



**S<sup>8</sup>ISK<sup>2023</sup>.**

Osmi Simpozij studenata kemičara  
Kemijski odsjek PMF-a

Horvatovac 102a, Zagreb  
21. listopada 2023.

# KNJIGA SAŽETAKA



## **UREDNIŠTVO**

Glavna urednica: Hrvojka Lukac

Pomoćni urednici: Luka Klemen, Vedrana Stantić

## **TEKST PRIPREMILI**

AUTORI, koji su odgovorni za tekstove sažetaka

## **NASLOVNICA**

Bruno Josip Fotak, Sara Macan

## **GRAFIČKA PRIPREMA I DIZAJN**

Hrvojka Lukac

## **FOTOGRAFIJA NA ZADNJOJ STRANICI**

Ela Kumer

2

---

## **ORGANIZATOR**

Hrvatsko kemijsko društvo (HKD)

Studentska sekcija (SSHKD)

## **TISAK**

Baris d.o.o.

## **IZDAVAČ**

Hrvatsko kemijsko društvo

**ISBN 978-953-8334-08-5**



## **ORGANIZACIJSKI ODBOR**

### **Vodstvo**

Antonio Magnabosco, pročelnik Studentske sekcije HKD-a

Dario Šušnić, predsjednik Organizacijskog odbora

Filip Simić, potpredsjednik Organizacijskog odbora

### **Tim za financije**

Livia Grgurić, Stjepan Dolić, Lea Malezan, Filip Simić

### **Tim za marketing**

Lana Bogdanovski, Bruno Josip Fotak, Marija Krznarić, Paula Lončarević,  
Lana Mijatović, Ema Poljac

### **Tim za planiranje**

Hrvojka Lukac, Luka Klemen, Vedrana Stantić, Vedran Šimunaj

### **IT koodrinatorica**

Sara Macan

## **SAVJETNICI**

dr. sc. Danijel Namjesnik

Andrea Usenik, mag. chem.

Jelena Kovač

Karla Remar

## **PARTNERI**

Studentska sekcija Hrvatskog društva kemijskih inženjera i tehnologa  
(Studentska sekcija HDKI)

Udruga studenata biotehnologije Sveučilišta u Rijeci (USBRI)

Croatian Pharmacy and Medical Biochemistry Students' Association  
(CPSA)

Simpozij studenata bioloških usmjerenja (SiSB)

Udruga studenata biologije – BIUS



## **POKROVITELJI**

Prirodoslovno-matematički fakultet (PMF)

Kemijski odsjek Prirodoslovno-matematičkog fakulteta (KO PMF)

## **SUFINANCIRANJE**

Studentski zbor Sveučilišta u Zagrebu (Studentski zbor UNIZG)

Studentski zbor Prirodoslovno-matematičkog fakulteta (SZPMF)

## **SPONZORI**

XELLIA d.o.o.

Coca-Cola HBC Hrvatska d.o.o.

PLIVA Hrvatska d.o.o.

MediLigo d.o.o.

Genos d.o.o. za vještačenje i analize

Ru-Ve d.o.o.

Accumular d.o.o.

Altium International d.o.o.

Medicpro d.o.o.

## **DONATORI**

Almagea d.o.o.

Baris d.o.o.

CUTE ZAGREB d.o.o.

IMMORTELLA, Bloom d.o.o.

Saponia d.d.

Selvita d.o.o.



## RIJEČ PREDsjedNIKA ORGANIZACIJSKOG ODBORA

Dragi sudionici 8. Simpozija studenata kemičara,

iznimna mi je čast predstaviti vam Knjigu sažetaka ovogodišnjeg, osmog po redu, SiSK-a. U ovom primjerku Knjige pronaći ćete sažetke 5 plenarnih i 3 pozvana predavanja, 18 usmenih te 21 postersko priopćenje. Naše predavače i izlagače slušat će 47 gostiju te 217 pasivnih sudionika. Uz 17 članova Organizacijskog odbora 8. SiSK-a, ove godine oborili smo rekord u broju sudionika na našem Simpoziju – njih čak 329.

Organizacija 8. SiSK-a imala je zadatak dostignuti uspjeh prethodnih Simpozija kao i ponuditi sudionicima nešto novo. Upravo smo zbog toga, uz znanstveni program Simpozija, uveli i Nastavnu sekciju čiji je cilj popularizacija zanimanja nastavnika kemije, osvještavanje studenata o važnosti pedagoških i metodičkih predmeta te pružanje drugačijeg pogleda na kemijske izazove. Time smo budućim znanstvenicima kemičarima i budućim nastavnicima kemije diljem Hrvatske i regije omogućili razmjenu znanja i iskustava te uvid u znanstvena okupljanja.

Cijela naša ovogodišnja saga ne bi bila moguća bez Organizacije koja je i u najtežim situacijama uspjela izvući maksimum iz svega. Posebnu zahvalnost dugujem predsjednicima timova Hrvojki, Liviji, Lani i Sari na dobroj komunikaciji, odličnom vođenju timova i prije svega na potpori. Hvala i pročelniku SSHKD-a Antoniju te potpredsjedniku 8. SiSK-a Filipu na prijedlozima i pomoći uslijed važnih odluka. Kako se većina nas prvi put susrela s ovim oblikom rada, bili su nam od velike koristi savjeti i pomoć profesora Vladislava Tomišića, dr. sc. Danijela Namjesnika te Andree Usenik, mag. chem. Hvala i pročelnici KO PMF-a profesorici Snežani Miljanić na potpori i pomoći kada god nam je bila potrebna. Veliko „Hvala!“ dugujem i predsjednici Organizacijskog odbora 7. SiSK-a Jeleni Kovač te potpredsjednici istog Karli Remar na brzom odgovaranju na poruke i svakom savjetu te pomoći. Ne smijem zaboraviti ni naše partnere Studentsku sekciju HDKI, USBRI, SiSB, BIUS te CPSA na promociji i podršci ovogodišnjem Simpoziju, kao ni naše sponzore i donatore koji su ovaj dan učinili još posebnijim. Iako nisu sudionici našeg Simpozija, hvala i našim obiteljima, prijateljima te drugim bliskim osobama na slušanju naših problema, pruženoj podršci i razumijevanju tijekom posljednjih 11 mjeseci.

Hvala svakom sudioniku 8. SiSK-a te se nadam da će vam ovaj Simpozij donijeti mnogo poznanstava, da ćete se dobro zabaviti i puno toga naučiti.

Dario Šušnić

Predsjednik Organizacijskog odbora 8. Simpozija studenata kemičara



8. Simpozij studenata kemičara, Zagreb, 21. listopada 2023.



## RIJEČ PROČELNIKA STUDENTSKE SEKCIJE HKD-a

Dragi studenti, profesori, asistenti te svi ostali sudionici,

nakon godinu dana ponovno se družimo i učimo jedni od drugih na osmom izdanju Simpozija studenata kemičara. Kao i svih prijašnjih godina ovaj Simpozij studentima nudi jedinstvenu priliku okušati se u posterskom ili usmenom izlaganju i na taj se način pripremiti za buduće nastupe na većim znanstvenim konferencijama. Usmena priopćenja su tako brojnim studentima vrlo dobra vježba javnog nastupa za skore obrane završnih/diplomskih radova, a u konačnici i sjajna uvertira u budući poslovni svijet, gdje će nekima takvi javni nastupi postati svakodnevnica. Ove godine po prvi puta na Simpozij uvodimo Nastavnu sekciju. Tako su u toj sekciji uvedena dva plenarna predavanja kojima se nadamo privući brojne buduće nastavnike na ovaj Simpozij i svima dati do znanja koje su sve mogućnosti i u nastavi kemije. Uz ostala tri plenarna predavanja te tri pozvana predavača, studenti imaju prilike vidjeti i učiti od svojih kolega, razmijeniti razna iskustva koja se već tradicionalno, osim na predavanjima, razmjenjuju i na pauzama. Svake godine broj prijava što aktivnih, što pasivnih, raste te nam se time ciljevi ostvaruju. Ovom prilikom se zahvaljujem i pohvaljujem sve studente koji su se prijavili za sudjelovanje na Simpoziju te se nadam da će međusobno druženje i upoznavanje studenata i znanstvenika na Simpoziju potaknuti aktivne, ali i pasivne sudionike, na nastavak (ili početak) istraživačkog rada i eventualno započinjanje novih suradnji.

Sve ovo ne bi bilo moguće bez naših vjernih i predanih ljudi iz Organizacijskog odbora koji su mjesecima odvajali svoje slobodno vrijeme ne bi li ostvarili i ovo osmo izdanje Simpozija. Od laganog tempa s kojim smo krenuli na početku godine, svaki mjesec bilo je jasnije da je Simpozij sve bliže; tempo je sve više rastao, posla je bilo sve više, ali svi ti „prvenstveno studenti“, moji dragi kolege, nisu posustajali i vjerujem da su sada ponosni na rezultat svoga rada. Ja sam na rezultate ponosan, a samim time sam ponosan i na njih. Veliko hvala predsjedniku Organizacije Dariju koji je uspio savršeno voditi Organizaciju, ali isto tako veliko hvala i Hrvojki, Filipu, Sari, Vedrani, Luki, Vedranu, Liviji, Stjepanu, Bruni, Mariji, Lani B., Emi, Pauli, Lani M., Antoniji i Lei. Svi oni odradili su veliki posao i samim time podigli ovaj Simpozij za još jednu ljestvicu. Također zahvaljujem se svim našim savjetnicima, a posebice Danijelu koji je bio spreman pomoći u bilo koje doba dana i noći. Hvala Hrvatskom kemijskom društvu i predsjedniku, profesoru Tomišiću na svojoj potpori, Kemijskom odsjeku PMF-a i pročelnici, profesorici Miljanić na ustupanju prostora Odsjeka i za kraj hvala svim našim vjernim partnerima, sponzorima i donatorima bez kojih bi održavanje Simpozija bilo gotovo nemoguće.

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

Antonio Magnabosco

Pročelnik Studentske Sekcije Hrvatskog kemijskog društva



8. Simpozij studenata kemičara, Zagreb, 21. listopada 2023.





## PROGRAM SIMPOZIJA



8:30 – 9:30

**REGISTRACIJA**

**OTVARANJE SIMPOZIJA**

predavaonica A1

9:30 – 9:50

riječ predsjednika Organizacijskog odbora: **Dario Šušnić**  
riječ dekana PMF-a: prof. dr. sc. **Mirko Planinić**  
riječ pročelnice Kemijskog odsjeka PMF-a: prof. dr. sc. **Snežana Miljanić**  
riječ predsjednika Hrvatskog kemijskog društva: prof. dr. sc. **Vladislav Tomišić**  
riječ pročelnika Studentske sekcije Hrvatskog kemijskog društva: **Antonio Magnabosco**

**PLENARNA PREDAVANJA**

predavaonica A1

moderator: Hrvojka Lukac

9:50 – 10:35

prof. dr. sc. **Sanda Vladimir-Knežević** (Sveučilište u Zagrebu Farmaceutsko-biokemijski fakultet, Zavod za Farmakognoziju): **KEMIJA NA PUTU OD BILJKE DO LIJEKA**

10:35 – 11:20

prof. dr. sc. **Ivanka Jerić** (Institut Ruđer Bošković, Laboratorij za biomimetičku kemiju, Zagreb): **SINTEZA NEPROTEINOGENIH AMINOKISELINA**

11:20 – 11:30

**KRATKA PAUZA**

11:30 – 12:15

moderator: Antonio Magnabosco

Asst. Prof. Dr. **Matic Lozinšek** (Jožef Stefan Institute, Ljubljana, Slovenia): **THE FASCINATING CHEMISTRY OF NOBLE GASES**

10

12:15 – 12:35

**PAUZA ZA KAVU**

**USMENA IZLAGANJA**

predavaonica A1

moderator: Stjepan Dolić

predavaonica A2

moderator: Antonio Magnabosco

predavaonica P1

moderator: Vedrana Stantić

12:35 – 12:50

**Antun Habajec**  
„Nasolje“ nad polielektrolitnim višeslojem

**Emilija Petrović Hađar**  
Karakterizacija i određivanje svojstava jodidnih kompleksa prijelaznih metala pripremljenih mehanokemijskom modifikacijom zeolita fau

**Filip Grdović**  
Karakterizacija loratadina i nabumetona te njihovih kompleksa s  $\beta$ -ciklodekstrinima spektroskopijom površinski pojačanog ramanovog raspršenja

12:50 – 13:05

**Nika Jakobović**  
Višestruko simultano kvantno-kemijsko dokiranje heterocikličkih molekula u aktivno mjesto butirilkolinesteraze

**Lucija Drempetić**  
Utjecaj kompleksa kobalta(III) na nastajanje dekanadata

**Mateja Cader**  
Mehanokemijska sinteza i karakterizacija inkluzijskog kompleksa loratadina i hidrosipropil- $\beta$ -ciklodekstrina

13:05 – 13:20

**Karla Kukina Gradečak**  
Utjecaj vezanja kationa na intrinzičnu fluorescenciju tercijarnog amidnog derivata kaliks[6]arena

**Antonio Močinić**  
Fleksibilni odzivi kristala koordinacijskih polimera kadmija(II)

**Nikša Bekavac**  
Modeliranje i optimiranje ekstrakcije lipaze primjenom vodenih dvofaznih sustava

13:20 – 13:30

**PAUZA ZA FOTOGRAFIRANJE**

stepenice ispred zgrade Kemijskog odsjeka PMF-a



13:30 – 14:30	<b>RUČAK</b>		
14:30 – 15:30	<b>POSTERSKA SEKCIJA</b>		
	<b>USMENA IZLAGANJA</b>		
	predavaonica <b>A1</b> moderator: Vedrana Stantić	predavaonica <b>A2</b> moderator: Livia Grgurić	predavaonica <b>P1</b> moderator: Paula Lončarević
15:30 – 15:45	<b>Stjepan Dolić</b> Pigmentom senzibilizirane solarne ćelije korištenjem antocijanina iz voća	<b>Damjan Šinjori</b> Adsorpcija plinova u fau tip zeolita modificiranog mehanokemijski sintetiziranim policijanometalatom	<b>Franko Pahović</b> Sinteza ferocenskih konjugata D-glukoze i N-acetil-D-glukozamina
15:45 – 16:00	<b>Stipe Blažević</b> Karakterizacija nanofilmova baziranih na derivatima kitozana i celuloze	<b>Josipa Sarjanović</b> Električno istraživanje vanadijevih koordinacijskih kompleksa dobivenih iz jednostavnih acilhidrazona	<b>Petra Ištoković</b> Sinteza i karakterizacija porfirinskih i adamantanskih poroznih organskih polimera s azo poveznicama
16:00 – 16:15	<b>Ana Ivančić</b> Utjecaj završnog sloja nanofilma kitozan/pektin na adheziju bakterija	<b>Lea Komočar</b> Kristali u pokretu: koordinacijski polimeri bakra(II) i kadmija(II)	<b>Filip Kučas</b> Priprava derivata manoziliranog desmuramil-peptida s ferocenskom podjedinicom na $\alpha$ -položaju D-izoglutamina
16:15 – 16:35	<b>PAUZA ZA KAVU</b>		
	Predstavljanje sponzora, donatora i partnera		
	<b>POZVANA PREDAVANJA</b>		<b>NASTAVNA SEKCIJA PLENARNA PREDAVANJA</b>
	predavaonica <b>A1</b> moderator: Livia Grgurić	predavaonica <b>A2</b> moderator: Luka Klemen	
16:35 – 17:05	dr. sc. <b>Ivica Cvrtila</b> (Institut Ruđer Bošković, Laboratorij za sintezu i katalizu u čvrstom stanju, Zagreb): <b>FORMILPIRIDINSKO PLAVILO</b>	16:35 – 16:40	uvodna riječ: dr. sc. <b>Olgica Martinis</b> (Agencija za odgoj i obrazovanje)
17:05 – 17:35	dr. sc. <b>Juraj Nikolić</b> (Sveučilište u Zagrebu Prirodoslovno-matematički fakultet, Zavod za fizikalnu kemiju): <b>TRIJUMVIRAT ISTRAŽIVANJA MATERIJALA: PRIPREMA, STRUKTURA I SVOJSTVA</b>	16:40 – 17:25	izv. prof. dr. sc. <b>Draginja Mrvoš-Sermek</b> (Sveučilište u Zagrebu Prirodoslovno-matematički fakultet, Zavod za opću i anorgansku kemiju): <b>KAKO BITI DOBAR NASTAVNIK KEMIJE?</b>
17:35 – 18:05	<b>Petra Lazarić Bošnjak</b> , univ. mag. pharm. (PLIVA Hrvatska d.o.o.): <b>TKO BRINE O SIGURNOSTI BOLESNIKA I LIJEKOVA?</b>	17:25 – 18:10	izv. prof. dr. sc. <b>Vesna Petrović Peroković</b> (Sveučilište u Zagrebu Prirodoslovno-matematički fakultet, Zavod za organsku kemiju): <b>ORGANSKA KEMIJA NA ŠKOLSKOJ KLUPI</b>
18:10 – 18:25	<b>ZATVARANJE SIMPOZIJA</b> predavaonica <b>A2</b>		
18:25 – 18:45	<b>ZABAVNI PROGRAM</b> PO "Entropija"		



# SADRŽAJ

## PLENARNA PREDAVANJA

PL1	<b>Kemija na putu od biljke do lijeka</b> Sanda Vladimir-Knežević	18
PL2	<b>Sinteza neproteinogenih aminokiselina</b> Ivanka Jerić	19
PL3	<b>The fascinating chemistry of noble gases</b> Matic Lozinšek	20
PL4	<b>Kako biti dobar nastavnik kemije?</b> Draginja Mrvoš-Sermek	21
PL5	<b>Organska kemija na školskoj klupi</b> Vesna Petrović Peroković	22

## POZVANA IZLAGANJA

PP1	<b>Formilpiridinsko plavilo</b> Ivica Cvrtila	24
PP2	<b>Trijumvirat istraživanja materijala: priprema, struktura i svojstva</b> Juraj Nikolić	25
PP3	<b>Tko brine o sigurnosti bolesnika i lijekova?</b> Petra Lazarić Bošnjak	26



## USMENA IZLAGANJA

U1	<b>„Nasolje“ nad polielektrolitnim višeslojem</b> <u>Antun Habajec</u> , Juraj Nikolić, Tin Klačić, Davor Kovačević	28
U2	<b>Višestruko simultano kvantno-kemijsko dokiranje heterocikličkih molekula u aktivno mjesto butirilkinesteraze</b> <u>Nika Jakobović</u> , Karlo Sović, Ines Primožič, Tomica Hrenar	29
U3	<b>Utjecaj vezanja kationa na intrinzičnu fluorescenciju tercijarnog amidnog derivata kaliks[6]arena</b> <u>Karla Kukina Gradečak</u> , Katarina Leko, Andrea Usenik, Nikola Cindro, Vladislav Tomišić	30
U4	<b>Karakterizacija i određivanje svojstava jodidnih kompleksa prijelaznih metala pripremljenih mehanokemijskom modifikacijom zeolita fau</b> <u>Emilija Petrović Hađar</u> , Nikola Jakupec, Lidija Posavec, Ana Palčić	31
U5	<b>Utjecaj kompleksa kobalta(III) na nastajanje dekanadata</b> <u>Lucija Drempetić</u>	32
U6	<b>Fleksibilni odzivi kristala koordinacijskih polimera kadmija(II)</b> <u>Antonio Močinić</u> , Ozana Mišura, Marijana Đaković	33
U7	<b>Karakterizacija loratadina i nabumetona te njihovih kompleksa s <math>\beta</math>-ciklodekstrinima spektroskopijom površinski pojačanog ramanovog raspršenja</b> <u>Filip Grdović</u> , Nives Galić, Adriana Kendel	34
U8	<b>Mehanokemijska sinteza i karakterizacija inkluzijskog kompleksa loratadina i hidroksipropil-<math>\beta</math>-ciklodekstrina</b> <u>Mateja Cader</u> , Lidija Posavec, Marijana Pocrnić, Dominik Cinić, Nives Galić	35
U9	<b>Modeliranje i optimiranje ekstrakcije lipaze primjenom vodenih dvofaznih sustava</b> <u>Nikša Bekavač</u> , Mia Radović, Bruno Zelić, Ana Jurinjak Tušek, Anita Šalić	36
U10	<b>Pigmentom senzibilizirane solarne ćelije korištenjem antocijanina iz voća</b> <u>Stjepan Dolić</u> , Karlo Sović, Gordan Horvat	37
U11	<b>Karakterizacija nanofilmova baziranih na derivatima kitozana i celuloze</b> <u>Stipe Blažević</u> , Mia Mesić, Juraj Nikolić, Davor Kovačević	38



U12	<b>Utjecaj završnog sloja nanofilma kitozan/pektin na adheziju bakterija</b> <u>Ana Ivančić</u> , Anamarija Zore, Aleksander Učakar, Klemen Bohinc, Juraj Nikolić, Davor Kovačević	39
U13	<b>Adsorpcija plinova u fau tip zeolita modificiranog mehanokemijski sintetiziranim policijanometalatom</b> <u>Damjan Šinjori</u> , Nikola Jakupec, Ana Palčić	40
U14	<b>Električno istraživanje vanadijevih koordinacijskih kompleksa dobivenih iz jednostavnih acil-hidrazona</b> <u>Josipa Sarjanović</u> , Edi Topić, Mirta Rubčić, Luka Pavić, Jana Pisk	41
U15	<b>Kristali u pokretu: koordinacijski polimeri bakra(II) i kadmija(II)</b> <u>Lea Komočar</u> , Mateja Pisačić, Ivan Kodrin, Marijana Đaković	42
U16	<b>Sinteza ferocenskih konjugata D-glukoze i N-acetil-D-glukozamina</b> <u>Franko Pahović</u> , Đani Škalamera	43
U17	<b>Sinteza i karakterizacija porfirinskih i adamantanskih poroznih organskih polimera s azo poveznicama</b> <u>Petra Ištoković</u> , Barbara Panić, Ivana Biljan	44
U18	<b>Priprava derivata manoziliranog desmuramil-peptida s ferocenskom podjedinicom na <math>\alpha</math>-položaju D-izoglutamina</b> <u>Filip Kučas</u> , Mia Bušljeta, Vesna Petrović Peroković, Željka Car, Rosana Ribić, Monika Kovačević, Lidija Barišić	45



## POSTERSKA IZLAGANJA

P1	<b>Supresija rasta tumorskih stanica izloženih djelovanju novih bakrovih kompleksa s hidroksi/benzopironima</b> <u>Jakov Babić</u> , Stjepan Šarić, Katarina Mišković Špoljarić, Berislav Marković, Sunčica Roca, Nikolina Filipović	48
P2	<b>Sinteza i in silico ADMET svojstva novih steroidnih tiazolidinonskih derivata</b> <u>Ema Begović</u> , <u>Nevena Jokić</u> , <u>Valentina Periškić</u> , <u>Nikolina Tapavica</u> , <u>Ksenija Pavlović</u>	49
P3	<b>Polifenolni sastav i senzorne karakteristike crnog vina odležanog u <i>Quercus petraea</i> bačvama iz Srbije</b> <u>Sara Brunet</u> , <u>Uroš Miljić</u> , <u>Jelena Vulić</u> , <u>Jovana Rajović</u> , <u>Vladimir Puškaš</u>	50
P4	<b>Funkcionalni hidrogelovi na bazi fmoc-aminokiselina s katalitičkim svojstvima</b> <u>Ena Dražić</u> , <u>Patrizia Janković</u> , <u>Daniela Kalafatović</u>	51
P5	<b>One-pot sinteza trisaharida iz saponina biljke <i>Quillaja saponaria</i></b> <u>Filip Grdović</u> , <u>Đani Škalamera</u>	52
P6	<b>Koordinacijski spojevi bakra(II) s izotocijanatnim i piridinskim ligandima kao akceptorima halogenske veze</b> <u>Mila Grgurić</u> , <u>Lidija Posavec</u> , <u>Dominik Cinčić</u>	53
P7	<b>Primjena različitih metoda komljenja u proizvodnji bezalkoholnog piva</b> <u>Lenka Grubač</u>	54
P8	<b>Adsorpcija poli(N-etil-4-vinilpiridina) na koloidne čestice titanijeva dioksida</b> <u>Tea Juračić</u> , <u>Karla Korade</u> , <u>Tajana Begović</u>	55
P9	<b>Stabilitetno-indikativna metoda i LC-MS karakterizacija razgradnih produkata cinarizina</b> <u>Lucija Lasić</u> , <u>David Klarić</u> , <u>Nives Galić</u>	56
P10	<b>Sinteza konjugata ferocena i celobioze</b> <u>Adriana Lipovčić</u> , <u>Đani Škalamera</u>	57
P11	<b>Novi pristup sintezi pentajodbenzena</b> <u>Antonio Magnabosco</u> , <u>Vladimir Stilinović</u>	58
P12	<b>Ispitivanje toksičnosti razgradnih produkata bioplastike polimljične kiseline</b> <u>Cristina Maligec</u> , <u>Marija Pranjić</u> , <u>Sanja Babić</u> , <u>Aleksandra Maršavelski</u>	59



P13	<b>Ispitivanje utjecaja temperature na koordinacijske, halogenske i tetrelne interakcije u kristalnoj strukturi dobivenoj iz olovovog tiocijanata i 3-jodopiridina</b> <u>Lucija Marić, Nikola Bedeković, Vladimir Stilinović</u>	60
P14	<b>Elementna analiza sušenog manga spektrometrijom masa uz induktivno spregnutu plazmu</b> <u>Ema Mihalić, Iva Juranović Cindrić, Ivan Nemet, Michaela Zeiner, Heide Lore Fiedler</u>	61
P15	<b>Ukupan sadržaj polifenolnih spojeva i antioksidativno djelovanje liofiliziranog meda</b> <u>Dario Piuković, Slobodan Gadžurić, Aleksandar Marić, Pavle Jovanov</u>	62
P16	<b>Razvoj i validacija metode za određivanje loratadina u prisutnosti njegovih razgradnih produkata</b> <u>Matea Rukavina, Marijana Pocrnić, Nives Galić</u>	63
P17	<b>Sinteza steroidnog hidrazid-hidrazona i <i>in silico</i> predviđanje ADMET svojstava</b> <u>Vladana Stošić, Branislava Tenjović, Andrea Nikolić</u>	64
P18	<b>Koordinacijski spojevi lantana(III) i neodimija(III) s tiocianatnim ligandima kao akceptori halogenske veze</b> <u>Ruđer Sušanj, Nea Baus Topić, Vinko Nemeč, Dominik Cinčić</u>	65
P19	<b>Razvoj naprednog sustava obrade voda onečišćenih mikroplastikom</b> <u>Lucija Švegović, Adriana Tičić, Luka Večenaj, Kristina Bule Možar, Martina Miloloža, Viktorija Martinjak, Dajana Kučić Grgić, Šime Ukić, Marinko Markić, Matija Cvetnić, Tomislav Bolanča</u>	66
P20	<b>Potpomognuta ekstrakcija biflavonoida iz listova <i>Ginkgo biloba</i> L.</b> <u>Iva Turkalj, Lina Šepić, Anita Šalić, Bruno Zelić, Dunja Šamec</u>	67
P21	<b>Rotovap kućne izrade</b> <u>Petar Volarević</u>	68





## PLENARNA PREDAVANJA

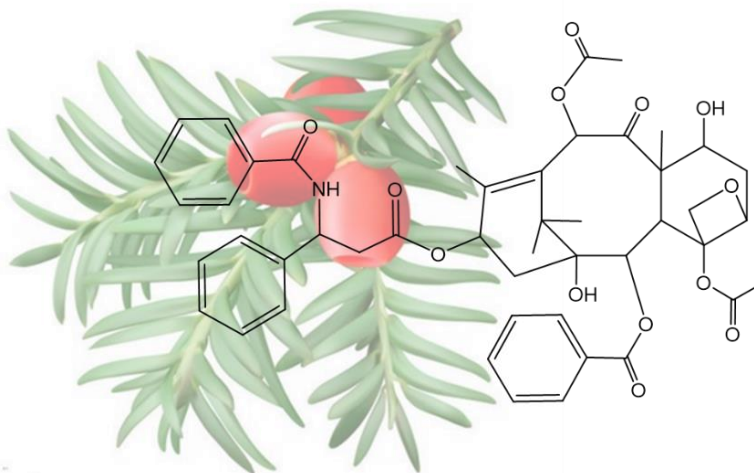


## KEMIJA NA PUTU OD BILJKE DO LIJEKA CHEMISTRY ON THE WAY FROM PLANT TO MEDICINE

Sanda Vladimir-Knežević

Sveučilište u Zagrebu Farmaceutsko-biokemijski fakultet, Zavod za farmakognoziju, Trg  
Marka Marulića 20, 10000 Zagreb, Hrvatska  
svladimir@pharma.hr

Primjena biljaka u svrhu liječenja seže daleko u prošlost te predstavlja osnovu tradicionalnih oblika liječenja, ali i moderne racionalne fitoterapije. Biljke su bogat izvor strukturno raznolikih biološki aktivnih molekula i još uvijek najveća inspiracija u istraživanju i razvoju lijekova. Napredak kemije omogućio je izolaciju i određivanje kemijske strukture prirodnih spojeva. Izolacijom morfina iz opija, godine 1803. započelo je novo razdoblje suvremene medicine i farmacije u kojem su razvijeni brojni lijekovi prirodnog podrijetla. Oko 40 % današnjih lijekova su izolirani originalni prirodni spojevi ili molekule dobivene polusintezom i potpunom sintezom po uzoru na prirodne tvari, a veliki dio potječe upravo iz biljaka. Pripadaju različitim skupinama biljnih sastavnica, među kojima su alkaloidi (morfina, vinblastin, kinin), diterpeni (paklitaksel), fenolni spojevi (salicin), seskviterpenski laktoni (artemizinin) i kardiotonični glikozidi (digoksin), a koriste se kao antineoplastici, analgetici, antipiretici, antimalarici i kardiotonici. Istraživanje prirodnih ljekovitih tvari koje se mogu primjenjivati u prevenciji i liječenju bolesti ili postati vodeće molekule u istraživanju i razvoju lijekova dobiva novi zamah napretkom metoda ekstrakcije, separacije i strukturne karakterizacije.



[1] S. Mathur, C. Hoskins, *Biomed. Rep.* **6** (2017) 612.

[2] D. J. Newman, G. M. Cragg, *J. Nat. Prod.* **83** (2020) 770.



## SINTEZA NEPROTEINOGENIH AMINOKISELINA SYNTHESIS OF NONPROTEINOGENIC AMINO ACIDS

Ivanka Jerić

Institut Ruđer Bošković, Laboratorij za biomimetičku kemiju, Bijenička cesta 54, 10000 Zagreb, Hrvatska  
ivanka.jeric@irb.hr

PL2

Procjenjuje se da je oko 800 neproteinogenih aminokiselina (engl. *nonproteinogenic amino acids*, NPAA) identificirano u bakterijama, gljivama, biljkama i morskim organizmima, ostavljajući 20 proteinogenih aminokiselina u manjini od 4 %. Postojanje više stotina biološki aktivnih prirodnih peptida s jednom ili više NPAA, odražava sposobnost ovih posebnih monomera da daju neka korisna funkcionalna svojstva, koja nisu dostupna u osnovnom skupu od 20 aminokiselina. Ugradnja NPAA u peptide dovodi do modifikacije sekundarne strukture što često rezultira poboljšanom selektivnošću, bioraspoloživošću i stabilnošću. Štoviše, naširoko se koriste u sintezi peptidnih katalizatora i funkcionalnih materijala. Konačno, NPAA su svestrani intermedijeri u organskoj sintezi, posebno u razvoju lijekova. Široka korisnost NPAA čini ih stoga jednom od najvažnijih skupina organskih molekula. S obzirom na važnost i primjenu NPAA u različitim aspektima našeg svakodnevnog života, od medicine preko farmaceutskih i kozmetičkih proizvoda do hrane i materijala, postoji snažna motivacija za pripremu različitih vrsta NPAA. Brojne metode razvijene za sintezu NPAA povećavaju dostupnost ove klase organskih molekula, dok novi napredak u sintezi i analizi peptida i biblioteka peptida značajno pridonosi razumijevanju načina na koji ugradnja NPAA modulira svojstva promatrane molekule. U ovom predavanju bit će prikazani rezultati istraživanja naše grupe u području pripreme novih aminokiselinskih motiva kemijskom modifikacijom prirodnih spojeva.

19



- [1] K. Vlahoviček-Kahlina, M. Vazdar, A. Jakas, V. Smrečki, I. Jerić, *J. Org. Chem.* **83** (2018) 13146–13156.  
 [2] J. Suć Sajko, V. Ljoljić Bilić, I. Kosalec, I. Jerić, *ACS Comb. Sci.* **21** (2019) 28–34.  
 [3] A. Jakas, A. Višnjevac, I. Jerić, *J. Org. Chem.* **85** (2020) 3766–3787.  
 [4] J. Suć Sajko, I. Jerić, *J. Org. Chem.* **87** (2022) 7076–7084.



## FASCINANTNA KEMIJA PLEMENITIH PLINOVA THE FASCINATING CHEMISTRY OF NOBLE GASES

Matic Lozinšek

Jožef Stefan Institute, Jamova cesta 39, 1000 Ljubljana, Slovenia  
matic.lozinsek@ijs.si

It is a widely accepted fact taught in schools that the group 18 elements or noble gases are inherently unreactive and reluctant to form chemical bonds. However, since the groundbreaking discovery of noble-gas reactivity [1], which shattered the dogma of their inertness, a rich chemistry has emerged featuring fascinating and structurally diverse compounds of xenon and krypton [2,3]. This relatively exotic subfield of main-group inorganic chemistry continues to yield intriguing and novel compounds [4,5]. New approaches are currently emerging in the field on noble-gas chemistry. These include the development of novel synthetic approaches such as mechanochemistry. This method circumvents the need for special vacuum line and the use of hazardous reagents and solvents, such as elemental fluorine and anhydrous hydrogen fluoride, respectively. Moreover, recent advances in 3D electron diffraction have opened new opportunities for elucidating the crystal structures of noble-gas compounds that do not yield crystals of sufficient size for single-crystal X-ray diffraction. Additionally, experiments conducted under high pressures in gigapascal range (1 GPa = 10,000 bars), performed in diamond anvil cells, enable the exploration of new and unprecedented chemical reactivity of the noble-gas compounds.



The photochemical synthesis of  $\text{KrF}_2$  by the UV irradiation of a mixture of solid krypton and liquid fluorine carried out at liquid nitrogen temperatures [3,6].

- [1] N. Bartlett, *Proc. Chem. Soc.* **6** (1962) 218.  
[2] D. S. Brock, G. J. Schrobilgen, B. Žemva, In: *Comprehensive Inorganic Chemistry II* (Eds.: J. Reedijk, K. Poepelmeier), Elsevier, (2013) pp. 755–822.  
[3] M. Lozinšek, G. J. Schrobilgen, *Nature Chem.* **8** (2016) 732.  
[4] J. R. De Backere, M. R. Bortolus, G. J. Schrobilgen, *Angew. Chem. Int. Ed.* **55** (2016) 11917.  
[5] M. Lozinšek, H. P. A. Mercier, G. J. Schrobilgen, *Angew. Chem. Int. Ed.* **60** (2021) 8149.  
[6] M. Lozinšek, *Novice IJS* **196** (2021) 13.



## KAKO BITI DOBAR NASTAVNIK KEMIJE? HOW TO BE A GOOD CHEMISTRY TEACHER?

Draginja Mrvoš-Sermek

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

PL4

*Biti nastavnik nije profesija već poziv. Ova se sintagma često susreće u javnom govoru i upisnim brošurama nastavničkih fakulteta. U vremenu kada znanost i tehnologija napreduju svakodnevno, biti nastavnik u STEM području dodatni je izazov ali i poticaj. Društveni i socijalni okvir ove profesije mijenja se značajno kroz povijest i to ne na bolje, ali svrha djelovanja nastavnika ostaje stalna. Nema profesije, osim nogometa, za koju najšira javnost smatra da je kompetentna procijeniti strategije i učinke djelovanja kao što je to za rad nastavnika. Česte obrazovne reforme kratkog daha koje su nepripremljene i nepromišljene, a provedene kao eksperiment na cijeloj populaciji, svaki su put ostavljene u provedbi sa svim nedostacima na leđima nastavnika. Sve te olakotne i neolakotne okolnosti zdravorazumski dovode do pitanja *Zašto bi netko poželio postati nastavnik?* Razloga je tisuću. Jedan je sigurno zbog svojih nastavnika koji su im otvorili puteve znanosti a time i kemije. Biti dobar nastavnik kemije uključuje uz altruizam i empatiju mnoge kompetencije: ponajprije izvrsno poznavanje struke i metodike nastavnog predmeta, psihološko-didaktičke kompetencije, IKT vještine, široko opće i interdisciplinarno obrazovanje, spremnost na timski rad i cjeloživotno usavršavanje. [1,2] Tijekom ovog predavanja želi se ukazati na prednosti i nedostatke nastavničkog zvanja, mogućnosti obrazovanja i doškoloovanja kroz zakonom propisane okvire, te pokušati odgovoriti na pitanje *Kada je nastavnik kemije profesija, a kada postaje poziv?**

21



Sve važno o dobroj nastavnoj praksi rekao je davno Jan Amos Komenski (1592.–1670.), češki pedagog, znanstvenik, nastavnik i pisac: *aktivno uključiti učenika u nastavu i utrošiti puno više vremena u pripremu nego provedbu nastave.*

[1] M. Sikirica, *Metodika nastave kemije*, Školska knjiga, Zagreb, 2003.

[2] T. O. B. Odden, A. Marin, J. L. Rudolph, *Sci. Educ.* **105** (2021) 653–680.



## ORGANSKA KEMIJA NA ŠKOLSKOJ KLUPI ORGANIC CHEMISTRY ON THE SCHOOL DESK

Vesna Petrović Peroković

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

Kemija je eksperimentalna znanost. U Kurikulumu za nastavni predmet Kemije za osnovne škole i gimnazije u Republici Hrvatskoj stoji da se „učenje i poučavanje kemije temelji na znanstveno-istraživačkom pristupu u čijoj je osnovi pokus“. [1] Radi se o dobro poznatim i opisanim pokusima [2] temeljenim na jeftinim, bezopasnim i lako dostupnim kemikalijama koji se korištenjem jednostavnog pribora mogu izvoditi na školskoj klupi, individualno ili u manjim skupinama, uz neizostavne mjere opreza i nadzor. Poučavanje kemije temeljeno na pokusu dodatni je izazov za nastavnike i profesore kemije, škole i širu zajednicu jer zahtijeva znatna financijska sredstva, prostorne i ljudske kapacitete, te iziskuje dodatno vrijeme za pripremu i provedbu pokusa. Važnost pokusa prepoznata je i uvrštena u program natjecanja iz kemije na državnoj razini gdje se izvodi individualno. Provedbeni okvir je isti kao i u redovitoj nastavi, no razina složenosti pokusa je viša i zahtjevnija. Osmisliti pokus te ga prilagoditi zadanom vremenskom okviru natjecanja i provedbi u učioničkom okruženju složen je zadatak stavljen pred autore pokusa. U tom je smislu potrebno napraviti različite prilagodbe i pojednostavljenja imajući u vidu očuvanje znanstvene metodologija i utemeljenosti te znanstveno-istraživački pristup. U ovom će se predavanju na primjerima odabranih pokusa iz organske kemije namijenjenih izvođenju na školskoj klupi skrenuti pozornost na neke od izazova pri njihovom osmišljavanju i načine na koji su riješeni.

[1] Odluka o donošenju kurikuluma za nastavni predmet Kemije za osnovne škole i gimnazije u Republici Hrvatskoj, NN 10/2019.

[2] M. Sikirica, *Zbirka kemijskih pokusa*, Školska knjiga, Zagreb, 2012.



## POZVANA PREDAVANJA



## FORMILPIRIDINSKO PLAVILO FORMYLPYRIDINE BLUE

Ivica Cvrtila

Institut Ruđer Bošković, Laboratorij za sintezu i katalizu u čvrstom stanju, Bijenička cesta  
54, 10000 Zagreb, Hrvatska  
Ivica.Cvrtila@irb.hr

Kako bi mogla stalno napredovati, znanost iziskuje ne samo sustavan rad na poznatom, nego i stalan priljev nepoznatog, tipično u formi neočekivanih opažanja. Takva se otkrića ne mogu predvidjeti pa ni planirati, što ih čini disruptivnima [1], kako po njihovom utjecaju na razvoj znanosti, tako i na svoje otkrivače. Naime, znanstvenik koji otkrije nešto zanimljivo, a nevezano za svoj primarni rad, morat će, želi li to dublje proučiti, ili raditi prekovremeno te tako riskirati mentalno, ako ne i fizičko zdravlje, ili početi ozbiljno kasniti s redovitim obavezama te tako riskirati svoj opstanak u znanosti. Pored toga, nema jamstva da će zanimljivo opažanje stvarno dovesti do značajnog otkrića. Ovo će se predavanje baviti neplaniranim otkrićem nove i još uvijek neidentificirane polimerne tvari koja nastaje u blago zakiseljenim vodenim otopinama 2-formilpiridina i amonijevog acetata. Kroz oko pola sata proći će se kroz eksperimentalne tehnike korištene kako bi se dobilo što više informacija o strukturi i svojstvima formilpiridinskog plavila te dometima i značaju svake od njih. Iako je pozadina otkrića dinamička kombinatorijalna kemija [2], budući da je plavilo prvotno opaženo u otopinama predviđenima za pokuse s dinamičkom razmjenom, konačan kontekst i potencijalan značaj i dalje su otvoreni, kao i mogućnost da je vrijeme uloženo uzalud.



Slika 1. Vlakanasti i kuglasti agregati formilpiridinskog plavila.

[1] M. Park, E. Leahey, R. J. Funk, *Nature*, **613** (2023) 138–144.

[2] P. T. Corbett, J. Leclaire, L. Vial, K. R. West, J.-L. Wietor, J. K. M. Sanders, S. Otto, *Chem. Rev.* **106** (2006) 3652–3711.





# TRIJUMVIRAT ISTRAŽIVANJA MATERIJALA: PRIPREMA, STRUKTURA I SVOJSTVA

## TRIUMVIRATE OF MATERIALS RESEARCH: PREPARATION, STRUCTURE AND PROPERTIES

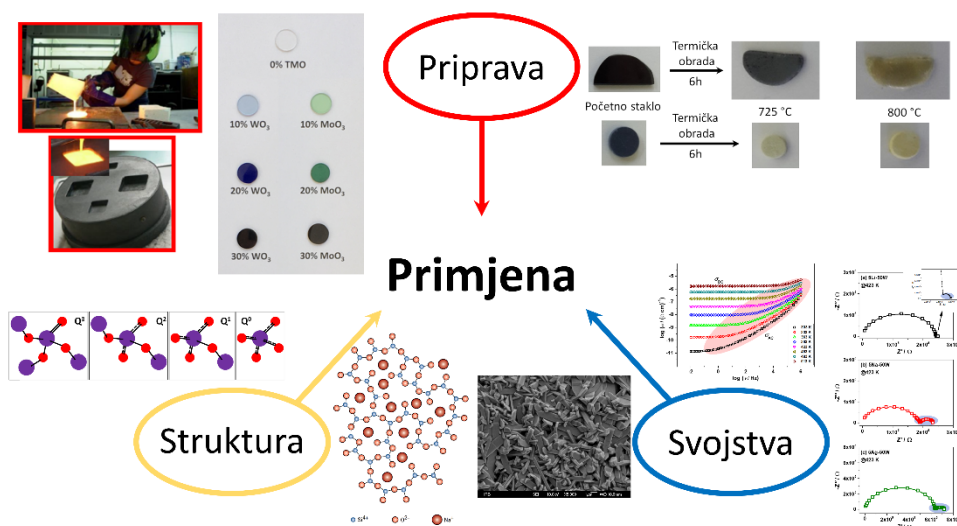
PP2

Juraj Nikolić

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

Znanost o materijalima je interdisciplinarno područje znanosti koja spaja fiziku i kemiju čvrstog stanja. Cilj ove grane znanosti je objasniti pojave u materijalima koje su od ključnog značaja za njihovu potencijalnu primjenu u svakodnevnom životu. Tri glavna stupa znanosti o materijalima su priprava materijala, struktura tek pripremljenog materijala te kako je struktura pripremljenog materijala povezana s njegovim svojstvima. U ovom predavanju prikazat će se kako izgleda tipično istraživanje novog materijala s potencijalnom primjenom. Fosfatna stakla su vrsta stakla koja su izgrađena od fosfatnih jedinica. Glavni nedostatak im je higroskopnost i topljivost u vodi. Ovim nedostacima se može doskočiti ugradnjom različitih metalnih oksida u njihovu strukturu, poput alkalijskih oksida ili prijelaznih metalnih oksida. No, ovisno o vrsti oksida koja se ugradi u strukturu, osim kemijske stabilnosti, mijenjaju se i druga svojstva ovih stakala. Nadalje, nakon ugradnje navedenih oksida, svojstva ovih materijala se mogu dalje promijeniti termičkom obradom pri čemu nastaje novi tip materijala zvan staklo-keramike. U provedenom istraživanju ispitano je kako sustavna ugradnja  $\text{Li}_2\text{O}$ ,  $\text{Na}_2\text{O}$  i  $\text{Ag}_2\text{O}$  u cink fosfatna stakla te njihova zamjena s  $\text{WO}_3$  i  $\text{MoO}_3$  utječe na strukturu i električna svojstva proučavanih serija stakala te kako daljnja termička obrada određenih ispitivanih stakala može dodatno promijeniti njihova svojstva.

25





## TKO BRINE O SIGURNOSTI BOLESNIKA I LIJEKOVA? WHO TAKES CARE OF PATIENTS AND MEDICINES SAFETY?

Petra Lazarić Bošnjak

PLIVA Hrvatska d.o.o., Prilaz baruna Filipovića 25, 10000 Zagreb, Hrvatska  
petra.lazaricbosnjak@pliva.com

Farmakovigilancija je znanost koja obuhvaća skup aktivnosti vezanih uz otkrivanje, procjenu, razumijevanje, prevenciju i postupanje u slučaju nuspojava lijekova, kao i novih saznanja o škodljivosti primjene lijekova. Nuspojave su štetne i neželjene reakcije na lijek, a mogu biti posljedica i medikacijskih pogrešaka i namjerne primjene lijeka izvan odobrenih uvjeta primjene. Agencije za lijekove i proizvođači lijekova omogućuju zdravstvenim djelatnicima i korisnicima lijeka prijavljivanje nuspojava, tijekom kliničkih ispitivanja i u svakodnevnoj praksi. Zaprimiteljne nuspojave se za svaki lijek periodički analiziraju, a jedan od glavnih mehanizama otkrivanja novih informacija o sigurnosnom profilu lijeka jest praćenje sigurnosnih signala, čiju detekciju danas mogu ubrzati primjena umjetne inteligencije i strojnog učenja. Nove informacije komuniciraju se stručnoj javnosti kroz ažurirane Sažetke opisa svojstava lijeka, a korisnicima lijeka preko Upute o lijeku, priložene u svakom pakiranju lijeka, a u novije vrijeme dostupne i kroz digitalne kanale. Sve su to rutinske mjere praćenja lijeka na tržištu i minimizacije rizika. Dodatne se mjere (poput edukacijskih materijala, pisma liječnicima ili programa prevencije trudnoće) također mogu provoditi, a lijek će biti na tržištu dokle god su mjere učinkovite, odnosno dokle god je dobit za bolesnike veća nego rizik od primjene lijeka.

26



[1] V. Ivetić Tkalčević *i sur.*, *Medicus* **26** (2017) 53–58.

[2] M. Cesarec *i sur.*, *Medicus* **26** (2017) 59–67.



## USMENA IZLAGANJA

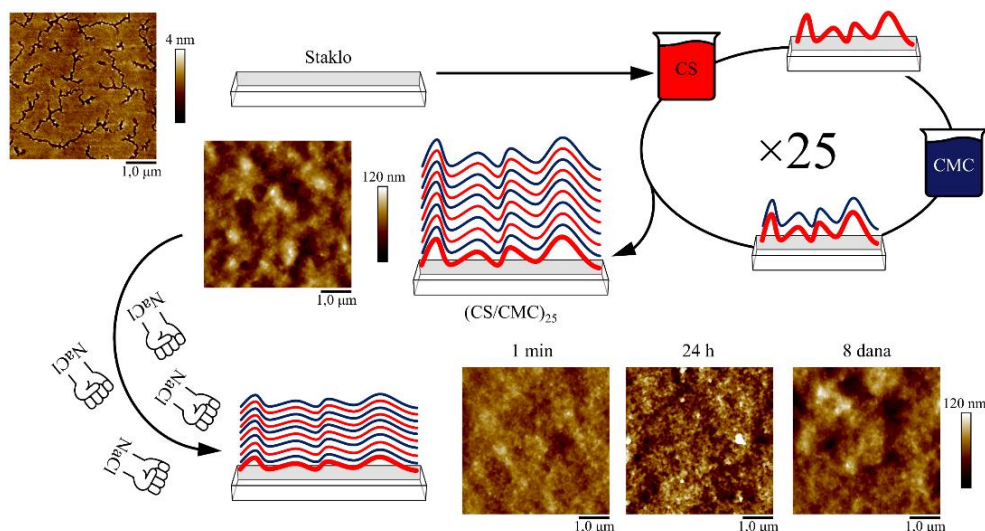


# „NASOLJE“ NAD POLIELEKTROLITNIM VIŠESLOJEM „ASSALTING“ THE POLYELECTROLYTE MULTILAYER

Antun Habajec, Juraj Nikolić, Tin Klačić, Davor Kovačević

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

Polielektroliti su makromolekule sa znatnim udjelom gradivnih jedinica koje sadrže ionske ili lako ionizirajuće skupine. Polikationi su polielektroliti koji sadrže skupine s pozitivnim, a polianioni skupine s negativnim nabojem. Naizmjeničnom adsorpcijom suprotno nabijenih polielektrolita na površinu nekog materijala nastaju tanki filmovi – polielektrolitni višeslojevi. [1] U ovom istraživanju proučavani su filmovi priređeni od biokompatibilnih polielektrolita, kitozana (CS) i karboksimetilceluloze (CMC). CS je polikation koji je zbog svojih antibakterijskih svojstava primjenu pronašao u prehrambenoj industriji. [2] CMC je derivat celuloze što ga čini dobrim polianionom za izgradnju biokompatibilnih filmova. [3] Uranjanjem filmova u otopinu soli povećava se pokretljivost polielektrolita pri čemu može doći do promjene svojstva filmova poput hrapavosti i debljine. [4] Sloj po sloj metodom priređeni su filmovi CS/CMC od 10, 20 i 50 slojeva. Nakon pripreve su uronjeni u otopinu soli, natrijeva klorida. Istraženo je kako koncentracija soli i vrijeme izlaganja utječe na svojstva filma koja su određena elipsometrijom, tenziometrijom, mikroskopijom atomskih sila (AFM), UV-Vis spektrofotometrijom i mikroskopijom foto-induciranih sila (PiFM). Elipsometrijom je pokazano da nakon tretmana soli dolazi do smanjenja debljine filmova. Promjena kontaktnog kuta, izmjerena tenziometrom, pokazala je da površina filma postaje manje hidrofilna nakon tretmana. AFM-om je određena promjena u morfologiji i hrapavosti filmova. Uz to, UV-Vis spektrofotometrom snimljeni su reflektancijski spektri filmova prije i nakon tretmana te je pokazana poveznica između hrapavosti površine i difuzne komponente reflektancije filma. PiFM-om je dokazano da se na površini filma nalaze oba polimera.



- [1] G. Decher, J. D. Hong, J. Schmitt, *Thin Solid Films* **210/211** (1992) 831–835.  
[2] H. Haghighi, F. Licciardello, P. Fava, H. W. Siesler, A. Pulvirenti, *Food Packag. Shelf Life* **26** (2020) 100551.  
[3] M. S. Rahman, M. S. Hasan, A. S. Nitai, S. Nam, A. K. Karmakar, M. S. Ahsan, M. J. A. Shiddiky, M. B. Ahmed, *Polymers* **13** (2021) 1345.  
[4] R. A. Ghostine, R. M. Jisr, A. Lehaf, J. B. Schlenoff, *Langmuir* **29** (2013) 11742–11750.



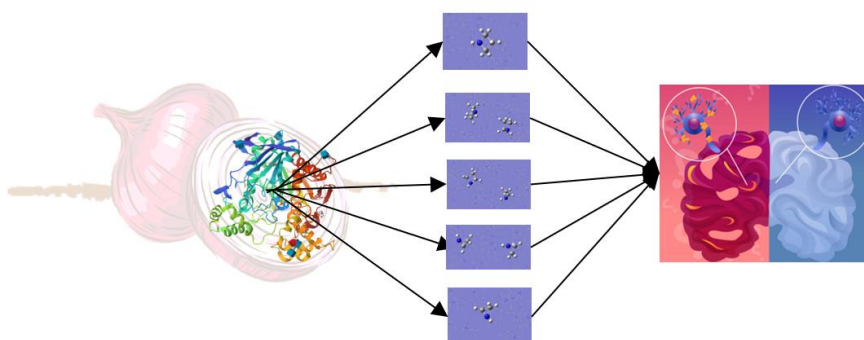
## VIŠESTRUKO SIMULTANO KVANTNO-KEMIJSKO DOKIRANJE HETEROCIKLIČKIH MOLEKULA U AKTIVNO MJESTO BUTIRILKOLINESTERAZE

### MULTIPLE SIMULTANEOUS QUANTUM-CHEMICAL DOCKING OF HETEROCYCLIC MOLECULES IN THE ACTIVE SITE OF BUTYRYLCHOLINESTERASE

Nika Jakobović, Karlo Sović, Ines Primožič, Tomica Hrenar

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

Važno obilježje Alzheimerove bolesti predstavlja nedostatak molekula koje prenose signale između živčanih stanica u mozgu, neurotransmitera. Među najvažnijima je acetilkolin koji ima ključnu ulogu u ljudskom pamćenju i učenju. Smanjenje koncentracije acetilkolina u mozgu doprinosi gubitku pamćenja i sveopćem kognitivnom padu [1]. Butirilkolinesteraza (BChE) i acetilkolinesteraza (AChE) su enzimi koji igraju važnu ulogu u metabolizmu acetilkolina. Oba su hidrolitički enzimi koji kataliziraju hidrolizu acetilkolina do acetata i kolina. BChE je odgovorna za razgradnju u krvotoku i drugim tkivima, ali ne toliko u mozgu zdrave osobe. Međutim, aktivnost BChE postupno raste kod bolesnika s Alzheimerovom bolešću, dok aktivnost AChE ostaje ili nepromijenjena ili se smanjuje [2]. Inhibiranje BChE moglo bi pomoći u liječenju Alzheimerove bolesti i stoga je provedeno molekularno dokiranje malih heterocikličkih molekula u aktivno mjesto BChE. Odabrane su molekule aziridin i azetidin te su dokirane korištenjem višestrukog simultanog kvantno-kemijskog dokiranja [3]. Sustavno pretraživanje konfiguracijskog prostora provedeno je pomoću stohastičkog Monte Carlo algoritma pretraživanja koji uključuje sve translacijske i rotacijske stupnjeve slobode. Za odabranih najnižih 100 lokalnih minimuma, geometrija je optimizirana korištenjem QM/QM pristupa unutar ONIOM (B3LYP-D3/6-31G(d):PM7) formalizma [4]. Izračunane su standardne Gibbsove energije vezanja i uspoređene za oba spoja, a njihov sinergistički učinak ispitan je dodavanjem druge molekule vrste u aktivno mjesto.



- [1] 2022 Alzheimer's disease facts and figures. *Alzheimer's Dementia*, **18** (2022) 700–778.  
 [2] N. H. Greig, D. K. Lahiri, K. Sambamurti K., *Int Psychogeriatr.* **14** (2002) 77–91.  
 [3] T. Hrenar, *qcc*, *Quantum Chemistry Code*, rev. 0.68268, 2023  
 [4] Gaussian 16, Revision A.03, M.J.Frisch *et al.*, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2016.



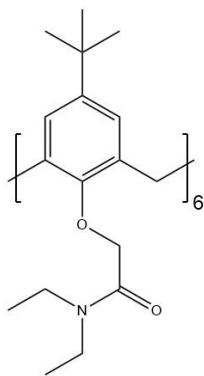
## UTJECAJ VEZANJA KATIONA NA INTRINZIČNU FLUORESCENCIJU TERCIJARNOG AMIDNOG DERIVATA KALIKS[6]ARENA

## INFLUENCE OF CATION BINDING ON INTRINSIC FLUORESCENCE OF TERTIARY-AMIDE CALIX[6]ARENE DERIVATIVE

Karla Kukina Gradečak, Katarina Leko, Andrea Usenik, Nikola Cindro,  
Vladislav Tomišić

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

Kaliks[ $n$ ]areni su makrociklički spojevi koji se sastoje od fenolnih podjedinica ( $n \geq 4$ ) povezanih metilenskim mostovima u *ortho* položaju. [1] Funkcionalizacijom gornjeg i/ili donjeg kaliksarenskog oboda mogu se prirediti efikasni, a ponekad i selektivni receptori za razne neutralne i nabijene vrste. Tako kaliksareni koji posjeduju ketonske, esterske ili amidne funkcijske skupine na donjem obodu pokazuju velik afinitet za vezanje kationa. [1–3] Najveći dio dosadašnjih istraživanja kompleksiranja odnosi se na kaliks[4]arene, dok su reakcije vezanja kationa s kaliks[6]arenima puno manje istraživane. U ovom radu istražena su fluorescencijska svojstva i afiniteti derivata kaliks[6]arena **L** (slika 1) prema kationima alkalijskih i zemnoalkalijskih metala u acetonitrilu. Termodinamički parametri reakcija kompleksiranja kationa određeni su na temelju mikrokolorimetrijskih, spektrofotometrijskih, fluorimetrijskih i NMR eksperimenata. Najzanimljiviji rezultati istraživanja odnose se na promjenu intenziteta fluorescencije liganda uslijed procesa kompleksiranja, iako spoj **L** u strukturi ne sadrži ciljano ugrađenu fluoroformu podjedinicu.



Slika 1. Struktura proučavanog derivata kaliks[6]arena **L**.

**Zahvala:** Istraživanje je provedeno u okviru projekta koji financira Hrvatska naklada za znanost pod nazivom MacroSol (IP-2019-04-9560).

[1] C. D. Gutsche, *Calixarenes: An Introduction*, The Royal Society of Chemistry, Cambridge, 2008.

[2] A. F. Danil de Namor, R. M. Cleverley, M. L. Zapata-Ormachea, *Chem. Rev.* **98** (1998) 2495–2525; B. S. Creaven, D. F. Donlon, J. McGinley, *Coord. Chem. Rev.* **253** (2009) 893–962.

[3] J. Požar, I. Nikšić-Franjić, M. Cvetnić, K. Leko, N. Cindro, K. Pičuljan, I. Borilović, L. Frkanec, V. Tomišić, *J. Phys. Chem. B* **121** (2017) 8539–8550; N. Cindro, J. Požar, D. Barišić, N. Bregović, K. Pičuljan, R. Tomaš, L. Frkanec, V. Tomišić, *Org. Biomol. Chem.* **16** (2018) 904–912; J. Požar, M. Cvetnić, A. Usenik, N. Cindro, G. Horvat, K. Leko, M. Modrušan, V. Tomišić, *Molecules* **27** (2022) 470.



# KARAKTERIZACIJA I ODREĐIVANJE SVOJSTAVA JODIDNIH KOMPLEKSA PRIJELAZNIH METALA PRIPRAVLJENIH MEHANOKEMIJSKOM MODIFIKACIJOM ZEOLITA FAU

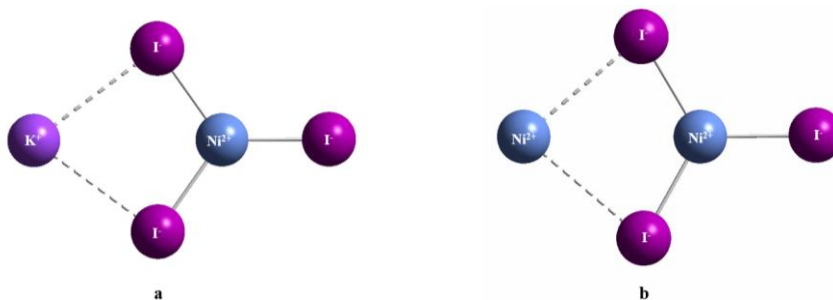
## CHARACTERIZATION AND DETERMINATION OF PROPERTIES OF TRANSITION METAL IODINE COMPLEXES PREPARED BY MECHANOCHEMICAL MODIFICATION OF FAU ZEOLITE

Emilija Petrović Hađar<sup>1</sup>, Nikola Jakupec<sup>2</sup>, Lidija Posavec<sup>1</sup>, Ana Palčić<sup>2</sup>

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

<sup>2</sup>Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, 10000 Zagreb, Hrvatska  
emilija.petrovichadjar@chem.pmf.hr

Zeoliti su kristalični aluminosilikati trodimenzionalne strukture koja tvori pore dobro definiranih dimenzija. Imaju sposobnost adsorpcije molekula čija veličina približno odgovara dimenzijama pora [1], primjerice štetnih plinova poput HCl i NO<sub>2</sub>. [2] Svojstva zeolita moguće je modificirati poslijesintetskim postupcima poput ionske izmjene. [3] U literaturi su opisane otopinske, a odnedavno i mehanokemijske sinteze čitavih kompleksa unutar pora zeolita. Modifikacijom zeolita svojstvo adsorpcije plinova može biti poboljšano te potencijalno omogućiti njihovo repetitivno korištenje. Ovdje su mehanokemijskom sintezom pripremljeni kompleksi željeza, kobalta, nikla i bakra s jodom unutar šupljina zeolita strukturnog tipa FAU. Dobiveni kompleksi identificirani su usporedbom njihovih FAR-IR spektara s teoretskim spektrima dobivenim računalnim simulacijama. Svojstvo adsorpcije plinova testirano je izlaganjem atmosferi zasićenoj s HCl i NO<sub>2</sub> te analiziranjem uzoraka IR spektroskopijom, difrakcijom rentgenskog zračenja na polikristalnom uzorku (PXR) i pretražnom elektronskom mikroskopijom (SEM). Identificirani su kompleksi kalija i nikla s jodom: kalijev trijodonikelat(II) (K[NiI<sub>3</sub>]) te niklov trijododiniklov(II) kation (Ni[NiI<sub>3</sub>]<sup>+</sup>) (slika 1.). Rezultati SEM-a pokazuju manja oštećenja površine modificiranih zeolita, u odnosu na nemodificirane zeolite, nakon izlaganja plinovima HCl i NO<sub>2</sub>. Na temelju PXR i IR analiza zaključeno je kako pri izlaganju kiselim atmosferama plinova HCl i NO<sub>2</sub> dolazi do povratne stabilizacije. Zeolit je stabiliziran kompleksima unutar pora, dok su sami kompleksi stabilizirani strukturom zeolita. Dobiveni uzorci pokazuju korisna svojstva koja mogu biti iskorištena u okvirima zelene kemije.



**Slika 1.** Identificirani trijodidni niklovi kompleksi a) K[NiI<sub>3</sub>], b) Ni[NiI<sub>3</sub>]<sup>+</sup>, strukture su dobivene usporedbom simuliranih FAR-IR spektara s eksperimentalnim.

[1] H. van Bekkum *et al.*, *Introduction to Zeolite Science and Practice*, Elsevier Science B.V., 2001, str. 1.

[2] P. Li, F. H. Tezel, *Microporous Mesoporous Mater.* **98** (2007) 94–101.

[3] R. J. Taylor *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **111** (1989) 6610.



## UTJECAJ KOMPLEKSA KOBALTA(III) NA NASTAJANJE DEKAVANADATA

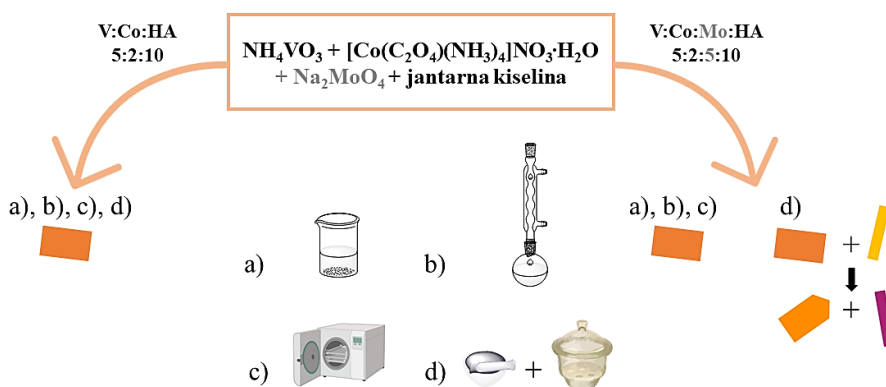
### THE INFLUENCE OF COBALT(III) COMPLEX ON DECAVANADATE FORMATION

Lucija Drempetić

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

lucija.drempetic@chem.pmf.hr / drempetic.lucija@gmail.com

U kemiji vanadija(V), molibdena(VI) i volframa(VI) u vodenoj otopini dominira stvaranje metal-kisik klustera poznatih kao polioksometalati (POM-ovi). Otkrio ih je Berzelius, a već su skoro dva stoljeća predmet istraživanja brojnih znanstvenika. [1] POM-ovi su građeni od oktaedarskih  $MO_6$  ( $M = Mo, W, V, Nb, Ta$ ) ili  $MM'O_6$  okso komponenti gdje  $M'$  može biti kation prijelaznog metala, ali i kation elementa  $p$ -bloka. Ovisno o njihovoj građi razlikujemo polioksometalate Kegginova, Andersonova i Dawsonova tipa. [2,3] Zbog svoje specifične građe, elektronske strukture i kiselobaznih svojstava POM-ovi nalaze primjenu u raznim područjima, od medicine do elektronike. Tako primjerice dekanadati, jedna od skupina ovih klusterskih vrsta, nalaze primjenu u katalizi, medicini i znanosti o materijalima. [4] Cilj rada bio je ispitati utjecaj kompleksnog spoja kobalta(III),  $[Co(C_2O_4)(NH_3)_4]NO_3 \cdot H_2O$ , na nastajanje i stabilnost dekanadata. Kation  $[Co(C_2O_4)(NH_3)_4]^+$  može imati ulogu protuiona, ali i poslužiti kao predložak. Ovaj se rad nadovezuje na ranije provedena istraživanja utjecaja kobaltovog kationa na stupanj polimerizacije u nastanku polioksomolibdata. [4,5] Sinteza POM-ova provedena je primjenom reakcija u vodenom mediju (sinteza pri sobnoj temperaturi, sinteza uz refluks, hidrotermalna sinteza) te mehanokemijskim reakcijama uz izlaganje reakcijske smjese vodenoj pari. Dobivena su četiri produkta od kojih su tri dekanadati, a jedan je molibdovanadat. Pripremljeni produkti okarakterizirani su difrakcijskim metodama (difrakcija na monokristalnom i polikristalnom uzorku), termogravimetrijskom analizom, elementnom analizom te infracrvenom spektroskopijom.



- [1] E. Sánchez-Lara *et al.*, *New J. Chem.* **43** (2019) 17746–17755.  
[2] M. Aureliano *et al.*, *Coord. Chem. Rev.* **447** (2021) 214143.  
[3] D. Thakre *et al.*, *Cryst. Growth Des.* **21** (2021) 4285–4298.  
[4] V. Damjanović *et al.*, *Cryst. Growth Des.* **19** (2019) 6763–6773.  
[5] V. Damjanović *et al.*, *Dalton Trans.* **48** (2019) 9974–9983.





## FLEKSIBILNI ODZIVI KRISTALA KOORDINACIJSKIH POLIMERA KADMIJA(II)

### FLEXIBLE RESPONSES OF CRYSTALS OF CADMIUM(II) COORDINATION POLYMERS

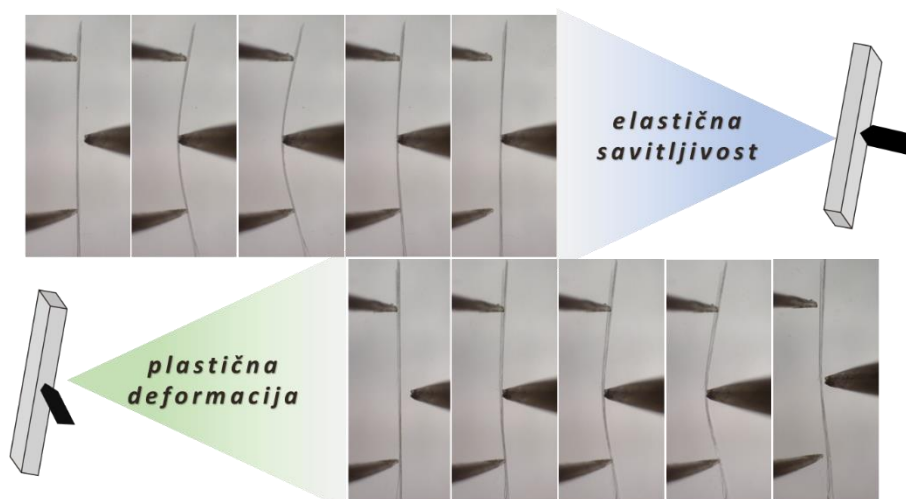
Antonio Močinić, Ozana Mišura, Marijana Đaković

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

U6

Unatoč tome što su kristali i kristalni materijali neizostavan dio suvremene tehnologije, primjena kristala često je ograničena zbog njihove krutosti, koja se donedavno smatrala jednom od osnovnih karakteristika kristalne tvari. Tek nedavno se uočilo kako molekularni kristali ne moraju biti samo kruti već mogu odgovarati na različite vanjske podražaje i pritom pokazivati cijeli raspon mehaničkih fleksibilnih odgovora. [1] Fleksibilan odziv kristala organskih molekularnih kristalinih potaknut mehaničkim, svjetlosnim ili toplinskim podražajem prepoznat je te detaljnije istražen na znatnom broju primjera, za razliku od kristala metaloorganskih sustava koji su u puno manjoj mjeri zastupljeni u literaturi. [1] Jedni od prvih primjera fleksibilnih metaloorganskih kristala su kristali koordinacijskih polimera koji se prilikom primjene mehaničke sile mogu elastično saviti, bez da dođe do njihova loma. [2] Zbog svoje strukture, 1D koordinacijski polimeri pokazali su se kao izvrsni kandidati za izučavanje fleksibilnih svojstava, a za ovo istraživanje odabrana je serija koordinacijskih spojeva kadmijevih(II) halogenida s 2,6-dimetilpirazinom kao ligandom. Spojevi  $[\text{CdCl}_2(2,6\text{-dmpz})_2]_n$  (**1**),  $[\text{CdBr}_2(2,6\text{-dmpz})_2]_n$  (**2**) i  $[\text{CdI}_2(2,6\text{-dmpz})_2]_n$  (**3**) sintetizirani su tehnikom tekućinske difuzije i otopinskom sintezom. Dobivenim kristalima ispitana je mehanička prilagodljivost kontroliranom primjenom mehaničke sile. Kristali spoja **1** pokazali su elastičnu i plastičnu savitljivost, kristali spoja **2** plastičnu savitljivost dok je kod kristala spoja **3** uočena tek slaba elastična savitljivost koja prelazi u plastičnu deformaciju.

33



[1] P. Commins *et al.*, *Chem. Commun.* **52** (2016) 13941–13954.

[2] M. Đaković *et al.*, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **57** (2018) 14801–14805.



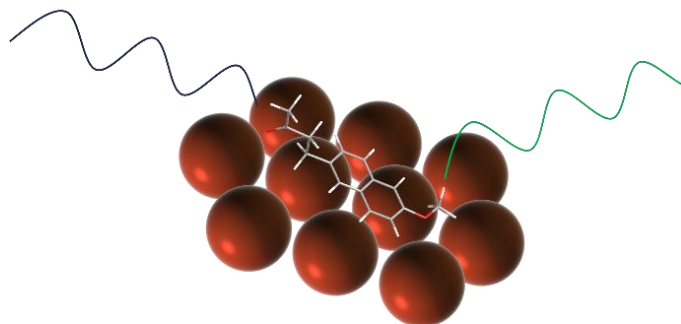
## KARAKTERIZACIJA LORATADINA I NABUMETONA TE NJIHOVIH KOMPLEKSA S $\beta$ -CIKLODEKSTRINIMA SPEKTROSKOPIJOM POVRŠINSKI POJAČANOG RAMANOVOG RASPRŠENJA

### CHARACTERIZATION OF LORATADINE, NABUMETONE AND THEIR COMPLEXES WITH $\beta$ -CYCLODEXTRINS BY SURFACE-ENHANCED RAMAN SCATTERING SPECTROSCOPY

Filip Grdović, Nives Galić, Adriana Kendel

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

Nabumeton je nesteroidni protuupalni predlijek koji se aplicira u svrhu ublažavanja upalnih procesa. [1] Loratadin je snažan, dugodjelujući antihistaminik koji ima visoku selektivnost za periferne histaminske H1-receptore te se koristi kao lijek protiv alergije. [2] Oba lijeka su slabo topljiva u vodi, a razmjerno dobro topljiva u metanolu i drugim organskim otapalima. Topljivost nabumetona i loratadina u vodi može se poboljšati stvaranjem inkluzijskih kompleksa s  $\beta$ -ciklodekstrinima. [3]  $\beta$ -ciklodekstrini su ciklički ugljikohidrati sastavljeni od sedam glukopiranoznih jedinica koji posjeduju nepolaru šupljinu u koju se može smjestiti molekula gosta. [4] U ovom istraživanju proučavana je primjena površinski pojačanog Ramanovog raspršenja (engl. *surface-enhanced Raman scattering*, SERS) u strukturnoj karakterizaciji lijekova nabumetona i loratadina,  $\beta$ -ciklodekstrina te kompleksa slabo topljivih lijekova s  $\beta$ -ciklodekstrinom i 2-hidroksipropil- $\beta$ -ciklodekstrinom (HP- $\beta$ -CD). U istraživanju, kao SERS supstrat, korištena je koloidna suspenzija zlata i to u obliku svježe pripravljene, koncentrirane i agregirane suspenzije. Promjene u položaju i intenzitetu vrpce u dobivenim SERS spektrima mogu ukazati na način vezanja lijekova, odnosno vezanja kompleksa na metalnu površinu supstrata. SERS spektroskopija se pokazala kao uspješna metoda za strukturno istraživanje nabumetona i loratadina koristeći koloidnu suspenziju zlata kao optimalan supstrat, no nije se potvrdilo nastajanje inkluzijskih kompleksa lijekova nabumetona i loratadina s  $\beta$ -ciklodekstrinima.



- [1] T. Hedner *et al.*, *Drugs* **64** (2004) 2315–2343.  
[2] G. G. Kay, A. G. Harris, *Clin. Exp. Allergy* **29** (1999) 147–150.  
[3] N. Goyenechea *et al.*, *Luminescence* **16** (2001) 117–127.  
[4] J. Zhang, P. X. Ma, *Adv. Drug Delivery Rev.* **65** (2013) 1215–1233.



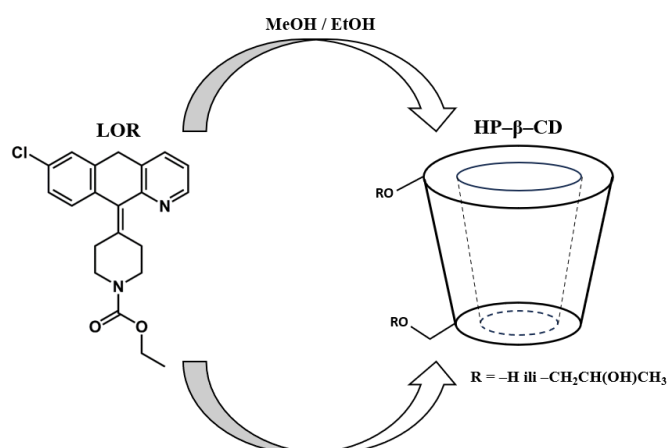
## MEHANOKEMIJSKA SINTEZA I KARAKTERIZACIJA INKLUZIJSKOG KOMPLEKSA LORATADINA I HIDROKSIPROPIL- $\beta$ -CIKLODEKSTRINA

### MECHANOCHEMICAL SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF HYDROXYPROPYL- $\beta$ - CYCLODEXTRIN INCLUSION COMPLEX WITH LORATADINE

Mateja Cader, Lidija Posavec, Marijana Pocrnić, Dominik Cinčić, Nives Galić

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

Ciklodekstrini su ciklički oligosaharidi, produkti enzimske razgradnje šećera i škroba. Građeni su od glukoznih podjedinica međusobno povezanih u stožastu strukturu alfa-1,4-glikozidnim vezama [1]. Kompleksiranjem s biološki aktivnim molekulama ciklodekstrini poboljšavaju njihova fizikalno-kemijska svojstva (topljivost i stabilnost) bez uzrokovanja kemijskih promjena, što je izuzetno važno za molekule aktivnih tvari u kontekstu farmaceutske industrije poput loratadina (LOR) koji je dugodjelujući antihistaminik niske topljivosti u vodi [2,3]. U ovom radu istražena je priprava kompleksa loratadina i (2-hidroksipropil)- $\beta$ -ciklodekstrina (HP $\beta$ CD). Mogućnost nastanka inkluzijskog kompleksa izučavana je metodom mljevenja komponenata bez i uz dodatak male količine organskog otapala te u različitim stehiometrijskim omjerima loratadina i ciklodekstrina. Uspješnost nastanka inkluzijskog kompleksa praćena je infracrvenom spektroskopijom, razlikovnom pretražnom kalorimetrijom i difrakcijom rendgenskog zračenja na praškastom uzorku. Dobivenim produktima i čistom loratadinu određena je topljivost u vodi i biorelevantnim medijima (simulirani duodenalni medij, pH 4,5 i simulirani intestinalni medij, pH 6,8) UV/VIS spektroskopijom i tekućinskom kromatografijom visoke djelotvornosti. Ustanovljeno je povećanje topljivosti loratadina u svim medijima s povećanjem omjera (2-hidroksipropil)- $\beta$ -ciklodekstrina te pojava nove vibracijske vrpce mehanokemijskom sintezom kompleksa uz dodatak metanola i etanola koja ukazuje na nastanak inkluzijskog kompleksa.



- [1] P. Saokham, C. Muankaew, P. Jansook, T. Loftsson, *Molecules* **23** (2018) 1161–1176.  
 [2] M. Cugovčan, J. Jablan, J. Lovrić, D. Cinčić, N. Galić, M. Jug, *J. Pharm. Biomed. Anal.* **137** (2017) 42–53.  
 [3] L. Omar, M. I. El-Barghouthi, N. A. Masoud, A. A. Abdoh, M. M. Al Omari, M. B. Zughul, A. A. Badwan, *J. Solution Chem.* **36** (2007) 605–616.



## MODELIRANJE I OPTIMIRANJE EKSTRAKCIJE LIPAZE PRIMJENOM VODENIH DVOFAZNIH SUSTAVA

### MODELING AND OPTIMISATION OF LIPASE EXTRACTION USING AQUEOUS TWO-PHASE SYSTEMS

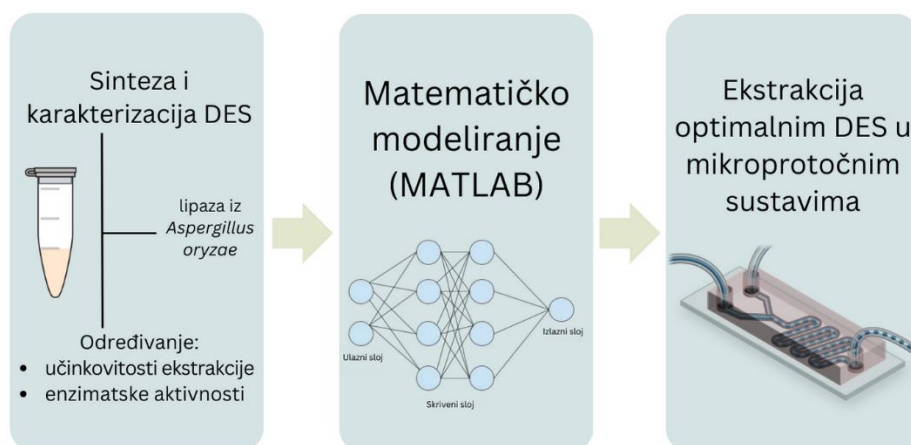
Nikša Bekavac<sup>1</sup>, Mia Radović<sup>1</sup>, Bruno Zelić<sup>2,3</sup>, Ana Jurinjak Tušek<sup>1</sup>, Anita Šalić<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Sveučilište u Zagrebu Prehrambeno-biotehnološki fakultet, Pierottijeva 6, 10000, Zagreb, Hrvatska

<sup>2</sup>Sveučilište u Zagrebu Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Marulićev trg 19, 10000, Zagreb, Hrvatska

<sup>3</sup>Sveučilište Sjever, Trg dr. Žarka Dolinara 1, 48000, Koprivnica, Hrvatska  
niksabekavac@gmail.com

Zbog povećane potražnje za ekološki prihvatljivim metodama ekstrakcije koja trenutno čini oko 70 % troškova u proizvodnim procesima farmaceutske, kemijske, prehrambene, biotehnološke i drugih industrija, sve se veća pažnja pridaje razvoju održivih i učinkovitih ekstrakcijskih procesa. Pročišćavanje enzima je vrlo često skup i dugotrajan postupak ako se koriste konvencionalne metode pa se u današnje vrijeme teži razvoju alternativnih, održivih i učinkovitijih metoda. Tako u održivoj ekstrakciji osjetljivih biomolekula kao što su proteini i enzimi svoju primjenu pronalaze prirodna eutektička otapala (NADES). U ovom radu, ispitan je potencijal primjene vodenih dvofaznih sustava (ATPS) na bazi NADES i soli ( $K_2HPO_4$ ) za ekstrakciju enzima lipaza iz *Aspergillus oryzae*. Ukupno je sintetizirano i karakterizirano (pH, gustoća, polarnost, viskoznost) 40 NADES. Svakom otapalu određen je i  $\sigma$ -profil. U seriji šaržnih eksperimenata, ispitan je utjecaj sastava ATPS-a na učinkovitost ekstrakcije i aktivnost lipaze. Na temelju dobivenih eksperimentalnih vrijednosti i  $\sigma$ -profila razvijen je model umjetnih neuronskih mreža za predviđanje aktivnosti enzima i učinkovitosti ekstrakcije u programskom paketu MATLAB. Na temelju razvijenog modela predloženi su optimalni NADES, a ocjena valjanosti matematičkog modela potvrđena je u seriji nezavisnih eksperimenata. Kako bi se proces nakon optimizacije intenzificirao, ekstrakcija je provedena u mikroekstraktor, rezultirajući učinkovitošću od  $E = 96,47 \pm 0,872$  % i rezidualnom aktivnošću enzima od  $99,2 \pm 0,64$  % pri vremenu zadržavanja od 0,5 min.





## PIGMENTOM SENZIBILIZIRANE SOLARNE ĆELIJE KORIŠTENJEM ANTOCIJANINA IZ VOĆA

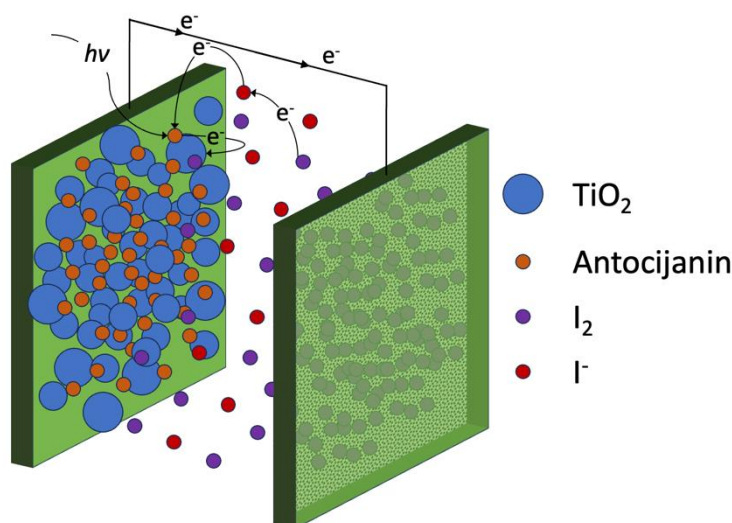
### DYE-SENSITIZED SOLAR CELLS USING ANTHOCYANIN FROM FRUITS

Stjepan Dolić, Karlo Sović, Gordan Horvat

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

U10

Od prve solarne ćelije konstruirane 1954. godine, znanstvenici aktivno traže inovativne materijale koji bi mogli poboljšati solarnu tehnologiju [1]. U ovom radu, konstruirana je i opisana DSSC (engl. *Dye-Sensitized Solar Cell*) s antocijaninom kao pigmentom. U svrhu razumijevanja takve tehnologije ključno je razumjeti kako dolazi do apsorpcije svjetlosti i separacije naboja te način na koji se postižu ovi procesi u DSSC ćeliji [2]. U svrhu ispitivanja najboljeg dostupnog supstrata, snimljeni su apsorpcijski spektri otopina aronije, maline i kupine u vodi i izopropanolu, prije i poslije namakanja na pločici titanijeva dioksida. Otopina kupine u vodi se pokazala kao najbolji supstrat jer je pokazivala najveću promjenu u apsorpciji zbog čega je korištena u konačnoj solarnoj ćeliji. Također je predstavljena nova metoda pripreve grafitne paste koja je jednostavnija od literaturnih metoda.



37

[1] J. Pastuszak, P. Węgierek, *Materials* **15** (2022) 5542.

[2] A. McEvoy, T. Markvart, L. Castañer, *Practical Handbook of Photovoltaics: Fundamentals and Applications*, Elsevier, Waltham, Oxford, 2012, str. 1–31; 479–542.



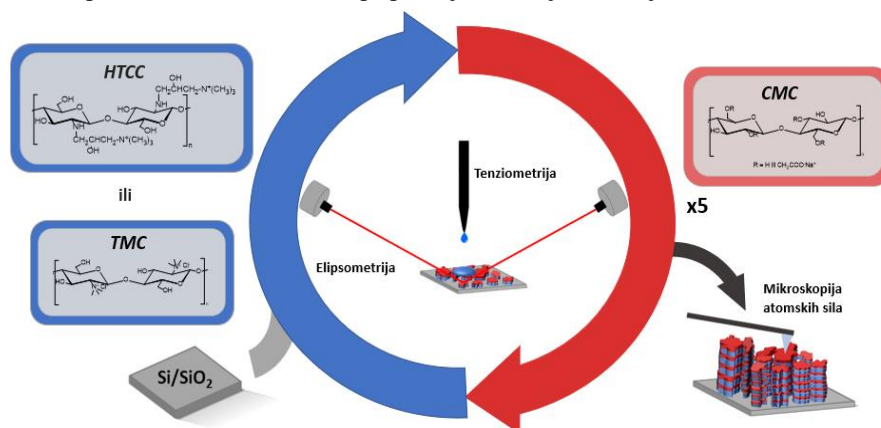
## KARAKTERIZACIJA NANOFILMOVA BAZIRANIH NA DERIVATIMA KITOZANA I CELULOZE

### CHARACTERISATION OF NANOFILMS BASED ON CHITOSAN AND CELLULOSE DERIVATIVES

Stipe Blažević, Mia Mesić, Juraj Nikolić, Davor Kovačević

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

*N,N,N*-trimetil kitozan (TMC) i *N*-[(2-hidroksi)-propil-3-trimetil amonij] kitozan (HTCC) derivati su kitozana koji dobivaju na popularnosti zbog sličnih svojstava kao kitozan, a pritom su topljiviji u širem pH području od kitozana što im daje mogućnost široke primjene u medicini. [1,2] Karboksimetilceluloza (CMC) acetilirani je derivat celuloze koji je topljiv u vodi, a zbog svoje viskoznosti često se koristi kao zgušnjivač emulzija, u ljepilima te deterdžentima. [3] Kombinacijom ovih polielektrolita mogu se prirediti biokompatibilni tanki filmovi zvani polielektrolitni višeslojevi. Cilj ovog rada je istraživanje svojstava biokompatibilnih polielektrolitnih višeslojeva sastavljenih od TMC/HTCC i CMC na supstratu silicijevog dioksida. Filmovi su pripremljeni Decherovom „sloj-po-sloj“ metodom. [4] Proučavano je kako povećanje ionske jakosti otopina polielektrolita dodatkom natrijevog klorida utječe na rast filmova i njihova površinska svojstva. Rast debljine filmova praćen je elipsometrijom, a tenziometrijom je određena močivost površine mjerenjem kontaktnog kuta između kapljice vode i filma za svaki pojedini sloj. Nakon pripreve nanofilmova od deset slojeva, mikroskopijom atomskih sila (AFM) snimljene su njihove površine te su dobiveni površinski parametri poput debljine, hrapavosti te prekrivenosti površine filmom. Rezultati su za (TMC/CMC) filmove pokazali da povećanjem ionske jakosti dolazi do smanjenja debljine filmova i pada u vrijednostima ostalih parametara površine. Osim toga, pokazano je prisustvo *stripping* efekta u filmu bez dodatka soli. S druge strane, kod (HTCC/CMC) višeslojeva uočen je eksponencijalan rast. Tenziometrija je pokazala visoku hidrofilnost svih priređenih višeslojeva, dok je AFM pokazao da tek najveći dodatak soli značajnije utječe na parametre površine unutar svake od pripremljenih serija višeslojeva.



- [1] A. Malik, M. Gupta, V. Gupta, H. Gogoi, R. Bhatnagar, *Int. J. Nanomedicine* **13** (2018) 7959–7970.  
[2] B. Shagdarova, A. Lunkov, A. Il'ina, V. Varlamov, *Int. J. Biol. Macromol.* **124** (2019) 994–1001.  
[3] S. Rahman, S. Hasan, A. S. Nitai, S. Nam, A. K. Karmakar, S. Ahsan, M. J. A. Shiddiky, M.B. Ahmed, *Polymers* **13** (2021) 1345.  
[4] G. Decher, J. D. Hong, J. Schmitt, *Thin Solid Films* **210/211** (1992) 831–835.



## UTJECAJ ZAVRŠNOG SLOJA NANOFILMA KITOZAN/PEKTIN NA ADHEZIJU BAKTERIJA

### EFFECT OF THE TERMINATING LAYER ON THE BACTERIAL ADHESION TO THE CHITOSAN/PECTIN NANOFILM

Ana Ivančić<sup>1</sup>, Anamarija Zore<sup>2</sup>, Aleksander Učakar<sup>3</sup>, Klemen Bohinc<sup>2</sup>,  
Juraj Nikolić<sup>1</sup>, Davor Kovačević<sup>1</sup>

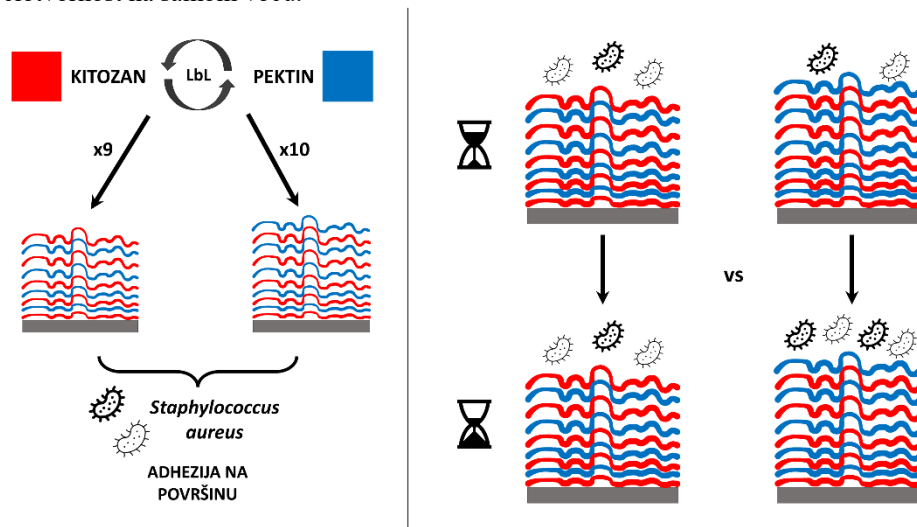
<sup>1</sup>Sveučilište u Zagrebu Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek, Horvatovac  
102a, 10000 Zagreb, Hrvatska

<sup>2</sup>Sveučilište u Ljubljani Zdravstveni fakultet, Zdravstvena pot 5, 1000 Ljubljana, Slovenija

<sup>3</sup>Institut "Jožef Stefan", Jamova cesta 39, 1000 Ljubljana, Slovenija

aivancic@chem.pmf.hr

Polielektrolitni višeslojevi su tanki filmovi koji nastaju naizmjeničnom adsorpcijom polielektrolita na čvrstu površinu. [1] Filmovi izgrađeni od prirodnih polielektrolita, poput kitozana (CS) i pektina (PC), posebno su zanimljivi zbog biokompatibilnosti i netoksičnosti, ali i baktericidnih i fungicidnih svojstava što ih čini pogodnim kandidatima za primjenu kao zaštitnih filmova na površini voća. [2] U prvom dijelu ovog istraživanja ispitan je utjecaj ionske jakosti na svojstva višesloja kitozana i pektina te su pripravljena tri višesloja sastavljena od 5 dvosloja CS/PC pri različitim koncentracijama natrijeva klorida. Drugi dio istraživanja vezan je uz adheziju bakterije *Staphylococcus aureus* na površinu višesloja kojemu je zadnji sloj kitozan odnosno pektin. Rast višeslojeva praćen je elipsometrijom, a tenziometrijom močivost površine. Morfologija površine, površinska hrapavost te potvrda debljine višeslojeva utvrđene su iz snimki mikroskopije atomskih sila (AFM). Prekrivenost površine višeslojeva bakterijama nakon različitih vremena inkubacije određena je pretražnom elektronskom mikroskopijom. Rezultati elipsometrijskih mjerenja pokazali su da ionska jakost nema veliki utjecaj na debljinu filmova, tenziometrija da su površine pojedinih slojeva vrlo hidrofilne te AFM mjerenja da je hrapavost površine filmova niska. Rezultati adhezije bakterija su pokazali veću prekrivenost površine bakterijama višesloja koji završava s kitozonom. Ta prekrivenost ne raste s vremenom, dok prekrivenost površine bakterijama raste osam puta u slučaju pektina kao zadnjeg sloja. Zaključno, pripravljeni filmovi pokazali su se pogodni za potencijalnu zaštitu voća, no potrebno je daljnje istražiti njihovu djelotvornost na samom voću.



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

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



## ADSORPCIJA PLINOVA U FAU TIP ZEOLITA MODIFICIRANOG MEHANOKEMIJSKI SINTETIZIRANIM POLICIJANOMETALATIMA

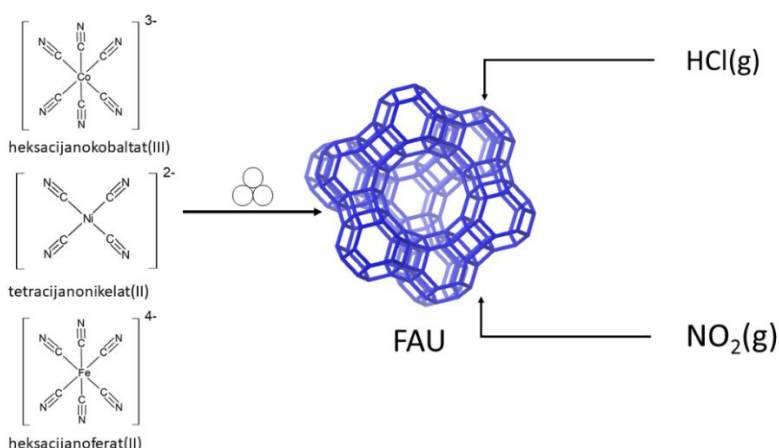
### GAS ADSORPTION BY FAU-TYPE ZEOLITE MODIFIED WITH MECHANOCHEMICALLY SYNTHESIZED POLYCYANOMETALLATES

Damjan Šinjori<sup>1</sup>, Nikola Jakupec<sup>2</sup>, Ana Palčić<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Sveučilište u Zagrebu Prirodoslovno matematički fakultet, Kemijski odsjek, Horvatovac  
102a, 10000 Zagreb, Hrvatska

<sup>2</sup>Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, 10000 Zagreb, Hrvatska  
dsinjori.chem@pmf.hr

Zeoliti su klasa poroznih anorganskih materijala koji su građeni od tetraedara, sačinjenih od atoma silicija i aluminijskih, koji su premoštenih kisikom i međusobno povezani u supramolekulske mreže. Kao porozni materijali zeoliti svoju primjenu nalaze u katalizi i adsorpciji plinova. [1] U svojoj strukturi sadrže kanale i šupljine u kojima se mogu nalaziti kationi alkalijskih i zemnoalkalijskih metala. Ti kationi mogu se izmijeniti drugim kationima ili koordinacijskim spojevima. Pokazano je da se policijanometalati, kompleksni anioni opće formule  $[M(CN)_x]^{y-}$ , mogu sintetizirati unutar šupljina zeolita otopinskom sintezom. [2] Cilj ovog rada je ispitati stabilnost i svojstva adsorpcije plinova zeolita Y (FAU) koji u svojoj strukturi sadrži mehanokemijski sintetizirane policijanometalate nikla, kobalta, željeza te bakrove katione. Policijanometalati su sintetizirani mljevenjem zeolita Y sa solima bakra, nikla, kobalta i željeza kako bi se postigla ionska zamjena, nakon čega je u drugom koraku dobiveni modificirani zeolit mljeven s kalijevim cijanidom (KCN). Uzorci modificiranih zeolita izloženi su zasićenim atmosferama kiselih plinova, dušikovog(IV) oksida ( $NO_2$ ) i klorovodika (HCl), na sat vremena. Prisutnost adsorbiranih  $NO_2$  i HCl potvrđena je infracrvenom spektroskopijom čak i mjesec dana nakon inicijalnog izlaganja uzoraka kiselom atmosferi. Stabilnost kristalne strukture zeolita određena je difrakcijom rentgenskog zračenja na praškastom uzorku. Rad je izrađen na Institutu Ruđer Bošković, na Zavodu za kemiju materijala u sklopu HRZZ projekta UIP-2019-04-4977 pod vodstvom dr. sc. Ane Palčić i Nikole Jakupca, mag. chem.



Slika 1: Zeolit Y modificiran policijanometalatom izložen kiselim atmosferama

[1] P. Li, F. H. Tezel, *Microporous and Mesoporous Materials*, **98** (2007) 94-101.

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





## ELEKTRIČNO ISTRAŽIVANJE VANADIJEVIH KOORDINACIJSKIH KOMPLEKSA DOBIVENIH IZ JEDNOSTAVNIH ACIL-HIDRAZONA

### ELECTRIC INVESTIGATION OF VANADIUM COORDINATION COMPLEXES OBTAINED FROM SIMPLE ACYL-HYDRAZONES

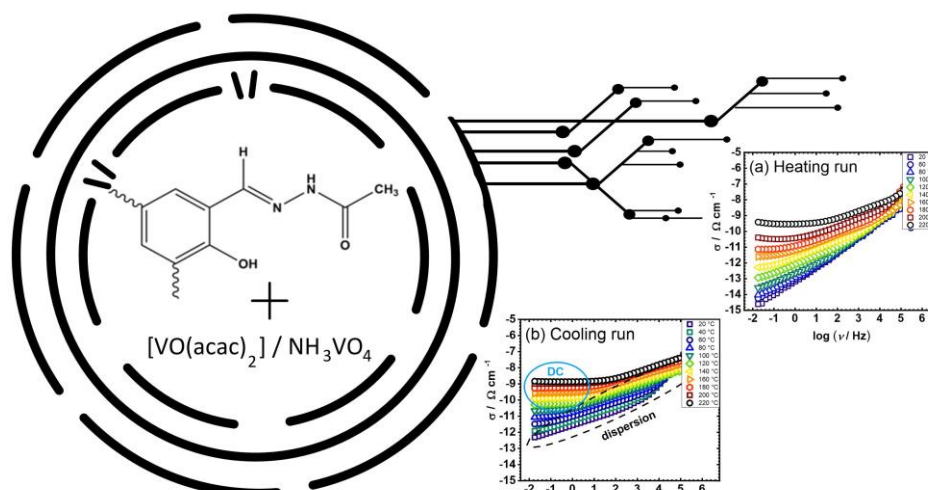
Josipa Sarjanović<sup>1</sup>, Edi Topić<sup>1</sup>, Mirta Rubčić<sup>1</sup>, Luka Pavić<sup>2</sup>, Jana Pisk<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup>Institut Ruđer Bošković, Laboratorij za funkcionalne materijale, Bijenička cesta 54, 10000  
Zagreb, Hrvatska

josipa.sarjanovic@chem.pmf.hr

Vanadium coordination complexes are widely used for their biological and medical applications, such as antibacterial and anticancer properties. [1,2] Hydrazones are extensively studied molecules because of their ease of preparation and different biological activities like antiinflammatory and antibacterial properties. [3] In this research, three ligands obtained from acetic acid hydrazide and different aldehydes were prepared and reacted with  $[\text{VO}(\text{acac})_2]$  or  $\text{NH}_4\text{VO}_3$ . Reactions were performed in methanol and different conditions for the preparation of the desired complexes were used. Mononuclear complexes ( $[\text{VO}(\text{L})(\text{D})]$  and  $[\text{VO}_2(\text{HL})]$ , where D is donor molecule) and one dinuclear vanadium(V) complex ( $[\text{VO}_2(\text{L})_2 \cdot \text{H}_2\text{O}]$ ) were synthesized. All the complexes were analysed and identified by IR-ATR, TG analysis, while molecular and crystal structure was determined by X-Ray diffraction. Using the *in situ* impedance spectroscopy method, the structural transformations of selected complexes were monitored, and their electrical properties were tested in a wide range of temperatures and frequencies. Further research perspective is to test the obtained complexes as catalysts.



[1] S. A. Talouki, G. Grivani, A. D. Khalaji, *Appl. Organomet. Chem.* **32** (2018) 4078.

[2] H. Barfeie, G. Grivani, V. Eigner, M. Dusek, A. D. Khalaji, *Polyhedron* **146** (2018) 19.

[3] S. H. H. Zaidi, A. Hai, B. R. A. Nawar, *J. Pharm. Appl. Chem.* **4** (2018) 17–21.

Ovaj je rad u potpunosti financiran od strane Hrvatske zaklade za znanost pod projektom IP-2019-04-1242.



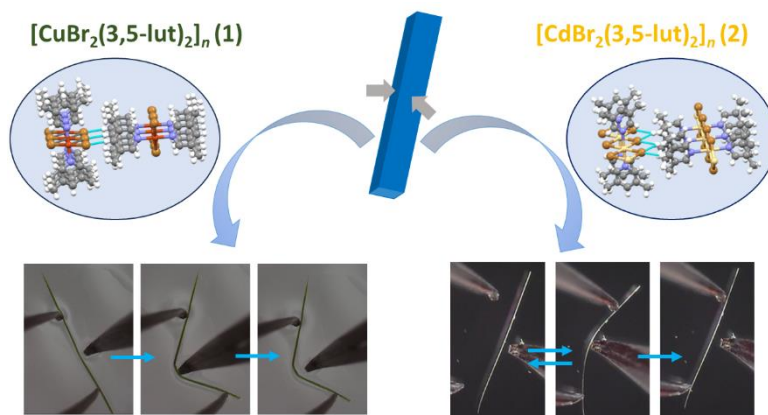
## KRISTALI U POKRETU: KOORDINACIJSKI POLIMERI BAKRA(II) I KADMIJA(II)

### CRYSTALS ON THE MOVE: COORDINATION POLYMERS OF COPPER(II) AND CADMIUM(II)

Lea Komočar, Mateja Pisačić, Ivan Kodrin, Marijana Đaković

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

Otkriće kristala koji pod utjecajem vanjskog podražaja pokazuju dinamičko ponašanje (savijanje, skakanje, i dr.) u potpunosti je promijenilo uobičajenu predodžbu o kristalima kao krutim i statičnim sustavima te otvorilo čitav spektar mogućnosti za njihovu potencijalnu primjenu u naprednim tehnologijama. [1] Dok je strukturno podrijetlo termički i svjetlosno potaknutih odziva kristala jako dobro istraženo, strukturni preduvjeti za postizanje mehanički induciranih odgovora kristala još uvijek nisu jasni. Uočeno je da se odzivi dinamičkih kristala pod utjecajem mehaničke sile protežu od čistog elastičnog do potpuno plastičnog savijanja s cijelim spektrom mogućnosti između. [2–4] Kako bi se produbilo razumijevanje dinamičkog ponašanja kristala, pripremljeni su strukturno vrlo slični kristali jednodimenzijskih koordinacijskih polimera bakrovog(II) i kadmijevog(II) bromida s 3,5-lutidinom (3,5-lut):  $[\text{CuBr}_2(3,5\text{-lut})_2]_n$  (**1**) i  $[\text{CdBr}_2(3,5\text{-lut})_2]_n$  (**2**). Odgovor kristala na primjenu mehaničke sile proučen je tehnikom savijanja u tri točke te modificiranim vlačnim eksperimentom, pri čemu su kristali oba spoja pokazali 2D izotropan odziv, no vrsta odziva bila je drugačija. Nadalje, odziv na toplinski podražaj ispitan je *hot-stage* mikroskopijom, te je uočena razlika u ponašanju kristala. Kristali bakrovog(II) polimera se zagrijavanjem savijaju, dok kristali kadmijevog(II) polimera ne pokazuju termički potaknut odgovor. Kako bi se objasnila razlika u termički potaknutom odgovoru i produbilo razumijevanje dinamičkog odgovora kristala, proučena su strukturna svojstva kristala spojeva **1** i **2** te je računalnim DFT metodama simulirana anizotropna deformacija jediničnih ćelija duž pojedinih kristalografskih osi.



[1] P. Naumov, D. P. Karothu, E. Ahmed, L. Catalano, P. Commins, J. Mahmoud Halabi, M. B. Al-Handawi, L. Li, *J. Am. Chem. Soc.* **142** (2020) 13256.

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

[3] M. Pisačić, I. Biljan, I. Kodrin, N. Popov, Ž. Soldin, M. Đaković, *Chem. Mater.* **33** (2021) 3660.

[4] M. Pisačić, I. Kodrin, I. Biljan, M. Đaković, *CrystEngComm* **23** (2021) 7072.

Ovaj je rad u potpunosti financiran od strane Hrvatske zaklade za znanost pod projektom IP-2019-04-1242.



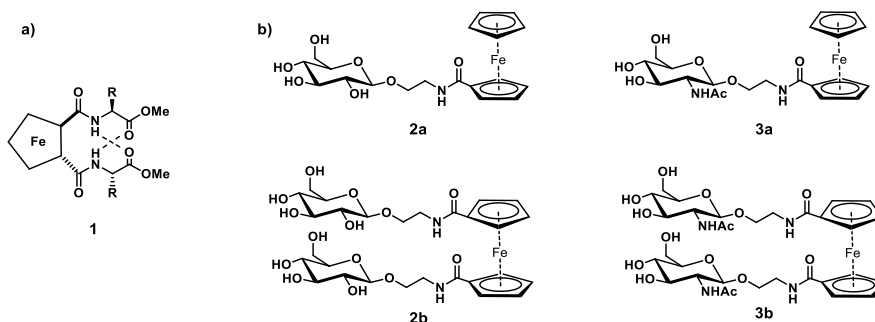
## SINTEZA FEROCENSKIH KONJUGATA D-GLUKOZE I N-ACETIL-D-GLUKOZAMINA

### SYNTHESIS OF FERROCENE CONJUGATES OF D- GLUCOSE AND N-ACETYL-D-GLUCOSAMINE

Franko Pahović, Đani Škalamera

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

Od organometalnih spojeva koji posjeduju ferocensku jedinicu posebno se ističu ferocenski peptidi radi helikalne kiralnosti, koju uzrokuje stabilizacija konformera uslijed prisustva intramolekulskih vodikovih veza između peptidnih lanaca vezanih na donji i gornji ciklopentadienilni prsten (slika 1a). [1] Zbog povoljne udaljenosti među ciklopentadienilnim prstenovima te zbog mogućnosti indukcije helikalne kiralnosti, ferocen je upravo idealan model enantioselektivnih katalizatora. [2,3] Do sad u literaturi nisu opisani analozi ferocenskih peptida u kojima se supramolekulske interakcije, umjesto između peptida, ostvaruju među šećernim jedinicama. S obzirom da su šećeri spojevi definirane kiralnosti te posjeduju veći broj polarnih hidroksilnih skupina koje mogu biti donori i akceptori vodikove veze, za očekivati je da će se i u ovom slučaju kiralnost putem neveznih interakcija prenositi do ferocena. U ovom radu provedena je sinteza mono- i disupstituiranih *O*-glikozida D-glukoze, odnosno *N*-acetil-D-glukozamina s ferocenskim mono- i dikarboksilnim kiselinama (slika 1b). Da bi se osigurala određena fleksibilnost te samim time i mogućnost stvaranja jačih vodikovih veza među šećernim jedinicama, uvedena je etilenska poveznica između ferocena i šećernih dijelova molekule. Ciljni derivati dobiveni su izravnom metodom glikozilacije peracetilirane D-glukoze, odnosno *N*-acetil-D-glukozamina uz 2-brometanol kao akceptor glikozidne veze. Nastali bromid supstituiran je azidom koji je zatim redukcijom preveden u amin u svrhu kondenzacije s ferocenskom (di)karboksilnom kiselinom.



**Slika 1.** a) Tipičan motiv vodikovih veza u ferocenskom peptidu. Iz prikaza je vidljiva stabilizacija konformera te helikalna kiralnost ferocena kao njezina posljedica. b) Strukture ferocenskih konjugata D-glukoze i *N*-acetil-D-glukozamina.

[1] S. I. Kirin, H.B. Kraatz, N. Metzler-Nolte, *Chem. Soc. Rev.* **35** (2006) 348–354.

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

[3] J. F. Scholtes, O. Trapp, *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* **58** (2019) 6306–6310.



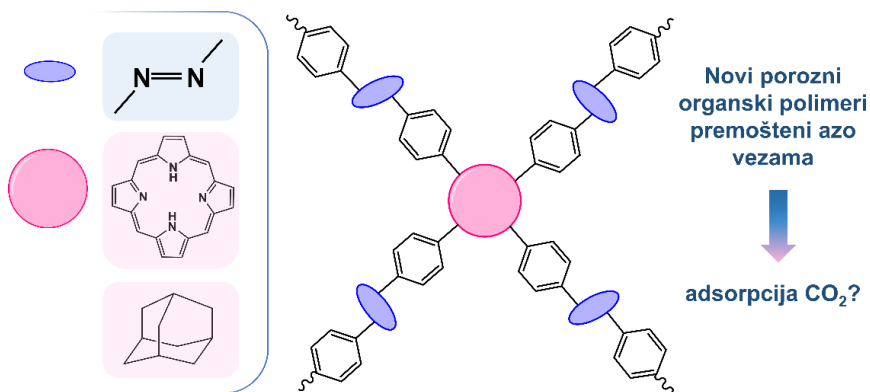
## SINTEZA I KARAKTERIZACIJA PORFIRINSKIH I ADAMANTANSKIH POROZNIH ORGANSKIH POLIMERA S AZO POVEZNICAMA

### SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF PORPHYRINIC AND ADAMANTANE POROUS ORGANIC POLYMERS WITH AZO LINKAGES

Petra Ištoković, Barbara Panić, Ivana Biljan

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

Uvođenjem azo veza u strukturu poroznih organskih polimera povećava se afinitet za vezanje  $\text{CO}_2$  jer dolazi do uspostavljanja povoljnih dipol-kvadrupol interakcija između atoma dušika i molekula  $\text{CO}_2$ . [1] Uz to, azo veze odbijaju molekule dušika čime se dodatno može povećati selektivnost poroznih organskih polimera za vezanje  $\text{CO}_2$  u odnosu na  $\text{N}_2$ . Zbog toga su se porozni organski polimeri premošteni azo vezama (azo-polimeri) nametnuli kao potencijalni materijali za skladištenje  $\text{CO}_2$  nastalog izgaranjem fosilnih goriva. Većina azo-polimera ima amorfnu strukturu i visoku kemijsku i termičku stabilnost, a pomnim odabirom polaznih građevnih jedinica i reakcijskih uvjeta tijekom sinteze mogu se pripremiti azo-polimeri željene poroznosti. [2,3] U ovom istraživanju provedena je sinteza i karakterizacija novih poroznih organskih azo-polimera sa središnjom porfirinskom i adamantanskom jedinicom. Kao polazne građevne jedinice za sintezu novih azo-polimera korišteni su tetranitro i tetraamino derivati s porfirinskom i/ili adamantanskom središnjom jedinicom. Azo-polimeri pripremljeni su redukcijom tetranitro monomera, oksidacijom tetraamino monomera ili reakcijom kondenzacije tetranitro monomera i komercijalno dostupnih aromatskih diamino i triamino monomera u bazičnim uvjetima. Karakterizacija sintetiziranih azo-polimera provedena je pomoću IR spektroskopije, spektroskopije NMR u čvrstom stanju, difrakcije rendgenskog zračenja na polikristalnom uzorku, termogravimetrijske analize i mjerenjem adsorpcijsko-desorpcijskih izoterma  $\text{N}_2$ . Iz dobivenih rezultata može se zaključiti da odabir metode sinteze i polaznih građevnih jedinica uvelike utječe na poroznost sintetiziranih azo-polimera.



Ovo istraživanje financirano je sredstvima Hrvatske zaklade za znanost (projekt FunMaterials, IP-2020-02-4467).

[1] H. A. Patel, S. Hyun Je, J. Park, D. P. Chen, Y. Jung, C. T. Yavuz, A. Coskun, *Nat. Commun.* **4** (2013) 1357.

[2] B. Panić, T. Frey, M. Borovina, K. Konopka, M. Sambolec, I. Kodrin, I. Biljan, *Polymers* **15** (2023) 229.

[3] T. Frey, B. Panić, P. Šutalo, M. Borovina, I. Biljan, I. Kodrin, *CrystEngComm* **25** (2023) 3870.



# PRIPRAVA DERIVATA MANOZILIRANOG DESMURAMIL-PEPTIDA S FEROCENSKOM PODJEDINICOM NA $\alpha$ -POLOŽAJU D-IZOGLUTAMINA

## SYNTHESIS OF MANNOSYLATED DESMURAMYL PEPTIDE DERIVATIVES WITH A FERROCENE SUBUNIT AT $\alpha$ -POSITION OF D-ISOGLUTAMINE

Filip Kučas<sup>1</sup>, Mia Bušljeta<sup>1</sup>, Vesna Petrović Peroković<sup>1</sup>, Željka Car,<sup>1</sup>  
Rosana Ribić,<sup>2</sup> Monika Kovačević,<sup>3</sup> Lidija Barišić<sup>3</sup>

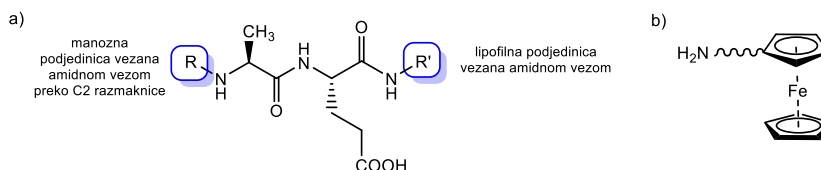
<sup>1</sup>Sveučilište u Zagrebu Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek, Horvatovac  
102a, 10000 Zagreb, Hrvatska

<sup>2</sup>Sveučilište Sjever Sveučilišni centar Varaždin, Jurja Križanića 31b, 42000 Varaždin,  
Hrvatska

<sup>3</sup>Sveučilište u Zagrebu Prehrambeno-biotehnološki fakultet, Pierottijeva 6, 10000 Zagreb,  
Hrvatska

fkucas@chem.pmf.hr

Tvari koje se dodaju cjepivima radi pojačavanja, ubrzavanja ili produljivanja specifične imunoreakcije na određeni antigen nazivaju se adjuvantima. Posebnu skupinu adjuvanata čine peptidni adjuvanti, među kojima se ističu derivati muramil-dipeptida (*N*-acetilmuramil-L-alanil-D-izoglutamin, MDP) i desmuramil-peptida (L-Ala-D-*iso*Gln, DMP), MDP-a bez šećerne *N*-acetilmuraminske komponente. [1] Proučavanjem različitih derivata desmuramil-peptida pokazalo se da uvođenje lipofilnih strukturnih podjedinica, osobito adamantilne, na  $\alpha$ -položaj izoglutamina DMP-a dovodi do porasta adjuvantskog učinka (Slika 1a). [2,3] Također se pokazalo da sličan učinak ima i vezanje manozne komponente na terminalnu amino-skupinu alanina DMP-a. U sklopu ovog rada sintetizirani su novi manozilirani derivati DMP-a s lipofilnom ferocenskom podjedinicom vezanom na  $\alpha$ -kraj D-izoglutamina. Kao polazni spoj korišten je prethodno pripremljeni zaštićeni dipeptid L-alanil-D-glutaminska kiselina (L-Ala-D-Glu). [3] Na  $\alpha$ -kraj glutaminske kiseline DMP-a amidnom vezom vezani su ferocenski amini s različitim brojem metilenskih skupina između amino-skupine i ferocenske podjedinice (Slika 1b). Dodatna strukturna modifikacija ferocenskih derivata DMP-a provedena je uvođenjem manozne podjedinice na amino-skupinu alanina preko C2 razmaknice. Strukturna karakterizacija dobivenih spojeva provedena je korištenjem spektroskopije NMR (<sup>1</sup>H i <sup>13</sup>C) i spektrometrije masa.



**Slika 1.** Strukturne formule molekula: a) desmuramil-peptida s označenim položajima i vrstom strukturnih modifikacija; b) ferocenskih amina



Istraživanja se provode u sklopu projekta Hrvatske zaklade za znanost  
IP-2020-02-9162.

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

[2] V. Petrović Peroković, Ž. Car, J. Draženović, R. Stojković, L. Milković, M. Antica, Đ. Škalamera, S. Tomić, R. Ribić, *Molecules* **26** (2021) 6352-6365.

[3] V. Petrović Peroković, Ž. Car, M. Bušljeta, D. Mihelec, M. Paurević, S. Ivanković, R. Stojković, R. Ribić, *Int. J. Mol. Sci.* **23** (2022) 8628.



8. Simpozij studenata kemičara, Zagreb, 21. listopada 2023.



## POSTERSKA IZLAGANJA



## SUPRESIJA RASTA TUMORSKIH STANICA IZLOŽENIH DJELOVANJU NOVIH BAKROVIH KOMPLEKSA S HIDROKSI/BENZOPIRONIMA

### GROWTH SUPPRESSION OF TUMOR CELLS EXPOSED TO NOVEL COPPER COMPLEXES WITH HYDROXY/BENZOPYRONES

Jakov Babić<sup>1</sup>, Stjepan Šarić<sup>1</sup>, Katarina Mišković Špoljarić<sup>2</sup>, Berislav Marković<sup>3</sup>, Sunčica Roca<sup>4</sup>, Nikolina Filipović<sup>1</sup>

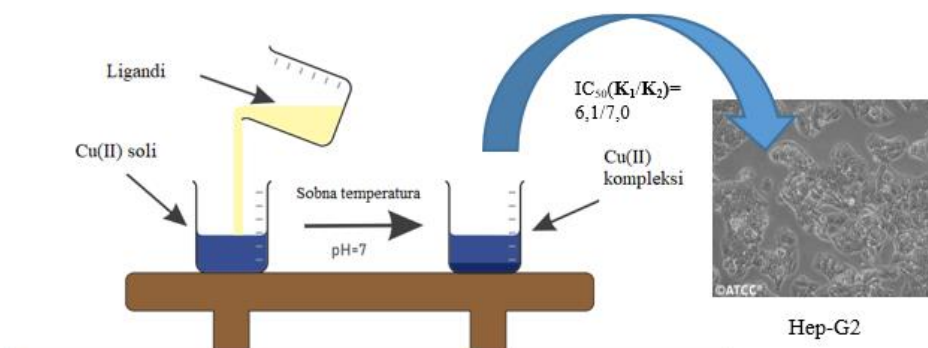
<sup>1</sup>Sveučilište u Osijeku Odjel za kemiju, Ulica cara Hadrijana 8/A, 31000 Osijek, Hrvatska

<sup>2</sup>Sveučilište u Osijeku Medicinski fakultet Osijek, Ulica Josipa Huttlera 4, 31000 Osijek, Hrvatska

<sup>3</sup>Sveučilište u Osijeku Fakultet za dentalnu medicinu i zdravstvo, Crkvena ulica 21, 31000 Osijek, Hrvatska

<sup>4</sup>Institut Ruđer Bošković, Centar za NMR, Bijenička Cesta 54, 10000 Zagreb, Hrvatska  
jakovbabic365@gmail.com

Rezultati istraživanja brojnih autora pokazali su kako cisplatin i njegovi analozi iskazuju značajnu protutumorsku aktivnost, ali da istovremeno štete okolnom, zdravom tkivu, odnosno primijećen je izostanak selektivnosti spoja. [1] Cilj ovog istraživanja bio je pripremiti nove kompleksne spojeve bakra koji će imati protutumorsku aktivnost, ali istovremeno pokazati i selektivnost prema tumorskim stanicama. Pripravi kompleksnih spojeva bakra s ligandima iz skupine benzopirona (kromon-2-karboksilna kiselina) i hidroksipirona (maltol) pristupilo se pomoću tri sintetske metode: otopinskom sintezom pri sobnoj temperaturi i pri temperaturi refluksa otapala, hidro/solvotermalnom sintezom i mehanokemijskom sintezom. Ciljani spojevi su u najvećem prinosu dobiveni otopinskom sintezom pri sobnoj temperaturi. Pripravljena su dva spoja (**K<sub>1</sub>** i **K<sub>2</sub>**) kojima je ispitana antiproliferativna aktivnost na ukupno sedam humanih staničnih linija, od kojih je jedna bila zdrava (MRC-5). Rezultati su pokazali da spojevi značajno utječu na supresiju rasta stanične linije Hep-G2 (hepatocelularni karcinom). Izračunate su IC<sub>50</sub> (polovica maksimalne inhibitorne koncentracije) vrijednosti spojeva na navedenoj staničnoj liniji: IC<sub>50</sub> (**K<sub>1</sub>**/**K<sub>2</sub>** Hep-G2) = 6,1/7,0. Osim IC<sub>50</sub> vrijednosti, kao dokaz o selektivnosti spojeva izračunati su indeksi selektivnosti (engl. Selectivity Indeks, SI) koji iznose SI(**K<sub>1</sub>**)= 1,431 SI(**K<sub>2</sub>**)= 1,622. Prikazani rezultati pokazuju da bi novi bakrovi kompleksi mogli predstavljati obećavajuću strukturnu polaznu točku za razvoj nove generacije potencijalnih protutumorskih sredstava.



[1] M. Carland, K. J Tan, J. M White, J. Stephenson, V. Murray, W. A Denny, W. David McFadyen, J. Inorg. Biochem, **99** (2005) 1738–1743.





## SINTEZA I *IN SILICO* ADMET SVOJSTVA NOVIH STEROIDNIH THIAZOLIDINONSKIH DERIVATA

### SYNTHESIS AND *IN SILICO* ADMET PROPERTIES OF NEW STEROIDAL THIAZOLIDINONE DERIVATIVES

P2

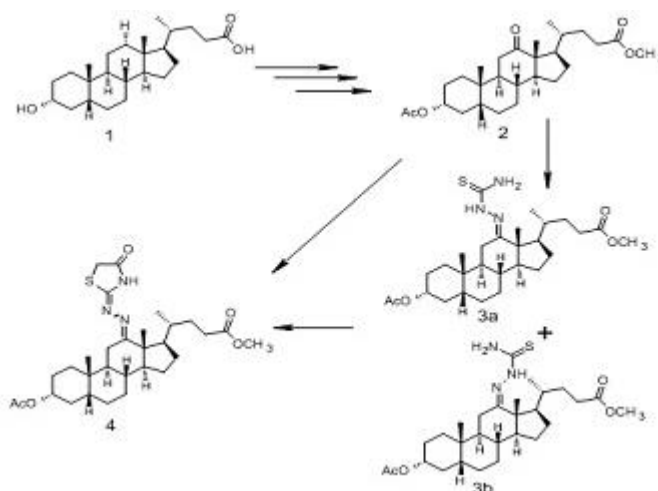
Ema Begović, Nevena Jokić, Valentina Periškić, Nikolina Tapavica, Ksenija Pavlović

University of Novi Sad, Faculty of Sciences, Department of Chemistry, Biochemistry and Environmental Protection, Trg Dositeja Obradovića 3, Novi Sad, Serbia

dh.239.21@student.pmf.uns.ac.rs, nevenajokic429@gmail.com,  
periskicvalentina@gmail.com, nikolinatapa@gmail.com

Thiazolidinones are one of the biologically important heterocyclic compounds, and their derivatives have found wide application in the world of medicine and pharmacy. The presence of the thiazolidinone nucleus in nature was first observed in the structure of penicillin. [1] Natural products with a thiazolidinone ring have been shown to possess cytotoxic, anticancer, antiviral, and anti-inflammatory activities and have therefore inspired scientists to design many synthetic compounds containing pharmacophores similar to them. [2] Herein, we present the optimization of the method and the synthesis of new thiazolidinone derivatives. Using deoxycholic acid as a starting compound, derivatives of steroid thiosemicarbazones (**3a** and **3b**) were first obtained through a series of chemical transformations. They further served as suitable substrates for the synthesis of the thiazolidinone function in the steroid nucleus (**4**). In addition to the conventional, microwave synthesis of the target thiazolidinone (**4**) was also performed, with better yields achieved. The obtained steroidal thiazolidinone derivatives, as well as its precursors, steroidal thiosemicarbazones, were tested *in silico* using SwissADME and ProTox-II web tools, whereby an insight into physicochemical properties, pharmacokinetics, and toxicity (ADMET) was obtained. The results showed that the obtained thiosemicarbazones show lower oral toxicity and better bioavailability compared to the obtained thiazolidinone.

49



[1] S. Nirwan, V. Chahal, R. Kakkar, *J. Heterocycl. Chem.* **56** (2019) 1239.

[2] S. K. Manjal, R. Kaur, R. Bhatia, K. Kumar, V. Singh, R. Shankar, R. Kaur, R. K. Rawal, *Bioorg. Chem.* **75** (2017) 406.



## POLIFENOLNI SASTAV I SENZORNE KARAKTERISTIKE CRNOG VINA ODLEŽANOG U *QUERCUS PETRAEA* BAČVAMA IZ SRBIJE

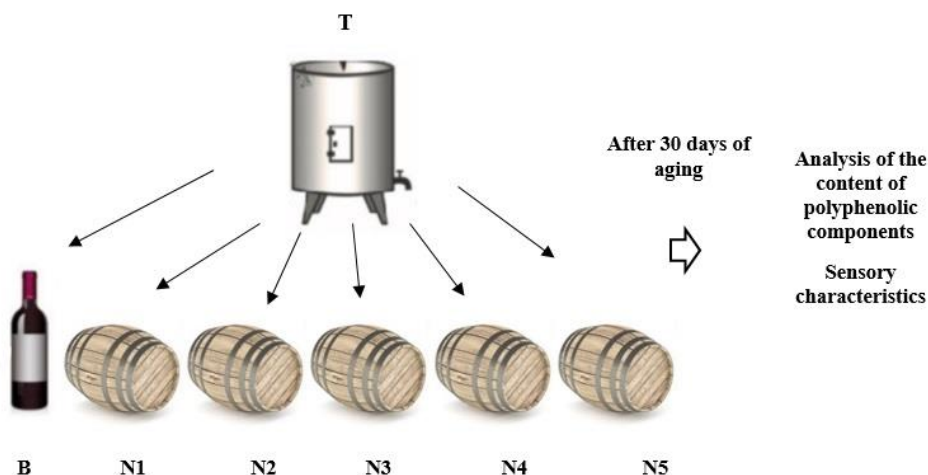
### POLYPHENOLIC COMPOSITION AND SENSORY CHARACTERISTICS OF RED WINE AGED IN *QUERCUS PETRAEA* BARRELS FROM SERBIA

Sara Brunet, Uroš Miljić, Jelena Vulić, Jovana Rajović, Vladimir Puškaš

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

sara.brunet99@gmail.com

The unique profile of wine is conditioned by: grape variety, growing area, wine production protocol, alcohol level and aging conditions. During the maturation of wine in oak wooden barrels, a series of chemical changes take place, which include oxidation-reduction reactions, extraction of phenolic compounds and extraction of volatile compounds [1,2]. In this work, phytochemical characterization of Merlot wine after 30 days of aging in five *Quercus petraea* barrels from Serbia included the determination of the content of total polyphenols, flavan-3-ols, anthocyanins and monomeric anthocyanins, as well as tannoid substances using spectrophotometric methods. Also, sensory evaluation of aged samples was done by 5 trained evaluators according to standardized procedures (ISO 3591, 2016). No significant differences were observed between the values of total polyphenolic compounds of wine samples that aged one month in barrels and control samples. The content of total flavan-3-ols, anthocyanins and monomeric anthocyanins decreased with the aging time in all wine samples from the oak barrels as a consequence of oxidative processes, polymerization and condensation reactions with other present compounds in the wine. All analyzed samples were characterized by extremely high results of the index of tannoid substances. Compared to the control sample, the most pronounced sensory differences were related to several aroma parameters such as: "vanilla", "boise", "coconut", "coffee" and "sawdust". However, when it comes to taste parameters, no significant differences were observed in the assigned grades.



[1] M. Carpena, A. G. Pereira, M. A. Prieto, J. Simal-Gandara, *Foods* **9** (2020) 1160–1185.

[2] T. Tarko, F. Krankowski, A. Duda-Chodak, *Molecules* **28** (2023) 620–643.



# FUNKCIONALNI HIDROGELOVI NA BAZI FMOC-AMINOKISELINA S KATALITIČKIM SVOJSTVIMA

## FUNCTIONAL HYDROGELS BASED ON FMOC-AMINO ACIDS WITH CATALYTIC PROPERTIES

P4

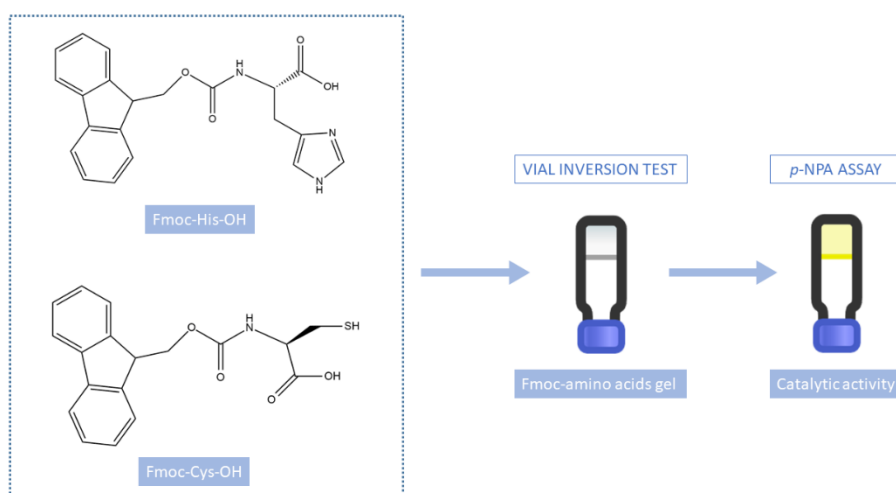
Ena Dražić, Patrizia Janković, Daniela Kalafatović

University of Rijeka. Department of Biotechnology, Radmile Matejčić 2, 51000 Rijeka, Croatia

ena.drazic@gmail.com

Low molecular weight hydrogelators are a promising field of study, offering numerous advantages over alternative materials such as ease of synthesis, tunable properties and biocompatibility. This research focuses on the design and characterization of hydrogels using Fmoc-amino acids, particularly Fmoc-histidine and Fmoc-cysteine, as small molecular building blocks capable of forming structures through non-covalent interactions, such as hydrogen bonding and  $\pi$ - $\pi$  stacking. Histidine, a polar amino acid, is frequently exploited for catalysis in combination with cysteine, a neutral amino acid known for its propensity to create disulfide bridges through oxidation. In this study, hydrogels of individual amino acids were obtained and then mixed in varying ratios to explore their stability, structural properties and catalytic activity. Initial assessment of gel stability was conducted using the vial inversion test, followed by evaluation of catalytic performance. Advanced characterization involved atomic force microscopy (AFM) to investigate morphological features and fluorescence analysis to reveal the critical aggregation concentration (CAC) of the Fmoc-amino acids. The p-NPA assay was used to evaluate the catalytic activity of the hydrogels. Our findings suggest that Fmoc-histidine hydrogels exhibit superior catalytic activity compared to Fmoc-cysteine, potentially attributed to the formation of disulfide bridges via oxidation processes, thereby hindering its nucleophilic reactivity. This study contributes to the understanding of low molecular weight hydrogelators and their potential applications as minimalistic catalysts.

51

[1] A. Croitoriu, L. E. Nita, A. P. Chiriac, A. G. Rusu, M. Bercea, *Gels* **7** (2021) 208.[2] E. R. Draper *et al.*, *CrystEngComm* **17** (2015) 8047–8057.



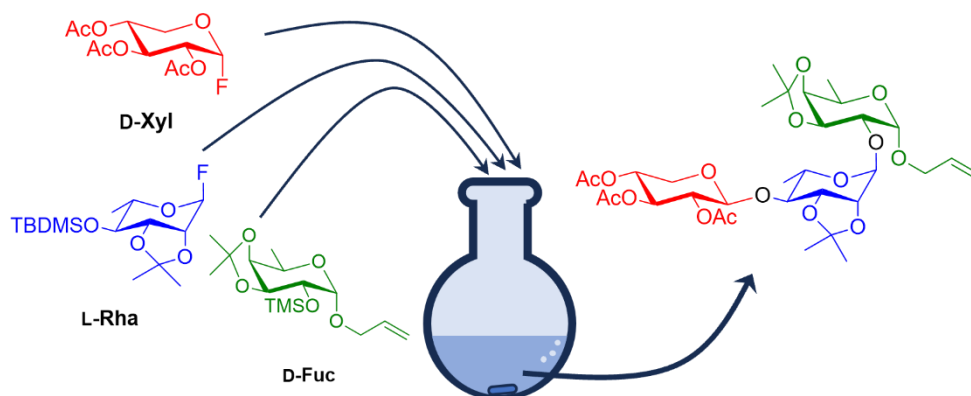
## ONE-POT SINTEZA TRISAHARIDA IZ SAPONINA BILJKE *QUILLAJA SAPONARIA*

### ONE-POT SYNTHESIS OF TRISACCHARIDE FROM THE SAPONIN OF THE PLANT *QUILLAJA SAPONARIA*

Filip Grdović, Đani Škalamera

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

Oligosaharidi i glikokonjugati igraju važnu ulogu u različitim biološkim procesima, uključujući virusne i bakterijske infekcije, rast i razvoj stanica, komunikaciju između stanica, kao i imunološki odgovor. Kako bi se mogli istraživati njihovi mehanizmi djelovanja i interakcije s drugim molekulama, potrebno ih je laboratorijski pripraviti, jer se u prirodi često nalaze u malim koncentracijama i u obliku teško odvojivih smjesa. Posljednjih godina, u sintezi prirodnih ugljikohidrata, glikozil-fluoridi se koriste kao svestrani glikozil-donori, [1] dok se kao glikozil-akceptori koriste silični eteri. [2] Korištenjem kombinacije ovih prekursora otvara se mogućnost *one-pot* sinteze koja pojednostavljuje uobičajenu višestupanjsku sintezu na način da eliminira potrebu za pročišćavanjem svakog međuprodukta i na taj način štedi vrijeme te otapala i reagense. Reakcijom navedenih prekursora nastaje O-glikozidna veza te stabilni i lako uklonjivi nusprodukt, trialkilsilicijev fluorid. [2] U *one-pot* pristupu, monosaharidni građevni blok uzastopno reagira s drugim saharidnim građevnim blokovima i reagensima u istoj posudi (tikvici), pri čemu nema potrebe za izolacijom i pročišćavanjem u svakom koraku. Takvim postupkom se nekoliko glikozilacija može povezati u jedan proces, na čijem se kraju, nakon jedne izolacije i pročišćavanja može dobiti ciljani oligosaharid. S ovim pristupom, gubitci su minimizirani i mogu se očekivati veći prinosi. U ovom radu sintetiziran je trisaharid Xyl-Rha-Fuc koji je ujedno i domena saponina QS-21 nužna za njegovu adjuvantsku aktivnost. Saponin QS-21, izoliran iz biljke *Quillaja saponaria* jedan je od najjačih poznatih imunoadjuvanata. [3] Adjuvanti su ključne imunostimulirajuće komponente cjepiva koje usmjeravaju imunološki odgovor na primijenjeni antigen. Imaju sposobnost izazivanja snažnih i trajnih imunoloških odgovora te mogućnost njihovog moduliranja. Jednostavna i elegantna *one-pot* sinteza trisaharida provedena u ovom radu otvorit će brži i lakši pristup sintezi derivata QS-21, a time potaknuti i pronalazak novih, stabilnijih i dostupnijih imunoadjuvanata.



[1] M. Yokoyama, *Carbohydrate Research* **327** (2000) 514.

[2] G. C. Sati *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **142** (2020) 7235–7242.

[3] P. Wang *et al.*, *J. Med. Chem.* **62** (2019) 9976–9982.



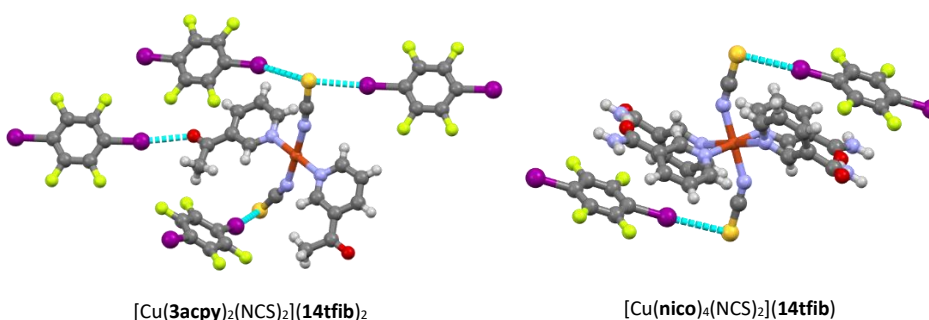
**KOORDINACIJSKI SPOJEVI BAKRA(II) S  
IZOTIOCIJANATNIM I PIRIDINSKIM LIGANDIMA  
KAO AKCEPTORIMA HALOGENSKE VEZE**

**COPPER(II) COORDINATION COMPOUNDS WITH  
ISOTHIOCYANATE AND PYRIDINE LIGANDS AS  
HALOGEN BOND ACCEPTORS**

Mila Grgurić, Lidija Posavec, Dominik Cinčić

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

Izotiocijanatni sumpor slabo je istražen kao akceptor halogenske veze [1] u kokristalima metaloorganskih spojeva, a iz perspektive kristalnog inženjerstva zanimljiv je zbog mogućnosti sudjelovanja u više halogenskih veza [2]. U ovom istraživanju cilj je bio ispitati akceptorski potencijal izotiocijanatne skupine u kompeticiji s karbonilnim kisikom i dušikom amino-skupine. Polazni kvadratno-planarni koordinacijski spojevi bakra(II) s izotiocijanatnim i *meta*-supstituiranim piridinskim ligandima nikotinamidom (**nico**) i 3-acetilpiridinom (**3acpy**), Cu(**nico**)<sub>2</sub>(NCS)<sub>2</sub> i Cu(**3acpy**)<sub>2</sub>(NCS)<sub>2</sub> [3] dobiveni su starenjem oktaedarskih spojeva, Cu(**nico**)<sub>2</sub>(MeOH)<sub>2</sub>(NCS)<sub>2</sub> i Cu(**3acpy**)<sub>2</sub>(MeOH)<sub>2</sub>(NCS)<sub>2</sub>. Metodom kristalizacije iz otopine izučena je mogućnost nastajanja kokristala s odabranim donorem halogenske veze, tetrafluor-1,4-dijodbenzenom (**14tfib**). Dobivena su dva kokristala koja su okarakterizirana difrakcijom rentgenskog zračenja na jediničnom kristalu. Jedan je očekivani kokristal [Cu(**3acpy**)<sub>2</sub>(NCS)<sub>2</sub>](**14tfib**)<sub>2</sub> dok je drugi kokristal [Cu(**nico**)<sub>4</sub>(NCS)<sub>2</sub>](**14tfib**) rezultat raspada početnog koordinacijskog spoja i dodatne koordinacije nikotinamida na ion bakra tijekom kokristalizacije s donorem. Strukturnom analizom spoja [Cu(**3acpy**)<sub>2</sub>(NCS)<sub>2</sub>](**14tfib**)<sub>2</sub> utvrđeno je da su uz dominantne međumolekulske interakcije, halogenske veze I⋯S, prisutne i halogenske veze I⋯O pri čemu je svaka molekula akceptora povezana s četiri molekule **14tfib**. U spoju [Cu(**nico**)<sub>4</sub>(NCS)<sub>2</sub>](**14tfib**) karbonilni kisik nema ulogu akceptora halogenske veze već sudjeluje u povezivanju metaloorganskih jedinaka u 2D mreže vodikovim vezama N-H⋯O. Svaki izotiocijanatni ligand povezan je s jednim donorem **14tfib** pri čemu nastaju halogenske veze I⋯S koje dodatno povezuju 2D mreže metaloorganskih jedinaka.



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

[2] L. Posavec, D. Cinčić, *XIV. Susret mladih kemijskih inženjera* (2022) 183.

[3] J. V. Handy *et al.*, *Inorg. Chim. Acta* **456** (2017) 64–75.



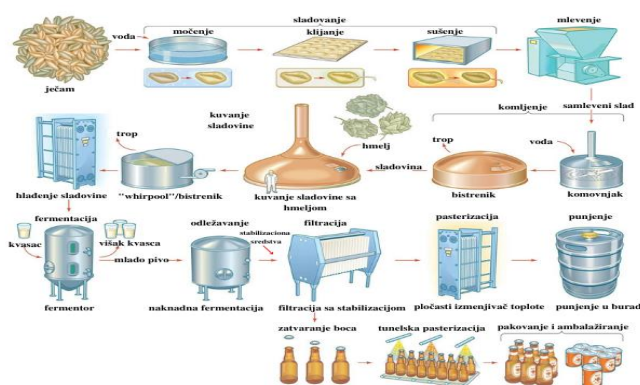
## PRIMJENA RAZLIČITIH METODA KOMLJENJA U PROIZVODNJI BEZALKOHOLNOG PIVA

### DIFFERENT MASHIN REGIMES IN NON-ALCOHOLIC BEER PRODUCTION

Lenka Grubač

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

Specijalna piva predstavljaju posebne vrste piva koje odstupaju od tradicionalnih tipova piva i njihova proizvodnja često uključuje primjenu nekonvencionalnih sirovina i tehnika. Vrste specijalnih piva od posebnog značaja su: bezalkoholna piva i piva s niskim udjelom etanola, piva bez glutena, niskokalorična piva i funkcionalna piva. Proizvodnja bezalkoholnih piva je porasla za čak 80 % u razdoblju od 2007. do 2012. godine, u količini od  $2,2 \times 10^9$  L/godini. Smatra se da je najveći uzrok za ovakav porast potražnje za bezalkoholnim pivima u EU pooštrena zakonska ograničenja konzumiranja alkoholnih pića, kao i osvješćivanje društva o dobrobitima umjerenog konzumiranja. Metode za proizvodnju bezalkoholnih piva i piva s niskim udjelom etanola mogu se podijeliti na biološke i fizikalne metode. Biološke metode podrazumijevaju inhibiranje proizvodnje etanola primjenom različitih bioloških procesa, dok se fizikalne metode temelje na uklanjanju već formiranog etanola u pivu pomoću fizikalnih procesa [1,2]. Ispitivana je kvaliteta sladovina, hmeljnih sladovina i bezalkoholnih piva proizvedenih iz 100 % ječmenog slada uz primjenu različitih metoda komljenja. Za proizvodnju sladovine primijenjena je standardna Kongresna metoda, kao i modificirani režim komljenja, po preporuci proizvođača kvasca koji je korišten u fermentaciji piva. Ciljani sadržaj ekstrakta u proizvedenim sladovinama je bio 8,5; 7,5 i 6,5 g/100g sladovine. Fermentacije su izvođene s čistom proizvodnom kulturom kvasca *Saccharomyces cerevisiae* var. *chevalieri* (SafBrew™ LA-01), proizvođača Fermentis (Lesaffre, Francuska). Sva analitička određivanja rađena su po standardnim EBC i/ili MEBAK metodama analize (Analytica - EBC, 2008; MEBAK, 2011). Svi rezultati prikazani su tablično. U sladovinama proizvedenim modificiranim režimom komljenja određen je znatno viši sadržaj etanola u usporedbi sa sladovinama proizvedenim Kongresnom metodom. Smanjenje udjela ekstrakta sladovina koje su proizvedene modificiranim režimom dovelo je do povećanja udjela etanola u mladim pivima.



[1] L. Montanari, O. Marconi, H. Mayer, P. Fantozzi, *Beer in Health and Disease Prevention*, Elsevier Inc., London, 2009.

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



## ADSORPCIJA POLI(N-ETIL-4-VINILPIRIDINA) NA KOLOIDNE ČESTICE TITANIJEVA DIOKSIDA

### ADSORPTION OF POLY(N-ETHYL-4-VINYLPYRIDINE) ON TITANIUM DIOXIDE COLLOIDAL PARTICLES

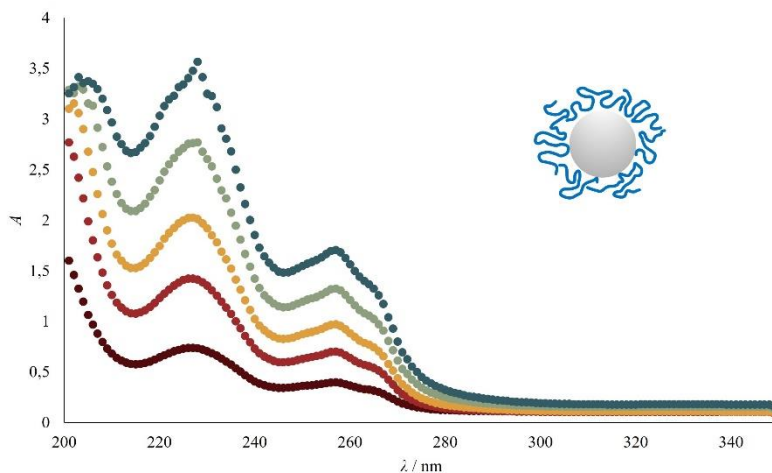
P8

Tea Juračić, Karla Korade, Tajana Begović

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

Međupovršina titanijev dioksid/otopina elektrolita ima veliku ulogu u mnogim ekološkim i tehnološkim procesima te svoju primjenu pronalazi u raznim područjima, poput kozmetičke i kemijske industrije te u građevini i medicini. [1] Intenzivno proučavani procesi na navedenoj međupovršini su adsorpcija, površinske reakcije i prekrivanja te kataliza. [2] Na površini titanijeva dioksida u otopini nastaje električni međupovršinski sloj. [3] Potencijal odredbeni ioni  $H^+$  i  $OH^-$  iz otopine formiraju površinske skupine čineći površinu pozitivno nabijenu u kiselim otopinama, a negativnu u lužnatim. [4] Površina minerala može se modificirati adsorpcijom polielektrolita čime se utječe na sama površinska svojstva minerala. [5] Polielektroliti su makromolekule čije se ponavljajuće jedinice sastoje od ioniziranih i/ili ionizabilnih skupina. Prema stupnju ionizacije mogu biti jaki ili slabi te prema ukupnom naboju mogu biti polikationi, polianioni ili poliamfoliti. Njihova konformacija u otopini ovisi o stupnju ionizacije polielektrolita, pH-vrijednosti i ionskoj jakosti otopine. [3] U ovom istraživanju proučavana je adsorpcija jakog polikationa poli(*N*-etil-4-vinilpiridina) (P4VP) na nanočestice titanijeva dioksida. Adsorpcija polikationa P4VP na čestice  $TiO_2$  kvantificirana je UV-VIS spektrofotometrijom. Za prikaz dobivenih rezultata korištene su različite adsorpcijske izoterme koje su i međusobno uspoređene.

55



**Slika 1.** UV-VIS spektar otopina polikationa P4VP nakon adsorpcije polikationa P4VP na nanočestice titanijeva dioksida:  $c_1 = 1 \times 10^{-4}$  (●),  $c_2 = 2 \times 10^{-4}$  (●),  $c_3 = 3 \times 10^{-4}$  (●),  $c_4 = 4 \times 10^{-4}$  (●),  $c_5 = 5 \times 10^{-4}$  (●); pri  $pH \approx 7$ ,  $\theta = 25^\circ C$ .

- [1] R. A. Baan, *Inhalation Toxicol.* **19** (2007) 219–221.  
 [2] T. Cosgrove, *Int. J. Adhes. Adhes.* **21** (2001) 173.  
 [3] T. Begović, N. Kallay, T. Klačić, *Koloidna i međupovršinska kemija*, nedovršena i nerecenzirana skripta, 2021.  
 [4] M. Kosmulski, *Adv. Colloid Interface Sci.* **99** (2002) 255–264.  
 [5] I. Szilagy, G. Trefalt, A. Tiraferri, P. Maroni, M. Borkovec, *Soft Matter* **10** (2014) 2479–2502.



## STABILITETNO-INDIKATIVNA METODA I LC-MS KARAKTERIZACIJA RAZGRADNIH PRODUKATA CINARIZINA

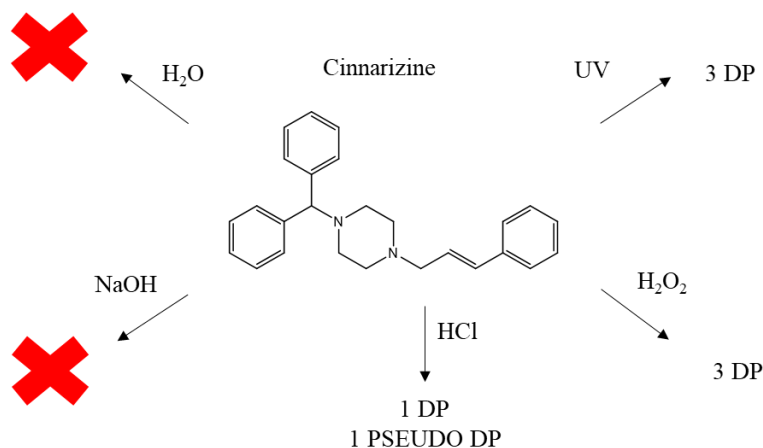
### STABILITY-INDICATING METHOD AND LC-MS CHARACTERIZATION OF CINNARIZINE DEGRADATION PRODUCTS

Lucija Lasić, David Klarić, Nives Galić

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

llasic@chem.pmf.hr

The chemical stability of active pharmaceutical ingredients affects the safety and efficacy of drugs. Forced degradation is the degradation of drug substances at conditions in which degradants are generated in a short span of time. It is required to demonstrate the specificity of stability-indicating methods and provide insight into the drug's degradation pathways and products. Stability-indicating methods are an important part of stability studies as they monitor the chemical stability or quality of active substances over time. [1] As part of this study, a stability-indicating method was developed and validated, which was then used to assess the chemical stability of cinnarizine. The developed and validated stability-indicating UPLC method was used for the quantitative determination of cinnarizine in the presence of its degradation products. Cinnarizine is a poorly soluble piperazine derivative used to treat nausea and dizziness. [2] Although stability studies on cinnarizine have already been conducted previously, there are large differences in the assessment of chemical stability and reported degradation products. To develop a stability-indicating method, forced degradation was performed on cinnarizine samples – hydrolytic degradation (in neutral, acidic, and basic media) at 80 °C, oxidative degradation, and photolytic degradation of cinnarizine at room temperature. The structural characterization of degradation products formed during the forced degradation was carried out by high-resolution mass spectrometry, with tandem mass spectrometry experiments on ions of interest. It has been established that hydrolytic degradation of cinnarizine occurs in an acidic medium, oxidative degradation in the presence of hydrogen peroxide, and photolytic degradation by exposure to UV radiation. Structures of five different degradation products were also determined. This stability-indicative method was validated according to the ICH Q2(R1) guidelines.



[1] M. Blessy, R. D. Patel, P. N. Prajapati, Y. Agrawal, *J. Pharm. Anal.* **4** (2014) 159–165.

[2] S. Shi, H. Chen, Y. Cui, X. Tang, *Int. J. Pharm.* **373** (2009) 147–155.





## SINTEZA KONJUGATA FEROCENA I CELOBIOZE

### SYNTHESIS OF FERROCENE AND CELLOBIOSE CONJUGATES

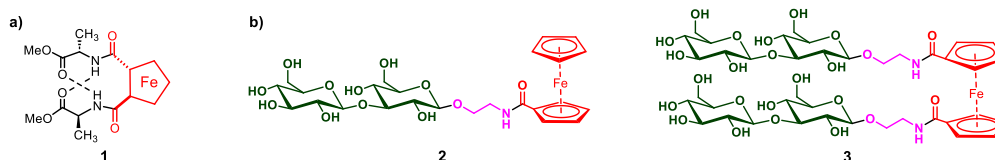
P10

Adriana Lipovčić, Dani Škalamera

Sveučilište u Zagrebu Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek, Zavod za organsku kemiju, Horvatovac 102a, 10000 Zagreb, Hrvatska  
adriana.lipovcic@chem.pmf.hr

Ferocenski peptidi posjeduju svojstvo helikalne kiralnosti (slika 1.a), što je poslužilo kao inspiracija za sintezu konjugata ferocena i celobioze. Posebnost ove kiralnosti je njeno podrijetlo iz stabilizacije konformera kroz intramolekulske vodikove veze između lanaca peptida vezanih na gornji i donji ciklopentadienilni prsten ferocena. Ova karakteristika našla je primjenu u dizajnu stereoselektivnih katalizatora i supramolekulskih sustava. [1,2] Do sada, analozi ovih sustava sa saharidnim jedinicama umjesto aminokiselinskih, nisu bili istraživani. Potencijal saharidnih derivata leži u velikom broju polarnih hidroksilnih skupina, što može rezultirati ostvarivanjem većeg broja povoljnih inter- i intramolekulskih vodikovih veza. Zahvaljujući inherentnoj kiralnosti saharida, očekuje se transfer te kiralnosti na ferocenski dio molekule putem supramolekulskih interakcija, slično onome što je zabilježeno kod ferocenskih peptida. Sintetizirani su ferocenski konjugati celobioze (slika 1. b) koji će omogućiti proučavanje udaljenog prijenosa kiralnosti, poznatog kao "backdoor induction" [1,3], sa saharidnog dijela molekule (celobioze) na ferocen ostvarivanjem supramolekulskih interakcija između molekula celobioze, za koje se očekuje da će biti slične interakcijama koje postoje u celulozi. Navedeno će omogućiti studij potencijala primjene saharidnih derivata ferocena u razvoju novih enantioselektivnih katalizatora temeljenih na prijenosu kiralnosti putem supramolekulskih interakcija.

57



**Slika 1.** a) Helikalna kiralnost u ferocenskim peptidima [1], b) konjugati ferocena i celobioze.

- [1] S. I. Kirin, H.-B. Kraatz, N. Metzler-Nolte, *Chem. Soc. Rev.* **35** (2006) 348–354.  
 [2] N. Pantalon Juraj, S. I. Kirin, *Coord. Chem. Rev.* **445** (2021) 214051.  
 [3] (a) K. Heinze, M. Beckmann, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2005** (2005) 3450–3457, (b) S. I. Kirin, U. Schatzschneider, X. de Hatten, T. Weyhermiiller, N. Metzler-Nolte, *J. Organomet. Chem.* **691** (2006) 3451–3457.



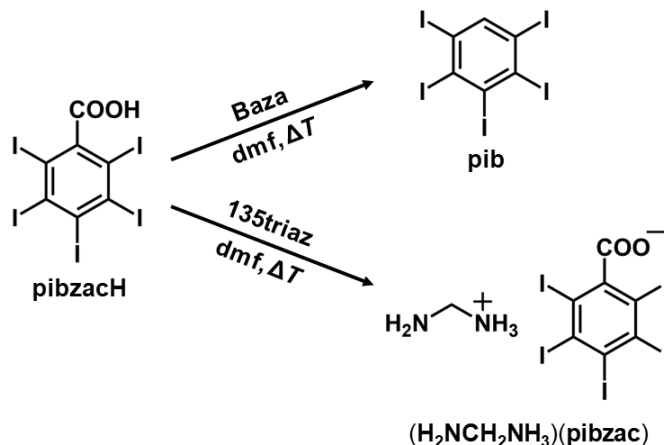
## NOVI PRISTUP SINTEZI PENTAJODBENZENA

### NEW APPROACH TO PENTAIODOBENZENE SYNTHESIS

Antonio Magnabosco, Vladimir Stilinović

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

Jodirani derivati benzena, a posebice perfluorirani jodbenzeni, u zadnjih nekoliko desetljeća od posebnog su značaja u supramolekularnoj kemiji kao donori halogenske veze. [1] Jodiranjem fenildiazonijevih soli pomoću jodida pripravlja se mono i dijodbenzeni. [2, 3] Priprava istih može se izvesti i jodiranjem benzena pomoću smjese  $I_2/I_2O_5$  u vrućoj sumpornoj kiselini. [4] Direktnim jodiranjem benzena pomoću joda/jodata ili perjodata nastaju tetra i heksajodbenzen. [5–7] Za sintezu pentajodbenzena potrebne su pak složenije metode jodiranja benzena pomoću bis(piridin)jododnija(I) tetrafluorborata uz triflatnu kiselinu u diklormetanu. [7] Takva metoda zahtijeva više reakcijskih koraka koji mogu trajati i po nekoliko dana. Prilikom pokušaja pripreme soli pentajodbenzojeve kiseline s organskim bazama, zamijetili smo da otapanjem pentajodbenzojeve kiseline (**pibzacH**) u vrućem dimetilformamidu (**dmf**) uz dodatak jednog ekvivalenta jake organske baze poput 2,2-diazabicyklo[2.2.2]oktana (**dabco**), *N,N*-dimetilaminopiridina (**dmap**) ili trietilamina (**Et<sub>3</sub>N**) dolazi do dekarboksilacije pentajodbenzojeve kiseline i nastanka pentajodbenzena (**pib**) u visokom reakcijskom iskorištenju. Upotrebom slabije organske baze 1,3,5-triazina (**135triaz**) dolazi do raspada baze i nastanka soli (**H<sub>2</sub>NCH<sub>2</sub>NH<sub>3</sub>**)(**pibzac**) monoprotiranog metilendiamina i pentajodbenzoata.



- [1] G. Cavallo, P. Metrangolo, R. Milani, T. Pilati, A. Priimagi, G. Resnati, G. Terraneo, *Chem. Rev.* **116** (2016) 2478.  
[2] H. J. Lucas, E. R. Kennedy, *Org. Synth.* **2** (1939) 351.  
[3] H. Schoutissen, *J. Am. Chem. Soc.* **55** (1933) 4535.  
[4] L. C. Brazdil, C. J. Cutler, *J. Org. Chem.* **61** (1996) 9621.  
[5] E. Rupp, *Chem. Ber.* **29** (1896) 1625.  
[6] D. L. Mattern, *J. Org. Chem.* **49** (1984) 3051.  
[7] J. Barleunga, J. M. Gonzalez, M. A. Garcia-Martin, P. J. Campos, *Tetrahedron Lett.* **34** (1993) 3893.



## ISPITIVANJE TOKSIČNOSTI RAZGRADNIH PRODUKATA BIOPLASTIKE POLIMLIJEČNE KISELINE

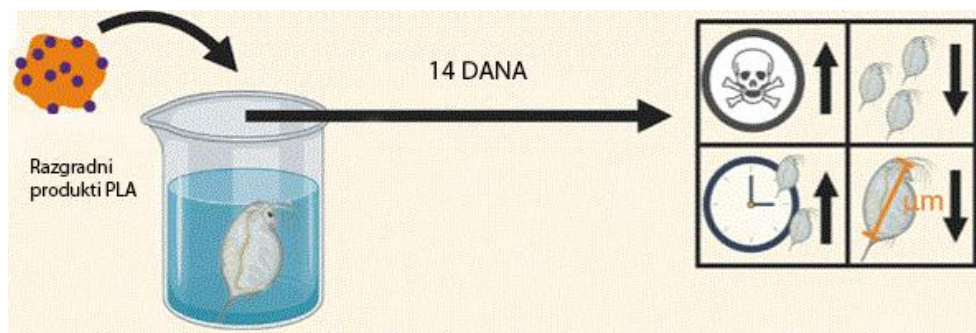
### EXAMINATION OF THE TOXICITY OF DEGRADATION PRODUCTS OF POLYLACTIC ACID BIOPLASTICS

Cristina Maligec<sup>1</sup>, Marija Pranjić<sup>1</sup>, Sanja Babić<sup>2</sup>, Aleksandra Maršavelski<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup>Institut Ruđer Bošković, Zavod za kemiju materijala, Laboratorij za biotehnologiju u  
akvakulturi, Bijenička Cesta 54, 10000 Zagreb, Hrvatska  
cmaligec.chem@pmf.hr

Onečišćenje morskih staništa plastikom sve je veća opasnost za okoliš i čini do 80 % ukupnog morskog otpada [1]. Polimljična kiselina je jedna od najzastupljenijih biopolimera, koji čini 33 % ukupne bioplastike proizvedene 2021. godine [2]. Ispitivanje razgradnje polimljične kiseline u prirodnom okolišu stoga je od velikog interesa. U ovom radu istražiti će se toksičnost polimljične kiseline i produkata koji nastaju njezinom razgradnjom u želudčanjoj i crijevnoj probavnoj tekućini na modelu slatkovodnog zooplanktonskog račića *Daphnia magna*. Eksperimentalne koncentracije mikroplastike polimljične kiseline postavljene su na 25, 50 i 100 mg L<sup>-1</sup>, dok su koncentracije razgradnih probavnih produkata polimljične kiseline bile 12,5, 25 i 50 mg L<sup>-1</sup>. Rezultati ovog istraživanja pokazuju kako su razgradni produkti polimljične kiseline u probavnim tekućinama toksičniji od polimljične kiseline. Također, rezultati naglašavaju potrebu za daljnjim istraživanjem toksičnosti razgradnih produkata polimljične kiseline, s obzirom na njihove potencijalno štetne učinke na vodene ekosustave i u konačnici na čovjeka.



[1] D. K. A. Barnes, F. Galgani, R. C. Thompson, M. Barlaz, *Philos. Trans. R. Soc. B.* **364** (2009) 1985–1998.

[2] J. P. G. L. Frias, R. Nash, *Mar. Pollut. Bull.* **138** (2019) 145–147.



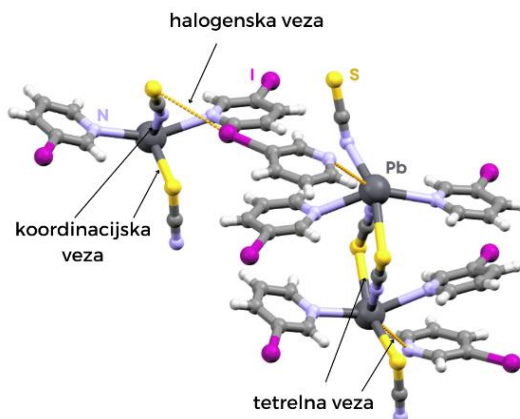
## ISPITIVANJE UTJECAJA TEMPERATURE NA KOORDINACIJSKE, HALOGENSKE I TETRELNE INTERAKCIJE U KRISTALNOJ STRUKTURI DOBIVENOJ IZ OLOVOVOG TIOCIJANATA I 3-JODOPIRIDINA

### INVESTIGATION OF THE TEMPERATURE EFFECT ON COORDINATIVE, HALOGEN, AND TETREL INTERACTIONS IN CRYSTAL STRUCTURES DERIVED FROM LEAD THIOCYANATE AND 3-IODOPYRIDINE

Lucija Marić, Nikola Bedeković, Vladimir Stilinović

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

Tetrelne veze nekovalentne su interakcije između Lewisove baze i atoma elemenata 14. skupine koji se ponašaju kao Lewisove kiseline. Poput halogenske veze, elektronima bogata funkcijska skupina iste ili druge molekule stupa u interakciju sa  $\sigma$ -šupljinom atoma donora tetrelne veze (područje atoma donora s nedostatkom elektrona). Budući da su kristalne strukture koje istovremeno sadrže halogenske, tetrelne i koordinacijske veze iznimno rijetke, do danas je simultani utjecaj spomenutih interakcija na kristalnu strukturu prilično slabo istražen. U ovom istraživanju sintetizirani su jedinični kristali  $\{[\text{Pb}_2(\text{SCN})_4(\mathbf{3Ipy})_4](\mathbf{3Ipy})_2\} \cdot \{[\text{Pb}(\text{SCN})_2(\mathbf{3Ipy})_2](\mathbf{3Ipy})\} \cdot [\text{Pb}_2(\text{SCN})_4(\mathbf{3Ipy})_6]$  postupnim hlađenjem otopine olovovog tiocijanata i 3-jodopiridina. Asimetrična jedinica kristalne strukture sastavljena je od tri različita kompleksa koji sadrže atome olova koji su hemikoordinirani s koordinacijskim brojevima 4, 5 i 6. Neovisno o koordinacijskom broju, atomi olova djeluju kao donori tetrelne veze prema piridinskom dušiku  $\mathbf{3Ipy}$  fragmenta kao i za S ili N atome tiocijanatnog liganda. Kao pouzdani i dobri donori halogenske veze, atomi joda sudjeluju u halogenskim vezama s tiocijanatnim skupinama koordiniranim na atome olova. S obzirom na prisutnost koordinacijskih, halogenskih i tetrelnih veza, promatrana kristalna struktura izvrstan je modelni sustav za istraživanje utjecaja temperature na duljine i geometrije triju različitih vrsta interakcija, unutar iste strukture. Kristalne strukture modelnog spoja određene su na 14 različitih temperatura u rasponu između 170 i 300 K. Utvrđeno je da je spoj stabilan u čitavom temperaturnom rasponu te su promjenom temperature uočene različite promjene duljine interakcija i njihovih geometrija, koje su međusobno korelirane i diskutirane.



[1] G. Mahmoudi *et al.*, *CrystEngComm* **20** (2018) 2812–2821.



## ELEMENTNA ANALIZA SUŠENOG MANGA SPEKTROMETRIJOM MASA UZ INDUKTIVNO SPREGNUTU PLAZMU

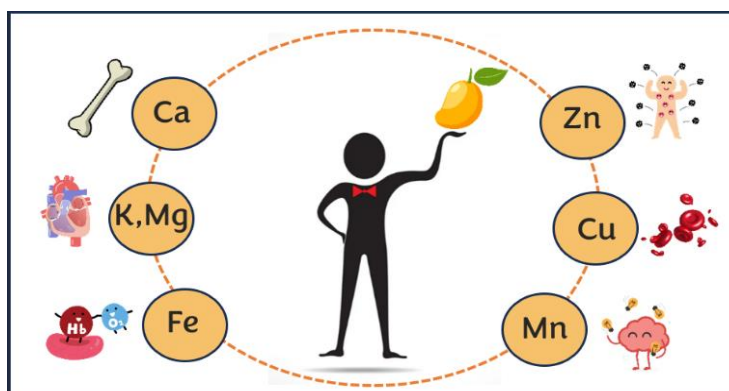
### ELEMENTAL ANALYSIS OF DRY MANGO BY INDUCTIVELY COUPLED PLASMA MASS SPECTROMETRY

Ema Mihalić<sup>1</sup>, Iva Juranović Cindrić<sup>1</sup>, Ivan Nemet<sup>1</sup>, Michaela Zeiner<sup>2</sup>,  
Heidelore Fiedler<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Sveučilište u Zagrebu Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek, Zavod za  
analitičku kemiju, Horvatovac 102a, 10000 Zagreb, Hrvatska

<sup>2</sup>Örebro University, School of Science and Technology, Man-Technology-Environment  
Research Centre, 5 Fakultetsgatan 1, 70182 Örebro, Sweden  
ema.mihalic@gmail.com

Mango (*Mangifera indica*, L.) je tropsko citrusno voće bogato nutrijentima, a konzumira se svjež ili kao suho voće. Vitamini A i C pridonose zdravlju metabolizma, kože i kose, a dijetalna vlakna i antioksidansi zdravlju srca i probave. Bogat je aminokiselinama, beta-karotenom, kalcijem, kalijem, magnezijem, željezom, no isto tako može sadržavati i potencijalno toksične elemente. [1] Kako bi se odredio udio pojedinih elemenata, najčešće se koriste metode atomske spektrometrije. U ovom radu, uzorci sušenog manga razgrađeni su u uređaju za mikrovalno potpomognutu razgradnju smjesom dušične kiseline i vodikovog peroksida, a nakon optimiziranja metode za pripremu uzorka, multielementna analiza provedena je metodom spektrometrije masa uz induktivno spregnutu plazmu (ICP-MS). [2] Od makroelemenata važnih za čovjekovo zdravlje u sušenom mangu prisutni su Ca, K, Mg i Na, a od mikroelemenata prisutni u najvećoj masenoj koncentraciji su Fe, Cu, Zn, Al i Mn ( $w > 3 \text{ mg kg}^{-1}$ ), dok toksični elementi nisu pronađeni u koncentracijama iznad dopuštene koje bi prema smjernicama EFSA predstavljale opasnost za ljudsko zdravlje. [3]



**Slika 1.** Esencijalni elementi prisutni u mangu (*Mangifera indica*, L.) i njihov utjecaj na ljudski organizam.

[1] R. N. Tharanathan, H. M. Yashoda, T. N. Prabha., *Food Rev. Int.* **22** (2006) 95.

[2] D. Potočnik *et al.*, *Meas.: Sens.* **18** (2021) 100292.

[3] EFSA Panel on Nutrition *et al.*, *EFSA J.* **20** (2022) e200102.



## UKUPAN SADRŽAJ POLIFENOLNIH SPOJEVA I ANTIOKSIDATIVNO DJELOVANJE LIOFILIZIRANOG MEDA

P15

### TOTAL POLYPHENOLIC CONTENT AND ANTIOXIDANT ACTIVITY OF LYOPHILIZED HONEY

Dario Piuković<sup>1</sup>, Slobodan Gadžurić<sup>1</sup>, Aleksandar Marić<sup>2</sup>, Pavle Jovanov<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Univerzitet u Novom Sadu Prirodno-matematički fakultet, Departman za hemiju, Trg  
Dositeja Obradovića 4, 21102 Novi Sad, Srbija

<sup>2</sup>Naučni institut za prehrambene tehnologije Novi Sad, Bulevar cara Lazara 1, 21101 Novi  
Sad, Srbija

dh.448.21@student.pmf.uns.ac.rs

Med je prirodna, slatka tvar, koju proizvode medonosne pčele (*Apis mellifera*) preradom nektara biljaka. Pčele sakupljaju ove sokove, prerađuju ih i dodaju im svoje specifične tvari, dehidriraju ih i odlažu u stanice saća do sazrijevanja [1]. Med se obično koristi u originalnom obliku, ali također se obogaćuje suhim voćem i konzumira kao ukusan desert. Suho voće predstavlja relativno koncentrirani oblik svježeg voća, jer uklonjena vlaga omogućava dulji vijek trajanja. Suho voće ima veću energetska vrijednost, sadržaj vlakana i često znatno veće antioksidativno djelovanje kao i sadržaj polifenolnih spojeva u usporedbi sa svježim voćem [2]. U ovom radu prikupljeno je 7 uzoraka meda koji sadrže 10 % sušenog (liofiliziranog) voća (višnja, jagoda, borovnica, malina, ananas, naranča, kupina) i kremasti med (50 % livadnog i 50 % uljane repice) kao kontrolni uzorak. Ukupan sadržaj polifenolnih spojeva i antioksidativno djelovanje su određeni pomoću spektrofotometrijskih metoda (*Folin-Ciocalteu* test i DPPH test). Ukupan sadržaj polifenolnih spojeva je bio u rasponu od 762,47 do 855,18 mg EKG (ekvivalent galne kiseline) po kilogramu, dok je  $IC_{50}$  vrijednost bila u rasponu od 48,32 do 79,62 %. Rezultati pokazuju da su svi uzorci bogati polifenolnim spojevima i da pokazuju visoko antioksidativno djelovanje.

62



[1] A. Marić, *Procena kvaliteta meda i ekstrakcija hidrosimetilfurfurala iz meda jonskim tečnostima*, Doktorski rad, Prirodno-matematički fakultet, Univerzitet u Novom Sadu, 2023.

[2] J. Vulić, J. Čanadanović-Brunet, G. Četković, S. Djilas, V. Tumbas Šaponjac, *J. Chem.* **2015** (2015) 1.



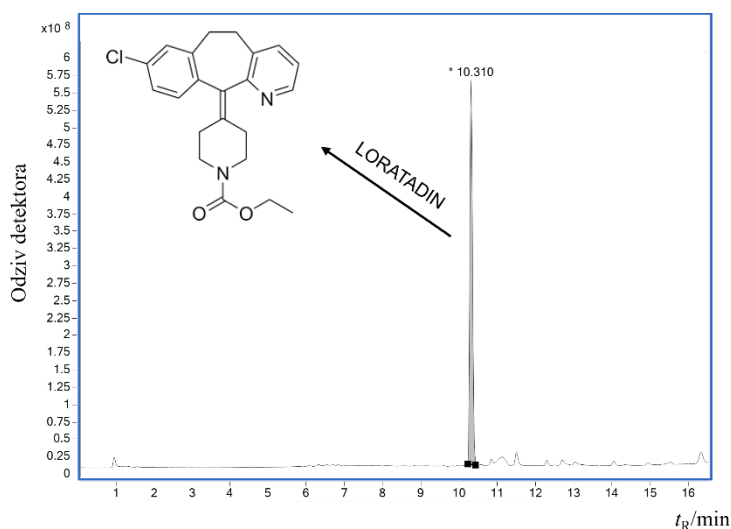
## RAZVOJ I VALIDACIJA METODE ZA ODREĐIVANJE LORATADINA U PRISUTNOSTI NJEGOVIH RAZGRADNIH PRODUKATA

### DEVELOPMENT AND VALIDATION OF METHOD FOR DETERMINATION OF LORATADINE IN THE PRESENCE OF ITS DEGRADATION PRODUCTS

Matea Rukavina, Marijana Pocrnić, Nives Galić

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

Loratadin je antihistaminik i farmakološki aktivni spoj lijekova za ublažavanje simptoma alergijskog rinitisa i urtikarije [1]. Smjernice Međunarodne konferencije o harmonizaciji tehničkih zahtjeva za registraciju humanih lijekova (engl. *International Conference on Harmonization of Technical Requirements for Pharmaceuticals for Human Use*, ICH) zahtijevaju ispitivanje stabilnosti djelatne tvari, radi potvrđivanja djelotvornosti i neštetnosti. U tu svrhu razvijaju se metode praćenja stabilnosti, odnosno validirani analitički postupci kojima se mogu kvantificirati količine djelatne stvari uslijed njezine razgradnje. Metode omogućavaju precizno mjerenje promjena u koncentraciji djelatne tvari bez interferencija koje potječu od ostalih razgradnih produkata ili onečišćenja [2,3]. Svrha validacije je dokazati prikladnost mjernog postupka za prethodno određenu svrhu, odnosno da metoda udovoljava zahtjevima uporabe. Standardizacijom radnog postupka osigurava se ponovljivost metode kao i pouzdanost dobivenih rezultata [4]. U ovom istraživanju razvijena je i validirana metoda određivanja loratadina u prisutnosti njegovih razgradnih produkata pomoću spregnutog sustava tekućinske kromatografije ultravisoke djelotvornosti i spektrometrije masa visokog razlučivanja. Uz selektivnost, određene su i ostale značajke metode poput linearnosti, preciznosti, granica detekcije i kvantifikacije analita te robusnosti. Validacija je provedena u skladu s ICH smjernicama.



- [1.] H. M. Friedman, *Am. J. Rhinol.* **1** (1987) 95–99.  
 [2.] Q1A(R2) Guideline.pdf (ich.org) (datum pristupa 18. rujna 2023)  
 [3.] M. Blessy *et al.*, *J. Pharm. Anal.* **4** (2014) 159–165.  
 [4.] M. Kaštelan-Macan, *Kemijska analiza u sustavu kvalitete*, Školska knjiga, Zagreb, 2003, str.100–102.



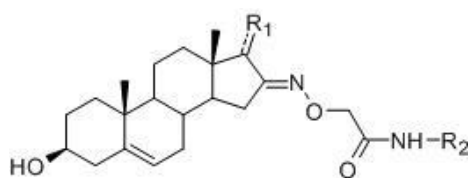
## SINTEZA STEROIDNOG HIDRAZID-HIDRAZONA I *IN SILICO* PREDVIĐANJE ADMET SVOJSTAVA

### SYNTHESIS OF STEROIDAL HYDRAZIDE-HYDRAZONES AND *IN SILICO* PREDICTION OF ADMET PROPERTIES

Vladana Stošić, Branislava Tenjović, Andrea Nikolić

University of Novi Sad Faculty of Sciences, Department of Chemistry, Biochemistry and Environmental Protection, Trg Dositeja Obradovića 3, 21000 Novi Sad, Serbia  
vladana.vakisa@gmail.com

Steroids play a crucial role in science and the pharmaceutical industry, especially in drug development. Their chemical structure and properties make them important starting materials for the synthesis of various biologically active agents. Hydrazide-hydrazones attracts the attention of medicinal chemists because of contain azomethine group connected with carbonyl group, which is responsible for different pharmaceutical applications. [1,2] With the aim of obtaining novel steroids with potential pharmaceutical and biological activities we synthesized steroidal hydrazide-hydrazones starting from dehydroepiandrosterone. The structure of new compounds was confirmed based on its spectral data. *In silico* ADMET profiling of novel compounds was performed using SwissADME and ProTox-II web tools. The Bioavailability Radar, which takes into account six physicochemical properties: lipophilicity, size, polarity, solubility, flexibility, and saturation, showed that all parameters of the synthesized compounds were in the optimal range. Physical and chemical properties were compared to Lipinski criteria, and all parameters fell within the optimal range. Predicted pharmacokinetic results indicate absorption in the gastrointestinal tract but no passage through the blood-brain barrier. Preliminary research suggests desirable drug properties, but further investigation is necessary to confirm their effectiveness and safety.



1  $R_1 = -NHNH_2$ ,  $R_2 = -NH_2$

2  $R_1 = -OH$ ,  $R_2 =$

3  $R_1 = -OH$ ,  $R_2 =$

[1] L. Popiołek, *Med. Chem. Res* **26** (2017) 287.

[2] M. Merlani, N. Nadaraia, L. Amiranashvili, A. Petrou, A. Geronikaki, A. Ciric, J. Glamoclija, T. Carevic, M. Sokovic, *Molecules* **28** (2023) 1167.





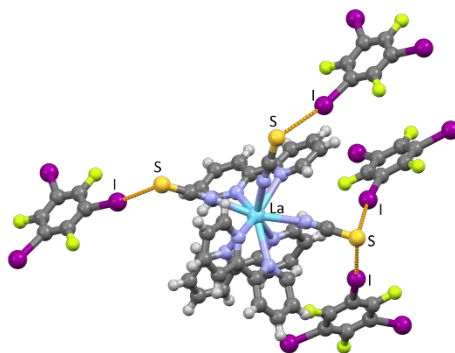
## KOORDINACIJSKI SPOJEVI LANTANA(III) I NEODIMIJA(III) S TIOCIANATNIM LIGANDIMA KAO AKCEPTORI HALOGENSKE VEZE

### LANTHANUM(III) AND NEODYMIUM(III) COORDINATION COMPOUNDS WITH THIOCYANATE LIGANDS AS HALOGEN BOND ACCEPTORS

Ruđer Sušanj, Nea Baus Topić, Vinko Nemec, Dominik Cinčić

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

Spojevi elemenata rijetkih zemalja, u čiju se skupinu ubrajaju lantanoidi, u zadnje vrijeme pronalaze sve veću primjenu u različitim područjima znanosti zbog svojih zanimljivih optičkih [1] i magnetskih svojstava. [2] Iz perspektive kristalnog inženjerstva, lantanoidni koordinacijski spojevi su zanimljivi zbog velikog koordinacijskog broja metalnog centra ( $KB \geq 8$ ), što omogućuje pripremu spojeva s većim brojem složenijih liganada. [3,4] U ovom istraživanju cilj je bio ispitati akceptorski potencijal koordinacijskih spojeva lantana i neodimija koji uz velike, sterički nepovoljnije ligande fenantrolin (**phen**) ili 2,2'-bipiridin (**22bpy**), sadrže i pseudohalogenidne ione  $NCS^-$  vezane izravno za metalni centar, za ostvarivanje halogenske veze. Polazni koordinacijski spojevi,  $La(\mathbf{phen})_3(NCS)_3$ ,  $La(\mathbf{22bpy})_3(NCS)_3$  i  $Nd(\mathbf{phen})_3(NCS)_3$ , dobiveni su sintezom iz otopine, te je izučena mogućnost nastajanja kokristala s dva odabrana perfluorirana donora halogenske veze, 1,4-dijodtetrafluorbenzenom (**14tfib**) i 1,3,5-trijod-2,4,6-trifluorbenzenom (**135tfib**). Kristalizacijom iz otopine dobivena su tri nova spoja. Od njih su dva očekivani kokristali,  $[La(\mathbf{22bpy})_3(NCS)_3](\mathbf{135tfib})_3$ , i  $[Nd(\mathbf{phen})_3(NCS)_3](\mathbf{14tfib})_4(\text{aceton})_2$ , dok je treći spoj, kokristal soli  $[La(\mathbf{phen})_2(NCS)_2(H_2O)_3]^+(NCS)^-(\mathbf{phen})_3(\mathbf{14tfib})_4$ , rezultat raspada i zamjene liganada početnog koordinacijskog spoja tijekom kokristalizacije s donatorom. Rentgenskom strukturnom analizom utvrđeno je da su u svim spojevima dominantne međumolekulske interakcije halogenske veze  $I \cdots S$ , koje su relativno linearne ( $\theta \approx 170^\circ$ ) i umjereno kratke ( $R.S. \sim 10 - 14\%$ ). Pokazano je da su istraživani koordinacijski spojevi politopični akceptori halogenske veze pri čemu se ostvaruje do šest halogenskih veza s pojedinom formulskom jedinicom koordinacijskog spoja.



- [1] G. Tessitore *et al.*, *RSC Adv.* **13** (2023) 17787.  
 [2] D. N. Woodruff, R. E. P. Winpenny, R. A. Layfield, *Chem. Rev.* **113** (2013) 5110.  
 [3] C. R. Groom *et al.*, *Acta Cryst.* **B72** (2016) 171.  
 [4] V. Nemec *et al.*, *CrystEngComm* **23** (2021) 3063.



## RAZVOJ NAPREDNOG SUSTAVA OBRADE VODA ONEČIŠĆENIH MIKROPLASTIKOM

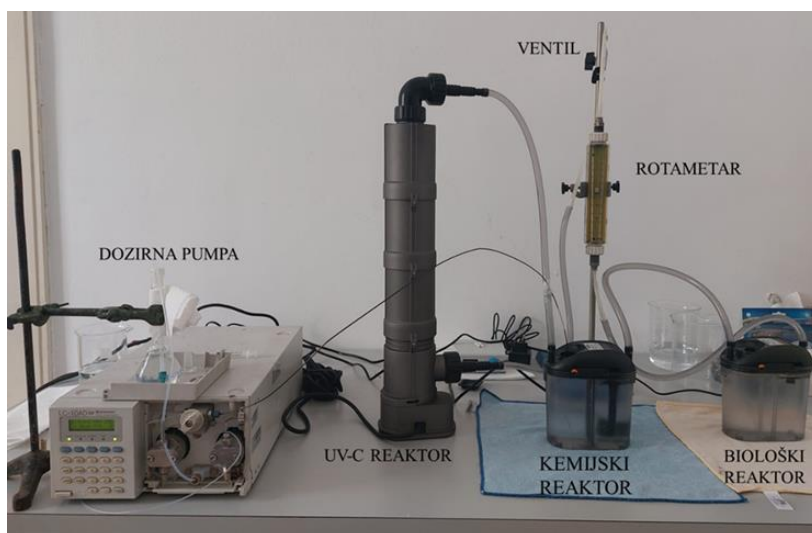
### DEVELOPMENT OF AN ADVANCED SYSTEM FOR THE PURIFICATION OF WATER POLLUTED BY MICROPLASTICS

Lucija Švegović, Adriana Tičić, Luka Večenaj, Kristina Bule Možar,  
Martina Miloloža, Viktorija Martinjak, Dajana Kučić Grgić, Šime Ukić,  
Marinko Markić, Matija Cvetnić, Tomislav Bolanča

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

lsvegovic@fkit.unizg.hr, aticic@fkit.unizg.hr, lvecenaj@fkit.unizg.hr

Plastično onečišćenje je problem današnjice, a mikroplastika (MP) čini veliki udio ukupne količine plastičnog otpada. MP-a je onečišćujuća tvar kojoj se diljem svijeta pridodaje sve više pozornosti. MP-om se smatraju sve plastične čestice reda veličine 1  $\mu\text{m}$  do 5 mm [1], a zbog dokazanog toksičnog učinka na žive organizme [2] uvode se regulacije i zabrane njezine uporabe. Međutim, to ne rješava problem MP-a koji se već nalazi u okolišu. Cilj ovog istraživanja bio je razviti napredni sustav za uklanjanje MP-a iz vodenih sustava primjenom kemijskog i biološkog tretmana. Dizajniran je ekološki prihvatljiv sustav u kojem se koristio tretman naprednim oksidacijskim procesom (UV-C/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>) i primjena mješovite kulture bakterija (*Pseudomonas aeruginosa* i *Bacillus subtilis*) u svrhu uklanjanja poli(vinil-klorid) MP-a. Razgradnja MP-a pratila se FTIR-ATR spektroskopijom i svjetlosnim mikroskopom uz dodatno praćenje ukupnog broja živih stanica bakterija u sustavu (CFU vrijednost) tijekom 10 dana provedbe procesa.



[1] L. M. R. Mendoza, M. Balcer, *Trends Anal. Chem.* **113** (2019) 402–408.

[2] C. G. Alimba, C. Faggio, *Environ. Toxicol. Pharmacol.* **68** (2019) 61–74.

**ZAHVALA:** Ovo istraživanje provedeno je u sklopu projekta Primjena naprednih tehnologija obrade voda za uklanjanje mikroplastike (AdWaTMiR, IP-2019-04-9661) financiranog od strane Hrvatske zaklade za znanost.



## POTPOMOGNUTA EKSTRAKCIJA BIFLAVONOIDA IZ LISTOVA *GINKGO BILOBA* L.

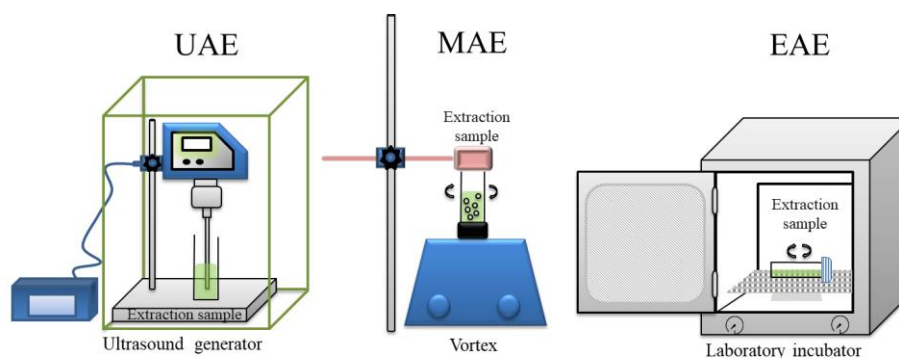
### ASSISTED EXTRACTION OF BIFLAVONOIDS FROM *GINKGO BILOBA* L. LEAVES

Iva Turkalj<sup>1</sup>, Lina Šepić<sup>1</sup>, Anita Šalić<sup>1</sup>, Bruno Zelić<sup>1,2</sup>, Dunja Šamec<sup>2</sup>

<sup>1</sup>University of Zagreb Faculty of Chemical Engineering and Technology, Marulićev trg 19, 10000 Zagreb, Croatia

<sup>2</sup>University North, Trg dr. Žarka Dolinara 1, 48000 Koprivnica, Croatia  
iturkalj@fkit.hr, lsepic@fkit.hr

Plants and herbs have been used since ancient times and even today many people rely on medicinal plants for their primary health care. *Ginkgo biloba* L., one of the oldest living trees, has a long history of use in traditional Chinese medicine. Today, dried leaves (as an infusion) and standardized leaf extract (EGb761) of ginkgo are among the most widely sold phytomedicines or dietary supplements in Europe and the United States. Several benefits are attributed to its use, including the treatment of early-stage symptoms of Alzheimer's disease, cardiovascular disease and Raynaud's disease, fatigue, anxiety, and depression, as well as its anti-cancer, anti-aging, and neuroprotective properties. Its pharmacological properties are attributed to its chemical composition, namely terpene trilactones and flavonoids especially bioflavonoids. [1,2] In this study, different extraction methods are investigated for the efficient isolation of biflavonoids from the ginkgo leaves including conventional extraction in 75 % ethanol, ultrasound-assisted extraction (UAE), mechanochemical-assisted extraction (MAE), and enzyme-assisted extraction (EAE). Morphological analyses of the powder before and after extraction were performed using SEM. Total content of polyphenols and flavonoids were determined spectrophotometrically in the extracts, and biflavonoids were identified and quantified by the HPLC-DAD analysis. The results of this study provide information on whether different techniques such as UAE, MAE and EAE improve the extraction of bioflavonoid compounds compared to conventional extraction methods.



[1] D. Šamec, E. Karalija, S. Dahija, S. T. Hassan, *Plants* **11** (2022) 1381.

[2] A. M. Silva, S. C. Silva, J. P. Soares, C. Martins-Gomes, J. P. Teixeira, F. Leal, I. Gaivão, *Plants* **8** (2019) 556.



## ROTOVAP KUĆNE IZRADE HOMEMADE ROTOVAP

Petar Volarević

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

Rotacijski isparivač (tzv. *rotovap*) dio je laboratorijske opreme kojim se uz pomoć sniženja tlaka, blagog zagrijavanja i rotiranja tikvice postiže brzo isparavanje otapala. Nažalost, takvi uređaji često su skupi te se rijetko koriste tijekom srednjoškolske nastave kemije. U ovom radu objašnjava se izrada rotovapa od raznih maloprodajno dostupnih i nekih 3D-printanih dijelova. Pri tome se postiže i zadržava sva funkcija komercijalnog stroja, ali po mnogo manjoj cijeni. Integriranjem nastave kemije i nastave fizike moguće je organizirati nastavni proces koji će istovremeno ostvarivati nastavne ciljeve oba predmeta. Time bi se osigurala mnogo šira primjena uređaja i unaprijedila nastava i kemije i fizike – kako za demonstraciju tako i za učenje. U tematskom smislu, različite su mogućnosti organiziranja nastavnih satova. Sam uređaj može poslužiti kao alat za učenje (kako funkcionira i kako se koristi) te tijekom demonstracije raznih metoda razdvajanja smjesa (kao što su ekstrakcija esencijalnih ulja, recikliranje otapala ili izolacija spojeva tijekom sinteza). Ovaj projekt mogao bi postići uspjeh, jer pokazuje da najskuplja i najkvalitetnija oprema nije uvijek nužna da bi se postigla i organizirala kvalitetna nastavna ili znanstvena aktivnost.

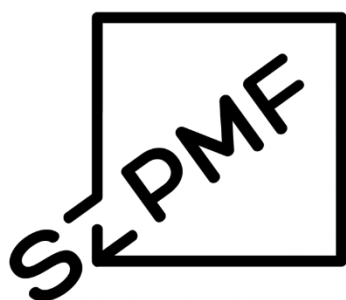


Zahvaljujem izv. prof. dr. sc. Nenadu Judašu na korisnim metodičkim savjetima.

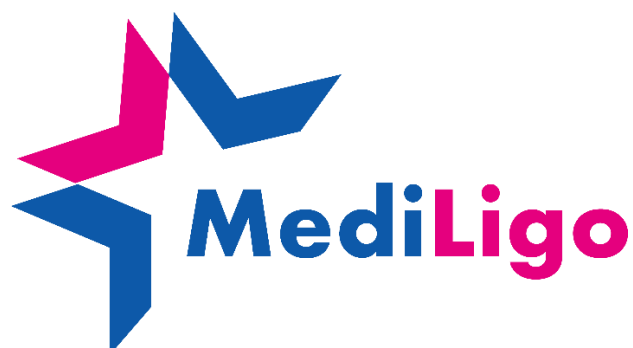




STUDENT  
SKI ZBOR  
SVEUČILIŠTA  
UZAGREBU



**Studentski zbor**  
Prirodoslovno  
Matematičkog  
Fakulteta













Udruga studenata biologije

**BIUS**







8. Simpozij studenata kemičara, Zagreb, 21. listopada 2023.



**Vidimo se za godinu dana na 9. SiSK-u!**