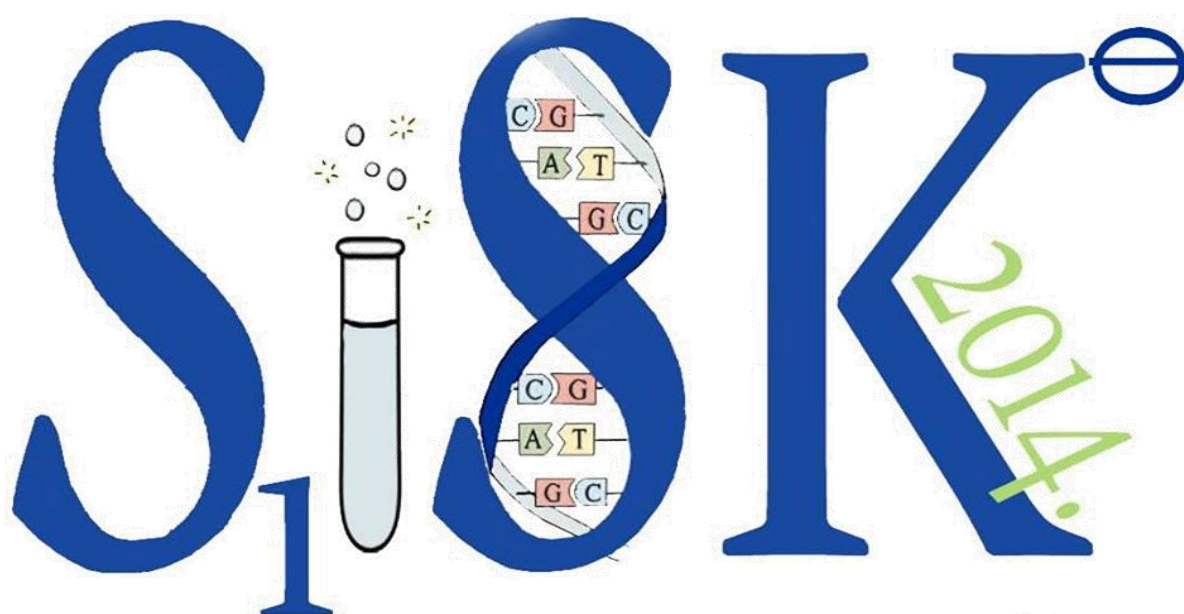


1. SIMPOZIJ STUDENATA KEMIČARA



Knjiga sažetaka

25. listopada 2014

Sveučilište u Zagrebu

Prirodoslovno-matematički fakultet

Kemijski odsjek

ORGANIZACIJSKI ODBOR

Tomislav Begušić, predsjednik

Kristina Smokrović, tajnica

Nikola Bedeković, tajnik

Loren Ban, član

Nea Baus, članica

Ingrid Gregorović, članica

Ivan Ilić, član

Karolina Kolarić, članica

Ana Mikelić, članica

Ana Milas, članica

Tomislav Piteša, član

Edi Topić, član

Ana Vlašić, članica

SURADNICI

Dr. sc. Dominik Cinčić, doc.

Dr. sc. Vladimir Stilinović, doc.

Danijel Namjesnik, dipl. ing.

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

ORGANIZATOR



Studentska sekcija Hrvatskog kemijskog društva

POKROVITELJI



Hrvatsko kemijsko društvo



Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek

UREDNICI

Ana Milas
Nikola Bedeković
Tomislav Piteša

TEKST PRIPREMILI

AUTORI, koji su odgovorni za tekst sažetaka

IZDAVAČI

Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek
Hrvatsko kemijsko društvo

SPONZOR

PLIVA Hrvatska d.o.o., Zagreb

DONATORI

BASF Hrvatska d.o.o., Zagreb
Otvoreni dan Kemijskog odsjeka PMF-a
POS d.o.o., Split

TABLICA SADRŽAJA

Riječ predsjednika Organizacijskog odbora	8
Riječ pročelnice SSHKD-a	9
Program	10
Sažeci.....	13
Predavanja	15
Usmena izlaganja	20
Glavni sponzor	44
Donatori	45



RIJEČ PREDsjedNIKA ORGANIZACIJSKOG ODBORA

Simpozij studenata kemičara događaj je na kojem studenti imaju priliku prezentirati kolegama svoj znanstveni rad. Cilj Simpozija prije svega je povezivanje hrvatskih studenata kemičara kako bi izmjenili svoja iskustva, znanja i ideje. Naime, ostvarivanje bolje komunikacije među studentima u Hrvatskoj dovodi do veće konkurentnosti u globaliziranom svijetu.

Tvorac same ideje o organiziranju ovakvog događaja je docent Cinčić, a moji prijatelji iz Studentske sekcije i ja bili smo dovoljno energični i entuzijastični da tu ideju provedemo u djelo. Pri osmišljavanju imena, htio sam da bude jasno da su pozvani svi studenti koji se bave kemijom, a ne samo studenti kemije. Upravo pojam studenta kemičara predstavlja sve one koji su usko povezani s kemijom. Kada smo sredili naziv, uslijedilo je nekoliko mjeseci intenzivnog rada kako bismo postigli konačni cilj – jedan dan SiSK-a. Ovakva organizacija zahtjeva dobar timski rad, usklađenost i međusobno uvažavanje među članovima Organizacijskog odbora. Osim cijelom svom timu, zahvalan sam i našim suradnicima i svim ostalim pomagačima koji su nas kao mentori upozoravali i upućivali na sve detalje, a često i na naše greške.

Iako se Simpozij organizira prvi put, već je privukao veliki broj sudionika, studente s kvalitetnim radovima izrađenima na domaćim i inozemnim institucijama, kao i izvrsne predavače s društvenim i znanstvenim temama. Osim samih studenata, ovaj događaj su prepoznali i mnogi drugi, naši cijenjeni pokrovitelji (Hrvatsko kemijsko društvo i Kemijski odsjek PMF-a), sponzori (PLIVA, BASF), asistenti i profesori s naših fakulteta. Upravo takva svestrana podrška obećava uspjeh u organizaciji idućih Simpozija i stvaranje tradicije okupljanja hrvatskih studenata kemičara.

Tomislav Begušić

Predsjednik Organizacijskog odbora



RIJEČ PROČELNICE SSHKD-a

Studentska sekcija djeluje u sklopu Hrvatskog kemijskog društva od 1997. godine. Od tada studenti aktivno sudjeluju u radu Hrvatskog kemijskog društva s brojnim uspješnim projektima. Organiziramo tribine, predavanja i radionice na kojima studenti mogu raspravljati o zajedničkim interesima te izmjenjivati ideje. Hrvatsko kemijsko društvo podupire nove ideje i projekte članova sekcije te pruža podršku u njihovom ostvarivanju.

Cilj djelovanja Studentske sekcije je povezivanje studenata te njihovo uključivanje u akademsku zajednicu putem novih poznanstava. Želimo povezati studente kemije i srodnih studija unutar zemlje kao i u inozemstvu. U procesu smo priključenja Europskoj mreži mladih kemičara (European Young Chemists' Network) koja povezuje sve kemičare mlađe od 35 godina unutar Europske asocijacije za kemijske i molekularne znanosti (European Association for Chemical and Molecular Sciences). Povezivanjem s predstavnicima kemičara u inozemstvu omogućit će bolju mobilnost studenata te razvijanje zajedničkih projekata u budućnosti.

Sekcija se bavi i popularizacijom znanosti među djecom vrtićke dobi putem projekta Znanstvena čarolije. Studenti posjećuju vrtiće i izvode zanimljive pokuse kako bi zainteresirali najmlađe generacije za znanost. Projekt je započeo 2010. godine, a danas ga vodi kolegica Dajana Barišić. Znanstvene čarolije su jedan od najuspješnijih i najpopularnijih projekata Studentske sekcije.

Drugi veliki projekt Studentske sekcije je upravo Simpozij studenta kemičara, koji predstavlja važan korak u povezivanju studenata zainteresiranih za teorijsku i primijenjenu kemiju. Ovom prilikom se zahvaljujem doc. dr. sc. Dominiku Cinčiću i Tomislavu Begušiću na pruženoj inicijativi, kolegama iz organizacijskog odbora na uloženom radu i vremenu te Hrvatskom kemijskom društvu, Kemijskom odsjeku Prirodoslovno-matematičkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu, Plivi, BASF-u i svim profesorima, docentima, asistentima i tehničkom osoblju na podršci i savjetima u realizaciji ovog projekta. Također zahvaljujem svim sudionicima Simpozija i nadam se da će se neki od vas uključiti u rad studentske sekcije i sudjelovati u budućim projektima.

Kristina Smokrović

Pročelnica Studentske sekcije Hrvatskog kemijskog društva

PROGRAM

9:30-10:00	Registracija
10:00-10:20	OTVARANJE SIMPOZIJA: - riječ predsjednika Organizacijskog odbora: Tomislav Begušić - riječ pročelnice Studentske sekcije Hrvatskog kemijskog društva: Kristina Smokrović

PREDAVANJA:	
A2 (predsjedavajući: Tomislav Begušić)	
10:20-10:50	Antonija Burčul (ETH, Zürich) i Lucija Šilić: <i>TINK - Technology InnovatioN Knowledge</i>
10:50-11:05	Zrinka Banić Tomišić (Državni zavod za intelektualno vlasništvo): <i>Intelektualno vlasništvo</i>
11:05-11:15	KRATKA PAUZA
11:15-11:40	Marko Hanževački (PMF, Zagreb): <i>Primjena ONIOM metode u modeliranju međumolekulskih interakcija u kristalima</i>
11:40-12:05	Kristina Kučanda (PMF, Zagreb): <i>Ciklička kinetika termičkog uravnotežavanja osno kiralnog bis-spiropirana</i>
12:05-12:30	„COFFEE BREAK“

USMENA IZLAGANJA:		
	A1 (predsjedavajuća: Ana Milas)	A2 (predsjedavajući: Tomislav Piteša)
12:30-12:45	Nina Fekonja i Helena Goričanec (FBF, Zagreb): <i>Izolacija membranskih proteina pomoću detergenta Tritona X-114 u svrhu analize njihove N-glikozilacije</i>	Tin Klačić (PMF, Zagreb): <i>Ovisnost temperature zraka o koncentraciji ugljikovog(IV) oksida</i>
12:45-13:00	Nikolina Šoštarić i Petar Šutalo (PMF, Zagreb): <i>Dvojni karakter domene arginil-tRNA-sintetaze u vezi s prijenosom informacija prema udaljenom katalitičkom mjestu</i>	Sanja Novak (PMF, Zagreb): <i>Priprema i spektroelegkrokemijska karakterizacija tankog filma jednozidnih ugljikovih nanocijevi</i>
13:00-13:15	Danijel Glavač (FKIT, Zagreb): <i>Sinteza, kristalografska analiza i citostatska djelovanja C-5 heteroarilnih i alkinilnih N-acikličkih pirimidinskih nukleozidnih analoga</i>	Dario Dabić (PMF, Zagreb): <i>Interakcije TiO₂ nanožica s dimernom površinski aktivnom tvari</i>
13:15-13:30	Maja Beus, Tomislav Ubrekić i Josipa Vidović (FBF, Zagreb): <i>Sinteza pirazinskih analoga antitumorskog lijeka sorafeniba</i>	Milenko Korica (Odjel za kemiju, Osijek): <i>Poboljšano uklanjanje fosfata iz vode pravilno strukturiranim mezoporoznim silicijevim dioksidom koji je dopiran samarijevim oksidom</i>

13:30-15:00	„LUNCH BREAK“	
	A1 (predsjedavajući: Loren Ban)	A2 (predsjedavajući: Edi Topić)
15:00-15:15	Tomislav Gregorić (FKIT, Zagreb): <i>Sinteza 1,4-disupstituiranih 1,2,3- triazola na položaju N-1 i N-3 5- bromuracila</i>	Alen Bjelopetrović (PMF, Zagreb): <i>Mononuklearni kompleksi molibdena(VI): trans-utjecaj kisikovih atoma</i>
15:15-15:30	Saša Opačak (PMF, Zagreb): <i>Sinteza i karakterizacija karbazolnih gvanidina, novih anionskih receptora</i>	Luka Bilić (PMF, Zagreb): <i>Sinteza i karakterizacija kompleksa molibdena (VI): reakcije u otopini i čvrstom stanju</i>
15:30-15:45	Petar Štrbac (PMF, Zagreb): <i>Priprava supstituiranih difenil-oksalata i fluorescentnih boja te njihova primjena u kemiluminiscenciji</i>	Tomislav Stolar i Stipe Lukin (PMF, Zagreb): <i>Mehanokemijska sinteza poroznih metaloorganskih mreža</i>
15:45-16:00	Pavica Šonjić i Tana Tandarić (FBF, Zagreb): <i>Utjecaj supstituenata na N3 i C5 položaju na reaktivnost derivata barbiturne kiseline s hipoklornom kiselinom. Kvantno-kemijska studija.</i>	Nikola Bedeković (PMF, Zagreb): <i>Preferencija piridinskog dušika prema alifatskoj karboksilnoj skupini u binarnim krutinama izvedenim iz derivata piridina i N-(2-karboksifenil)glicina</i>
16:00-16:15	Jana Volarić (PMF, Zagreb): <i>Utjecaj topokemije na kinetiku dimerizacije p-halogennitrozobenzena u čvrstom stanju</i>	Ivan Ilić, Neven Golenići i Tomislav Piteša (PMF, Zagreb): <i>Sinteza i karakterizacija polimorfnih oblika 2-amino-4-metilpiridinijeva salicilata</i>
16:15-16:35	„COFFEE BREAK“	
A2 (predsjedavajući: Nikola Bedeković)		
16:35-16:50	Darko Vušak (PMF, Zagreb): <i>Kvantitativni odnos strukturnih svojstava i antitumorske aktivnosti derivata benzimidazola</i>	
16:50-17:05	Marko Racar (FKIT, Zagreb): <i>Djelotvornost novih gvanidinskih katalizatora i optimiranje procesa dobivanja biodizela metodom odzivnih površina</i>	
17:05-17:20	Tea Crnković (FBF, Zagreb): <i>Primjenjivost in vitro testova citotoksičnosti za procjenu bioloških učinaka srebrnih nanočestica</i>	

Uživajte u pirotehničkoj idili!

ZATVARANJE SIMPOZIJA:	
17:30	Edi Topić (PMF, Zagreb): <i>SiSK na piromanski način</i>

SAŽECI

PREDAVANJA

Marko Hanževački (PMF, Zagreb): *Primjena ONIOM metode u modeliranju međumolekulskih interakcija u kristalima.....* 16

Kristina Kučanda (PMF, Zagreb): *Ciklička kinetika termičkog uravnotežavanja osno kiralnog bis-spiropirana.....* 18

Primjena ONIOM metode u modeliranju međumolekulskih interakcija u kristalima

Marko Hanževački, Zlatko Mihalić

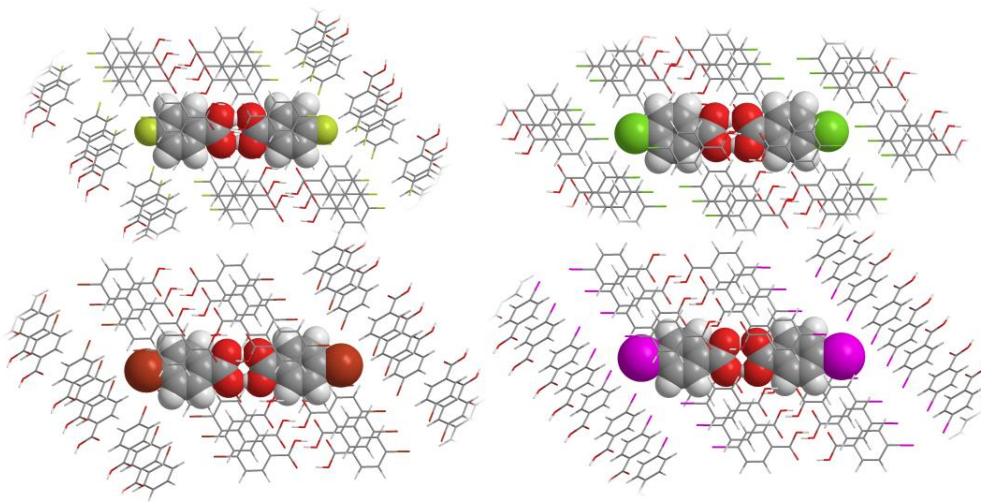
Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet,

Kemijski odsjek, Zavod za organsku kemiju

marko.hanzevacki@hotmail.com

U posljednjih nekoliko godina sve više se nastoji povezati kristalna struktura novih materijala s njihovim fizikalnim i kemijskim svojstvima. Razumijevanje odnosa između kemijske strukture i svojstava materijala jedno je od temeljnih područja istraživanja u prirodnim znanostima. Uz klasične eksperimentalne tehnike sve veću pažnju privlači računalna kemija. Razvojem računala i novih računalnih metoda moguće je proučavanje sve većih i većih kemijskih sustava. Osim biološki zanimljivih molekula, kao složeni sustavi mogu se promatrati i kristali. Njihovo modeliranje rezultira boljim razumijevanjem međumolekulskih interakcija i omogućava dizajniranje novih kristalnih struktura organskih molekula i anorganskih kompleksa. Zanimljivo je istraživanje polimorfizma u kristalima što je važno npr. u farmaceutskoj industriji.

U ovom radu korišten je višerazinski pristup u modeliranju složenih sustava (modificirani QM/MM pristup). Slične ideje su već primijenjene na velikim biološkim sustavima. Naime, ONIOM (engl. *Our own N-layered Integrated molecular Orbital and molecular Mechanics*) pristup pokazao se uspješnim u proučavanju aktivnog mjesta enzima u kojem je cijeli sustav moguće podijeliti na nekoliko razina prema važnosti koje se onda modeliraju na različitim razinama teorije. Samo aktivno mjesto od najvećeg je interesa i modelira se na najvišoj razini teorije. Na taj način postiže se odgovarajući kompromis između točnosti rezultata i utrošenog računalnog vremena. Osnovni cilj ovog istraživanja je pronalazak računalnog modela kojim bi se pomoću relativno malog broja molekula moglo opisati ponašanje molekula u cijelom kristalu. Dobiveni model mogao bi biti koristan za strukturnu analizu sličnih kristalnih sustava, u daljnjim istraživanjima kristalnih struktura koje su podložne polimorfizmu, kao i u istraživanju kemijskih reakcija u čvrstoj fazi.



Istražene su međumolekulske interakcije u kristalnim sustavima *para*-halogenbenzojeve kiseline (F, Cl, Br i I). Analizom Hirshfeldove površine utvrđeno je kako su vodikove veze, $\pi \cdots \pi$ kontakti, halogen-halogen interakcije uglavnom odgovorne za pakiranje molekula. Modeliranje ovih interakcija na izoliranom paru molekula pokazalo se uspješnim samo u slučaju jakih vodikovih veza. Dvorazinska ONIOM metoda uspješno je reproducirala i geometrije parova molekula povezanih halogen-halogen interakcijama, $\pi \cdots \pi$ kontaktima i slabim vodikovim C–H \cdots X interakcijama. U računima više razine teorije korištena su četiri DFT funkcionala s uključenim Grimmeovom disperznim interakcijama treće generacije (B2PLYP, B97, B3LYP i M06-2X) u kombinaciji s tri osnovna skupa (6-311G, 6-311G(d) i 6-311G(d,p)). Okolni realni sustav modeliran je na semiempirijskoj razini teorije PM6 metodom s uključenim disperzijskim korekcijama. Modelirani su hipotetski sustavi zamjenom atoma halogena. Pokazalo se da je kod derivata *para*-halogenbenzojevih kiselina povoljniji tip II nego tip I halogen-halogen interakcije, iako eksperimentalni podaci sugeriraju da je kod *para*-klorbenzojeve kiseline povoljniji tip I interakcije. U ovom slučaju QTAIM analiza pokazala je postojanje dodatne C–H \cdots X interakcije. ONIOM metoda daje geometrije usporedive s onima u kristalu. Izračunate energije interakcija pokazuju trendove u skladu s eksperimentalnim podacima. Pokazalo se da je odabir prikladnog modelnog sustava od iznimne važnosti za proučavanje međumolekulskih interakcija

Ciklička kinetika termičkog uravnotežavanja osno kiralnog bis-spiropirana

Kristina Kučanda¹, Pintu K. Kundu², Avishai Lerner², Gregory Leitus²,
Rafal Klajn²

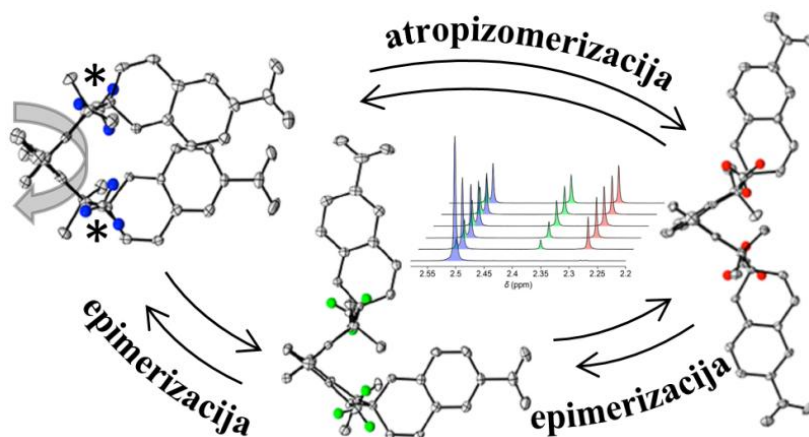
¹Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek

²Weizmann Institute of Science, Rehovot

kristina.kucanda@gmail.com

Molekulski prekidači molekule su koje reverzibilno mijenjaju strukturu pa time i svojstva pod vanjskim utjecajima, kao što je pH, metalni ioni ili svjetlost. Od velikog su interesa za primjene u složenim sustavima, osobito u elektronici i medicini. Glavni izazov u razvoju naprednih primjena molekulskih prekidača očuvanje je željene promjenjivosti u prostorno ograničenim okruženjima, kao što su makromolekule i materijali u čvrstom stanju. Osno kiralni bis-spiropiran spoj je koji sadržimolekulski rotor i fotoprekidač. Sintetiziran je kao ishodna podjedinica za nanoporozne mreže osjetljive na više podražaja^[1] i model sterički ometenog prekidača. Izoliran je svaki od njegova tri dijastereomera te su im rentgenskom difrakcijom na monokristalu određene kristalne strukture. Kinetika uravnotežavanja dijastereomera u otopinama praćena je ¹H NMR spektroskopijom. Ustanovljeno je da dijastereomeri prelaze jedan u drugi reverzibilnom cikličkom reakcijskom shemom te su određene energije aktivacije i njihova ovisnost o polarosti otapala. Rezultati pokazuju da svojstva molekulskih prekidača jako ovise o njihovom neposrednom kemijskom okruženju. To je bitno za dizajn novih molekulskih prekidača i materijala.^[2]

Rad je napravljen na Department of Organic Chemistry, Weizmann Institute of Science.



[1] Kundu, P. K., Olsen, G. L., Kiss, V., Klajn, R., Nat. Commun. 5 (2014) 3588.

[2] Kundu, P. K., Lerner, A., Kučanda, K., Leitus, G., Klajn, R., J. Am. Chem. Soc. 136 (2014) 11276.

USMENA IZLAGANJA

- Nina Fekonja i Helena Goričanec** (FBF, Zagreb): *Izolacija membranskih proteina pomoću detergenta Tritona X-114 u svrhu analize njihove N-glikozilacije* 22
- Nikolina Šošćarić i Petar Šutalo** (PMF, Zagreb): *Dvojni karakter domene arginil-tRNA-sintetaze u vezanju tRNA i prijenosu informacija prema udaljenom katalitičkom mjestu* 23
- Danijel Glavač** (FKIT, Zagreb): *Sinteza, kristalografska analiza i citostatska djelovanja C-5 heteroarilnih i alkinilnih N-acikličkih pirimidinskih nukleozidnih analoga*..... 24
- Maja Beus, Tomislav Ubrenkić i Josipa Vidović** (FBF, Zagreb): *Sinteza pirazinskih analoga antitumorskog lijeka sorafeniba*..... 25
- Tin Klačić** (PMF, Zagreb): *Ovisnost temperature zraka o koncentraciji ugljikovog(IV) oksida* 26
- Sanja Novak** (PMF, Zagreb): *Priprema i spektroelektrokemijska karakterizacija tankog filma jednozidnih ugljikovih nanocijevi* 27
- Dario Dabić** (PMF, Zagreb): *Interakcije TiO₂ nanožica s dimernom površinski aktivnom tvari* 28
- Milenko Korica** (Odjel za kemiju, Osijek): *Poboljšano uklanjanje fosfata iz vode pravilno strukturiranim mezoporoznim silicijevim dioksidom koji je dopiran samarijevim oksidom*..... 29

- Tomislav Gregorić** (FKIT, Zagreb): *Sinteza 1,4-disupstituiranih 1,2,3- triazola na položaju N-1 i N-3 5- bromuracila* 30
- Saša Opačak** (PMF, Zagreb): *Sinteza i karakterizacija karbazolnih gvanidina, novih anionskih receptora.....* 31
- Petar Štrbac** (PMF, Zagreb): *Priprava supstituiranih difenil-oksalata i fluorescentnih boja te njihova primjena u kemiluminiscenciji.....* 32
- Pavica Šonjić i Tana Tandarić** (FBF, Zagreb): *Utjecaj supstituenata na N3 i C5 položaju na reaktivnost derivata barbiturne kiseline s hipoklornom kiselinom. Kvantno-kemijska studija.....* 33
- Jana Volarić** (PMF, Zagreb): *Utjecaj topokemije na kinetiku dimerizacije p-halogennitrozobenzena u čvrstom stanju.....* 34
- Alen Bjelopetrović** (PMF, Zagreb): *Mononuklearni kompleksi molibdena(VI): trans-utjecaj kisikovih atoma* 35
- Luka Bilić** (PMF, Zagreb): *Sinteza i karakterizacija kompleksa molibdena (VI): reakcije u otopini i čvrstom stanju.....* 36
- Tomislav Stolar i Stipe Lukin** (PMF, Zagreb): *Mehanokemijska sinteza poroznih metaloorganskih mreža.....* 37
- Nikola Bedeković** (PMF, Zagreb): *Preferencija piridinskog dušika prema alifatskoj karboksilnoj skupini u binarnim krutinama izvedenim iz derivata piridina i N-(2-karboksifenil) glicina.....* 38
- Ivan Ilić, Neven Golenić i Tomislav Piteša** (PMF, Zagreb): *Sinteza i karakterizacija polimorfnih oblika 2-amino-4-metilpiridinijeva salicilata ...* 39
- Darko Vušak** (PMF, Zagreb): *Kvantitativni odnos strukturnih svojstava i antitumorske aktivnosti derivata benzimidazola* 40
- Marko Racar** (FKIT, Zagreb): *Djelotvornost novih gvanidinskih katalizatora i optimiranje procesa dobivanja biodizela metodom odzivnih površina* 41
- Tea Crnković** (FBF, Zagreb): *Primjenjivost in vitro testova citotoksičnosti za procjenu bioloških učinaka srebrnih nanočestica* 42

Izolacija membranskih proteina pomoću detergenta Tritona X-114 u svrhu analize njihove N-glikozilacije

Nina Fekonja, Helena Goričanec, Olga Gornik

Farmaceutsko-biokemijski fakultet, Zagreb

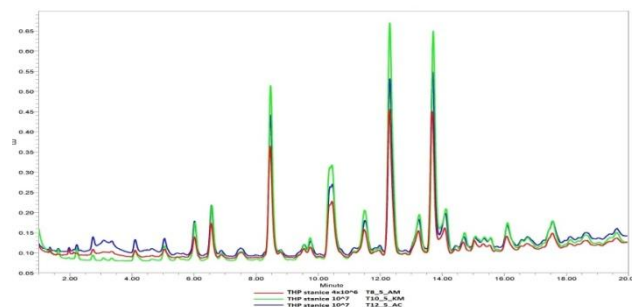
ninaa.fekonja@gmail.com; helena.goricanec@gmail.com

Glikozilacija membranskih proteina važna je za mnoge njihove funkcije, kako međustanično prepoznavanje, tako i interakcije pojedinih molekula s receptorima na staničnoj površini [1]. Kako bi se bolje razumjeli ovi procesi u mnogim fiziološkim i patofiziološkim stanjima, važno je posjedovati pouzdanu analitičku metodu koja bi omogućila istraživanje glikozilacije membranskih proteina. Dosadašnje metode izolacije i analize glikozilacije ovih proteina pokazale su se nedovoljno reproducibilnima zbog prisustva unutarstaničnih proteina koji često nose nedovršene glikanske strukture. Stoga je cilj ovog rada bio optimirati metodu izolacije isključivo membranskih proteina pomoću detergenta Triton X-114 te analizirati njihovu N-glikozilaciju tekućinskom kromatografijom ultravisoke djelotvornosti koja se bazira na hidrofилnim interakcijama. U tu svrhu korištene su stanice iz THP stanične linije. Ključni korak bio je pročišćavanje izoliranih proteina od suviška detergenta te je isprobano nekoliko metoda kako bi se ustanovilo koja od njih daje najbolje rezultate. Izolirani membranski proteini pročišćavani su pomoću 3 kDa centrifugalnih filtera (koji propuštaju male čestice detergenta, a zadržavaju proteinske molekule) ili upotrebom različitih organskih otapala koja su precipitirala proteine. Organska otapala koja su bila korištena su aceton, kombinacija aceton/metanol i kloroform/metanol.

Rezultati koji su dobiveni nakon pročišćavanja pomoću spin-filtera nisu bili zadovoljavajući jer, iako je uzorak bio pročišćen od detergenta, intenziteti pikova na kromatogramu glikozilacijskog profila bili su praktički u razini šuma samog instrumenta. Kao takvi ne mogu se koristiti za pouzdanu interpretaciju. Bolje rezultate pokazale su metode s organskim otapalima. One su dale jače intenzitete pikova i kromatograme bolje razlučivosti. Ovaj pristup pokazao je dobru ponovljivost te da je količina stanica uzetih u analizu u konačnici proporcionalna intenzitetu kromatografskih pikova.

Ovim radom dizajnirana je metoda izolacije membranskih proteina te analize njihove N-glikozilacije. Postojanje ove metode važno je u studiranju razumijevanja mnogih fizioloških i patofizioloških procesa u organizmu u kojima stanična glikozilacija igra važnu ulogu.

Ovaj rad izrađen je na Zavodu za biokemiju i molekularnu biologiju Farmaceutsko-biokemijskog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu.



Slika 1: Kromatogrami N-glikana otpuštenih s membranskih proteina THP stanica nakon različitih metoda precipitacije proteina: aceton (plavo), kloroform/metanol (zeleno), aceton/metanol (crveno)

- [1] Varki, A. et al., (1999), *Essentials of Glycobiology*, New York, Cold Spring Harbor Laboratory Press

Dvojni karakter domene arginil-tRNA-sintetaze u vezanju tRNA i prijenosu informacija prema udaljenom katalitičkom mjestu

Nikolina Šoštarić, Petar Šutalo, Ivana Weygand-Đurašević

Prirodoslovno-matematički fakultet, Zagreb

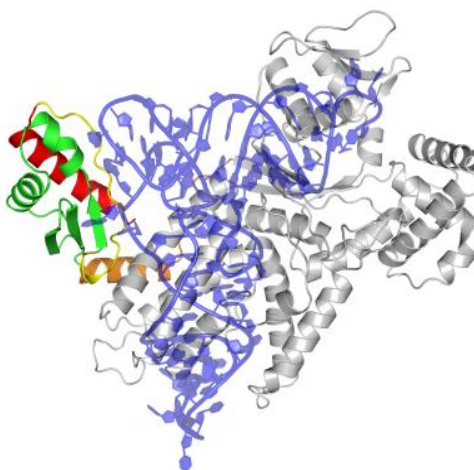
nsostaric1@chem.pmf.hr, psutalo@chem.pmf.hr

Stanični proteini nastaju radom ribosoma koji genetičku informaciju, sadržanu u obliku molekula mRNA, prevode u slijed aminokiselina rastućeg polipeptidnog lanca. Aminokiseline dolaze na ribosom esterificirane na 3'-kraj pripadnih molekula tRNA čiji antikodon mora biti komplementaran kodonu mRNA kako bi donesena aminokiselina bila ugrađena u nastajući protein. Stvaranje kovalentne veze između aminokiseline i odgovarajuće tRNA (reakciju aminoacilacije) kataliziraju aminoacil-tRNA-sintetaze. Radom ovih enzima osiguran je vjeran prijenos genetičke informacije, zbog čega je detaljno istraživanje njihovih svojstava od iznimne važnosti.

U ovom radu ispitana je uloga N-terminalne domene arginil-tRNA-sintetaze iz arheje *Methanothermobacter thermoautotrophicus* (MtArgRS) u vezanju pripadne tRNA i reakciji aminoaciliranja. Korišteni su divlji tip i četiri krnja oblika enzima skraćena s N-kraja. Rekombinantni enzimi su izolirani iz stanica domaćina i pročišćeni afinitetnom kromatografijom te gel-filtracijom. Pripadni je supstrat, tRNA^{Arg} iz istog arhejskog izvora (MttRNA^{Arg}), dobiven transkripcijom u domaćinu *Escherichia coli* te pročišćen kromatografijom ionske izmjene. Dodatno je optimiran daljnji korak pročišćavanja MttRNA^{Arg} kromatografijom obrnutih faza pri čemu su izdvojene tri populacije MttRNA^{Arg}, različite prema količini nadodanih posttranskripcijskih modifikacija.

Nativnom elektroforezom na poliakrilamidnom gelu određene su ravnotežne konstante disocijacije kompleksa divljeg oblika i deletanata MtArgRS s MttRNA^{Arg}. Ove su vrijednosti pokazatelji uloge N-terminalne domene u vezanju pripadne tRNA. S ciljem proučavanja uloge N-terminalne domene u katalitičkoj reakciji, određeni su kinetički parametri većine rekombinantnih enzima u uvjetima ustaljenog stanja. Ravnotežne konstante disocijacije usporedivih su vrijednosti za sve ispitane komplekse, dok je utjecaj delecija na katalitičku efikasnost enzima drastičan. Ovakvi rezultati ukazuju na postojanje dvojne uloge ispitane domene MtArgRS u odnosu na interakciju s tRNA. Iako ova domena nema presudnu ulogu u vezanju tRNA, vrlo je važna u prijenosu informacija o njenom vezanju prema udaljenom katalitičkom mjestu.

Ovaj rad je izrađen na Zavodu za biokemiju Kemijskog odsjeka Prirodoslovno-matematičkog fakulteta u Zagrebu.



Sinteza, kristalografska analiza i citostatska djelovanja C-5 heteroarilnih i alkinilnih N-acikličkih pirimidinskih nukleozidnih analoga

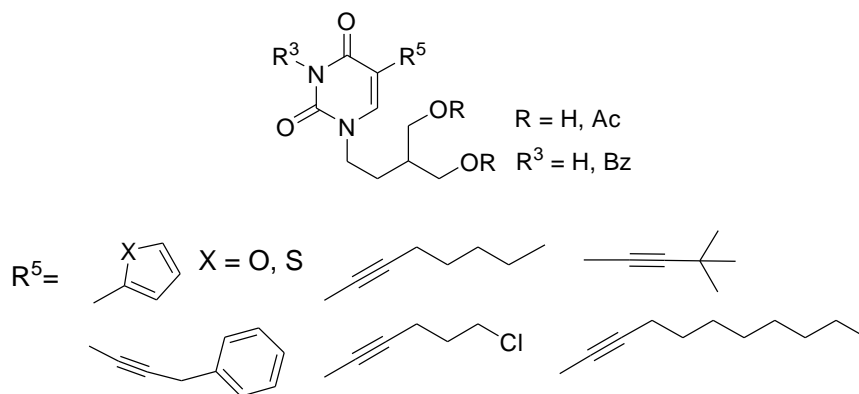
Danijel Glavač, Silvana Raić-Malić

Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Zagreb

glavac.danijel@gmail.com

Strukturni analozi prirodnih nukleozida u kojima je purinski, pirimidinski ili šećerni prsten zamijenjen strukturno srodnom heterocikličkom bazom ili acikličkim lancem imaju izraženu citostatsku i antivirusnu aktivnost [1]. Istraživanje je usmjereno na sintezu novih pirimidinskih analoga, koji svojom strukturom oponašaju prirodne spojeve, pirimidinske nukleozide. Derivati pirimidina s heteroarilnim supstutentom u položaju C-5 pirimidina **8a** i **8b** pripremljeni su Stille-ovom reakcijom povezivanja organokositrovih intermedijara s nezasićenim organskim elektrofilima pomoću paladijevog katalizatora. C-5 alkinilni derivati pirimidina **14a-e** priređeni su Sonogashira-inom reakcijom acikličkog 5-joduracilnog derivata s odgovarajućim terminalnim alkinima pomoću paladijevog(0) katalizatora, bakrovog (I) jodida (CuI) i baze, terciarnog amina. Novopriređeni spojevi su okarakterizirani spektroskopskim metodama ^1H i ^{13}C NMR, te masenom spektrometrijom. Rentgenskom strukturnom analizom određena je kristalna i molekulska struktura spojeva **8a**, **11** i **14c**. N-aciklički pirimidinski derivat s 5-furilnim supstutentom **8a** i 5-jod N-aciklički derivat **12** pokazali su snažno i selektivno antiproliferativno djelovanje na karcinom dojke (MCF-7) te na normalne fibroblaste porijeklom iz čovjeka (BJ).

Ovaj rad izrađen je na Zavodu za organsku kemiju Fakulteta kemijskog inženjerstva i tehnologije Sveučilišta u Zagrebu.



Shema 1. Pregled sintetiziranih spojeva

[1] A. Meščić, S. Krištafor, I. Novaković, A. Osmanović, U. Muller, D. Završnik, S.M. Ametamey, L. Scapozza, S. Raić-Malić, *Molecules* **18** (2013) 5104-24; A. Meščić, D. Glavač, A. Osmanović, D. Završnik, M. Cetina, D. Makuc, J. Plavec, S. M. Ametamey, S. Raić-Malić, *J. Mol. Struct.* **1039** (2013) 160-6.

Sinteza pirazinskih analoga antitumorskog lijeka sorafeniba

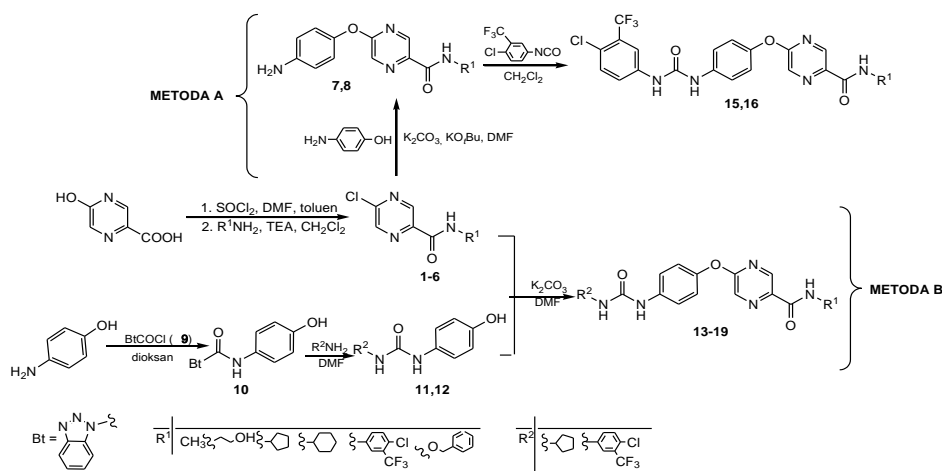
Maja Beus, Tomislav Ubrekić, Josipa Vidović, Diana Lović, Zrinka Rajić-Džolić

Farmaceutsko –biokemijski fakultet

tubrekić@student.pharma.hr; jvidovic@student.pharma.hr

Sorafenib je noviji citostatik, inhibitor više kinaza uključenih u staničnu proliferaciju i preživljavanje. Prema svojoj strukturi sorafenib je difenil-urea, te je u ovom radu razvijen novi put sinteze te skupine spojeva, koji je općenitiji i jeftiniji od ranije opisanog sintetskog puta u literaturi. Tim sintetskim putem, koristeći benzotriazolsku metodologiju, pripremljeni su novi, do sada neopisani spojevi, derivati sorafeniba **13–19**. Početni spoj u sintezi je 5-hidroksi-2-pirazinkarboksilna kiselina, koja se pomoću tionil-klorida, te kasnije odgovarajućeg amina, prevodi u amide **1–6**. Amidi **1–6** korišteni su za pripremu difenil-urea pomoću Metode A (analogne opisanoj u literaturi) i nove Metode B. U Metodi B, klorid 1-benzotriazolkarboksilne kiseline **7** reagira s *p*-aminofenolom te nastaje odgovarajući benzotriazolid **8**, koji u idućoj reakciji s aminima daje uree **9** i **10**. U posljednjem sintetskom koraku uree **9** i **10** reagiraju s amidima **1–6** i daju konačne produkte **13–19**. Strukture svih sintetiziranih spojeva potvrđene su uobičajenim spektroskopskim metodama (IR, ¹H i ¹³C NMR, MS). Produkti **13–19** su potencijalni citostatici te je ispitivanje njihovog antitumorskog djelovanja u tijeku.

Rad je izrađen na Zavodu za farmaceutsku kemiju, na Farmaceutsko biokemijskom fakultetu.



Shema 1. Sinteza pirazinskih analoga sorafeniba

[1] G. M. Cooper, R. E. Hausman, *Stanica*, 5. izdanje, Medicinska naklada, Zagreb, 2010.

[2] S. Wilhelm, C. Carter, M. Lynch, T. Lowinger, J. Dumas, R. A. Smith, B. Schwartz, R. Simantov, S. Kelley, Discovery and development of sorafenib: a multikinase inhibitor for treating cancer, *Nature Rev. Drug Discov.* 5 (2006) 835–844.

Ovisnost temperature zraka o koncentraciji ugljikovog(IV) oksida

Tin Klačić, Marko Filip Horvat, Jan Radanović i Darko Vušak

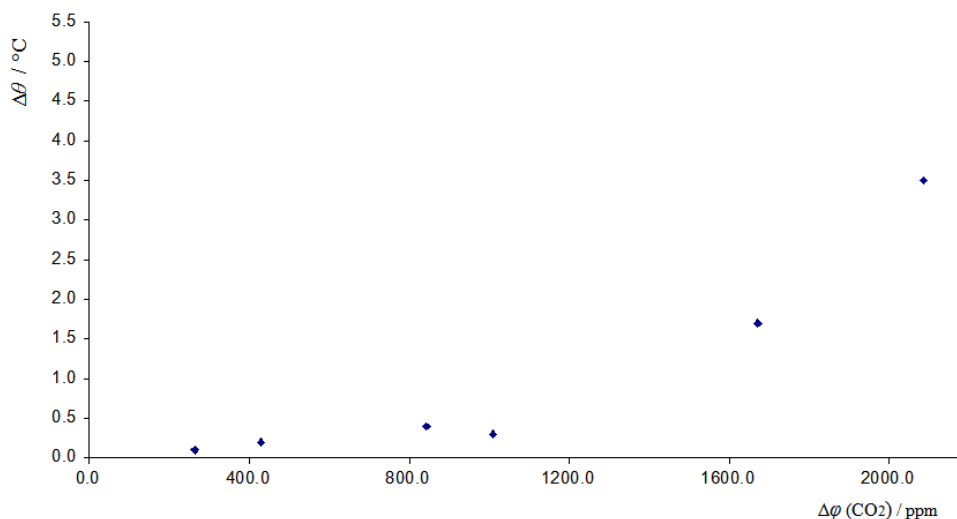
Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu,

Horvatovac 102 A, Zagreb

tin.klacic@gmail.com

Ovaj je istraživački rad zamišljen kao modifikacija i proširenje demonstracijskog pokusa naslovljenog Ugljikov dioksid i globalno zatopljenje [1]. Provedenim istraživanjem ustanovljena je matematička funkcija ovisnosti promjene temperature zraka o promjeni volumne koncentracije ugljikovog dioksida u rasponu od 0,0 ppm do 2100,0 ppm. U svrhe istraživanja konstruirana je plinska komora za kontrolirane promjene volumne koncentracije plinovite faze i za mjerenje temperature digitalnim termometrom s dugačkom sondom. Sustav sastavljen od plinske komore u kojoj se nalazi aproksimativno crno tijelo simulirao je Zemljinu površinu i njezinu atmosferu, a lampa usmjerenog snopa svjetlosti je predstavljala izvor zračenja sličan solarnom. Takav sustav simulacija je efekta staklenika u kojoj je moguće kontrolirati promjene volumne koncentracije CO₂ dok su ostali parametri konstantni. Zaključujemo da promjena koncentracije CO₂ u istraženom području utječe na promjenu temperature zraka. Također u području promjene koncentracije od 0,0 ppm do otprilike 900,0 ppm funkcija se ponaša gotovo linearno čime se predviđa slab doprinos ugljikovog dioksida na povišenje globalne temperature u narednim godinama. Primijetili smo da se u području otprilike nakon 900,0 ppm zbivaju za sada nepoznate pojave na molekularnoj razini koje uzrokuju značajan utjecaj na porast temperature.

Rad je napravljen na Zavodu za fizikalnu kemiju Kemijskog odsjeka PMF-a uz potporu Saveza za energetiku Hrvatske i u suradnji s udrugom Prelog.



[1] M. Sikirica, *Zbirka kemijskih pokusa*, Školska knjiga, Zagreb, 2011, p. 547.

Priprema i spektroelektrokemijska karakterizacija tankog filma jednozidnih ugljikovih nanocijevi

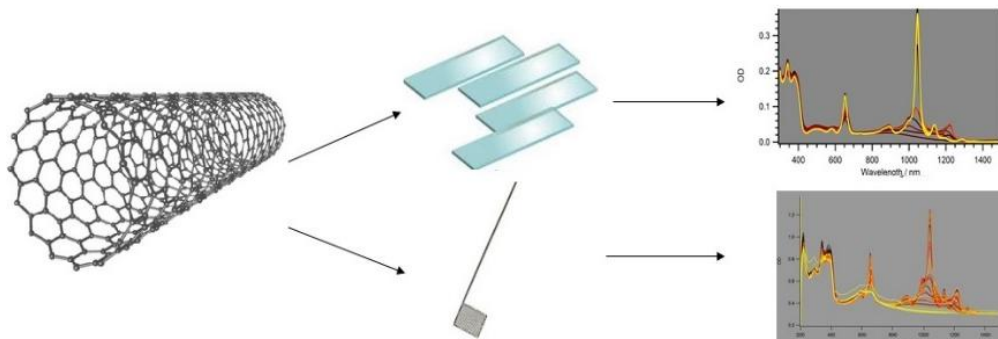
Sanja Novak¹, Tobias Hertel²

¹Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu,
Zagreb

²Julius-MaximiliansUniversität, Würzburg, Njemačka
e-mail: snovak90@gmail.com

Ugljikove nanocijevi su cilindrične strukture izgrađene od ugljikovih atoma čija duljina doseže vrijednosti na mikrometarskoj skali dok je dijametar nanometarskih dimenzija, a odlikuju se izuzetnim svojstvima; velikom čvrstoćom i tvrdoćom, toplinskom vodljivošću, temperaturnom stabilnošću i vodljivošću električne struje.¹ Tanki film jednozidnih ugljikovih nanocijevi pripremljen je iz CoMoCAT materijala na stakalcu sa slojem indijevog oksida dopiranog kositrom (ITO) i na elektrodi od platinske mrežice filtracijskom tehnikom uz polifluoren (PFO) kao ekstrakcijsko sredstvo.² Spektroelektrokemijskom metodom istraživani su filmovi različitih debljina. Nakon primjene potencijala mjerena je apsorpcija filmova kako bi se detektirale promjene u optičkim prijelazima ugljikovih nanocijevi i odredila širina energetske procjepa. Dobiveni rezultati ukazuju na to da se pripremom filma na elektrodi od platinske mrežice dobiva spektar s manje šuma iz kojeg se jednoznačnije i preciznije može odrediti širina energetske procjepa u usporedbi s filmom pripremljenim na ITO stakalcu.

Rad je izrađen na Institutu za Fizikalnu i Teorijsku kemiju, Julius-MaximiliansUniversität, Würzburg, u Njemačkoj.



[1] M. Kumar, Y. Ando, *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, Vol 10. (2010) 3739-3758

[2] H. Ozawa, N. Ide, T. Fujigaya, Y. Niidome, N. Nakashima, *Chem. Lett.* 40 (2011) 239-241

Interakcije TiO₂ nanožica s dimernom površinski aktivnom tvari

Dario Dabić, Kristina Kučanda, Atiđa Selmani

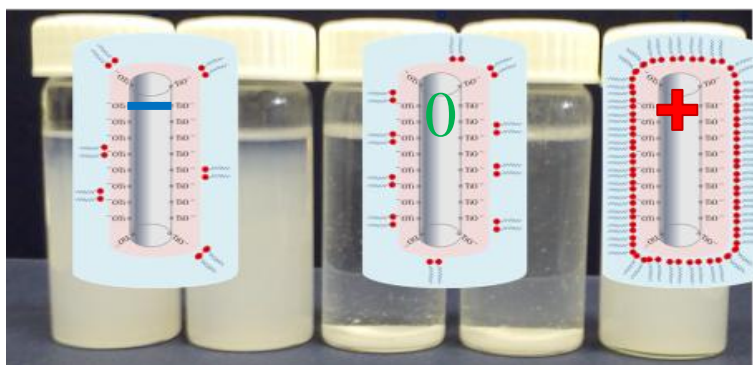
Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek
dariottp@gmail.com, kristina.kucanda@gmail.com

Uspješna primjena nanomaterijala za pročišćavanje otpadnih voda mora zadovoljiti određene kriterije, počevši od dizajna i sinteze pa do ispitivanja parametara koji uvjetuju njihovu primjenu u različitim medijima.¹ Na stabilnost nanomaterijala utječu različiti čimbenici poput koncentracije nanočestica, sastava medija, ionske jakosti i pH medija. Otpadne vode kompleksan su sustav koji se sastoji od različitih organskih molekula, iona teških metala i radioaktivnih iona koji mogu promijeniti svojstva nanomaterijala te u konačnici i njihovu efikasnost.² Iz tog razloga iznimno je bitno ispitati čimbenike koji uvjetuju stabilnost i interakciju nanomaterijala s različitim spojevima koji se mogu naći u otpadnim vodama. Površinske aktivne tvari (PAT, surfaktanti, tenzidi, detergentsi) klasa su spojeva koji su sve prisutniji u svakodnevnom životu, pa se intenzivno istražuju i sintetiziraju nove PAT poboljšanih svojstava.

Cilj je ovog rada istražiti interakciju TiO₂ nanožica (NW) s kationskom dimernom površinski aktivnom tvari, bis(*N,N*-dimetil-*N*-dodecil)etilen-1,2-diamonijevim dibromidom (DimBr₂), u vodenim otopinama pri sobnoj temperaturi.

Interakcija TiO₂ NW i DimBr₂ ispitana je mjerenjem elektroforetske pokretljivosti, veličine čestica (dinamičkim raspršenjem svjetlosti) i vizualnim opažanjem u vremenskom periodu od 24 h, pri odabranim koncentracijama TiO₂ i DimBr₂. Konduktometrijom je određena kritična micelizacijska koncentracija DimBr₂, dok je morfologija TiO₂ NW određena pretražnim elektronskim mikroskopom, a njihova specifična površina višeslojnom adsorpcijom plinovitog dušika BET metodom. Porastom koncentracije PAT, elektroforetska pokretljivost raste od jako negativnih do jako pozitivnih vrijednosti, što upućuje na adsorpciju PAT na TiO₂ NW. Pri vrijednostima pokretljivosti blizu nule opažena je ubrzana agregacija TiO₂ NW, što rezultira porastom veličine čestica i taloženjem, dok je pri najvećoj koncentraciji surfaktanta opažena usporena agregacija. Predložen je model kojim se mogu objasniti dobiveni rezultati.

Rad je napravljen na Zavodu za fizikalnu kemiju Kemijskog odsjeka PMF-a.



[1] G. R. Patzke, Y. Zhou, R. Kontic, F. Conrad, *Angew. Chem. Int. Ed.* **50** (2011) 826.

[2] W. Liu, T. Wang, A. G. L. Borthwick, Y. Wang, X. Yin, X. Li, J. Ni, *Science of the Total Environment* **456** (2013) 171.

Poboljšano uklanjanje fosfata iz vode pravilno strukturiranim mezoporoznim silicijevim dioksidom koji je dopiran samarijevim oksidom

Milenko Korica¹, Igor Đerđ², Marko Nusko², međunarodni suradnici (Shaojuan Deng³, Fei Zhang³, Yan Wang³, Bingqian Han³, Yude Wang³)

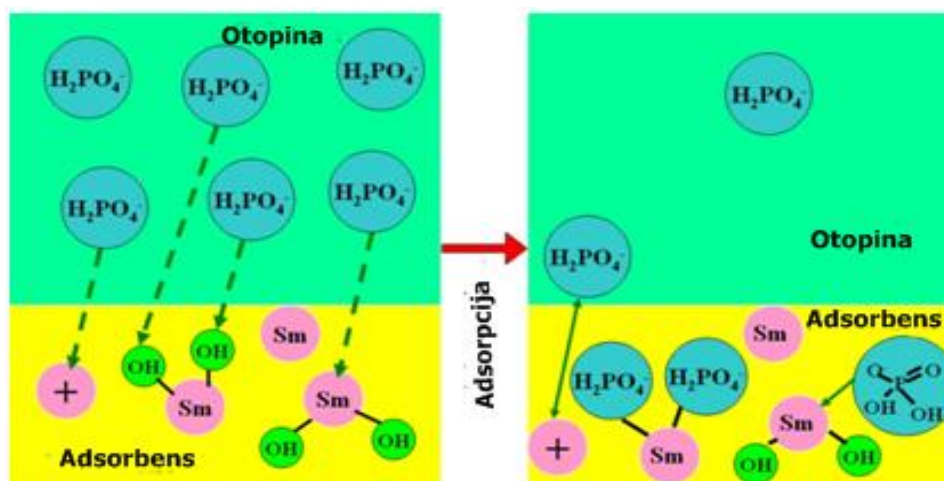
¹Odjel za kemiju, Cara Hadrijana 8/A, 31000 Osijek, Hrvatska

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

³Department of Materials Science and Engineering, Yunnan University, 650091 Kunming, NR Kina
mile91k@gmail.com

Sintetizirane su serije pravilno strukturiranog mezoporoznog silicijevog dioksida tretiranog samarijevim oksidom (Sm-MCM-41) laganim sol-gel postupkom u jednom koraku koristeći cetiltrimetilamonijev bromid (CTAB) kao predložak, tetraetilortosilikat (TEOS) kao izvor silicijevog dioksida i samarijev klorid heksahidrat kao prekursor. Sintetizirani materijali sa Sm/Si molarnim omjerom od 0.2 do 0.8 su okarakterizirani difrakcijom X-zraka (XRD), transmisijском elektronskom mikroskopijom (TEM) i N₂ adsorpcijsko-disorpcijskim mjerenjem (BET metoda). Svi promatrani spojevi posjeduju pravilnu heksagonalnu strukturu s velikom površinom, velikim volumenom pora i jednolikom veličinom pora. Mezoporozni sastojci su korišteni kao novi adsorbens za uklanjanje fosfata iz sintetske vodene otopine. Kapacitet uklanjanja fosfata koristeći Sm-MCM-41 u molarnom omjeru 0.6 je dosegao čak do 20 mg P/g. Sm-MCM-41 materijali, u usporedbi s MCM-41 i Sm₂O₃ česticama, imaju veliki kapacitet za uklanjanje fosfata, što ih čini obećavajućim kandidatima za kontrolu i zaštitu vode.

Rad je napravljen na Odjelu za kemiju i na Institutu Ruđer Bošković u suradnji sa sveučilištem Yunnan.



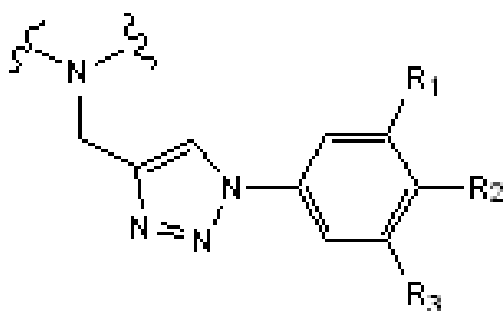
Sinteza 1,4-disupstituiranih 1,2,3- triazola na položaju N-1 i N-3 5-bromuracila

Tomislav Gregorić, Silvana Raić-Malić

Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije,
tgregoric@fkit.hr

Triazolni prsten, kao bioizoster amidne veze, ubraja se među važne biološki aktivne spojeve odgovorne za protutumorske i protumikrobne učinke. Najuspješnija metoda za sintezu 1,4-disupstituiranog 1,2,3-triazola je Huisgenova cikloadicija terminalnih alkina i azida s bakrom (I), kao katalizatorima. Reakcija se, prema zadanim uvjetima i dobivenim iskorištenjima, može svrstati u 'klik' reakcije. Pored toga, potvrđeno je da hibridi 1,2,3-triazola i odgovarajućih heterocikla, poput pirimidina, kinolina, kumarina, izatina, povećavaju biološku učinkovitost molekula [1].

U ovom su radu prikazani sintetizirani mono (N-1) i disupstituirani (N-1, N-3) derivati 5-bromuracila, odnosno njihovi konjugati s 1,2,3-triazolom. Ciljani spojevi sintetizirani su regioselektivnom reakcijom 1,3-dipolarne cikloadicije N-propargilnih derivata 5-bromuracila i odgovarajućih aromatskih azida, uz bakar kao katalizator. Za pripravu N-1 monosupstituiranih derivata 5-bromuracila provedene su okolišu prihvatljive sinteze potpomognutom mikrovalovima, dok su N-1, N-3 disupstituirani pirimidinski derivati sintetizirani pri sobnoj temperaturi preko noći.



1. R₁= H R₂= F R₃= H
2. R₁= H R₂= Cl R₃= H
3. R₁= H R₂= H R₃= F
4. R₁= Cl R₂= H R₃= Cl

Slika 1. Prikaz sintetiziranih spojeva.

1. S. Korunda, S. Krištafor, M. Cetina, S. Raić-Malić, *Curr. Org. Chem.* 17 (2013) 1114.

Sinteza i karakterizacija karbazolnih gvanidina, novih anionskih receptora

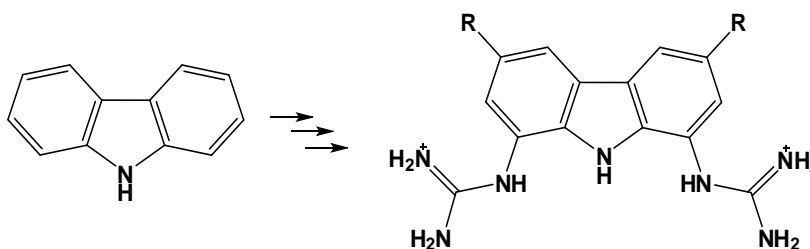
Saša Opačak¹, Marina Šekutor², Kata Mlinarić-Majerski²

¹Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek

²Zavod za organsku kemiju i biokemiju, Institut Ruđer Bošković
sasaopacak@gmail.com

Sinteza anionskih receptora je atraktivno područje supramolekulske kemije zbog sveopće prisutnosti aniona u okolišu i organizmima.[1] Naročito zanimljivi receptori su supstituirani karbazoli koji mogu stvarati različito obojene komplekse s pojedinim anionima što omogućava lakšu analizu i razlikovanje aniona. U literaturi su primjerice poznati ureidni derivati karbazola koji kompleksiraju anione putem stvaranja vodikovih veza između aniona i NH skupina karbazola odnosno uree.[2]

Cilj ovoga rada je sinteza 1,8-bisgvanidinskih karbazola s različitim supstituentima na položajima 3 i 6 (R = Cl, Br, I, CN, OMe, alkil, itd.). Variranjem supstituenata na aromatskim prstenovima mijenja se kiselost protona NH skupina karbazola i gvanidina čime se utječe na sposobnost stvaranja vodikovih veza.



Prva ciljna molekula je 1,8-bisgvanidin-3,6-diklorkarbazol, sinteza kojeg počinje kloriranjem karbazola. Nitriranjem 3,6-diklorkarbazola dobiven je 1,8-dinitro-3,6-diklorkarbazol koji je zatim reduciran katalitičkim hidrogeniranjem u 1,8-diamino-3,6-diklorkarbazol [3], ciljni prekursor za pripremu 1,8-bisgvanidin-3,6-diklorkarbazola. Idući korak sinteze bit će kondenzacija Boc-zaštićene tiouree [4] s 1,8-diamino-3,6-diklorkarbazolom te uklanjanje Boc zaštitne skupine kiselom hidrolizom, a u svrhu dobivanja ciljnog 1,8-bisgvanidin-3,6-diklorkarbazola. Strukture svih pripremljenih produkata potvrđene su ¹H NMR spektrima.

Nakon sinteze navedenog anionskog receptora na analogan način bit će pripremljeni i drugi gvanidinski derivati karbazola.

[1] Sessler, J. L., Gale, P. A., Cho, W.-S., Anion Receptor Chemistry, RSC, Cambridge, 2006.

[2] Thangadurai, T. D., Singh, N. J., Hwang, I., Lee, J. W., Chandran, R. P., Kim, K. S., J. Org. Chem. 72 (2007), 14.

[3] Chmielewski M. J., Charon, M., Jurczak, J., Org. Lett., 6, (2004), 20.

[4] Rether, C., Sicking, E., Boese, R., Schmuck, C., Beilstein J. Org. Chem. 6 (2010), 3.

Priprava supstituiranih difenil-okсалata i fluorescentnih boja te njihova primjena u kemiluminiscenciji

Petar Štrbac¹, Tomislav Portada²

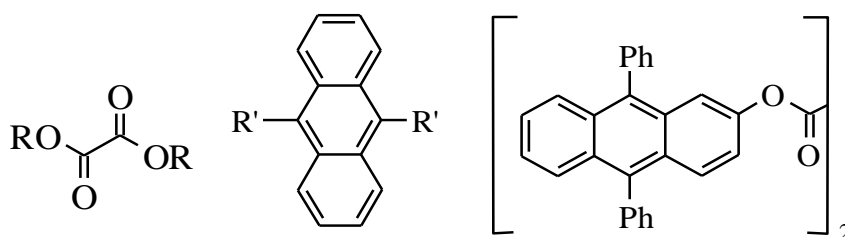
¹Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu

²Zavod za organsku kemiju i biokemiju, Institut Ruđer Bošković
petar.strbac@mail.ru

Reakcija estera oksalne kiseline s vodikovim peroksidom u prisutnosti fluorescentne boje praćena je intenzivnom kemiluminiscencijom koja ima i komercijalnu primjenu [1]. U ovom su radu literaturno opisanim postupcima pripravljena dva aktivirana estera oksalne kiseline, bis(2,4-dinitrofenil)-okсалat **1a** i bis(2,4,6-triklorfenil)-okсалat **1b** [2,3], te dvije fluorescentne boje, 9,10-difenilantracen **2a** [4] i 9,10-bis(feniletinil)antracen **2b** [5]. Optimizacijom postupka pripreme estera **1b** postignuto je iskorištenje od 95% što je značajno bolje od literaturno opisanih 50–60% [2,3].

Osmišljen je i pripremljen spoj **3** koji je u isto vrijeme i ester oksalne kiseline, i fluorescentna boja. Očekivanje da će se dodatkom spoja **3** u reakcijsku smjesu boja i (li) intenzitet svjetlosti značajnije mijenjati tijekom reakcije nažalost se nije ostvarilo.

U tijeku je optimizacija sinteze spojeva **2a** i **2b**.



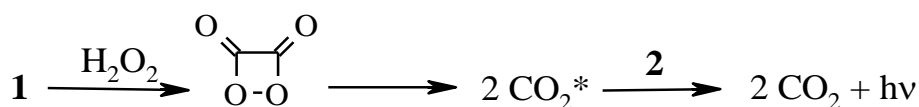
1a R = 2,4-dinitrofenil

2a R' = fenil

3

1b R = 2,4,6-triklorfenil

2b R' = feniletinil



Rad je izrađen na Institutu Ruđer Bošković u Laboratoriju za supramolekularnu i nukleozidnu kemiju.

[1] Ciscato, L. F. M. L. et al., ARKIVOC 2012 (iii) 391–430.

[2] McCapra, F., Methods in Enzymology, Bioluminescence and Chemiluminescence Part C, 305 (2000), 633–659.

[3] Mohan, A. G., Turro, N. J., J. Chem. Ed., 51 (1974) 528–529.

[4] Zhi, Z., Yang, X., Lu, L., Wang, X., The Chemical Educator 5 (2000) 42, 187–189.

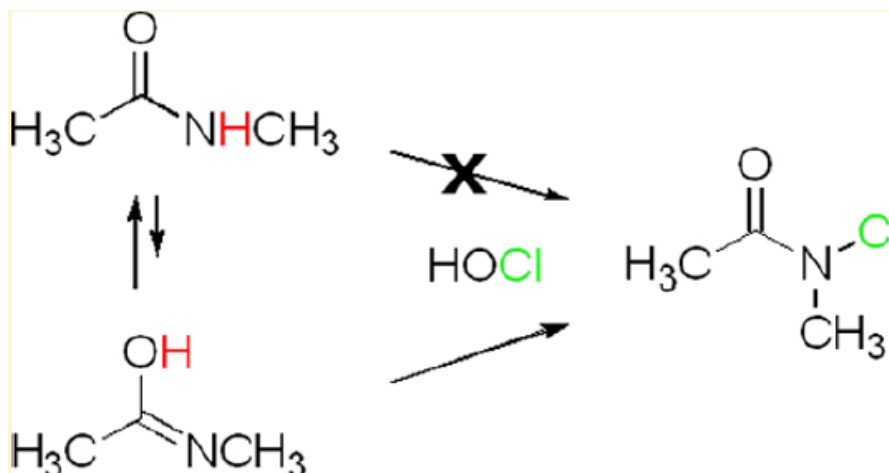
[5] US Patent 3911038A.

Utjecaj supstituenata na N3 i C5 položaju na reaktivnost derivata barbiturne kiseline s hipoklornom kiselinom. Kvantno-kemijska studija.

Pavica Šonjić, Tana Tandarić, Davor Šakić, Valerije Vrčec
 Farmaceutsko-biokemijski fakultet, Zagreb
 pavica.sonjic@gmail.com, tana.tandanic@gmail.com

Pojava lijekova u okolišu u posljednjih je dvadesetak godina postala goruća ekološka tema. Poseban problem predstavljaju perzistentni lijekovi koji su otporni na razgradnju, biološku i kemijsku, pa se nakupljaju u okolišu zadržavajući svoja farmakološka svojstva. U skupini perzistentnih spojeva nalaze se barbiturati, antikonvulzivi čije koncentracije u vodama iznose i do 6 µg/L. Pokazano je da se tijekom kloriranja, odnosno kemijske obrade otpadnih voda, struktura barbiturata ne mijenja. Kako bismo objasnili kemijsku inertnost barbiturata prema kloriranju upotrijebili smo standardne kvantno-kemijske metode za opis reakcija odabranih barbiturata s hipoklornom kiselinom (HOCl). Na B3LYP teorijskoj razini detaljno je prikazan mehanizam reakcije kloriranja barbiturata koji su supstituirani različitim skupinama (alkili, cikloalkenili ili fenili vezani na C5 položaju). Izračunate energije barijera za kloriranje iznose preko 150 kJ/mol, što ukazuje na kinetičku stabilnost barbiturata. Energije barijera za kloriranje barbiturata supstituiranih elektronegativnim skupinama (-F, -Cl, -CN, -NO₂) na C5 položaju niže su i do 30 kJ/mol. Računi su provedeni i s drugim elektron- odvlačecim skupinama. Ti rezultati pokazuju da kemijska sudbina barbiturata, npr. u postrojenjima za obradu voda, ovisi o vrsti supstituenata na C5-položaju. Provedeni su izračuni i za derivate barbiturne kiseline različito supstituirane na N3-položaju, što ne pokazuje znatan utjecaj na reakciju kloriranja, ali tumači slabu reaktivnost ovakvih derivata s hipoklornom kiselinom. Ova studija otvara mogućnost dizajna novih barbiturata koji su lakše razgradivi u okolišu i, prema tome, imaju povoljniji ekotoksikološki profil.

Rad je izrađen u Zavodu za organsku kemiju Farmaceutsko-biokemijskog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu.

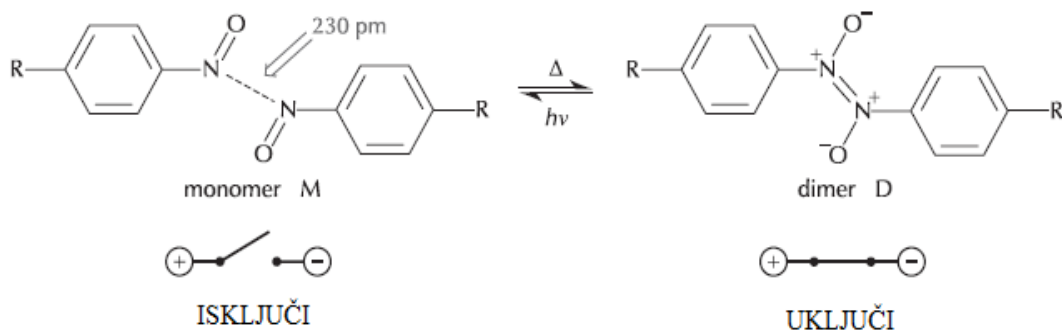


Utjecaj topokemije na kinetiku dimerizacije *p*-halogennitrozobenzena u čvrstom stanju

Jana Volarić, Hrvoj Vančik

Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek
janavolaric@gmail.com

Kao model za kinetičko istraživanje reakcija u čvrstom stanju uzeta je reakcija dimerizacije nitrozo spojeva prvenstveno zbog svoje jednostavnosti, pošto uključuje kidanje i nastajanje jedne veze, te mogućnosti praćenja procesa koristeći IR spektroskopiju. U ovom radu promatrane su kinetike dimerizacije *p*-halogennitrozobenzena u čvrstom stanju. Određena je ovisnost konstante brzine reakcije dimerizacije monomera 4-bromnitrozobenzena u KBr pastili o temperaturi, te je iz nje izračunata energija aktivacije. Unatoč načinu pakiranja 4-jodnitrozobenzena, gdje su sve molekule orijentirane tako da ne može doći do dimerizacije bez značajne promjene orijentacije, ipak zbog nesavršenosti kristala dolazi do dimerizacije molekula pri 60°C na kojoj je izračunata konstanta brzine reakcije. U nizu eksperimenata s 4-bromnitrozobenzenom promatrana je ovisnost konstante brzine reakcije dimerizacije o uređenosti sustava. Topokemijski utjecaj istraživao je na tri načina: pri kriogenim temperaturama nakon fotolize dimera, direktnom sublimacijom uzorka monomera i epitaksijom monomera na ohlađenu pločicu CsI pri kriogenim temperaturama kako bi se dobila različita uređenost sustava, od molekula monomera koji se nalaze u rešetci dimera nakon fotolize, molekula monomera u vlastitoj kristalnoj rešetci do nasumično orijentiranih molekula monomera u tankom sloju.



Mononuklearni kompleksi molibdena(VI):

trans-utjecaj kisikovih atoma

Alen Bjelopetrović¹, Višnja Vrdoljak¹, Gordana Pavlović²,
Marina Cindrić¹

¹Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek,
Zavod za opću i anorgansku kemiju,

²Sveučilište u Zagrebu, Tekstilno-tehnološki fakultet, Zavod za primjenjenu kemiju
abjelopetrovic@chem.pmf.hr

Mononuklearni kompleksi molibdena(VI) priređeni su reakcijom [MoO₂(acac)₂] i hidrazona, tridentatnih liganada koji uz C=N dvostruku vezu imaju i N-N jednostruku vezu. Hidrazoni se stabiliziraju kroz ketoamino-enolimino tautomeriju, a strukturna su istraživanja pokazala postojanje obje forme u kompleksnim spojevima.

Ispitivanja su također pokazala da kompleksi inhibiraju transkripciju DNA i zaustavljaju rast stanica, a opaženi efekt je i do 100 puta jači od efekta samog liganda.¹ U okviru istraživanja kemije kompleksnih spojeva molibdena priređeni su kompleksi opće formule [MoO₂(L)D], gdje je L hidrazonato ligand (L¹: R₁=H; R₂=H, L²: R₁=OCH₃, R₂=H; L³: R₁=H, R₂=OCH₃). Reakcije pripreve kompleksa provedene su u različitim alkoholima (CH₃OH, C₂H₅OH, C₃H₇OH ili (CH₃)₃COH) te acetonitrilu, CH₃CN i uz dodatak Lewisovih baza, piridina, α-pikolina i γ-pikolina.



Rentgenska strukturna analiza izoliranih kompleksa pokazala je da je na MoO₂²⁺ skupinu hidrazonski ligand vezan tridentatno, preko deprotonirane hidroksilne skupine, dušika i kisika, dok je oktaedarska koordinacija molibdena postignuta vezanjem alkohola ili baze kao monodentatnih O- odnosno N- donorskih liganada. Nastala koordinativna veza molibden-O ili -N znatno je slabija od preostalih veza što omogućuje lakšu zamjenu liganda na šestom koordinacijskom mjestu. Svi izolirani kompleksi identificirani su na temelju podataka iz infracrvenih spektara, termogravimetrijske analize i difrakcije rentgenskog zračenja na polikristalnom uzorku, a u pojedinim slučajevima i difrakcijom rentgenskog zračenja na monokristalnom uzorku.

Ovaj rad je izrađen na Zavodu za opću i anorgansku kemiju Kemijskog odsjeka Prirodoslovno-matematikog fakulteta u Zagrebu.

^[1] E. W. Ainscough, A. M. Brodie, W. A. Denny, G. J. Finlay, S. A. Gothe, J. D. Ranford, *J. Inorg. Biochem.* **77** (1999), 125-133

Sinteza i karakterizacija kompleksa molibdena (VI): reakcije u otopini i čvrstom stanju

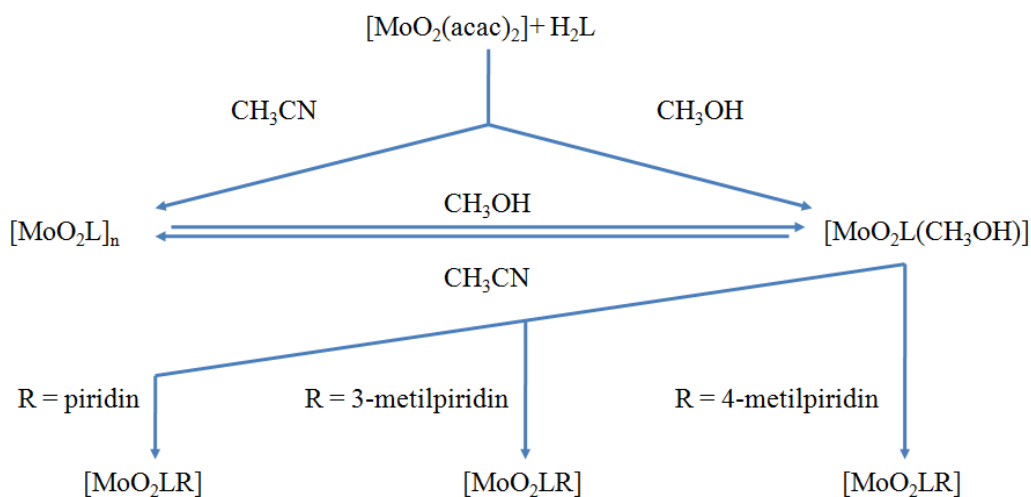
Luka Bilić, Marina Cindrić, Jana Pisk, Mirta Rubčić, Marijana Đaković

Prirodoslovno-matematički fakultet, Zavod za opću i anorgansku kemiju, Kemijski odsjek, Horvatovac 102a

lbilic@chem.pmf.hr

Priređeni su kompleksni spojevi molibdena(VI), $[\text{MoO}_2\text{L}(\text{CH}_3\text{OH})]$ (L = ONO-ligand), sa svrhom proučavanja izmjena liganada u *trans* položaju u odnosu na okso kisik MoO_2^{2+} skupine. U okviru ovog istraživanja priređeni su i indentificirani kompleksi molibdena(VI) s 3-(2-hidroksi-5-metilfenil-amino)- i 3-(2-hidroksi-4-metilfenil-amino)-1-fenilbut-2-en-1-onom, ligandima dobivenim reakcijama 2-amino-4-metilfenola odnosno 2-amino-5-metilfenola i 1-benzil-1,3-butadiona u etanolu ($\text{L}^1 = \text{Bzac-4Me}$ odnosno $\text{L}^2 = \text{Bzac-5Me}$). Kompleksi molibdena(VI) su priređeni reakcijom *bis*(2,4-pentandionato)dioksomolibdena(VI) i odgovarajućeg liganda u metanolu. Molekulska i kristalna struktura kompleksa $[\text{MoO}_2\text{L}^1(\text{CH}_3\text{OH})]$ i $[\text{MoO}_2\text{L}^2(\text{CH}_3\text{OH})]$ te njihovih derivata $[\text{MoO}_2\text{L}^1\text{R}]$ i $[\text{MoO}_2\text{L}^2\text{R}]$ (R = piridin, 3-metilpiridin i 4-metilpiridin) je određena na temelju podataka rentgenske strukturne analize, infracrvene spektroskopije, elementne i termogravimetrijske analize. Ispitivanja svojstava priređenih kompleksa su pokazala da je moguća izmjena koordiniranog metanola s drugim ligandima kao što su piridin, 3-metilpiridin i 4-metilpiridin u otopini i u čvrstom stanju. Ustanovljeno je također da u odsutnosti koordinirajućeg liganda kao što je alkohol ili neka N-baza dolazi do polimerizacije i nastanka $[\text{MoO}_2\text{L}]_n$ kompleksa. Izmjena O- i N-donorskih liganada kao i polimerizacija su popraćene promjenom boje.

Ovo istraživanje je napravljeno na Zavodu za opću i anorgansku kemiju, Kemijskog odsjeka Prirodoslovno-Matematičkog fakulteta.





Mehanokemijska sinteza poroznih metaloorganskih mreža

Tomislav Stolar¹, Stipe Lukin¹, Ivan Halasz², Ivica Đilović¹

¹Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek

²Zavod za fizičku kemiju, Institut Ruđer Bošković

tstolar@chem.pmf.hr, slukin@chem.pmf.hr

Metaloorganske mreže su metalne koordinacijske sfere koje su povezane organskim poveznicama. Zajedno tvore 3D poroznu strukturu mreža zbog koje imaju važnu industrijsku primjenu. Mehanokemijskom sintezom u čvrstom stanju priređene su metaloorganske mreže MOF-74 i HKUST-1. Kao izvor metala korišteni su njihovi oksidi koji daju vodu kao nusprodukt. Pokusi su izvođeni u uvjetima LAG i ILAG, a ishodi pojedinih reakcija s odgovarajućim oksidima analizirani su difrakcijskim metodama, infracrvenom spektroskopijom, te vremenski razlučenom *in situ* Ramanovom spektroskopijom. Utvrđeno je da MOF-74 nastaje isključivo pod ILAG uvjetima sinteze koji uključuju dodatak tekućeg DMF-a te amonijevog nitrata kao ionskog aditiva. Vrijeme reakcije utvrđeno je optimizacijom metode *in situ* Ramanovom spektroskopijom. Izravna mehanosinteza HKUST-1 nije dala trenutnih rezultata, ali on je nastao starenjem reakcijske smjese kroz nekoliko tjedana.

Rad je izrađen u Laboratoriju za sintezu novih materijala na Zavodu za kemiju materijala Instituta Ruđer Bošković i na Zavodu za opću i anorgansku kemiju Kemijskog odsjeka Prirodoslovno-matematičkog fakulteta.

Preferencija piridinskog dušika prema alifatskoj karboksilnoj skupini u binarnim krutinama izvedenim iz derivata piridina i *N*-(2-karboksifenil) glicina

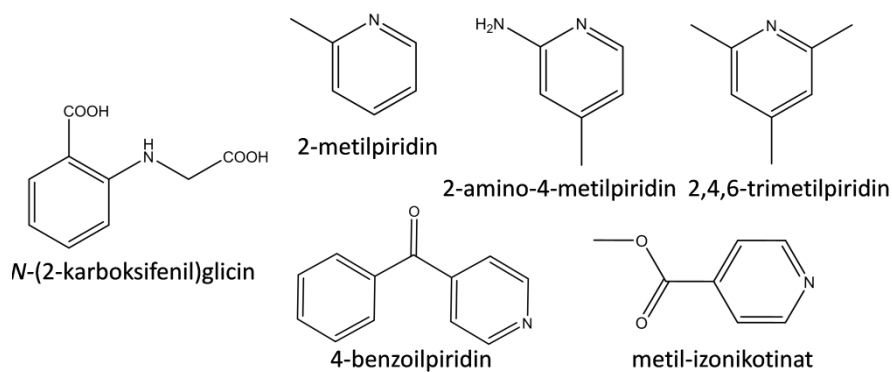
Nikola Bedeković, Vladimir Stilinović

Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek, Zagreb

nbedeko2@gmail.com

Piridin i njegovi derivati stupaju u interakcije s karboksilnim kiselinama, kako u otopini tako i u čvrstom stanju. Karboksilne kiseline sadrže karboksilnu skupinu koja u protoniranom obliku može poslužiti kao donor vodikove veze prema piridinskom dušiku pa se interakcija među tim jedinkama uspostavlja uglavnom vodikovim vezama. Moguća je i deprotonacija karboksilne skupine, odnosno protonacija dušikovog atoma na piridinu ili neke bočne skupine na piridinskom prstenu te stvaranje ionskog para. Ovisno koja od tih interakcija prevlada, kristalizacijom iz otopine mogu nastati soli ili kokristali kiseline i piridinskog derivata. U ovome radu korištena je aromatsko-alifatska dikiselina *N*-(2-karboksifenil)glicin, koja ima mogućnost vezanja piridinâ na obje karboksilne skupine. Sklonost vezivanja piridinâ na pojedinu karboksilnu skupinu proučavana je sintezom dvokomponentnih krutina koje se sastoje od spomenute dikiseline i piridinâ stehiometrije 1:1, te proučavanjem kristalnih struktura nastalih spojeva. Rezultati dobiveni proučavanjem struktura dvokomponentnih kristala ukazuju na preferencijalno vezanje piridinâ na alifatsku karboksilnu skupinu dikiseline.

Rad je izrađen na Zavodu za opću i anorgansku kemiju, Kemijskog odsjeka Prirodoslovno-matematičkog fakulteta u Zagrebu.



Shema 1. Prikaz spojeva korištenih u sintezi dvokomponentnih krutina.

Sinteza i karakterizacija polimorfnih oblika

2-amino-4-metilpiridinijeva salicilata

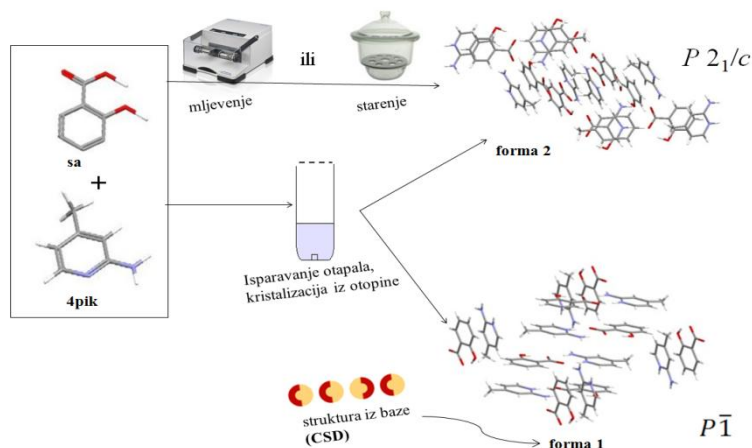
Neven Golenić, Ivan Ilić, Tomislav Piteša, Dominik Cinčić

Prirodoslovno matematički fakultet, Kemijski odsjek

neven.golenic@gmail.com; iilic25693@gmail.com; tpitesa@gmail.com

Jedno od važnijih područja kristalnog inženjerstva jest predviđanje i razumijevanje faktora koji utječu na kontrolu polimorfije, odnosno na usmjeravanje supramolekulskog povezivanja molekula prema željenom supramolekulskom ishodu [1]. U ovome radu pripravljena je sol salicilne kiseline (**sa**) s 2-amino-4-pikolinom (**4pik**). Tradicionalnom metodom kristalizacije iz otopine dobivena su dva polimorfna oblika soli, triklinski (Forma I) i monoklinski (Forma II). Triklinski oblik prethodno je već opisan u literaturi te su njegovi strukturni podatci iznađeni u bazi strukturnih podataka *Cambridge Structural Database (CSD)* [2], [3]. Metodom mljevenja potpomognutim kapljevinom te metodom starenja izučavana je mogućnost nastajanja oba polimorfna oblika. Pokazalo se da je Formu I moguće izolirati samo kristalizacijom iz otopine i to u smjesi s Formom II dok su svi mehanokemijski pokusi rezultirali fazno čistim produktom, Formom II. Pripravljene polimorfe te reaktanti, **sa** i **4pik**, izučavani su metodom difrakcije rentgenskih zraka na praškastom uzorku i diferencijalnom pretražnom kalorimetrijom. Za monoklinski oblik metodom difrakcije rentgenskog zračenja na jediničnom kristalu iznađena je molekulska i kristalna struktura. Za oba polimorfa računane su elektrostatske energije jediničnih ćelija metodom Hartree-Fock (Gaussian 09W, osnovni skup: 3-21G, neperiodički račun).

Istraživanje je napravljeno na Kemijskom odsjeku Prirodoslovno-matematičkog fakulteta u Zagrebu.



[1] J. Bernstein, *Polymorphism in Molecular Crystals*, Clarendon Press, Oxford, 2002.

[2] Hemamalini, M., Fun, H.-K., *Acta Crystallogr.*, **E66** (2010) o2151.

[3] F. H. Allen, *Acta Crystallogr.*, **B58** (2002) 380.

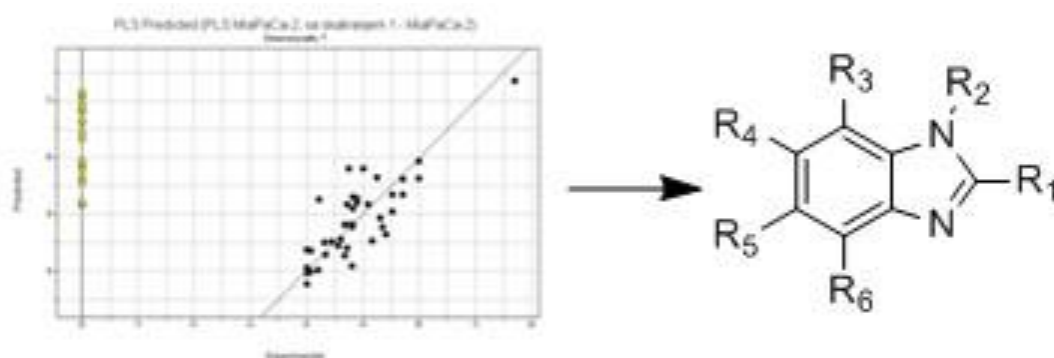
Kvantitativni odnos strukturnih svojstava i antitumorske aktivnosti derivata benzimidazola

Darko Vušak, Branimir Bertoša

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

darko.vusak@yahoo.com

Derivati benzimidazola vrlo su važni spojevi u farmakologiji te se koriste u raznim područjima medicine zbog antimikrobiološke aktivnosti, a između ostalog imaju i velik potencijal kao antitumorski lijekovi. Mehanizmi antitumorskog djelovanja derivata benzimidazola se razlikuju s obzirom na strukturu molekule, a nekad nisu u potpunosti poznati. Kemometrijske metode su se pokazale veoma korisnima budući da pronalaženje pogodnih lijekova može biti vremenski i ekonomski zahtjevno. Poznavanjem strukture spojeva te njihove biološke aktivnosti moguće je kreirati kemometrijski model koji kvantificira utjecaj strukture na djelovanje spoja na tumorske stanice. U istraživanju su korištene multivarijantne tehnike analiza glavnih komponenta – PCA i parcijalna projekcija najmanjih kvadrata – PLS. PCA metodom grupirane su strukturno slične molekule, a pomoću PLS su kreirani statistički modeli te su pomoću njih dizajnirani novi spojevi poboljšane aktivnosti. Istraživanje je provedeno na Zavodu za fizikalnu kemiju na Kemijskom odsjeku Prirodoslovno-matematičkog fakulteta u Zagrebu u sklopu Višeg praktikuma fizikalne kemije.



[1] M. Hranjec et al., *Eur. J. Med. Chem.* **43**(2008) 2877.

Djelotvornost novih gvanidinskih katalizatora i optimiranje procesa dobivanja biodizela metodom odzivnih površina

Marko Racar¹, Ivana Šoljić Jerbić¹, Zoran Glasovac², Mirjana Eckert-Maksić²,
Zrinka Kauzlarić³, Olivera Platiša³, Ante Jukić¹

¹ Zavod za tehnologiju nafte i petrokemiju, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb

² Zavod za organsku kemiju i biokemiju, Institut Ruđer Bošković, Zagreb

³ Kontrolni laboratorij RN Sisak, Ina Industrija nafte d.d., Sisak
mracar@fkit.hr

Biodizel predstavlja alternativno gorivo koje sa sobom donosi brojne prednosti kao što su: smanjenje emisija stakleničkih plinova, obnovljivost, biorazgradivost, netoksičnost, ne sadrži sumpor te omogućava smanjenje ovisnosti o fosilnim gorivima. Kako bi se omogućila šira primjena biodizela potrebno je ekonomski i ekološki poboljšati proces njegove proizvodnje. Drugim riječima, kako je proizvodnja biodizela katalitički proces, javlja se potreba za razvojem novih i boljih katalizatora uz optimiranje procesa. Današnji procesi proizvodnje biodizela primjenjuju uglavnom NaOH i KOH kao katalizatore za proces transesterifikacije, no njihova primjena pokazuje brojne poteškoće ukoliko se u reakcijskoj smjesi nalaze veći udjeli vode ili slobodnih masnih kiselina zbog nepoželjne sporedne reakcije saponifikacije, što može dovesti do nastanka emulzija te otežanog izdvajanja glicerola. U ovom radu ispitana je primjena novih derivata gvanidina (organskih superbaza) kod kojih nema poteškoća s reakcijama saponifikacije. Osim ispitivanja različitih gvanidinskih katalizatora u ovom radu provedeno je i optimiranje procesa transesterifikacije repičinog ulja s najdjelotvornijim ispitanim gvanidinskim katalizatorom primjenom metode odzivnih površina (RSM). Pri tome su u planiranju pokusa varirana tri parametra (maseni udio katalizatora, vrijeme provedbe reakcije te omjer metanola i repičinog ulja) na tri razine. Kao rezultat metode odzivnih površina dobiven je empirijski matematički model procesa transesterifikacije pomoću kojeg su određeni optimalni uvjeti: maseni udio katalizatora od 1,75 mas. %, molarni omjer metanola i repičinog ulja od 6,21:1 te vrijeme provedbe reakcije od 80 minuta. Optimalni uvjeti provedbe procesa transesterifikacije repičinog ulja potvrđeni su u uvećanom mjerilu, a dobivenom biodizelu određena su glavna fizikalno-kemijska i primjenska svojstva koja su potvrdila visoku razinu kvalitete na komercijalnoj razini.

Primjenjivost *in vitro* testova citotoksičnosti za procjenu bioloških učinaka srebrnih nanočestica

Tea Crnković¹, Ivana Vinković Vrček²

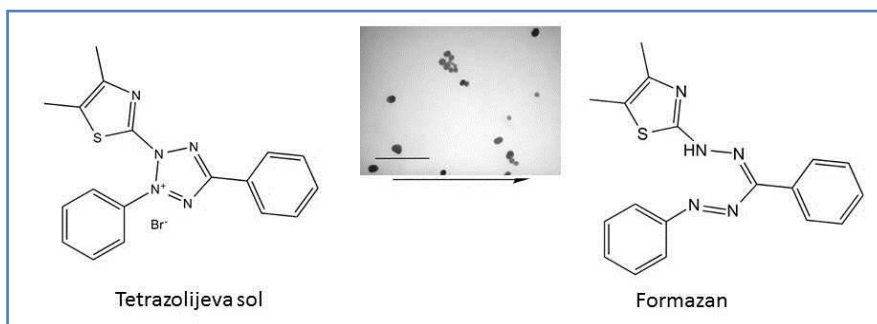
¹Farmaceutsko-biokemijski fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb

²Jedinica za analitičku toksikologiju i mineralni metabolizam, Institut za medicinska istraživanja i medicinu rada, Zagreb

tcrnkovic@student.pharma.hr

In vitro testovi citotoksičnosti, zbog lake dostupnosti i izvedivosti, često se koriste kao moćan instrument u procjeni rizika novih kemikalija. Međutim, nedavna istraživanja su pokazala da primjena klasičnih *in vitro* testova u ispitivanju bioloških učinaka nanočestica može dovesti do lažno negativnih ili lažno pozitivnih rezultata [1]. Razlog tome jest reaktivnost i nepredvidivo ponašanje nanočestica koje se od „tradicionalnih“ kemikalija razlikuju po iznimno velikom udjelu površine obzirom na volumen. Tako se mogu očekivati interakcije s reagensima koji se rabe u tim testovima, adheriranje nanočestica na staničnu površinu i interferencije optičke prirode [2].

U ovom je istraživanju ispitana primjenjivost *in vitro* testova koji rabe derivate tetrazolijevih soli (MTT, MTS i WST) za određivanje toksičnosti srebrnih nanočestica. Testiran je ionski oblik srebra (u obliku AgNO₃), te nekoliko vrsta srebrnih nanočestica koji su se razlikovali obzirom na veličinu čestica i njihovu površinsku strukturu. Za svaki od ovih uzoraka ispitali smo učinak različitih koncentracija ionskog i nano oblika srebra na stupanj redukcije tetrazolijeve soli do formazana. Rezultati su prikazani kao % nastalog formazana u odnosu na kontrolne uzorke u kojima je tetrazolijeva sol inkubirana u biološkom mediju bez dodatka srebra. Utvrđeno je da ionski oblik srebra ne uzrokuje nikakav učinak u ispitivanom koncentracijskom rasponu, dok su svi uzorci srebrnih nanočestica inducirali redukciju svih vrsta tetrazolijevih soli u formazan u primjenjenim koncentracijama. Prema tome, ove *in vitro* metode primjenjive su samo za testiranja učinaka nanočestica srebra pri onim koncentracijama koje nemaju utjecaj na reagens. Istraživanje je provedeno na Institutu za medicinska istraživanja i medicinu rada u Zagrebu.



[1] In Vitro Evaluation of Cellular Response Induced by Manufactured Nanoparticles, M., Horie, Chem. Res. Toxicol., 25 (2012) 605–619

[2] Particle-Induced Artifacts in the MTT and LDH Viability Assays, L., Holder, Chem. Res. Toxicol., 25 (2012) 1885–1892.



GLAVNI SPONZOR

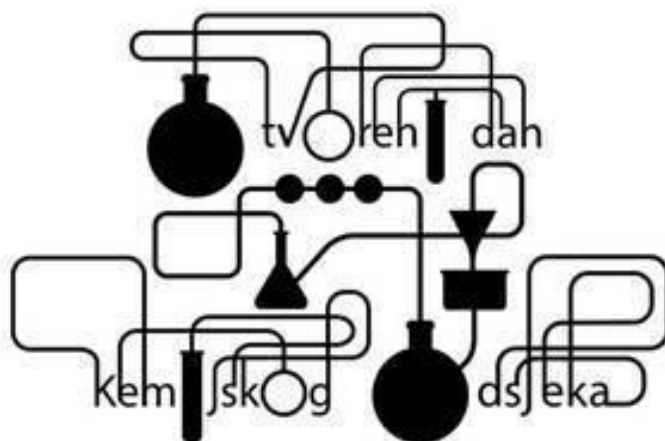


PLIVA

DONATORI

 **BASF**

The Chemical Company



POS d.o.o.

INFORMATIČKE USLUGE – SPLIT