [1]. Zbog vrlo dobrih spektroskopijskih svojstava, derivati benzimidazola primjenu pronalaze, između ostalog, i u kemijskim optičkim sensorima kao fluorofori i kromofori. Ono što karakterizira takve molekulske sustave su maksimumi apsorpcije u vidljivom dijelu spektra te visoki intenzitet fluorescencije. U ovome radu, pripremljen je ireverzibilni kemijski optički senzor (optoda) - kemodozimetar za detekciju i određivanje Hg^{2+} iona, temeljen na fluorescentnom odgovoru derivata benzimidazola imobiliziranog u polimernu (PVC) matricu. U kiselim uvjetima, derivat benzimidazola se protonira te s anionskom boratnom soli tvori ionski par Fluorofor⁺Receptor⁻ u membrani senzora. Senzorski mehanizam zasniva se na nepovratnoj reakciji raspada boratne soli u prisutnosti Hg^{2+} iona [2]. Smjesa za tanke polimerne filmove pripravljena je otapanjem 2-N-piperidinilbenzimidazol[1,2- α]kinolin-6-karbonitrila (fluorofor) [3] i kalij tetrakis(4-klorfenil)borata (receptor) u omjeru 1:3 u otopini PVC-a u tetrahidrofuranu. Smjesa je zatim *dip coating* metodom nanosena na papirni nosač te je time pripravljena optoda za detekciju i određivanje Hg^{2+} iona u rasponu koncentracija od $5 \cdot 10^{-4}$ do $5 \cdot 10^{-8}$ mol L⁻¹ u acetatnom puferu pri pH=3. Odziv, stabilnost optode i ponovljivost praćeni su UV-vidljivom fluorescencijskom spektroskopijom. Iz ovisnosti omjera intenziteta fluorescencije pri 500 nm i 480 nm o koncentracije Hg^{2+} iona konstruirana je kalibracijska krivulja s linearnim odzivom optode u području koncentracija od $5 \cdot 10^{-5}$ do $1 \cdot 10^{-7}$ mol L⁻¹. Odzivi optoda ne razlikuju se međusobno pri istim koncentracijama Hg^{2+} iona, što ukazuje na dobru ponovljivost senzora. Nadalje, odzivi optoda protoniranih u acetatnom puferu bez prisutnosti Hg^{2+} iona su jednaki što potvrđuje stabilnost senzora.

[1] Wolfbeis, O. S., Materials for fluorescence-based optical chemical sensors. J. Mater. Chem. 2005, 15 (27-28), 2657-2669.

[2] Murkovic, I.; Wolfbeis, O. S., Fluorescence-based sensor membrane for mercury (II) detection. Sens. Actuator B-Chem. 1997, 39 (1-3), 246-251.

[3] Perin, N.; Hranjec, M.; Pavlovic, G.; Karminski-Zamola, G., Novel aminated benzimidazo[1,2- α]quinolines as potential fluorescent probes for DNA detection: Microwave-assisted synthesis, spectroscopic characterization and crystal structure determination. Dyes Pigment. 2011, 91 (1), 79-88.



Slika 1. Odziv senzora u prisutnosti Hg^{2+} iona

ODREĐIVANJE ELEMENATA U KOSI: ODABIR ODGOVARAJUĆE PROCEDURE PRANJA UZORKA

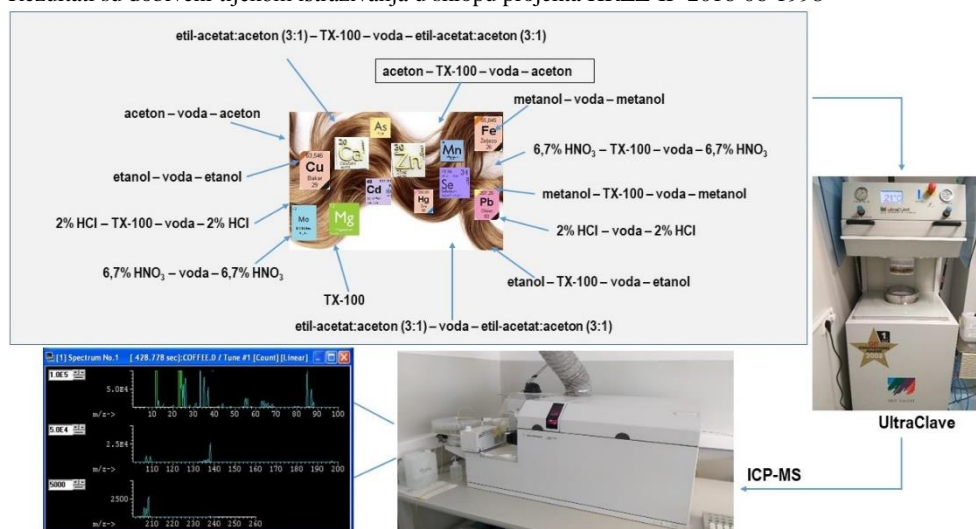
ELEMENT DETERMINATION IN HAIR: SELECTION OF THE SUITABLE SAMPLE WASHING PROCEDURE

Anja Bošnjaković, Ankica Sekovanić, Jasna Jurasović, Tatjana Orct, Antonija Sulimanec Grgec, Martina Piasek

Institut za medicinska istraživanja i medicinu rada
asekovanic@imi.hr

Kosa je neinvazivni biološki uzorak koji postaje sve važniji u istraživanjima rastuće izloženosti metalima u okolišu i s razvojem sve osjetljivijih spektrometrijskih metoda i uređaja. Koncentracije brojnih toksičnih i esencijalnih elemenata u kosi koreliraju s koncentracijama elemenata u tijelu. Analiza elemenata predstavlja izazov jer je uzorak kose potrebno prikladno uzorkovati i potom oprati na odgovarajući način, za što nema prihvaćene standardne procedure, da se ukloni vanjska kontaminacija kako bi rezultati odražavali koncentracije elemenata nakupljenih u kosi. Cilj istraživanja bio je procijeniti različite načine pranja uzoraka kose za određivanje toksičnih i esencijalnih elemenata (As, Ca, Cd, Cu, Mg, Mn, Mo, Fe, Hg, Pb, Se i Zn) u uzorcima kose. Ispitana je učinkovitost pranja uzoraka kose neionskim detergentom (Triton X-100), različitim organskim otapalima (acetone, etanol i metanol), smjesom otapala (etil-acetat i acetone 3:1) i kiselinama (dušična i klorovodična kiselina) uz obradu ultrazvučnim valovima ili bez nje. Razvijena je i validirana prikladna metoda multielementne analize ICP-MS-om pri čemu su svi ispitani validacijski parametri zadovoljili unaprijed postavljene kriterije prihvatljivosti. Postupci pranja uzoraka bili su podjednako zadovoljavajući, izuzev pranja kiselinama pri čemu se elementi gube zbog oštećivanja kose (vidljiva je promjena boje i pucanje vlasi). Primjena ultrazvuka pospješila je učinkovitost pranja uzorka kose do 10 %, ovisno o određivanom elementu i primijenjenom postupku pranja.

Rezultati su dobiveni tijekom istraživanja u sklopu projekta HRZZ-IP-2016-06-1998



REDOKS SVOJSTVA FERROCENOM SUPSTITUIRANIH NUKLEOBAZA

REDOX PROPERTIES OF FERROCENE-SUBSTITUTED NUCLEOBASES

Mateja Toma, Valerije Vrček

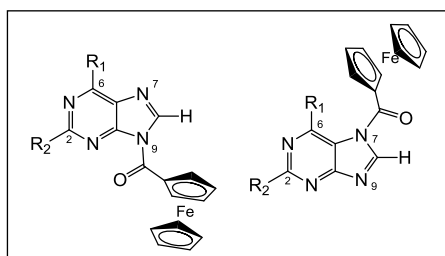
Sveučilište u Zagrebu Farmaceutsko-biokemijski fakultet
mtoma@pharma.hr

Ferrocene-substituted nucleobases have diverse biological and electrochemical properties since they combine biogenic and redox-active parts. [1] Ferrocene undergoes a reversible one-electron oxidation producing a stable ferrocenium cation and serves as an internal standard for electrochemistry in non-aqueous solution. Ferrocenyl compounds are known to exhibit anticancer activity through a redox mechanism by generating reactive oxygen species – hydroxyl radicals ($\bullet\text{OH}$) causing the DNA cleavage and oxidative stress. [2]

In continuation of our work [3,4] we synthesized a series of ferrocene-substituted purine- and pyrimidine-nucleobase derivatives and measured their redox potential by the cyclic voltammetry in dichloromethane. All measured compounds showed a reversible one-electron oxidation in the range of 300-450 mV. Interestingly, we can easily distinguish the two ferrocenoyl-purine regioisomers, N7 and N9, simply by the redox potential value. In the case of bis-ferrocene substituted compounds the two electrochemical events were expected, but only one simultaneous process was observed. In order to examine the tendency of ferrocene-nucleobase conjugates to produce reactive oxygen species (ROS), we carried out an acellular screening with DCFH assay in DMSO. We found that the nucleobases coupled with ferrocene generate ROS, while neither ferrocene itself nor the nucleobases were active. By changing the substituents on the purine ring, one can significantly influence the ROS generation of ferrocene-substituted nucleobases.

References:

- [1] K. Kowalski, *Coord. Chem. Rev.* 2016, *317*, 132.
- [2] M. Patra, G. Gasser, *Nat. Rev. Chem.* 2017, *1*, 1.
- [3] J. Lapić, V. Havaić, D. Šakić, K. Sanković, S. Djaković, V. Vrček, *Eur. J. Org. Chem.* 2015, 5424.
- [4] M. Toma, L. Božičević, J. Lapić, S. Djaković, D. Šakić, T. Tandarić, R. Vianello, V. Vrček, *J. Org. Chem.* 2019, *84*, 19, 12471.



OTAPALOM KONTROLIRANA SINTEZA HIDRATA KOMPLEKSNIH SPOJEVA BAKRA S GLICINOM I 2,2'- BIPIRIDINOM

SOLVENT CONTROLLED SYNTHESIS OF HYDRATES OF COPPER COMPLEX COMPOUNDS WITH GLYCINE AND 2,2'-BIPYDINE

Darko Vušak, Biserka Prugovečki, Dubravka Matković-Čalogović

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

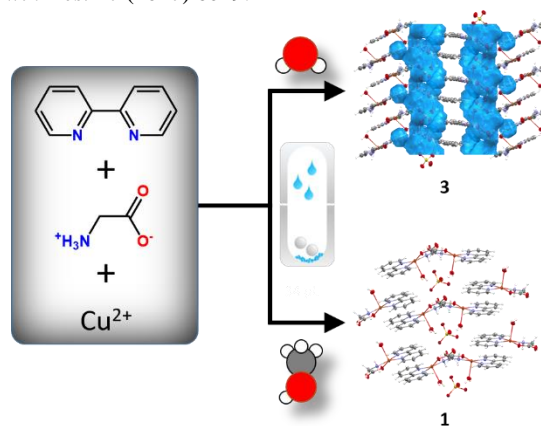
Bakrovi(II) kompleksi s aminokiselinama i heterocikličkim bazama istražuju se desetljećima zbog izražene antitumorske aktivnosti, ali i kao modelni spojevi u proučavanju interakcija bakra s proteinima [1-3]. Također, u posljednje vrijeme ova skupina kompleksa istražuje se i u svrhu razvoja novih materijala s određenima magnetskim svojstvima, kemijskih senzora te potencijalom skladištenja otapala ili drugih molekula [3].

U sklopu našeg proučavanja kompleksnih spojeva bakra s aminokiselinama i heterocikličkim bazama sintetizirana su tri hidrata kompleksa bakra s glicinom i 2,2'-bipiridinom te im je određena kristalna struktura: $[\text{Cu}(\text{gly})(\text{H}_2\text{O})(\text{bpy})]_2\text{SO}_4$ (1), $[\text{Cu}(\text{gly})(\text{H}_2\text{O})(\text{bpy})]_2\text{SO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ (2) i $[\text{Cu}(\text{gly})(\text{H}_2\text{O})(\text{bpy})][\text{Cu}(\text{gly})(\text{SO}_4)(\text{bpy})] \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ (3). Kompleksi su sintetizirani otopinskom te mehanokemijskom sintezom. Pokazali smo da je kontrolom uvjeta – količine otapala i odabirom reaktanata – moguće kontrolirano dobiti čiste hidrate reakcijama u otopini, ali i čvrstom stanju (slika 1). Također, proučen je utjecaj atmosfere (različiti sastav para otapala) na stabilnost pojedinog hidrata. Sva tri spoja tvore 1D beskonačne lance kompleksa povezanih π -interakcijama. Dok spojevi 1 i 2 sadrže samo kompleksne katione tipa $[\text{Cu}(\text{gly})(\text{H}_2\text{O})(\text{bpy})]^+$, kod spoja 3 dolazi do promjene koordinacije pri čemu se polovica koordiniranih molekula vode zamijeni sulfatnim ionima te nastaju kompleksni kationi $[\text{Cu}(\text{gly})(\text{H}_2\text{O})(\text{bpy})]^+$ i anioni $[\text{Cu}(\text{gly})(\text{SO}_4)(\text{bpy})]^-$.

[1] X. Y. Le, S. Liao, X. P. Liu and X. L. Feng, *J. Coord. Chem.* 59 (2006) 985.

[2] S. R. Liao, X. Y. Le and X. L. Feng, *J. Coord. Chem.* 61 (2008) 847.

[3] D. Vušak, B. Prugovečki, D. Milić, M. Marković, I. Petković, M. Kralj and D. Matković-Čalogović, *Cryst. Growth Des.* 17 (2017) 6049.



Slika 1. Shema mehanokemijske sinteze spojeva 1 i 3 uz dodatak različitih otapala.

POSTERSKA IZLAGANJA ***POSTER PRESENTATIONS***

Analiza, sinteza i vođenje procesa
*Process analysis, synthesis and
design*

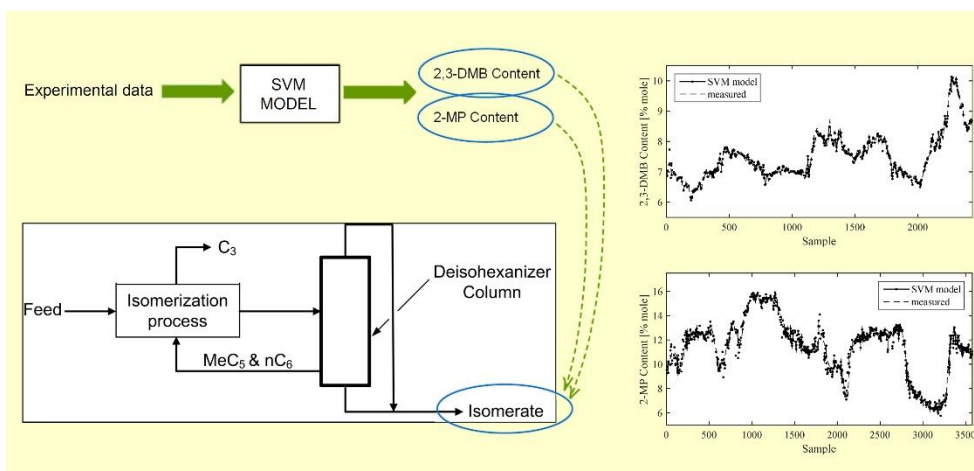
METODA POTPORNIH VEKTORA KAO SOFTVERSKI SENZORI NA PROCESU IZOMERIZACIJE

SUPPORT VECTOR MACHINE-BASED SOFT SENSORS IN THE ISOMERIZATION PROCESS

Srećko Herceg, Željka Ujević Andrijić, Nenad Bolf

Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Sveučilište u Zagrebu,
hsrecko@gmail.com

U ovom radu predstavljen je razvoj softverskih senzora primjenom metode potpornih vektora. Ova metoda bazirana je na statističkoj teoriji učenja i ima široku primjenu u razvoju modela softverskih senzora. Modeli razvijeni u ovom radu nalaze primjenu u kontinuiranoj procjeni sadržaja važnih komponenata u proizvodima rafinerijskog procesa izomerizacije opremljenog kolonom za deizoheksanizaciju. Velika pozornost pridana je odabiru i predobradi eksperimentalnih podataka. Vrednovanje razvijenih modela na nezavisnom skupu podataka pokazalo je primjenjivost za procjenu sadržaja komponenata rafinerijskih proizvoda. Razvijeni softverski senzori mogu se primijeniti kao zamjena za analizator u procesu izomerizacije, kao i u strategijama naprednog vođenja procesa.



MODELIRANJE I OPTIMIZACIJA PROCESA PROIZVODNJE TEKUĆIH ORGANSKIH GNOJIVA NA BILJNOJ BAZI

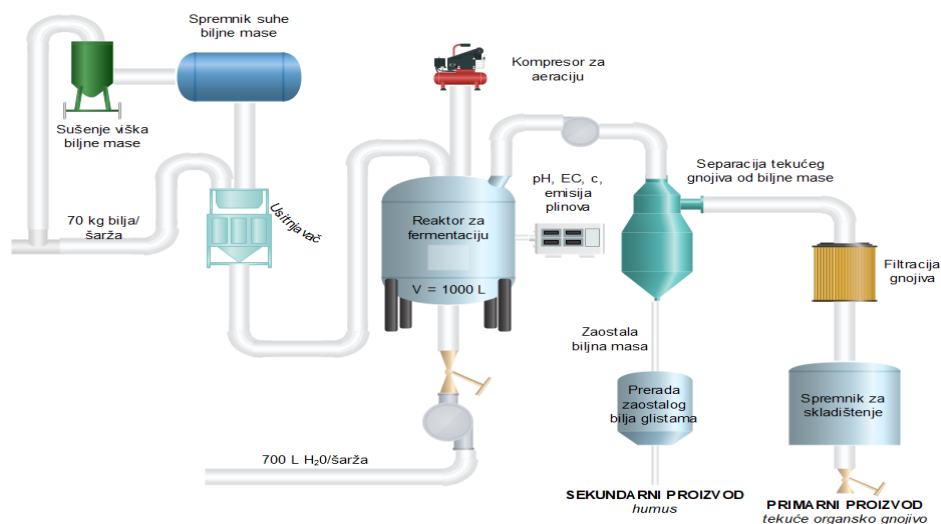
MODELING AND OPTIMIZATION OF THE PRODUCTION PROCESS OF A PLANT BASIS LIQUID ORGANIC FERTILIZERS

Zvonimir Jukić, Ante Čović-Stanić

Kemijsko-tehnološki fakultet, Ruđera Boškovića 35, 21000 Split
zvonimir.jukic@ktf-split.hr

Tekuća organska gnojiva na biljnoj bazi u zadnje vrijeme se ističu kao sve efikasnija alternativa industriji mineralnih gnojiva, kako po pitanju agronomskog efekta, tako i po pitanju pozitivnog učinka na okoliš. Ciljanim odabirom i doziranjem komponenti biljne sirovine, može se dobiti višefunkcionalni proizvod – ekološko gnojivo i ekološki pesticid. Međutim, u procesu proizvodnje, koji nije do kraja razvijen, ističu se dva glavna problema: trom i dugotrajan proces, uz malu konverziju sirovine, što utječe na efikasnost i ekonomičnost procesa. Detektirana su četiri ključna procesna parametra preko kojih se vrši optimizacija cjelokupnog procesa: granulacija sirovine, temperatura reakcijske suspenzije, aeracija suspenzije i režim miješanja suspenzije. S obzirom da se prijenos tvari u suspenziji odvija mehanizmom difuzije, potrebno je pronaći optimalnu granulaciju i režim miješanja, a kako se proces odvija prema mehanizmu ekstrakcije kruto-tekuće potrebno je pronaći optimalnu temperaturu i aeraciju suspenzije. Optimizacijom procesnih parametara omogućava se modeliranje procesa i predviđanje tijeka proizvodnje u pogonu.

63



SIMULATING COMPLEX DISTILLATION SEQUENCES USING COMMERCIAL SIMULATORS

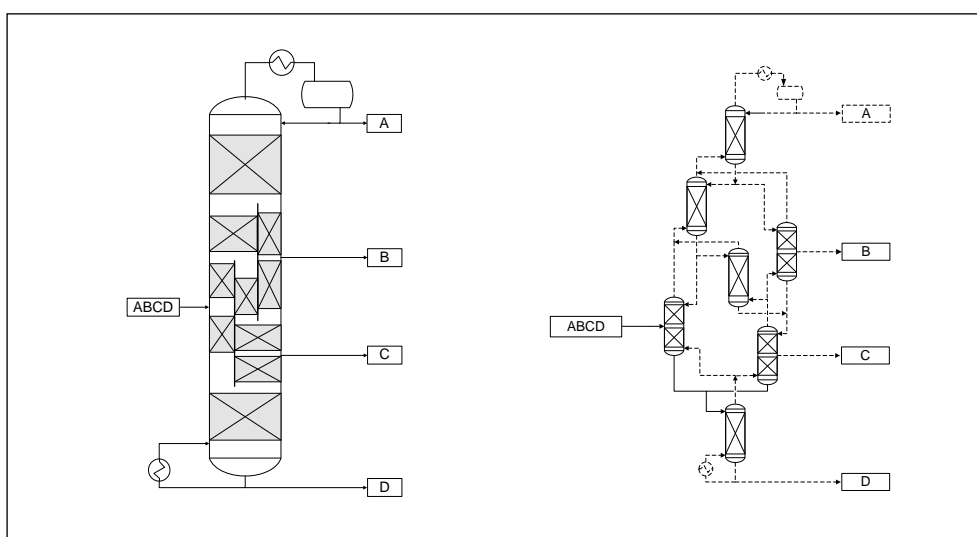
Goran Lukač¹, Ulrich Preißinger², Thomas Grützner², Igor Dejanović¹

¹ University of Zagreb, Faculty of Chemical Engineering and Technology, 10000 Zagreb, Croatia

² Ulm University, Institute of Chemical Engineering, Laboratory of Thermal Process Engineering, Ulm, Germany
glukac@fkit.hr

Dividing-Wall Columns (DWC) are among most perspective new distillation technologies that could offer major breakthrough towards sustainability of large-volume refining and chemical production, thanks to their significantly better energy efficiency compared to conventional systems. For implementation of such complex configurations to be possible, detailed steady-state and dynamic behaviour studies and analyses need to be performed and validated. Simulating DWCs using commercially available simulators such as ChemCad or Aspen Hysys is not a trivial task. While their calculations are reliable and accepted industry wide, they feature DWC-ready models of very limited possibilities. Therefore, DWC configurations, especially more complex ones, need to be assembled using thermally coupled individual rigorous distillation models, connected in an appropriate sequence. There are several challenges arising from this fact, which need to be solved in order to achieve valid simulation results.

This paper presents used methods and techniques for achieving that, starting from the basic design of the column, initialization, dimensioning, all the way to the final setup of the dynamic model for open- and closed-loop performance testing. This will be shown on the example of a Multiple Dividing-Wall Column (mDWC), specifically the "2-2-4" variant, featuring two dividing walls, two liquid and vapour splits, four product streams and in total consisting of 10 different separation sections (beds). As such, it is an exceptional showcase of how complex the simulations can become in order to accurately represent steady state and dynamic performance.



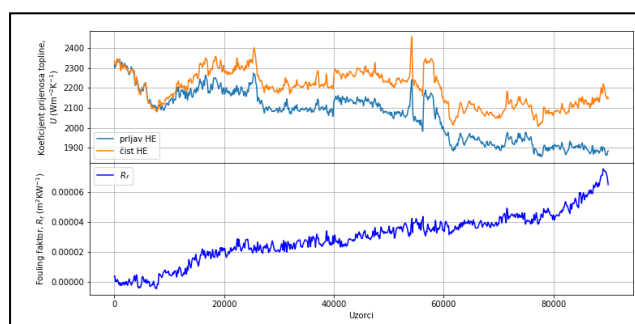
PREGLED METODA I RAZVOJ MODELA U PROGRAMSKOM JEZIKU *PYTHON* ZA PREPOZNAVANJE I PREDVIĐANJE NASTAJANJA NASLAGA U INDUSTRIJSKIM IZMJENJIVAČIMA TOPLINE

A REVIEW OF METHODS AND MODEL DEVELOPMENT IN *PYTHON* PROGRAMMING LANGUAGE FOR FOULING DETECTION AND PREDICTION IN INDUSTRIAL HEAT EXCHANGERS

Nikola Rimac, Željka Ujević Andrijić

Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije,
Zavod za mjerenja i automatsko vođenje procesa,
Savska cesta 16/5a, 10 000 Zagreb, Hrvatska
nrimac@fkit.hr

Nastajanje naslaga u izmjenjivačima topline ozbiljan je i uvijek aktualan industrijski problem čije se posljedice mjere u milijunima dolara godišnje. Nastajanje naslaga dovodi do smanjenja efikasnosti rada izmjenjivača topline što utječe na smanjenje opsega proizvodnje, dodatne neželjene popravke procesne opreme, ali i na okoliš zbog korištenja kemikalija za čišćenje te dodatne potrošnje energije. Stoga ni ne čudi da se u akademskim i industrijskim krugovima razvila potreba za rješanjem tog problema. Razvijani su i predstavljeni razni empirijski, poluempirijski i fundamentalni modeli poput Ebert i Panchalovog modela, NTU metode i drugih. Zbog složenog procesa nastajanja naslaga ne postoji široko primjenjiv fundamentalni model za predviđanje nastajanja naslaga. Stoga se predlaže razvoj naprednih modela na temelju kontinuirano prikupljenih podataka koji za ulogu nemaju fizikalnu identifikaciju mehanizma nastajanja nego prilično lako opisuju vezu ulaznih i izlaznih veličina što je često i dovoljno za razumijevanje i predviđanje vladanja procesa. Primjer takvih naprednih metoda su sustavi neizravne logike, umjetne neuronske mreže, parcijalna regresija metodom najmanjih kvadrata, nelinearne autoregresijske metode i druge. Ovaj rad obuhvaća pregled dosadašnjih najčešće korištenih metoda za prepoznavanje i predviđanje nastajanja naslaga. Na osnovu podataka prikupljenih kontinuiranim mjerenjima temperature i protoka s rafinerijskog postrojenja, razvijen je model umjetnih neuronskih mreža u programskom jeziku *Python*. Model neuronskih mreža razvijen je unutar *Keras* biblioteke. U radu je prikazano da se predloženi model razvijen u *Pythonu* može zadovoljavajuće koristiti za prepoznavanje i predviđanje nastanka naslaga u izmjenjivačima topline.



Biokemijsko inženjerstvo
Biochemical engineering

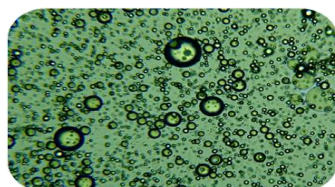
USPOREDBA EMULZIFIKACIJE U ŠARŽNOM REAKTORU I MIKROREAKTORU – DVOFAZNI SUSTAV ULJE-VODA

COMPARISON OF BATCH AND MICROREACTOR EMULSIFICATION PROCESS – TWO PHASE SYSTEM OIL - WATER

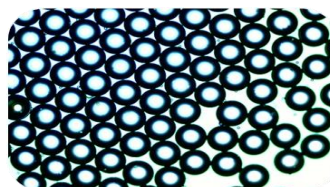
Zoran Bila, Martin Češi, Marko Čombor, Ivana Čulo, Filip Grgić, Davor Valinger, Maja Benković, Tamara Jurina, Ana Jurinjak Tušek, Jasenka Gajdoš Kljusurić

Prehrambeno-biotehnoški fakultet, Pierottijeva 6, 1000 Zagreb
zoran.bila995@gmail.com

Up to this day emulsions that include two or more liquid phases are found in almost all kinds of industries ranging from food to environmental. Most common emulsification processes are carried out in classical batch reactors with capabilities of mixing two or more phases at high stirring rates. Besides batch reactors, over the last 20 years, microreactor technology has provided excellent results in fields of chemical and pharmaceutical industry, biotechnology, medicine and also food industry. This research is therefore focused on comparison of the batch and microreactor emulsification process of the two phase oil-water system. Experiments were conducted using two emulsifiers –Tween 20 and polyethylene glycol 2000 (PEG 2000) in a two phase system comprising of 30 % oil and 70 % water (v/v). For batch experiments, IKA RW20 overhead stirrer, equipped with 5 cm diameter emulsifying disc stirrer, was used at 2 rotational speeds: 1000 min^{-1} and 1400 min^{-1} , with a total mixing time of 7 minutes. For microreactor experiments, Micronit teardrop micromixer microreactor was used with microchannel width of $240 \mu\text{m}$, height of $150 \mu\text{m}$ and length of 53.3 mm , at 5 different combinations of oil and water flows: i) $30 \mu\text{L min}^{-1}$ oil and $90 \mu\text{L min}^{-1}$ water; ii) $40 \mu\text{L min}^{-1}$ oil and $100 \mu\text{L min}^{-1}$ water; iii) $50 \mu\text{L min}^{-1}$ oil and $110 \mu\text{L min}^{-1}$ water; iv) $70 \mu\text{L min}^{-1}$ oil and $130 \mu\text{L min}^{-1}$ water and v) $90 \mu\text{L min}^{-1}$ oil and $150 \mu\text{L min}^{-1}$ water. After emulsification, formed emulsions were photographed under a microscope at magnification 4x (BTC Type LCD-35, Bresser, Germany), and the micrographs were analyzed using the ImageJ software v.1.8.0 (NIH, Maryland, USA), with the results expressed as Feret diameter (minimal, maximal and average). Based on the obtained results, batch experiments resulted in emulsions with lower minimal Feret diameter, but with much larger differences in minimal and maximal droplet sizes and larger span of droplet sizes. In microreactor experiments, the obtained average droplet size was larger compared to the batch experiments, but the differences between minimal and maximal droplet sizes were lower. This leads to a conclusion that, when uniform particle size of the emulsions is a priority, regardless of the required size, microreactor emulsification shows better results. However, if smaller droplet diameter emulsions are required, but with low uniformity, the batch process is more adequate.



Batch (PEG, 1400 min^{-1})



Microreactor (PEG, $30 \mu\text{L min}^{-1}$ oil and $90 \mu\text{L min}^{-1}$ water)

PRIMJENA EUTEKTIČKIH OTAPALA U VALORIZACIJI OTPADA NARANČINE KORE

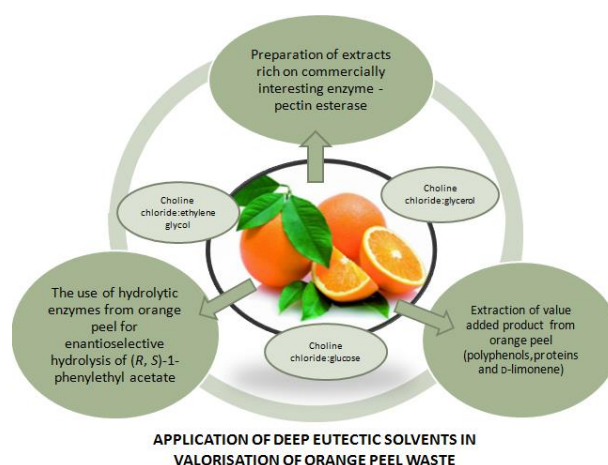
APPLICATION OF DEEP EUTECTIC SOLVENTS IN VALORISATION OF ORANGE PEEL WASTE

Ivona Čupić, Ana Novak, Iva Čukelj, Manuela Panić, Martina Andlar, Ivana Radojčić Redovniković, Marina Cvjetko Bubalo

Faculty of Food Technology and Biotechnology, University of Zagreb, Pierottijevega 6,
10000 Zagreb, Croatia
cupicivona@gmail.com

Food industry waste is considered a renewable source of value-added functional components, such as fiber, oil, protein, waxes, dyes, and biologically active components. One of the great example is waste management of orange peel as a by-product of juice production, which is rich in polymers (cellulose, hemicellulose and pectin), enzymes (eg. pectin-esterase), flavanoids, essential oils (mostly limonene) and pigments. Thus, consumption and processing of citrus fruits in the food, cosmetic and pharmaceutical industries are increasing daily. In order to make the biorefinery concept fully based on environmentally acceptable principles, during the process of extracting, separation and analysis of various compounds, green solvents such as deep eutectic solvents (DESs) are nowadays considered. DESs fully fits the principles of green chemistry since are non-toxic, non-volatile, biodegradable, low in cost and easy to prepare. Within this work valorisation of orange peel waste was performed on three levels, all based on DES: (i) extraction of value added product from orange peel (polyphenols, proteins and D-limonene); (ii) the use of hydrolytic enzymes from orange peel for enantioselective hydrolysis of (*R, S*)-1-phenylethyl acetate; (iii) preparation of extracts rich on commercially interesting enzyme - pectin esterase. Choline chloride-based DESs were found to be good substitutes for acidified ethanol and *n*-heptane in extraction of polyphenols and D-limonene, respectively, while they showed low protein extraction efficiency. DES were shown to be superior solvents for the enantioselective hydrolysis of (*R,S*)-1-phenylethylacetate using hydrolytic enzymes from orange peel in comparison to buffer (much higher enantioselectivity was obtained). Finally, pectin-esterase extracted from orange peel exhibit significantly higher activity in DESs in comparison to buffer.

68



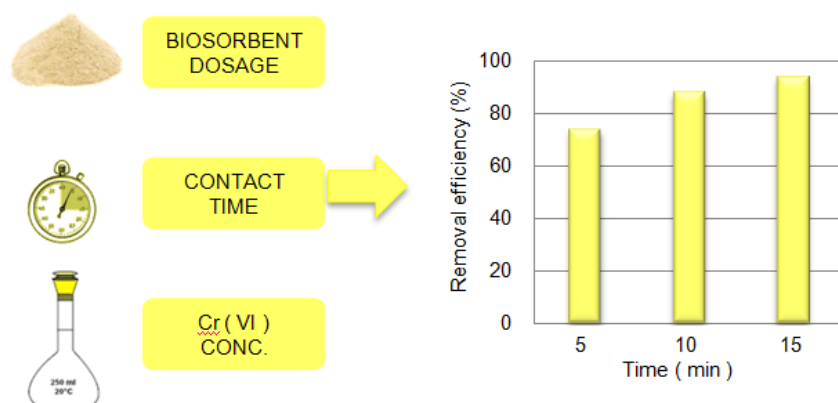
THE INFLUENCE OF CONTACT TIME IN REMOVING Cr (IV) IONS FROM WATER USING LEMON PEEL AS LOW-COST ADSORBENT

Amila Dubravac, Meldina Omerčević, Mirnesa Zohorović, Emir Horozić, Husejin Keran

Faculty of Technology, University of Tuzla, Univerzitetska 8, 75 000 Tuzla, Bosnia and Herzegovina

dubravac.amila@gmail.com

High percent of industrialization and urbanization causes daily pollution of wastewater and water used in households. Besides conventional methods, methods involving the use of biomass are increasingly used today. One of such methods is biosorption. In this paper the influence of the contact time on the efficiency of removing Cr⁶⁺ ions using the lemon peel as a low-cost biosorbent was examined. Measurements were performed on the UV / VIS spectrophotometer Perkin Elmer λ25, at wavelength of 540 nm. The lemon peel was dried at the room temperature for 30 days, after which it was chopped up and sieved for granulation of 800 μm. For the batch-adsorption diagram, a range of solutions has been prepared with concentrations in the range of 0,1 – 0,5 mg / L ($y = 0,3402x + 0,0047$; $R = 0,9991$). The results show that lemon peel efficiently removes Cr⁶⁺ ions from water, with an efficiency of 73,59, 87,77 and 93,64%, after being mixed for 5, 10 and 15 minutes, respectively.

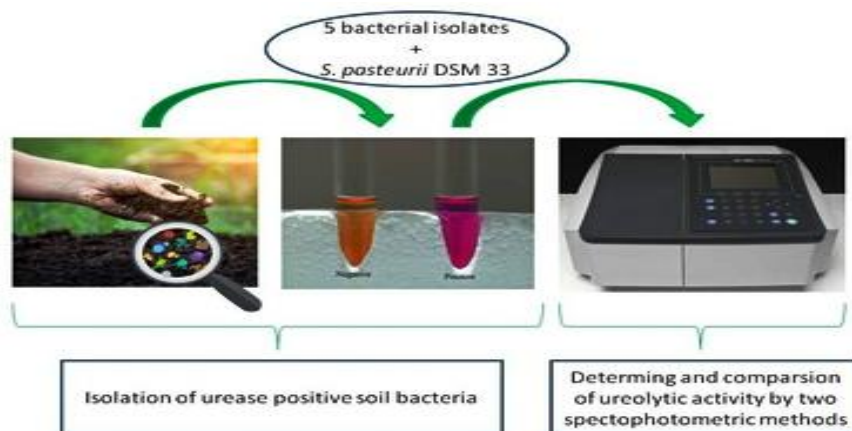


COMPARISON OF UREOLYSIS RATES BETWEEN BACTERIAL STRAINS ISOLATED FROM ALKALINE SOILS

Čila Holpert, Anja Saveljić

University of Novi Sad, Faculty of Technology Novi Sad, Bul. cara Lazara 1,
21000 Novi Sad, Serbia
holpert.csilla@gmail.com

In recent years, urea has been one of the most used nitrogen source as fertilizer in different agricultural areas. Due to frequent use of fertilizers, accumulation of this nitrogen compound in the soil as well as waters and wastewaters becomes a major environmental problem. The ureolytic bacteria such as *Sporosarcina* and *Bacillus* strains are well-known in different engineering processes where urea reduction is required. In this study, rates of hydrolyzed urea (ureolysis) by reference strain *Sporosarcina pasteurii* DSM 33 and bacterial strains isolated from alkaline soils were examined by two different spectrometric techniques. Furthermore, the comparing of ureolysis rates, pH changes and bacterial behavior were observed. The ureolysis rates were investigated under aerobic conditions using reference culture *Sporosarcina pasteurii* DSM 33 and bacterial strains isolated from alkaline soils near Novi Sad, Vojvodina, Serbia. In preliminary studies, all five selected bacterial strains showed ureolytic activity on Urea base agar. The ureolysis rates were determined spectrometrically (UV-1800 spectrophotometer, Shimadzu, Kyoto, Japan) in Urea broth with 20% at the beginning of the experiment and periodically during 72 hours at 30 °C. The modified Nessler method is a type of test which is commonly used for ammonia detection and does not required expensive reagents. On the other hand, spectrometric by commercial Ammonia-Urea kit (Megazyme, Wicklow, Ireland) provided a rapid, simple, sensitive, and reliable assay for urea detection. Additionally, pH monitoring was measured by pH-meter HI99161 (Hanna Instruments, Vunsakat, USA) in the same intervals as for ureolysis check. According to the obtained results, all five bacterial isolates were capable to hydrolyze urea and change pH value of Urea broth. Depending on the techniques of analysis, the difference in bacterial behavior and kinetics of hydrolyzed urea was observed. During first day of incubation, ureolysis by tested strains and reference culture were intensively and pH value increased for almost 2 units. At the end of incubation period, the soil bacteria response was similar to reference culture, successively reducing urea in nutrient media.



ANALIZA GLOBALNE OSJETILJOSTI KINETIČKIH PARAMETERA MODEL METABOLIZMA TRIPTOFANA

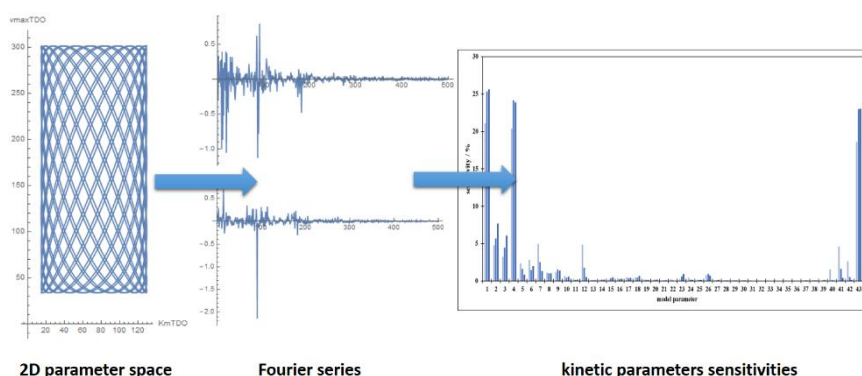
GLOBAL SENSITIVITY ANALYSIS OF TRYPTOPHAN METABOLISM MODEL KINETIC PARAMETERS

Anja Karatović, Sandra Remenar, Brigita Herout, Tamara Jurina, Davor Valinger, Maja Benković, Jasenka Gajdoš Kjusurić, Ana Jurinjak Tušek

Prehrambeno-biotehnoški fakultet, Pierottijeva 6, 1000 Zagreb
anjak1312@gmail.com

The biggest challenge when working with mathematical models describing biological processes is to choose the appropriate values of the kinetic parameters. This applies especially to the models of the metabolically processes. Parameter values are obtained from various sources and under specific experimental conditions and constitute sources of uncertainties. Useful tool for dealing with model parameter uncertainties is sensitivity analysis. Sensitivity analysis is the study how uncertainty in the model output can be apportioned to different sources of uncertainty in the model input factor, for example model parameters. In this work global sensitivity analysis method (Fourier Amplitude Sensitivity Test, FAST) was applied for analysis of the kinetic parameters of the tryptophan metabolism model. The aim of this study was to determinate the first order sensitivities of model metabolites at three time points in order to identify the possible shift in metabolism control. Model of tryptophan metabolism proposed by Rios-Avila et al., 2013 includes mammalian data on enzyme kinetics and tryptophan transport from intestinal lumen to liver, muscle and brain. Regulatory mechanism and inhibitions of relevant enzymes were included. The analysed model is expressed in the form of 16 ordinary differential equations and includes 44 kinetic parameters. Using FAST method, the system analysis is based on evaluation of the first moments form the multidimensional joint probability distribution. Effect of each individual process variable on each of the system outputs is evaluated by ratio of the ensemble variance of the conditional expected value relative to the total ensemble dispersion. Results showed that the most important parameters for the tryptophan state concentration were (1) K_{mPRO} -saturation constant in protein synthesise reaction, (2) $v_{maxTRPGS}$ -maximum reaction rate for the reaction of tryptophan transport from gut to portal circulation and (3) k_{14} - reaction rate of the reaction of tryptophan transport from muscles to peripheral circulation. Results also show the slight increase of the sensitivity coefficients of the listed parameters over the time.

71



OPTIMIRANJE UVJETA IMOBILIZACIJE ALDOLAZE NA MEZOPOROZNU SILIKU

OPTIMISATION OF ALDOLASE IMMOBILIZATION ON MESOPOROUS SILICA

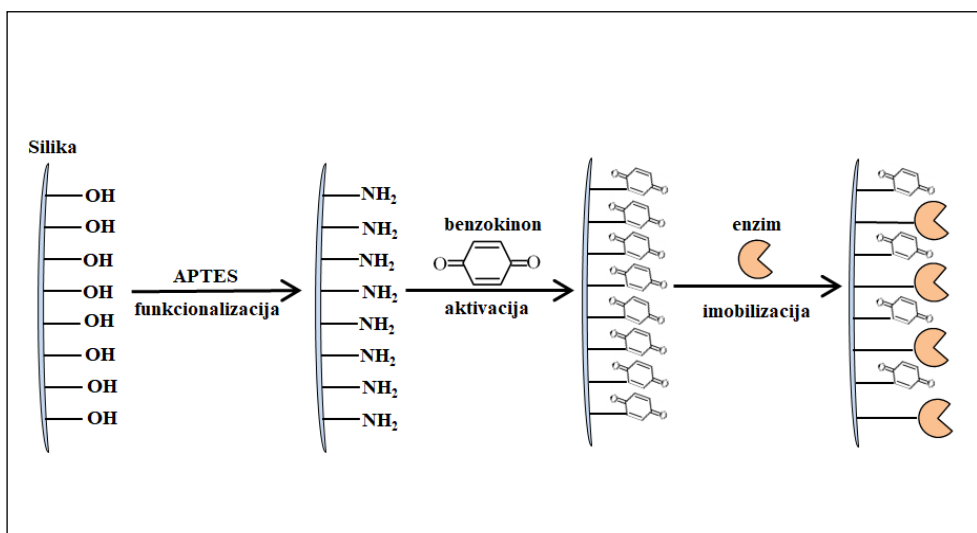
Barbara Kolić, Dino Skendrović, Ana Vrsalović Presečki

Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije Sveučilišta u Zagrebu,
Marulićev trg 19 HR-10000 Zagreb
bkolic@fkit.hr

Primjena biokatalize za proizvodnju prekursora bočnog lanca statina, jednog od najtraženijih farmaceutika, predstavlja atraktivnu alternativu klasičnom kemijskom načinu sinteze. Jedan od poznatih načina biokatalitičke proizvodnje navedene komponente je aldolna adicija acetaldehida i kloroacetaldehida korištenjem enzima deoksiriboza-fosfat aldolaza (DERA). Iako taj put sinteze ima mnoge prednosti, veliki problem predstavlja deaktivacija enzima uzrokovana supstratima i međuproduktom reakcije, što onemogućava višestruko korištenje biokatalizatora. Jedan od mogućih načina za rješenje tog problema je imobilizacija enzima.

U ovom radu je enzim DERA imobiliziran na mezoporoznu siliku kovalentnim vezanjem u svrhu povećanja stabilnosti enzima. Mezoporozna silika je sintetizirana sol-gel metodom. Za funkcionalizaciju i aktivaciju nosioca korišteni su 3-aminopropiltrioksilan (APTES) i benzokinon (slika 1.). Imobilizacija enzima DERA na tako pripremljenom nosiocu provedena je pri različitim koncentracijama i pH vrijednostima fosfatnog pufera, kako bi se pronašli optimalni uvjeti procesa. Uspješnost imobilizacije se odredila usporedbom efikasnosti i preostale aktivnosti imobiliziranog enzima u usporedbi s slobodnim enzimom.

72



Slika 1. Primjer korištene metode funkcionalizacije, aktivacije i imobilizacije aldolaze na mezoporoznu siliku.

BIOKATALITIČKA AZIDOLIZA FLUORO-SUPSTITUIRANIH DERIVATA STIREN-OKSIDA

BIOCATALYTIC AZIDOLYSIS OF FLUORO-SUBSTITUTED STIREN-OXIDE DERIVATIVES

Petra Marin¹, Nevena Milčić², Irena Dokli³, Martina Sudar², Zvezdana Findrik Blažević², Maja Majerić Elenkov³

¹Sveučilište u Zagrebu, Prehrambeno-biotehnološki fakultet
Pierottijeva 6, HR-10000 Zagreb

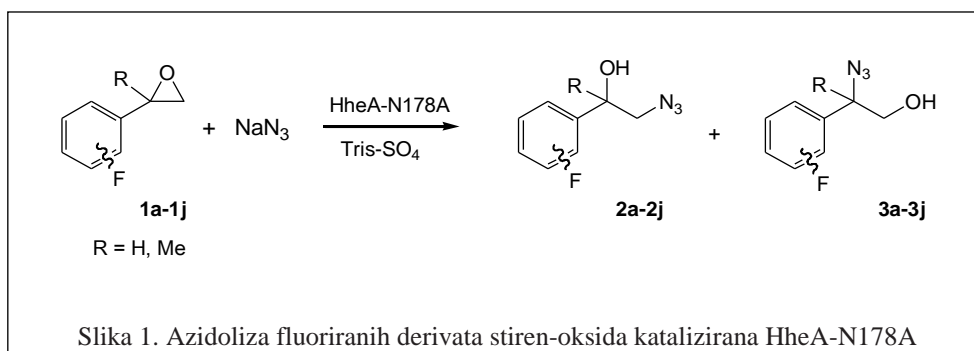
²Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije
Marulićev trg 19, HR-10000 Zagreb

³Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, HR-10000 Zagreb
pmarin@pbf.hr

Halogenhidrin-dehalogenaze (HHDH) su enzimi koji kataliziraju nukleofilno otvaranje epoksida koristeći niz malih aniona kao što su azid, cijanid, cijanat i dr.¹ Reakcije se odvijaju u blagim uvjetima, pri sobnoj temperaturi, neutralnom pH i atmosferskom tlaku, a usto pokazuju visoku regio- i enantioselektivnost te kao takve predstavljaju dobru alternativu klasičnim kemijskim metodama sinteze. Upotrebom ovih enzima moguće je pripremiti niz kiralnih građevnih blokova čija je dostupnost od velikog značaja u kemijskoj, farmaceutskoj i agrokemijskoj industriji.

Prema dosadašnjim istraživanjima, genetski modificirani enzim HheA-N178A pokazao je povećanu enantioselektivnost u odnosu na divlji tip HheA te smanjenu regioselektivnost u katalizi azidolize stiren-oksida.² Provedena ispitivanja u ovom radu usredotočena su na određivanje aktivnosti i enantioselektivnosti HheA-N178A na setu fluoriranih derivata stiren-oksida kao supstrata uz natrijev azid kao nukleofil (slika 1). Racemični supstrati pripremljeni su sintetskim metodama, a enzim HheA-N178A ekspresijom u stanicama *E. coli* MC1061. Enzimske reakcije provedene su u Tris-SO₄ puferu koristeći sirovi enzimski ekstrakt. Tijek reakcija praćen je plinskom kromatografijom, a enantiomerna čistoća produkata određena je plinskom ili tekućinskom kromatografijom visoke djelotvornosti koristeći kolone s kiralnom stacionarnom fazom.

1. G. Hasnaoui, M. Majerić Elenkov, J. H. Lutje Spelberg, B. Hauer, D. B. Janssen, *ChemBioChem* 2008, 9, 1048-1051.
2. A. Mikleušević, I. Primožić, T. Hrenar, B. Salopek-Sondi, L. Tang, M. Majerić Elenkov, *Tetrahedron: Asymmetry* 2016, 27, 930-935.



KINETIKA I MEHANIZAM ENZIMATSKE SINTEZE NANOČESTICA ZLATA

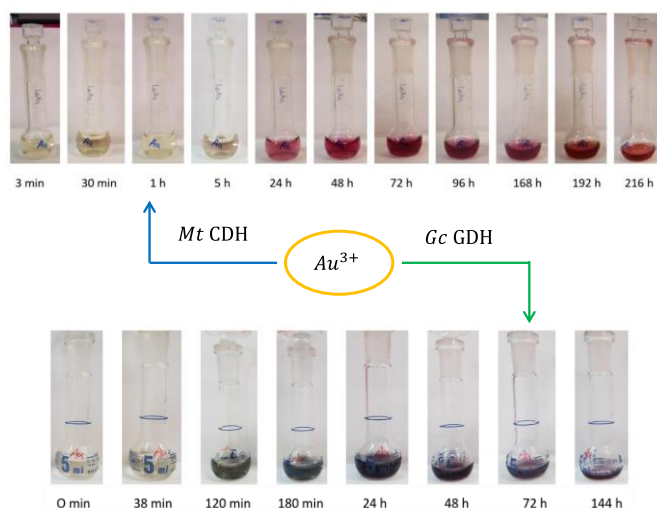
KINETICS AND MECHANISM OF THE ENZYMATIC SYNTHESIS OF THE GOLD NANOPARTICLES

Lela Martinaga¹, Katarina Komljenović², Ana Vrsalović Presečki²,
Iva Rezić²

¹Sveučilište u Zagrebu, Tekstilno-tehnološki fakultet
Prilaz baruna Filipovića 28a, 10000 Zagreb, Hrvatska

²Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije
Marulićev trg 19, 10000 Zagreb, Hrvatska
lela.pintaric@tff.hr

Proizvodnja i upotreba metalnih nanočestica u kontinuiranom je porastu. Konvencionalne metode njihove sinteze često koriste razne toksične kemikalije i čine upotrebu tako sintetiziranih nanočestica ograničenom u prehrambenoj i tekstilnoj industriji, medicini, farmaceutici, itd. Stoga je vrlo važno naći i ispitati nove metode sinteze metalnih nanočestica koji će rezultirati ekološki prihvatljivim nanočesticama, a jedna od takvih upravo je njihova enzimatska sinteza. Nanočestice zlata jedne su od najviše istraživanih i korištenih vrsta nanočestica. Koriste se u raznim područjima znanosti i tehnologije te posebice u medicini u raznim terapijskim i dijagnostičkim sustavima. U ovom radu, sintetizirane su nanočestice zlata korištenjem enzima glukoza dehidrogenaze (*Gc* GDH), koji katalizira reakciju oksidacije glukoze i celobioza dehidrogenaze (*Mt* CDH), koji katalizira reakciju oksidacije celobioze. Ispitana je kinetika oba enzima u navedenim reakcijama te je promatran utjecaj iona zlata na aktivnost enzima. Kinetika u oba slučaja opisana je jednosupstratnom Michaelis-Menteničinom kinetikom uz kompetitivnu inhibiciju ionima zlata. Procijenjene konstante inhibicije upućuju da je inhibicija ionima zlata značajnija u slučaju reakcije oksidacije glukoze uz *Gc* GDH u odnosu na oksidaciju celobioze uz *Mt* CDH. Provođenjem sinteze nanočestica zlata uz *Mt* CDH i reakciju oksidacije celobioze, zaključeno je kako je mehanizam nastajanja nanočestica zlata direktno povezan s kinetikom reakcije oksidacije. Za navedenu sintezu postavljen je matematički model koji se dobro slaže s eksperimentalno dobivenim rezultatima. Prilikom sinteze nanočestica zlata uz *Gc* GDH i glukozu, utvrđeno je da mehanizam nastajanja nanočestica nije povezan s reakcijom oksidacije glukoze, već nanočestice zlata nastaju redukcijom iona zlata uz glukozu i aminokiseline koje grade enzim.



MODELIRANJE ENZIMATSKE SINTEZE NANOČESTICA SREBRA

MODELLING OF THE ENZYMATIC SYNTHESIS OF SILVER NANOPARTICLES

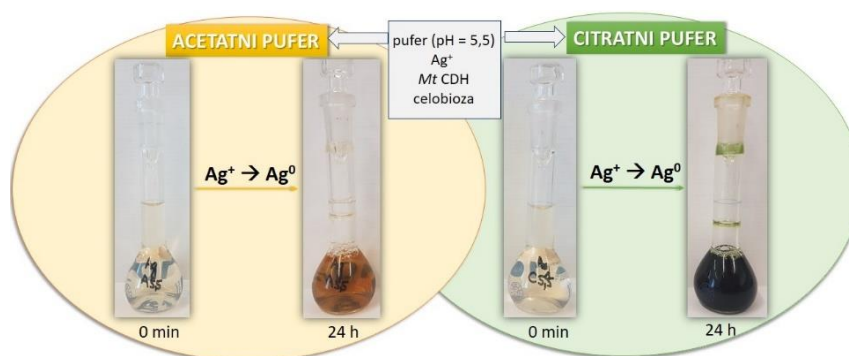
Petra Pohanić¹, Lela Martinaga², Ana Vrsalović Presečki¹, Iva Rezić²

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

²Sveučilište u Zagrebu, Tekstilno-tehnološki fakultet
Prilaz baruna Filipovića 28a, 10000 Zagreb, Hrvatska
ppohanic@fkit.hr

Nanotehnologija je jedna od najpopularnijih tema istraživanja u modernoj znanosti materijala te se naziva i *područjem sljedeće industrijske revolucije*. Nanočestice srebra (Ag NPs) najčešće su korištena vrsta metalnih nanočestica te se, s obzirom na baktericidna svojstva, primjenjuju uglavnom u području medicine za liječenje teških opekлина, razne dijagnostičke postupke i kao nosioci lijekova, ali i u tekstilnoj i prehrambenoj industriji gdje se ugrađuju u materijale u svrhu njihovog unapređivanja.

Kao alternativa tradicionalnoj kemijskoj sintezi Ag NPs, danas se često koristi njihova enzimatska sinteza kojom se smanjuje upotreba reaktanata štetnih za ljude i okoliš. U ovom radu, u svrhu sinteze Ag NPs, korišten je enzim celobioza dehidrogenaza (*Mt* CDH) koji katalizira reakciju oksidacije celobioze te djeluje kao reducens iona srebra (Ag^+ u Ag^0). Ispitana je kinetika enzima kao i utjecaj iona srebra na kinetiku u acetatnom i citratnom puferu. Kinetika je u oba slučaja opisana jednosupstratnom Michealis-Menteničinom kinetikom uz kompetitivnu inhibiciju ionima srebra. Na temelju procijenjenih kinetičkih parametara zaključeno je kako je reakcija povoljnija u acetatnom puferu, s obzirom na znatno manju inhibiciju reakcije i deaktivaciju enzima ionima srebra u tom mediju. Postavljeni matematički model validiran je provođenjem reakcija sinteze Ag NPs u kotlastom reaktoru.



STABILITY OF LIPASE IN NATURAL DEEP EUTECTIC SOLVENTS

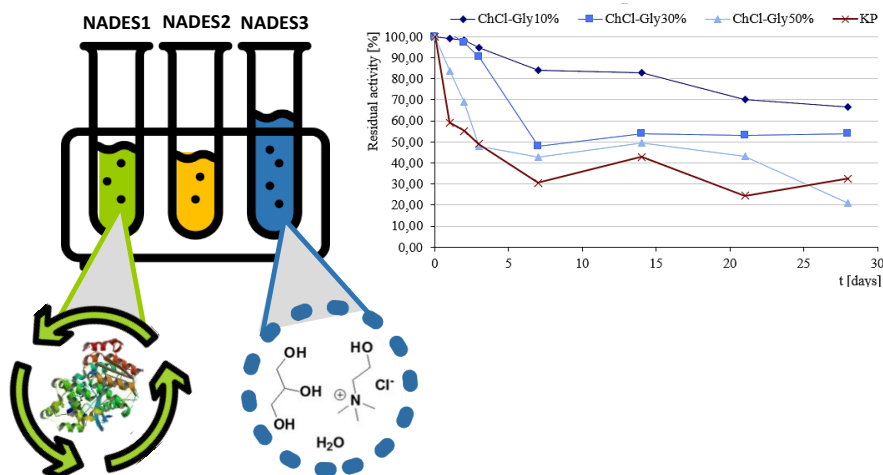
Mia Radović, Manuela Panić, Ana Jurinjak Tušek, Marina Cvjetko Bubalo, Ivana Radojčić Redovniković

Faculty of Food Technology and Biotechnology, University of Zagreb, Pierottijeva 6,
10000 Zagreb, Croatia
mradovic@pbf.hr

Current literature unquestionably implies that natural deep eutectic solvents (NADES)-mediated biocatalytic approach is an exciting new field with enormous possibilities for improving reaction efficiency and sustainability through better substrate solubility/loading, improved enzyme activity and stability. These non-toxic and non-flammable solvents are mixtures of cheap, natural, non-toxic and readily available components prepared by mixing quaternary ammonium salts and hydrogen bond donor (HBD) based on natural products in a specific molar ratio resulting homogenous solution based on hydrogen bonds between NADES components.

To assess the suitability of three NADES (choline chloride-based with ethylene glycol, glycerol and glucose as HBDs) in lipase-catalyzed hydrolytic reactions, we carried out a stability evaluation of free and immobilized *Candida antarctica* lipase B within these solvents at room temperature during the period of 28 days. Generally, both immobilized and free *Candida antarctica* lipase B showed similar stability in NADES compared to reference solvent (buffer). The only exception was found for choline chloride:glycerol where immobilized *Candida antarctica* lipase B showed much higher stability (~80%, 28 days) compared to buffer (~40%, 28 days), implying that NADES could serve as stabilizing medium for lipase.

76



USPOREDBA UTJECAJA AKTIVACIJSKIH AGENSA NA EFIKASNOST I STABILNOST ALDOLAZE IMOBILIZIRANE NA MAGNETSKE NANOČESTICE

A COMPARISON OF ACTIVATING AGENTS FOR EFFICIENCY AND STABILITY OF ALDOLASE IMMOBILIZED ON MAGNETIC NANOPARTICLES

Dino Skendrović, Tomislav Rimac, Ana Vrsalović Presečki

Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije Sveučilišta u Zagrebu,
Marulićev trg 19 HR-10000 Zagreb
dskendrov@fkit.hr

Enzyme immobilization is a promising technique for improving enzyme stability while retaining its activity. It often includes binding of an enzyme to a solid carrier, by employing covalent bonds or by adsorption. If using covalent bond, the carriers should be activated with appropriate activating agents that act as a link between carrier and enzyme.

The aim of this work was to immobilize aldolase on silica coated magnetic nanoparticles. For that purpose carrier was synthesized using solvothermal method and three different types of activating agents, glutaraldehyde, benzoquinone and 3-Glycidyloxypropyl trimethoxysilane (GPTMS), were used (Figure 1). The features of immobilized aldolase were examined in the reaction of double aldol addition for production of statin side chain precursors, a valuable pharmaceutical intermediate. Retained activity and enzyme stability of immobilized aldolase was compared with that of a free enzyme.

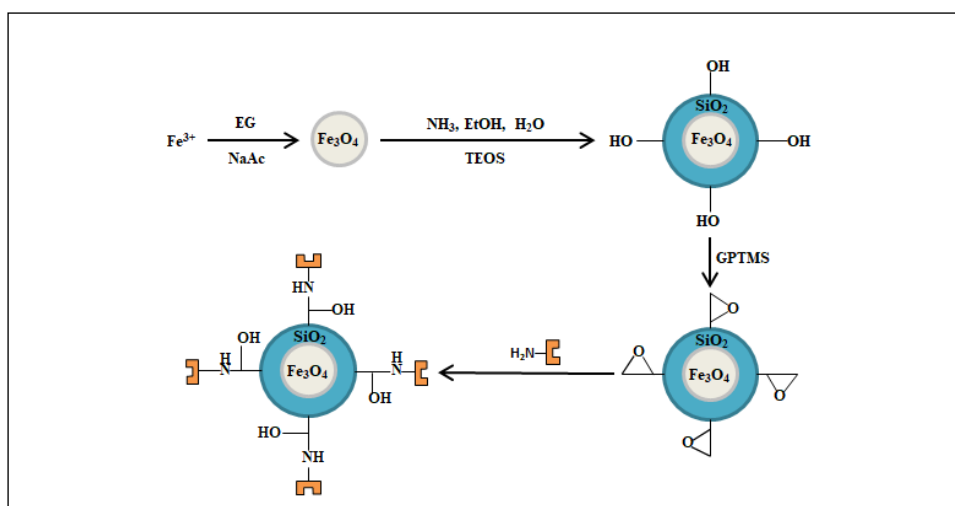


Figure 1. Synthesis, activation and immobilization of enzyme on magnetic nanoparticles using GPTMS as activating agent.

BIOACTIVITY AND BIOAVAILABILITY OF RED PEPPER WASTE ENCAPSULATED BIOACTIVE COMPOUNDS AFTER *IN VITRO* GASTROINTESTINAL DIGESTION

Manuela Sovilj, Isidora Otašević

University of Novi Sad, Faculty of Technology Novi Sad, Bul. cara Lazara 1,
21000 Novi Sad, Serbia
manuela.sovilj@gmail.com
isidora.otasevic@yahoo.com

Large amounts of wastes are generated annually by food industry, and are extensively used as animal feeds and fertilizers. Considering the fact that vegetable processing wastes contain significant amounts of valuable compounds derived from the original material, they have the potential to be reused into numerous added-value and marketable products. The pericarp of the red pepper fruit accumulates considerable amounts of phenolics and carotenoids, which contribute to a growing awareness of the valorization of numerous valuable compounds present in red pepper waste (RPW). The bioavailability and bioactivity of present bioactive compounds are limited by their stability against oxidative degradation during storage and bioaccessibility from the food matrix during gastrointestinal digestion. Encapsulation technology is an effective method for improving their stability by entrapping the core material with a coating agent. In this study, RPW extract was encapsulated in whey protein using freeze- and spray-drying techniques. The effect of *in vitro* gastrointestinal digestion on the release and bioactivity of encapsulated bioactive compounds (phenolics and carotenoids), after each digestion step was monitored. The results showed that the release of phenolics and carotenoids, as well as antioxidants, anti-hyperglycaemic, and anti-inflammatory activities are affected by pH and intestinal fluid, with 7.5 exhibited at higher levels. Spectrophotometric analysis revealed that after intestinal digestion of freeze-dried encapsulate (FDE) and spray-dried encapsulate (SDE) TPh values were 62.12% and 56.88% of the initial phenolic contents, respectively, while TCar decreased to 20.4% and 15.05% of the initial carotenoid content, respectively. Data of HPLC analysis revealed presence of three hydroxybenzoic acids (gallic, vanillic, and protocatechuic acid), two hydroxycinnamic acids (caffeic and chlorogenic acid), one flavan-3-ols (epicatechin) and three flavonols (rutin, quercetin, and myricetin). The encapsulation of RPW bioactive compounds showed a protective effect against pH changes and enzymatic activities along digestion, and thereby contributed to an increase in its bioaccessibility in the gut. Relatively high antioxidant capacity, reducing power, anti-hyperglycaemic, and anti-inflammatory activity are properties where FDE arises in terms of all investigated activities. Results show that there is a big potential for RPW encapsulates as an antioxidant in food systems, due to its high content of phenolics, carotenoids, and bioactivity. Also, the obtained results suggest encapsulation as an efficient method for valorization of bioactive compounds from RPW, with improved nutritional and color properties.

78



Ekoinženjerstvo
Environmental engineering

PHOTOREACTOR DESIGN FOR UV-LED PHOTOCATALYTIC DEGRADATION OF MICROPOLLUTANTS

Danilo Bertagna Silva¹, Sandra Babić¹, Gianluigi Buttiglieri^{2,3}

¹University of Zagreb, Faculty of Chemical Engineering and Technology

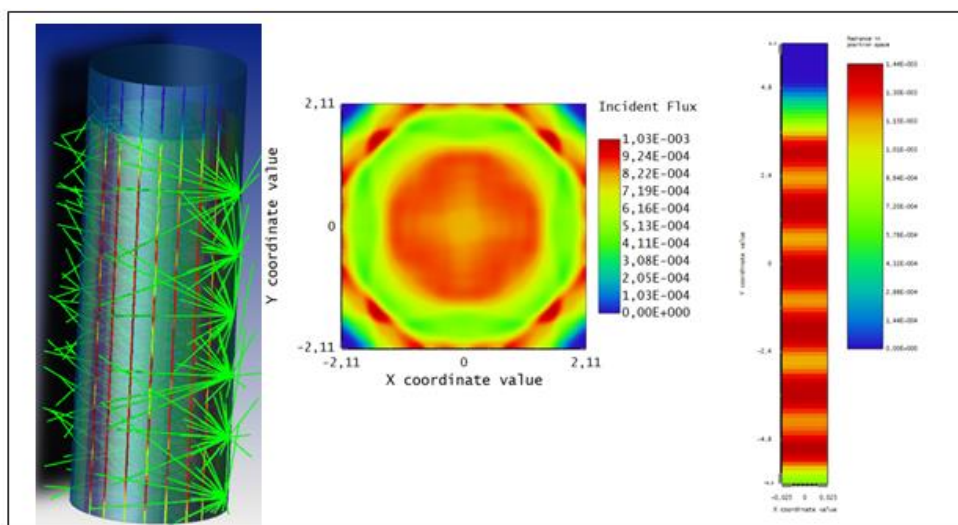
²Catalan Institute of Water Research, Girona

³University of Girona

dsilva@fkit.hr

In this work, a photoreactor using 8 different arrays of UV-LED was simulated using Zemax Opticstudio software. The design of the light sources was based on the product RealUV™ UVA-LED strip lights, provided by Waveform Lightning. The reactor tested was a quartz cylinder of known dimensions coated with a nanolayer of TiO₂ on its inner walls. The liquid inside the reactor was salt water. The LED strips were positioned in radially-symmetric distributed columns, illuminating the reactor from outside. The number of LED columns around the reactor (4 or 6), number of LEDs per column (6 or 12) and distance between the columns and the reactor (1 or 2 cm) were the parameters varied for the simulation. The light profile on the reactor's walls and inside its middle cross section was evaluated.

Results show that arrays with LEDs positioned closer to the reactor provided higher incident flux and radiance. However, a less homogenous distribution of light is observed for arrays closer to the reactor. Light homogeneity is a key parameter for an efficient photoreactor design, particularly for photocatalysis, since electron-hole recombination is enhanced in the areas with higher radiation intensities, decreasing the overall efficiency of the process. Doubling the number of LEDs on each column from 6 to 12 decreased homogeneity for all cases and did not improve the average values of radiance and incident flux per LED. Changing the number of columns around the reactor from 4 to 6 increased the light homogeneity on the reactor's walls, but decreased it on the cross section. Considering the geometry of the reactor and the position of the catalyst on its inner walls, the light intensity on the cross section is fundamental to understand the pollutant degradation which comes from photolysis, while the light intensity and homogeneity in the reactor walls affects greatly the photocatalytic degradation. The most efficient photoreactor design should combine higher values of radiance and incident flux per LED with high homogeneity on the reactor walls.



BIOREMEDIJACIJA: ZELENI PRISTUP U OBRADI NAFTOM ONEČIŠĆENOG TLA

BIOREMEDIATION: A GREEN APPROACH FOR TREATMENT OF OIL CONTAMINATED SOIL

Barbara Bertović¹, Marija Vuković Domanovac²

¹STSI – Integrirani tehnički servisi d.o.o., Lovinčićeva 4, HR-10002 Zagreb

²Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Sveučilište u Zagrebu,
Marulićev trg 19, HR-10000 Zagreb

Barbara.Bertovic@stsi.hr

Tlo je neobnovljiv resurs koji ima velik socijalno – ekonomski i ekološki značaj te nam omogućuje život na Zemlji kakav poznajemo. Ipak, na razini Europske Unije ne postoje sveobuhvatni zakonski propisi za zaštitu tla, stoga danas svjedočimo značajnoj degradaciji tla na globalnoj razini. Kao jedan od većih problema izdvaja se onečišćenje tla koje nastaje u gotovo svim granama industrije. Onečišćenje tla naftom i naftnim produktima predstavlja značajan rizik za ljudsko zdravlje i okoliš. Danas postoje brojne remedijacijske tehnologije koje se koriste za rješavanje ovoga problema. U ovom radu kao tehnologija obrade tla s naftnim ugljikovodicima primijenjena je ex-situ bioremedijacija koja se temelji na sposobnosti mikroorganizama da svojom metaboličkim procesima razgrade onečišćenje te ga koriste kao izvor energije. Provedena je rekonstrukcija dvije benzinske postaje (BP-A i BP-B). Iskopano je onečišćeno tlo koje je sadržavalo koncentracije ukupnih naftnih ugljikovodika (TPH) od 1694,60 mg/kg (BP-A) i 1159,40 mg/kg (BP-B). Postupak bioremedijacije provodio se uz dodatak komercijalnog preparata bakterijskih sojeva te uz održavanje optimalnih okolišnih uvjeta. Rezultati postupka pokazuju postizanje ciljanih graničnih vrijednosti (<200 mg/kg TPH) u periodu od 90 do 180 dana što ukazuje da je tlo obrađeno te se može ponovno racionalno iskoristiti u okolišu kao resurs.

81



ODREĐIVANJE TOKSIČNOSTI MIKROPLASTIKE S MIKROALGOM *Chlorella* sp.

DETERMINATION OF MICROPLASTICS TOXICITY WITH MICROALGAE *Chlorella* sp.

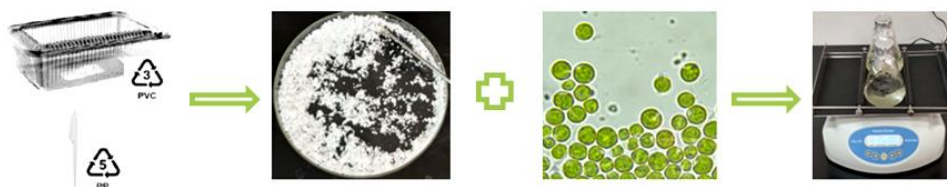
Kristina Bule¹, Martina Miloloža¹, Dajana Kučić Grgić¹, Matija Cvetnić¹,
Vesna Očelić Bulatović²

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

²Sveučilište u Zagrebu, Metalurški fakultet, Aleja narodnih heroja 3, Sisak, Hrvatska
kbule@fkit.hr

S porastom broja stanovništva te razvojem industrije dolazi do sve veće potrebe za proizvodnjom plastike i njezinom potrošnjom, a njezino neodgovorno odlaganje u okoliš postalo je problem na globalnoj razini. Mikroplastikom se smatraju sve čestice plastike manje od 5 mm, a razni su izvori mikroplastike od kojih je najvažnije izdvojiti industrije, kućanstva te sustave za obradu otpadnih voda. Mikroplastika je sveprisutna u svim sastavnicama okoliša, ali i u različitim prehrambenim proizvodima što izaziva zabrinutost zbog mogućeg štetnog utjecaja na različite ekosustave i ljudsko zdravlje. U svrhu procjene utjecaja mikroplastike na vodene organizme, provode se ekotoksikološka istraživanja. Testni organizmi su ribe, *Daphnia magna*, *Danio rerio*, ali i alge kod kojih je uočeno smanjenje sastava klorofila, smanjenje sposobnosti fotosinteze, efekt sjene, morfološke promjene, oksidativni stres te smanjenje rasta.

U ovome radu istražen je utjecaj dvije vrste mikroplastike – polivinilklorida (PVC) i poplpropilena (PP) na mikroalgu *Chlorella* sp. tijekom 4 dana. Ispitao se utjecaj veličina čestica (600-710 μm ; 300-500 μm ; <300 μm) i početne koncentracije mikroplastike (10 mg/L; 500 mg/L; 1000 mg/L) na toksičnost *Chlorella* sp.. Istraživanja su se provodila u Erlenmeyerovim tikvicama radnog volumena 100 mL na rotacijskoj tresilici pri 160 o/min i sobnoj temperaturi. Tijekom pokusa praćene su optička gustoća (OG) i broj živih stanica (CFU) algi, a u 0., 2. i 4. danu određivane su pH-vrijednost i koncentracija otopljenoga kisika. Uočen je toksični utjecaj mikroplastike na mikroalgu pri najmanjoj veličini čestica mikroplastike, <300 μm . Cilj istraživanja bio je odrediti i inhibiciju rasta alge *Chlorella* sp. tijekom izloženosti mikroplastici. Postotak inhibicije rasta alge nakon izlaganja mikropalstici iznosio je 4,28% za PVC te 5,04% za PP.



FACILE PREPARATION OF TiO₂/Fe₂O₃ LAYERED COMPOSITE FILMS FOR SOLAR-DRIVEN PHOTOCATALYTIC DEGRADATION OF PHARMACEUTICALS

Francis M. dela Rosa¹, Josipa Papac¹, Antonija Tomić¹, Marin Kovačić¹,
Marijana Kraljić Roković¹, Hrvoje Kušić¹, Urška Lavrenčić Štanger²,
Ana Lončarić Božić¹

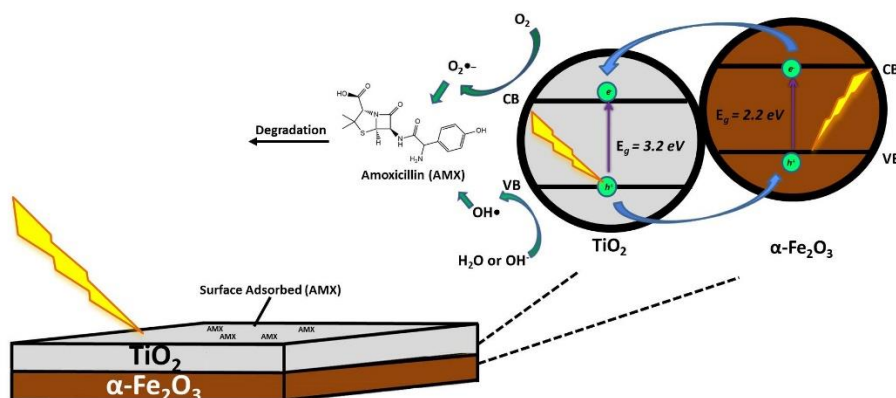
¹ Faculty of Chemical Engineering and Technology, University of Zagreb, Marulicev trg
19, HR-10000 Zagreb, Croatia

² Faculty of Chemistry and Chemical Technology, University of Ljubljana, 1000, Ljubljana,
Slovenia

frosa@fkit.hr

hkusic@fkit.hr

Amoxicillin (AMX) and ciprofloxacin (CIP) were widely used in human and veterinary medicine. In recent years, AMX and CIP were detected in drinking water samples and wastewater effluents in European communities. This occurrence of trace amounts of antibiotics (i.e. AMX, CIP) in various bodies of water may promote imbalance in the ecosystem and leads to further development of antibiotic resistant pathogens. Thus, alarming government decision bodies to include AMX and CIP in the second EU “watch list” of European Decision (2018/840/EU). One of the promising solutions to remove these substances is the application of advanced oxidation technologies, e.g. sustainable solar-assisted TiO₂-based photocatalysis. In this study, commercial grade TiO₂ (P25 Aeroxide), and α -Fe₂O₃ (hematite) were utilized to prepare two layered photocatalytic films on a glass substrate via spin coating technique. Configurations of the layered films are as follows: pure TiO₂, pure α -Fe₂O₃, TiO₂ layers covering α -Fe₂O₃, α -Fe₂O₃ layer over TiO₂ and physically mixed 50% (w/w) of TiO₂/Fe₂O₃ composite. All of the photocatalytic films were characterized for their surface and semiconducting properties to get insight into their photoactivity under solar irradiation. The hypothesis is that photocatalytic layered films would be more efficient for photocatalytic degradation of AMX and CIP in natural pH under solar irradiation compared to benchmark TiO₂-P25.



UKLANJANJE MIKROPLASTIKE NAPREDNIM OKSIDACIJSKIM PROCESIMA

MICROPLASTICS REMOVAL BY ADVANCED OXIDATION PROCESSES

Dorian Delić, Hana Duhaček, Stella Hamilton, Matija Cvetnić, Dajana Kučić Grgić, Viktorija Prevarić, Marija Sigurnjak, Šime Ukić, Marinko Markić, Tomislav Bolanča

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

Mikroplastika predstavlja onečišćenje u obliku sitnih plastičnih čestica manjih od 5 mm, a nastaje iz dva izvora: A) izravna proizvodnja i B) fragmentacija većih plastičnih ostataka uslijed razgradnje. S obzirom da se na postrojenjima za pročišćavanje otpadnih voda ne uklanjaju čestice mikroplastike i oni se smatraju potencijalnim izvorom mikroplastike u vodenom okruženju. S obzirom na to potrebno je naći novi i inovativni pristup za uklanjanje čestica mikroplastike iz pitke i otpadne vode. Također, jedan od izazova je analiza i detekcija mikroplastike. Ona se detektirala vizualno tako što su se identificirale moguće plastične čestice mikroskopom nakon čega je uslijedila potvrda analizama kemijskog sastava. Napredni oksidacijski procesi (AOP) pokazali su se efikasnim u uklanjanju organskih onečišćivala. Ključna prednost AOP-a je u tome što se stvaraju in-situ radikalske vrste koje reagiraju s organskim onečišćujućim tvarima i na kraju ih mineraliziraju u krajnje proizvode, CO₂ i H₂O, uz smanjenje toksičnosti i povećanje biorazgradivosti obrađene vode, dok je nedostatak vrlo složena optimizacija samoga procesa i ekonomska prihvatljivost s obzirom na utrošak kemikalija.

Ovo istraživanje financirano je sredstvima Hrvatske zaklade za znanost kroz projekt pod nazivom Napredne tehnologije pročišćavanja vode za uklanjanje mikroplastike (AdWaTMiR, IP-2019-04).



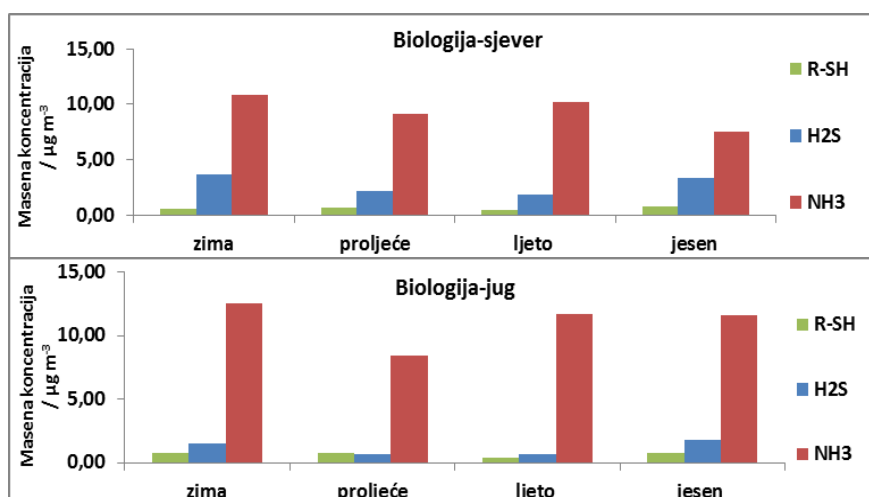
RAZINE VODIKOVOG SULFIDA, AMONIJAKA I MERKAPTANA U ZRAKU NA PODRUČJU CUPOVZ-a

LEVELS OF HYDROGEN SULPHIDE, AMMONIA AND MERCAPTANS IN THE AIR OF CUPOVZ AREA

Valentina Gluščić, Martina Šilović Hujić, Ivan Bešlić, Silvije Davila, Gordana Pehnc

Institut za medicinska istraživanja i medicinu rada, Ksaverska c.2, 10 000 Zagreb
vgluscic@imi.hr

Na području Centralnog uređaja za pročišćavanje otpadnih voda grada Zagreba (CUPOVZ) provode se od 2004. godine ciljana mjerenja imisijskih koncentracija vodikovog sulfida (H_2S), amonijaka (NH_3) i ukupnih merkaptana (R-SH), koji svojim neugodnim mirisom mogu utjecati na kvalitetu življenja (dodijavanje mirisom). U ovom radu prikazani su rezultati mjerenja provedenih tijekom 2017. godine na dvije mjerne postaje: Biologija-sjever i Biologija-jug, a koje su obje smještene u krugu CUPOVZ-a te su klasificirane kao industrijske u odnosu na izvor emisija. 24-satni uzorci H_2S , NH_3 , i R-SH sakupljeni su po mjesec dana u svakom godišnjem dobu. Na promatranom području mjereni su i meteorološki parametri; temperatura, relativna vlažnost i tlak. U promatranom razdoblju mjerenja na mjernoj postaji Biologija-sjever dnevne koncentracije H_2S kretale su se u rasponu od 0,58 do 11,06 $\mu g m^{-3}$, NH_3 od 0,66 do 39,74 $\mu g m^{-3}$ i R-SH od 0 do 2,76 $\mu g m^{-3}$. Na mjernoj postaji Biologija-jug dnevne koncentracije H_2S kretale su se u rasponu od 0,12 do 8,70 $\mu g m^{-3}$, NH_3 od 3,71 do 52,32 $\mu g m^{-3}$ i R-SH od 0 do 3,88 $\mu g m^{-3}$. Koncentracije H_2S , NH_3 , i R-SH na obje mjerne postaje pokazuju statistički značajnu sezonsku ovisnost ($p < 0,05$). U promatranom razdoblju koncentracije H_2S i R-SH na obje mjerne postaje povremeno su prekoračivale granične vrijednosti (GV) propisane Uredbom o razinama onečišćujućih tvari u zraku (NN 117/2012, NN 84/2017) za 24-satni prosjek. Koncentracije NH_3 na obje mjerne postaje, u svim godišnjim dobima bile su niske i nisu prelazile propisanu GV.



MONITORING EMISIJA POLUTANATA NA PODRUČJU GRADA TUZLE

MONITORING OF POLLUTANTS EMISSIONS IN THE TUZLA CITY

Emir Hodžić¹, Elma Alić², Emir Horozić¹

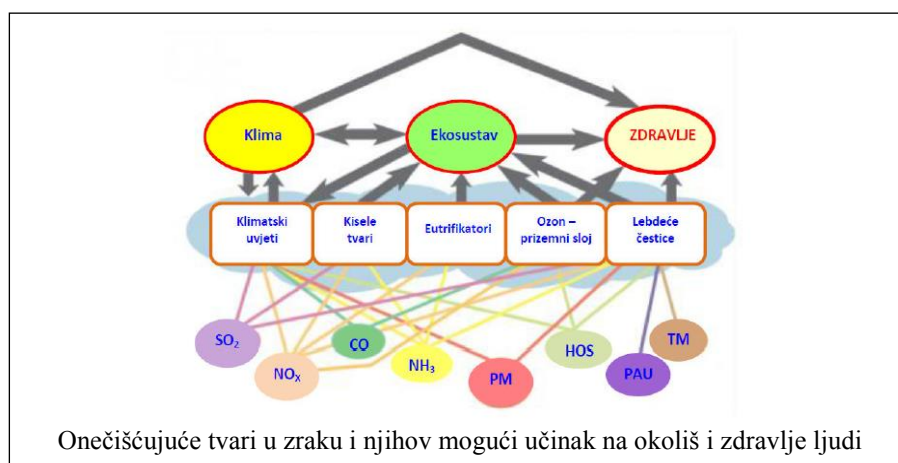
¹Tehnološki fakultet, Univerzitet u Tuzli, Univerzitetska 8., 75000 Tuzla, BiH

²Medicinski fakultet, Univerzitet u Tuzli, Univerzitetska 1., 75000 Tuzla, BiH

hemir49@yahoo.com

Onečišćenje zraka se sve više smatra značajnim rizikom po zdravlje stanovništva. Uslijed rada industrija, individualnih ložišta i velike koncentracije saobraćaja, na području grada Tuzla je već duži vremenski period prisutan problem onečišćenja zraka. Tvari koje onečišćuju okoliš nanose veliku štetu ljudima i drugim živim bićima, a onečišćenje zbog sagorijevanja fosilnih goriva je na vodećem mjestu crne ljestvice prijetnji po zdravlje. Naše zdravlje je u izravnoj vezi sa zdravljem okoliša, s obzirom da onečišćenost okoliša može biti uzrok niza bolesti (astme, alergija, raznih oblika raka, bolesti srca i krvožilnog sustava, problema s plodnošću, neuroloških problema). U ovom radu prikazani su rezultati monitoringa emisije polutanata u vremenskom periodu od 1.1.2019. do 31.12.2019. godine i štetan utjecaj onečišćenog zraka na ljudski organizam. Vršen je monitoring zraka za polutante: sumpor dioksid (SO₂), dušikov dioksid (NO₂), ugljikov monoksid (CO), ozon (O₃) i lebdeće čestice PM_{2,5}, na tri lokacije u Tuzli: Skver, Bosanski kulturni centar i Bukinje. Rezultati pokazuju da je tokom sezone grijanja odnosno zimskih mjeseci kvaliteta zraka u urbanom području grada Tuzle onečišćena. Najveća koncentracija sumpor dioksida je zabilježena u prosincu na mjernoj stanici Bukinje i iznosila je 271,7 µg/m³. U istom mjesecu, na mjernoj stanici Skver zabilježena je koncentracija lebdećih čestica PM_{2,5} od 153,2 µg/m³. Na osnovu dobivenih rezultata dolazi se do zaključka da je potrebno hitno uspostaviti sistem upravljanja kvalitetom zraka u Tuzlanskom kantonu i razraditi mjere zaštite zraka od onečišćenja.

86



SASTAV MIKROBNE ZAJEDNICE U POSTROJENJU ZA PROČIŠĆAVANJE KOMUNALNE OTPADNE VODA

COMPOSITION OF MICROBIAL COMMUNITIES IN MUNICIPAL WASTEWATER TREATMENT PLANT

Sanja Ivanušić¹, Marin Ganjto², Monika Šabić Runjavec¹,
Marija Vuković Domanovac¹

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

²Zagrebačke otpadne vode – upravljanje i pogon d.o.o., Čulinečka cesta 287, HR-10000
Zagreb

sivanusic@fkit.hr

Čista voda je vrijedan prirodni resurs, temeljni uvjet za život i stoga je važno s njom pravilno gospodariti. Unaprjeđenje kvalitete života utječe na povećanje složenosti sastava komunalnih otpadnih voda čijim se pročišćavanjem osigurava zaštita površinskih i podzemnih voda te sprječava negativan utjecaj na zdravlje ljudi i okoliš. U svijetu se za pročišćavanje komunalnih otpadnih voda najčešće koristi proces s aktivnim muljem koji se svrstava u skupinu bioloških aerobnih postupaka pročišćavanja. Razumijevanje raznolikosti mikrobne zajednice u aktivnom mulju ključno je za kontrolu procesa pročišćavanja. U ovom radu provedena je analiza aktivnog mulja iz Centralnog uređaja za pročišćavanje otpadnih voda grada Zagreba (CUPOVZ). Rezultati prikazuju najčešće prisutne više mikroorganizme u aktivnom mulju i učinkovitost biološkog pročišćavanja otpadne vode.



USPOREDBA MASENIH KONCENTRACIJA PAU U PRIOBALNOM PODRUČJU SREDNJEG JADRANA I SREDIŠNJOJ HRVATSKOJ

COMPARISON OF MASS CONCENTRATIONS OF PAHs IN COASTAL AREA OF THE MIDDLE ADRIATIC AND MIDDLE CROATIA

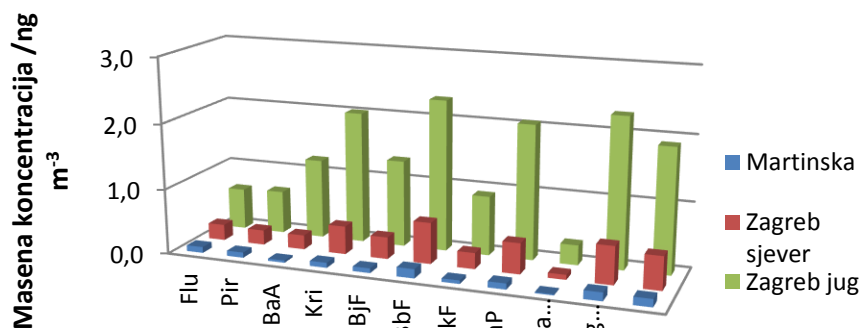
Ivana Jakovljević¹, Zdravka Sever Štrukil¹, Gordana Pehneć¹, Ivan Bešlić¹,
Andrea Milinković², Saranda Bakija Alempijević², Sanja Frka²

¹Institut za medicinska istraživanja i medicinu rada, Ksaverska cesta 2, Zagreb

²Zavod za istraživanje mora i okoliša, Institut Ruđer Bošković, Bijenička c. 54, Zagreb
ijakovljevic@imi.hr

Policiklički aromatski ugljikovodici (PAU) nastaju za vrijeme industrijskih procesa uslijed nepotpunog sagorijevanja organskih tvari te kao posljedica prirodnih procesa (npr. šumskih požara), a također su sastavni dijelovi ispušnih plinova motornih vozila. Oni se zbog rasprostranjenosti, postojanosti, bioakumulacije, i štetnih utjecaja na zdravlje ljudi te biljnog i životinjskog svijeta smatraju prioritetnim zagađivalima. Cilj ovog istraživanja je po prvi puta napraviti usporedbu masenih koncentracija PAU lebdećih čestica u zraku priobalnog područja srednjeg Jadrana i urbanog područja središnje Hrvatske. Sakupljanje dvodnevni uzoraka lebdećih čestica provodilo se u razdoblju od veljače do srpnja 2019. godine na mjernoj postaji Martinska (Šibenik), te jednodnevni uzoraka na sjeveru i jugu grada Zagreba. Analiza policikličkih aromatskih ugljikovodika (PAU) provedena je kromatografijom visoke djelotvornosti (HPLC) s fluorescentnim detektorom promjenjivih valnih duljina ekscitacije i emisije. Određivani su fluoranten (Flu), piren (Pir), benzo(a)antracen (BaA), krizen (Kri), benzo(j)fluoranten (BjF), benzo(b)fluoranten (BbF), benzo(k)fluoranten (BkF), benzo(a)piren (BaP), benzo(ghi)perilen (BghiP), indeno(1,2,3-cd)piren (IP). Kroz čitavo razdoblje mjerenja zabilježene su relativno niske vrijednosti masenih koncentracija PAU u priobalnom području, dok su u središnjoj Hrvatskoj zabilježene više vrijednosti. Najniže vrijednosti za sva tri mjerna mjesta zabilježene su za DahA (0,016 ng m⁻³, 0,075 ng m⁻³, 0,306 ng m⁻³ za postaju Martinska, Zagreb sjever, Zagreb jug) dok je u najvišim koncentracijama izmjeren BbF (0,140 ng m⁻³, 0,632 ng m⁻³, 2,319 ng m⁻³ za postaju Martinska, Zagreb sjever, Zagreb jug).

(Ovaj je rad sufinancirala Hrvatska zaklada za znanost projektom IP-2018-01-3105 (BiREADI)).



UKLANJANJE BOJE IZ TEKSTILNE OTPADNE VODE ULTRAFILTRACIJSKIM MEMBRANAMA

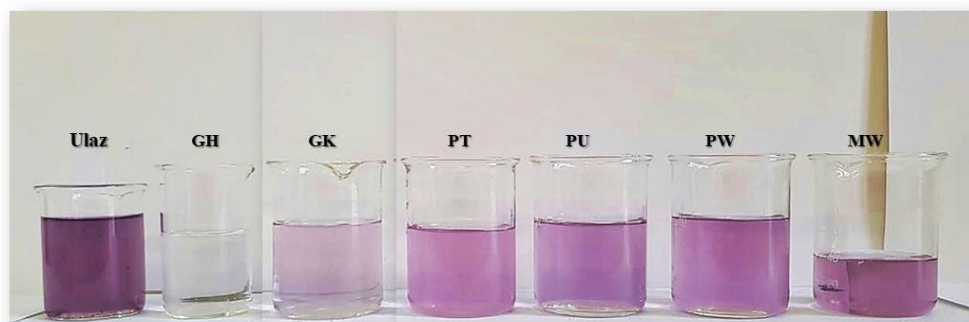
COLOUR REMOVAL FROM TEXTILE WASTEWATER BY ULTRAFILTRATION MEMBRANES

Klara Karadakić¹, Iva Ćurić², Davor Dolar¹

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

² Galeb dalmatinska trikotaža d.d., Punta 6, Omiš
k.karadacic@gmail.com

Tekstilna industrija u prerađivačkom sektoru, smatra se jednom od najvećih potrošača i zagađivača vode. Sastav i količina otpadnih voda tekstilne industrije ovisi o vrsti korištene sirovine i načinu obrade. U otpadnoj vodi može biti sadržana velika količina bojila koja nastaje postupkom bojadisanja tekstilnog materijala što uzrokuje obojenost vode. Bojila su karakterizirana s visokom stabilnošću i otpornošću na djelovanje svjetlosti, promjenu temperature kao i na djelovanje detergenata i drugih kemikalija. Navedeno ukazuje da je uklanjanje bojila iz tekstilne otpadne vode glavni problem zbog negativnog utjecaja na okoliš i ljudsko zdravlje. U ovom radu otpadna voda tekstilne industrije Galeb d.d. obrađena je sa 6 komercijalnih (GH, GK, PT, PU, PW, MW) ultrafiltracijskih (UF) membrana u obliku ravnih plahti s ciljem uklanjanja boje i intenziteta obojenja u trajanju od 3 h. UF membrane razlikovale su se u graničnoj molekularnoj masi (MWCO) koja je bila od 2 kDa do 50 kDa. S porastom MWCO vrijednosti tlak se kretao od 1,5 bar do 10 bar. Spektrofotometrijski su dobiveni podaci za uklanjanje boje i intenziteta boje. Najveće uklanjanje boje od 93,23-97,29 % dobiveno je GH membranom (2 kDa) dok je s MW membranom (50 kDa) dobiveno najmanje uklanjanje od 61,53-64,98 %. Intenzitet uklanjanja boje pokazuje sličnu situaciju s GH membranom od visokih 97,74-99,39 % dok se s MW membranom postiže 63,68-68,73 %. Smanjenjem MWCO membrana dolazi do povećanja uklanjanja boje kao i intenziteta boje u permeatima kroz 3 h tretmana.



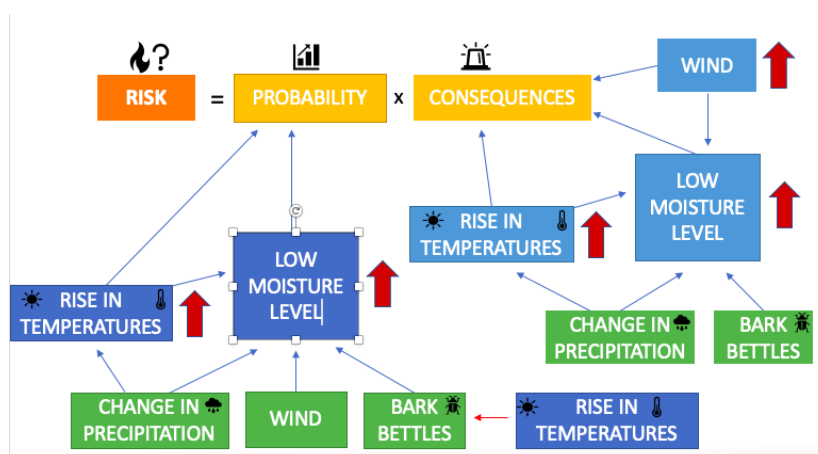
THE IMPACT OF CLIMATE CHANGE ON FOREST FIRE RISK

Peter Kočman, Simon Schnabl

University of Ljubljana, Faculty of Chemistry and Chemical Technology, Večna pot 113,
SI-1000 Ljubljana, Slovenia
kocman.peter96@gmail.com

The presented work is the result of collecting statistical data obtained by industrially independent organizations in the field of climate change and forest fires. The main motivation was the desire to provide objective description of the situation in this field, where many climate studies strongly oppose the interpretation of the measured/obtained data. The content of the work describes the mechanisms of combustion, spread of fire and the effects of climate change on various aspects of forests as ecosystems, which are important for the forest fire safety. The main topics of the discussion are the effects of elevated temperatures, movement of climatic zones, prolongation of drought periods, migration of insects, extreme weather events, economic damage, ecological damage, who is threatened and forecasts based on changing trends. By studying the trends, the goal was to primarily find out if the atmosphere is changing in Slovenia as well as in the vicinity, how it changes, what the consequences might be in the coming years, do we take sufficient preventive measures and are we able to carry out effective measures in case of the unwanted event. Forest fire is a form of uncontrolled spread of fire across the forest surface. The burning process is primarily driven by wind and low fuel humidity. The dependence of the entire process of forest fire is easily described by three interdependent factors: weather, fuel and topography. Of the three, the state of weather and fuel, are constantly present variables that have the greatest influence on the degree of risk for the occurrence of a fire, and at the same time dictate its intensity and rate of spread. In the wild, forest fires are unwanted events that threaten wildlife, environmental infrastructure and consequently also human beings. The result of a forest fire is most often a large burned area and at the same time enormous financial damage.

90



Slika 1. Kočman Peter, Simon Schnabl. Vpliv klimatskih sprememb na požarno varnost gozdov. Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Ljubljana, 2019.

ISPITIVANJE EKOTOKSIČNOSTI MIKROPLASTIKE

DETERMINATION OF ECOTOXICITY OF MICROPLASTICS

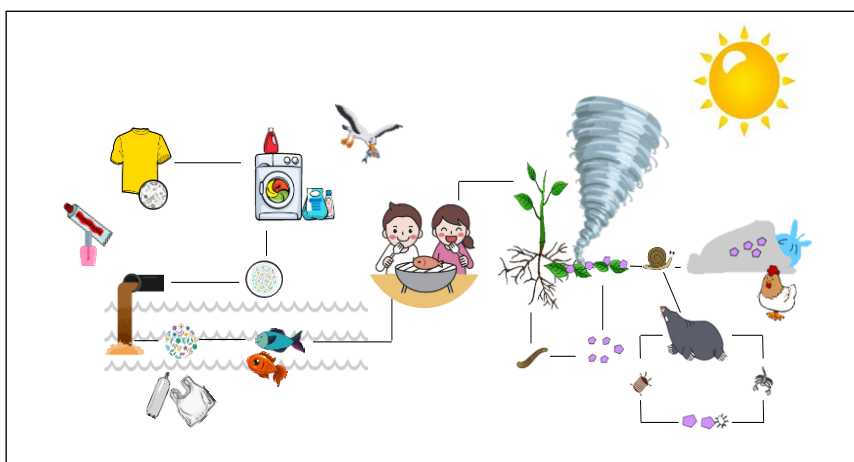
Antonija Kovačević¹, Ema Lovrinčić¹, Martina Miloloža¹, Vesna Očelić Bulatović², Dajana Kučić Grgić¹

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

²Metalurški fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Aleja narodnih heroja 3, 44103 Sisak, Hrvatska
akovacevi@fkit.hr

Mikroplastikom se smatraju sve čestice plastike manje od 5 milimetara. Mikroplastika dospijeva u sve dijelove ekosustava na razne načine. Najveći problem su otpadne vode, odnosno aktivni mulj koji se primjenjuje u uređajima za biološku obradu otpadnih voda koje sadrže mikroplastiku. Nakon obrade, otpadne vode se ispuštaju u prirodni recipijent, a višak aktivnog mulja se često odlaže na tlo. Tim putem mikroplastika dospijeva u tlo, a u konačnici i u vode. Ispitivanja toksičnosti mikroplastike važna su zbog njezinog utjecaja na organizme. Prema do sada provedenim istraživanjima, dokazan je štetan utjecaj na mikroalge, slatkovodne organizme te ribe.

U ovom radu ispitivala se ekotoksičnost mikroplastike, polistirena i polietilena, veličina 300 – 500 μm i 500 – 100 μm u koncentracijama od 50, 100, 250, 500 i 1000 mg/L na bakteriju *Pseudomonas putida* prema ISO 10712:1995. Tijekom ispitivanja pratila se optička gustoća, broj izraslih stanica u mL (st/mL), pH-vrijednost, koncentracija kisika i temperatura. Dobiveni rezultati ukazali su na inhibicijsko djelovanje mikroplastike na rast bakterije *Pseudomonas putida*.



PROČIŠĆAVANJE ZRAKA SOLARNOM FOTOKATALIZOM - RAZGRADNJA AMONIJAKA I METANA

SOLAR PHOTOCATALYSIS FOR AIR PURIFICATION - AMMONIA AND METHANE DEGRADATION

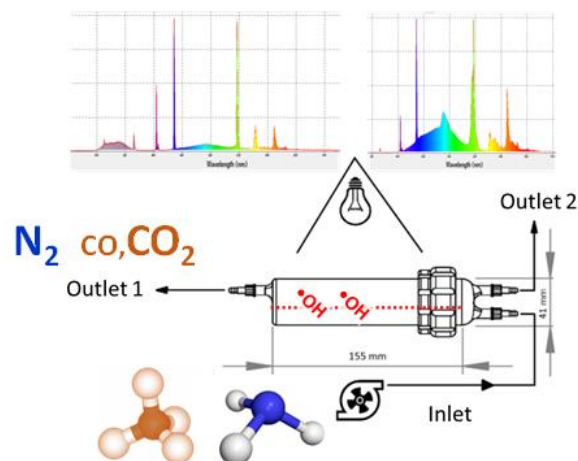
Jan Marčec¹, Mateo Topić¹, Petar Markužić¹, Ana-Maria Radovan¹, Lucija Radetić¹, Igor Jajčinović², Ivan Brnardić², Ivana Grčić¹

¹Sveučilište u Zagrebu, Geotehnički fakultet, Hallerova aleja 7, 42000 Varaždin

²Sveučilište u Zagrebu, Metalurški fakultet, Ulica narodnih heroja 3, 44000 Sisak

jan.marceec@gfv.unizg.hr

Porast stanovništva utječe i razvoj sve intenzivnije poljoprivrede i uzokuje povećane emisije amonijaka (NH_3) i metana (CH_4), stvarajući potrebu za rješenjima pasivne zaštite kvalitete zraka iznad navedenih kolektivnih izvora emisija. Jedno od mogućih rješenja je solarna fotokataliza – napredni oksidacijski proces koji uslijed sinergijske interakcije energije zračenja, fotokatalizatora - poluvodiča u prisustvu vlage dovode do redoks-reakcija na površini katalizatora i razgradnje oksidacije onečišćivala u zraku do vodene pare, ugljikovog dioksida i ostalih inertnih produkata, ovisno o kemijskom sastavu onečišćivala. Zbog svoje učinkovitosti pročišćavanja, minimalnog utjecaja na okoliš i ekonomske isplativosti solarna fotokataliza predstavlja alternativno rješenje postojećim metodama te je kao takva uvrštena u popis najbolje raspoloživih tehnika (NRT). Kako bi se potvrdila mogućnost primjene fotokatalitičke oksidacije za uklanjanje ciljanih onečišćivala, provedeni su eksperimenti u posebno dizajniranim reakcijskim sustavima – tzv. fotokatalitičkim zračnim tunelima, na manjoj skali – MPWT (eng. *mini photocatalytic wind tunnel*) za razgradnju NH_3 i većoj skali – PWT (eng. *photocatalytic wind tunnel*) za razgradnju NH_3 i CH_4 . Unutar reakcijskog prostora postavljene su mreže od staklenih vlakana premazane fotokatalitičkim filmom na bazi titan dioksida (TiO_2), koje su direktno izložene simuliranom sunčevom zračenju. Kao izvor zračenja korištene su svjetiljke punog spektra s niskim i pojačanim UVB dijelom, s najvišim izmjerenim intenzitetima UVA i UVB zračenja od $1,35 \text{ mW cm}^{-2}$ i $2,45 \text{ mW cm}^{-2}$ na površini fotokatalizatora. Rezultati ukazuju na smanjenje koncentracije NH_3 i CH_4 u struji zraka uslijed oksidacije NH_3 u N_2 ($X = 70\%$) i CH_4 u CO ($X < 5\%$) odnosno CO_2 ($X = 40\%$). Sustavi su nadograđeni s jednostavnom mjerom platformom na bazi Arduina za kontinuirano praćenje porasta i smanjenja udjela onečišćivala u zraku.



FITOEKSTRAKCIJA I FITOSTABILIZACIJA TEŠKIH METALA

PHYTOEXTRACTION AND PHYTOSTABILIZATION OF HEAVY METALS

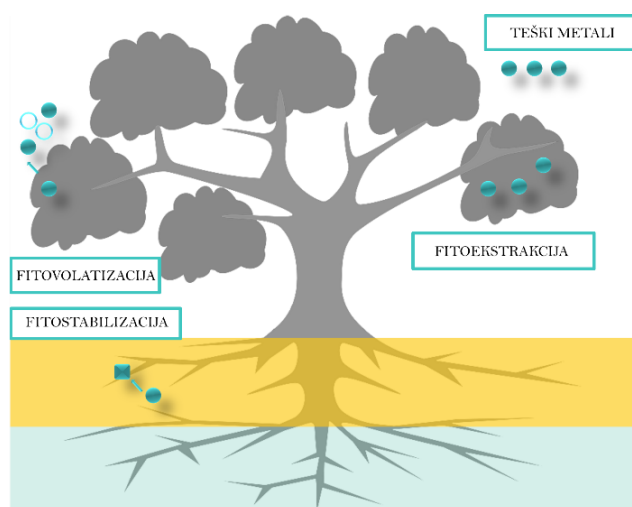
Nevena Milčić, Zvezdana Findrik Blažević, Marija Vuković Domanovac

Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije Sveučilišta u Zagrebu,
Marulićev trg 19, HR-10000 Zagreb
nmilcic@fkit.hr

Teški metali (TM) narušavaju kvalitetu atmosfere, vodnih tijela i tala te predstavljaju najtrajnije i najsloženije vrste onečišćujućih tvari kada je u pitanju remedijacija u prirodi. Nisu podložni metaboličkoj razgradnji stoga postoji rizik od biomagnifikacije, odnosno bioakumulacije u tkivima članova hranidbenog lanca proporcionalno trofičkim razinama, čime su organizmi na vrhu najugroženiji. Pojam fitoremedijacije odnosi se na skup postupaka koji upotrebljavaju biljke i okolišne mikroorganizme prisutne u zoni korijenja za nedestruktivnu remedijaciju tala (slika 1).

Fitoekstrakcija predstavlja unos TM korijenskim sustavom, prijenos u vaskularna tkiva te akumulaciju u biljnim izbojcima nadzemne biomase za žetvu. Fitostabilizacija predstavlja postavljanje biljnog pokrova na onečišćenom tlu s ciljem ograničavanja migracije i biorasploživosti onečišćujućih tvari akumuliranjem unutar korijenja ili imobilizacijom u rizosferi. Općenito, učinkovitost fitoremedijacije ovisi o odabranoj biljnoj vrsti i značajkama tla, karakteristikama onečišćujućih tvari, zoni korijenja i okolišnim uvjetima te dodacima za poboljšanje procesa. Budućnost fitoremedijacije leži u boljem poznavanju genetičkih značajki i temeljnih biokemijskih procesa biljnih stanica te u manipulaciji istih u svrhu poboljšanja procesa. Kako bi fitoremedijacija postala pouzdana tehnologija za širok spektar primjena u većem mjerilu, potrebno je ulagati resurse u nova istraživanja s ciljem boljeg razumijevanja procesa u cjelini, a posebice na genetičkoj i biokemijskoj razini.

Autori zahvaljuju Hrvatskoj zakladi za znanost za financiranje stipendije za doktorat Nevene Milčić.



Slika 1. Mehanizmi fitoremedijacije teških metala

MEĐULABORATORIJSKO USPOREDBENO MJERENJE KONCENTRACIJE O₂, CO, NO I SO₂ U OTPADNOM PLINU

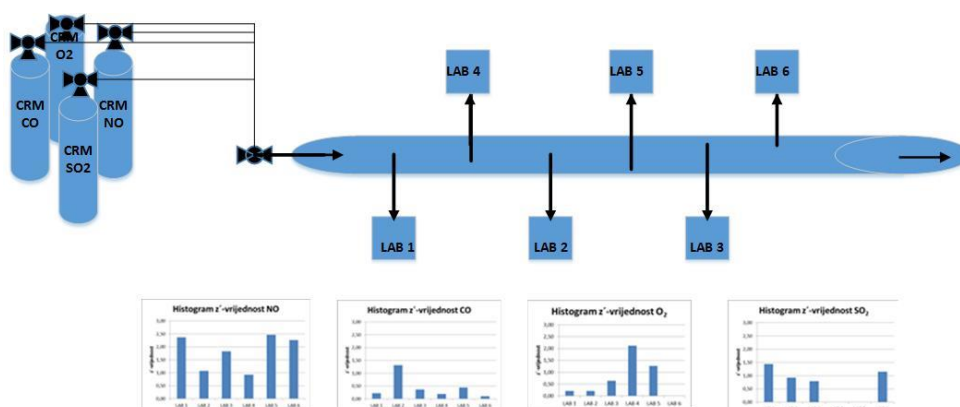
INTER-LABORATORY COMPARISON MEASUREMENT OF CONCENTRATIONS OF O₂, CO, NO AND SO₂ IN WASTE GASES

Hrvoje Nikl¹, Matija Cvetnić², Tomislav Bolanča², Marko Rogošić²

¹Cerium d.o.o., Zagreb, Lašćinska cesta 143

²Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije Sveučilišta u Zagrebu, Marulićev trg 19
hrvoje.nikl@cerium.hr

Dio redovitoga postupka akreditacije ispitnih i umjernih laboratorija je i međulaboratorijska usporedba (MU) koja, između ostaloga, zahtijeva i određivanje sustavne pogreške laboratorija (engl. *laboratory bias*) koji se najčešće određuje pomoću tzv. referentnih materijala ili uzoraka poznate vrijednosti mjenenoga svojstva. U radu je opisano međulaboratorijsko usporedbeno mjerenje za ispitne laboratorije koji se bave periodičnim mjerenjima emisije onečišćujućih tvari u zrak iz nepokretnih izvora. Mjerenju je pristupilo šest ispitnih laboratorija s metodama koje uključuju određivanje koncentracija plinova sukladno važećim normama. Pri usporedbenom mjerenju primijenjeni su certificirani referentni plinovi i njihove smjese, a određivane su koncentracije O₂, CO, NO i SO₂. Prije usporedbenoga mjerenja homogenost referentnog uzorka dokazana je provedbom niza mjerenja i statističkom analizom rezultata. Tijekom usporedbenoga mjerenja ispitni laboratoriji uzorkovali su plinske smjese u točno određenom vremenskom intervalu, nakon čega su obradili vlastite rezultate i iskazali ih u obliku srednje vrijednosti kojoj je pridružena mjerna nesigurnost svakog laboratorija zasebno. Standardna devijacija međulaboratorijske usporedbe određena je na temelju zahtjeva već spomenutih normi i iznosi 1.67 % od referentne (zadane) vrijednosti koncentracije ($3\sigma_{\text{mlab}} = 5\%$). Budući da je mjerna nesigurnost referentne vrijednosti koncentracije plina bila veća od 30 % vrijednosti standardne devijacije MU, kao kriterij uspješnosti koristila se tzv. z' -vrijednost, što znači da je mjerna nesigurnost referentnog plina uključena u izračun odstupanja od točne vrijednosti. Rezultate MU pojedini laboratoriji mogu koristiti u određivanju vlastite mjerne nesigurnosti, kako samih metoda, tako i rezultata mjerenja.



PHOTOCATALYTIC DEGRADATION OF OXYTETRACYCLINE IN WATER BY N-TiO₂ PHOTOCATALYST UNDER VISIBLE IRRADIATION

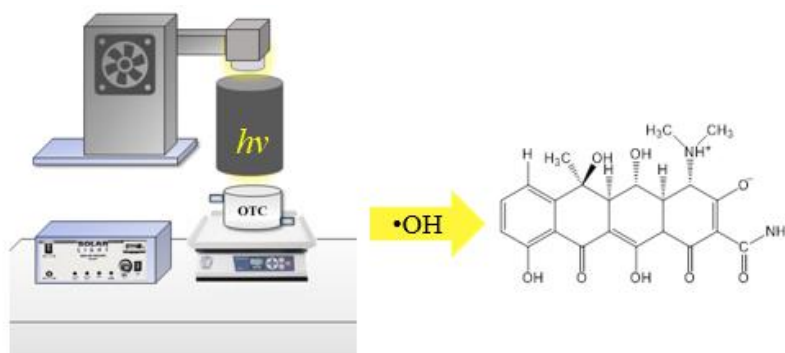
Josipa Papac¹, Marin Kovačić¹, Katarina Kljajić¹, Dorotea Piškorić¹, Boštjan Žener², Urška Lavrenčić Štangar², Hrvoje Kušić¹, Ana Lončarić Božić¹

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

²Fakultet za kemijo in kemijsko tehnologijo, Univerza v Ljubljani, Večna pot 113, 1000 Ljubljana, Slovenija
jpapac@fkit.hr

Oxytetracycline (OTC), a wide spectrum antibiotic, is a pharmaceutical of emerging concern (CEC) in the environment. The appearance of OTC, due to incomplete removal in municipal wastewater treatment plants, has led to antibiotic-resistant bacteria in environment. Advanced oxidation processes, especially photocatalysis, are perspective solutions for the removal of pharmaceuticals from wastewaters. However, from an economic and ecological point of view, it is important to develop photocatalysts that can utilize visible radiation of the solar spectrum. In this work photocatalytic activity of nitrogen doped titania (N-TiO₂), as well as reference photocatalyst Aeroxide P25 (TiO₂-P25) were investigated for the degradation of OTC in water. In the present work, N-TiO₂ was prepared by a sol-gel synthesis and powder samples were characterized with X-Ray diffraction (XRD), specific surface area (BET) as well as with scanning electron microscopy (SEM). In the research, N-TiO₂ has shown higher adsorption capacity under lower pH values. With the addition of hydrogen peroxide at pH 4, the photocatalytic activity of N-TiO₂ has improved remarkably. The investigation of the effects of radical scavengers has revealed an improvement of photocatalytic activity in the presence of iodide, an electron scavenger. The photocatalytic activity of N-TiO₂ was not affected significantly by model inorganic and organic matrices, while the complex inorganic and organic matrices have shown a synergistic effect towards removal efficiency. During the investigated duration of photocatalytic treatment, the treated wastewater could be characterized as toxic towards bacteria *Vibrio fischeri* and partially biodegradable, indicating the necessity to extend photocatalytic treatment time.

95



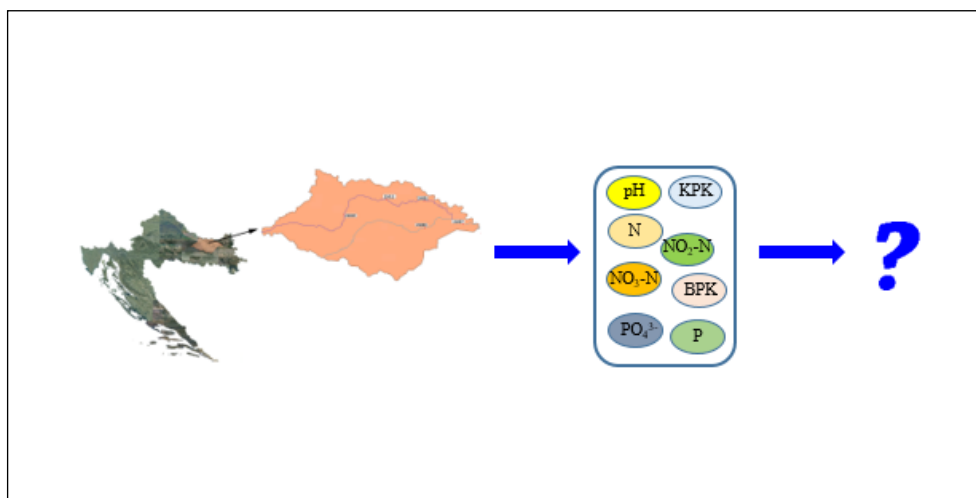
ISTRAŽIVANJE KVALITETE POVRŠINSKE VODE SLIVA KARAŠICE-VUČICE

ASSESSMENT OF SURFACE WATER QUALITY OF VUČICA-KARAŠICA RIVER

Petra Penić, Karolina Kolarić, Ana Amić

Odjel za kemiju, Sveučilište u Osijeku, Ulica cara Hadrijana8/A, 31000 Osijek
petra.penic@gmail.com

U radu je ispitana kvaliteta površinske vode sliva rijeka Karašice i Vučice, koji se nalazi u području s intenzivnom poljoprivrednom proizvodnjom. Istraživanje se odnosi na period 2014.-2018. godinu i pokriva pet lokacija duž sliva (tri lokacije na Karašici i dvije lokacije na Vučici). Analizirani parametri kvalitete vode su bili pH, sadržaj nitrata, sadržaj nitrita, sadržaj ortofosfata, sadržaj ukupnog dušika, sadržaj ukupnog fosfora, te BPK₅ i KPK-Mn kao pokazatelji režima kisika. Dobiveni rezultati pokazuju da kvaliteta vode varira ovisno o parametru i godini, ali se generalno može smatrati dobro a u nekim slučajevima i vrlo dobrom. Međutim, kako se radi o području intenzivne poljoprivredne proizvodnje, svakako je potrebno zaštititi sliv od budućeg zagađenja, primjerice smanjenom upotrebom mineralnih i dušičnih gnojiva te dodatnom obradom otpadnih voda.



ENVIRONMENTALLY RELEVANT TOXICITY TESTING OF WATER-INSOLUBLE SURFACE COATINGS

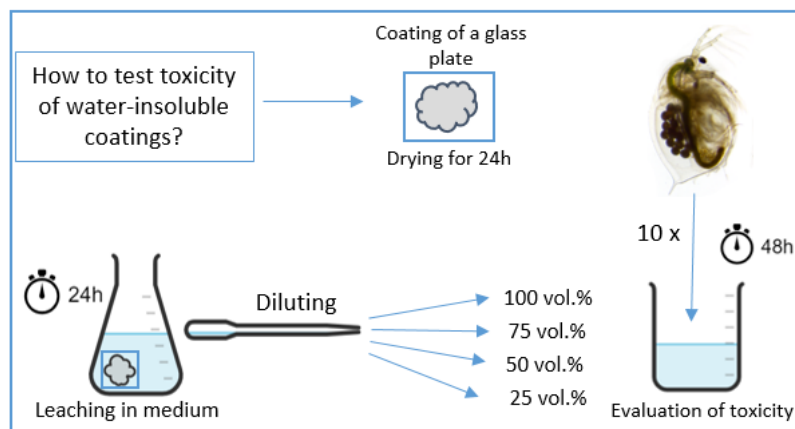
Leja Pleško, Janez Cerar, Andreja Žgajnar Gotvajn, Gabriela Kalčikova

University of Ljubljana, Faculty of Chemistry and Chemical Technology, Večna pot 113,
SI-1000 Ljubljana, Slovenia
plesko.leja@gmail.com

In the past there have been several approaches how to test toxicity of water-insoluble compounds. However, the most often method used is with addition of solvents that can significantly alter toxicity of water-insoluble compound. Also, the environmental relevance of such testing is questioned. Therefore, the aim of this study was to develop toxicity testing protocol for water-insoluble coating that would be easy, fast and more environmentally relevant. For this purpose, toxicity of two-component waterborne epoxy coating and its components was determined using water flea *Daphnia magna*. The component A contained among others trizinc bis(orthophosphate) and 1-metoxy-2-prophanol, whereas the component B contained zinc oxide and 2-butoxyethanol.

Toxicity tests were carried out separately on coating in full composition, as well as separately on their two main components. The respective tests started with covering of inert glass plates with tested samples and so prepared glass plates were then allowed to dry for 24h. The glass plates with dried coatings were put in the medium M4 (ISO 10706, 2000) and components were leached to the medium for the period of 24 hours. After leaching, the medium was diluted to several concentrations to simulate extensive rain event and ten water fleas, not older than 24 hours, were added to these diluted solutions. In case of a good dose-response relationship, the results were expressed as 48hEC₅₀.

According to the results, component B shows high toxicity causing 100 % inhibition in solutions of all tested concentrations. The reason is presence of zinc oxide, which is according to its safety data sheet very toxic for water fleas. Component A showed lower toxicity to water fleas. In this case the 48hEC₅₀ for component A was 22.7 vol. % and is mainly caused by trizinc bis (orthophosphate). Moreover, the result showed that the tested coating in full composition is far less toxic to water fleas as their separate components. Calculated 48hEC₅₀ for tested coating is >100 vol. %. Results of the study demonstrate that the leaching method is a good approach to test the toxicity of water-insoluble coating and consequently could be used to assess impact of such compounds on the environment.



RAZGRADNJA MIKROONEČIŠĆIVALA U VODAMA SOLARNOM FOTOKATALIZOM U TANKOM SLOJU

DEGRADATION OF MICROPOLLUTANT BY THIN- LAYER SOLAR PHOTOCATALYSIS

Lucija Radetić¹, Jan Marčec¹, Ana-Maria Radovan¹, Kristina Šimunković¹,
Karlo Leskovar¹, Kristina Tolić², Dragana Mutavdžić Pavlović², Ivana
Grčić¹

¹Sveučilište u Zagrebu, Geotehnički fakultet, Hallerova aleja 7, 42000 Varaždin

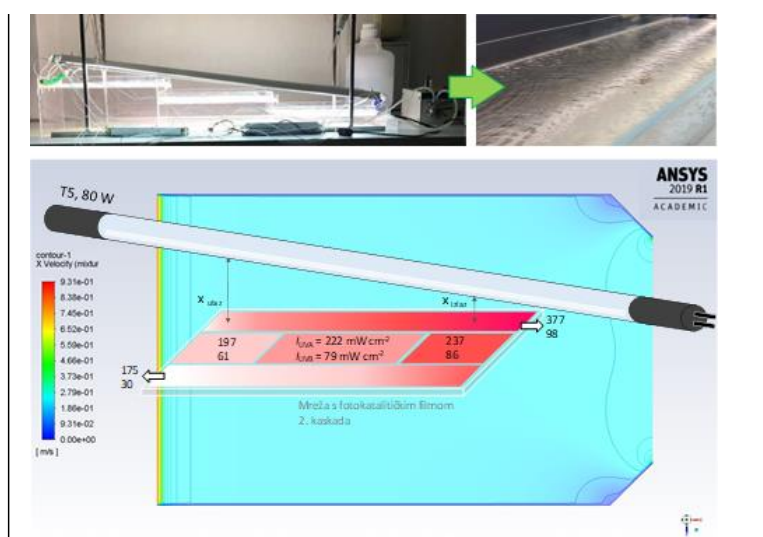
²Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Marulićev trg 19,
10000 Zagreb

lucija.radetic@gfv.unizg.hr

Konvencionalnim metodama obrade otpadnih voda u na uređajima za pročišćavanje komunalnih otpadnih voda nije moguće u potpunosti ukloniti mikroonečišćivala te ona zaostaju u okolišu u malim količinama. Zbog svoje postojanosti i sposobnosti bioakumulacije predstavljaju problem za okoliš. Primjena solarne fotokatalize, pokazala se kao dobra metoda uklanjanja mikroonečišćivala iz voda. Mogućnost korištenja Sunca kao izvora potrebnog zračenja za inicijaciju katalitičkog ciklusa, solarnu fotokatalizu čini zanimljivom alternativom te je kao takva uvrštena u popis najbolje raspoloživih tehnika (NRT).

U ovom radu provedeni su eksperimenti razgradnje i oksidacije odabranih mikroonečišćivala u vodama; farmaceutika (diazepam i enrofloksacin) te široko rasprostranjenog onečišćivala, 1H-benzotriazol, komponente antikoroziivnih premaza. Referentni eksperimenti su provedeni s bojom metilensko modrilo. Korišten je optimalan tip reaktora za primjenu solarne fotokatalize u tankom sloju - reaktor pločastog tipa (FPCR reaktor, eng. *flat-plate cascade reactor*) s imobiliziranim fotokatalitičkim filmom na bazi titan dioksida (TiO₂) na staklenim vlaknima i u suspenziji TiO₂ P25, pod simuliranim zračenjem kompaktnih fluorescentnih žarulja s povećanim UV dijelom spektra, usmjerenog na površinu katalizatora pomoću paraboličnih zrcala. Rezultati ukazuju na potpunu razgradnju odabranih onečišćivala u vodama nakon 30 do 60 minuta provedbe procesa u FPCR-u u potpunoj recirkulaciji. Na temelju prikupljenih eksperimentalnih podataka dobivenim u FPCR reaktoru i razvijenog matematičkog modela istoga, procijenjene su stvarne konstante razgradnje ciljanih onečišćivala.

98



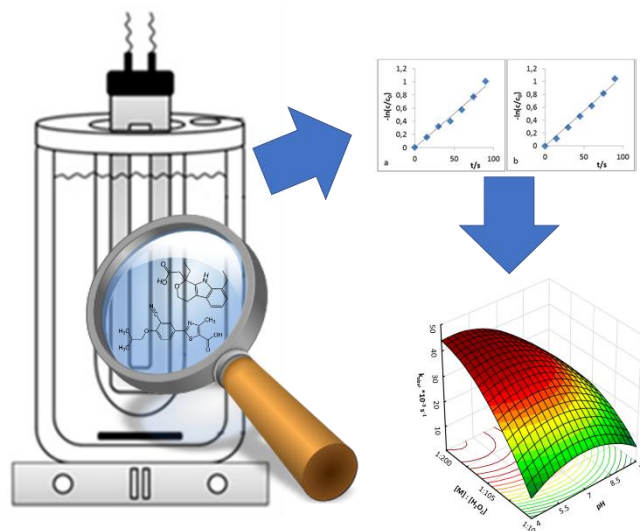
ADVANCED OXIDATION PROCESSES FOR DEGRADATION OF ETODOLAC AND FEBUXOSTAT IN WATER

Amin Samzadeh, Jelena Kovačić, Matija Cvetnić, Šime Ukić, Dajana Kučić Grgić, Viktorija Prevarić, Marija Sigurnjak, Martina Miloloža, Tomislav Bolanča

Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Sveučilište u Zagrebu, Marulićev trg 19
amin3am@gmail.com

Almost every pharmaceutical presents a potential hazard to the environment. Because of that, they are listed as an emerging pollutant. Their properties such as chemical stability, toxicity to microorganisms and general recalcitrance towards degradation are the reason of becoming ubiquitous in the environment. Wastewater treatment plants in most cases are showing low efficiency for the removal of emerging pollutants and some other options have to be considered.

This study involves UV-C/H₂O₂ and UV-C/S₂O₈²⁻ advanced oxidation processes, applied for the treatment of pharmaceuticals etodolac and febuxostat. The apparent degradation kinetic constants of each of these two pharmaceuticals were calculated. The degradation of pharmaceuticals by both investigated photooxidative processes obeyed first-order kinetics. The influence of pH and pollutant/oxidant ratio on the degradation kinetics was evaluated using the full factorial experimental design. The optimum treatment conditions were deduced by the response surface modeling. In both cases, degradation kinetics is dependent on both pollutant/oxidant ratio and pH.



IZOLACIJA SELEKTIRANIH MIKROBNIH KULTURA IZ TLA ONEČIŠĆENOG HERBICIDIMA

ISOLATION OF SELECTED MICROBIAL CULTURES FROM A HERBICIDE CONTAMINATED SOIL

Ivana Stojmilović¹, Monika Šabić Runjavec¹, Dubravka Čelig²,
Zvezdana Findrik Blažević¹, Marija Vuković Domanovac¹

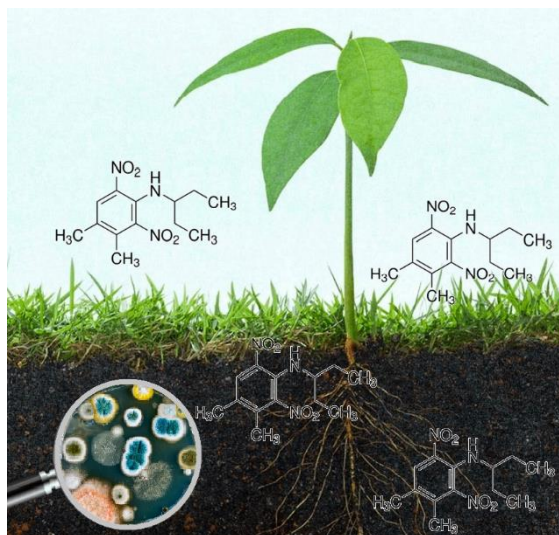
¹Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Sveučilište u Zagrebu,
Marulićev trg 19, HR-10000 Zagreb

²Hrvatska agencija za poljoprivredu i hranu, Centar za zaštitu bilja,
Gorice 68b, HR-10000 Zagreb

istojmilo@fkit.hr

Tlo je nositelj brojnih funkcija neophodnih za život na Zemlji o kojem ovisi održivost ekosustava. Kao izrazito složen medij podložan je procesima degradacije koji mogu onesposobiti njegove funkcije. Pri uzgoju usjeva, korov često predstavlja veliku prijetnju prinosa, što zahtjeva primjenu herbicida. Redovita primjena herbicida može dovesti do njihovog nakupljanja u tlu, a povišena koncentracija mijenja fizikalno-kemijska svojstva tla, sastav mikroflore i njihovu aktivnost, a posljedično i prinose. Mikroorganizmi, kojima je tlo prirodno stanište, mogu biti tolerantni prema herbicidima te ih metabolizirati. U ovom radu provedena je izolacija autohtone kulture mikroorganizama iz tla onečišćenog pendimetalinom, herbicidom iz skupine dinitroanilina. Iz izrasle mješovite kulture selektirane su najdominantnije bakterijske kulture i kulture plijesni koje ukazuju potencijalnu mogućnost biokatalitičke razgradnje pendimetalina.

100



FOTOKATALITIČKA RAZGRADNJA FARMACEUTIKA U VODI: METODA ODZIVNIH POVRŠINA

PHOTOCATALYTIC DEGRADATION OF PHARMACEUTICALS IN WATER: RESPONSE SURFACE MODELING APPROACH

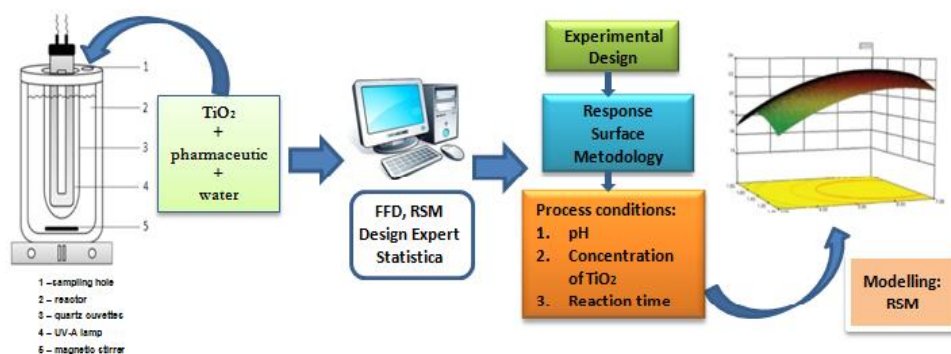
Antonija Tomić, Francis dela Rosa, Marin Kovačić, Hrvoje Kušić, Ana
Lončarić Božić

University of Zagreb, Faculty of Chemical Engineering and Technology, Marulićev trg 19,
10000 Zagreb, Croatia
atomic@fkit.hr

Pharmaceuticals in wastewaters can not only cause environmental deterioration but adverse health effects on human as well. They are often hardly biodegradable and physicochemical technologies are required for their removal from water, albeit they are usually of limited effectiveness. Among possible solutions for the degradation of organic pollutants in wastewater is heterogeneous photocatalysis.

In this work, photocatalytic treatment of ibuprofen, amoxicillin and ciprofloxacin by UV-A/TiO₂ process were studied. The experiments were performed in suspension, at pH values from 4 to 10 and TiO₂ mass concentrations from 0.2 mg/L to 2 mg/L. The removal and conversion extents of the aforementioned pharmaceuticals during photocatalytic treatment were monitored by HPLC. Optimal photocatalytic parameters were determined by Full Factorial Design (FFD) based on two variables, pH and mass concentration of applied photocatalyst, combined with RSM approach. Analysis of variance and statistical parameters were determined by Design Expert and Statistica software packages.

The use of this approach enabled simple and fast detection of influential process parameters, and provided system optimization within the tested range of process parameters.



PERIODIČKA MJERENJA EMISIJA KONCENTRACIJA OTPADNOG PLINA CO, KRUTIH ČESTICA I VLAGE IZ ASFALTNIH BAZA TVRKE STRABAG CROATIA D.O.O.

PERIODIC MEASUREMENTS OF WASTE GAS EMISSIONS OF CO, PARTICULATE MATTER AND MOISTURE CONCENTRATIONS FROM ASPHALT BASES OF COMPANY STRABAG CROATIA D.O.O.

Juraj Vdović¹, Leo Dorogi¹, Ivan Pehar², Hrvoje Nikl³, Marko Rogošić⁴,
Tomislav Bolanča⁴, Matija Cvetnić⁴

¹Zavod za istraživanje i razvoj sigurnosti d.o.o., Zagreb, Ulica grada Vukovara 68

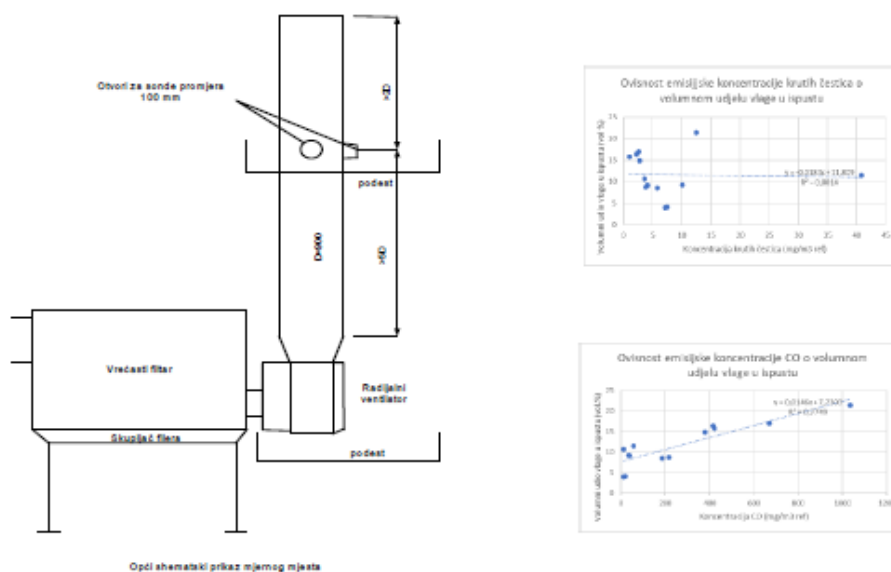
²Strabag Croatia d.o.o., Zagreb, Ulica Petra Hektorovića 2

³Cerium d.o.o., Zagreb, Lašćinska cesta 143

⁴Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije Sveučilišta u Zagrebu, Marulićev trg 19
juraj.vdovic@zirs.hr

Prema Zakonu o zaštiti zraka (NN., br. 130/11., 47/14., 61/17, 118/18) operateri asfaltnih baza zakonski su obvezni periodički pratiti emisije onečišćujućih tvari u zrak i to, između ostalog, plinova CO, SO₂, NO i NO₂ (izraženih kao NO_x) te krutih čestica (ukupnih praškastih tvari). Prema pravilniku o graničnim vrijednostima emisija (NN. br. 87/17), izmjerene koncentracije svode se na standardne uvjete (tlak 101325 Pa i temperaturu od 273 K) i na referentni udio kisika, koji ovisi o procesu. U radu je opisan postupak mjerenja emisija onečišćujućih tvari u zrak. Nadalje, provedena je usporedba izmjerenih koncentracija CO i krutih čestica s volumnim udjelom vlage u ispuštu iz asfaltnih baza tvrtke Strabag Croatia d.o.o. u zadnjih sedam godina. Mjerenja su provedena prema važećim normama. Usporedba rezultata dovodi u vezu emisijsku koncentraciju plina CO s volumnim udjelom vlage u ispuštu. S druge strane, to se ne može reći za emisijsku koncentraciju krutih čestica, koja više ovisi o redovnom održavanju vrećastih filtara koji smanjuju koncentraciju krutih čestica u ispuštu. Vlaga u ispuštu najvećim dijelom potječe od vlažnosti sirovina koje se upotrebljavaju za proizvodnju asfalta (prvenstveno pijeska), dok manjim dijelom nastaje sagorijevanjem goriva u plameniku.

102



DISINFECTION OF WASTEWATER WITH PERACETIC ACID – TOXICITY AND MICROPOLLUTANT REMOVAL

Anja Vehar¹, Nadja Hvala², Marjetka Levstek⁴, Ana Kovačič^{2,3}, Ester Heath^{2,3}, Marjetka Stražar⁴, Andreja Žgajnar Gotvajn¹

¹University of Ljubljana, Faculty of Chemistry and Chemical Technology, Večna pot 113, SI-1000 Ljubljana, Slovenia

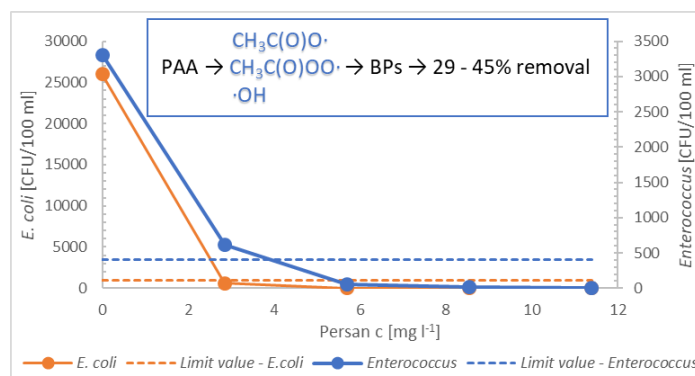
²Jožef Stefan Institute, Jamova cesta 39, SI-1000 Ljubljana, Slovenia

³International Postgraduate School Jožef Stefan, Jamova cesta 39, SI-1000 Ljubljana, Slovenia

⁴Javno Podjetje Centralna čistilna naprava Domžale-Kamnik d.o.o., Študljanska cesta 91, SI-1230, Domžale, Slovenia

anja.vehar15@gmail.com

Despite the considerable improvement in water quality as a result of modern wastewater treatment technologies, the steps of effluent disinfection and micropollutant removal still need to be improved and implemented. The efficiency of peracetic acid (PAA) in combination with hydrogen peroxide (H₂O₂) for disinfection has already been proven. PAA and H₂O₂ in water solution form nonselective and highly reactive peroxy and hydroxyl radicals, which have the potential, not only to deactivate bacteria, but also to remove persistent micropollutants. In our study, laboratory scale effluent disinfection with PersanTM (15 % of PAA and 15 % to 30 % of H₂O₂) was studied. The bioindicator species, which were used for determination of disinfection efficiency, were *Enterococcus* and *Escherichia coli*. Ecotoxicity of the treated effluent was determined with *Daphnia magna*. Changes in the concentration of total organic carbon (TOC), and the removal of 12 bisphenols (BPs, bisphenol A and its 11 alternatives) were also measured. The study was performed in the real wastewater treatment plant effluent. Results showed that the lowest concentration of PersanTM, which had to be added to the effluent to remove 98 % of *Enterococcus* and *Escherichia coli*, was 5.7 mg L⁻¹. This addition of PersanTM had no toxic effect on *Daphnia magna*. It increased the effluent TOC for 13 % and efficiently removed (8.4 % to 84.1%) the bisphenols (BPC, BPE, BPA, BPS and BPAP) still present in the effluent after the biological stage (below limit of quantification). When the effluent was spiked with environmentally relevant concentrations of bisphenols, the addition of PersanTM removed on average 29.2 % (9.4 % to 53.5 %) of bisphenols. These results indicate, that PersanTM can be efficiently used both for disinfection and partial micropollutant removal. Future work will be focused on PersanTM addition for effective disinfection and complete removal of model compounds.



**Mehanički, toplinski i separacijski
procesi**
*Mechanical, thermal and separation
processes*

EKSTRAKCIJA BIOAKTIVNIH SPOJEVA IZ DUHANSKOG OTPADA PRIMJENOM EUTEKTIČKIH OTAPALA

EXTRACTION OF BIOACTIVE COMPOUNDS FROM TOBACCO WASTE USING DEEP EUTECTIC SOLVENTS

Marija Banožić¹, Maja Matic², Silvija Šafranko¹, Ana-Marija Cikoš¹,
Martina Jakovljević¹, Maja Molnar¹, Stela Jokić¹

¹Sveučilište Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku, Prehrambeno-tehnološki fakultet
Franje Kuhača 20, 31000 Osijek, Republika Hrvatska

²Sveučilište u Mostaru, Agronomski i prehrambeno-tehnološki fakultet
Biskupa Čule bb, 88000 Mostar, Bosna i Hercegovina
mbanozic@ptfos.hr

Duhanski otpad je kruti otpad koji nastaje tijekom procesiranja lista duhana. Vrste duhanskog otpada međusobno se razlikuju po granulaciji i mjestu izdvajanja u procesu proizvodnje. Cilj ovog rada bio je istražiti učinkovitost eutektičkih otapala u ekstrakciji bioaktivnih komponenti iz duhanskog industrijskog otpada (refabrikat, rebro i prašina). Napravljen je screening različitih eutektičkih otapala te je odabrano najučinkovitije otapalo - kolin klorid/etilen-glikol koje je korišteno u daljnjim postupcima ekstrakcije. Ispitan je utjecaj različitih procesnih uvjeta (vrijeme miješanja, temperatura miješanja i udio vode u otapalu) na svojstva samog ekstrakta (ukupne fenole, antioksidacijsku aktivnost, udio klorogenske kiseline i rutina). Metodom odzivne površine određeni su optimalni procesni uvjeti za dobivanje ekstrakata poželjnih svojstava (30 min, 70 °C, 29,99 % vode). Provedeno istraživanje ogleđa se u maksimalnom iskorištavanju nusproizvoda duhanske industrije, a rezultira visokovrijednim ekstraktima koji se mogu implementirati u druge procese i proizvode.

Zahvala: Ovaj rad sufinancirala je Hrvatska zaklada za znanost projektom „Primjena inovativnih tehnika ekstrakcije bioaktivnih komponenti iz nusproizvoda biljnoga podrijetla“ (UIP-2017-05-9909).



PROIZVODNJA BIODIZELA IZ OTPADNOG TALOGA KAVE

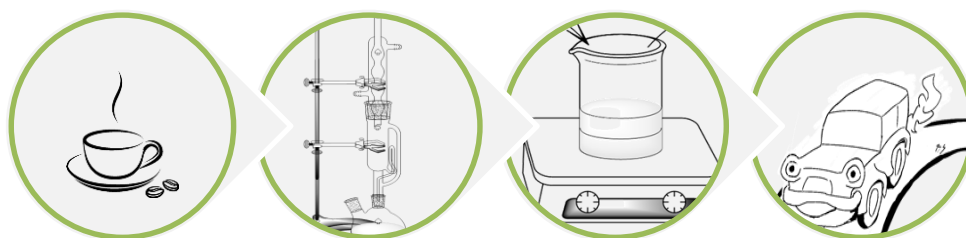
BIODIESEL PRODUCTION FROM WASTE COFFEE GROUNDS

Marina Gapit, Ema Pollak, Ana Petračić, Aleksandra Sander

Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije
Marulićev trg 19, 10000 Zagreb
epollak@fkit.hr

Biodizel pripada skupini biogoriva, obnovljiv je, netoksičan i biorazgradiv stoga predstavlja prihvatljivu alternativu fosilnim gorivima. Najčešće se proizvodi iz jestivih biljnih ulja ili životinjskih masti, no kako bi se izbjeglo korištenje sirovina koje služe za prehranu ljudi, sve se češće proizvodnja okreće sirovinama kao što su nejestiva i otpadna ulja, a jedno od takvih je i ulje ekstrahirano iz otpadnog taloga kave.

U ovom je radu predložena metoda proizvodnje biodizela iz ulja ekstrahiranog iz otpadnog taloga kave. Ulje je pročišćeno kapljevinskom ekstrakcijom pomoću niskotemperaturnog eutektičkog otapala (eng. *Deep Eutectic Solvent*, DES) na bazi kalijeva karbonata. Istražen je utjecaj reakcijskih uvjeta, odnosno vrste katalizatora te masenog omjera katalizator : metanol : ulje na kvalitetu sintetiziranog biodizela. KOH se pokazao kao učinkovitiji katalizator, a optimalni omjer KOH : metanol : ulje je 0,5 : 40 : 100. Sirovi biodizel pročišćen je dvjema metodama; već poznatim šaržnim postupkom kapljevinske ekstrakcije uz DES na bazi kolin klorida, te dosad neisprobanom kontinuiranom kolonskom ekstrakcijom u ekstraktoru s pulsirajućim pliticama. Analiza ukazuje da biodizel proizveden iz otpadnog taloga kave te pročišćen kolonskom ekstrakcijom zadovoljava propisane kriterije za dizelske motore.



PRIPREMA TERAPEUTSKIH NISKOTEMPERATURNIH EUTEKTIČKIH OTAPALA (THEDES)

PREPARATION OF THERAPEUTIC DEEP EUTECTIC SOLVENTS (THEDES)

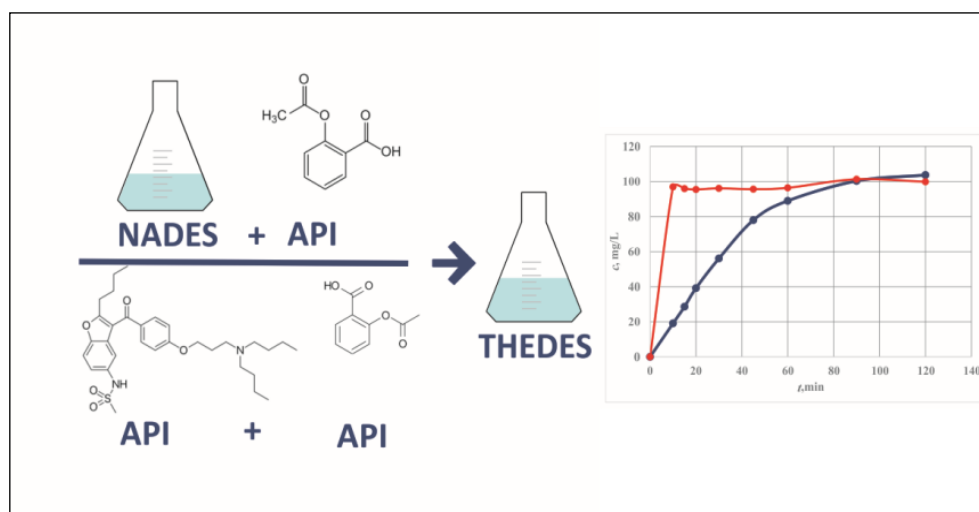
Anamarija Mitar, Damir Jakus, Ana Juričić, Dalibor Marjan,
Jasna Prlić Kardum

Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije
Marulićev trg 19, 10000 Zagreb
amitar@fkit.hr

THEDES je skraćeni naziv za terapijska niskotemperaturna eutektička otapala koji su mješavina dvaju sastojaka, od kojih je jedna farmaceutska djelatna tvar. Dvije ili više krutina pomiješane u određenom molnom omjeru pri povišenoj temperaturi povezuju se vodikovim vezama te nastaje kapljevina. Otkriće THEDES-a omogućilo je poboljšanje primjene lijekova. Naime, prevođenjem djelatne tvari u kapljevinu postiže se bolja topljivost i permeabilnost lijeka u ljudskom organizmu. Pri tome je važno voditi računa o neškodljivosti komponenata koje se koriste za pripremu THEDES-a.

U ovom radu istražena je mogućnost pripreme THEDES-a s različitim djelatnim tvarima (acetilsalicilna kiselina, kofein, dronedaron-hidroklorid, benzojeva kiselina) u različitim molnim omjerima djelatne farmaceutske tvari i pomoćne komponente. Dobivenim THEDES-ima određena je gustoća, viskoznost, profil oslobađanja djelatne tvari te analizom na diferencijalnom pretražnom kalorimetru temperature faznih promjena. Kako bi se potvrdio nastanak THEDES-a i odredile interakcije među komponentama koje čine THEDES snimljeni su FTIR spektri.

107



POVEĆANJE TOPLJIVOSTI I BRZINE OSLOBODANJA LURASIDON-HIDROKLORIDA PRIMJENOM LIOFILIZACIJE

ENHANCING THE SOLUBILITY AND RELEASE RATE OF LURASIDONE HYDROCHLORIDE USING LYOPHILIZATION

Josipa Skočibušić, Gabriela Brnadić, Mirna Filakovac, Ivona Tomljanović, Joško Barbarić, Krunoslav Žižek

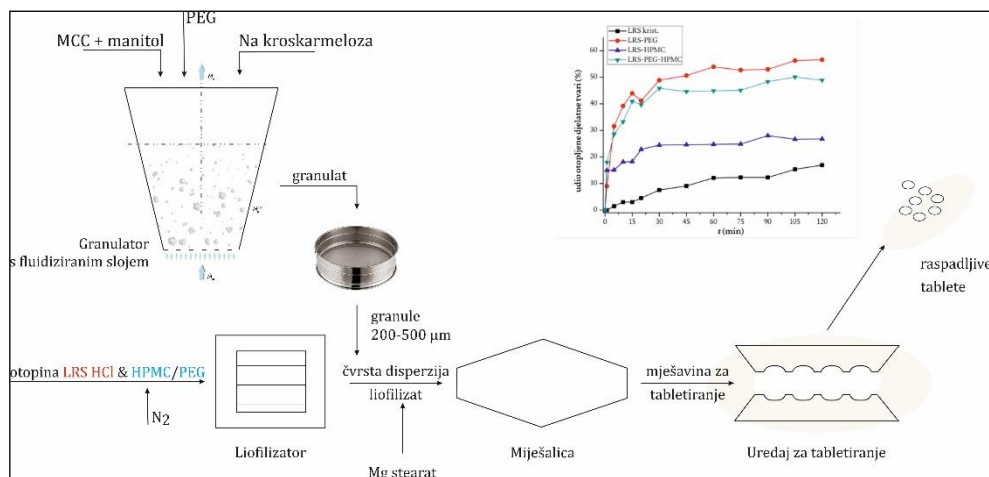
Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije
Marulićev trg 19, 10000 Zagreb
jskocibus@fkit.hr

Shizofrenija je teška psihička bolest današnjice, a primjena antipsihotika jedan je od načina njezina uspješnog liječenja. Lurasidon-hidroklorid (LRS HCl) je antipsihotik druge generacije i dostupan je na tržištu u dozirnomo obliku konvencionalnih tableta. LRS HCl je djelatna tvar slabe topljivosti u vodenom mediju što otežava njezinu primjenu u liječenju psihičkih poremećaja. S ciljem povećanja topljivosti djelatne tvari, pripravljene su čvrste disperzije u matricama dvaju hidrofilnih polimera poli(etilen-glikola) i hidroksipropil-metilceluloze. U pripravi disperzija korišten je postupak liofilizacije u uvjetima visokog vakuuma i niske temperature.

Difraktogrami ne ukazuju na promjenu u faznom sastavu čvrstih disperzija. Rezultati infracrvene spektroskopije i termogrami diferencijalne pretražne kalorimetrije ukazuju na moguću prisutnost interakcija između LRS HCl i polimernih matrica koje mogu imati pozitivan učinak na povećanje topljivosti djelatne tvari.

U pripravi raspadljivih tableta korištene su čvrste disperzije i pomoćne tvari: manitol, natrijeva kroskarmeloza te mikrokristalna celuloza. Karakterizacija raspadljivih tableta podrazumijevala je ispitivanje ujednačenosti masa raspadljivih tableta, testiranje njihove raspadljivosti, te određivanje sadržaja djelatne tvari. *In vitro* ispitivanjima određena je topljivost djelatne tvari te su utvrđeni profili njezina oslobađanja iz raspadljivih tableta.

Vrijeme raspadljivosti za sve tablete manje je od 3 minute što ukazuje da se pripravljeni dozirni oblici opravdano mogu kategorizirati kao raspadljive tablete za usta. Profili oslobađanja u laboratorijskom okruženju i u prisutnosti McIlvaineovog pufera (pH = 3,8) ukazuju na brže oslobađanje djelatne tvari iz svih raspadljivih tableta pripremljenih iz čvrstih disperzija u odnosu na čisti LRS HCl.



ADSORPCIJA MELASOTVORNIH METALA K I Na NA REZANCE ŠEĆERNE REPE

ADSORPTION OF K AND Na ON SUGAR BEET NOODLES

Jelena Šurlan¹, Teodora Cvanić¹, Nikola Maravić¹, Lidija Peić Tukuljac²

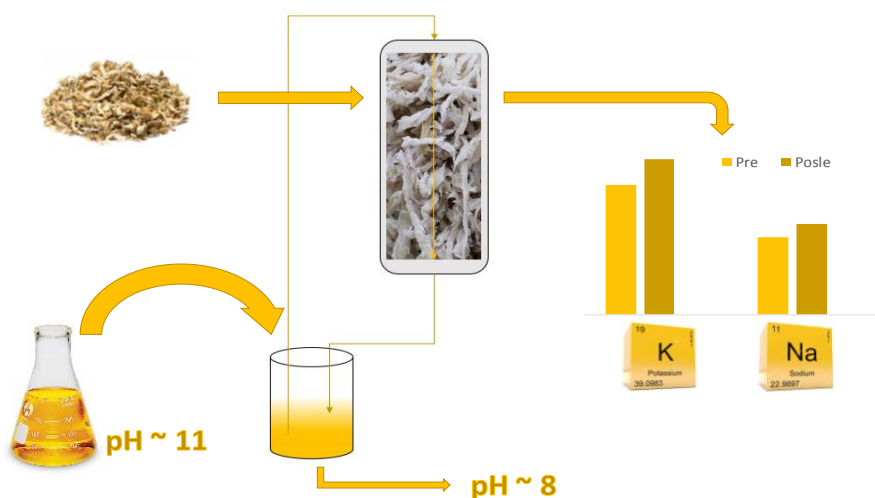
¹Univerzitet u Novom Sadu, Tehnološki fakultet
Bulevar cara Lazara 1, 21000 Novi Sad, Srbija

²Institut za prehrambene tehnologije, Bulevar cara Lazara 1, 21000 Novi Sad, Srbija
jelena.surlan1997@gmail.com

U industriji šećera, pročišćavanjem alkalnog soka teži se postizanju što većeg prinosa saharoze iz šećerne repe. Melasotvorni metali, poput kalija i natrija, povećavaju raspadljivost saharoze stvarajući saharate, čime otežavaju proces kristalizacije i smanjuju količinu šećera kao konačnog proizvoda, a povećavaju količinu šećera u melasi. Uklanjanjem melasotvornih metala olakšava se proces kristalizacije i povećava prinos saharoze.

Cilj ovog istraživanja je separirati K^+ i Na^+ ione iz alkalnog soka procesom adsorpcije na rezancima šećerne repe, pri različitim temperaturama alkalnog soka i različitim masenim odnosima soka i rezanaca. Kao adsorbens odnosno punila adsorpcijske kolone koriste se prešani repini rezanci. Alkalni sok prolazi kroz kolonu u trajanju od 2 sata, u uvjetima konstantne temperature i protoka alkalnog soka. U uzorcima alkalnog soka prije i poslije adsorpcije ispitivan je sadržaj K^+ i Na^+ iona atomskim apsorpcijskim spektrofotometrom. Dodatno, ispitivane su promjene pH vrijednosti, boje, sadržaja suhe tvari i šećera. U rezancima šećerne repe određen je sadržaj K^+ i Na^+ iona, također, atomskom apsorpcijskom spektrofotometrijom. Sadržaj suhe tvari određen je sušenjem pri temperaturi 105 °C u trajanju od 5 sati.

Uz konstantan odnos alkalnog soka i repinih rezanaca, na temperaturama od 30 °C i 50 °C, rezultati pokazuju da viša temperatura pozitivno utječe na efikasnost procesa separacije. Više temperature omogućuju brže kretanje iona u alkalnom soku, a time i bolji kontakt s aktivnim mjestima repinih rezanaca. Na konstantnoj temperaturi, uz različite odnose alkalnog soka i repinih rezanaca: 13:1 i 8:1, rezultati ukazuju na efikasniju adsorpciju uz veći odnos alkalnog soka i rezanaca šećerne repe. Na osnovu dobivenih rezultata, može se zaključiti da je separacija/odvajanje K^+ i Na^+ iona iz alkalnog soka efikasnija na višim temperaturama i s većom količinom rezanaca.



PRIPRAVA I KARAKTERIZACIJA RASPADLJIVIH TABLETA ZA USTA

PREPARATION AND CHARACTERIZATION OF ORALLY DISINTEGRATING TABLETS

Dominik Varga, Tea Barbaro, Ivona Lacko, Dario Tomić,
Joško Barbarić, Krunoslav Žižek

Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije
Marulićev trg 19, 10000 Zagreb
dvarga@fkit.hr

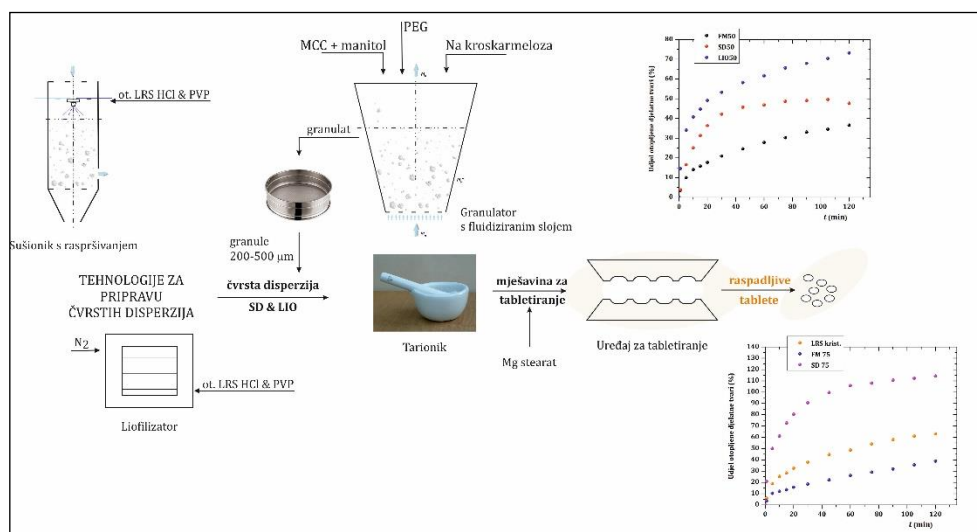
Lurasidon-hidroklorid je djelatna tvar izrazito male topljivosti u vodenom mediju što otežava njegovu primjenu u liječenju psihičkih poremećaja. S ciljem povećanja njegove topljivosti, procesnim tehnologijama liofilizacije i sušenja raspršivanjem pripravljene su čvrste disperzije djelatne tvari u matrici hidrofilnog polimera, poli(vinil-pirolidona).

Čvrste disperzije karakterizirane su diferencijalnom pretražnom kalorimetrijom, rendgenskom difrakcijskom analizom praha i infracrvenom spektroskopijom. Određena je ravnotežna topljivost djelatne tvari u čvrstim disperzijama.

U pripravi raspadljivih tableta promjera 8 mm korištene su čvrste disperzije i fizikalne mješavine, te pomoćne tvari: manitol, natrijeva kroskarmeloza i mikrokristalna celuloza. Dobivene tablete testirane su na raspadljivost, masu i sadržaj djelatne tvari. *In vitro* ispitivanjima određena je topljivost djelatne tvari te su utvrđeni profili njezina oslobađanja iz raspadljivih tableta.

Vrijeme raspadljivosti za sve tablete manje je od 3 minute čime se pripremljeni dozirni oblici opravdano smatraju raspadljivim tabletama. Profili otapanja u laboratorijskom okruženju i u prisutnosti McIlvaineovog pufera (pH = 3,8) ukazuju na brže oslobađanje djelatne tvari iz raspadljivih tableta pripremljenih iz čvrstih disperzija u odnosu na one koje sadrže čisti lurasidon-hidroklorid i fizikalnu mješavinu djelatne tvari i polimera.

110



Reakcijsko inženjerstvo

Reaction engineering

DEGRADATION KINETICS OF SELECTED ANTIBIOTICS BY OZONE-BASED REACTIONS

Teja Antončič, Andreja Žgajnar Gotvajn

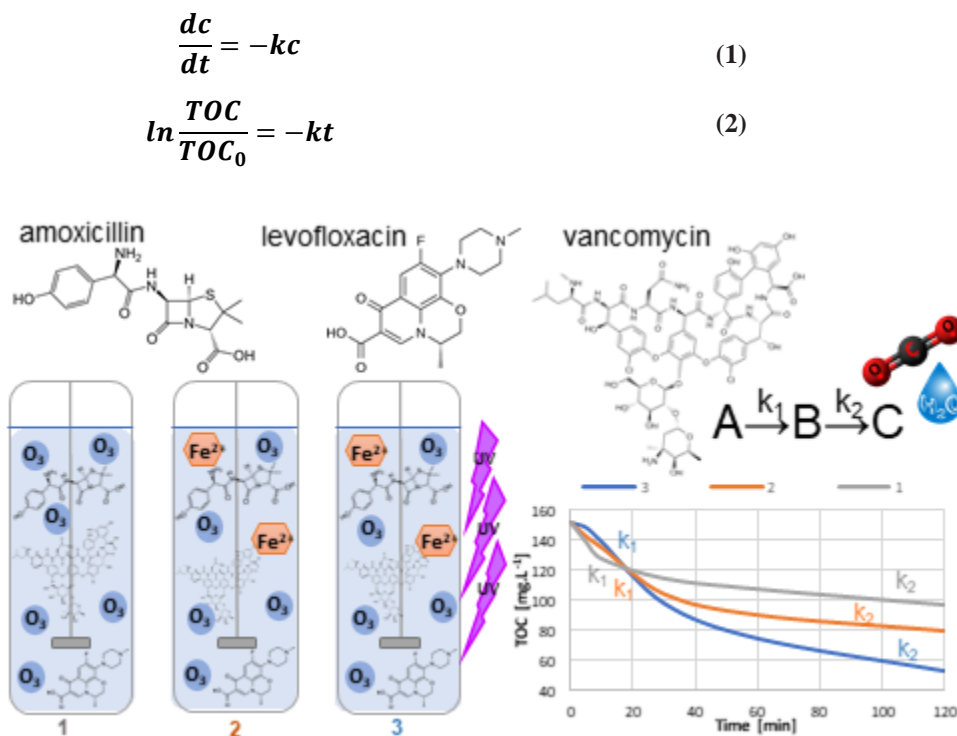
University of Ljubljana, Faculty of Chemistry and Chemical Technology, Večna pot 113,
SI-1000 Ljubljana, Slovenia
teja.ant@gmail.com

The wide use of antibiotics nowadays is polluting environment and contaminating even natural water systems. The most efficient method to degrade those compounds so far seem to be advanced oxidation processes (AOPs). Application of effective oxidants such as ozone can lead to decomposition of pollutants and reduction of their toxicity.

The aim of the research was to study degradation of amoxicillin, levofloxacin, vancomycin and the mixture of all above antibiotics in aqueous solutions – model wastewaters. They are used as human or veterinary antibiotics to treat infections caused by bacteria such as pneumonia, tonsillitis and others. The initial concentration of each investigated antibiotic was 400 mg L⁻¹ and in the mixture the concentration of each antibiotic was 100 mg L⁻¹. All experiments were run for 120 min. They were carried out in a cylindrical glass reactor with volume of 300 mL and the nominal inflow of ozone into reactor was 3 g h⁻¹. Different methods such as ozonation (O₃), catalytic ozonation with Fe²⁺ (O₃/Fe²⁺) and catalytic ozonation with Fe²⁺ and UV-A black light (O₃/Fe²⁺/UV) were compared. The removal efficiency of each method was determined by total organic carbon (TOC) measurements. Results show that the most efficient removal of each antibiotic and their mixture was achieved with O₃/Fe²⁺/UV. The removal efficiencies with O₃/Fe²⁺/UV for amoxicillin, levofloxacin, vancomycin and the mixture were 66.5, 62.9, 67.4 and 65.3 %, respectively.

The kinetics of decomposition of all samples was also determined using equation (1). They all fit 1st order reactions well based on the TOC determination. Rate constant (k) was calculated by equation (2) for two consecutive steps of degradation. Rate constants for the same stage of ozonation were comparable.

112



KINETIČKI MODEL SINTEZE BIODIZELA KATALIZIRANE ENZIMOM LIPAZA

KINETIC MODEL OF BIODIESEL SYNTHESIS CATALYSED BY LIPASE

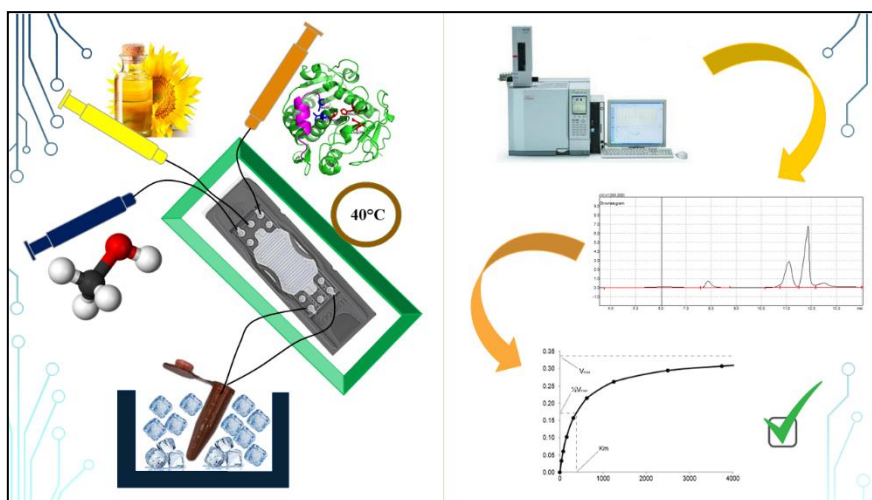
Matea Bačić, Anabela Ljubić, Martin Gojun, Anita Šalić

Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije
Marulićev trg 19, 10000 Zagreb
mbacic@fkit.hr, aljubic@fkit.hr

Danas se sve više teži primjeni obnovljivih i održivih izvora energije, pri čemu je od posebnog interesa upotreba biogoriva koja su ekološki prihvatljivija u odnosu na fosilna goriva, a dobivaju se iz izvora čija je raspoloživost praktički neograničena. Kao alternativa fosilnom dizelu znatnu pozornost privukao je biodizel, ester viših masnih kiselina i nižih alkohola. Iako je šaržna proizvodnja biodizela procesom transesterifikacije koja se provodi uz kiseline i lužine kao katalizatore industrijski najzastupljenija, sve se više uočavaju prednosti korištenja enzima kao katalizatora u ovom procesu. Osim toga, intenzifikacija procesa proizvodnje biodizela ostvaruje se i njegovom kontinuiranom proizvodnjom, pri čemu je primjena mikroreaktora za provedbu procesa transesterifikacije rezultirala izrazitim povećanjem produktivnosti ovog procesa. Provedbom procesa u mikroreaktoru postižu se veća učinkovitost te znatne uštede energije i sirovina, što je prvenstveno posljedica velikog omjera površine i volumena kao glavne karakteristike mikrosustava.

U ovom radu je provedena sinteza biodizela u PTFE mikroreaktoru ($d = 500 \mu\text{m}$, $V = 235,62 \mu\text{L}$) katalizirana enzimom lipaza. Postavljen je matematički model procesa, a za opis kinetike reakcije korišten je Bi-Bi Ping-Pong kinetički model. Rezultati dobiveni pokusima u mikroreaktoru pri različitim početnim koncentracijama reaktanata i produkata korišteni su za procjenu parametara kinetičkog modela. Ocjena valjanosti matematičkog modela procesa provedena je usporedbom s rezultatima neovisnih pokusa te je na razini statističke pogreške utvrđeno njihovo dobro slaganje.

113



ISTRAŽIVANJE HIDRODINAMIKE U RAZLIČITIM IZVEDBAMA ANULARNOG FOTOKATALITIČKOG REAKTORA

RESEARCH OF HYDRODYNAMICS IN VARIOUS DESIGNS OF AN ANNULAR PHOTO-CATALYTIC REACTOR

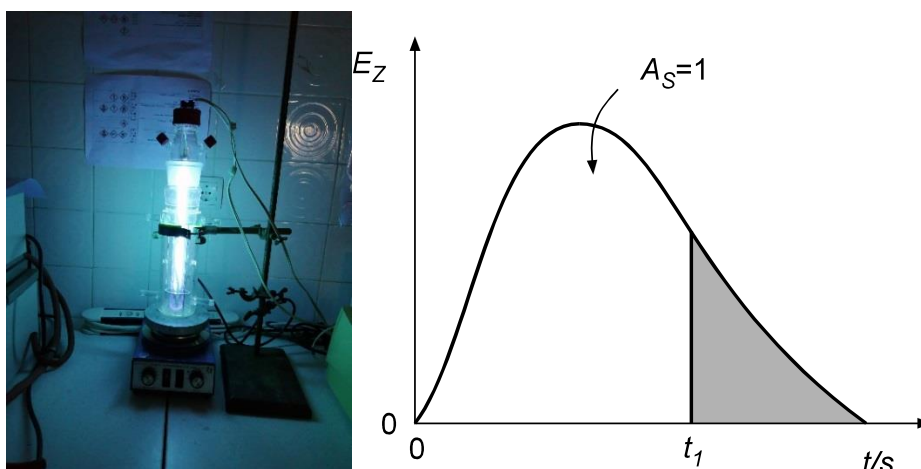
Vladimir Cvetojević, Hrvoje Dragozet, Vanja Kosar

Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije
Marulićev trg 19, 10000 Zagreb
vcvjetoj@fkit.hr

Utjecaj hidrodinamike u heterogenim fotokatalitičkim procesima još uvijek je nedovoljno istražen usprkos velikom interesu za primjenom fotokatalize u zaštiti okoliša, medicini i naprednim postupcima pretvorbe energije.

Cilj ovoga rada je ispitati utjecaj hidrodinamike na učinkovitost fotokatalitičkog sustava primjenom anularnog fotokatalitičkog reaktora. Eksperimentalni dio sastojat će se u određivanju funkcije raspodijele vremena zadržavanja kao mjere odstupanja od idealnog strujanja ili miješanja zavisno o tome primjenjuje li se suspenzijski anularni fotoreaktor ili fotoreaktor s nepokretnim slojem fotokatalizatora nanesenog na punila/nosače izvedenih u obliku staklenih kuglica različitih dimenzija. Jedno od ključnih pitanja svakog heterogenog fotokatalitičkog procesa je priprema i primjena odgovarajućeg fotokatalizatora i njegov smještaj unutar reaktora. Kao modelna komponenta prilikom testiranja aktivnosti fotokatalizatora koristit će se acetamiprid, a fotorazgradnja će se provoditi na imobiliziranom sloju TiO_2 nanesenom na staklene kuglice. Fotorazgradnja će se provoditi u šaržnoj izvedbi anularnog reaktora uz različite protoke recirkulacije reakcijske smjese. Posebna pažnja posvetit će se ispitivanju stabilnosti fotokatalizatora s obzirom na mogućnost gubitka aktivne komponente (engl. leaching) zavisno o hidrodinamičkim uvjetima provedbe procesa. Na temelju interpretacije dobivenih rezultata bit će izvedeni zaključci o učinkovitosti izučavanog fotokatalitičkog sustava.

114



Rad je financiran sredstvima Hrvatske zaklade za znanost u okviru projekta IN-PhotoCat (IP-2018-01-8669)

ISPITIVANJE UVJETA SINTEZE NANOČESTICA SREBRA UZ GLUKOZU

GLUCOSE MEDIATED SILVER NANOPARTICLE SYNTHESIS

Sara Čačko¹, Stella Hamilton¹, Lela Martinaga², Ana Vrsalović Presečki¹

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

²Sveučilište u Zagrebu Tekstilno-tehnološki fakultet, Prilaz baruna Filipovića 28a, 10000 Zagreb, Hrvatska
scacko@fkit.hr

Nanotehnologija se, kao znanost, sve više primjenjuje u raznim područjima tehnologije i industrije. Metalne nanočestice se, kao produkti nanotehnologije, ovisno o svojstvima koja pokazuju, koriste ponajviše u medicini, farmaciji, zaštiti okoliša, elektronicima, energetici i sl.

Nanočestice srebra su najšire korištene metalne nanočestice te su zbog svojih antimikrobnih svojstava trenutno najzastupljenije u proizvodnji dezodoransa, odjeće, zavoja, otopina za čišćenje, sprejeva i medicinskih proizvoda.

U okviru ovoga rada provedena je ekološki prihvatljiva sinteza nanočestica srebra uz upotrebu glukoze kao reducensa. Pri tome su ispitani uvjeti reakcije, tj. različite početne koncentracije srebrova nitrata, AgNO_3 i glukoze u svrhu nastanka nanočestica što manjih veličina i što veće koncentracije. Reakcije su provedene u citratnom puferu, pri sobnoj temperaturi uz prisustvo svjetlosti i kisika.

Provedeno ispitivanje pokazalo je da početna koncentracija glukoze ima blagi utjecaj na reakciju sinteze nanočestica srebra, dok je utjecaj koncentracije AgNO_3 veći. Veličina sintetiziranih nanočestica srebra najmanja je pri najnižoj ispitanoj koncentraciji glukoze (5 mM) i najvišoj koncentraciji AgNO_3 , dok je brzina sinteze nanočestica najveća pri srednjoj ispitanoj koncentraciji glukoze (7 mM). Koncentracija sintetiziranih nanočestica srebra raste s porastom početne koncentracije AgNO_3 .



PRIMJENA ULTRAFILTRACIJSKIH MEMBRANA ZA PROČIŠĆAVANJE BIODIZELA

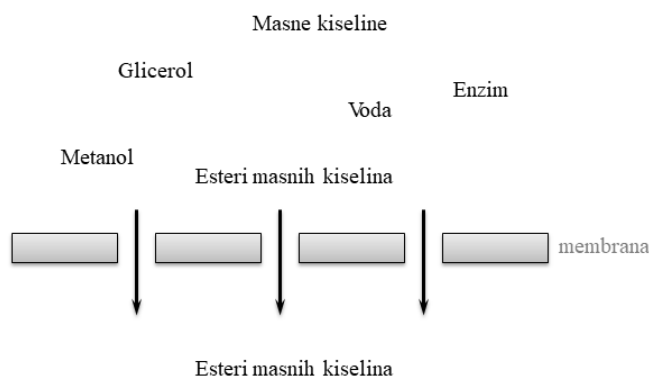
APPLICATION OF ULTRAFILTRATION MEMBRANES FOR BIODIESEL PURIFICATION

Martin Gojun, Tea Sokač, Anita Šalić

Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije
Marulićev trg 19, 10 000 Zagreb, Hrvatska
mgojun@fkit.hr

Biodizel je obnovljiv izvor energije, a najčešće se dobiva procesom transesterifikacije masti i ulja uz prisutnost katalizatora. Nakon proizvodnje, sirovi biodizel sadrži nečistoće poput sapuna, katalizatora i glicerola te je neophodno provesti postupke pročišćavanja da bi se dobio čisti biodizel spreman za daljnje korištenje. Najčešće korištena metoda pročišćavanja je ispiranje vodom. Glavni nedostatak te metode je korištenje velike količine čiste vode koja nakon procesa i sama mora proći postupak pročišćavanja prije zbrinjavanja. Uporaba membrana za pročišćavanje sirovog biodizela pokazala se kao alternativna metoda kojom se dobiva biodizel s manjim udjelom glicerola i to bez uporabe vode što ovu metodu čini ekološki prihvatljivijom. Membrane koje se mogu koristiti za pročišćavanje biodizela su keramičke i polimerne (polietersulfonske, poliakrilonitrilne, celulozne, polipropilenske itd).

U ovom radu provedena je sinteza biodizela u šaržnom reaktoru ($V = 250$ ml) iz jestivog suncokretovog ulja uz prisutnost enzima lipaze porijeklom iz *Thermomyces lanuginosus*. Dobiveni biodizel ($I_{\text{estri masnih kiselina}} = 96\%$, $t = 6$ h) sadržavao je 107 mg/ml glicerola. Nakon separacije u lijevku za odjeljivanje uspješno je uklonjeno 97,7% glicerola. Zaostali glicerol u biodizelu (0.8 mg/ml) pročišćen je postupkom „dead end“ ultrafiltracije primjenom različitih polimernih membrana.



ISPITIVANJE UVJETA SINTEZE NANOČESTICA ZLATA UZ GLUKOZU

GLUCOSE MEDIATED GOLD NANOPARTICLE SYNTHESIS

Stella Hamilton¹, Sara Čačko¹, Lela Martinaga², Ana Vrsalović Presečki¹,

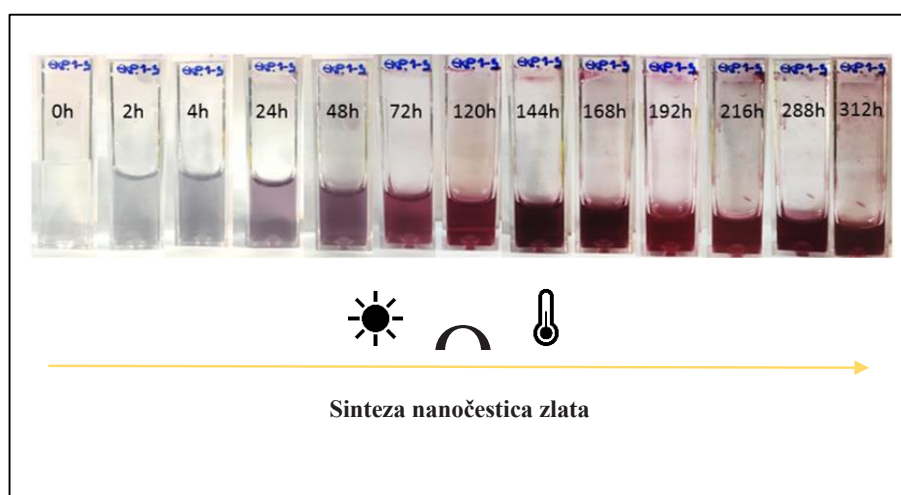
¹Sveučilište u Zagrebu Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Marulićev trg 19,
10000 Zagreb, Hrvatska

²Sveučilište u Zagrebu Tekstilno-tehnološki fakultet, Prilaz baruna Filipovića 28a,
10000 Zagreb, Hrvatska
shamilton@fkit.hr

Nanotehnologija je znanost velikog potencijala za primjenu u brojnim područjima istraživanja. Nanočestice zlata, jedne su od najstabilnijih i biokompatibilnih vrsta nanočestica zbog čega se sve više primjenjuju u medicini, elektronici, tekstilnoj industriji i drugim područjima, a istražuje se i mogućnost njihove primjene u elektroničkim vodičima, isporuci lijekova, za terapijske agense, u katalizi i sl. Sve veća potražnja i primjena metalnih nanočestica rezultira stoga i sve većom potrebom za razvojem ekološki prihvatljivijih metoda njihove sinteze.

U ovom je radu provedena sinteza nanočestica zlata korištenjem tetrakloroauratne kiseline kao izvora iona zlata te glukoze kao reducensa. Ispitan je utjecaj uvjeta reakcije na koncentracije i veličinu sintetiziranih nanočestica. Reakcije su provedene u fosfatnom puferu, pri sobnoj temperaturi te uz prisustvo svjetlosti i kisika.

Rezultati istraživanja pokazali su da početna koncentracija glukoze blago utječe na reakcijsku brzinu sinteze nanočestica zlata, dok je utjecaj koncentracije tetrakloroauratne kiseline značajniji. Veličina sintetiziranih nanočestica gotovo i ne ovisi o koncentraciji glukoze, dok je njihova koncentracija u blagom porastu s porastom koncentracije glukoze.



NEIDEALNO STRUJANJE U MODELNIM CIJEVIMA

NON-IDEAL FLOW IN MODEL TUBES

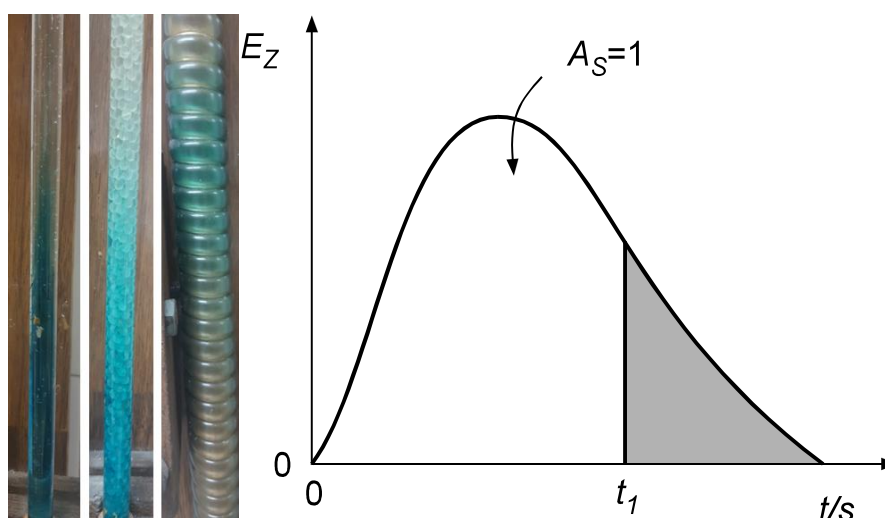
Filip Kurt, Katarina Licht, Vanja Kosar

Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije
Marulićev trg 19, 10 000 Zagreb, Hrvatska
fkurt@fkit.hr

U ovom je radu istraživano odstupanje od idealnog strujanja u trima različitim modelnim cijevima, odnosno kolonama. Osnovni je koncept sadržan u pojmu raspodjele vremena zadržavanja kapljevine. Raspodjela vremena zadržavanja je statistička krivulja koja kvalitativno i kvantitativno opisuje odstupanje strujanja kapljevine od idealnog načina strujanja.

Rad je zasnovan na eksperimentalnim podacima dobivenim praćenjem promjene koncentracije traser na izlasku iz kolone tijekom vremena. Eksperimenti su provedeni u ravnoj praznoj cijevi, cijevi ispunjenoj staklenim kuglicama te praznoj spiralnoj cijevi, a kao traser je korištena otopina KCl u struji vode. Ispitivani su utjecaji promjene protoka traser u rasponu od 100 do 600 ml/min. Također svi su eksperimenti provedeni s različitim volumenima traser (0,5 i 1 mL) u svrhu približavanja idealnom impulsnom poremećaju.

Dobivene su krivulje raspodjele vremena zadržavanja, izračunate su vrijednosti srednjeg vremena zadržavanja i disperzijskog broja te su eksperimenti uspoređeni s teorijskim modelom aksijalne disperzije. Na temelju dobivenih rezultata moguće je bolje predvidjeti hidrodinamičko ponašanje u realnim cijevnim reaktorima pri različitim izvedbama i uvjetima rada.

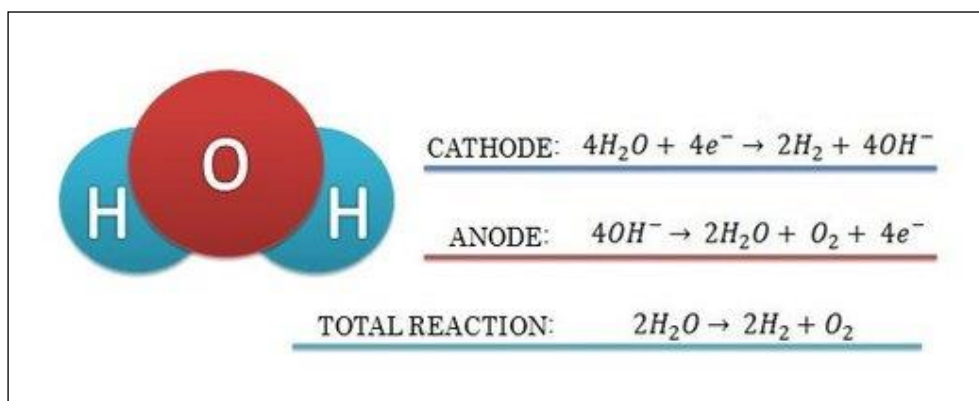


HYDROGEN PRODUCTION BY ELECTROLYSIS OF AQUEOUS SOLUTION OF SODIUM HYDROXIDE

Milica Lukić, Dženan Suljić

Faculty of Technology, University of Tuzla, Univerzitetska 8,
75 000 Tuzla, Bosnia and Herzegovina
lukicmilica987@gmail.com

Hydrogen is an essential element in human life and safe hydrogen production is important because of its properties in gaseous phase. As electrolysis is the simplest process to produce hydrogen, it is important to study the working mechanism in set conditions. The purpose of this research is to study the hydrogen production for various conditions of electrolyte concentrations and volume, as well as the effects of current on the process. The use of this technique could enable controlled hydrogen production in gaseous phase, reduction in energy consumption and in maintenance expenses, but also an increase in the efficiency, durability and safety.



UGAĐANJE REAKCIJSKIH UVJETA MEHANOKEMIJSKE SINTEZE PERHALOGENIRANOG AZOBENZENA

OPTIMIZING THE CONDITIONS OF MECHANOCHEMICAL SYNTHESIS OF PERHALOGENATED AZOBENZENE

Viktorija Medvarić, Katarina Lisac, Nikola Cindro i Dominik Cinčić

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

Horvatovac 102a, Zagreb

viktorija.medvaric@chem.pmf.hr

Azobenzeni su spojevi koji prilikom izlaganja svjetlu mogu reverzibilno izomerizirati (*trans* → *cis*) te ih ta karakteristika čini vrlo zanimljivim spojevima za dizajn obojenih i fotoosjetljivih materijala poput organskih poluvodiča i senzora [1,2]. Fotomehaničko ponašanje azo spojeva rezultat je promjene svjetlosne energije u mehaničku energiju, izomerizacija je brza i rezultira značajnim promjenama u optičkim i fizičkim karakteristikama [2]. Prema literaturnim podatcima sinteza azobenzenâ najčešće se provodi tradicionalnom metodom u otopini [3], a u posljednje vrijeme koristi se i mehanokemijski pristup [4,5].

U ovom radu proučavana je mehanokemijska sinteza *cis*- i *trans*-1,2-bis(2,3,5,6-tetrafluor-4-jodfenil)diazena iz 1,2,4,5-tetrafluorjodanilina (**itfa**). Promjenom reakcijskih uvjeta (trajanje mljevenja, vrsta i količina oksidansa, količina pomoćne krutine za mljevenje te vrsta dodane kapljevine) pokušalo se doći do spoznaja o reaktivnosti prekursora te utjecaju različitih reakcijskih uvjeta na ishod sinteze. Reakcije mljevenja provedene su u kugličnom mlinu Retsch MM 200 pri frekvenciji 25 Hz. U svim pokusima korištene su posudice načinjene od smjese pleksiglasa i tflona te dvije čelične kuglice promjera 7 mm. Ishodi reakcija praćeni su tekućinskom kromatografijom visoke djelotvornosti. Kao oksidansi u reakcijama mljevenja korišteni su piridinijev klorokromat, kromov(VI) oksid ili kalijev permanganat. Utvrđeno je da je najbolji prinos željenog produkta dobiven pokusom mljevenja 1,2,4,5-tetrafluorjodanilina i kalijeva permanganata u množinskom omjeru 1:6, uz dodatak 200 mg aloksa kao pomoćne krutine za mljevenje te uz trajanje pokusa od 2 sata. Kao tekućina koja potpomaže mljevenje krutih reaktanata isprobani su acetonitril, benzen, aceton ili voda. Pokazalo se da je najbolji prinos reakcije, s najčišćim produktom, dobiven uz dodatak male količine acetona.

120

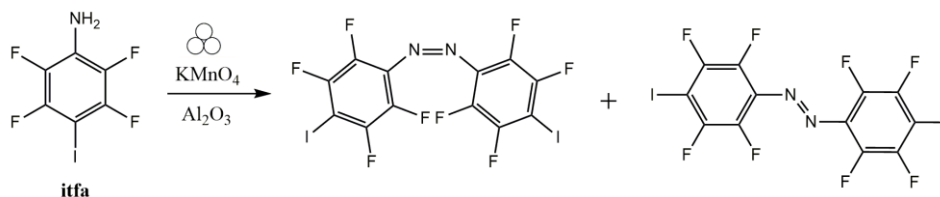
[1] J. M. Abendroth, O. S. Bushuyev, P. S. Weiss i C. J. Barrett, *ACS Nano* **9** (2015) 7746–7768.

[2] O. S. Bushuyev, T. Friščić i C. J. Barrett, *CrystEngComm*, **18** (2016) 7204–7211.

[3] E. Merino, *Chem. Soc. Rev.*, **40** (2011) 3835–3853.

[4] R. Thorwirth, F. Bernhardt, A. Stolle, B. Ondruschka i J. Asghari, *Chem. Eur. J.*, **16** (2010) 13236–13242.

[5] G.-W. Wang, *Chem. Soc. Rev.*, **42** (2013) 7668–7700.



FOTOKATALITIČKA RAZGRADNJA NEONIKOTINOIDNIH INSEKTICIDA U UVJETIMA SIMULIRANOG SUNČEVOG ZRAČENJA

PHOTOCATALYTIC DEGRADATION OF NEONICOTINIOD INSECTICIDES UNDER SIMULATED SOLAR RADIATION CONDITIONS

Antonela Sirovina, Kristina Liber, Marina Duplančić

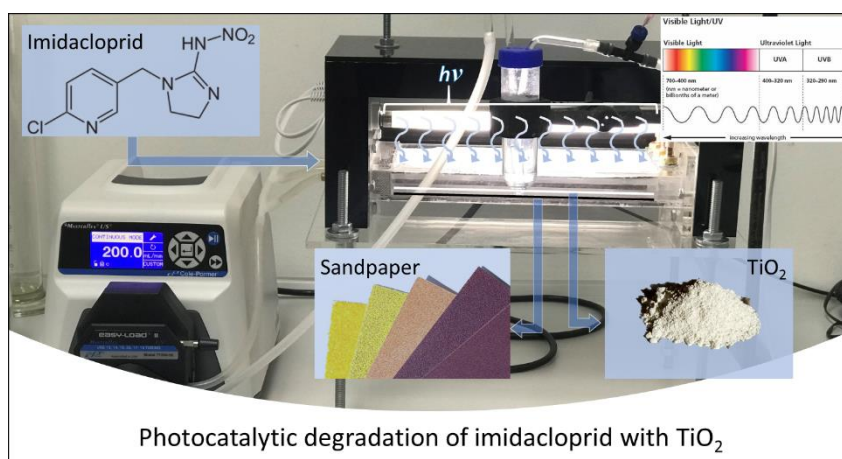
Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije,
Marulićev trg 19, 10 000 Zagreb, Hrvatska

asirovina@fkit.hr

Neonikotonoidni insekticidi (ili neonikotinoidi), uključujući imidakloprid, tiakloprid, tiametoksam, klotianidin i acetamiprid, od 2018. godine uvršteni su na proširenu tzv. "watch" listu Europske komisije unutar Okvirne direktive o vodama zbog potvrđenog rizika i opasnosti za vodeni okoliš. Njihovo uklanjanje jedan je od izazova kojim se bave mnoga istraživanja [1,2]. Cilj ovog rada je razvoj novih fotokatalizatora i inovativnih izvedbi fotokatalitičkih reaktora za razgradnja neonikotinoidnih insekticida u vidljivom dijelu Sunčeva spektra. Fotokatalitičkom razgradnjom uz primjenu Sunčeva zračenja smanjuju se investicijski troškovi procesa u realnom sustavu. Kao predstavnik neonikotinoidnih insekticida koristit se imidakloprid. U okviru istraživanja pripremljen je imobilizirani sloja fotokatalizatora (TiO_2) primjenom različitih nosača katalitički aktivne tvari i odgovarajućeg veziva koje omogućava pripremu stabilnog sloja i prihvatljive mehaničke značajke pri različitim uvjetima primjene. Određene su fizičko-kemijske, morfološke i ostale značajke pripremljenih fotokatalizatora te je testirana njihova fotokatalitička aktivnosti. Provedena je i usporedba fotolitičke i fotokatalitičke razgradnje primjenom različitih izvora zračenja. Pripremljeni fotokatalizatori pokazali su odličnu aktivnost prilikom fotokatalize s UV zračenjem i nešto manju aktivnost primjenom simuliranog Sunčevog zračenja.

[1] K.M. Lee, C.W. Lai, K.S. Ngai, J.C. Juan, Recent developments of zinc oxide based photocatalyst in water treatment technology: A review, *Water Research* 88 (2016) 428-448.

[2] D. Chatterjee, S. Dasgupta, Review: Visible light induced photocatalytic degradation of organic pollutants, *J. Photoch. Photobio. C* 6 (2005) 186–205.



Rad je izrađen u okviru projekta Identifikacija fotokatalitičkih i katalitičkih procesa za obradu otpadnih voda i otpadnih plinova, IN PhotoCat (IP-2018-01-8669) financiranog sredstvima Hrvatske zaklade za znanost (voditeljica projekta: prof. dr. sc. Vesna Tomašić).

PRIPRAVA I KARAKTERIZACIJA ČESTICA CuO SINTETIZIRANIH U MILIREAKTORU

SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF CuO PARTICLES IN MILLIREACTOR

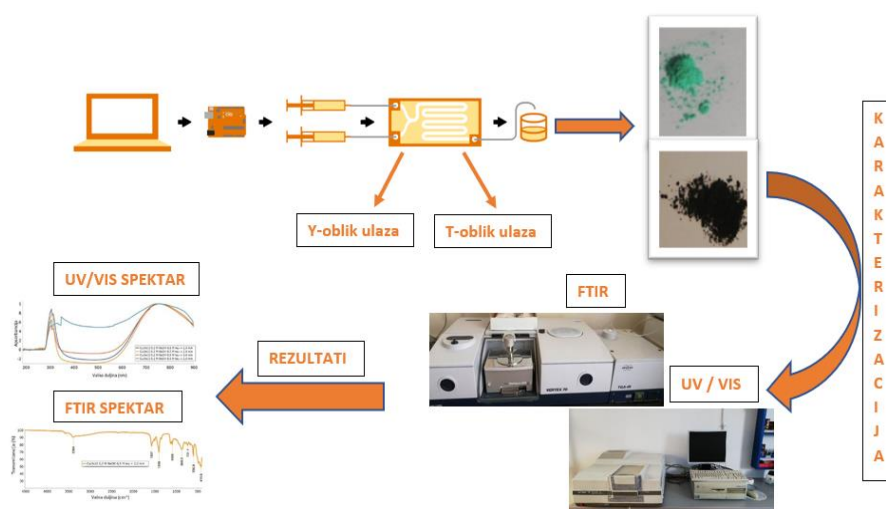
Ivna Vukić, Marija Lukić, Vladimir Dananić

Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije,
Marulićev trg 19, HR-10000 Zagreb
ivukic@fkit.hr

Sinteza čestica CuO odvija se raznim dugotrajnim i relativno opasnim metodama poput hidrotermalne sinteze, elektronanošenja i refluksne kondenzacije. Prednosti sinteze u milireaktoru u odnosu na nabrojane metode su brže dobivanje čestica pri sobnim uvjetima, bez ekstremnih tlakova i temperatura te kontinuirani način proizvodnje. Sintezom u milireaktoru dobivaju se čestice u vremenu zadržavanja, τ od nekoliko minuta. Nedostatak proizvodnje čestica CuO u milireaktorima je začepljenje pri molarnim koncentracijama NaOH ($c > 1,0$ M) uslijed stvaranja velike količine precipitata. Dobivene čestice karakterizirane su kvalitativno UV/VIS i FTIR spektroskopskim metodama i uspoređene s literaturnim referencama. Crne čestice predstavljaju bakrov(II) oksid, što je potvrđeno s FTIR analizom s maksimumom na vrpci 600 cm^{-1} koji predstavlja vibracijski mod rastezanja CuO veza. Apsorpcijski maksimumi oko 300 i 700 nm snimljeni na UV/VIS spektrofotometru također dokazuju da je riječ o česticama CuO. Pošto su sinteze provedene pri različitim reakcijskim uvjetima (vremenima zadržavanja, različitim koncentracijama NaOH, različitim oblicima ulazne sekcije milimiješala) pri čemu su nastale čestice različitih boja (plava, svijetlozelena, smeđa i crna), potrebno je provesti dodatne metode karakterizacije čestica pomoću XRD i SEM morfološke analize kako bi se točno odredilo o kojim česticama je riječ.

122

Ključne riječi: bakrov(II) oksid, milireaktor, UV/VIS, FTIR



Razvoj materijala i proizvoda

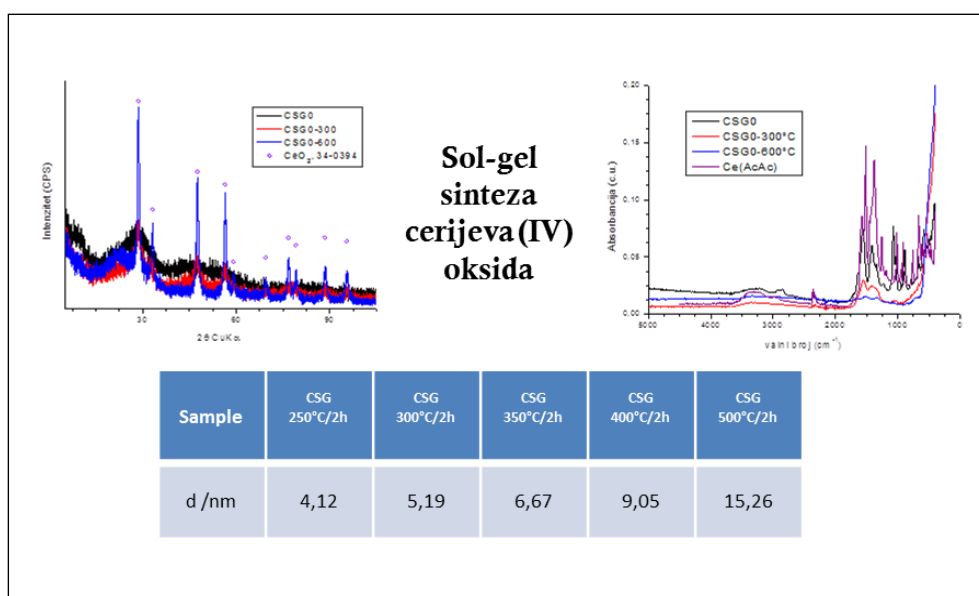
Materials and products development

SOL-GEL SINTEZA CERIJEVA(IV) OKSIDA**SOL-GEL SYNTHESIS OF CERIUM(IV) OXIDE**

Emina Ema Alić, Magdalena Ondrušek, Ivana Katarina Munda,
Stanislav Kurajica, Vilko Mandić

Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije,
Marulićev trg 19, HR-10000 Zagreb
ealic@fkit.hr

U ovom radu sintetiziran je cerijev(IV) oksid (CeO_2) i provedena je njegova karakterizacija. CeO_2 poznati je materijal s vrlo širokim područjem primjene, u koje najčešće spada kao katalizator. CeO_2 ima plošno centriranu kubičnu rešetku fluoritne strukture s dva stabilna oksidacijska stanja. Prijelazom iz Ce^{4+} u Ce^{3+} oksidacijsko stanje, nastaju vakancije kisika zbog kojih se cerijev(IV) oksid odlikuje velikim kapacitetom pohrane kisikovih atoma koji se smještaju u tetraedarske intersticije. CeO_2 je moguće pripremiti nizom različitih metoda, a u ovom slučaju primijenjena je sol-gel sinteza. Sol-gel sinteza ima mnoge prednosti, a neke od njih su jednostavna i ekonomična izvedba koja ne zahtjeva skupu aparaturu niti veliku potrošnju energije. Gel je dobiven miješanjem na magnetskoj miješalici uz refluks u trajanju od 24 h na temperaturi od 60 °C iz cerijeva acetyl-acetonata te metanola i etilen-glikola kao otapala. Nakon starenja i sušenja gela, dobiven je sitan prah čestica nanometarskog reda veličine. Uzorci dobivenog materijala žareni su s prekidima kako bi se dobio čisti cerijev(IV) oksid bez zaostatka organske tvari. Također su provedene analize svih žarenih uzoraka te karakterizacija rendgenskom difrakcijskom analizom (XRD), termogravimetrijskom analizom (TGA), infracrvena spektroskopija s Fourierovom transformacijom (FTIR). Nadalje, pretražnom elektronskom mikroskopijom (SEM) praćena je morfologija uzoraka. Osim toga provedena je kinetika kristalizacije i određena energija aktivacije prema Scottovoj jednačini za neizotermnu kinetiku. Prema rezultatima navedenih analiza utvrđeno je da se žarenjem produkta sol-gel sinteze na 300 °C i 600 °C dobiva kristalinični CeO_2 , s time da na 300 °C zaostaje organske tvari koja daljnjim žarenjem do 600 °C potpuno izgara.



PRIPRAVA SENZORA NA OSNOVI CELULOZE SA SVOJSTVOM EMISIJE IZAZVANE AGREGACIJOM

PREPARATION OF SENSORS BASED ON CELLULOSE WITH AGGREGATION-INDUCED EMISSION PROPERTIES

Helena Berić, Paula Božek, Roko Blažić, Elvira Vidović

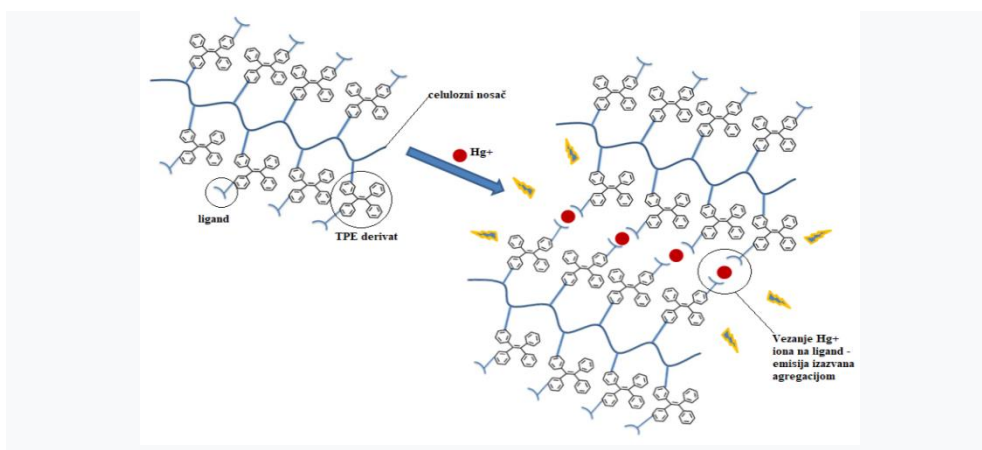
Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije,
Marulićev trg 19, HR-10000 Zagreb

hpisonic@fkit.hr

Na intenzitet luminiscencije klasičnih luminofera znatno utječe njihova koncentracija u otopini. U koncentriranim otopinama luminiscencija klasičnih luminofera se znatno smanjuje uslijed međudjelovanja molekula luminofera što ograničava njihovu primjenu. Nasuprot tome, luminogeni sa svojstvom emisije izazvane agregacijom (EIA) ne emitiraju svjetlost kada su otopljeni već kad se izazove njihova agregacija. S obzirom na to, luminogeni s EIA svojstvima mogu se primjenjivati u koncentriranim otopinama i u krutom stanju. Tetrafeniletan (TPE) jedna je od molekula s EIA svojstvima koja se zbog relativno jednostavne sinteze derivata TPE vrlo često istražuje [1]. Selektivna agregacija derivata TPE djelovanjem neke vanjske pobude (pH, temperatura, otopina iona metala) omogućava njihovu primjenu u senzoricima. Cilj ovog rada je najprije sintetizirati derivate TPE s ligandima koji omogućavaju selektivno kompleksiranje iona žive, a potom kemijskim vezanjem senzorske molekule (derivata TPE) na celulozu pripremiti senzor s EIA svojstvima za određivanje žive. Sinteza derivata TPE provedena je McMurryevom reakcijom. Reakcija je provedena u tetrahidrofuranu pri čemu su derivati benzofenona korišteni kao reaktanti. Kako bi se omogućilo vezanje derivata TPE na celulozu provedena je modifikacija celuloze tosil kloridom.

[1] J. Mei, N.L.C. Leung, R.T.K. Kwok, J.W.Y. Lam, B.Z. Tang, Aggregation-Induced Emission: Together We Shine, United We Soar!, *Chem. Rev.*, 2015., 115(21), 11718-940

125



Slika 1. Shematski prikaz emisije izazvane agregacijom

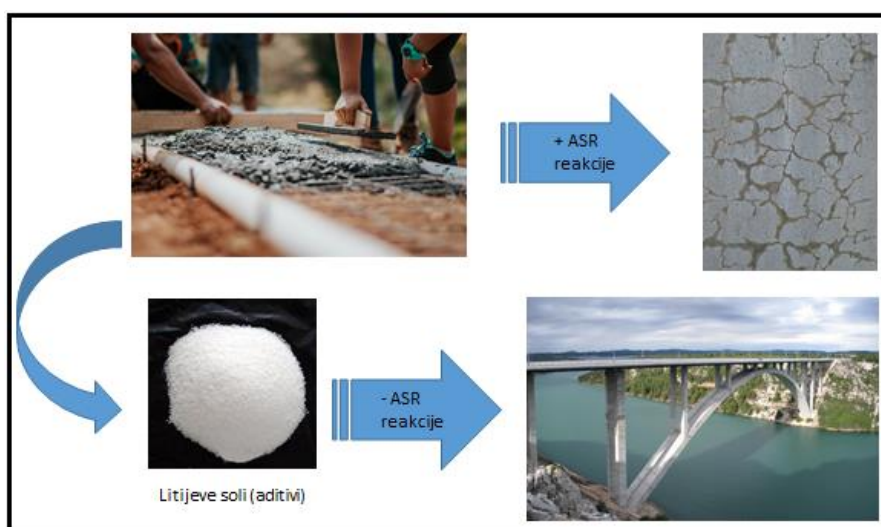
UTJECAJ LITIJEVIH SOLI NA HIDRATACIJU PORTLAND CEMENTA

INFLUENCE OF LITHIUM SALTS ON PORTLAND CEMENT HYDRATION

Marin Božičević, Dominik Horvat, Filip Brleković, Nevenka Vrbos

Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije,
Marulićev trg 19, HR-10000 Zagreb
mbozicevi@fkit.hr

Modifikacijom sastava poroznih silikatnih materijala (Portland cementa) moguće je značajno utjecati na funkcionalna svojstva pripravljenog veziva (kompozita) te time značajno proširiti područje primjene. Alkalno agregatne reakcije (ASR) ili „rak cementa“ je nastanak i bubrenje reakcijskih produkata izrazito alkalne cementne paste i reaktivnih silikatnih sastojaka agregata. Bubrenje produkata reakcije ima utjecaj na vrijeme očvršćivanja, konačnu čvrstoću i količinu produkata hidratacije, a posebice je izraženo u vlažnim uvjetima. U ovom radu cilj je usporediti utjecaj različitih litijevih soli, koje su poznate kao aditivi za sprječavanje alkalno agregatnih reakcija, na razvoj topline hidratacije Portland cementa. Uporabljene otopine litijevih soli (litij sulfat, litij karbonat, litij formijat i litij fluorid) sadrže masu soli jednaku 0,5 %, 1,0 % i 1,5 % mase cementa. Uzorci su pripremljeni s vodocementnim omjerom 0,4. Za mjerenje napredovanja hidratacije korišten je laboratorijski semiizoperabolni kalorimetar. Za identifikaciju produkata hidratacije i utvrđivanje mineralnog faznog sastava korištene su rendgenska difrakcijska analiza (XRD) i infracrvena spektroskopija s Fourierovom transformacijom (FTIR). Ustanovljeno je intenzivnije oslobađanje topline u predindukcijskom razdoblju, što se može pripisati utjecaju litijeva kationa. U razdoblju indukcije i razdoblju ubrzavanja reakcije ustanovljena je razlika u odnosu na referentni uzorak Portland cementa bez dodatka litijevih soli. Litijev karbonat i litijev sulfat djeluju kao ubrzivači, fluorid djeluje kao usporivač, a formijat usporava glavne reakcije. XRD i FTIR analizom nije utvrđeno nastajanje novih faza.



UTJECAJ UVJETA OČVRŠĆIVANJA NA SVOJSTVA POLIAKRILATNIH SMOLA ZA STEREOLITOGRAFIJU

INFLUENCE OF CURING ON THE PROPERTIES OF POLYACRYLATE RESINS USED IN STEREOLITHOGRAPHY

Ivan Karlo Cingesar, Ivan Sušec, Laura Šoić, Domagoj Vrsaljko

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

icingesar@fkit.hr

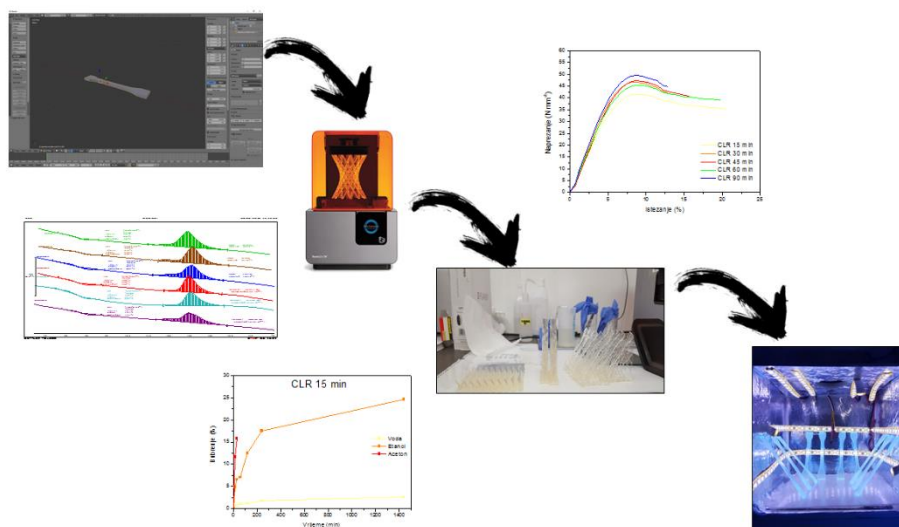
Stereolitografija (SLA) je postupak aditivne proizvodnje koji se koristi za izradu modela i prototipova korištenjem fotokemijskih procesa u kojima svjetlost uzrokuje polimerizaciju. Nakon što se SLA postupkom izradi model, on ostaje na platformi u tzv. „green state” obliku, što znači da proces polimerizacije nije potpuno dovršen. Naknadnim očvršćivanjem, izlaganjem materijala svjetlu i toplini, nastoji se postići veća umreženost modela.

Cilj rada je istražiti utjecaj duljine naknadnog očvršćivanja i različitog kuta ispisa na primjenska svojstva poliakrilatnih smola *Clear* i *HighTemp*. Naknadno očvršćivanje provedeno je u termostiranoj komori pri 60 °C pomoću svjetlosti valne duljine 405 nm. Na kidalici su ispitana mehanička svojstva. Toplinska svojstva određena su diferencijalnom pretražnom kalorimetrijom, površinska mjerenjem kontaktnog kuta te otpornost na otapala bubrenjem (korištena otapala: etanol, aceton i redestilirana voda).

Rezultati pokazuju ovisnost mehaničkih svojstava o vremenu naknadnog očvršćivanja odnosno, povećanjem vremena naknadnog očvršćivanja epruvete postaju krtije i čvršće. Povećanjem vremena naknadnog očvršćivanja umreženost materijala je sve veća pa se DSC-om izmjerena entalpija potpunog umrežavanja smanjuje, baš kao i bubrenje materijala.

Ovaj je rad sufinanciran iz Europskog fonda za regionalni razvoj projektom KK.01.1.1.04.0006.

127



PROIZVODNJA MIKROREAKTORA TEHNOLOGIJOM PROIZVODNJE RASTALJENIM FILAMENTOM

PRODUCTION OF MICROREACTORS BY FUSED FILAMENT FABRICATION TECHNOLOGY

Lucija Fiket, Kristina Sušac, Domagoj Vrsaljko

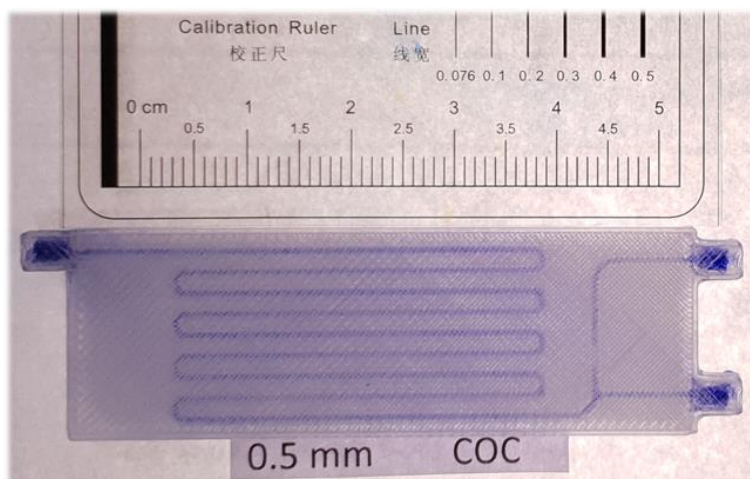
Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije,
Marulićev trg 19, HR-10000 Zagreb

lfiket@fkit.hr

Postoje razne tehnologije 3D-ispisa, a u ovom radu korištena je tehnologija proizvodnje rastaljenim filamentom (FFF, engl. *fused filament fabrication*) kod koje 3D-pisač ispisuje predmet iz digitalnog modela u fizički trodimenzionalni objekt dodavanjem polimernog materijala sloj po sloj. Pomoću CAD programa Fusion 360 za računalni dizajn, dizajnirani su mikroreaktorski sustavi s različitim promjerom mikrokanala i to dimenzija 100 μm , 200 μm , 300 μm , 500 μm , 800 μm i 1000 μm koji će se koristiti za sintezu metilnog estera masnih kiselina (FAME). Mikroreaktorski sustavi zbog svojih malih dimenzija i velike međufazne površine osiguravaju brzo miješanje, dobru regulaciju temperature što je velika prednost u odnosu na klasično izvedene reaktorske sustave. Odabir materijala za izradu mikroreaktora ovisi o mnogo faktora kao što su vrsta kemijske reakcije koja se provodi u sustavu, kompatibilnosti otapala i materijala, mehaničkim zahtjevima, cijeni i dostupnosti na tržištu. Polimerni materijali korišteni za izradu mikroreaktorskih sustava prvenstveno moraju biti kemijski inertni i moraju biti kompatibilni s protokolom izrade. Iz tog razloga korištena su četiri polimerna materijala čija su se kemijska svojstva ispitala metodom bubrenja i u vodi, metanolu, acetonu, ulju, glicerolu i FAME. Materijali koji su korišteni za izradu mikroreaktorskih sustava u ovom radu su: Z-Glass (PETG sa staklenim vlaknima), F43 Tough (smjesa poleolefina), Glassbend te cikloolefinski kopolimer (COC).

Optimiranjem uvjeta 3D-ispisa uspješno su izrađeni mikroreaktorski sustavi dimenzija mikrokanala 800 μm i 1000 μm za sva četiri polimerna materijala čiji su kanali u potpunosti prohodni. Prohodni mikroreaktorski sustavi dimenzija mikrokanala 300 μm i 500 μm uspješno su izrađeni od materijala Z-Glass i COC. Ispisom mikroreaktorskih sustava mikrokanala manjih dimenzija uočeno je kako na određenim dijelovima mikrokanali nisu prohodni ili je prisutan prevelik otpor zbog čega se prohodnost mikrokanala nije mogla u potpunosti ispitati.

Ovaj je rad sufinanciran iz Europskog fonda za regionalni razvoj projektom KK.01.1.1.04.0006.



SENSORY PERCEPTION AND NUTRITIVE VALUE OF GLUTEN-FREE BREAD ENRICHED WITH SUGAR BEET AND APPLE FIBRES

Emilija Fodor, Igor Letić, Marijana Đorđević, Dragana Šoronja-Simović

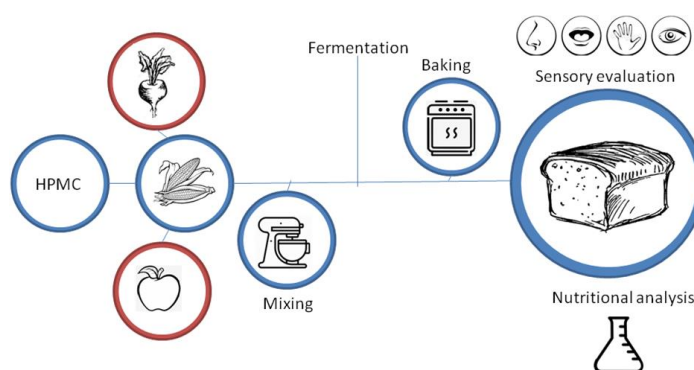
University of Novi Sad, Technological Faculty,
Bulevar Cara Lazara 1, 21000 Novi Sad Serbia
ema.fodor@gmail.com

Lack of gluten as a structure-forming agent in gluten-free (GF) bread production reflects on inferior sensory properties, such as poor flavor and color, a crumbly texture, undeveloped cell structure, faster staling, reduced volume, which do not resemble standard wheat bread. Although a variety of GF flours and refined flours can be used, the most common ingredient in GF bread is starch (corn, rice, potato, or tapioca starch). The use of corresponding raw materials in GF bread results in lower nutrient content compared to wheat counterparts. Dietary fibers, proteins and minerals are major nutrients that GF bread is usually deficient in. Considering the potential health benefits of dietary fibers (cholesterol and fat binding ability, decrease in blood glucose levels), their inclusion in GF bread production is highly recommended in order to obtain a new functional product.

The aim of this study is to observe the effect of sugar beet and apple fibers addition on GF bread sensory properties and nutritional quality. The GF bread was made from a combination of corn flour and corn starch with the addition of hydroxypropylmethylcellulose (HPMC). Used sugar beet fibers (SBF) were obtained after sugar beet pulp chemical modification with alkaline hydrogen peroxide, and apple fibers (AF) were a commercially available product. Both fibers have been added in two different quantities, 3 % and 7 % calculated according to the weight of the corn flour and corn starch blend.

The evaluation of GF bread sensory properties was conducted using a point-based method. The following sensory properties were evaluated: external appearance, crumb appearance, smell and taste. According to the total sum of the obtained points, GF breads were classified into the quality categories. Nutritional quality of GF bread was determined through several different physical analyses which included: moisture content, crude ash content, protein content, total fat content and total dietary fibers content. The carbohydrates content was calculated by difference, rather than analyzed directly.

GF bread formulated with 3 % and 7 % SBF has not shown a difference in color, flavor or aroma, while the addition of AF resulted in a slightly sweet apple flavor and aroma as well as a darker brown color, which was more prominent in sample with 7 % AF. All samples had a high volume and a developed structure with a soft crumb texture. The total dietary fiber content was slightly higher in samples with 3 % and 7% SBF (4.78 % and 6.04 %, respectively) compared to samples with 3 % and 7 % AF (4.47 % and 5.91 %, respectively). All GF bread samples can be classified as sources of dietary fiber according to Serbian regulations as well as the regulations of the European Union because they contain more than 3 g of total dietary fiber per 100 g of product. GF bread formulated with AF also showed higher moisture, total fat and carbohydrates content, while SBF addition resulted in a higher crude ash level.



IZDVAJANJE BIOPOLIMERA HITINA IZ OTPADNIH OKLOPA RAKOVA

EXTRACTION OF CHITIN BIOPOLYMER FROM SHRIMP SHELL WASTE

Marija Fucak, Valentina Kamenar, Gabrijela Prišćan, Zvonimir Katančić

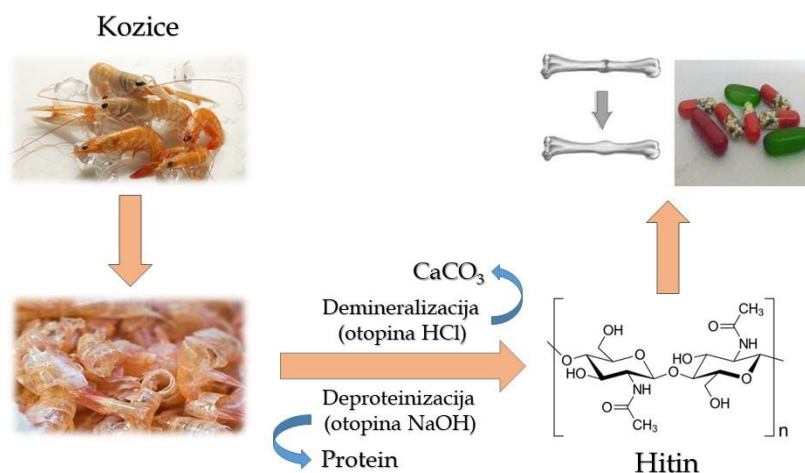
Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije
Marulićev trg 19, 10000, Zagreb
mfucak@fkit.hr

Hitin je polisaharid opće formule $(C_8H_{13}O_5N)_n$. Biokompatibilan je, netoksičan i biorazgradivi polimer, a prisutan je u zelenim algama, kutikulama insekata te u egzoskeletu rakova. Tehnike izolacije hitina su različite jer ovise u velikoj mjeri o sastavu izvora koji znatno varira od jedne do druge vrste. Kod egzoskeleta većina tehnika oslanja se na kemijske procese za ekstrakciju proteina i uklanjanje anorganske tvari.

Otpad životinjskog podrijetla promatran s higijenskog, epidemiološkog i ekološkog stajališta smatra se potencijalno opasnim, a tu pripada i otpad iz industrije prerade kozica i rakova te restoranski ostaci hrane. Izdvajanjem hitina bi se smanjila količina takvog otpada, a dobila bi se vrijedna sirovina jer hitin i njegova modifikacija kitozan imaju primjenu u medicini, inženjerstvu tkiva i kozmetičkoj industriji.

Cilj ovog rada bio je iz oklopa kozica izdvojiti hitin te ga potom okarakterizirati pretražnom elektronskom mikroskopijom, infracrvenom spektroskopijom s Fourierovom transformacijom i termogravimetrijskom analizom. Hitin iz oklopa rakova dobio se procesima demineralizacije i deproteinizacije. Kod demineralizacije su se izmleveni oklopi kozica stavili u otopinu HCl-a kako bi se otopio kalcijev karbonat. Zaostala masa se profiltrirala i posušila, te se podvrgla deproteinizaciji kako bi se razgradili proteini pomoću otopine NaOH. Tijekom eksperimenta odredio se sadržaj vlage, proteina i pepela, kao i postotak demineralizacije i deproteinizacije. Po završetku ovih procesa, kao krajnji produkt, ostao je hitin koji je okarakteriziran ranije navedenim metodama.

Rezultati su pokazali da je navedenim postupkom hitin uspješno izdvojen te je kao takav prikladan za daljnje modificiranje u kitozan.



ISPITIVANJE UTJECAJA UV ZRAČENJA NA KOMPOZITE POLIETILENA S METALNIM OKSIDIMA

INFLUENCE OF UV RADIATION ON POLYETHYLENE METAL OXIDE COMPOSITES

Vanja Gilja, Ana-Marija Vican, Ana Peršić, Ljerka Kratožil Krehula

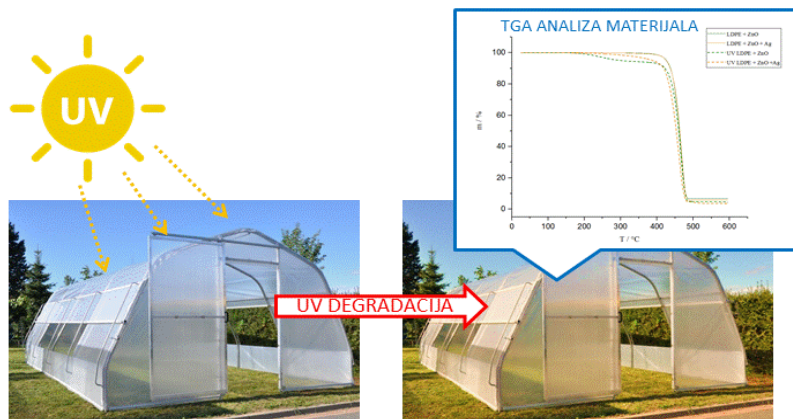
Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije
Marulićev trg 19, 10000, Zagreb
vgilja@fkit.hr

Široka primjena polimernih materijala iziskuje povećanje njihove stabilnosti prema utjecaju brojnih okolišnih čimbenika. Jedan od nepoželjnih procesa degradacije polimernih materijala je djelovanje UV zračenja koje može izazvati narušavanje mehaničkih, kemijskih i/ili reoloških svojstava pri čemu polimerni materijali gube kvalitetu i primjenska svojstva. S ciljem poboljšanja stabilnosti materijala na UV zračenje, koriste se brojne organske i anorganske aktivne komponente kao što su aditivi/punila koji sprečavaju ili usporavaju proces degradacije. Aditivi/punila u polimernom kompozitu djeluju kao apsorbirajući koji selektivno apsorbiraju UV zračenje te ga emitiraju u obliku topline pri čemu štite polimernu matricu od degradacije. Zbog svog netoksičnog djelovanja na polimerne materijale, kao UV blokatori najčešće se primjenjuju metalni oksidi ZnO, TiO₂ i SiO₂.

U ovom radu pripremljeni su i ispitivani polimerni kompoziti na bazi polietilena niske gustoće (LDPE) s dodatkom metalnih oksida (TiO₂, ZnO i SiO₂) s potencijalnim svojstvom UV blokiranja te kompoziti istih metalnih oksida uz dodatak čestica srebra. Utjecaj UV zračenja na pripremljene kompozitne uzorke ispitan je UV starenjem u UV komori Suntest ($\lambda = 290$ nm) u vremenskom periodu od 10 dana.

Karakterizacija uzoraka provedena je FTIR spektroskopijom i termogravimetrijskom analizom. Rezultati su pokazali da se dodatkom čestica metalnih oksida povećala stabilnost i otpornost na UV zračenje polietilena niske gustoće. Kod nekih uzoraka vidljiva je manja otpornost prema degradaciji koja se pripisuje aglomeraciji dodanih čestica metalnih oksida.

Ključne riječi: degradacija, metalni oksidi, polietilen niske gustoće (LDPE), polimerni kompoziti, UV zračenje



Proces degradacije polimernih materijala djelovanjem UV zračenja

HALOGENSKA VEZA U HALOGENPIRIDINIJEVIM SOLIMA HEKSACIJANOŽELJEZOVE(III) KISELINE

HALOGEN BONDS IN HALOGENOPYRIDINIUM HEXACYANOFERRATE(III) SALTS

Nikola Jakupec, Vladimir Stilinović

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

Budući da su Lewisove baze te samim time i dobri akceptori vodikove veze, heksacijanoferati (**hcf**) se koriste kao građevne jedinice u kristalnom inženjerstvu i kao takvi stvaraju lance, dvodimenzijske i trodimenzijske metaloorganske mreže, što je pokazano za kalijeve soli [1] i protonirane heksacijanoferate(II) [2]. Osim akceptora vodikove veze, heksacijanoferati(II) mogu biti akceptori halogenske veze [3], a nedavno je to pokazano za protonirane heksacijanoferate(II)[4]. Protonirani heksacijanoferati(III) do sada još nisu korišteni kao akceptori halogenske veze.

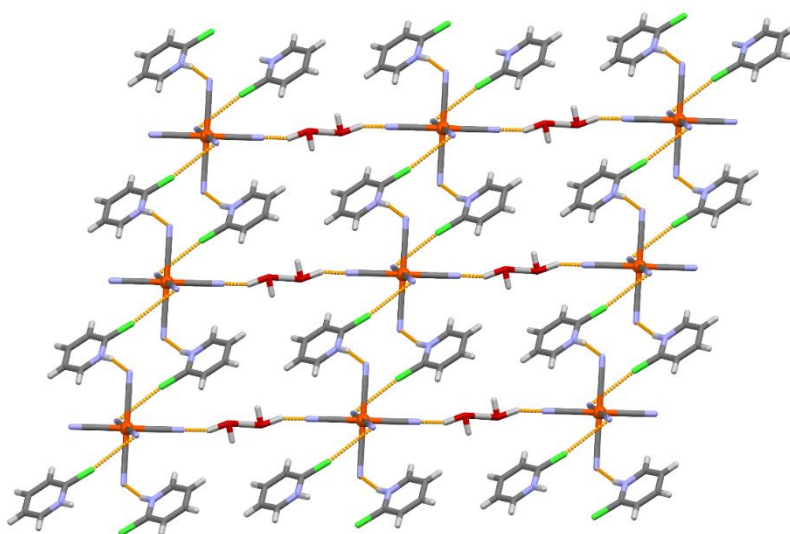
Kako bi se proučio utjecaj halogenske veze na mreže protoniranih heksacijanoferata(III), heksacijanoželjezova(III) kiselina (H_3hcf) pomiješana je sa donorima halogenske veze: 2-klorpiridinom (**2-Clpy**), 3-klorpiridinom (**3-Clpy**) i 3-brompiridinom (**3-Brpy**). Nastali kristali analizirani su tehnikom difrakcije rentgenskog zračenja na monokristalu. Pronađeno je da u slučaju **2-Clpy** i **3-Brpy** nastaju dvodimenzijske mreže hcf^{3-} iona koji su međusobno premošteni Zundelovim ionima ($H_5O_2^+$), dok su u slučaju **3-Clpy** anioni premošteni s dvama **3-ClpyH⁺** ionima. Analizom elektrostatskog potencijala mapiranog na Hirschfeldovu plohu zaključeno je kako jedino u slučaju **2-Clpy** nastaje halogenska veza (udaljenost $Cl \cdots N$ je 3,317 Å s kutem od 168,59°). Te interakcije, zajedno s vodikovim vezama, premošćuju različite slojeve hcf^{3-} mreža. U slučaju **3-Brpy** vodikove veze i $Br \cdots N$ kontakti premošćuju slojeve hcf^{3-} mreža, dok u **3-Clpy** slojevi mreža nisu premošteni, već se slažu jedan na drugi kao rezultat kristalnog pakiranja.

[1] B. Yan, H. D. Wang, Z. D. Chen, *J. Mol. Struct.* 569, (2001), 65.

[2] I. Cvrtila, V. Stilinović, *Cryst. Growth Des.*, 17 (2017), 6793-6800.

[3] J. E. Ormond-Prout, P. Smart, L. Brammer, *Cryst. Growth Des.*, 12, (2012), 205.

[4] N. Jakupec, V. Stilinović, *Halogen Bonding in Halogenopyridinium Hexacyanoferrates*, The Twenty-Sixth Croatian-Slovenian Crystallographic Meeting, Poreč, 2018, Book of Abstracts str. 28.



1D I 2D POROZNE STRUKTURE BAKROVIH(II) KOMPLEKSA SA SARKOZINOM I HETEROCIKLIČKIM BAZAMA

1D AND 2D POROUS STRUCTURES OF NOVEL COPPER (II) COMPLEX COMPOUNDS WITH SARCOSINE AND HETEROCYCLIC BASES

Mia Jurković, Darko Vušak, Biserka Prugovečki,
Dubravka Matković-Čalogović

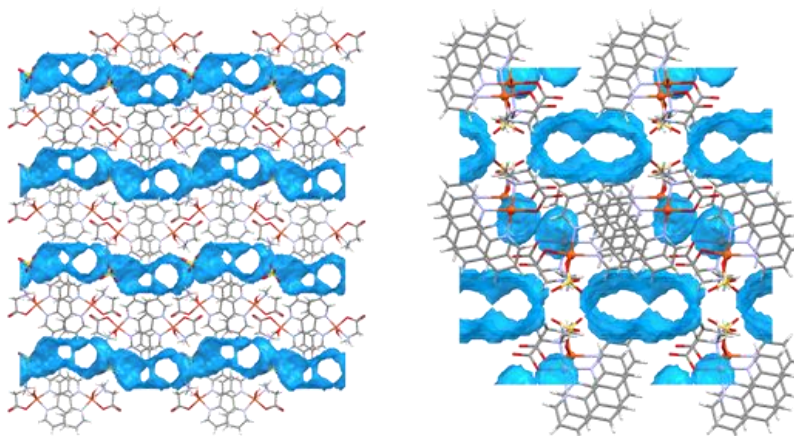
Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu,
Horvatovac 102a, 10000 Zagreb
mjurkovic1@chem.pmf.hr

Bakrovi(II) kompleksi s aminokiselinama i heterocikličkim bazama često su predmet proučavanja u kristalnom inženjerstvu zbog njihove sposobnosti da grade različite arhitekture, a istraživani su i zbog antitumorske aktivnosti [1-2]. Kristalne strukture takvih spojeva su porozne, što znači da imaju sposobnost apsorpcije molekula otapala ili drugih tvari u prilagođenim uvjetima [1]. U ovom radu biti će predstavljena otopinska sinteza i strukturalna karakterizacija dva bakrova(II) kompleksa s fenantrolinom, odnosno 2,2'-bipiridinom te sarkozinom. Kompleks $[\text{Cu}(\text{Sar})(\text{H}_2\text{O})(\text{bpy})]_2\text{SO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ (**1**) je dimernog oblika te je uočeno povezivanje $\text{C}=\text{O} \cdots \text{Cu}$ interakcijama (slika 1). Molekule vode, koje zauzimaju 20,7 % volumena, tvore dvodimenzionalne porozne kanale između kojih su smješteni kompleksni kationi. Spoj kristalizira u monoklinskom sustavu, u prostornoj grupi $P 2_1/c$, a parametri jedinične ćelije su: $a = 11,6921(3) \text{ \AA}$, $b = 23,7345(11) \text{ \AA}$, $c = 13,4122(8) \text{ \AA}$, $\beta = 90,652(4)^\circ$. Kod kompleksa $[\text{Cu}(\text{Sar})(\text{H}_2\text{O})(\text{Phen})][\text{Cu}(\text{SO}_4)(\text{Sar})(\text{phen})] \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ (**2**), prisutni su beskonačni jednodimenzionalni kanali formirani nekovalentnim interakcijama te svojevrsno slaganje u lance. U kanalima se nalazi po 6 molekula vode, dok je jedna molekula vode zarobljena u diskretne džepove pri čemu ukupni udio vode u strukturi iznosi 21,6 % (slika 1). Kompleks **2** kristalizira u rompskom sustavu, u prostornoj grupi $Pbcm$ s parametrima jedinične ćelije: $a = 24,3101(12) \text{ \AA}$, $b = 7,3030(5) \text{ \AA}$, $c = 20,8781(10) \text{ \AA}$.

133

[1] D. Vušak, B. Prugovečki, D. Milić, M. Marković, I. Petković, M. Kralj i D. Matković-Čalogović, *Cryst. Growth Des.* **17** (2017) 6049.

[2] X. Y. Le, S. Liao, X. P. Liu i X. L. Feng, *J. Coord. Chem.* **59** (2006) 985.



Slika 1. Kristalne strukture kompleksa **1** (lijevo) i kompleksa **2** (desno). Plavom bojom su označene plohe koje omeđuju kristalizacijske vode.

UTJECAJ OTAPALA NA KRISTALIZACIJU U ČVRSTOM STANJU BAKROVIH(II) KOMPLEKSA S L-TREONINOM I HETEROCIKLIČKIM BAZAMA

INFLUENCE OF SOLVENT ON SOLID STATE CRYSTALLIZATION OF COPPER(II) COMPLEXES WITH L-THREONINE AND HETEROCYCLIC BASES

Katarina Ležaić, Darko Vušak, Biserka Prugovečki, Dubravka Matković-
Čalogović

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

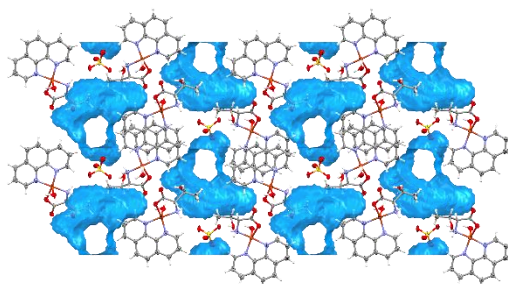
klezaic@chem.pmf.hr

Bakrovi(II) kompleksi s aminokiselinama i heterocikličkim bazama u današnje se vrijeme često istražuju u kontekstu antitumorskih aktivnosti te kao modelni spojevi za istraživanje interakcija između metala i proteina. Također su zanimljivi u kristalnom inženjeringu zbog formiranja velikog broja različitih samoudružujućih kompleksa u čvrstom stanju [1–3]. Zbog porozne strukture, ti kompleksi imaju sposobnost apsorpcije ili desorpcije molekula otapala i imaju potencijalnu primjenu u skladištenju istih ili drugih gostujućih molekula [4].

Prikazani su rezultati istraživanja utjecaja različitih vrsta otapala (voda, metanol, smjesa vode i metanola) na kristalnu strukturu novo sintetiziranih bakrovih(II) kompleksa s L-treoninom i heterocikličkim bazama (1,10-fenantrolin (phen) ili 2,2'-bipiridin (bpy)) [5]. Izmjena otapala provedena je u čvrstom stanju izlaganjem parama otapala (engl. *aging*), a provedena je mehanokemijska sinteza proučavanih spojeva uz različita otapala i različite hidrate bakrovog(II) sulfata. Kontrolirajući količinu vode i metanola u otopini, otopinskom sintezom su dobiveni različiti solvati proučavanih kompleksnih spojeva.

134

- [1] X. Y. Le, S. Liao, X. P. Liu, X. L. Feng, *J. Coord. Chem.* 56 (2006) 985.
- [2] S. R. Liao, X. Y. Le, X. L. Feng, *J. Coord. Chem.* 61 (2008) 847.
- [3] M. T. Bordignon Luiz, B. Szpoganicz, M. Rizzoto, M. G. Basallote, A. E. Martell, *Inorg. Chim. Acta* 287 (1999) 134.
- [4] D. Vušak, B. Prugovečki, D. Milić, M. Marković, I. Petković, M. Kralj, D. Matković-Čalogović, *Cryst. Growth Des.* 17 (2017) 6049.
- [5] K. Ležaić, D. Vušak, B. Prugovečki, D. Matković-Čalogović, *Sinteza i strukturna karakterizacija bakrovih(II) kompleksa s L-treoninom i heterocikličkim bazama*, 6. simpozij studenata kemičara, Zagreb, 26.10.2019.



Slika 1. Kristalna i molekulska struktura spoja
 $[\text{Cu}(\text{L-Thr})(\text{H}_2\text{O})(\text{phen})]_2\text{SO}_4 \cdot 11\text{H}_2\text{O}$ i beskonačni 1D kanali vode (plave plohe).

Istraživanje je financirano sredstvima Hrvatske zaklade za znanost, projekt br. IP-2014-09-4274.

KOKRISTALIZACIJA TRIMETILFENILAMONIJEVOG JODIDA S PERFLUORIRANIM DONORIMA HALOGENSKE VEZE

COCRYSTALLIZATION OF TRIMETHYLPHENYLAMMONIUM IODIDE WITH PEFLUORINATED HALOGEN BOND DONORS

Marin Liović, Vladimir Stilinović, Dominik Cinčić

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

mliovic@chem.pmf.hr

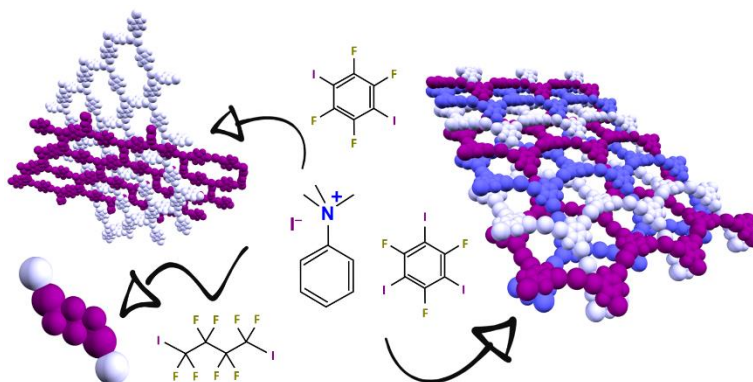
Halogenska veza je nekovalentna interakcija između Lewisove baze (akceptora) i atoma halogena kovalentno povezanog sa skupinom koja dobro izvlači elektronsku gustoću (donora). Među mnogim proučavanim akceptorima – atomi kisika, dušika, halogeni atomi, π -sustavi i dr. – posebno se ističu halogenidni anioni. Negativnog su naboja što ih čini boljim Lewisovim bazama od kovalentno vezanih atoma halogena i sferični su što otvara mogućnost istovremenog ostvarivanja većeg broja interakcija. Ovisno o odabranom kationu, halogenidu i donoru halogenske veze, ostvarene halogenske veze mogu biti raznih geometrija što je pak u svezi s kristalnim pakiranjem i posljedično, pripremljeni kokristali mogu imati drugačija fizikalna i kemijska svojstva.

Kako bismo izučili halogenide kao akceptore halogenske veze, u ovome radu pripremljeni su kokristali trimetilfenilamonijevo jodida (A^+I^-) s 1,4-dijodoktafluorbutanom (**ofib**), 1,4-dijodtetrafluorbenzenom (**14tfib**) i 1,3,5-trijodtrifluorbenzenom (**135tfib**). Svi su kokristali pripremljeni iz etanolnih otopina soli i odgovarajućih donora evaporacijom otapala. Produkti su okarakterizirani difrakcijom rentgenskog zračenja u jediničnom kristalu. U sva tri kokristala prisutne su halogenske veze $I \cdots I^-$, no, njihove se geometrije znatno razlikuju. U kokristalu s **ofib** prisutni su diskretni $I^- \cdots \text{ofib} \cdots I^-$ trimeri, dok u kokristalima s **14tfib** nastaju 2D-mreže povezivanjem donora i jodida kao tritopičnim akceptorom. 2D-mreže drugačije topologije prisutne su u kokristalu s tritopičnim donatorom – **135tfib** – gdje je jodid ditopičan akceptor i ostvaruje gotovo linearan motiv $I^- \cdots I^- \cdots I^-$. Kroz ova je tri primjera istaknuta sposobnost jodida u tvorenju supramolekulskih struktura različitih geometrija i topologija. Daljnje bi istraživanje moglo ukazati na (ne)predvidljivost takvih motiva u sličnim sustavima što je od interesa za kristalno inženjerstvo materijala koji se temelje na halogenskim vezama.

[1] J. Grebe, G. Geiseler, K. Harms, K. Dehnicke, *Z.Naturforsch.,B:Chem.Sci.* **54** (1999) 77.

[2] J. Viger-Gravel, S. Leclerc, I. Korobkov, D. L. Bryce, *CrystEngComm* **15** (2013) 3168.

[3] K. Lisac, D. Cinčić, *Crystals* **7** (2017) 363.



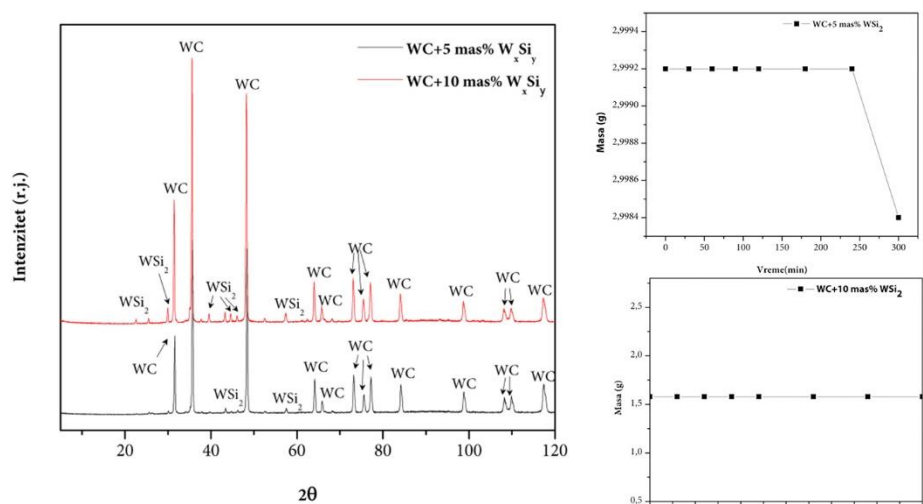
SINTERING AND CHARACTERIZATION OF TUNGSTEN BASED REFRACTORY COMPOSITES

Jelena Luković, Marija Prekajski Đorđević, Tamara Minović-Arsić,
Branko Matović

“Vinča“ Institute of Nuclear Sciences, University of Belgrade, Belgrade, Serbia
jelenal@vin.bg.ac.rs

Tungsten based refractory materials have excellent stability at high temperatures, high melting point, very high hardness, low friction coefficients, low reactivity, high oxidation resistance, and good thermal and electrical conductivity. Therefore, these materials are suitable for application in hard metal industry. In this work, composite materials made of commercial tungsten carbide (WC) and homemade tungsten silicides (WSi_2 and W_5Si_3) were prepared. Optimal synthesis conditions (heating temperature and time of heating) for synthesis of tungsten silicides from elementary powders were found. Obtained silicide powders were used as additives in different mass percentages (5 and 10 wt% of silicides) in WC. Then, mixtures were spark plasma sintered at 1600 °C at a heating rate of 100 °C/min and a load of 50 MPa for 5 min in a vacuum. Nanoindentation tests were performed on sintered samples, as well as cavitation erosion testing accompanied by the profilometry measurements to examine changes in mass and surface properties. Microstructure and morphology were determined by scanning electron microscopy (SEM). It was found that these materials exhibit great cavitation erosion resistance with the minimal mass loss in spite of their high porosity.

136



UTJECAJ DODATKA ETERIČNOG ULJA BOSILJKA NA KVALITETU SVJEŽIH KOBASICA

EFFECT OF BASIL ESSENTIAL OIL ON FRESH SAUSAGE QUALITY

Marić Đorđe, Momčilo Krulj

University of Novi Sad, Faculty of Technology Novi Sad, Bul. cara Lazara 1, 21000 Novi Sad, Serbia

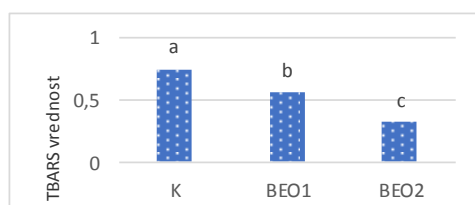
maricjordje997@gmail.com

Svježe kobasice su jedni od najzastupljenijih proizvoda od mesa na tržištu Republike Srbije. Pored mikrobiološkog kvarenja, oksidacija lipida predstavlja najznačajniji uzrok kvarenja ovih proizvoda. U cilju smanjenja oksidacije lipida koriste se sintetski i prirodni antioksidansi. Zbog potencijalno toksičnog djelovanja i opasnosti po zdravlje ljudi upotreba sintetskih antioksidanata (BHT, BHA, TBHQ) je limitirana. Stoga, u posljednje vreme naglo raste potražnja za prirodnim aditivima, kao alternativni za sintetske (hemijske) aditive. Zahvaljujući snažnom antioksidativnom i antimikrobnom potencijalu, eterično ulje bosiljka nalazi sve veću primjenu u prehrambenoj industriji.

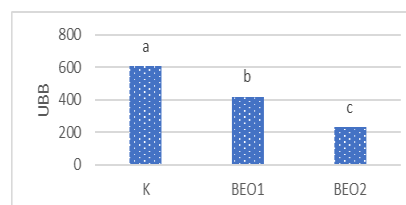
U ovom radu ispita utjecaj dodatka eteričnog ulja bosiljka (BEO) na kvalitetu svježih kobasica. Nadjev za izradu svježih kobasica proizveden je korištenjem svinjskog mesa II kategorije (70 %), svinjskog čvrstog masnog tkiva (27 %), kuhinjske soli (2 %) i začina (1 %). U tako formiran nadjev dodavano je ulje bosiljka dobiveno postupkom hidrodestilacije. Proizvedene su tri grupe kobasica: s dodatkom 0,075 $\mu\text{L/g}$ BEO (BEO1), 0,150 $\mu\text{L/g}$ BEO (BEO2) i kobasice kontrolne grupe (bez dodatka BEO). Sve tri grupe kobasica punjene su u svinjsko tanko crijevo, hladene i čuvane na temperaturi od 4 °C tokom 7 dana. Oksidativna stabilnost kobasica određena je korištenjem TBARS testa (mg malondialdehida/kg), dok je mikrobiološki profil kobasica utvrđen preko ukupnog broja aerobnih mezofilnih bakterija (UBB), *Salmonella* spp., *E. coli* i *L. monocytogenes*. Statistička obrada podataka provedena je korištenjem Duncan testa.

Utjecaj dodatka eteričnog ulja bosiljka na oksidativnu i mikrobiološku stabilnost svježih kobasica prikazana je na slikama 1 i 2, respektivno. Tokom 7 dana čuvanja kobasice proizvedene sa dodatkom eteričnog ulja bosiljka imale su statistički značajno ($p < 0,05$) manje TBARS vrijednosti u usporedbi s kobasicama kontrolne grupe (Slika 1). Na kraju perioda skladištenja (7. dan), samo je u kobasici BEO2 grupe utvrđena TBARS vrijednost ispod 0,5 mg malondialdehida/kg. TBARS vrijednost u koncentraciji od 0,5 mg malondialdehida/kg se smatra kao granična za pojavu užglosti u proizvodima od mesa. Dodatak eteričnog ulja bosiljka utjecao je statistički značajno ($p < 0,05$) na redukciju kolonija aerobnih mezofilnih bakterija (Slika 2). *Salmonella* spp., *E. coli* i *L. monocytogenes* ni u jednoj od ispitanih kobasica nisu izolirani.

Na osnovu rezultata može se zaključiti da se eterično ulje bosiljka može koristiti kao prirodni antioksidant i antimikrobni agens u proizvodnji svježih kobasica.



Slika 1. TBARS vrijednost svježih kobasica nakon 7 dana skladištenja



Slika 2. UBB u svježim kobasicama nakon 7 dana skladištenja

KINETIKA OKRUPNJAVANJA CERIJEVA(IV) OKSIDA DOPIRANOG MANGANOM

COARSENING KINETICS OF MANGANESE DOPED CERIA

Monika Mihaljević¹, Ivana K. Munda¹, Katarina Mužina¹, Gordana Matijašić¹, Goran Dražić², Stanislav Kurajica¹

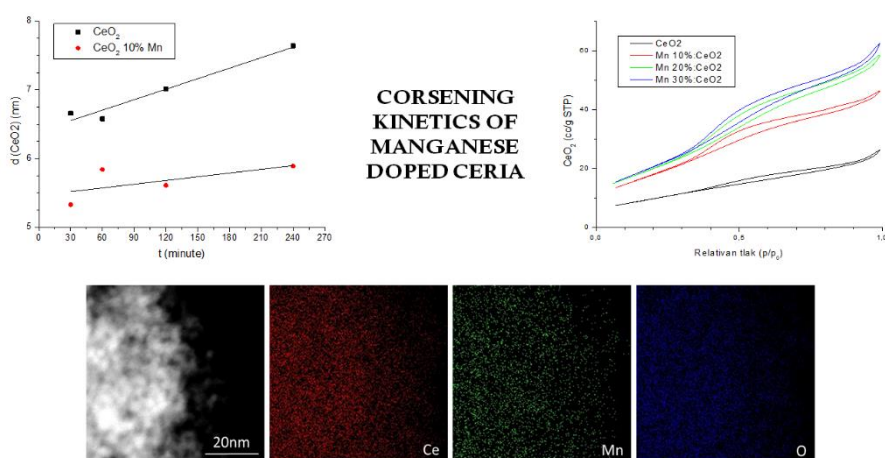
¹Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Marulićev trg 19, Zagreb, Hrvatska

²National Institute of Chemistry, Hajdrihova 19, SI-1001 Ljubljana, Slovenia
mmihaljevic997@gmail.com

Cerijev(IV) oksid, CeO_2 koristi se kao katalizator s različitim primjenama u području istraživanja stanja okoliša. Njegova dobra katalitička svojstva pripisuju se mogućnostima stvaranja vakancija kisika, visokoj mobilnosti kisika i kapacitetu skladištenja kisika unutar rešetke. Različiti manganovi oksidi imaju visoku katalitičku aktivnost te se vjeruje da će ugradnja Mn atoma u kristalnu rešetku CeO_2 poboljšati njegova katalitička svojstva.

Nanokristali čistog CeO_2 te dopiranog manganom u različitim udjelima, pripremljeni su hidrotermalnom sintezom. Prednosti ovakvog pristupa su sinteza u jednoj reakcijskoj posudi, ekonomičnost te okolišna prihvatljivost, obzirom da je omogućena sinteza nanočestica pri niskim temperaturama u samo jednom koraku. Uzorci su termički obrađeni na više temperatura kako bi se pratila termička stabilnost i aglomeracija uzoraka. Također je na uzorcima praćena izotermna kinetika okrupnjavanja nanočestica. Veličina čestica određena je Scherrer-ovom metodom iz difraktograma rendgenske difrakcije uzoraka, dok je specifična površina pripremljenih nanočestica određena preko adsorpcijsko-desorpcijskih izoterma dušika. Primjenom Arrhenius-ove jednadžbe određene su energije aktivacije rasta kristala za sve uzorke. Primjećeno je povećanje energije aktivacije dopiranih uzoraka u odnosu na čisti CeO_2 . Morfologija pripremljenih uzoraka praćena je transmisivskim elektronskim mikroskopom (TEM).

138



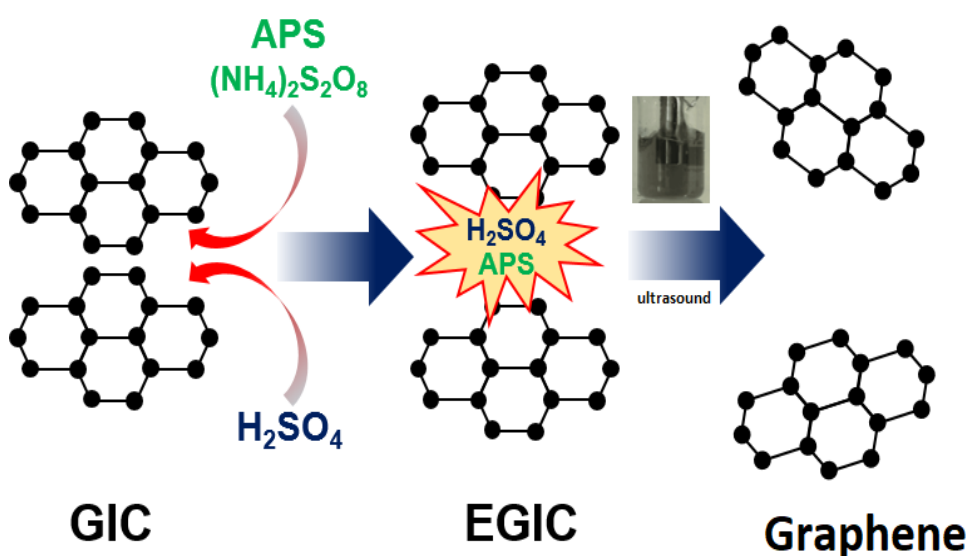
GRAFEN IZ PERSULFATOM INTERKALIRANOG GRAFITA

GRAPHENE OBTAINED FROM PERSULFATE INTERCALATED GRAPHITE

Klara Perović, Katarina Belošević, Marin Kovačić, Hrvoje Kušić

Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije
Marulićev trg 19, 10000 Zagreb, Hrvatska
kperovic@fkit.hr

Recently, great attention has been put on the development of graphene and graphene-based nanomaterials (e.g. graphene/carbon nanotubes (CNTs), graphene/metal oxides). Graphene definition applies not only to a monolayer of carbon atoms but also to a few-layered and multi-layered graphene materials. Even though graphene monolayers provide the highest performance in various applications, they are very expensive and quite difficult to work with because of their tendency to agglomerate in dry form and suspensions. Thus, multilayered graphene provides a better effect-to-cost ratio in most applications. Wider application of such materials requires the development of an effective, inexpensive and scalable process for their production, and the development of one such method was the focus within this work. Specifically, the purpose of this work was to explore the possibility of obtaining multi-layered graphene materials from expanded graphite formed by thermal expansion of graphite intercalated with a solution of ammonium persulfate in sulfuric acid, followed by ultrasonic exfoliation of expanded graphite intercalation compounds (EGIC) in the solution of sodium lauryl sulfate. The obtained materials were characterized by SEM, FTIR, and TGA techniques, and compared with the commercial graphene A12 (Graphene Laboratories).



UTJECAJ MOLEKULSKIH MEĐUDJELOVANJA NA SVOJSTVA MJEŠAVINA MINERALNIH I OBNOVLJIVIH DIZELSKIH GORIVA

EFFECT OF MOLECULAR INTERACTIONS ON PROPERTIES OF MINERAL AND RENEWABLE DIESEL BLENDS

Mario Pipunić¹, Lucija Konjević², Fabio Faraguna³, Ante Jukić³

¹Cirrus centar d.o.o., Zlatka Šulentića 4, 10 000 Zagreb

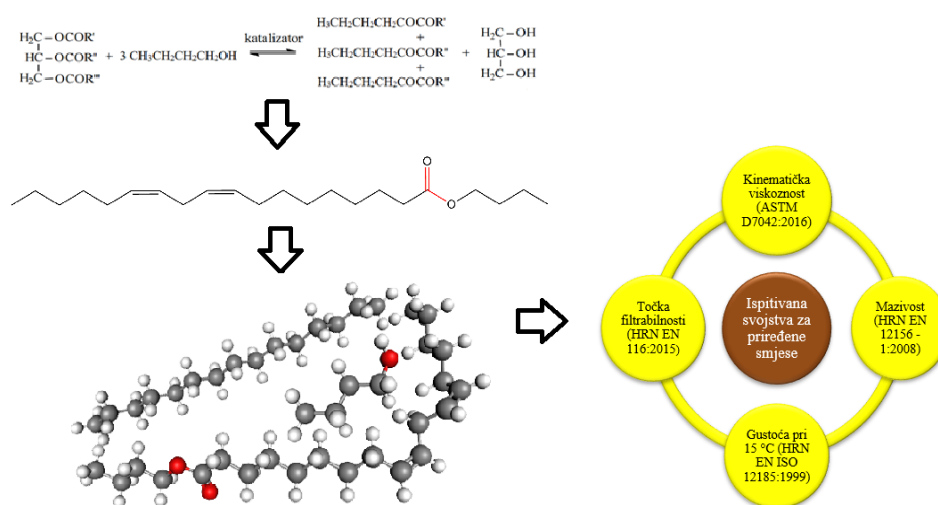
²INA – Industrija nafte d.d., Lovinčićeva ulica 4, 10 000 Zagreb

³Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Sveučilište u Zagrebu,
Marulićev trg 19, 10 000 Zagreb

mario.pipunic@cirrus-centar.hr

Biodizel je ester viših masnih kiselina i nižih alkohola koji se zasebno ili u smjesi s konvencionalnim dizelom upotrebljava kao gorivo za dizelske motore. Mineralni dizel i biodizel se miješaju u različitim udjelima, a dobivaju se goriva poboljšanih svojstava naspram polaznih sastavnica – bolja mazivost u odnosu na čisti mineralni dizel te viša toplinska vrijednost i niža viskoznost u odnosu na čisti biodizel. Kao niži alkohol za proizvodnju biodizela uobičajeno se upotrebljava metanol dobiven iz fosilnih sirovina, ali se u novije vrijeme upotrebljavaju i bioetanol te biobutanol. Butilni esteri viših masnih kiselina (FABE) proizvode se iz *n*-butanola i biljnog ulja reakcijom transesterifikacije pri čemu se butanol u reakcijsku smjesu uvodi u suvišku. Svrha ovog rada je bila istražiti utjecaj molekularnih međudjelovanja na neka svojstva mješavina mineralnog dizela, biodizela (FABE) i *n*-butanola u različitim udjelima. Ispitani su gustoća, kinematička viskoznost, niskotemperaturna filtrabilnost i mazivost za mješavine do udjela FABE od 10 vol. % i do udjela butanola od 10 vol. %. Najveće odstupanje od idealnog ponašanja ustanovljeno je za svojstva kinematičke viskoznosti i osobito mazivosti kojemu je uzrok u molekularnim međudjelovanjima. Smanjenjem udjela FABE i povećanjem udjela butanola u smjesi mazivost iskazana promjerom istrošenosti se smanjuje, pri čemu sadržaj butanola do 10 vol. % ne narušava svojstva mazivosti čistog dizela.

140



SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF Au DOPED TiO₂ NANOMETRIC POWDERS

Marija Prekajski Đorđević, Jelena Luković, Tamara Minović Arsić,
Svetlana Butulija, Branko Matović

"Vinca" Institute of Nuclear Sciences, Materials Science Laboratory, University of
Belgrade, P.O. Box 522, Belgrade, Serbia
prekajski@vinca.rs

Nanostructured titania samples of pure and doped with 1, 2 and 3 mol% of Au were synthesized by a simple synthesis route using titanium(IV)-isopropoxide and water as an agent for controlling hydrolysis and condensation reactions. The phase evolution of titania (TiO₂) was followed by calcination at 400, 600 and 800 °C. The effect of Au doping on the optical, structural and morphological properties of these TiO₂ nanoparticles was investigated. The synthesized powders were examined by field emission scanning electron microscopy (FESEM), and X-ray diffraction (XRD). Single-phase anatase was obtained at low temperature (400 °C) in all cases. The present study indicates that this simple synthesis method can be an effective route to produce efficient photoactive doped anatase nanopowders.

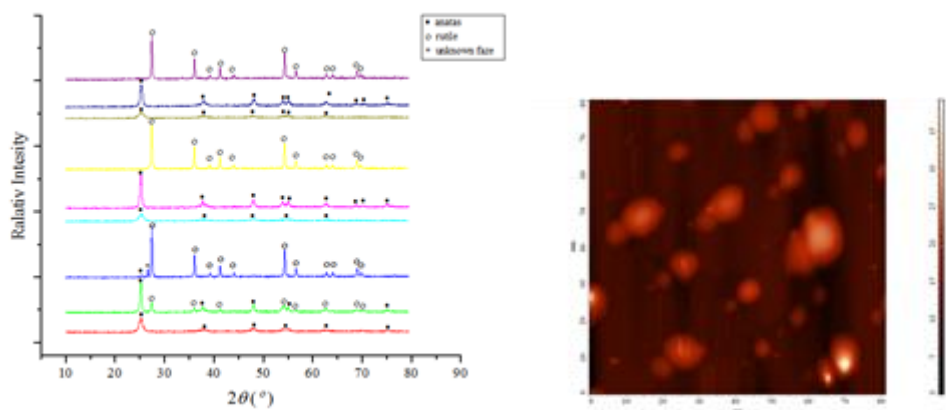


Fig. 1. XRD patterns of synthesized Au doped TiO₂ samples, calcinated at different temperatures, and NC-AFM image of 1 mol% Au doped TiO₂ sample, calcinated at 400 °C.

ELECTROSPINNING TO IMPROVE MEDICAL TEXTILES - ARTIFICIAL LIGAMENT

Luka Savić¹; Pierre-Alexis Mouthuy¹, Maja Somogyi Škoc²

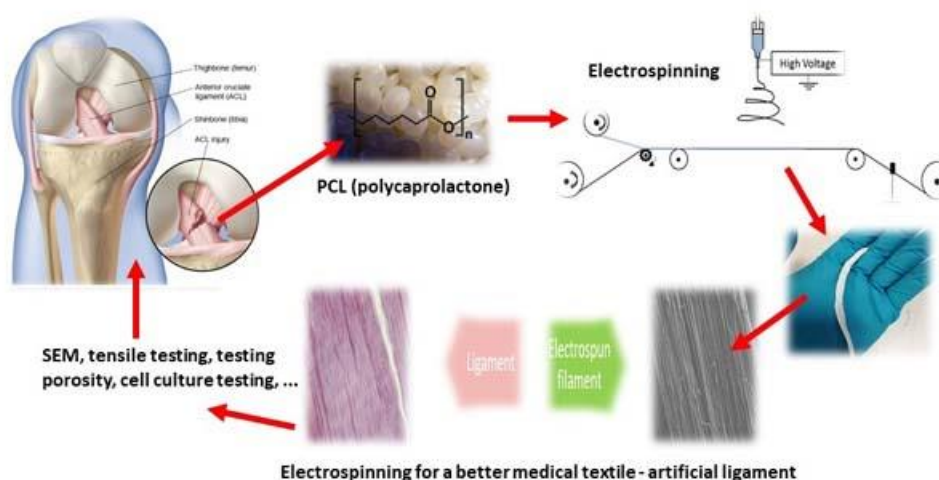
¹Botnar Research Centre, Nuffield Department of Orthopaedics, Rheumatology and Musculoskeletal Sciences, Medical Science Division, University of Oxford, Oxford, United Kingdom

²University of Zagreb Faculty of Textile Technology, Prilaz baruna Filipovića 28a, HR-10000 Croatia
maja.somogyi@tff.hr

Textiles have probably been used for medical applications since human learned to produce tools, mainly as sutures and wound dressings. Nowadays, textile structures are used as permanent implants too and find applications in the field of regenerative medicine. In particular, submicron fibres are attractive because they have the ability to mimic the extracellular matrix surrounding cells in the human body. Based on our previous knowledge and work, the process of electrospinning was modified with the aim to achieve continuous threads made of submicron fibres. This method, using a metal wire as collector, was developed at the Botnar Research Centre, University of Oxford. The threads were produced from polycaprolactone (PCL), a biodegradable and biocompatible polymer. Many PCL devices have already been approved by the FDA (Food and Drug Administration) and are currently in use in clinics. The threads produced by electrospinning showed sufficient tensile strength, measure in a tensile machine, to use them in process of twisting, weaving. SEM (Scanning Electron Microscope) was used to image the electrospun fibres. Overall, the results showed the promising possibility of producing new artificial ligaments using electrospinning.

142

Keywords: Medical textile, Electrospinning, Artificial ligament, Polycaprolactone, Tissue Regeneration, Woven Polycaprolactone



BIODEGRADABLE SCAFFOLDS FOR CARTILAGE CULTURE

Lucija Štefan¹, Anamarija Rogina¹, Maja Pušić², Alan Ivković³, Inga Marijanović², Marica Ivanković¹, Hrvoje Ivanković¹

¹Faculty of Chemical Engineering and Technology, University of Zagreb, HR-10001 Zagreb, Marulićev trg 19, p.p.177, Croatia

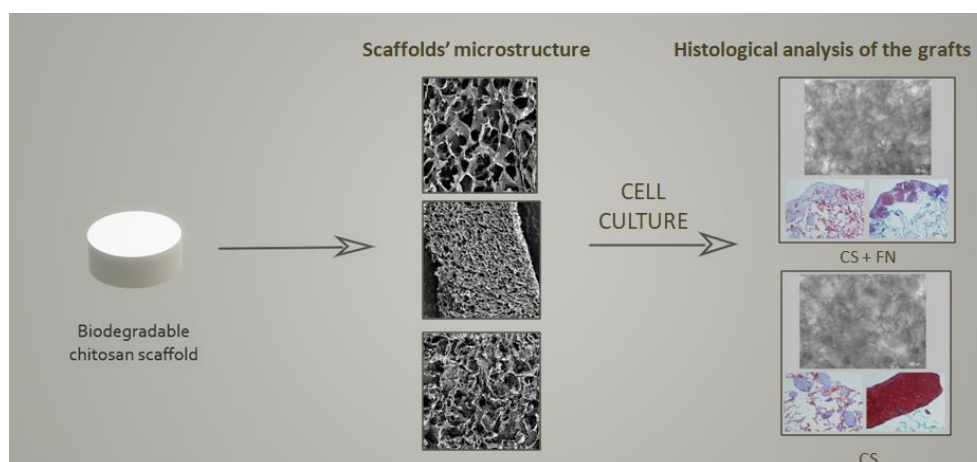
²Faculty of Science, University of Zagreb, HR-10001 Zagreb, Horvatovac102a, Croatia
³Department of Histology and Embryology, School of Medicine, University of Zagreb, HR-10001 Šalata 3, Croatia

lucija.stefan1@gmail.com

Tissue engineering is a promising alternative for conventional treatment of tissue defects and diseases. The main goal of this interdisciplinary field is to synthesize biomaterials suitable for replacement and regeneration of damaged tissues. Chitosan is a versatile material for biomedical applications, commonly used as a biodegradable scaffold for cartilage regeneration due to the composition similar to glycosaminoglycans found in native articular cartilage. Furthermore, chitosan surface can easily be modified by adhesive proteins, such as fibronectin, that mediate cell-scaffold interactions.

In this work, commercial chitosan scaffolds with different deacetylation degree and molecular weight have been investigated as potential support for chondrogenic differentiation of sheep nasal chondrocytes. Porous scaffolds were prepared by lyophilisation method and further characterised in terms of microstructure, physical and biological properties. In order to improve cell attachment, scaffolds were modified by fibronectin, an extracellular protein which plays the important role in wound healing and improves chitosan's binding properties. Pure and modified chitosan scaffolds were used as platforms for culture of nasal chondrocytes for 7 and 14 days. The histological analysis on specific genes of final grafts indicated good chondrogenic differentiation on both pure and fibronectin-modified scaffolds after 14 days of culture.

This work has been supported by the Croatian Science Foundation under the project IP-2014-09-3752.



RAZLIČITI UTJECAJI NA KONCENTRACIJE ŠTETNIH PLINOVITIH PRODUKATA DETONACIJE ANFO EKSPLOZIVA

DIFFERENT EFFECTS ON CONCENTRATIONS OF TOXIC GASEOUS DETONATION PRODUCTS OF ANFO EXPLOSIVE

Barbara Štimac, Muhamed Sućeska

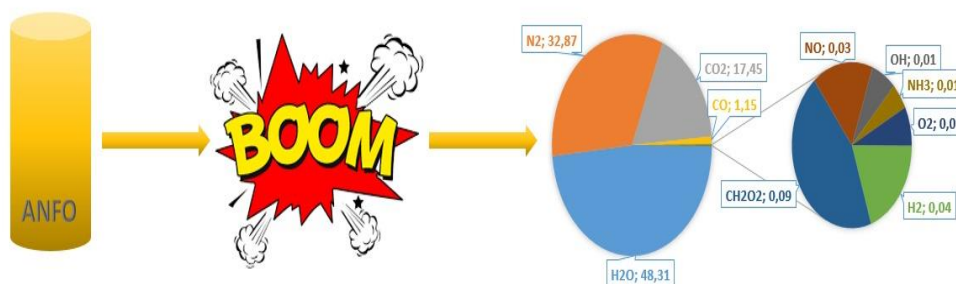
Sveučilište u Zagrebu, Rudarsko-geološko-naftni fakultet,
Pierottijeva 6, 10 000 Zagreb
bstimac@rgn.hr

ANFO je gospodarski eksploziv koji se najčešće koristi za površinska i podzemna miniranja. Po kemijskom sastavu ANFO je smjesa amonijevog nitrata (AN) i mineralnog ulja sa uravnoteženom bilancom kisika koja se postiže kod odnosa 94 % AN : 6 % mineralnog ulja. Pri detonaciji takve mješavine nastaju uglavnom vodena para, ugljikov dioksid i dušik. Međutim, zbog nepotpunih reakcija dio plinovitih produkata detonacije čine štetni ugljikov monoksid, dušikovi oksidi i amonijak.

U ovom radu istraživana je utjecaj sadržaja mineralnog ulja i utjecaj gustoće smjesa na koncentracije CO, NO_x i NH₃. Koncentracije detonacijskih produkata i detonacijski parametri izračunati su korištenjem termokemijskog koda EXPLO5.

Nađeno je da povećanje udjela mineralnog ulja iznad 6 % u ANFO eksplozivu rezultira negativnom bilancom kisika i značajnim porastom koncentracije CO u plinovitim detonacijskim produktima. S druge strane smanjenje postotka mineralnog ulja ispod 6 % rezultira pozitivnom bilancom kisika i povećanjem koncentracije NO_x.

144



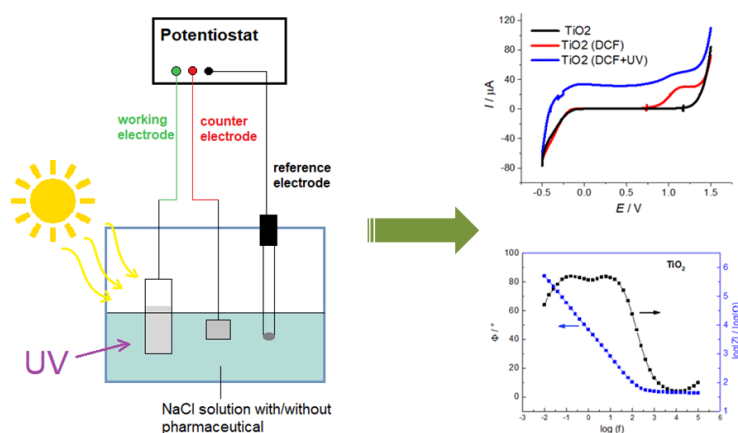
TiO₂ AND TiO₂/SnS₂ APPLICATION IN PHOTOELECTROCHEMICAL DEGRADATION OF PHARMACEUTICAL COMPOUNDS

Mia Tominac, Klara Perović, Tayebah Sharifi, Hrvoje Kušić, Marijana Kraljić Roković

Faculty of Chemical Engineering and Technology, University of Zagreb,
Marulićev trg 19, Zagreb
mtominac@fkit.hr

Pharmaceuticals are known to have a significant impact on aquatic environment causing ecological risk and human health damage. Accordingly, it is important to develop an innovative and practical water treatment technique, which will be able to remove them. Photoelectrochemical oxidation is one of the promising techniques due to its simplicity and combination of photocatalytic and electrochemical process. Additionally, recombination of photogenerated electron/hole pairs that occurs decreases by applying external potential, leading to enhancement in pharmaceutical degradation efficiency. One of the most important photocatalytic candidates is TiO₂. Since it is limited to UV-irradiation, significant efforts have been done to extend its absorption into the visible light region through TiO₂ doping or TiO₂ composite formation. Therefore, the aim of this work was to investigate and compare photoelectrochemical activities of TiO₂/SnS₂ nano-composite to those of TiO₂. The examination was performed using photoelectrochemical techniques in 0.1 mol dm⁻³ NaCl solution, for degradation of pharmaceuticals such as diclophenac, salicylic acid and memantine hydrochloride. For this purpose, TiO₂ and TiO₂/SnS₂ nano-composite were immobilised on FTO electrodes. Electrochemical impedance spectroscopy (EIS) was used to characterize electrode/solution interface in the presence and absence of pharmaceutical compounds. Electrochemical and photoelectrochemical degradation of pharmaceutical was monitored by linear polarisation. The experiments showed that it is possible to degrade pharmaceutical using electrochemical process and to improve degradation using UV-irradiation for TiO₂ electrode or UV/Vis-irradiation for TiO₂/SnS₂ electrode.

145



FUNKCIONALIZACIJA POVRŠINE TITANIJEVA DENTALNOG IMPLANTATA BIOAKTIVNIM PREVLAKAMA

FUNCTIONALIZATION OF TITANIUM DENTAL IMPLANT BY BIOACTIVE COATINGS

Katarina Varzić¹, Jozefina Katić¹, Ankica Šarić², Ines Despotović²,
Mirela Leskovic¹, Marin Petković³, Željka Petrović²

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

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

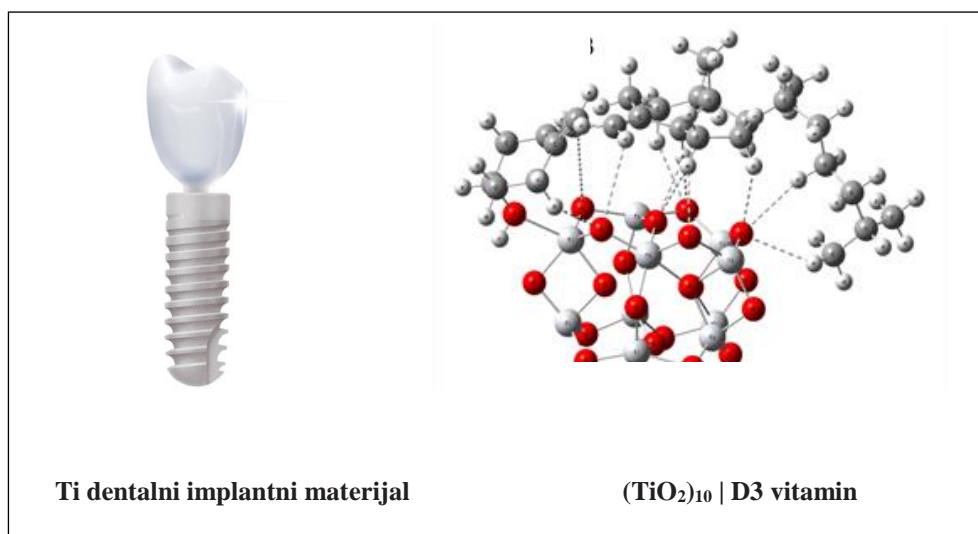
³Adentro Dental Studio, Petrova 67, 10000 Zagreb, Hrvatska

kvarzic@fkit.hr

Usljed mehaničke traume, ozljede ili zbog nepravovremeno liječenog karijesa i paradontoze može doći do djelomičnog ili potpunog gubitka zuba/zubiju. Kako bi se održala kakvoća života pojedinca problem se rješava ugradnjom dentalnih implantata – metalni vijak, kao baza za keramičku krunicu, most ili zubnu protezu, ugrađuje se u kost čeljusti. Za izradu dentalnih implantata najčešće se koriste materijali na osnovi titanija.

Za uspješnu implantaciju i kako bi se izbjegle bolne korekcijske operacije, po ugradnji implantata mora doći do brze oseointegracije s okolnom kosti i tkivima. Kako formiranje postojanih interakcija implantni materijal/kost i implantni materijal/okolno tkivo ovisi o mikrostrukтури, morfologiji i sastavu te hidrofilnosti površine, funkcionalizacija površine implantnog materijala je od ključne važnosti.

U ovom istraživanju, provedena je funkcionalizacija površine titanijeva dentalnog implantata kemisorpcijom bioaktivnih molekula, mogućih pojačivača oseointegracije. Morfologija modificiranih površina Ti|TiO₂|bioaktivna prevlaka ispitana je koristeći SEM, a svojstva močenja pomoću mjerenja kontaktnog kuta. *In vitro* karakterizacija nemodificiranih i modificiranih površina provedena je u otopini umjetne sline upotrebom elektrokemijske impedancijske spektroskopije. Eksperimentalna otkrića potvrđena su DFT izračunima i predložen je mehanizam formiranja bioaktivnih prevlaka.



Primijenjena kemija *Applied chemistry*

STABILNOST TRIMETOKSI SUPSTITUIRANOG KARBOKSAMIDA 2-AMINO BENZIMIDAZOLA S ANTIOKSIDATIVNIM I ANTIPROLIFERATIVNIM DJELOVANJEM

STABILITY OF TRIMETHOXY SUBSTITUTED 2- AMINO BENZIMIDAZOLE CARBOXAMIDE WITH ANTIOXIDATIVE AND ANTIPROLIFERATIVE ACTIVITY

Vendi Barbir¹, Kristina Tolić¹, Dragana Mutavdžić Pavlović¹, Ida Boček¹,
Marijana Hranjec¹, Mislav Runje²

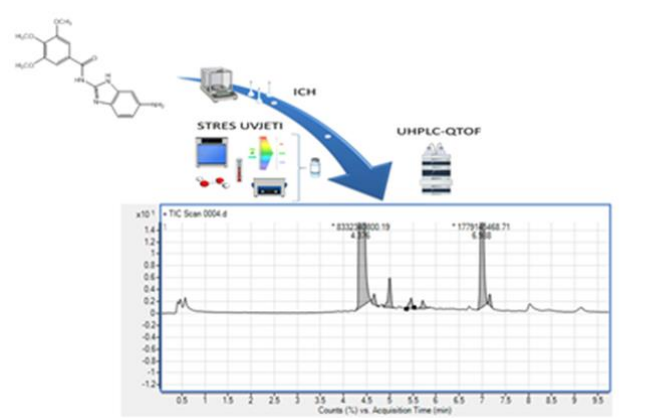
¹Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije
Marulićev trg 19, 10000 Zagreb

²Pliva Croatia TAPI R&D, Prilaz baruna Filipovića 25, 10000 Zagreb
vbarbir@fkit.hr

Razgradnja novosintetiziranih aktivnih spojeva pri raznim uvjetima provodi se s ciljem ispitivanja njihove stabilnosti kako bi se uz djelatnu aktivnu tvar prepoznala i onečišćenja koja mogu biti prisutna u tvari kao posljedica proizvodnje ili razgradnje. Prema ICH smjericama onečišćenja se klasificiraju kao anorganska, organska te ostatna otapala. Organska onečišćenja i nusprodukti nastali razgradnjom aktivne tvari pod raznim utjecajima (temperatura, svjetlo, promjena pH itd.) mogu imati različita toksična djelovanja te u konačnici utjecati na sigurnost i samu djelotvornost tvari. Studije prisilne razgradnje koje se u farmaceutskoj industriji sustavno provode prilikom proizvodnje novih farmaceutski aktivnih tvari ukazuju na ponašanje i stabilnost samog lijeka.

Trimetoksi supstituirani karboksamid 2-aminobenzimidazola pokazuje izraženu antiproliferativnu i antioksidativnu aktivnost. Benzimidazoli su zbog niza svojih dobrih bioloških svojstava (antitumorska, antimikrobna, protuupalna, itd.) vrlo važni potencijalni biološki agensi, stoga se ovom spoju ispitala stabilnost pod utjecajem temperature i svjetla, podložnost oksidaciji, te kiseloj i baznoj hidrolizi. Na osnovu eksperimenata predložene su strukture glavnih razgradnih produkata te je definiran njegov put razgradnje. Za separaciju, identifikaciju te karakterizaciju ispitivanog aktivnog spoja korištena je tekućinska kromatografija visoke djelotvornosti vezana na spektrometriju masa (LC-MS/MS).

Ovaj rad financirala je Hrvatska zaklada za znanost projektom IP-2018-01-4379 pod nazivom „Istraživanje antioksidativnog djelovanja benzazolskog skeleta u dizajnu novih antitumorskih agensa“.



BIS(TRIAZOLYLPYRENE)-DERIVED PSEUDOPEPTIDES: SYNTHESIS, FLUORESCENCE PROPERTIES AND BIOLOGICAL ACTIVITY

Mateja Belovari¹, Davor Nestić², Željka Ban¹, Dragomira Majhen²,
Zoran Džolić¹

¹Laboratory for Supramolecular Chemistry, Division of Organic Chemistry and
Biochemistry, Ruđer Bošković Institute, Bijenička cesta 54, 10000 Zagreb

²Laboratory for Cell Biology and Signal Transmission, Division of Molecular Biology,
Ruđer Bošković Institute, Bijenička cesta 54, 10000 Zagreb

Mateja.Belovari@irb.hr

Self-assembled peptide nanostructures are very promising biomaterial with huge potential in several biomedical applications.[1] Pyrene is one of the most useful fluorogenic units due to its high detection sensitivity and its ability to form an excimer. Changes to the intensity of fluorescence emission confirm the formation of self assembled complex.[2] Due to their many interesting fluorescence properties, pyrene and its derivatives are of considerable interest for the development of sensors and diagnostic tools.[3]

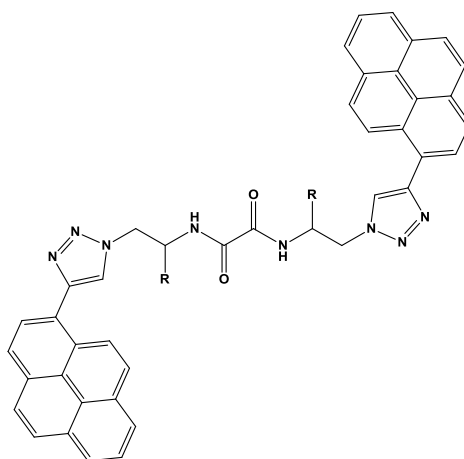
In the aim of design of fluorescent organic nanoparticles, novel products containing pyrene chromophore linked via a triazole ring to an amino acid derivatives were synthesised using Cu-catalyzed “click” reaction. We report the synthesis of novel bis(triazolylpyrene)-derived pseudopeptides, their photophysical properties, self-assembly in DMSO/H₂O as well as confocal fluorescence microscopy studies. Their bioactivity and cellular uptake will be tested on a panel of human tumor cell lines.

1. de la Rica R., Matsui H., *Chem. Soc. Rev.*, 2010, **39**, 3499-3509

2. Romero T. at all., *Org. Lett.*, 2009, **11**, 3466-3469

3. Werder S. at all., *Org. Lett.*, 2008, **10**, 2011-2014

This work has been fully supported by Croatian Science Foundation under the project number IP-2016-06-5983.



Structure of novel bis(triazolylpyrene)-derived pseudopeptides

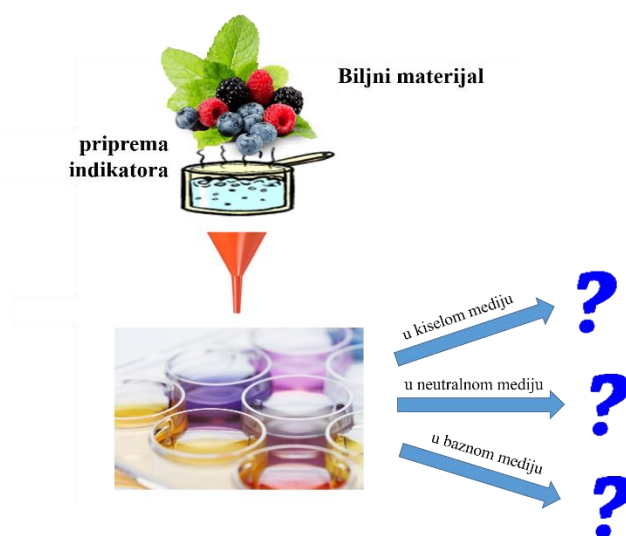
ISTRAŽIVANJE PRIMJENE BILJNOG MATERIJALA KAO KISELO-BAZNOG INDIKATORA

STUDY OF PLANT MATERIAL AS ACID-BASE INDICATOR

Katarina Bilić, Ivana Balić, Elvira Kovač-Andrić, Ana Amić

Sveučilište u Osijeku, Odjel za kemiju
Ulica cara Hadrijana 8/A, 31000 Osijek
katarina.bilic11@gmail.com

Tradicionalne metode poučavanja, koje i danas dominiraju u učionici, rijetko uključuju pokuse, što je slučaj i kada su u pitanju kiselo-bazni indikatori. Ukoliko nastava uključuje pokus, tada se nerijetko koriste sintetski kiselo-bazni indikatori, koji su često skupi i time nedostupni. Naša prethodna ispitivanja su pokazala kako se biljni materijal može uspješno upotrijebiti kao alternativni kiselo-bazni indikator. U ovom radu su prethodna istraživanja proširena te uključuju ne samo sirovi biljni materijal već i proizvode na bazi odabranog biljnog materijala, kako bi utvrdili mogu li se koristiti kao kiselo-bazni indikatori. Istraženi biljni materijal bilo je bobičasto voće, primjerice brusnice, crvene i crne ribizle, borovnice, goji bobice, aronija, drijenak i dr., u obliku svježeg voća i u obliku dostupnih prerađevina (sušeno voće, sokovi, čajevi, džemovi, te u pojedinim slučajevima i voćno vino). Prerađevine su ispitane u nekoliko različitih koncentracija, te su odabrane one prerađevine koje su sadržavale najveći udio voća. Preliminarni rezultati pokazuju veliki potencijal primjene ne samo biljnih sirovina već i prerađevina kao kiselo-baznog indikatora.



SINTEZA POTENCIJALNOG ADJUVANTA ZA CJEPIVA - KONJUGATA QUILLAJA SAPONINA I DESMURAMIL-DIPEPTIDA

SYNTHESIS OF A POTENTIAL VACCINE ADJUVANT – CONJUGATE OF QUILLAJA SAPONIN AND DESMURAMYL DIPEPTIDE

Andrej Biškup, Đani Škalamera

Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet
Horvatovac 102a, 10 000 Zagreb

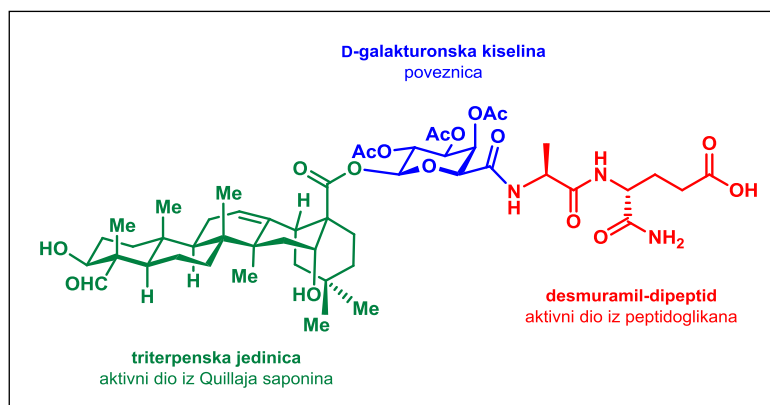
abiskup@chem.pmf.hr

Adjuvantni su tvari koje se dodaju cjepivima kako bi se pojačao imunološki odgovor na antigen. Najčešće korišteni adjuvantni su alum, koloidna suspenzija aluminijevog hidroksida, i MF50, emulzija skvalena u vodi. Vrlo je mali broj dostupnih adjuvanata za humanu upotrebu, a nerijetko se povezuju s nuspojavama, što postavlja imperativ za razvoj novih, učinkovitijih adjuvanata, koji nisu toksični i nemaju nuspojave.¹

U razvoju novih adjuvanata posebno su zanimljivi kandidati prirodni spojevi, od kojih su se saponini izolirani iz kore drveta *Quillaja saponaria* (QS) Molina pokazali kao jedni od najjačih do sad poznatih adjuvanata. *Lead* spoj iz ove serije je QS-21, koji je nedavno odobren za humanu upotrebu (cjepivo Shigrix, GSK). Međutim, QS-21 ima nekoliko velikih nedostataka: nije kemijski stabilan, limitiran mu je izvor te je potrebno vrlo zahtjevno pročišćavanje. Stoga je razvoj novih, jednostavnijih adjuvanata temeljenih na toj strukturi vrlo obećavajuće područje istraživanja.² Muramil-dipeptid (MDP) je najmanja strukturna jedinica peptidoglikana koja pokazuje imunostimulirajuće djelovanje. Desmuramil-dipeptidi su analozi MDP-a bez hidrofilne *N*-acetilmuraminske jedinice, za koje je pokazano da nakon modifikacije s lipofilnim supstituentima (npr. adamantanom) pokazuju vrlo visoku adjuvantnu aktivnost.³

Cilj ovog rada je priprava konjugata triterpena iz QS i desmuramil-dipeptida, jedinica za koje je poznato da svaka zasebno posjeduje izraženu adjuvantnu aktivnost. Pretpostavka je da bi ovakvom konjugacijom došlo do sinergističkog efekta u povećanju adjuvantne aktivnosti. Sintaza ciljnog spoja kreće iz triju osnovnih sintona – triterpenske karboksilne kiseline dostupne hidrolizom iz komercijalno dostupnog ekstrakta kore QS; desmuramil-dipeptida, čija je relativno jednostavna sinteza poznata od ranije, te *D*-galakturonske kiseline kao poveznice, čija je sinteza osmišljena u ovom radu.

- (1) A. Di Pasquale, S. Preiss, F. Tavares Da Silva, N. Garcon, *Vaccines* **2015**, 3, 320-343.
- (2) P. Wang, Đ. Škalamera, X. Sui, P. Zhang, S. M. Michalek, *J. Med. Chem.* **2019**, 62, 1669-1676.
- (3) R. Ribić, M. Paurević, S. Tomić, *Croat. Chem Acta* **2019**, 92, 153-161.



SINTEZA I SPEKTROSKOPSKA SVOJSTVA BIOLOŠKI AKTIVNIH TETRACIKLIČKIH REGIOIZOMERA IMIDAZO[4,5-*b*]PIRIDINA

SYNTHESIS AND SPECTROSCOPIC PROPERTIES OF BIOLOGICALLY ACTIVE TETRACYCLIC REGIOISOMERS OF IMIDAZO[4,5-*b*]PYRIDINES

Ida Boček¹, Matej Kadić¹, Leonarda Vugrin¹, Nataša Perin¹, Borka Lončar²,
Marijana Hranjec¹

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

²PLIVA Hrvatska d.o.o., Prilaz baruna Filipovića 25, 10000 Zagreb
ibocek@fkit.hr

Imidazo[4,5-*b*]piridini, kao strukturni analozi purina, predmet su istraživanja medicinskih kemičara. Novi derivati ove heterocikličke jezgre intenzivno se istražuju budući da aktivnost spoja ovisi o funkcionalnim skupinama koje, uz dušikove atome, ostvaruju interakcije s ciljanom metom.[1] Uz širok spektar bioloških aktivnosti, novi derivati pronalaze primjenu u različitim optičkim sensorima zbog zanimljivih spektroskopskih karakteristika.[2] Za sintezu novih derivata imidazo[4,5-*b*]piridina korištena je sinteza potpomognuta mikrovalovima uz klasične metode organske sinteze.[3] Strukture novih derivata potvrđene su korištenjem ¹H, ¹³C i 2D NMR spektroskopije te spektrometrije masa. Spektroskopska karakterizacija odabranih derivata provedena je u 11 organskih otapala različite polarnosti korištenjem UV/Vis i fluorimetrijske spektroskopije. pH titracije praćene UV/Vis i fluorimetrijskom spektroskopijom provedene su u svrhu istraživanja potencijalne primjene novih spojeva kao senzora za detekciju pH.

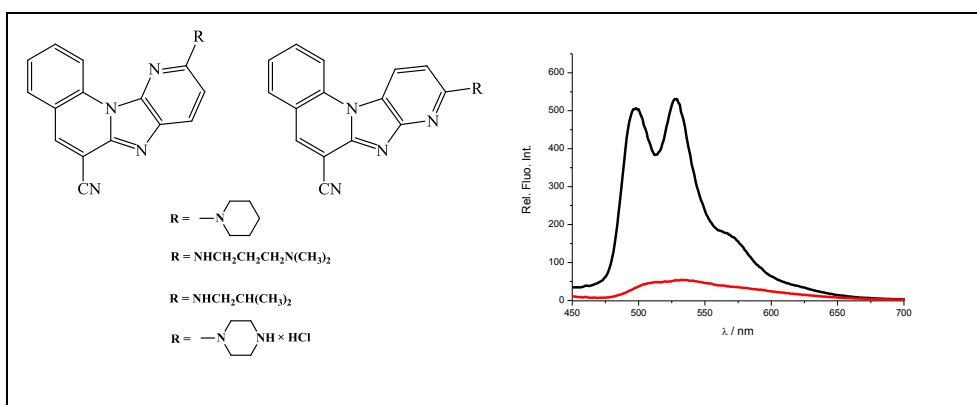
152

[1] M. Hranjec, B. Lučić, I. Ratkaj, S. Kraljević Pavelić, I. Piantanida, K. Pavelić, G. Karminski-Zamola, *Eur. J. Med. Chem.* **46** (2011) 2748-2758.

[2] N. Dash, F. A. S. Chipem, R. Swaminathan, G. Krishnamoorthy, *Chem. Phys. Lett.* **460** (2008) 119-124.

[3] N. Perin, K. Bobanović, I. Zlatar, D. Jelić, V. Kelava, S. Koštrun, V. Gabelica Marković, K. Brajša, M. Hranjec, *Eur. J. Med. Chem.* **125** (2017) 722-735.

Ovaj rad financirala je Hrvatska zaklada za znanost projektom IP-2018-01-4379 pod nazivom „Istraživanje antioksidativnog djelovanja benzazolskog skeleta u dizajnu novih antitumorskih agensa“.



SPECTROSCOPIC CHARACTERIZATION OF BENZIMIDAZOLE CONJUGATES AS SENSORS FOR METAL CATIONS AND pH DETECTION IN SOLUTIONS

Kristina Crnjac, Marija Ćurić, Petra Marketin, Anja Beč, Nataša Perin, Maja Cindrić, Marijana Hranjec

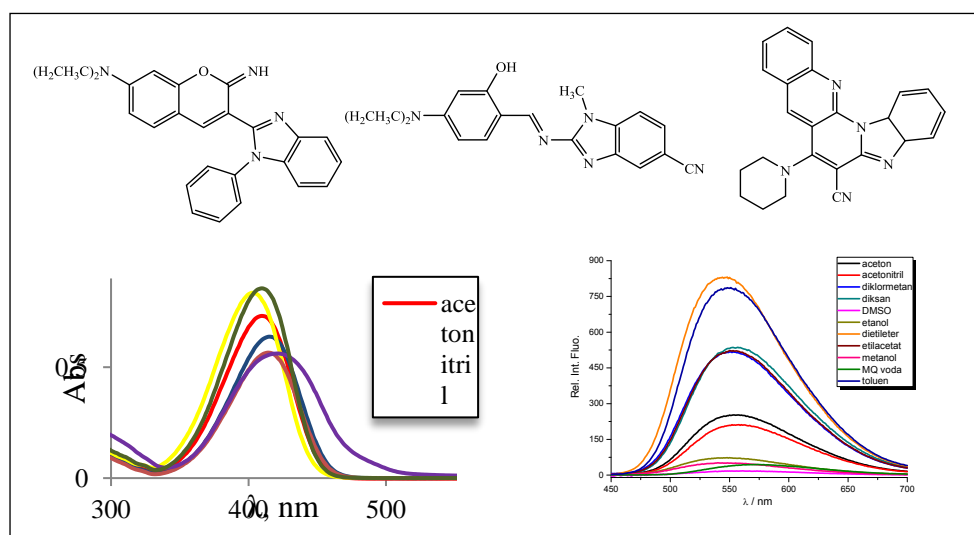
Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije
Marulićev trg 19, 10000 Zagreb

kernjac@fkit.hr

Recently, one of the extensively studied classes of organic fluorescent sensors is that based on benzimidazole nuclei [1]. Benzimidazole nucleus is an attractive building block of such molecular structures due to multifunctionality of its heteroaromatic conjugated planar structure [2]. Also, due to the highly conjugated planar chromophore, the benzimidazole benzannulated derivatives offer promising applications in optoelectronics, optical lasers, fluorescence probes and organic luminophores. Within this work, we present the synthesis and spectroscopic characterization of imino-coumarin and Schiff base derived benzimidazole conjugates as well as pentacyclic benzimidazole derivative. For the synthesis of novel targeted compounds, classical organic synthesis reactions as well as microwave assisted amination were used. To study and confirm the possibility of synthesized derivatives for their application as metal or pH sensors, UV/Vis and fluorimetric titrations of aqueous compounds solutions with aqueous solutions of metal chloride salts or different buffers were performed.

[1] E. Horak, M. Robić, A. Šimanović, V. Mandić, R. Vianello, M. Hranjec and I. Murković-Steinberg, *Dyes and Pigments* 162 (2019) 688–696.

[2] a) M. Hranjec, E. Horak, D. Babić, S. Plavljanić, Z. Srdović, I. M. Steinberg, R. Vianello and N. Perin, *New J. Chem.* 41 (2017) 358–371; b) E. Horak, R. Vianello, M. Hranjec and S. Krištafor, *Spectrochim. Acta A, Mol. Biomol. Spectros.* 178 (2017) 225–233.



HALOGENSKA VEZA U SOLIMA SULFONSKIH KISELINA I HALOGENPIRIDINA

HALOGEN BONDING IN SALTS OF SULFONIC ACIDS WITH HALOPYRIDINES

Matija Čulig, Vinko Nemeč, Dominik Cinčić

Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet
Horvatovac 102a, Zagreb
culigmatija@gmail.com

Sulfonske kiseline su organski spojevi koji se primjenjuju kao katalizatori u organskoj sintezi,¹ no u zadnjih dvadesetak godina sulfonske kiseline i njihovi derivati kao građevni blokovi zanimljivi su za izučavanje u kristalnom inženjerstvu.² Pretragom baze strukturnih podataka Cambridge Structural Database³ za motiv sulfonske funkcijske skupine u ulozu akceptora ili donora vodikove veze (preko kisikovog atoma) nađeno je 20 590 skupova podataka. S druge strane, u bazi je pohranjeno samo 368 skupova podataka za spojeve koji sadrže sulfonski kisikov atom u ulozu akceptora halogenske veze, od kojih se 37 odnose na *p*-toluensulfonsku kiselinu (**pts**aH) i samo 6 na benzensulfonsku kiselinu (**bs**aH).

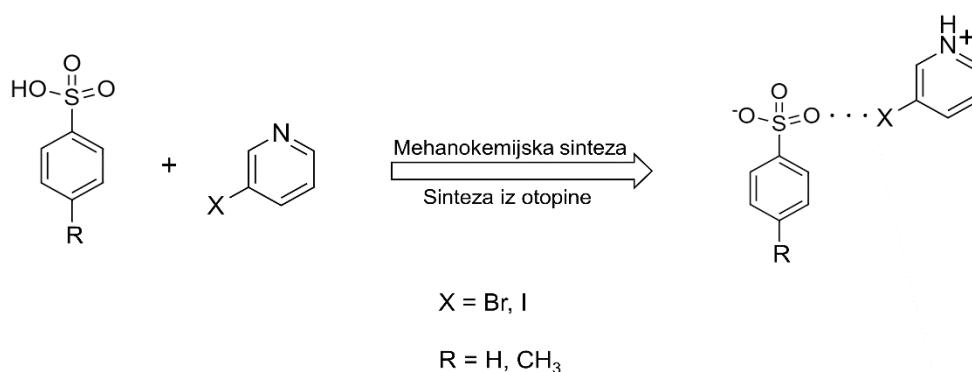
U ovom radu cilj je bio ispitati potencijal deprotoniranih sulfonskih kiselina kao akceptora halogenske veze s protuionima, protoniranim halogenpiridinima, kao donorima halogenske veze. U tu svrhu pripravljene su soli sulfonskih kiselina, **bs**aH i **pts**aH, s odabranim halogenpiridinima: 3-klorpiridinom (**3Clpy**), 3-brompiridinom (**3Brpy**) i 3-jodpiridinom (**3Ipy**). Mehanokemijskom sintezom te sintezom iz otopine priređeno je pet soli (**3ClpyH**)(**bs**a), (**3BrpyH**)(**bs**a), (**3IpyH**)(**bs**a), (**3BrpyH**)(**pts**a) i (**3ClpyH**)(**pts**a). Soli su okarakterizirane difrakcijom rendgenskog zračenja u polikristalnom uzorku i jediničnom kristalu, te razlikovnom pretražnom kalorimetrijom. Strukturna analiza pokazala je da su ioni u solima **3BrpyH**⁺ i **3IpyH**⁺ međusobno povezani halogenskim vezama Br⁺⋯O odnosno I⁺⋯O. Uz halogenske veze ioni su još, očekivano, povezani vodikovim vezama N⁺-H⋯O i C-H⋯O. U solima koje sadrže kation **3ClpyH**⁺ ioni su povezani samo vodikovim vezama, što je u skladu sa slabijom donorskom moći atoma klora.⁴

[1] G. Busca, *Chem. Rev.* **107** (2007) 5366-5410.

[2] V. Videnova-Adrabska, I. Turowska, T. Borowiak, G. Duthiewicz, *New J. Chem.* **25** (2001) 1403-1409.

[3] C. R. Groom, I. J. Bruno, M. P. Lightfoot, S. C. Ward, *Acta Cryst.* **B72** (2016) 171-179.

[4] V. Stilinović, G. Horvat, T. Hrenar, V. Nemeč, D. Cinčić, *Chem. Eur. J.* **23** (2017) 5244-5257.



PRIPREVA PROPARGILNOG DERIVATA DESMURAMIL-DIPETIDA

SYNTHESIS OF PROPARGYL DERIVATIVE OF DESMURAMYL DIPEPTIDE

Josip Draženović¹, Antonija Ožegović¹, Danijela Mihelec¹, Željka Car¹,
Đani Škalamera¹, Vesna Petrović Peroković¹, Rosana Ribić²

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

²Sveučilišni centar Varaždin, Sveučilište Sjever
Jurja Križanića 31b, 42000 Varaždin
josipd2011@hotmail.com

Imunostimulatori ili adjuvantni su imunomodulatori koji ubrzavaju, pojačavaju ili produljuju imunološki odgovor na određeni antigen te se dodaju cjepivima koja nisu dovoljno imunogenična.¹ Derivati muramil-dipeptida (MurNAc-L-Ala-D-isoGln, MDP) i desmuramil-dipeptida (L-Ala-D-isoGln), MDP-a bez šećerne *N*-acetilmuraminske komponente, ulaze u skupinu peptidnih adjuvanata. U našem laboratoriju prethodno su sintetizirani i ispitani adamantilni desmuramil-dipeptidi te njihovi manozni derivati.^{2,3} Manozna je uvedena kako bi se omogućilo prepoznavanje spoja od strane manoznih receptora, dok adamantilna skupina povećava lipofilnost spoja što se pozitivno odražava na adjuvantsku aktivnost.

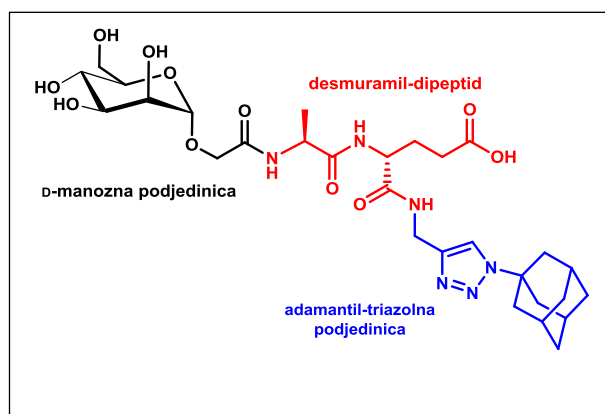
U nastavku istraživanja istražiti će se mogućnost modificiranja manoziliranog desmuramil-dipeptida uvođenjem adamantanske podjedinice preko triazolnog prstena bakrom kataliziranom azid-alkin cikloadicijom (klik-reakcija). U tu svrhu pripremljen je alkinski prekursor, propargilni derivat dipeptida L-Ala-D-Glu. Alkinska funkcijska skupina uvedena je na dipeptid propargiliranjem α -karboksilne skupine glutaminske kiseline. Adamantanska podjedinica vezat će se na propargilirani dipeptid u obliku 1-(adamantan-1-il)-1,2,3-triazolne skupine klik-reakcijom s 1-azidoadamantanom. U posljednjem stupnju slijedit će kondenzacija modificiranog desmuramil-dipeptida i manozilirane octene kiseline.

155

(1) R. Ribić, M. Paurević, S. Tomić, *Croat. Chem. Acta* **2019**, 92, 153-161.

(2) R. Ribić, L. Habjanec, B. Vranešić, R. Frkanec, S. Tomić, *Chem. Biodiver.* **2012**, 9, 777-788.

(3) R. Ribić, L. Habjanec, R. Frkanec, B. Vranešić, S. Tomić, *Chem. Biodiver.* **2012**, 9, 1373-1381.



OPTIMIZACIJA PRIPREME KRVNE PLAZME ZA ODREĐIVANJE 5-METILTETRAHIDROFOLATA

OPTIMIZATION OF BLOOD PLASMA PREPARATION FOR 5-METHYLTETRAHYDROFOLATE ASSAY

Ivan Džajić¹, Edvin Brusač¹, Mario-Livio Jeličić¹, Daniela Amidžić Klarić¹, Biljana Nigović¹, Nikša Turk², Ana Mornar¹

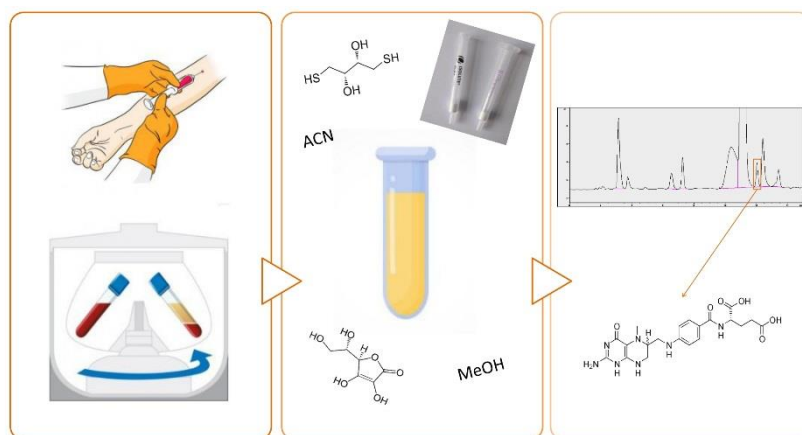
¹Sveučilište u Zagrebu, Farmaceutsko-biokemijski fakultet
Ul. Ante Kovačića 1, 10000 Zagreb

²Klinički bolnički centar Zagreb, Kišpatićeva ul. 12, 10000 Zagreb
idezajic@student.pharma.hr

U svrhu što učinkovitijeg praćenja terapije upalnih bolesti crijeva uz analizu koncentracija metabolita tiopurinskih imunosupresiva potrebna je i analiza plazmatskih koncentracija aktivnog oblika folne kiseline, 5-metiltetrahidrofolata (5-MTHF) koji je u ovih pacijenata u potencijalnom nedostatku. Cilj ovog rada bio je razviti jednostavnu i brzu kromatografsku metodu za praćenje obiju skupina analita uz prihvatljivo vrijeme trajanja metode te što manji manualni rad analitičara. Biološki uzorci su složenog sastava, a analiti koji se određuju u vrlo niskim koncentracijama, stoga je potrebno optimizirati pripremu uzorka plazme za analizu 5-MTHF da bi se poboljšala osjetljivost metode te se postigle niže granice određivanja. Također, uzevši u obzir prirodu analita, cilj je pripremiti i stabilan uzorak kako bi se osigurala reprezentativna slika biološkog stanja.

RP-HPLC-FLD tehnika korištena je za praćenje koncentracije 5-MTHF u plazmi. U optimizaciji pripreme ispitani su razni omjeri plazme i acetonitrila/metanola (2:1 i 3:1), utjecaj dodane količine antioksidansa askorbinske kiseline (ASK) (od 15 do 90 µg na 200 µL plazme) te ditioneitolu (DTT) (25 µg na 200 µL plazme) te otapala nakon uparivanja uzorka (1 i 3 g/L ASK). U svrhu što boljeg uklanjanja interferencija u uzorku, ispitane su i Phree Phospholipid Removal i Isolute PLD+ sorbensi. Priprema uzorka s 90 µg ASK uz omjer 2:1 MeOH:plazma pokazala je najveću iskoristivost uz najveću površinu pika 2 sata nakon prvog injektiranja, dok je najstabilnija otopina bila ona s dodanih 15 µg ASK i 25 µg DTT, pokazujući najmanje relativno smanjenje površine pika nakon 2 sata. Sorbensi su pokazali manji broj interferirajućih pikova uz nešto manji analitički prinos u odnosu na postupak taloženja proteina. U ovom radu optimizirana je priprema uzorka plazme za analizu 5-MTHF. Daljnjim tijekom istraživanja provest će se i optimizacija pripreme uzorka za analizu tiopurina te će metoda biti validirana.

Ovaj rad sufinancirala je Hrvatska zaklada za znanost projektom [UIP-2017-05-3949].



Sisymbrium officinale (L.) Scop: GLUCOSINOLATE PROFILE AND SYNTHESIS OF ISOPROPYL ISOTHIOCYANATE

Azra Đulović¹, Nikolina Anđelković¹, Marijana Popović¹, Elma Vuko²,
Nada Bezić², Vedrana Čikeš Čulić³, Ivica Blažević¹

¹Sveučilište u Splitu, Kemijsko-tehnološki fakultet
Ruđera Boškovića 35, 21000 Split

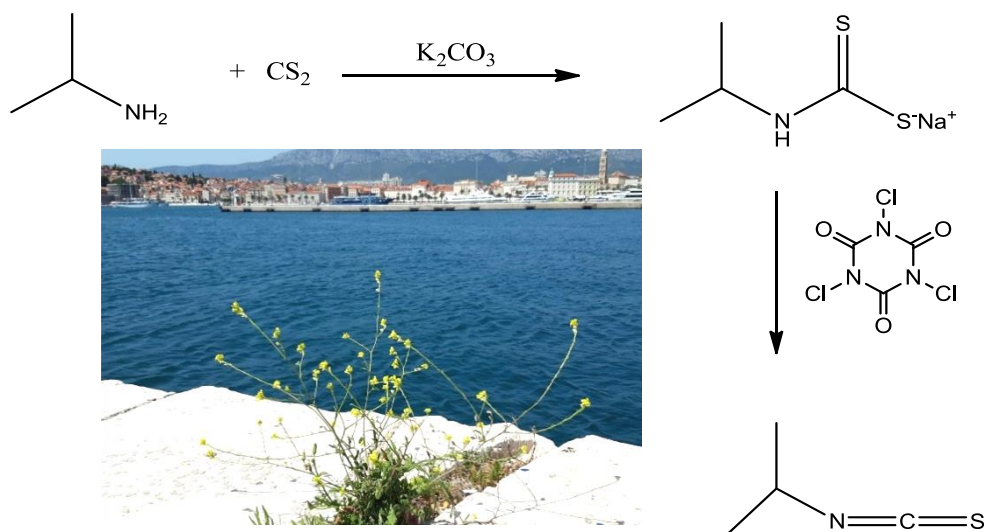
²Sveučilište u Splitu, Prirodoslovno-matematički fakultet
Ruđera Boškovića 33, 21000 Split

³Sveučilište u Splitu, Medicinski fakultet
Šoltanska 2, 21000 Split
azra@ktf-split.hr

Hedge mustard (*Sisymbrium officinale* (L.) Scop.), a plant from Brassicaceae family, was collected in Split and in the Krka River area during May 2019. The aim of the study was to isolate and identify glucosinolates (GSLs) and their breakdown products. Different isolation methods have been applied in this work: hydrodistillation in the modified Clevenger apparatus, autolysis, and microwave-assisted distillation and microwave hydrodiffusion and gravity. GC-MS analysis of the volatile isolates indicated that the most abundant volatile product was isopropyl isothiocyanate (ITC), originated from glucoputranjivin degradation. GSLs were also identified and quantified by their desulfo counterparts using HPLC-DAD analysis in different plant parts (root, stem, leaf, flower). Three GSLs were identified in all plant parts: glucoputranjivin (0.68-16.00 $\mu\text{mol/g}$ DW), 4-hydroxyglucobrassicin (0.04-2.73 $\mu\text{mol/g}$ DW) and glucobrassicin (0.24-6.40 $\mu\text{mol/g}$ DW). Furthermore, glucosinalbin, 4-methoxyglucobrassicin and neoglucobrassicin were also identified in the roots.

In order to investigate biological properties (cytotoxic and antiviral), isopropyl ITC was synthesized by one-pot synthesis by reaction of isopropyl amine with CS_2 in aqueous K_2CO_3 solution affording the dithiocarbamate intermediate, which was further desulfurized by adding cyanuric acid at 0 °C to provide the corresponding ITC. After purification with petroleum ether, the ITC was confirmed by GC-MS and spectroscopic techniques.

This research has been fully supported by the Croatian Science Foundation under the project BioSME (HRZZ-IP-06-2016-1316, PI IB).



UTJECAJ pH OTOPINE NA SORPCIJU KRIZOTINIBA NA ČESTICE TiO_2 U SUSPENZIJI

THE INFLUENCE OF pH VALUE ON SORPTION OF CRIZOTINIB IN TiO_2 PARTICLES IN SUSPENSION

Iva Fereža, Kristina Tolić, Dragana Mutavdžić Pavlović

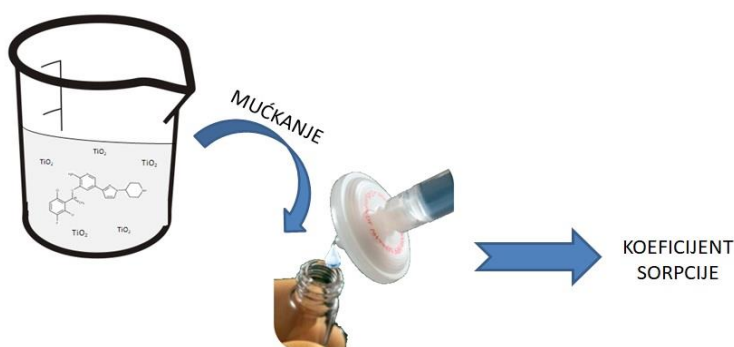
Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije
Marulićev trg 19, 10000 Zagreb

ifereza@fkit.hr

Farmaceutici su tvari koji se svakodnevno koriste u humanoj i veterinarskoj medicini radi održavanja zdravlja. Njihova konstanta konzumacija povećava vjerojatnost dospijevanja i pronalaska tih aktivnih tvari u okolišu koji uključuje tlo, sedimente, otpadne vode i u konačnici pitke vode. U okolišu farmaceutik može biti izložen raznim utjecajima te tako podlijevati različitim procesima razgradnje i uzrokovati novonastale produkte koji često mogu biti toksičniji od početnog spoja. Farmaceutici su u uporabi svega nekoliko desetljeća tako da je njihova koncentracija u okolišu niska iako je do nedavno njihova identifikacija i kvantifikacija bila otežana sve do razvoja analitičkih metoda koje su omogućile njihovu analizu pri nižim granicama detekcije. Kao jedan od neistraženih farmaceutika o čijoj se sudbini i ponašanju u okolišu ništa ne zna je krizotinib. On predstavlja malu molekulu odobrenu 2011. godine kao protutumorski lijek koji inhibira receptor tirozin kinazu kod raka pluća kao jednog od vodećih uzroka smrti u svijetu.

Napredni oksidacijski procesi poput fotokatalize jedan su od načina uklanjanja farmaceutika iz okoliša. TiO_2 je jedan od najčešće korištenih fotokatalizatora. Razlog njegove česte upotrebe leži u činjenici da je netoksičan, jeftin te učinkovit. Ipak prilikom fotokatalize ne može se zanemariti činjenica da se farmaceutici prilikom takvog procesa mogu adsorbirati na površinu TiO_2 kao i na površinu nekog drugog fotokatalizatora. Iz tog razloga cilj ovog rada bio je ispitati koliko se krizotiniba može sorbirati na česticama TiO_2 tijekom fotokatalize krizotiniba u vodenom mediju. U tu svrhu određeno je vrijeme kontakta krizotiniba sa česticama TiO_2 u suspenziji da bi došlo do njegove maksimalne sorpcije. Na osnovu toga određen je kinetički model koji najbolje opisuje sorpciju krizotiniba. Budući da je sorpcija krizotiniba uvjetovana njegovim fizikalno-kemijskim svojstvima, ali i fizikalno-kemijskim karakteristikama sorbensa i medija u kojem se on nalazi, ispitali smo i utjecaj pH vrijednosti otopine krizotiniba na sorpciju. Parametri sorpcije krizotiniba određeni su primjenom različitih sorpcijskih izoterma.

158



Zn(II) I Cu(II) KOMPLEKSI KIRALNIH IMINODIACETAMIDNIH LIGANADA

Zn(II) AND Cu(II) COMPLEXES OF CHIRAL IMINODIACETAMIDE LIGANDS

Franka Folo^{1,2}, Natalija Pantalon Juraj², Srećko I. Kirin²

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

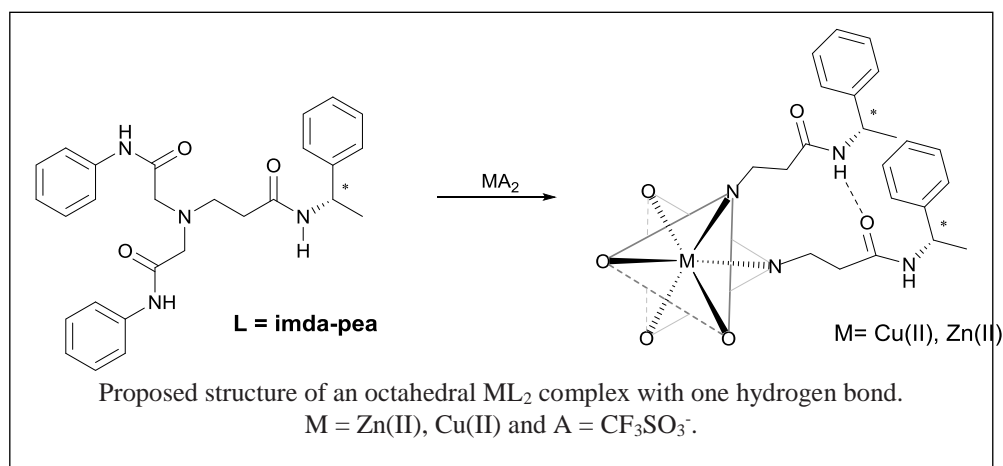
²Ruđer Bošković Institute, Bijenička cesta 54, 10000 Zagreb
franka_f@hotmail.com

Tridentate ligands, such as iminodiacetamide derivatives and transition metals can form hexacoordinated complexes of ML and ML₂ stoichiometry¹. Ligands **imda-pea** and **imda-phe** prepared in this work have chiral chains with amide groups (**pea** = (S)-1-phenylethylamine and **phe** = L-Phenylalanine methyl ester) that could form hydrogen bonds between two ligands in a complex of ML₂ stoichiometry. For the ligand **imda-pea**, one hydrogen bond is possible, while two hydrogen bonds are possible for **imda-phe**, allowing the formation of different secondary structures. These compounds could have potential use in enantioselective catalysis. In complexes with hydrogen bonded secondary structures, chirality can be transmitted to the metal centre by "backdoor induction" from distant chiral groups, and the metal centre can selectively catalyse enantioselective reactions².

In this work, ligands **imda-pea** and **imda-phe** were prepared in two steps, by standard amide coupling reactions, followed by nucleophilic substitution with chloroacetamide precursors. The complexes were characterized in solid state by IR spectroscopy. In solution, the Zn(II) complexes were studied by ¹H NMR spectroscopy and the Cu(II) complexes by UV-Vis spectroscopy. The transfer of chirality to the metal centre was studied by CD spectroscopy.

159

1. Pantalon Juraj, N.; Miletić, G.; Perić, B.; Popović, Z.; Smrečki, N.; Vianello, R.; Kirin, S. I., *Inorg. Chem.* 2019, DOI: 10.1021/acs.inorgchem.9b02200.
2. Opačak, S.; Kokan, Z.; Glasovac, Z.; Perić B.; Kirin, S. I., *Eur. J. Org. Chem.* 2019, (11), 2115-2128.



KRISTALIZACIJA DERIVATA INZULINA CRYSTALIZATION OF INSULIN DERIVATIVES

Boris Gomaz, Ivana Kekez, Dubravka Matković-Čalogović,
Biserka Prugovečki

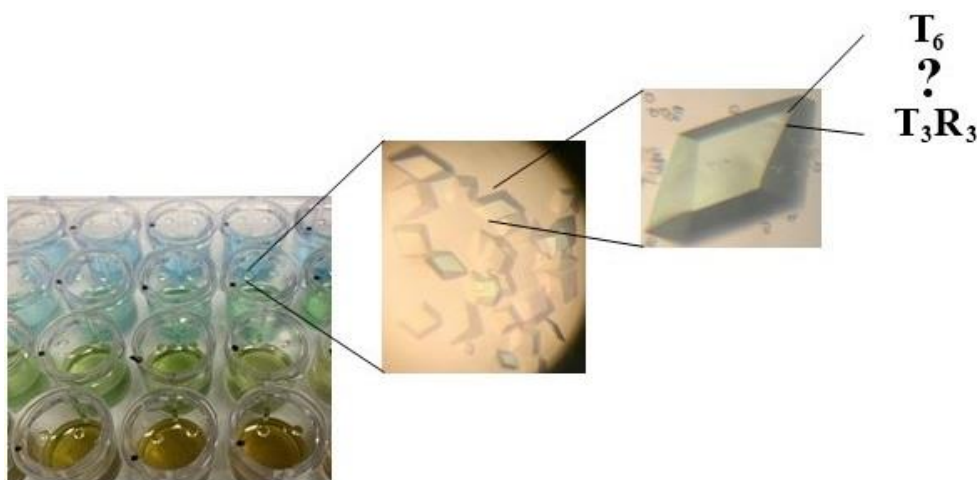
Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet
Horvatovac 102a, 10000 Zagreb
bgomaz@chem.pmf.hr

Inzulin je jedan od najvažnijih hormona koji sudjeluju u regulaciji ugljikohidrata u tijelu i već godinama je predmet brojnih istraživanja. Specifično govoreći o ljudskom inzulinu, ulazak glukoze u β stanice Langerhansovih otočića gušterače, uzrokuje njegovo izlučivanje. Ovaj polipeptidni hormon sastoji se od dvaju lanaca: A lanca koji sadrži 21 aminokiselinu i B lanca koji sadrži 30 aminokiselina. U lancu A postoji jedan disulfidni most dok su lanci A i B povezani pomoću dvaju disulfidnih mostova. U prisutnosti cinkovih iona šest monomernih jedinica se okuplja i dobiva se puno stabilniji; heksamer, koji služi kao skladišni inzulin. Inzulin je biološki aktivan kao monomer.^[1] Pokazano je da i drugi metalni ioni mogu tvoriti heksamere inzulina te da različiti kristalizacijski uvjeti vode nastajanju triju različitih formi heksamera inzulina T_6 , T_3R_3 i R_6 .^[2-4]

U ovom radu bit će prikazani rezultati kristalizacije derivata ljudskog inzulina uz različite metalne ione (bakar(II), nikal(II) i kobalt(II)) te u prisutnosti različitih halogenidnih iona (kloridi, bromidi i jodidi) u cilju dobivanja jediničnih kristala za određivanje 3D-strukture. Kristalizacija je provedena metodom difuzije para u visećoj kapi. Također će biti prikazani osnovni rezultati određivanja 3D-strukture priređenih derivata metodom difrakcije rendgenskog zračenja na jediničnom kristalu. Difrakcijski podaci su sakupljeni na sinkrotronu Elettra u Trstu.

160

1. D. L. Nelson i M. M. Cox, *Lehninger Principles of Biochemistry*, Fourth edition, USA: W. H. Freeman and Company, 2005, str. 589, 902–910
2. B. Prugovečki, N. Ivetić i D. Matković-Čalogović, *Maced. J. Chem. Chem. En.*, **34** (2015), 1; 67-72
3. B. Prugovečki, I. Pulić, M. Toth i D. Matković-Čalogović, *Croat. Chem. Acta*, **85** (2012), 4; 435-439
4. B. Prugovečki, E. J. Dodson, G. G. Dodson i D. Matković-Čalogović, *Croat. Chem. Acta*, **82** s(2009), 2; 433-438



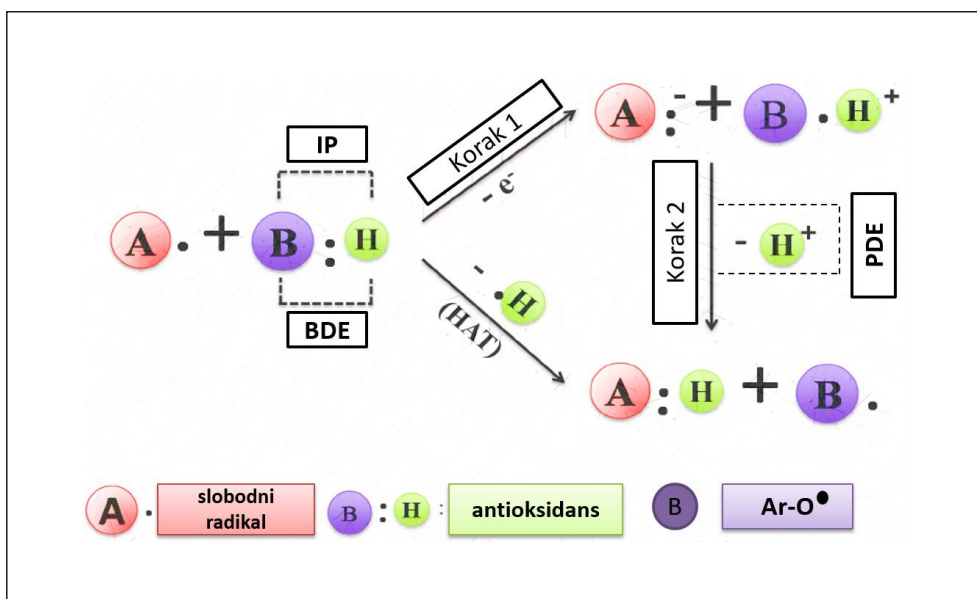
ISTRAŽIVANJE ANTIOKSIDACIJSKOG POTENCIJALA ODABRANIH OKSADIAZOLA: HAT vs ET-PT

ASSESSMENT OF ANTIOXIDANT POTENTIAL OF SELECTED OXADIAZOLES: HAT vs ET-PT

Elena Gotal, Ana Amić

Sveučilište u Osijeku, Odjel za kemiju
Ulica cara Hadrijana 8/A, 31000 Osijek
gotal551@icloud.com

Oksadiazoli su aromatični, heterociklički spojevi u čijoj se strukturi nalaze kisikovi i dušikovi atomi. Od velikog su značaja za medicinsku kemiju zbog raznolike biološke aktivnosti, koja između ostalih uključuje antibakterijsku, antivirusnu, protuupalnu, protutumorsku aktivnost. Studije su pokazale da oksadiazoli posjeduju i antioksidacijsku aktivnost, čime pomažu u borbi protiv slobodnih radikala i oksidativnog stresa. Antioksidacijski potencijal 15 odabranih oksadiazola je ispitana teoretski. Ispitana su reakcijske entalpije dva mehanizma, mehanizam prijenosa vodikovog atoma (HAT) i mehanizam prijenosa elektrona popraćenog prijenosom protona (ET-PT), upotrebom PM7 metode. Proučavano je cijepanje O-H, C-H i N-H veza, te značaj funkcijskih skupina. Preliminarni rezultati potvrđuju važnost prisutnosti jedne ili više hidroksilne skupine u strukturi spoja, budući da spojevi s ovom funkcijskom skupinom pokazuju veću antioksidacijsku aktivnost.



FIZIČKO-KEMIJSKA KARAKTERIZACIJA I BIOAKTIVNOST KOMPLEKSA ODABRANIH BIOMETALA SA 8-HIDROKSIKINOLINOM

PHYSICO-CHEMICAL CHARACTERIZATION AND BIOACTIVITY OF SELECTED BIOMETAL COMPLEXES WITH 8-HYDROXYQUINOLINE

Emir Horozic¹, Amira Cipurković², Halid Junuzović¹,
Melisa Ahmetović¹, Lejla Mekić³

¹Univerzitet u Tuzli, Tehnološki fakultet,
Urfeta Vejzagića 8, 75 000 Tuzla

²Univerzitet u Tuzli, Prirodno-matematički fakultet
Urfeta Vejzagića 4, 75 000 Tuzla

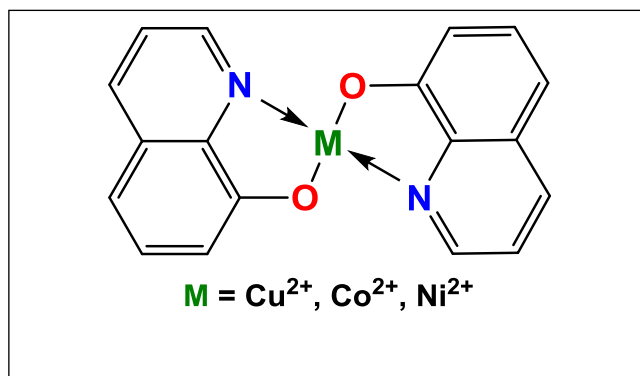
³Univerzitet u Tuzli, Farmaceutski fakultet
Urfeta Vejzagića 8, 75 000 Tuzla

emir.horozic@untz.ba

Sinteza kompleksnih spojeva predstavlja interesantno područje istraživanja zbog njihove potencijalne biološke, katalitičke i inhibitorne aktivnosti. U ovom radu sintetizirani su kompleksi odabranih divalentnih biogenih metala d-bloka (bakra, kobalta i nikla) sa 8-hidroksikinolinom (8-HH). Strukturna analiza kompleksa izvršena je primjenom spektralnih metoda. Antimikrobna aktivnost ispitana je difuzijskom tehnikom na bakterijskim sojevima iz ATCC kolekcije. Antioksidativni kapacitet analiziran je FRAP i DPPH metodom. Spektralnom analizom utvrđeno je da 8-HH koordinira metalne ione kao bidentatni NO-donorski ligand. Uzimajući u obzir spektralne podatke, dolazi se do zaključka da Cu(II) ion sa 8-HH formira kompleks kvadratno-planarne geometrije, dok preostala dva kompleksa uslijed vezivanja molekule/a vode za metalni centar formiraju geometrijske oblike karakteristične za komplekse većih koordinacijskih brojeva. 8-HH pokazuje jako antimikrobno djelovanje u slučaju svih testiranih sojeva. Antimikrobna aktivnost sintetiziranih kompleksa je značajno manja u odnosu na matični ligand. Zone inhibicije M(II) kompleksa kreću se u rasponu od 15-28 mm što ih i dalje svrstava u komponente visokog antimikrobnog djelovanja. Najslabiji antimikrobni efekt evidentiran je kod Cu(II) kompleksa dok je najveća inhibitorna aktivnost uočena kod Ni(II) kompleksa. Analizom antioksidativnog kapaciteta utvrđena je visoka redukcijska sposobnost 8-HH i sintetiziranih kompleksa.

162

Ključne riječi: 8-HH, bakar, kobalt, nikl, bioaktivnost



ODABIR OTAPALA ZA UČINKOVITU EKSTRAKCIJU POLIBROMIRANIH DIFENIL ETERA IZ UZORAKA KUĆNE PRAŠINE UZ POMOĆ MIKROVALOVA

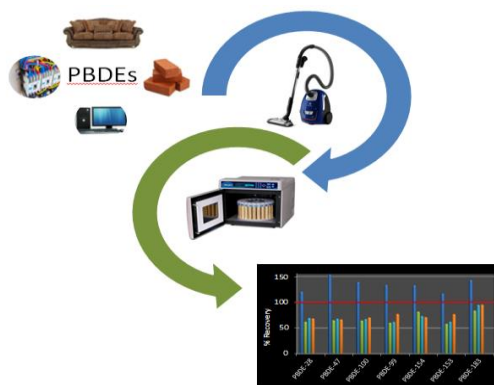
SOLVENT SELECTION FOR EFFECTIVE EXTRACTION OF POLYBROMINATED DIPHENYL ETHERS FROM HOUSE DUST SAMPLES USING MICROWAVES

Karla Jagić, Darija Klinčić, Marija Dvorščak

Institute for Medical Research and Occupational Health
Ksaverska cesta 2, 10000 Zagreb
kjagic@imi.hr

Polybrominated diphenyl ethers (PBDEs) are highly persistent, hydrophobic and semi-volatile organic pollutants used as additive flame retardants in a variety of textile materials, furniture fillers, building materials, electronic and electrical equipment. When added to polymers, they do not form chemical bonds with materials and can therefore easily migrate into the surrounding air, dust, soil, and water during the use, disposal and/or recycling of treated materials. Microwave-assisted extraction (MAE) of 7 PBDEs (BDE-28, BDE-47, BDE-99, BDE-100, BDE-153, BDE-154 and BDE-183) from house dust samples was performed with 20 mL of solvent at 80 °C for 10 minutes, using a power of 600 W. Purified extracts were then analyzed by gas chromatography on a dual capillary column system with dual electron capture detectors. Investigation of MAE performance (recovery, repeatability) using different extraction solvents was performed by analyzing spiked dust samples. For that purpose, the analytes were added to dust at a mass fraction of 10 ng mL⁻¹. The solvents tested for extraction of the target analytes from house dust were: *n*-hexane; dichloromethane (9:1), *n*-hexane:dichloromethane (1:1), *n*-hexane:NaOH (10 % w/v) (1:1), *n*-hexane:acetone (1:1), *n*-hexane:2-propanol (1:1), *n*-hexane: ultrapure water (10:1). Both, *n*-hexane:acetone (1:1) and *n*-hexane:ultrapure water (10:1) achieved an efficient extraction with good recoveries and repeatability, and also reduced the chromatographic background. Ultimately, *n*-hexane:acetone (1:1) was selected as the best extraction solvent because of better reproducibility results. Besides that, since there was no additional step of removing water by adding Na₂SO₄, the loss of analytes, consumption of chemicals and sample processing time were reduced. The overall recoveries for MAE using *n*-hexane:acetone (1:1) as extraction solvent ranged from 63 to 96% with relative standard deviation between 6 and 18%.

This work was financially supported by Project No. HrZZ-UIP-2017-05-6713 – *Development, validation and application of analytical methods for PBDE determination (DeValApp)* funded by the Croatian Science Foundation.



A COMPARISON OF GREEN CHEMISTRY METHODS IN SYNTHESIS OF QUINAZOLINONE BASED SCHIFF BASES

Mario Komar¹, Fran Prašnikar², Maja Molnar¹

¹Josip Juraj Strossmayer University of Osijek, Faculty of Food Technology Osijek
Franje Kuhača 20, 31000 Osijek

²Josip Juraj Strossmayer University of Osijek, Department of Biology
Ulica cara Hadrijana 8/A, 31000 Osijek
mario.komar@ptfos.hr

In the recent years, to avoid or minimize the damage of environment, ultrasound-assisted synthesis (UAS), microwave-assisted synthesis (MAS) and mechanochemical synthesis (MS) are important modern green techniques for synthesis of organic compounds. The quinazolinone core and its derivatives have been studied because of their wide range of biological activities such as antibacterial, antifungal, antitumor, anticollusant, antiinflammatory and antimicrobial. The main goal of this study was to investigate the yields and time required for the completion of reaction for Schiff bases. A series of quinazolinone based Schiff bases were synthesized via condensation of 3-amino-2-methyl-4(3*H*)quinazolinone with substituted benzaldehydes by microwave, ultrasound and mechanochemical mixing. The novel procedure features short reaction time, moderate yields and simple workup.



SYNTHESIS AND STRUCTURAL CHARACTERIZATION OF NOVEL POTENTIAL BIOLOGICALLY ACTIVE BENZIMIDAZOLE AMIDE DERIVATIVES

Marija Kos, Donata Jambriško, Nataša Perin,
Maja Cindrić, Marijana Hranjec

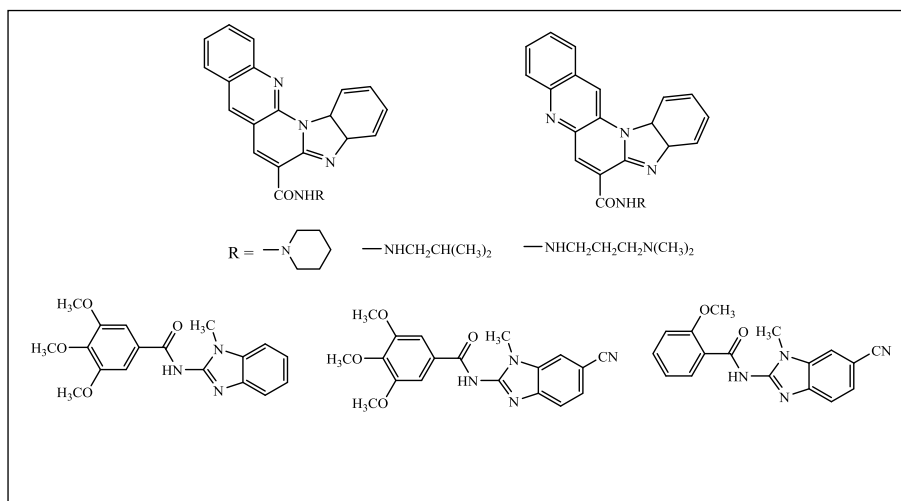
Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije
Marulićev trg 19, 10000 Zagreb
mkos1@fkit.hr

Over the past few years substituted benzimidazoles and their azino fused derivatives have been one of the most extensively studied classes of heterocyclic compounds and the constant and growing interest for their synthesis is owed mostly to their well-known broad range of biological features [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.

Herein we present the synthesis and structural characterization of novel pentacyclic amide benzimidazole derivatives as well as *N*-substituted benzimidazole derived amides substituted with methoxy groups. For the synthesis of novel targeted compounds, classical organic synthesis reactions as well as photochemical and microwave assisted synthesis were used. Additionally, structural and spectroscopic characterization of prepared benzimidazole derivatives was achieved by using NMR and UV/Vis spectroscopy as well as mass spectrometry.

[1] M. Aleksić, B. Bertoša, R. Nhill, Sabine Depauw, I. Martin-Kleiner, M. David-Cordonnier, S. Tomić, M. Kralj, *Eur. J. Med. Chem.* 71 (2014) 267–281.

[2] N. Perin, R. Nhili, M. Cindrić, B. Bertoša, D. Vušak, I. Martin-Kleiner, W. Laine, G. Karminski-Zamola, M. Kralj, M. H. David-Cordonnier, M. Hranjec, *Eur. J. Med. Chem.* 122 (2016) 530-545.



MECHANOCHEMICAL SYNTHESIS OF GRAPHENE OXIDE FOR FABRICATION OF 3D GRAPHENE-BASED HYDROGEL/AEROGEL

Magdalena Kralj¹, Irena Sović¹, Ivan Halasz¹,
Antonio Supina², Davor Čapeta²

¹Institute Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, 10000 Zagreb

²Institut za fiziku, Bijenička cesta 46, 10000 Zagreb

mkralj@irb.hr

Past few decades, graphene oxide (GO) has attracted significant attention due to its excellent properties that can be utilized for various other applications such as electronic and energy storage devices, biosensors and optical materials. Nevertheless, large-scale production of high quality GO is still a challenging task for researchers and since industrial-scale chemical synthesis of GO are inherently generating large amount of toxic, it is more than necessary to find a cheaper and cleaner way of its production. [1]

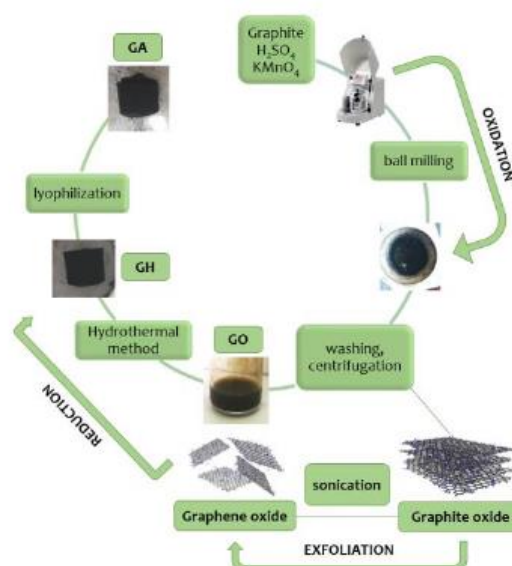
However, recently mechanochemical reactions offers advantages over traditional solvent based chemistry reflected in better yields and selectivity, better energy- and atom-economy and reduced waste generation. [2]

Herein, we report versatile and eco-friendly approach to prepare GO by use of mechanochemical ball milling and fabrication of 3D graphene-based mesoporous frameworks via easy and eco-friendly hydrothermal process using as synthesized GO. Graphene hydrogels are a new class of 3D carbon monoliths holding promise for applications as diverse as electrochemical energy storage, CO₂ capture, tissue engineering and pollutant adsorption. They consist of entangled layers of graphene, albeit they partially retain the excellent properties of monolayer graphene. [3]

[1] A.M. Dimidiev, S. Eigler, Wiley (2016).

[2] J.L. Howard, Q. Cao, D.L. Browne, Chem. Sci. 9, 3080 (2018)

[3] H.P. Cong, X.C. Ren, P.Wang, S.H. Yu, ACS Nano 6, 2693 – 2703 (2012)



NOVI ANTRACENSKI ANALOG TRIARILBORAN FLUOROFORA U INTERAKCIJAMA S DNA, RNA I PROTEINIMA

NOVEL ANTHRACENE ANALOG OF TRIARYLBORANE FLUOROPHORE WITH DNA, RNA AND PROTEIN INTERACTIONS

Ivona Krošl¹, Željka Ban¹, Stefanie Griesbeck², Todd B. Marder²,
Ivo Piantanida¹

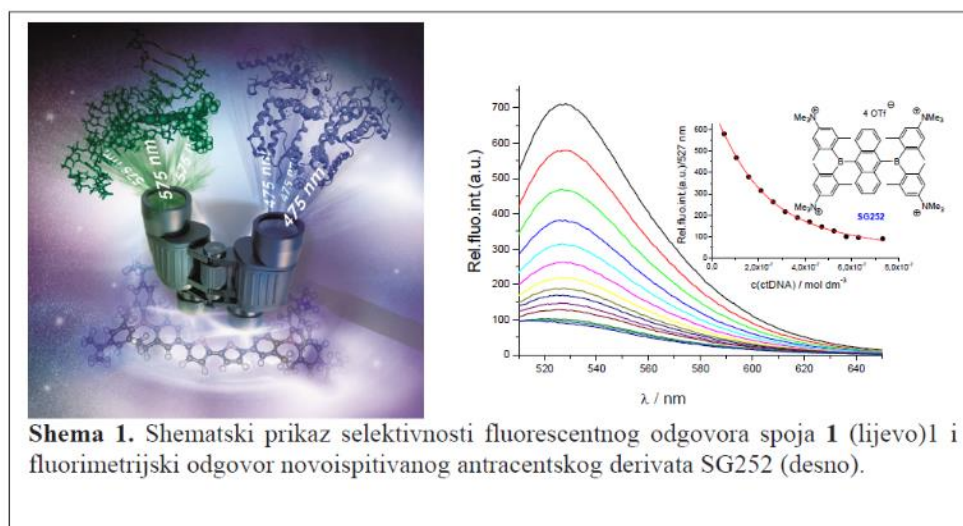
¹Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, 10000 Zagreb

²Institut für Anorganische Chemie, and Institute for Sustainable Chemistry & Catalysis
with Boron, Julius-Maximilians-Universität Würzburg, Würzburg, Germany
ikros1@irb.hr

U raznim biološkim ili biokemijskim eksperimentima, kao i u mnogim medicinskim dijagnostičkim testovima, koriste se fluorescentne probe male molekulske mase, s tim da mala veličina molekule predstavlja izazov u dizajniranju novih selektivnih proba. Jedan od naših ciljeva je sintetizirati malu molekulsku probu koja se veže na nekoliko različitih biomakromolekula (DNA, proteini) dajući različiti spektroskopski odgovor za različite biomolekule. Nedavno smo pokazali kako novi triaril-bor-fluorofor (Shema 1, lijevo) omogućuje istodobnu kvantifikaciju DNA / RNA i proteina (BSA) u otopini, zahvaljujući tome što može razlikovati između DNA/RNA i BSA uz pomoć fluorescentne emisije, $\Delta\lambda = 100$ nm. U ovdje predstavljenim istraživanjima novopripravljeni antracenski analog (Shema 1, SG252) je pokazao snažno vezanje za ds-DNA, ds-RNA, ss-RNA i BSA praćeno različitim fluorescentnim odgovorima.

167

¹Ž. Ban, S. Griesbeck, S. Tomić, J. Nitsch, T. Marder, I. Piantanida, Chem. Eur. J. (2019) doi.org/10.1002/chem.201903936.



ODREĐIVANJE TOKSIČNOSTI BAKTERIJOM *Vibrio fischeri* STANDARDNIH OTOPINA FARMACEUTIKA I PRIMJENA NA REALNE UZORKE

TOXICITY DETERMINATION BY *Vibrio fischeri* BACTERIA FOR STANDARD SOLUTIONS OF PHARMACEUTICALS AND APPLICATION TO REAL SAMPLES

Kristina Kukrika, Danijela Ašperger

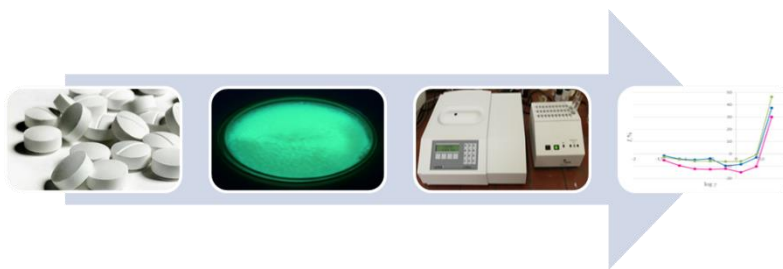
Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije
Marulićev trg 19, 10000 Zagreb
kkukrika@fkit.hr

Posljednjih godina bilježi se stalni rast broja oboljelih i broja novih bolesti, što za posljedicu ima sve veću potrošnju farmaceutika. Kako svi farmaceutski aktivni spojevi prije ili kasnije završe u okolišu (najviše vodenom) potrebno je istražiti njihov utjecaj na isti, obzirom da već u vrlo malim dozama izazivaju određene farmakološke i fiziološke učinke.

U ovom je radu ispitivana toksičnost široko primjenjivanih farmaceutika, ali i realnih uzoraka nakon obrade otpadnih voda naprednim oksidacijskim procesima. Ispitivani farmaceutici se svrstavaju u tri skupine prema načinu djelovanja: antibiotike (gentamicin), antihelmintike (ivermektin, klozantel, mebendazol) i kemoterapeutske agense (hidroksiklorokin). Toksičnost je ispitivana standardnom DIN 38412 L34 metodom primjenom luminiscentne bakterije *Vibrio fischeri* koja je osjetljiva na organske onečišćujuće tvari.

Zamijećen je isti trend rasta krivulja toksičnosti kod svih ispitanih ksenobiotika. Međutim, niti jedan nije izazvao potpunu inhibiciju bakterijske kulture. Od standardnih otopina ksenobiotika, najveću inhibiciju je pokazao gentamicin, zatim klozantel i ivermektin, dok se mebendazol pokazao pogodnim za rast bakterijske kulture. Uzorci vode hidroksiklorokina nakon primjene naprednih oksidacijskih procesa pokazali su vrlo nisku toksičnost što ukazuje na mogućnost primjene takvog sustava obradbe vode i u realnom sektoru.

168



ORGANSKA TVAR I NUSPRODUKTI DEZINFEKCIJE U VODOOPSKRBNOM SUSTAVU PAKRAC-LIPIK

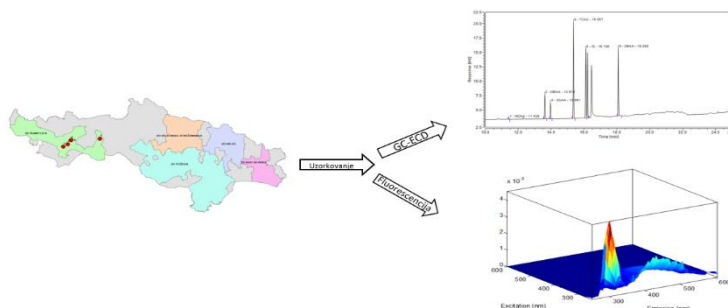
ORGANIC MATTER AND DISINFECTION BYPRODUCTS IN WATER SUPPLY SYSTEM PAKRAC-LIPIK

Livia Kurajica, Magdalena Ujević Bošnjak, Jurica Štiglić

Hrvatski zavod za javno zdravstvo, Rockefellerova 7, 10000 Zagreb
livia.kurajica@hzjz.hr

Reakcijom prirodne organske tvari i dezinfekcijskog sredstva nastaju nusprodukti dezinfekcije. Napoznatiji nusprodukti dezinfekcije klorom su trihalometani (THM) i haloacetene kiseline (HAA). Potreba za praćenjem njihovih koncentracija u vodi za piće proizlazi iz potencijalno štetnog djelovanja na ljudsko zdravlje. U Republici Hrvatskoj postavljena dozvoljena granica za koncentraciju ukupnih THM iznosi $100 \mu\text{g L}^{-1}$, dok maksimalna dozvoljena koncentracija za ukupne HAA nije definirana. Kako bi se razumjeli mehanizmi nastajanja nusprodukata dezinfekcije potrebno je karakterizirati organsku tvar koja je prisutna u vodi. Najbolja metoda za karakterizaciju organske tvari je fluorescentna spektroskopija odnosno snimanje ekscitacijsko-emisijskih matrica (EEM) pomoću kojih se simultano snimaju fluorescentni podaci kroz široki raspon ekscitacijskih i emisijskih valnih duljina. Za modeliranje podataka najčešće se koristi Parallel Factor Analysis (PARAFAC), statistička tehnika za istraživanje fluorescentnih spektara. Predmet istraživanja ovog rada bio je Vodoopskrbni sustav Pakrac-Lipik od sirove vode do vode na slavini u periodu od lipnja do listopada 2019. Karakterizirana je organska tvar fluorescentnom spektroskopijom i određeni su nusprodukte dezinfekcije. Provedena je i statistička analiza podataka pomoću programa Statistica. Za opisivanje fluorescentnih podataka napravljen je dvokomponentni model. Prvu komponentu čine huminske kiseline, a druga komponenta sadrži proteine u strukturi i naziva se tirozin. THM i HAA u uzorcima su nađeni u rasponu koncentracija od ispod granice kvantifikacije do $63,0 \mu\text{g L}^{-1}$, odnosno do $40,3 \mu\text{g L}^{-1}$.

169

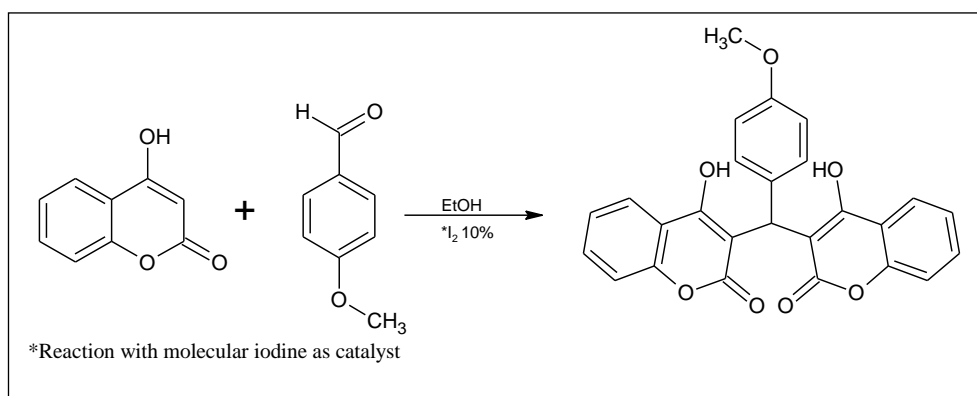


APPLYING GREEN METHODS IN SYNTHESIS OF BISCOUMARIN FROM 4-HYDROXYCOUMARIN

Mirjana Lončar, Maja Molnar

Josip Juraj Strossmayer University of Osijek, Faculty of Food Technology Osijek
Franje Kuhaca 20, 31000 Osijek
mirjana.loncar@ptfos.hr

The aim of our work was to synthesise biscoumarins by condensing 4-methoxybenzaldehyde with 4-hydroxycoumarin, using ethanol as a reaction medium and applying three different „green“ methods: microwave irradiation, ultrasound irradiation and synthesis in a ball mill. The reactions were carried out: a) in catalyst-free conditions, b) using catalytic amount of molecular iodine. The results show that the usage of iodine as a catalyst enhances these reactions, reduces the reaction time and increases yields compared to the reaction under catalyst-free conditions.



JEDNOSTAVNA HPLC METODA ZA ODREĐIVANJE LIMUNSKKE KISELINE U VOĆNIM SOKOVIMA U ZELENIM UVJETIMA

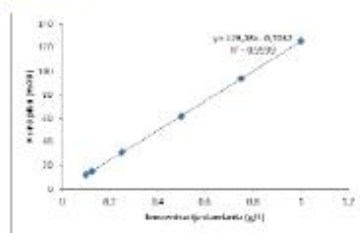
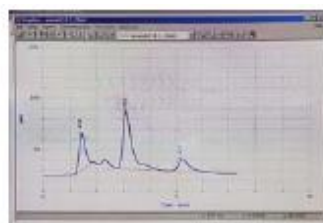
SIMPLE, GREEN HPLC ANALYSES OF CITRIC ACID IN FRUIT JUICES

Maja Ljepović, Suzana Inić, Jasna Jablan, Ana-Marija Domijan

Farmaceutsko-biokemijski fakultet Sveučilišta u Zagrebu
sinic@pharma.hr

Cilj ovog istraživanja je odrediti koncentraciju limunske kiseline u uzorcima prirodnih i komercijalno dostupnih voćnih sokova na hrvatskom tržištu. Koncentracija limunske kiseline u voćnim sokovima ($n = 15$) određena je pomoću tekućinske kromatografije visoke djelotvornosti (HPLC) s UV/Vis detektorom u zelenim uvjetima uz primjenu 100% vodene mobilne faze. Korištena je kolona RP-18 (125 x 4,6 mm, 5 μm ; LiChrospher, Merck, Darmstadt, Njemačka). Mobilna faza bila je 50 mM fosfatni pufer (pH = 2,8) s protokom 0,5 mL/min, a valna duljina detektora bila je podešena na 214 nm. Metoda je ispitana standardnim otopinama limunske kiseline u koncentracijskom rasponu od 0,1 do 1,0 g/L. U ispitivanom području metoda je bila linearna (koeficijent korelacije, $R^2 = 0,9999$). Ponovljivost metode, izražena kao relativna standardna devijacija (RSD) bila je ispod 2,5%, a srednja preciznost izražena kao relativna standardna devijacija (RSD) iznosila je manje od 3%. Granica dokazivanja bila je 0,01 g/L, a granica određivanja 0,03 g/L što pokazuje da je metoda osjetljiva za određivanje koncentracije limunske kiseline u voćnim sokovima. Koncentracija limunske kiseline u šest komercijalno pribavljenih voćnih sokova bila je u rasponu od 1,42 g/L (sok od miješanog voća) do 4,42 g/L (sok od naranče). Izmjerene koncentracije u pet uzoraka prirodnih voćnih sokova iznosile su od 0,32 g/L (sok miješanog voća) do 7,66 g/L (sok od naranče), a u četiri uzorka prirodnog soka koncentracija limunske kiseline je bila ispod detekcijskog limita. Iz dobivenih rezultata može se zaključiti da je HPLC metoda brza i pouzdana za određivanje limunske kiseline u uzorcima voćnih sokova. Budući da je u sedam uzoraka, koncentracija limunske kiseline prelazila propisima dozvoljenu vrijednost, važno je pratiti njenu koncentraciju u svim prehrambenim proizvodima zbog poznatih štetnih utjecaja limunske kiseline na zdravlje ljudi.

171



SINTEZA I STRUKTURNA ANALIZA KOMPLEKSA KOBALTA(III) S PIPERIDIN-*N*-ACETAMIDOM I 2,2'- BIPYRIDINOM

SYNTHESIS AND STRUCTURAL ANALYSIS OF COBALT(III) COMPLEX WITH PIPERIDINE-*N*- ACETAMIDE AND 2,2'-BIPYRIDINE

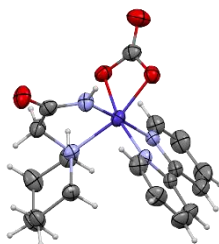
Aleksandar Mandić, Darko Vušak, Biserka Prugovečki, Dubravka
Matković-Čalogović

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

Kompleksi prijelaznih metala s heterocikličkim bazama te s derivatima aminokiselina vrlo su važni u bioanorganskoj kemiji zbog mogućnosti interkalacije u dvostruku uzvojnici DNA zbog čega imaju izražena antiproliferativna svojstva. Takvi kompleksi u čvrstom stanju često tvore porozne strukture u kojima se mogu skladištiti molekule otapala ili drugih tvari [1,2]. Također, često se udružuju nekovalentnim interakcijama, kao što su π -interakcije aromatičnih motiva i vodikove veze, pri čemu nastaju supramolekulske arhitekture koje su predmet istraživanja u kristalnom inženjeringu.[3]

Sintetiziran je i strukturno analiziran novi oktaedarski kompleks kobalta(III) s piperidin-*N*-acetamidatom (pipAcNH), koji je ranije okarakteriziran u našoj grupi [4], i 2,2'-bipiridinom te karbonatnim ionom, $[\text{Co}(\text{CO}_3)(\text{pipAcNH})(\text{bpy})] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ (slika 1). Ovisno o reakcijskim uvjetima, dobiven je i spoj već poznat u kristalografskoj bazi podataka (engl. *Cambridge Structural Database*) [5], $[\text{Co}(\text{CO}_3)(\text{bpy})_2]\text{Cl} \cdot 6\text{H}_2\text{O}$. Karbonatni ioni potječu od ugljikovog dioksida iz zraka. Oba su spoja porozna te sadrže beskonačne 1D kanale vode. Spoj **1** kristalizira u monoklinskom sustavu u prostornoj grupi $P2_1/c$ s parametrima jedinične ćelije $a = 13,4340(17) \text{ \AA}$, $b = 9,1196(8) \text{ \AA}$, $c = 17,2419(19) \text{ \AA}$, $\beta = 105.533(15)^\circ$. Kompleksi se π -interakcijama međusobno povezuju u dimere, koji su N-H \cdots O vodikovim vezama povezani u 2D slojeve.

- [1] S. R. Liao, X. Y. Le, X. L. Feng, *J. Coord. Chem.* 61 (2008) 847.
[2] M. T. Bordignon Luiz, B. Szpoganicz, M. Rizzoto, M. G. Basallote, A. E. Martell, *Inorg. Chim. Acta* 287 (1999) 134.
[3] D. Vušak, B. Prugovečki, D. Milić, M. Marković, I. Petković, M. Kralj, D. Matković-Čalogović, *Cryst. Growth Des.* 17 (2017) 6049.
[4] D. Cindrić, I. Krvarić, N. Smrečki, D. Vušak, B. Prugovečki, D. Matković-Čalogović, 5. Simpozij studenata kemičara, Zagreb, 27. listopada 2018.
[5] K. Das, U. C. Sinha, C. Chatterjee, A. Mishnev, *Z. Krist. Cryst. Mater.* 205 (1993) 316.



Slika 1. Struktura kompleksa $[\text{Co}(\text{CO}_3)(\text{pipAcNH})(\text{bpy})] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$. Prikazana je jedinka bez molekula kristalizacijskih voda radi jednostavnosti prikaza.

KONTROLIRANO I UČINKOVITO UKLAPANJE C₆₀-FULERENA UNUTAR SODALITNE METAL-ORGANSKE MREŽE S MALIM APERTURAMA

CONTROLLABLE AND HIGHLY EFFICIENT ENTRAPMENT OF C₆₀-FULLERENE IN SODALITE MOF WITH SMALL APERTURES

Valentina Martinez, Bahar Karadeniz, Krunoslav Užarević

Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, 10000 Zagreb
valentina.martinez@irb.hr

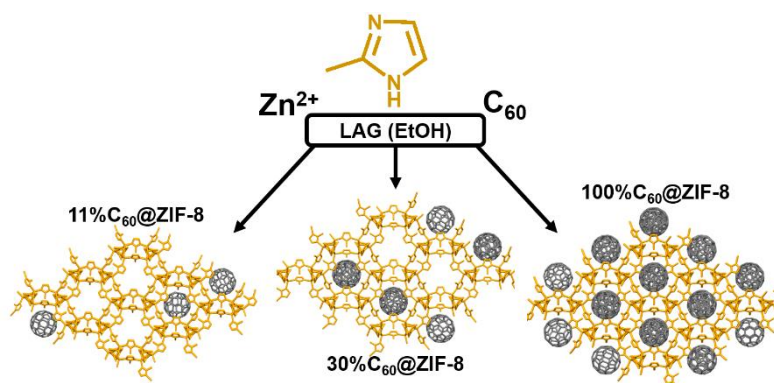
Fulereni su visoko-istraživana alotropska modifikacija ugljika u obliku kuglastih šupljih molekula koje mogu biti funkcionalizirane na površini, ili sadržavati određene atome ili molekule u unutrašnjosti (endofulereni). U modernoj kemiji materijala su intenzivno istraživani kao molekulski nanoreaktori, katalizatori ili senzorski materijali, ovisno o tipu funkcionalne skupine.¹ Naročito je interes za hibridne materijale koji imaju definiran raspored fulerena u prostoru jer mogu pokazati neka zanimljiva magnetska i fotokemijska svojstva. Današnje tehnike sinteze takvih materijala među ostalim uključuju kokristalizaciju te uklapanje u porozne materijale među kojima su i metal-organske mreže.² Metal-organske mreže su visoko uređene trodimenzionalne strukture s porama ili kanalima, građene od metalnih iona premoštenih organskim molekulama. U spomenute pore se tijekom ili nakon sinteze mogu uklopiti molekule odgovarajuće veličine.³

U ovom radu izučavana je učinkovitost uklapanja fulerena u sodalitnu strukturu ZIF-8 uz pomoć mljevenja potpomognutog tekućinom (LAG). Sodalitne strukture specifične su zbog velikih pora s malim otvorima koje onemogućavaju migraciju većih gostiju poput fulerena, ali u isto vrijeme otežavaju sintezu takvih hibridnih materijala klasičnim otopinskim metodama. U ovom smo radu pokazali da mehanokemijska sinteza pri kojoj se mreža formira oko molekule fulerena omogućuje brzu i kontroliranu sintezu hibridnog C₆₀@ZIF-8 materijala te daje daleko bolje rezultate od post-sintetske enkapsulacije putem natapanja ZIF-8 u otopini fulerena ili otopinske sinteze ZIF-8 u otopini koja sadržava veliki suvišak fulerena. Štoviše, mehanokemijskim pristupom omogućena je kontrola količine fulerena uklopljene unutar sodalitne strukture čime se kontroliraju i svojstva konačnih C₆₀@ZIF-8 materijala.

1) F. Langa De La Puente, J.-F. Nierengarten, Fullerenes: Principles and Applications, RSC (2007) Cambridge

2) S. Goswami, D. Ray, K. Otake, C. Kung, S. J. Garibay, T. Islamoglu, A. Atilgan, Y. Cui, C. J. Cramer, O. K. Farha, J. T. Hupp, *Chem. Sci.*, 2018, **9**, 4477-4482; A. Kouloumpis, K. Spyrou, K. Dimos, V. Georgakilas, P. Rudolf D. Gournis, *Front. Mater.* 2015, **2**, 1-8

3) Q. Zhu and Q. Xu, *Chem. Soc. Rev.*, 2014, **43**, 5468-5512



SYNTHESIS AND STRUCTURAL CHARACTERIZATION OF ORGANIC AND INORGANIC SALTS OF DABCO BETAINAMIDE DERIVATIVES

Mia Mesić, Leon Poljanić, Kristina Smokrović, Ivica Đilović,
Dubravka Matković-Čalogović

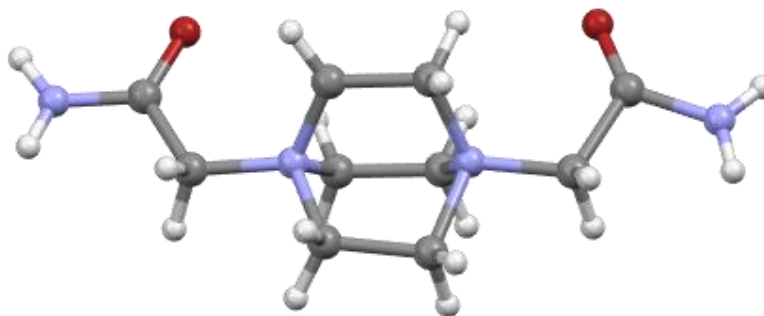
Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet
Horvatovac 102a, 10000 Zagreb
mmesic@chem.pmf.hr

Betaines and betainamides are a class of naturally occurring glycine derivatives. They are characterised by an alkylated, quaternary amino group, and are easily prepared. Interactions of betainamides are not well studied with the context of crystal engineering, even though they provide an interesting class of cations that are both capable of coordinating metal cations and forming hydrogen bond networks with anions as well as cations.[1]

A series of organic and inorganic salts were prepared with 1,4-bis(carbamoylmethyl)-1 λ^4 ,4-diazabicyclo[2.2.2]octan-4-ium (DABCO betainamide) as a cation. This cation was chosen not only for its propensity for the formation of hydrogen bonds, but for its limited flexibility as well as the lack of aromatic rings. The purpose of this work is to examine whether the chosen cation can act as a receptor for specific anion due to a set of specific directional and nondirectional intermolecular interactions, mainly as an acceptor or donor of hydrogen bonds and electrostatic effects.

[1] Walters, M. et al. *Inorg. Chem.* (2005) **44** 1172-1174

This work has been funded by the Croatian Science Foundation (IP-2014-09-4274).



EFFECT OF THE LINKER LENGTH AND AMIDE GROUP ORIENTATION ON CHIRAL BPA COMPLEXES OF Zn(II) AND Cu(II)

Natalija Pantalón Juraj¹, Dominik Moreth^{1,2}, Robert Vianello¹,
Ulrich Schatzschneider², Srećko I. Kirin¹

¹Ruđer Bošković Institute, Bijenička cesta 54, 10000 Zagreb

²Julius-Maximilians-Universität, Am Hubland, Würzburg

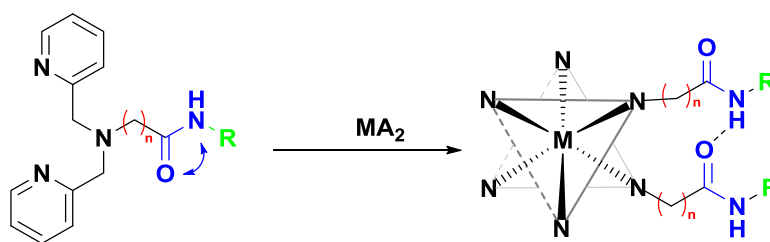
npantal@irb.hr

Bis(2-picolyl)amine (**bpa**) and its derivatives are tridentate ligands known for the formation of complexes with late transition metals that found use as enzyme mimics, metal ion sensors and anticancer agents. In the Cambridge Structural Database, a variety of **bpa** complexes are described, such as monomers, dimers and coordination polymers. [1]

In this work, six chiral **bpa** ligands and their complexes with Zn(II) and Cu(II) were prepared and characterized by NMR, UV-Vis and CD spectroscopy. The stoichiometry, stereochemistry and possibility of different hydrogen bonding patterns were studied by DFT calculations. To optimize the formation of **ML₂** complexes, several variations were introduced into the ligand structure, such as the length of the CH₂ linker, orientation of the amide group (-CO-NH- or -NH-CO-) and different chiral substituents. In **ML₂** complexes, the ligands have the possibility of forming one or two intramolecular hydrogen bonds. In these hydrogen bonded secondary structures, transfer of chirality by "backdoor induction" to the metal centre is possible and such complexes could selectively catalyse enantioselective reactions. [2]

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

[2.] Opačak, S.; Kokan, Z.; Glasovac, Z.; Perić B.; Kirin, S. I., *Eur. J. Org. Chem.* **2019**, (11), 2115-2128.



Synthesis of bis(2-picolyl)amine complexes of **ML₂** stoichiometry.

M = Zn(II), Cu(II); A = CF₃SO₃⁻, R = (S)-1-phenylethanamine, L-Phenylalanine methyl ester, L-(N-acetyl)-phenylalanine or cholamide and n = 1 or 2.

KOROZIJSKA ZAŠTITA BAKRA DUGOLANČANIM ORGANSKIM KISELINAMA

CORROSION PROTECTION OF COPPER WITH LONG- CHAIN ORGANIC ACIDS

Ena Pezić, Lucija Tarle, Dajana Mikić

Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije Sveučilišta u Zagrebu,
Trg Marka Marulića 19, 10 000 Zagreb
epezic@fkit.hr

Kako bi se spriječilo razaranje konstrukcijskih materijala, potrebna je kvalitetna zaštita od korozije. Jedna od novih metoda zaštite od korozije je formiranje samoorganizirajućih monoslojeva (SAM) organskih kiselina na površini metala.

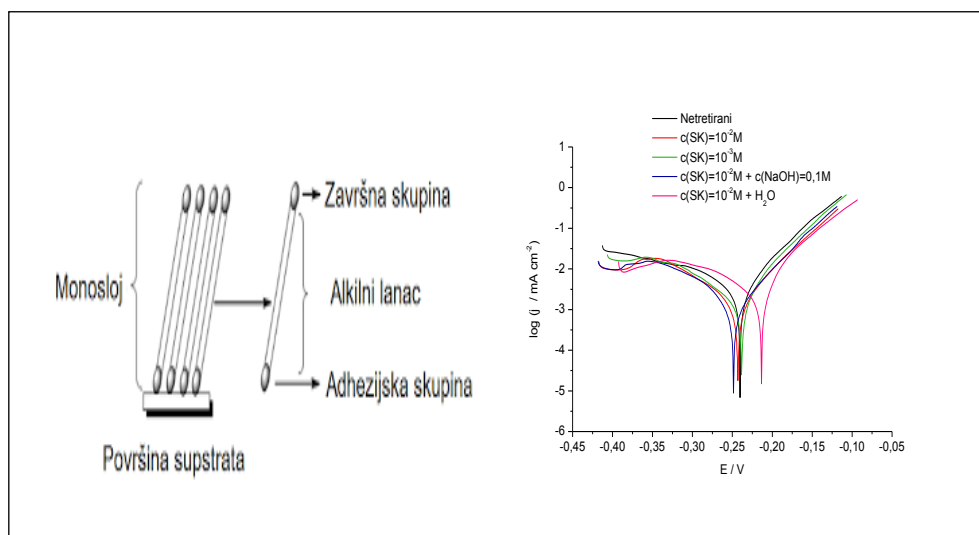
U ovom radu proučavana je korozijska zaštita čistog bakra formiranjem SAM-ova stearinske (SK) i oktadecilfosfonske (ODPA) kiseline različitih koncentracija pri različitim eksperimentalnim uvjetima. Korozijski medij bila je 3%-tna otopina NaCl-a.

Mjerenja su provedena elektrokemijskim tehnikama s izmjeničnom (AC) i istosmjernom (DC) strujom. Od DC tehnika su se provodile metoda Tafelove ekstrapolacije i metoda linearne polarizacije, dok se od AC tehnika koristila elektrokemijska impedancijska spektroskopija (EIS). Za ispitivanje površinskih karakteristika uzorka koristila se goniometrija i infracrvena spektrometrija s Fourierovom transformacijom signala (FTIR).

Istraživanja u ovom radu pokazuju da na površini bakra dolazi do formiranja filma SK i ODPA što je potvrđeno FTIR spektroskopijom te taj film čini površinu hidrofobnom što je potvrđeno goniometrijom. Elektrokemijska ispitivanja ukazuju da se najbolja korozijska zaštita postiže pripremom filmova u otopinama viših koncentracija SK (10^{-2} M) i ODPA (10^{-3} M).

Dobiveni rezultati pokazuju da nastali filmovi daju korozijsku zaštitu koja nije dugotrajna u ispitivanom agresivnom mediju.

177



SYNTHESIS AND STRUCTURAL CHARACTERIZATION OF MIXED AMINO-ACID COMPLEXES OF COPPER(II)

Leon Poljanić, Kristina Smokrović, Ivica Đilović,
Dubravka Matković-Čalogović

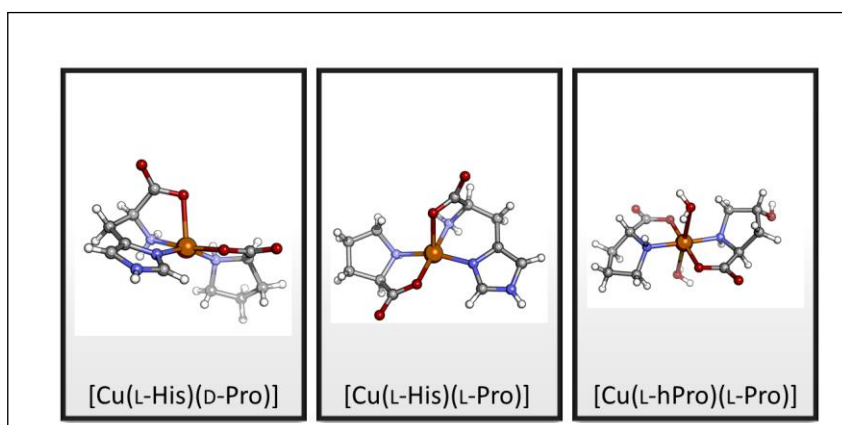
Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet
Horvatovac 102a, 10000 Zagreb
lpoljanic@chem.pmf.hr

Copper complexes with amino acids (AK) have been known for a long time and structures of the $\text{Cu}(\text{AK})_2$ type are known for all natural amino acids except cysteine. However, mixed complexes are not nearly as well researched, with only 9 recorded structures in the CSD crystallographic database (Cambridge Structural Database) out of more than 1500 possible combinations of different amino-acids. In this work we have prepared three new mixed amino-acid complexes with histidine and proline derivatives by reacting equimolar amounts of copper (II) hydroxide and selected amino acids (L- and D-proline, L-histidine, L-hydroxyproline) in a mixture of water, methanol and dimethylformamide (1: 1: 0.1). The unit crystals of three new mixed complexes were obtained: Cu (L-His) (L-Pro), Cu (L-His) (D-Pro), and Cu (L-hPro) (L-Pro). The crystal structures of the prepared complexes were determined by X-ray diffraction on a unit crystal at room temperature. All three complexes crystallize as hydrates and form complicated three-dimensional hydrogen bonding networks with water molecules.

[1] Taizo, O., Hirotsuka, S., Yoshio, S., Takeshi, S., Osamu, Y., Akitsugu, N., Bull. Chem. Soc. Jpn. **52** (1979) 2229.

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

This work has been funded by the Croatian Science Foundation (project no. IP-2014-09-4274).



IDENTIFIKACIJA PUTEVA RAZGRADNJE PIMAVANSERIN LJEKOVITE DJELATNE TVARI

IDENTIFICATION OF DEGRADATION PATHWAYS OF PIMAVANSERIN ACTIVE PHARMACEUTICAL INGREDIENT

Irena Radić¹, Mislav Runje¹, Sandra Babić²

¹Pliva HRVATSKA d.o.o, Prilaz Baruna Filipovića 25, 10000 Zagreb

²Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije
Marulićev trg 19, 1000 Zagreb

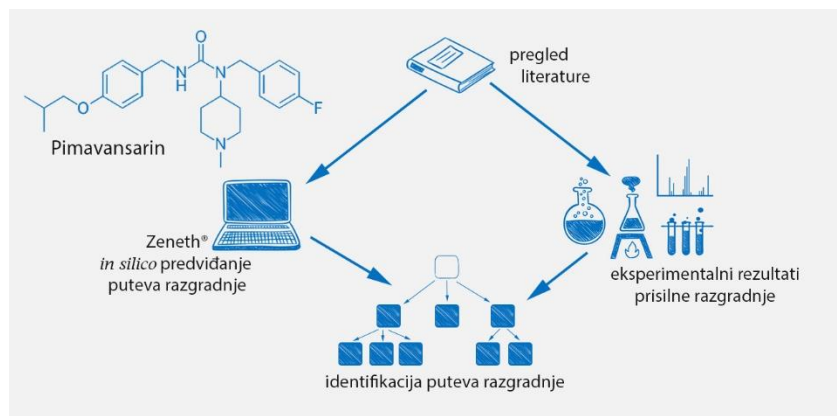
irena.radic01@pliva.com

Pimavanserin je atipični antipsihotik koji je odobren za liječenje Parkinsonove bolesti, a također se istražuje za liječenje Alzheimerove bolesti, psihoze, shizofrenija, velikog depresivnog poremećaja. Onečišćenje je svaki sastojak ljekovite djelatne tvari koji nema definiran kemijski entitet kao ljekovita tvar ili svaki sastojak farmaceutskog proizvoda koji nije ljekovita ili pomoćna tvar u samom proizvodu, a mogu nastati tijekom proizvodnog procesa ljekovite tvari ili se formirati prilikom razgradnje same ljekovite tvari. Nastali produkti razgradnje mogu biti potencijalno genotoksični, mutageni ili kancerogeni. Kvantitativno određivanje, identifikacija i strukturna karakterizacija onečišćenja u djelatnoj tvari kao i procjena biološke sigurnosti svakog pojedinog onečišćenja nakon provedenih testova prisilne razgradnje postavlja nove izazove i ciljeve moderne kemijske analize u farmaceutskoj industriji. U ovom radu opisana je primjena računalnog programa Zeneth[®] (Lhasa Limited, Leeds, UK) za predviđanje puteva prisilne razgradnje pimvanserin ljekovite djelatne tvari. Ljekovita djelatna tvar je podvrgnuta studiji prisilne razgradnje (kisela i bazična hidroliza, oksidacija, povišena temperatura i utjecaj svjetlosti) [1, 2], a nastali razgradni produkti identificirani su primjenom kromatografije ultravisoke djelotvornosti vezane sa spektrometrijom masa visoke razlučivosti (UHPLC-QTOF). Na temelju dobivenih MS i MS/MS spektara, kao i na temelju predviđanja puteva prisilne razgradnje dobivenih pomoću Zeneth[®] računalnog programa, predložene su strukture nastalih produkata razgradnje.

179

[1] International Conference on Harmonisation, Stability Testing of New Drug Substances and Products Q1A (R2), IFPMA, Geneva, 2003.

[2] International Conference on Harmonisation, Photo Stability Testing of New Drug Substances and Products, Q1B, IFPMA, Geneva, 1996.



TOKSIČNOST FARMACEUTIKA U BINARIM SMJESAMA

TOXICITY OF PHARMACEUTICALS IN BINARY MIXTURES

Edi Radin, Marija Sigurnjak, Šime Ukić, Matija Cvetnić, Marko Rogošić, Tomislav Bolanča

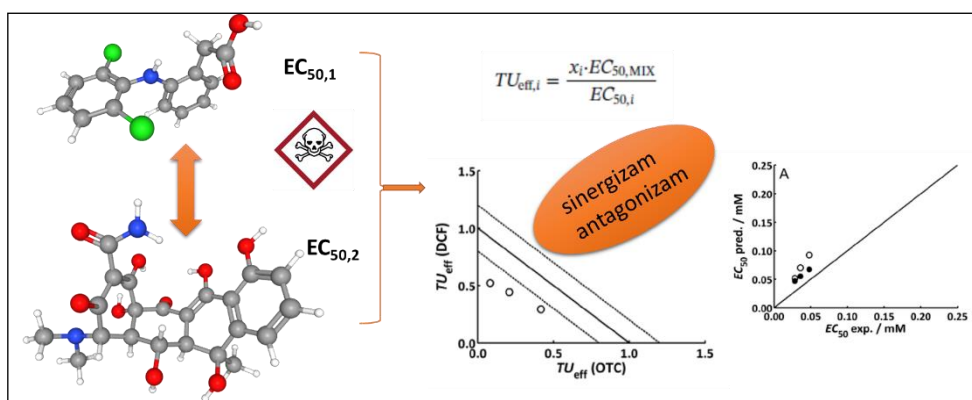
Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije
Marulićev trg 19, 10000 Zagreb
eradin@fkit.hr

Sve veća potrošnja i upotreba farmaceutika posljedica je intenzivnog rasta broja stanovnika, otkrića novih lijekova te povećanja udjela starije populacije u razvijenim zemljama. Brzi rast svjetske populacije rezultirao je i globalnim povećanjem osviještenosti o važnosti pitke vode te sukladno tome intenzivnijim monitoringom okoliša.

Farmaceutici su jedna od tvari čija prisutnost u vodenom mediju predstavlja potencijalnu prijetnju organizmima. Iako su u okolišu prisutni uglavnom u koncentracijama koje se ne smatraju štetnim za ljudsko zdravlje, mnogi od njih kumulativno mogu uzrokovati štetne učinke; to znači da se stvarni rizik krije u dugoročnoj izloženosti. U mnogim zemljama, uključujući Europsku Uniju, procjena rizika još uvijek je uglavnom usmjerena na analizu efekata čistih tvari, a manje na njihove smjese, iako su upravo smjese tvari najčešće prisutne u okolišu. Problem sa smjesama onečišćivala jest u činjenici da smjese mogu imati veću toksičnost od zasebnih komponenta (sinergizam).

Za potrebe istraživanja odabrano je šest farmaceutika, redom: azitromicin, eritromicin, karbamazepin, oksitetraciklin, deksametazon i diklofenak, te je analizirana njihova zasebna ali i zajednička toksičnost u binarnim smjesama. Ukupno je analizirana toksičnost 45 binarnih smjesa. Primijenjena su dva najčešće korištena modela za opis toksičnosti smjesa: aditivni model (engl. *Concentration addition model*) i model neovisnog djelovanja (engl. *Independent action model*). Usporedbom predviđenih i eksperimentalno određenih vrijednosti toksičnosti dobivena je informacija o mehanizmu toksičnog djelovanja ispitanih farmaceutika u smjesama.

Ovo istraživanje financirano je sredstvima Hrvatske zaklade za znanost kroz projekt pod nazivom *Modeliranje okolišnih aspekata napredne obrade voda za razgradnju prioriternih onečišćivala* (MEAoWT, IP-09-2014-7992).



CONJUGATES OF PURINE AND PURINE ISOSTERES WITH FERROCENE: SYNTHESIS AND BIOLOGICAL EVALUATION

Valentina Rep¹, Helena Šimek¹, Martina Piškor¹, Petra Mišetić², Petra Grbčić³, Jasna Padovan², Vesna Gabelica¹, Sandra Kraljević Pavelić³, Silvana Raić-Malić¹

¹University of Zagreb, Faculty of Chemical Engineering and Technology
Marulićev trg 19, 10000 Zagreb

²GlaxoSmithKline Research Centre Zagreb
Ul. Damira Tomljanovića 15, 10000 Zagreb

³University of Rijeka, Department of Biotechnology
Radmile Matejčić 2, 51000 Rijeka
vrep@fkit.hr

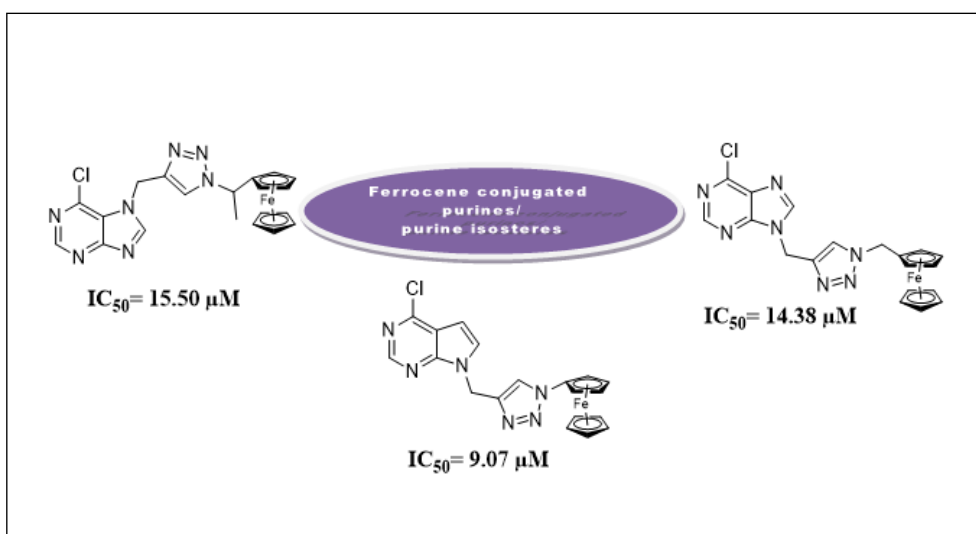
On account of their extensive biological activity, nucleoside analogs present an important role as chemotherapeutic agents. [1,2] In recent years it has been observed that incorporation of organometallic fragments into biomolecules provides compounds with antitumor activity. [3] Taking into consideration the biological relevance of ferrocene and nucleoside analogs, novel purine and purine isosteres containing a ferrocene N-1-substituted 1,2,3-triazole (**11a-c**, **12a-c**, **13a-c**, **14a-c**, **15a-c**, **16a**, **23a-c**, **24a-c**, **25a-c**) and a ferrocene 4-substituted 1,2,3-triazole moiety (**34a-c**, **35a-c**) attached to variety of heterocyclic bases were prepared using copper-catalyzed azide-alkyne cycloaddition (CuAAC) reaction of corresponding azidoferrocene precursors and propargylated purine derivatives. Of all tested compounds, ferrocene conjugates **11c** ($IC_{50} = 9.07 \mu M$), **13a** ($IC_{50} = 14.38 \mu M$) and **15b** ($IC_{50} = 15.50 \mu M$) displayed marked antiproliferative activity against colorectal adenocarcinoma cell line. ADME properties (kinetic solubility, microsomal stability and permeability) of synthesized compounds were also studied. Preliminary results of **13a** and **15a** showed their high solubility and moderate metabolic stability.

181

[1] S. Raić-Malić, A. Mešičić, *Curr. Med. Chem.* 2015, 22, 1462

[2] T. Gazivoda, M. Šokčević, M. Kralj, L. Šuman, K. Pavelić, E. De Clercq, G. Andrei, R. Snoeck, J. Balzarini, M. Mintas, S. Raić-Malić, *J. Med. Chem.* 2007, 50, 4105; S. Prekupec, D. Makuc, J. Plavec, L. Šuman, M. Kralj, K. Pavelić, J. Balzarini, E. De Clercq, M. Mintas, S. Raić-Malić, *J. Med. Chem.* 2007, 50, 3037; S. Krištafor, A. Bistrović, J. Plavec, D. Makuc, T. Martinović, S. Kraljević Pavelić, S. Raić-Malić, *Tetrahedron Lett.* 2015, 56, 1222

[3] S. Maračić, J. Lapić, S. Djaković, T. Opačak- Bernardi, Lj. Glavaš- Obrovac, V. Vrček, S. Raić-Malić, *Appl. Organometal Chem.* 2019, 33, 4628



NOVI TRIPEPTID KOJI UČINKOVITO VEŽE BAKROV(II) ION I DVOLANČANU DNA

NEW TRIPEPTIDE WITH EFFICIENT BINDING OF COPPER(II) ION AND DOUBLE-STRANDED DNA

Karla Ribičić, Biserka Žinić, Ivo Piantanida

Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, 10000 Zagreb
kribicic@fkit.hr

Mnogi proteini vrlo efikasno vežu metalne katione (npr. albumini seruma vežu Cu^{2+} s $\log K_s = 14$) i na tome baziraju svoju biološku aktivnost. Zanimljivo je kako i neki vrlo kratki peptidi mogu tvoriti stabilne komplekse s metalnim kationima, recimo W-H-W peptid efikasno kompleksira prijelazne metale poput bakra. S druge strane, peptidi s triptofanima (W) se nekovalentno vežu na DNA ili RNA.

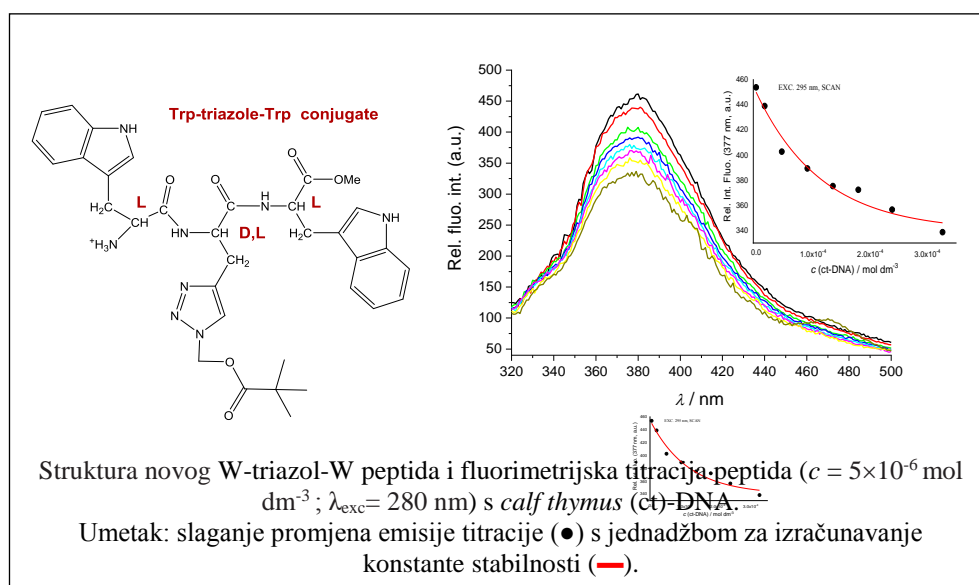
Uzevši u obzir oba svojstva (W-H-W vezanje bakra i interakcije s DNA/RNA) te kako Cu^{2+} u određenim uvjetima može efikasno cijepati DNA ili RNA polinukleotidni lanac, u ovom radu pripremljen je novi analog W-H-W, gdje je histidin zamjenjen triazolom.

W-triazol-W efikasno koordinira Cu^{2+} u vodenom mediju s $\log K_s = 5,3$ uz značajno gašenje fluorescencije triptofana. Dodatno, W-triazol-W je pokazao biorelevantne interakcije s dvolančanom DNA (Shema 1, $\log K_s \sim 5$), te preliminarni rezultati ukazuju kako i kompleks W-triazol-W / Cu^{2+} također interagirira s DNA, s mogućnošću cijepanja.

¹F. Tisato, C. Marzano, M. Porchia, M. Pellei and C. Santini, Medicinal Research Reviews 2010, 30, 708-749.

²K. P. Mahon, M. D. Roy, J. R. Carreon, E. G. Prestwich, J. L. Rouge, S. Shin and S. O. Kelley, Chembiochem 2006, 7, 766-773

182



TOKSIČNOST BINARNIH SMJESA ALAKLORA, KLORFENVINFOSA, DIURONA I IZOPROTURONA

TOXICITY OF BINARY MIXTURES OF ALACHLOR, CHLORFENVINPHOS, DIURON AND ISOPROTURON

Marija Sigurnjak, Edi Radin, Šime Ukić, Matija Cvetnić, Marko Rogošić,
Tomislav Bolanča

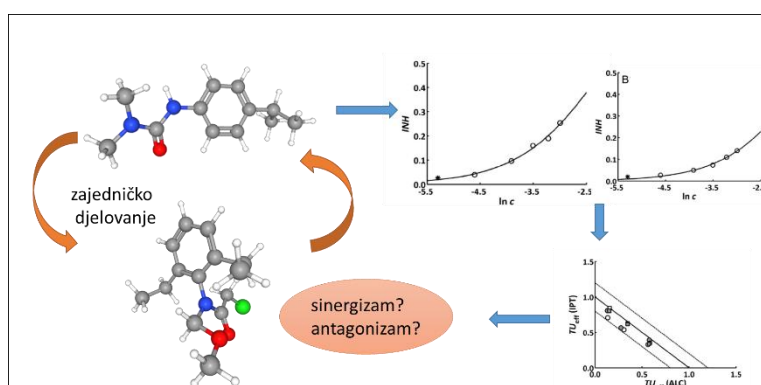
Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije
Marulićev trg 19, 10000 Zagreb
marijas@fkit.hr

Intenzivan ekonomski rast praćen porastom svjetske populacije rezultirao je povećanjem onečišćenja voda. Želeći očuvati relativno ograničene vodene resurse, dolazi do praćenja tvari čija prisutnost u vodama predstavlja opasnost po vodeni okoliš. Među ostalim, javila se i potreba za praćenjem pesticida čiji štetni utjecaj na okoliš je očekivan, a kontinuirana intenzivna upotreba dovodi do povećane koncentracije u vodama.

Iako su vodeni mediji najčešće kokteli različitih onečišćivala čije zajedničko djelovanje u nekim slučajevima rezultira aditivnim efektom, ponekad antagonizmom (smanjenje toksičnosti), a ponekad, što je za okoliš posebno pogubno, sinergizmom (veća toksičnost), procjena rizika i dalje se uglavnom provodi na temelju rezultata ispitivanja toksičnosti zasebnih onečišćivala. Upravo stoga, spoznaje su o zajedničkom djelovanju onečišćivala iznimno važne u procjeni rizika.

Podatci o toksičnim efektima smjesa pesticida u literaturi su vrlo oskudni. Ovaj rad donosi rezultate toksičnosti četiriju pesticida koja se nalaze na Europskoj listi prioriternih onečišćivala u području vodne politike: alaklora, klorfenvinfosa, diurona i izoproturona, kao i njihovih binarnih smjesa. Toksičnost je određena prema bakteriji *Vibrio fischeri*. U opisu djelovanja smjesa primjenjena su dva modela, aditivni model i model neovisnog djelovanja pri čemu su promatrane dvije razine toksičnosti: EC_{10} i EC_{50} . Analizom je utvrđen aditivni efekt u svim smjesama pesticida, osim u slučaju binarne smjese izoproturona i klorfenvinfosa, gdje je uočeno sinergističko djelovanje.

Ovo istraživanje financirano je sredstvima Hrvatske zaklade za znanost kroz projekt pod nazivom *Modeliranje okolišnih aspekata napredne obrade voda za razgradnju prioriternih onečišćivala* (MEaWT, IP-09-2014-7992).



SINTEZA, STRUKTURNA KARAKTERIZACIJA I ANTIBAKTERIJSKA AKTIVNOST NOVIH BENZOTIAZOLNIH DERIVATA

SYNTHESIS, STRUCTURAL CHARACTERIZATION AND ANTIBACTERIAL ACTIVITY OF NOVEL BENZOTHIAZOLE DERIVATIVES

Ivana Sokol¹, Mateja Novak¹, Helena Prpić¹, Marijan Orlović²,
Domagoj Drenjančević², Silvana Raić-Malić¹, Tatjana Gazivoda Kraljević¹

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

²Sveučilište Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku, Medicinski fakultet Osijek
Josipa Huttlera 4, 31000 Osijek

tgazivod@fkit.hr

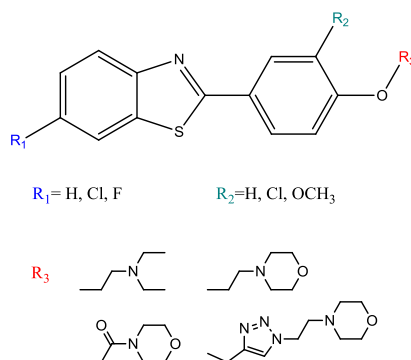
Benzotiazol i njegovi derivati pripadaju važnoj skupini sintetskih spojeva u organskoj i medicinskoj kemiji zahvaljujući širokom spektru biološkog djelovanja poput antitumorskog, antimikrobnog i antituberkulostatskog.¹ 2-supstituirani derivati benzotiazola pokazali su izraženo djelovanje na tumorske stanične linije raka dojke, jajnika, debelog crijeva i bubrega u nanomolarnom području inhibitornih koncentracija.² Nadalje, 1,2,3-triazolni prsten ima važnu ulogu kao farmakofor i poveznica zbog rigidne strukture i *in vivo* stabilnosti, a lako se priprema Huisgenovom 1,3-dipolarnom cikloadicijom, poznatom i kao klik reakcija.³

S ciljem ispitivanja antimikrobne aktivnosti sintetizirani su novi derivati 6-halobenzotiazola supstituirani u položaju 2 arilnim supstytutentima. Reakcijom 4-hidroksibenzaldehida s različito supstituiranim tiofenolima dobiveni su odgovarajući 6-halo-2-(4-hidroksifenil)benzotiazoli koji su nadalje reakcijom *O*-alkiliranja prevedeni u 2-(4-alkoksifenil)benzotiazolne derivate i reakcijom propargiliranja uz NaH ili K₂CO₃ kao bazu u *O*-propargilirane derivate benzotiazola. Ciljani 1,4-disupstituirani 1,2,3-triazolni derivati benzotiazola sintetizirani su bakrom kataliziranom klik reakcijom odgovarajućih terminalnih alkina i azida mikrovalovima potpomognutim reakcijama. 6-halobenzotiazolni derivati s *p*-*N,N*-dietilaminfenilnim supstytutentom u položaju 2 pokazali su najizraženiju aktivnost protiv gram-pozitivnih bakterijskih sojeva rezistentnih na antibiotike.

[1] R. S. Keri, M. R. Patil, S. A. Patil, S. Budagumpi, *Eur. J. Med. Chem.* **89** (2015) 207.

[2] T. D. Bradshaw, S. Wrigley, D. F. Shi, R. J. Schultz, K. D. Paull, M. F.G. Stevens, *Br. J. Cancer*, **77**(1998) 745

[3] S. Raić-Malić, A. Mešić, *Current Medicinal Chemistry*, **22** (2015) 1462



SYNTHESIS AND CONFORMATIONAL ANALYSIS OF NOVEL TYPE OF FERROCENE PEPTIDOMIMETICS

Tea Stipčić¹, Sunčica Roca², Lidija Barišić¹, Monika Kovačević¹

¹University of Zagreb, Faculty of Food Technology and Biotechnology
Pierottijeva ul. 6, 10000 Zagreb

²Rudjer Bošković Institute, Bijenička 54, 10 000 Zagreb
monika.kovacevic@pbf.hr

The amide conjugates of 1,*n*-disubstituted ferrocenes and amino acids are well known for their ability to adopt the turn or β -sheet-like structures [1-5], owing to the turn-inducing capacity of ferrocene scaffolds.

Amide-to-ester substitutions in the peptide backbone have proven to be a good tool for evaluating of backbone hydrogen-bonding behaviour of the so-derived depsipeptides [6-7]. Herein, we describe the synthesis of depsipeptide analogue of the previously reported ferrocene peptides [2,4]. The influence of the amide-to-ester substitution on the conformational properties of the depsipeptide **1** is explored by IR, NMR and CD spectroscopy.

[1] Moriuchi, T.; Hirao, T. *J. Incl. Phenom. Macrocycl. Chem.*, **2012**, *74*, 23.

[2] Barišić, L.; Čakić, M.; Mahmoud, K. A.; Liu, Y.; Kraatz, H.-B.; Pritzkow, H.; Kirin, S. I. Metzler-Nolte, N.; Rapić, V. *Chem. Eur. J.*, **2006**, *12*, 4965.

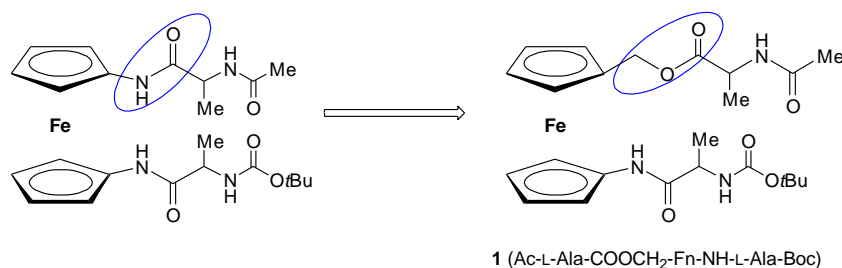
[3] Chowdhury, S.; Mahmoud, K. A.; Schatte, G.; Kraatz, H.-B. *Org. Biomol. Chem.*, **2005**, *3*, 3018.

[4] Kovačević, M.; Kodrin, I.; Cetina, M.; Kmetič, I.; Murati, T.; Čakić Semenčić, M.; Roca, S.; Barišić, L. *Dalton Trans.*, **2015**, *44*, 16405.

[5] Moriuchi, T.; Hirao, T. *Acc. Chem. Res.*, **2010**, *43*, 1040.

[6] Yang, X.; Wang, M.; Fitzgerald, M. C. *Bioorg. Chem.* **2004**, *32*, 438.

[7] Powers, E. T.; Deechongkit, S.; Kelly J. W. *Adv. Protein Chem.* **2006**, *72*, 39.



Ferrocene depsipeptide **1**

INHIBICIJSKI UČINAK EKSTRAKATA PLANIKE (*Arbutus unedo* L.) NA ENZIMSKU AKTIVNOST CYP2C8

INHIBITORY EFFECT OF STRAWBERRY TREE (*Arbutus unedo* L.) EXTRACTS ON THE CYP2C8 ENZYME ACTIVITY

Marija Škrlec¹, Martin Kondža^{1,2}, Željko Maleš¹, Mirza Bojić¹

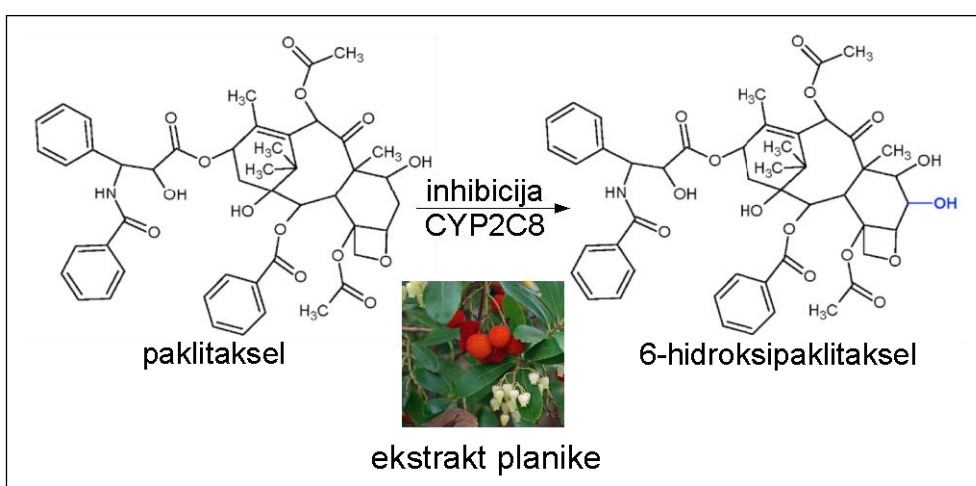
¹Sveučilište u Zagrebu, Farmaceutsko-biokemijski fakultet
Ul. Ante Kovačića 1, 10000 Zagreb

²Sveučilište u Mostaru, Farmaceutski fakultet
Matice Hrvatske bb, 88000 Mostar
mskrlec@student.pharma.hr

Arbutus unedo L. – planika, vazdazeleni je grm ili nisko drvo iz porodice Ericaceae koje raste u zemljama oko Sredozemnog mora. Planika sadrži različite kemijske spojeve, sekundarne metabolite biljaka, kao što su flavonoidi, proantocijanidini, trjeslovine, iridoidi, šećeri i eterično ulje. U farmaciji je od interesa jer djeluje kao adstringens, diuretik, uroantispetik i antidijaroik. Citokrom P450 su najznačajniji enzimi odgovorni za metabolizam lijekova i drugih tvari stranih ljudskom organizmu (ksenobiotika) uključujući sekundarne metabolite biljaka.

Cilj ovog rada bio je utvrditi utjecaj metanolnih ekstrakata planike na enzimsku aktivnost CYP2C8. U tu svrhu korišteno je 12 uzoraka planike skupljenih tijekom 12 mjeseci tijekom 2018. godine. Aktivnost CYP2C8 praćena je primjenom paklitaksela kao marker supstrata koji se djelovanjem navedenog enzima prevodi u 6- hidroksipaklitaksel. Nastali metabolit određen je primjenom obrnuto fazne tekućinske kromatografije visoke djelotvornosti spregnute s UV detektorom. Rezultat je iskazan kao postotak nastalog metabolita u odnosu na kontrolu bez inhibitora. Svi ispitani uzorci inhibirali su nastanak 6-hidroksipaklitaksela te je ostatna enzimska aktivnost iznosila 27% do 54%. Ovi rezultati ukazuju da ekstrakti planike mogu utjecati na enzimsku aktivnost CYP2C8, a temeljem usporedbe s kemijskim sastavom ekstrakata učinak se djelomično može povezati s polifenolnim sastavnicama ekstrakata planike.

186



SINTEZA NOVIH OKSIMSKIH DERIVATA BICIKLO[3.2.1]OKTADIENA KAO POTENCIJALNIH INHIBITORA KOLINESTERAZA

SYNTHESIS OF THE NEW OXIME DERIVATIVES OF THE BICYCLO[3.2.1]OCTADIENE AS POTENTIAL CHOLINESTERASE INHIBITORS

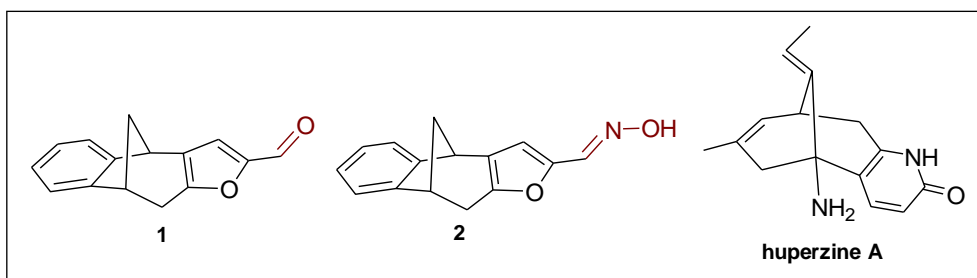
Ana Vukovinski, Ana Grgičević, Irena Škorić

Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije
Marulićev trg 20, 10 000 Zagreb
avukovins@fkit.hr

Spojevi iz skupine oksima poznati su kao dobri reaktivatori fosforiliranih kolinesteraza, kao i njihovi inhibitori [1]. Acetilkinesteraza održava normalnu razinu acetilkolina hidrolizom, a inhibicija ovog enzima posebno je važna kod smanjenja simptoma Alzheimerove bolesti [2]. Prethodno sintetizirani benzobiciklo[3.2.1]oktadieni pokazali su obećavajuće rezultate inhibicijske aktivnosti kolinesteraza, te je nastavljena daljnja funkcionalizacija osnovnog skeleta koristeći formilni derivat **1** kao početni supstrat. Važno je istaknuti da poznati inhibitor kolinesteraza huperzin A također ima metano-premošteni biciklo[3.3.1]oktadienski kostur koji je vrlo sličan biciklo[3.2.1]oktadienskom skeletu. Oksim **2** sintetiziran je u nekoliko stupnjeva Wittigovom reakcijom te Vilsmeierovim formiliranjem iz aldehida **1** [3], a onda preveden u čitav niz novih oksimskih etera koji su izolirani i spektroskopski okarakterizirani. Prilikom sinteze, osim predviđenih produkata, dobiveni su i srodni oksimi i oksimski eteri nastali otvaranjem furanskog prstena na bicikličkom skeletu. Za odabrane oksime i oksimske etere u ulozi inhibitora acetil- i butirilkolinesteraze računalno je ispitana relativna termodinamička stabilnost kompleksa enzim-inhibitor u cilju predviđanja jačine inhibicije [4]. Za sve nove oksimske derivate analizirana su i preliminarna fizikalno-kemijska svojstva te se prema *in silico* modelu za predviđanje aktivnosti pokazalo da spojevi imaju potencijalno dobru CNS aktivnost. Mjerenje njihove inhibicijske aktivnosti pokazat će koliko su eksperimentalni rezultati u skladu s računalnim ispitivanjem, te dati važne informacije o potencijalnom djelovanju novopripređenih oksimskih derivata, kao i u slučaju amino-derivata [5].

187

- [1] I. V. Zueva, S. V. Lushchekina and P. Masson, *Biosci. Rep.*, 2018, 38, 1-10.
[2] a) P. Anand, B. Singh and N. Singh, *Bioorg. Med. Chem.*, 2012, 20, 1175–1180.; b) J. Wiemann, A. Loesche and R. Csuk, *Bioorganic Chemistry*, 2017, 74, 145–157.
[3] I. Kikaš, I. Škorić, Ž. Marinić and M. Šindler-Kulyk, *Tetrahedron*, 2010, 66, 9405-9414.
[4] A. Ratković, K. Pavlović, D. Barić, Ž. Marinić, I. Grgičević, I. Škorić, Irena, *J. Mol. Struct.* 2020, 1200, 127149-127149.
[5] I. Šagud, N. Maček, A. Grgičević, T. Čadež, J. Hodak, M. Dragojević, K. Lasić, Z. Kovarik, I. Škorić, *J. Enzyme Inh. Med. Chem.* (prihvaćen za objavljivanje).



OKSIDACIJSKI STRES U KLIJANCIMA VRSTE *SINAPIS ALBA* L. NAKON IZLOŽENOSTI EKSTRAKTU VRSTE *IMPATIENS GLANDULIFERA* ROYLE

OXIDATIVE STRESS IN *SINAPIS ALBA* L. SEEDLINGS EXPOSED TO *IMPATIENS GLANDULIFERA* ROYLE EXTRACT

Katarina Zelić¹, Ivan Duka¹, Tihana Vilović¹, Željkan Maleš¹, Mirza Bojić¹,
Božena Mitić², Dario Hruševac², Ana-Marija Domijan¹

¹Sveučilište u Zagrebu, Farmaceutsko-biokemijski fakultet
Ul. Ante Kovačića 1, 10000 Zagreb

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

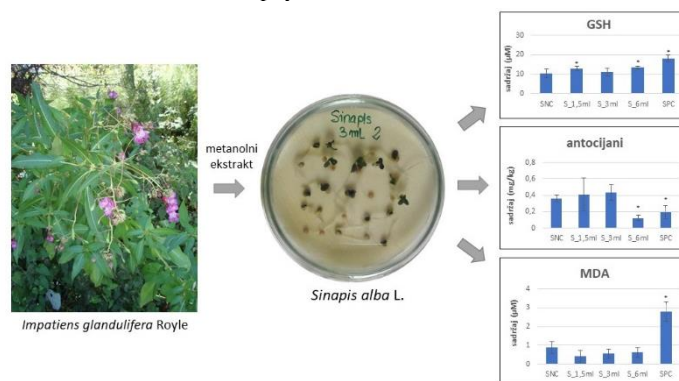
kzelic@student.pharma.hr

U ovom istraživanju ispitan je učinak metanolnog ekstrakta žljezdastog neditka, *Impatiens glandulifera* Royle, Balsaminaceae na parametre oksidacijskog stresa u klijancima bijele gorušice - *Sinapis alba* L., Brassicaceae. Sjemenke vrste *S. alba* tijekom tri dana bile su izložene metanolnom ekstraktu vrste *I. glandulifera* kojim je impregniran filter papir u tri različite doze (1,5; 3 i 6 mL). U pokus je uključena negativna kontrola (filter papir impregniran s deioniziranom vodom) i pozitivna kontrola (impregnacija s 0,02 M CuSO₄). Pokusi su provedeni u tri ponavljanja. Homogenat biljnoga tkiva (100 mg tkiva) pripremljen je s trikloroocetnom kiselinom (0,5 mL TCA). U supernatantu je izmjeren sadržaj neproteinskih tiola (GSH), antocijana i malondialdehida (MDA). Sadržaj GSH izmjeren je prema Ellmanu (Ellman, 1959), sadržaj antocijana određen je pH-diferencijalnom metodom prema Giusti i Wrolstadu (2001), a sadržaj MDA pomoću tiobarbituratnog testa (Heath i Packer, 1968). Dobiveni rezultati obrađeni su statistički (Statistica 8.0, StatSoft, 2007). Sadržaj GSH u tretiranim klijancima vrste *S. alba* bio je viši u odnosu na negativnu kontrolu ($10,4 \pm 2,4 \mu\text{M}$) te je u uzorcima tretiranim sa 6 mL ekstrakta vrste *I. glandulifera* bio značajno viši od negativne kontrole ($13,4 \pm 0,7 \mu\text{M}$; $p < 0,05$). Tretman s ekstraktom vrste *I. glandulifera* uzrokovao je sniženje sadržaja antocijana te je izloženost najvišoj dozi dovela do statistički značajno nižeg sadržaja antocijana ($0,13 \pm 0,03 \text{ mg/kg}$) u odnosu na negativnu kontrolu ($0,36 \pm 0,04 \text{ mg/kg}$; $p < 0,05$). Sadržaj MDA u tretiranim klijancima vrste *S. alba* nije se razlikovao od negativne kontrole ($p > 0,05$). Dobiveni rezultati pokazuju da je ekstrakt vrste *I. glandulifera* u klijancima bijele gorušice uzrokovao promjene u sadržaju GSH i antocijana te se može zaključiti da je došlo do oksidacijskog stresa.

G.L. Ellman, Arch Biochem Biophys, 1959

MM. Giusti i R.E. Wrolstad, Curr Prot in Food Anal Chem, 2001

R.L. Heath, L. Packer, Arch Biochem Biophys, 1968.



INTERAKCIJE DERIVATA BENZIMIDAZOLNIH AMIDA S DNA I RNA

DNA AND RNA INTERACTIONS OF BENZIMIDAZOLE AMIDINES

Iva Zonjić¹, Marijana Radić Stojković¹, Andrea Bistrović Popov²,
Silvana Raić-Malić²

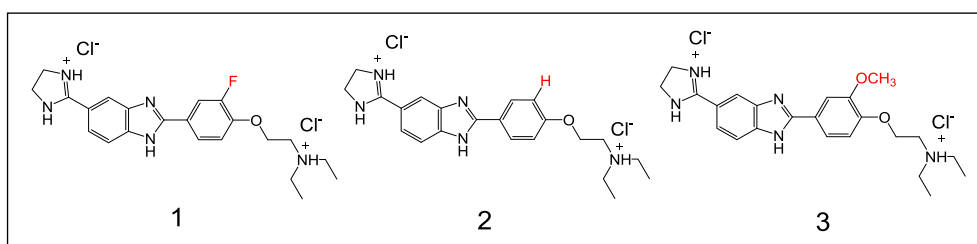
¹Ruđer Bošković Institute, Bijenička 54, Zagreb, Croatia

²University of Zagreb, Faculty of Chemical Engineering and Technology
Marulićev trg 20, 10000 Zagreb
izonjic@irb.hr

A series of novel benzimidazole amidines derivatives are synthesized at the Department of Organic Chemistry, Faculty of Chemical Engineering and Technology. They differ only in one substituent (-F vs -H vs -OCH₃) attached on phenyl ring (Figure 1.). These three compounds were selected for the binding study with DNA and RNA based upon their antitrypanosomal activity. Binding of studied compounds to DNA and RNA polynucleotides (ctDNA, poly(dAdT)₂, poly(dGdC)₂ and poly A – poly U) was monitored with the fluorescence spectroscopy. CD titrations and ΔT_m experiments were used for a determination of the binding modes (intercalation, groove binding, external binding).

Interestingly, even though benzimidazole amidines derivatives differ only in one substituent, they caused opposite changes in fluorescence upon interaction with studied polynucleotides. While addition of derivatives 1 and 2 caused a decrease of fluorescence in the presence of DNA/RNA, the addition of any polynucleotide resulted exclusively in strong emission increase of derivate 3 which can probably be ascribed to donor properties of methoxy group. All three compounds exhibited positive induced CD spectra (ICD) with ctDNA, poly(dAdT)₂ and poly A – poly U. Usually, a positive ICD band, with an intensity similar or stronger than CD band of DNA/RNA, strongly supports the minor groove binding to DNA or the major groove binding to ds-RNA [1]. Thus, it can be concluded that studied compounds bind to minor groove of ctDNA and AT-DNA and to major groove of ds-RNA.

[1] Šmidlehner, T.; Piantanida, I.; Pescitelli, G. *Beilstein J. Org. Chem.* **2018**, *14*, 84–105.



A series of novel benzimidazole amidines derivatives
which differ only in one substituent on phenyl ring.

NOVI KOMPLEKSI TRANZICIJSKIH METALA S TENOILTRIFLUOROACETONOM: SINTEZA, SPEKTRALNA KARAKTERIZACIJA I *IN VITRO* BIOLOŠKA AKTIVNOST

NOVEL TRANSITION METAL COMPLEXES WITH TENOILTRIFLUOROACETONE: SYNTHESIS, SPECTRAL CHARACTERIZATION AND *IN VITRO* BIOLOGICAL ACTIVITY

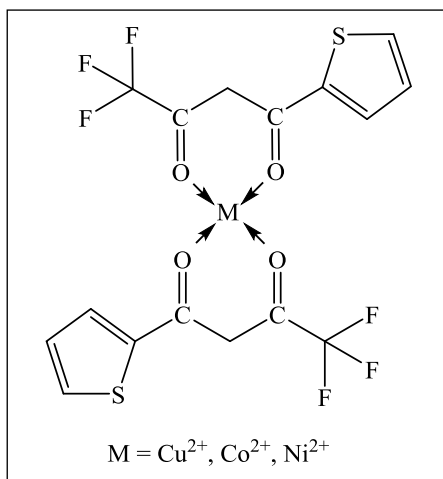
Amila Zukić¹, Emir Horozić², Zahida Ademović², Jasmin Suljagić²,
Amra Džambić¹, Demir Bjelošević¹, Lamija Kolarević¹

¹Univerzitet u Tuzli, Farmaceutski fakultet
Univerzitetska 8, 75 000 Tuzla

²Univerzitet u Tuzli, Tehnološki fakultet
Univerzitetska 8, 75 000 Tuzla
amila.zukic@outlook.com

Tenoiltrifluoroaceton (TTFA) je helatni farmakološki agens. U pogledu strukture ispunjava osnovni uvjet za kompleksiranje jer sadrži dva donorska atoma kisika iz karbonilne grupe. U ovom radu sintetizirani su kompleksi odabranih tranzicijskih metala (bakra, kobalta i nikla) sa TTFA. Strukturne karakteristike dobivenih produkata određene su primjenom spektroskopskih metoda. Morfologija kristala analizirana je primjenom binokularnog mikroskopa. Antimikrobna aktivnost ispitana je difuzijskom tehnikom na sojevima i ATCC kolekcije (*E. coli*, *E. faecalis*, *B. subtilis*, *L. monocytogenes*, *S. aureus*, *P. aeruginosa* i *C. albicans*).

Na osnovi dobivenih spektralnih podataka utvrđeno je da TTFA koordinira metalne ione kao bidentatni O-donorski ligand, pri čemu se formiraju kompleksi tetraedarske geometrije. Difuzijskom tehnikom uočena je značajna antimikrobna aktivnost sintetiziranih kompleksa (pri koncentraciji od 5 mg mL⁻¹). Cu(TTFA)₂ kompleks pokazao je značajnu inhibicijsku aktivnost u slučaju svih mikroorganizama, sa zonama inhibicije u rasponu od 17-25 mm. Značajno antibakterijsko djelovanje Co(TTFA)₂ kompleksa utvrđeno je kod *E. coli*, *B. subtilis* i *L. monocytogenes*. Slabije djelovanje utvrđeno je kod *S. aureus* i *P. aeruginosa* dok je potpuni izostanak aktivnosti evidentiran kod *E. faecalis*. Ni(TTFA)₂ kompleks pokazuje slabiju antibakterijsku aktivnost u odnosu na Co(TTFA)₂. Antifungalno djelovanje utvrđeno je kod Cu(II) i Co(II) kompleksa, sa zonom inhibicije od 19 mm.



POKROVITELJI | *UNDER THE AUSPICES OF*



Ministarstvo znanosti i obrazovanja



Sveučilište u
Zagrebu



HIS

HRVATSKI INŽENJERSKI SAVEZ
CROATIAN ENGINEERING ASSOCIATION

SPONZORI | *SPONSORS*

CLASS PLUS

GORIVA



Šešal

JURAJ ŠEBALJ
RALLY VOZAČ

Poboljšana formula
za bezbrižnu vožnju.

INA
Dokazano najbolja.

Dodatno se upoznajte s našim poslovanjem na www.pliva.hr, a pozivamo vas da se povežete s nama i putem društvenih mreža.



Jeste li se ikada zapitali kako bi bilo raditi u PLIVI?

PLIVA veliku pažnju posvećuje suradnji s akademskom zajednicom te aktivno sudjelujemo u brojnim studentskim projektima. Prve korake suradnje s PLIVOM zainteresirani studenti mogu ostvariti putem stručne prakse, a kroz dugu tradiciju stipendiranja značajna sredstva usmjeravamo u stipendiranje vrhunskih studenata. Uspješna suradnja sa studentima motivira i usmjerava naša daljnja nastojanja u pridonosaženju kvalitetnijem studentskom životu i osiguravanju pozitivnog imidža PLIVE među zajednicama studenata.



About Xellia Pharmaceuticals

Integrating Science and Innovation to Save Lives

Xellia Pharmaceuticals is a world leader in the development, manufacturing and supply of fermented anti-infectives sold as active pharmaceutical ingredients and finished dosage forms to key pharmaceutical industry companies. Headquartered in Copenhagen, Denmark and owned by Novo A/S, Xellia Pharmaceuticals has more than 1600 employees globally. From state-of-the-art manufacturing sites in the U.S., China, Denmark and Hungary to R&D sites in Norway and Croatia; Xellia Pharmaceuticals excels within innovative product development to deliver high quality products to its customers. Based on our long-term expertise, we bring value for our stake holders and signify a patient-centric mindset through an embedded corporate motivation of, integrating science and knowledge to save lives.

Our product portfolio of anti-bacterial and anti-fungal products used for the treatment of severe infections, including infections caused by multi-resistant bacteria and fungi, is the foundation for our growth strategy within the antibiotics' sector.

Xellia is the leading supplier of important anti-infectives Vancomycin and Colistimethate Sodium (CMS). Our success and strong market position is built on more than 100 years' of pharmaceutical industry experience.

Xellia Pharmaceuticals' focus its R&D investments within inhalable and injectable product technologies as we are committed to researching solutions, which not only improve patients' quality of life, but will also ultimately save lives.

Supplying products to more than 70 countries world-wide and with more than 500 customers internationally, Xellia Pharmaceuticals places a high regard on maintaining strong relationships with its customers. Our sales team serves as the first point of contact for customers, ensuring fast and accurate delivery of product information; through managing orders to delivery.

Xellia Pharmaceuticals' Global Technical Support team serves as the main point of contact for customers to provide them with specialized support for all technical matters that may be associated with market entry and launch of products. Working collaboratively with the sales team and cross-functionally with Xellia's internal departments at all sites, Xellia Pharmaceuticals is dedicated to providing reliable outstanding service to its customers at all times.

For further information please visit our website www.xellia.com

S PRIRODOM U ČISTIM ODNOSIMA.

Agroproteinka je moderna hrvatska tvrtka i lider u ekološkom zbrinjavanju nusproizvoda životinjskog podrijetla i biorazgradivog otpada. Tvrtka koja doprinosi jačanju poslovnih načela kružnog gospodarstva i održivog razvoja.

Baštinimo 60- godišnju tradiciju brige za zdravlje ljudi, životinja i okoliša. U svojim najsuvremenijim pogonima dobivamo sirovinu za hranu za kućne ljubimce, sirovinu za biodiesel, energente te toplinsku i električnu energiju. Stoga je već prihvatljivo i standardno za Agroproteinku da iz izdvojenih životinjskih nusproizvoda i otpada naše svakodnevnice, stvara nove proizvode i nove vrijednosti. Osim središnje lokacije u Sesevskom Kraljevcu, u kojem se nalaze i tri pogona, izgradili smo mrežu sabirališta po čitavoj Hrvatskoj kako bismo skratili vrijeme od nastanka nusproizvoda do njegove prerade.



AGROPROTEINKA

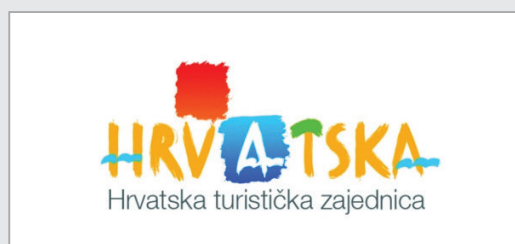
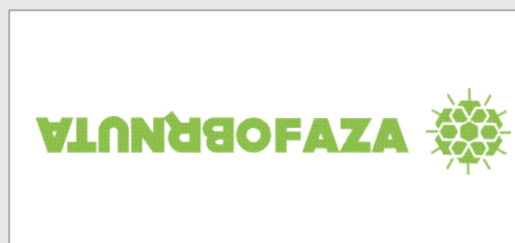


SPONZOR NAGRADE ZA NAJBOLJU PREZENTACIJU | *BEST PRESENTATION AWARD SPONSOR*



DONATORI | *DONORS*

Dr. sc. SANJA SLAVICA
MATEŠIĆ
(privatna donacija)



Izdavač:
Hrvatsko društvo kemijskih
inženjera i tehnologa (HDKI)
2020.
ISBN: 978-953-6894-71-0