Simpozij studenata doktorskih studija PMF-a : knjiga sažetaka

Edited book / Uredničko knjiga

Publication status / Verzija rada: **Published version / Objavljena verzija rada (izdavačev PDF)**

Publication year / Godina izdavanja: **2018**

Permanent link / Trajna poveznica: https://urn.nsk.hr/urn:nbn:hr:217:496060

Rights / Prava: In copyright / Zaštićeno autorskim pravom.

Download date / Datum preuzimanja: **2024-03-29**

Repository / Repozitorij:

Repository of the Faculty of Science - University of Zagreb

SIMPOZIJ STUDENATA DOKTORSKIH STUDIJA PMF-a

Sveučilište u Zagrebu Prirodoslovno-matematički fakultet
Zagreb, 9. veljače 2018.

Knjiga sažetaka

Zagreb, 2018.

Naziv simpozija: Simpozij studenata doktorskih studija PMF-a

Organizator:
Prirodoslovno-matematički fakultet Sveučilište u Zagrebu
Horvatovac 102A, HR-10 000, Zagreb, Hrvatska
Tel.: 01/4606 000
URL: http://www.pmf.unizg.hr

Mjesto održavanja simpozija:
Prirodoslovno-matematički fakultet Sveučilišta u Zagrebu
Horvatovac 102A, Zagreb

Znanstveni odbor simpozija:
prof. dr. sc. H. Buljan, prodekan za znanost i doktorske studije, izv. prof. dr. sc. D. Bucković,
prof. dr. sc. Z. Drmač, akad. prof. dr. sc. M. Juračić, izv. prof. dr. sc. D. Leljak Levanić,
izv. prof. dr. sc. K. Kumerički, izv. prof. dr. sc. I. Primožič, prof. dr. sc. Z. Stiperski.

Organizacijski odbor simpozija:
dr. sc. Maja Antunović, dr. sc. Tena Dubček, dr. sc. Marko Erceg, dr. sc. Igor Felja
dr. sc. Slaven Gašparović, dr. sc. Maja Martinuš, dr. sc. Katarina Varga.

Mrežna stranica simpozija:
http://www.pmf.unizg.hr/poslijediplomski_studiji/simpozij_studenata_doktorskih_studija

Glavni urednik: *Ines Primožič*

Uredništvo*: D. Bucković, Z. Drmač, M. Juračić, D. Leljak Levanić, K. Kumerički, I. Primožič, Z. Stiperski.*

Tehnički urednik: *Branka Maravić*

Tekstove sažetaka pripremili potpisani autori.

Izdavač:
Prirodoslovno-matematički fakultet Sveučilišta u Zagrebu

ISBN 978-953-6076-43-7

Sadržaj

Predgovor..... VIII

Usmena priopćenja 1

U-M1: LOKALNO PORAVNAVANJE NIZOVA I SLOŽENA POISSONOVA APROKSIMACIJA 1
Hrvoje Planinić, Bojan Basrak

U-M2: THETA LIFTOVI IREDUCIBILNIH REPREZENTACIJA METAPLEKTIČKE GRUPE.....1
Petar Bakić[1], Marcela Hanzer[1], Neven Grbac[2]

U-M3: KONSTRUKCIJA EKSTREMALNIH Z_4-KODOVA TIPA II 2
Sara Ban, Dean Crnković, Sanja Rukavina

U-M4: OPTIMIZACIJA PRIGUŠENJA VIBRACIJSKIH SUSTAVA 2
Matea Puvača, Ninoslav Truhar, Zoran Tomljanović

U-M5: ROBUSNE NUMERIČKE METODE ZA NELINEARNE PROBLEME SVOJSTVENIH VRIJEDNOSTI 2
Ivana Šain Glibić

U-M6: ANALIZA LINEARNOG PROBLEMA 3D INTERAKCIJE FLUIDA, STENTA I LJUSKE 3
Sunčica Čanić[1], Marija Galić[2], Boris Muha[2], Josip Tambača[2]

U-M7: POJAČANJA DIRACOVE NEJEDNAKOSTI 4
Karmen Grizelj

U-M8: HARNACKOVA NEJEDNAKOST ZA SUBORDINIRANE SLUČAJNE ŠETNJE 4
Stjepan Šebek[1], Ante Mimica[2]

U-F1: METAPHASE KINETOCHORE MOVEMENTS ARE REGULATED BY KINESIN-8 MOTORS AND MICROTUBULE DYNAMIC INSTABILITY 5
Agneza Bosilj[1], Anna H. Klemm[2], Iva M. Tolić[2,3], Nenad Pavin[1]

U-F2: ISTRAŽIVANJE POVEZANOSTI KRISTALNE STRUKURE I MAGNETSKOG PONAŠANJA 5
Filip Torić[1], Damir Pajić[1] , Gordana Pavlović[2], Marina Cindrić[3], Krešo Zadro[1]

U-F3: IMPLICITNA JEDNADŽBA STANJA KOZMIČKIH FLUIDA I MODELI TAMNE ENERGIJE, TAMNE MATERIJE I NJIHOVOG UJEDINJENJA 6
Dalibor Perković

U-K1: IZOPENTENIL-DIFOSFAT-FOSFOHIDROLAZA: NOVI ENZIM METABOLIZMA IZOPRENOIDA U BILJAKA?.....7
Zrinka Karačić[1], Iva Pavlović[2], Ondřej Novák[3], Branka Salopek Sondi[2]

U-K2: ODRŽIVOST MOTIVA HALOGENSKE VEZE PRI KOKRISTALIZACIJI AMINÂ, IMINÂ I NJIHOVIH KOORDINACIJSKIH SPOJEVA S PERFLUORIRANIM AROMATIMA 7
Vinko Nemec, Dominik Cinčić

U-K3: NEW UNCHARGED POTENT REACTIVATORS OF ACHE AND BCHE INHIBITED BY NERVE AGENTS..8
Tamara Zorbaz[1], Anissa Braïki[2], Nikola Maraković[1], Maja Katalinić[1], Julien Renou[2], Ludovic Jean[2], Pierre-Yves Renard[2] and Zrinka Kovarik[1]

U-K4: KINETIKE KEMIJSKIH REAKCIJA AROMATSKIH DINITROZO SPOJEVA U ČVRSTOM STANJU 9
Petar Bibulić, Igor Rončević, Ivana Biljan, Hrvoj Vančik

U-K5: DEFORMACIJA KRISTALNE REŠETKE KALCITA IZAZVANA HIPERVISOKIM TLAKOM. USPOREDBA DIFRAKTOGRAMA ŠOKIRANIH VAPNENACA S KRKA I IZ VISOKOG ATLASA (MAROKO) 9
Marina Čalogović, Tihomir Marjanac

U-K6: KAKO NEAKTIVNI KONJUGATI AUKSINA IZAZIVAJU INHIBICIJU RASTA KORIJENA: ULOGA AUKSIN-AMIDOHIDROLAZA I POSLJEDIČNA DISTRIBUCIJA AUKSINA U KORIJENU 10
Ana Smolko[1], Aleš Pěnčík[2,3], Iva Pavlović[1], Branka Salopek-Sondi[1]

U-K7: RAZVOJ SMJERNICA ZA PRIJENOS ODABRANIH SUPRAMOLEKULSKIH SINTONA IZ ORGANSKIH U METALO-ORGANSKE SUSTAVE....11
Mladen Borovina, Ivan Kodrin, Marijana Đaković

U-B1: EPIGENETIČKA REGULACIJA GENA *BACH2* I NJEGOVA ULOGA U GLIKOZILACIJI IMUNOGLOBULINA G....12
Marija Klasić[1], Aleksandar Vojta[1], Melanija Posavec Marjanović[1], Ivan Biruš[1], Irena Trbojević Akmačić[2], Gordan Lauc[2,3], Vlatka Zoldoš[1]

U-B2: 'BOLD SYSTEMS' I EVOLUCIJA MONAŠKIH SKAKAVACA (ORTHOPTERA: TETRIGIDAE): BATRACHIDEINAE KAO ZASEBNA PORODICA?....12
Josip Skejo,[1,2] Damjan Franjević[1]

U-B3: VODENGRINJE (HYDRACHNIDIA) KAO KLJUČNE SASTAVNICE I DESKRIPTORI LIMNOKRENIH I REOKRENIH KRŠKIH IZVORA HRVATSKE....13
Ivana Pozojević, Sanja Gottstein

U-B4: PREŽIVLJAVANJE KLINIČKI ZNAČAJNE BAKTERIJE *Acinetobacter baumannii* U VODENIM MEDIJIMA RAZLIČITIH TEMPERATURA I VRIJEDNOSTI pH 14
Svjetlana Dekić, Jasna Hrenović, Tomislav Ivanković

U-B5: PICOPLANKTON IN THE SOUTH ADRIATIC SEA: GLIMPSE OF WINTER DIVERSITY IN OLIGOTROPHIC ECOSYSTEM 15
Maja Mucko, Sunčica Bosak, Ivana Babić, Zrinka Ljubešić

U-B6: PRISUTNOST VIRUSA U POPULACIJAMA ŠIŠMIŠA U HRVATSKOJ 15
Ivana Šimić

U-B7: PROMJENA GLIKOZILACIJE IMUNOGLOBULINA G TIJEKOM STARENJA 16
Jasminka Krištić[1], Frano Vučković[1], Maja Pučić-Baković[1], Ozren Polašek[2], Caroline Hayward[3], Tim Spector[4], Gordan Lauc[1,5]

U-B8: IZBOR STANIŠTA PRIMARNIH I SEKUNDARNIH DUPLJAŠICA U POPLAVNIM NIZINSKIM ŠUMAMA UZ RIJEKU DRAVU U HRVATSKOJ 16
Mario Slatki

U-GG1: PROMJENE U RAZVOJU JEDINICA LOKALNE SAMOUPRAVE OD 1991. DO 2011. GODINE: PRIMJER SJEVERNE HRVATSKE....18
Valentina Valjak

U-GL1: KOLOČEPSKI KANAL – POTOPLJENI KRŠKI BAZEN 19
Dragana Šolaja[1], Slobodan Miko[1], George Papatheodorou[2]

U-OC1: SASTAV I POTENCIJALNA ULOGA PROKARIOTSKIH ZAJEDNICA U BIOKEMIJSKIM PROCESIMA EUKSINSKOG OKOLIŠA ROGOZNIČKOG JEZERA 20
Milan Čanković[1], Gavin Collins[2], Estefania Porca[2], Ines Petrić[1], Ivica Janeković[1], Irena Ciglenečki[1]

Posterska priopćenja 21

P-M1: METODA UVJETA OPTIMALNOSTI ZA PROBLEME VIŠEKRITERIJSKOG OPTIMALNOG DIZAJNA....21
Krešimir Burazin[1], Ivana Crnjac[1], Marko Vrdoljak[2]

P-M2: HOMOGENIZACIJA JEDNADŽBE ELASTIČNE PLOČE....21
Krešimir Burazin[1], Jelena Jankov[1], Marko Vrdoljak[2]

P-M3: REPREZENTACIJE NEKIH IRACIONALNIH W-ALGEBRI 22
Ana Kontrec

P-M4: KORELIRANE SLUČAJNE ŠETNJE U NEPREKIDNOM VREMENU I FRAKCIONALNE PEARSONOVE DIFUZIJE....22
Nikolai Leonenko[1], Ivan Papić[2], Alla Sikorskii[3], Nenad Šuvak[2]

P-M5: NEPONIŠTAVANJA POINCARÉOVIH REDOVA NA METAPLEKTIČKOJ GRUPI I PRIMJENE....23
Sonja Žunar

P-F1: MODULACIJA TOKA KOZMIČKIH ZRAKA MEĐUPLANETARNIM UDARNIM VALOM....24
Anamarija Kirin[1], Bojan Vršnak[2], Mateja Dumbović[3], Bernd Heber[4]

P-F2: ROBUSNOST OBOJENE KOMPLEKSNE MREŽE NA ZAOBILAŽENJE BOJE....24
Andrea Kadović, Vinko Zlatić

P-F3: KUTNE KORELACIJE IDENTIFICIRANIH PAROVA HADRONA POMOĆU ALICE DETEKTORA NA LHC SUDARIVAČU....25
Filip Erhardt, Marko Jerčić, Mirko Planinić, Nikola Poljak, Goran Simatović, Antonija Utrobičić

P-F4: VERIFIKACIJA PROGNOZE MAGLE NA ZAGREBAČKOJ ZRAČNOJ LUCI....25
Jadran Jurković[1], Zoran Pasarić[2], Igor Kos[1]

P-F5: PROBING THE DIFFERENCES FOR TEMPO INCORPORATED IN GLASSY AND CRYSTALLINE ETHANOL USING CONSTANT TIME CPMG EXPERIMENT....26
Jurica Jurec, B. Rakvin, M. Jokić, M. Kveder

P-F6: CHRYSTALOVA I PROUDMANOVA REZONANCIJA SIMULIRANE POMOĆU TRI NUMERIČKA MODELA....27
Maja Bubalo[1], Ivica janeković[2,3], Mirko Orlić[1]

P-F7: JEDNODIMENZIONALNA KOREKCIJA PRISTRANOSTI MJESEČNE TEMPERATURE ZRAKA I OBORINE IZ KLIMATSKIH MODELA: KALIBRACIJA I VALIDACIJA....27
Renata Sokol Jurković, Ivan Güttler

P-F8: KARAKTERISTIKE KLIMATSKIH TRENDOVA TEMPERATURA ZRAKA I MORA NA JADRANU....28
Slavko Radilović[1], Darko Koračin[1], Danijel Belušić[2], Ivica Vilibić[3], Karlo Penović[1], Clea Denamiel[3], Jadranka Šepić[3], Ante Bralić[1]

P-K1: PRIPRAVA I STRUKTURNA KARAKTERIZACIJA KOORDINACIJSKIH POLIMERA BAKRA(II) S L-PROLINOM, L-TRIPTOFANOM, GLICILGLICINOM I 4,4'-BIPIRIDINOM....29
Kristina Smokrović, Ivica Đilović, Dubravka Matković-Čalogović

P-K2: ISTRAŽIVANJE MEĐUPOVRŠINSKOG SLOJA GRAFIT - VODENA OTOPINA ELEKTROLITA....29
Antun Barišić, Mirna Mandarić, Tajana Preočanin

P-K3: SOLVATOMORFIZAM I *CIS-TRANS* IZOMERIZACIJA U KOMPLEKSIMA BAKRA(II) SA SERINOM I IZOLEUCINOM....30
Darko Vušak[1], Jelena Budimčić[2], Jasmina Sabolović[2], Biserka Prugovečki[1], Dubravka Matković-Čalogović[1]

P-K4: KINETIČKA RAZDIOBA U SINTETSKOM MJESTU IZOLEUCIL-TRNA-SINTETAZE ODREĐUJE MEHANIZAM DISKRIMINACIJE NEPRIPADNIH AMINOKISELINA....31
Igor Živković, Ita Gruić-Sovulj

P-K5: UTJECAJ ZAMJENE Li_2O I Ag_2O S WO_3 I MoO_3 NA MEHANIZAM ELEKTRIČNOG TRANSPORTA I STRUKTURU CINK FOSFATNIH STAKALA....32
Juraj Nikolić[1], Luka Pavić[1], Ana Šantić[1], Petr Mošner[2], Ladislav Koudelka[2], Andrea Moguš-Milanković[1]

P-K6: KONFORMACIJSKA ANALIZA *trans*-DEKALINA....32
Karlo Sović, Tomica Hrenar

P-K7: SINTEZA I KOMPLEKSACIJSKA SVOJSTVA FENANTRIDINSKOG DERIVATA KALIKS[4]ARENA....33
Katarina Leko, Andrea Usenik, Nikola Cindro, Vladislav Tomišić

P-K8: KOMBINIRANA MEHANOKEMIJSKA I OTOPINSKA SINTEZA ADICIJSKIH SPOJEVA BAKROVIH(ii) SALICILATA....34
Aleksandar Meštrić, Nenad Judaš

P-K9: UTJECAJ OTAPALA NA STRUKTURNU RAZNOLIKOST HETEROMETALNIH [$Cu^{II}Cr^{III}$] KOMPLEKSNIH SPOJEVA 34
Lidija Kanižaj, Krešimir Molčanov, Marijana Jurić

P-K10: ANTIMICROBIAL ACTIVITY OF QUATERNARY 3-HYDROXYQUINUCLIDINIUM SALTS WITH LONG ALKYL CHAINS....35
Linda Bazina[1], Barbara Soldo[1], Ana Maravić[2], Ines Primožič[3], Matilda Šprung[1], Renata Odžak[1]

P-K11: MEHANIZAM HIDROLIZE PEPTIDNE VEZE NA MODELNOM SUSTAVU DPP III IZ *Bacteroides thetaiotaomicron* 36
Marko Tomin, Sanja Tomić

P-K12: PRIMJENA MEHANOKEMIJE U FUNKCIONALIZACIJI AROMATSKIH SPOJEVA 36
Mateja Đud, Zoran Glasovac, Davor Margetić

P-K13: SINTEZA MARKOCIKLIČKIH SPOJEVA S ENDIINSKIM MOTIVOM 37
Mladena Glavaš, Matija Grediček, Ivanka Jerić

P-K14: MODELNI SUSTAV REAKTIVNOG ALDEHIDA I AMINOKISELINE: REAKCIJSKI MEHANIZAM....38
Sanja Škulj, Katarina Vazdar, Mario Vazdar

P-K15: RAČUNALNI UVID U REVERZIBILNU INHIBICIJU MONOAMINOOKSIDAZE B 38
Tana Tandarić, Robert Vianello

P-K16: KARAKTERIZACIJA HIDRAZONA I NJIHOVIH KOMPLEKSNIH SPOJEVA SA ŽELJEZOM(III) SPEKTROMETRIJOM MASA 39
Tomislav Benković[1], Darko Kontrec[2], Nives Galić[1]

P-K17: ISTRAŽIVANJA REKACIJA POLIMERIZACIJE U MOLEKULSKIM SAMOUDRUGAMA DERIVATA BIS(AMINOKISELINA) AMIDA FUMARINSKE KISELINE....40
Tomislav Gregorić, Janja Makarević, Leo Frkanec

P-K18: UTJECAJ KAPLJEVINE NA ISHOD MEHANOKEMIJSKE SINTEZE METALOORGANSKIH MATERIJALA POVEZANIH HALOGENSKIM VEZAMA 41
Katarina Lisac, Dominik Cinčić

P-B1: PRELIMINARNI REZULTATI UČINKA ONEČIŠĆENJA ZRAKA IZ RAFINERIJE NAFTE NA FIZIOLOŠKE PROMJENE U NATIVNIM LIŠAJEVIMA 42
Maja Maslać Mikulec[1, 2], Saša Likić[1], Oleg Antonić[2, 3], Mirta Tkalec[1]

P-B2: UTJECAJ EPIGENETIČKOG UTIŠAVANJA GENA *Hnf1α* NA GLIKOZILACIJU PROTEINA U ADENOKARCINOMU GUŠTERAČE I DIJABETESU 42
Ivona Bečeheli,[1] Petra Korać,[2] Vlatka Zoldoš,[2] Gordan Lauc[1,3]

P-B3: SILVER NANOPARTICLES AFFECT GERMINATION AND INDUCE OXIDATIVE STRESS IN TOBACCO43
Renata Biba[1], Dajana Matić[1], Petra Cvjetko[1], Petra Peharec Štefanić[1], Sandra Šikić[2], Biljana Balen[1]

P-B4: PROTEOM SERUMA PASA S POREMEĆAJEM FUNKCIJE BUBREGA I SRCA 43
Petra Bilić[1], Nicolas Guillemin[1], Mangesh Bhide[2], David Eckersall[1], Vladimir Mrljak[1]

P-B5: MINIJATURIZACIJA I SEMI-AUTOMATIZACIJA METODE MEMBRANSKE PROPUSNOSTI NA MDCKII-MDR1 STANICAMA 44
Ana Bokulić, Astrid Milić

P-B6: INHIBICIJA PUTEVA NOTCH I PARP U LIMFOCITIMA....44
Luka Horvat[1], Josipa Skelin[2], Mariastefania Antica[2], Maja Matulić[1]

P-B7: PRAŽIVOTINJE AKIVNOG MULJA KAO INDIKATORI UČINKOVITOSTI PROČIŠĆAVANJA OTPADNIH VODA....45
Mirjana Kepec[1], Renata Matoničkin Kepčija[2], Slavko Kepec[3]

P-B8: ANALYSIS OF Fe DISTRIBUTION AMONG CYTOSOLIC BIOMOLECULES AND IDENTIFICATION OF Fe-BINDING COMPOUNDS IN THE LIVER AND GILLS OF VARDAR CHUB (*Squalius vardarensis* KARAMAN) 46

Nesrete Krasnići[1], Zrinka Dragun[1], Saša Kazazić[2], Hasan Muharemović[2], Snježana Kazazić[2], Maja Jordanova[3], Katerina Rebok[3], Vasil Kostov[4], Marijana Erk[1]

P-B9: CHANGES OF PHYTOPLANKTON COMMUNITY STRUCTURE IN CORRELATION WITH DIFFERENT CONCENTRATIONS OF NITRATES IN SURFACE WATER OF VARAŽDIN ALLUVIAL AQUIFER SYSTEM46
Antonija Kulaš[1], Tamara Marković[2], Petar Žutinić[1], Marija Gligora Udovič[1]

P-B10: PRIMJENA NANOČESTICA ŽELJEZOVIH OKSIDA OBLOŽENIH D-MANOZOM ZA PRAĆENJE BIODISTRIBUCIJE HONDROCITA U TKIVNOM INŽENJERINGU HRSKAVICE.....47
Maja Pušić[1], Tihana Marić[1], Siniša Škokić[2], Katarina Caput Mihalić[1], Maja Antunović[1], Daniel Horak[3], Srećko Gajović[4], Inga Marijanović[1], Alan Ivković[5,6]

P-B11: POPULACIJSKA ANALIZA ATLANTSKE PLAVOPERAJNE TUNE, *Thunnus thynnus* (Linaeus, 1758) U KAVEZNOM UZGOJU PRIMJENOM MIKROSATELITNIH LOKUSA.....48
Ivana Radonić

P-B12: INTERPLAY OF RECOMBINATION, PLASMID STABILITY, AND CRISPR-Cas IMMUNITY IN *Escherichia coli*.....48
Marin Radovčić[1], Edward L. Bolt[2], Ivana Ivančić Baće[1]

P-B13: RAZVOJ METODE ANALIZE *N*-GLIKANA KROMATOGRAfiJOM NA IMOBILIZIRANOM HEPARINU I SPEKTROMETRIJOM MASE.....49
Genadij Razdorov[1], Gordan Lauc[1,2]

P-B14: DIVERSITY AND EVOLUTION OF HUMAN RESPIRATORY SYNCYTIAL VIRUS ON1 STRAINS IN CROATIA, 2012-2016.....50
Anamarija Slović[1,2], Jelena Ivančić-Jelečki[1,2], Sunčanica Ljubin-Sternak[3,4], Gordana Mlinarić Galinović[4], Tatjana Vilibić-Čavlek[4,5], Irena Tabain[5], Dubravko Forčić[1,2]

P-B15: NOVA SAZNANJA O RASPROSTRANJENOSTI RIJEČNE KORNJAČE (*Mauremys rivulata*) U HRVATSKOJ.....51
Ana Štih[1], Dragica Šalamon[2]

P-GL1: UZROCI I POSLJEDICE STRESNIH EPIZODA ZABILJEŽENIH U PERMSKIM NASLAGAMA VELEBITA.52
Ana Šimičević

P-OC1: DUGOROČNO ISTRAŽIVANJE SADRŽAJA ORGANSKE TVARI U JADRANSKOM MORU KAO INDIKATOR GLOBALNIH PROMJENA.....53
Jelena Dautović[1], Vjeročka Vojvodić[1], Nataša Tepić[2], Božena Ćosović[1], Irena Ciglenečki[1]*

P-OC2: INTERPRETACIJA FORAMINIFERSKIH ZAJEDNICA SREDNJEG I JUŽNOG JADRANA POMOĆU ODABRANIH GEOKEMIJSKIH POKAZATELJA STANJA SEDIMENTA.....54
Krešimir Markulin[1], Vlasta Ćosović[2], Grozdan Kušpilić[1]

Predavanja 55

Uspješan razvoj inovacija – kako s tehnologijom do tržišta.....55
dr. sc. Vlatka Petrović

Zaštita intelektualnog vlasništva - trendovi i smjernice.....55
dr. sc. Nataša Maršić

Sudionici.....56

Predgovor

Kada je Charles Darwin sa brodom Beagle kretao na putovanje, na kojem je posjetio otočje Galápagos, a koje je rezultiralo teorijom evolucije, Darwin je u biti kretao u nepoznato. Doktorski studiji jesu nadogradnja i jedna vrsta nastavka obrazovanja dodiplomskih i diplomskih studija. Ključna je razlika što, svaki student/studentica doktorskog studija, pri izradi svoje doktorske disertacije istražuje nepoznato (*terra incognita)*. Svaki doktorand dužan je pronaći svoj Galápagos, zemlju u kojoj nitko prije njega ili nje nije bio, i u njemu prepoznati ono novo i nepoznato i objasniti to ostatku svijeta. Proces otkrića je uzbudljiv, jedinstven, često riskantan ali ispunjava zadovoljstvom jednom kad se prebrode sve oluje i na kraju objavi rad. Dragi studenti doktorskih studija Prirodoslovno-matematičkog fakulteta (PMF) Sveučilišta u Zagrebu, ponosite se time što istražujte nepoznato i radosno kročite kroz to putovanje.

PMF po drugi put organizira Simpozij studenata doktorskih studija PMF-a na kojem će sudjelovati studenti sedam doktorskih studija koji djeluju pri PMF-u, a to su: poslijediplomski sveučilišni doktorski studij Biologija, Doktorski studij geografije: prostor, regija, okoliš, pejzaž, poslijediplomski sveučilišni doktorski studij Fizika, poslijediplomski sveučilišni doktorski studij Geologija, poslijediplomski sveučilišni studij poslijediplomski sveučilišni doktorski studij Kemija, poslijediplomski sveučilišni doktorski studij Matematika i interdisciplinarni poslijediplomski sveučilišni doktorski studij Oceanologija.

U okviru Simpozija, 78 istraživača i istraživačica predstavit će znanstvena istraživanja svojim kolegama, mentorima i nastavnicima doktorskih studija te znanstvenicima sa srodnih fakulteta i instituta, u obliku 29 kratkih usmenih priopćenja i 49 posterskih izlaganja.

Osim stjecanja iskustva u prezentiranju znanstvenih rezultata (*soft skills*) i boljem međusobnom upoznavanju doktoranada, cilj ovog simpozija je i doprinijeti interdisciplinarnosti i boljoj povezanosti između odsjeka PMF-a, kao i suradnji sa znanstvenicima iz srodnih disciplina na drugim znanstvenim ustanovama. U ime Znanstvenog i Organizacijskog odbora Simpozija, svim sudionicima zahvaljujem na odazivu i želim uspješan i ugodan dan na PMF-u.

prof. dr. sc. Hrvoje Buljan
prodekan za znanost i doktorske studije

Usmena priopćenja

U-M1: LOKALNO PORAVNAVANJE NIZOVA I SLOŽENA POISSONOVA APROKSIMACIJA

Hrvoje Planinić, Bojan Basrak

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

Promatramo lokalna poravnanja bez praznina dva nezavisna n.j.d. niza slova iz konačne abecede (npr. 4 slova u slučaju DNA nizova), vidi Dembo, Karlin i Zeitouni (1994) i Hansen (2006). Poznato je da, uz odgovarajuće uvjete, broj esencijalno različitih lokalnih poravnanja čiji score (ili ocjena poravnanja) premašuje veliki prag konvergira prema Poissonovoj slučajnoj varijabli. Izravna posljedica je asimptotsko ponašanje maksimalnog score-a što se koristi pri određivanju kritičnih područja kod testiranja sličnosti dva biološka niza.

Pokazat ćemo da broj svih lokalnih poravnanja čiji score premašuje veliki prag, zbog lokalne ekstremalne zavisnosti među score-ovima, konvergira prema složenoj Poissonovoj slučajnoj varijabli. Ovaj rezultat bit će jednostavna posljedica puno općenitijeg rezultata o točkovnoj konvergenciji score-ova zajedno sa njihovim pozicijama. Ostaje istražiti može li taj rezultat pomoći pri konstrukciji novih testova za mjerenje sličnosti dvaju nizova.

1. Dembo, A., Karlin, S., Zeitouni, O., *Ann. Probab.* (1994) 2022-2039.
2. Hansen, N. R., *Ann. Appl. Probab.* (2006) 1262-1296.

U-M2: THETA LIFTOVI IREDUCIBILNIH REPREZENTACIJA METAPLEKTIČKE GRUPE

Petar Bakić[1], Marcela Hanzer[1], Neven Grbac[2]

[1] *Matematički odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Bijenička cesta 30, Zagreb*
[2] *Odjel za matematiku, Sveučilište u Rijeci, Slavka Krautzeka 75, Rijeka*

Velik dio istraživanja u modernoj matematici obuhvaćen je Langlandsovim programom, formuliranim 60ih godina prošlog stoljeća. Ključnu ulogu u njemu imaju posebne funkcije - tzv. automorfne forme - te njima bliske automorfne reprezentacije, pomoću kojih su iskazane neke od najvažnijih tvrdnji Langlandsovog programa. U ovom kontekstu važna je globalna theta korespondencija, jer predstavlja jedan od rijetkih načina direktne konstrukcije automorfnih reprezentacija.

Da bi se razumjela globalna theta korespondencija, potrebno je u potpunosti opisati njezinu lokalnu verziju, koja povezuje reprezentacije različitih grupa - u našem slučaju, metaplektičke i ortogonalne. Proučavanjem lokalne theta korespondencije dobivamo i mnoge vrijedne informacije o reprezentacijama klasičnih grupa nad lokalnim poljima, stoga je ova pojava zanimljiva i sa stanovišta teorije reprezentacija.

Kao i kod većine pitanja u teoriji reprezentacija, theta korespondenciju nije moguće direktno opisati za sasvim općenite reprezentacije; potrebno ju je najprije istražiti uzevši u obzir samo neke posebne klase reprezentacija. U ovom radu koncentriramo se na generičke reprezentacije metaplektičke grupe, čime se nadamo postići važan korak u ukupnom opisu theta korespondencije.

1. Muić, G., *Isr. J. Math.* **164** (2008) 87-124.
2. Atobe, H., Wee Teck G., *Invent. Math.* **210** (2017) 341-415.

U-M3: KONSTRUKCIJA EKSTREMALNIH Z_4-KODOVA TIPA II

Sara Ban, Dean Crnković, Sanja Rukavina

Odjel za matematiku, Sveučilište u Rijeci, Radmile Matejčić 2, Rijeka

Tema usmenog izlaganja je konstrukcija ekstremalnih Z_4-kodova Tipa II. Predstavit ćemo metode za konstrukciju novih ekstremalnih Z_4-kodova Tipa II iz već poznatih ekstremalnih Z_4-kodova Tipa II te metodu za konstrukciju ekstremalnih Z_4-kodova Tipa II iz binarnih kodova koji zadovoljavaju određene uvjete.

Polazeći od poznate metode konstrukcije ekstremalnih Z_4-kodova Tipa II za duljine *n*=24, 32 i 40, razvijena je metoda konstrukcije ekstremalnih Z_4-kodova Tipa II za duljine *n*=48, 56 i 64.

Objasnit ćemo zašto možemo koristiti binarne kodove pridružene Hadamardovim matricama u konstrukciji ekstremalnih Z_4-kodova Tipa II.

1. K. H. Chan, *Three New Methods for Construction of Extremal Type II Z4-Codes*, PhD Thesis, 2012.
2. M. Harada, *Discrete Math.* **340** (2017)2466-2468.
3. M. Harada, *J. Combin. Theory Ser. A* **117** (2010)1285-1288.
4. M. Harada, *Discrete Math.* **311** (2011) 2148-2157.
5. W. C. Huffman, V. Pless, *Fundamentals of Error-Correcting Codes*, Cambridge University Press, 2003.
6. H. Kimura*, Aust. J. Comb.* **10** (1994) 153-162.
7. V. Pless, J. Leon, J. Fields, *J. Combin. Theory Ser. A* **78** (1997) 32–50.
8. V. D. Tonchev, *J. Combin. Theory Ser. A* **52** (1989)197-205.

U-M4: OPTIMIZACIJA PRIGUŠENJA VIBRACIJSKIH SUSTAVA

Matea Puvača, Ninoslav Truhar, Zoran Tomljanović

Sveučilište J.J. Strosmayera u Osijek, Odjel za matematiku, Trg Ljudevita Gaja 6, Osijek

Bit će predstavljen algoritam za određivanje aproksimacije optimalnog prigušenja za sustave sa zadanom strukturom. Pristup se bazira na minimizaciji traga pripadne Lyapunove jednadžbe š to je ekvivalentno minimizaciji ukupne energije sustava. Zadana struktura u našem slučaju znači da je sustav blizu modalno prigušenog sustava. Pristup je vrlo efikasan za sustave koji su blizu modalno prigušenog, a za one sustave koji nisu blizu modalno prigušenog pristup daje dobru aproksimaciju optimalnog prigušenja.

1. N Truhar, Z. Tomljanović, M. Puvača, *Int. J. Numer. Anal. Mod.* **14** (2017) 201-217.
2. M.H. Milman, C.C. Chu, *J. Guid. Control Dynam.* **17** (1994) 848-856.
3. N. Truhar, K. Veselić, *Syst. Control Lett.* **56** (2007) 493-503
4. N. Truhar, Z. Tomljanović, K. Veselić, *App. Math. Comput.* **250** (2015) 270-279.
5. I. Nakić, *Optimal damping of vibrational systems***,** PhD thesis, Fernuniversitat, Hagen,2002.
6. K. Veselić, *Damped Oscillations of Linear Systems, Springer Lecture Notes in Mathematics*, Springer, Berlin, 2011.

U-M5: ROBUSNE NUMERIČKE METODE ZA NELINEARNE PROBLEME SVOJSTVENIH VRIJEDNOSTI

Ivana Šain Glibić

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

Nelinearni problemi svojstvenih vrijednosti $F(\alpha)x = 0$ se prirodno javljaju u primjenama u prirodnim i inžinjerskim znanostima. Npr. Kvadratični problemi $(\alpha^2 M + \alpha C + K)x = 0$ u analizi vibracija mehaničkih sustava, akustici, mehanici fluida; kubični problemi $(\alpha^3 A_3 + \alpha^2 A_2 + \alpha A_1 + A_0)x = 0$ npr. u računanju diskretnog spektra energetskih stanja kod proučavanja poluvodiča itd.

Cilj rada je doprinijeti dubljem razumijevanju numeričke osjetljivosti problema te razviti nove numeričke metode za odabrane klase nelinearnih problema. U radu se promatraju i metode za računanje svih svojstvenih vrijednosti s pripadnim svojstvenim vektorima (direktne metode), i metode za računanje određenog dijela spektra (iterativne metode).
Metode koje se koriste za rješavanje ovih problema su najčešće bazirane na pogodno odabranoj linearizaciji i rješavanju ekvivalentnog linearnog problema. Pri tome, metoda koja rješava linearni problem ne čuva strukturu polaznog problema, što rezultira nizom netrivijalnih problema vezanih za numeričku stabilnost. Na primjer, čak i ako je rješenje lineariziranog problema stabilno unatrag (izračunate aproksimacije su egzaktna rješenja bliskog linearnog problema), to ne vrijedi u terminima originalnog nelinearnog problema. U tom slučaju treba podobno izabrati linearizaciju, te skalirati parametre početnog problema. Iterativne metode se onda definiraju tako da poštuju strukturu linearizacije, te svojstvene parove aproksimiraju svojstvenim parovima manjeg nelinearnog problema umjesto svojstvenim parovima linearnog problema. Pri tome se koriste metode projekcije koje čuvaju strukturu početnog problema, pa time i omogućavaju iskorištavanje informacija koje znamo o strukturi spektra u svrhu što bolje aproksimacije.

1. Hammarling, S., C. J. Munro, F. Tisseur. "An algorithm for the complete solution of quadratic eigenvalue problems. MIMS EPrint 2011.86."*Manchester Institute for Mathematical Sciences. ACM Trans. Math. Softw*(2011).
2. Higham, Nicholas J., Ren-Cang Li, Françoise Tisseur, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.* **29** (2007) 1218-1241.
3. Lehoucq, Richard B., Danny C. Sorensen, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.* **17** (1996)789-821.
4. Bai, Zhaojun, Yangfeng Su, *SIAM J. Matrix Anal.Appl.* **26** (2005) 640-659.
5. Jia, Zhongxiao, Yuquan Sun, Implicitly restarted generalized second-order Arnoldi type algorithms for the quadratic eigenvalue problem, *arXiv preprint arXiv* (2010) *1005.3947*.
6. Lu, Ding, Yangfeng Su, Zhaojun Bai, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.* **37** (2016) 195-214.

U-M6: ANALIZA LINEARNOG PROBLEMA 3D INTERAKCIJE FLUIDA, STENTA I LJUSKE

Sunčica Čanić[1], Marija Galić[2], Boris Muha[2], Josip Tambača[2]

[1]*University of Houston, Houston, USA*
[2]*Matematički odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Bijenička cesta 30, Zagreb*

Proučavamo linearni problem interakcije fluida i strukture u kojem je inkompresibilni, viskozni fluid modeliran pomoću 3d Stokesovih jednadžbi, dok je elastična struktura modelirana kao linearna 2d Koiterova ljuska spojena s 1d mrežom sastavljenom od elastičnih štapova. Motivacija za modeliranje ovog problema dolazi iz proučavanja toka krvi kroz krvne žile tretirane sa stentovima. Interakcija fluida i strukture na kontaknom području opisana je kinematičkim i dinamičkim rubnim uvjetima, te u obzir uzimamo sva tri pomaka strukture. Problem je linearan jer promatramo situaciju u kojoj je tok fluida laminaran i pomak strukture malen, no o brzini pomaka strukture nemamo nikakve pretpostavke. Koristeći 'operator-splitting' metodu dokazujemo egzistenciju slabog rješenja ovog problema.

1. S. Čanić, M. Galović, M. Ljulj, J. Tambača*, SIAM J. Appl. Math*. **77** (2017) 774-769.
2. S. Čanić, M. Galić, B. Muha, J. Tambača, *Analysis of a linear 3d fluid-stent-shell interaction problem*, (2017) preprint
3. B. Muha, S. Čanić, *Arch. Ration. Mech. Anal.* **207** (2013)919-968.

U-M7: POJAČANJA DIRACOVE NEJEDNAKOSTI

Karmen Grizelj

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

Diracova nejednakost veže infinitezimalni karakter i K-tipove unitarnog (g,K)-modula. Vogan uvodi algebarski pojam Diracove kohomologije Harish-Chandrinih modula i formulira slutnju prema kojoj Diracova kohomologija, ako nije 0, određuje infinitezimalni karakter reprezentacije. Slutnju su dokazali Huang i Pandžić i ona je svojevrsno pojačanje Diracove nejednakosti: ako je M unitaran (g,K)-modul i ako u tenzorskom produktu M sa spin modulom S postoji K-tip E na kojem je Diracova nejednakost zapravo jednakost, onda je infinitezimalni karakter modula M jednak K-infinitezimalnom karakteru K-tipa E.
Slutnja Salamance i Vogana kaže da infinitezimalni karakter unitarnog modula M takvog da tenzorski produkt M i S sadrži E mora biti u konveksnoj ljusci translata od E u odnosu na Weylovu grupu. Cilj doktorata je dokazati ovu slutnju barem u nekim slučajevima.

1. S. A. Salamanca-Riba, D. A. Vogan Jr., *Ann. Math.* **148** (1998) 1067-1133.
2. J.-S. Huang, P. Pandžić, *Dirac operators in representation theory*, Birkhäuser, 2006.
3. G. Shimura, *Ann. Math.* **132** (1990) 237-272.
4. A. W. Knapp, D. A. Vogan Jr., *Cohomological induction and unitary representations*, Princeton University Press, 1995.

U-M8: HARNACKOVA NEJEDNAKOST ZA SUBORDINIRANE SLUČAJNE ŠETNJE

Stjepan Šebek[1], Ante Mimica[2]

[1]*Zavod za primijenjenu matematiku, Fakultet elektrotehnike i računarstva, Sveučilište u Zagrebu, Unska 3, Zagreb*
[2]*Matematički odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Bijenička cesta 30, Zagreb*

U slučaju neprekidno-vremenskih Markovljevih procesa, subordinacija je dobro poznata i korisna procedura dobivanja novog procesa od originalnog procesa. Novi proces može se uvelike razlikovati od originalnog procesa, ali svojstva tog novog procesa mogu se razumjeti u terminima originalnog procesa. Najpoznatija primjena ovog koncepta je dobivanje simetričnog stabilnog procesa od Brownovog gibanja. Puno toga je napravljeno vezano uz subordinaciju neprekidno-vremenskih Markovljevih procesa. S druge strane, diskretna subordinacija uvedena je tek 2011. godine i malo toga se zna o subordiniranim slučajnim šetnjama, iako se radi o vrlo prirodnoj tehnici dobivanja novih slučajnih šetnji od postojećih.

U ovom radu promatramo veliku klasu subordiniranih slučajnih šetnji X na cjelobrojnoj rešetci Z^d koje su dobivene korištenjem subordinatora čiji je Laplaceov eksponent potpuna Bernsteinova funkcija koja zadovoljava uvjete skaliranja u nuli. Za dobivene subordinirane slučajne šetnje pronalazimo ocjene za prijelazne vjerojatnosti, Greenovu funkciju i Greenovu funkciju kugle te dokazujemo Harnackovu nejednakost za nenegativne harmonijske funkcije.

1. R. F. Bass, D. A. Levin, *Trans. Amer. Math. Soc.* **354** (2002) 2933-2953.
2. A. Bendikov and W. Cygan, *Alpha - stable random walk has massive thorns*, arXiv:1307.4974v3 (2016).
3. A. Bendikov, L. Saloff-Coste, *Math. Nachr.* **285** (2012) 580-605.
4. P. Kim, R. Song and Z. Vondraček, *Stoch. Proc. Appl.* **124** (2014) 235-267.
5. G. F. Lawler, *Intersections of random walks*, Birkhäuser, 1996.
6. A. Mimica, P. Kim, *Electron. J. Probab.* **37** (2012) 1-23.
7. R. Schilling, R. Song, Z. Vondraček, *Bernstein functions: Theory and applications, 2nd ed.*, De Gruyter, 2012.

U-F1: METAPHASE KINETOCHORE MOVEMENTS ARE REGULATED BY KINESIN-8 MOTORS AND MICROTUBULE DYNAMIC INSTABILITY

Agneza Bosilj[1], Anna H. Klemm[2], Iva M. Tolić[2,3], Nenad Pavin[1]

[1]*Department of Physics, Faculty of Science, University of Zagreb, Bijenička cesta 32, Zagreb*
[2]*Max Planck Institute of Molecular Cell Biology and Genetics, Pfotenhauerstr. 108, 01307 Dresden, Germany; present address: Biomedical Center, LMU Munich, Großhaderner Str. 9, 82152 Planegg-Martinsried, Germany*
[3]*Division of Molecular Biology, Ruđer Bošković Institute, Bijenička cesta 54, Zagreb*

During metaphase, sister chromatids are connected to microtubules (MTs) extending from the opposite spindle poles via kinetochores, protein complexes on the chromosome. Kinetochores congress to the equatorial plane of the spindle and oscillate around it, with kinesin-8 motors restricting these movements. Yet, the physical mechanism underlying kinetochore movements is unclear. We show that kinetochore movements in the fission yeast Schizosaccharomyces pombe are regulated by kinesin-8-promoted MT catastrophe, force-induced rescue and MT dynamic instability. A candidate screen showed that only kinesin-8 motors Klp5/Klp6 are required for kinetochore centering. Our theoretical model with Langevin description of MT dynamic instability shows that kinesin-8 motors are required for kinetochore centering, whereas sensitivity of rescue to force is necessary for the generation of oscillations. We found that irregular kinetochore movements occur for a broader range of parameters than regular oscillations. Thus, our work shows how regulation of MT dynamic instability contributes to kinetochore congression and the accompanying oscillations.

U-F2: ISTRAŽIVANJE POVEZANOSTI KRISTALNE STRUKURE I MAGNETSKOG PONAŠANJA

Filip Torić[1], Damir Pajić[1] , Gordana Pavlović[2], Marina Cindrić[3], Krešo Zadro[1]

[1] *Fizički odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Bijenička 32, Zagreb*
[2] *Tekstilno-tehnološki fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Prilaz baruna Filipovića 28, Zagreb*
[3] *Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Horvatovac 102a, Zagreb*

Metalo-organski kompleksi od posebnog su zanimanja za znanstvenu zajednicu radi temeljnog istraživanja međudjelovanja izmjene magnetskih centara i radi mogućih primjena kao osnovnih građevnih jedinica molekulskih magneta. Sinteza novih kompleksa uznapredovala je na način da je moguće dizajnirati spojeve željene strukture. Poseban je izazov proučavati vezu između strukture i magnetskih svojstava.

U ovom istraživanju sintetiziran je niz od 13 novih tetranuklearnih kompleksa Ni(II) kubana, $[Ni_4L_4(C_nH_{2n+1}OH)(C_mH_{2m+1}OH)]$ (n,m=1,2,3,4,5; L je organski ligand) te je proučavan utjecaj finih strukturnih promjena na magnetsko ponašanje. Magnetsko ponašanje modelirano je spinskim hamiltonijanom koji uključuje međudjelovanje izmjene, cijepanje energijskih razina bez prisutnosti polja (ZFS) i međudjelovanje molekula. Numeričkom prilagodbom i simulacijama utvrđeno je da opaženi visoki maksimumi krivulja $\chi T(T)$ potječu od osnog doprinosa ZFS te su dobiveni i drugi parametri magnetskih međudjelovanja.

Pokazane su korelacije između parametara magnetskih međudjelovanja i tri strukturna parametra: prosječnog Ni1-O-Ni2 kuta, prosječnog kuta između O-Ni-O ravnina i prosječnog kuta između O-Ni1-O ravnine i Ni1-Ni2 vektora. Utvrđeno je da se finom promjenom strukture ugradnjom različitih liganada može utjecati na parametre magnetskih međudjelovanja i promjenu osnovnog stanja.

U-F3: IMPLICITNA JEDNADŽBA STANJA KOZMIČKIH FLUIDA I MODELI TAMNE ENERGIJE, TAMNE MATERIJE I NJIHOVOG UJEDINJENJA

Dalibor Perković

Zdravstveno veleučilište, Mlinarska 38, Zagreb

Ubrzano širenje svemira jedno je od ključnih otkrića u modernoj kozmologiji. Iako se na tom problemu radi već dva desetljeća, još uvijek nema empirijski potvrđene teorije koja bi na zadovoljavajući način objasnila ovu pojavu. U ovom radu razvija se nova metodologija modeliranja tamne energije preko implicitne jednadžbe stanja kozmičkog fluida, poput modeliranja brzine zvuka kao funkcije parametra jednadžbe stanja kozmičkih fluida.
Ispituju se svojstva tamne energije u dobivenim modelima poput tranzijentne tamne energije i budućih singulariteta u širenju svemira. Proučava se ujedinjenje tamne materije i tamne energije u dobivenim modelima i sukladnost s podacima iz kozmoloških opažanja. Modeliraju se i proučavaju funkcije raspodjele gustoće za sferno simetrične strukture kao model lokalnih koncentracija ujedinjenog tamnog fluida koje prožimaju velike strukture vidljive materije u svemiru i dobiveni rezultati se uspoređuju s rezultatima empirijskih opažanja.

U-K1: IZOPENTENIL-DIFOSFAT-FOSFOHIDROLAZA: NOVI ENZIM METABOLIZMA IZOPRENOIDA U BILJAKA?

Zrinka Karačić[1], Iva Pavlović[2], Ondřej Novák[3], Branka Salopek Sondi[2]

[1]*Laboratorij za biokemiju proteina i molekulsko modeliranje, Zavod za organsku kemiju i biokemiju, Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, Zagreb*
[2]*Laboratorij za kemijsku biologiju, Zavod za molekularnu biologiju, Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, Zagreb*
[3]*Laboratory of Growth Regulators, Centre of the Region Haná for Biotechnological and Agricultural Research, Institute of Experimental Botany AS CR & Faculty of Science of Palacký University, Šlechtitelů 27, Olomouc, Češka*

Izopentenil-difosfat (IPP) je osnovna građevna jedinica izoprenoida i jedan od centralnih metabolita u biljaka. Spojevi čija sinteza počinje jedinicom IPP i njegovog izomera dimetilalil-difosfata (DMAPP) uključuju karotenoide, klorofile i sterole, a od biljnih hormona abscizinsku kiselinu, gibereline i citokinine, između ostalih. Biljke su jedini organizmi koji imaju dva različita i organelama odvojena puta sinteze IPP, što ukazuje na iznimnu važnost izoprenoida za ove organizme. Iako su osnovni mehanizmi sinteze IPP detaljno opisani za razne organizme, u biljkama se još uvijek pronalaze novi enzimi koji sudjeluju u sintezi izoprenoida i njenoj regulaciji, kao što je na primjer izopentenil-fosfat-kinaza.[1] Njena suprotnost, izopentenil-difosfat-fosfohidrolaza, je enzim koji smo nedavno okarakterizirali na primjeru rekombinantnih proteina iz mahovine *Physcomitrella patens* i uročnjaka, *Arabidopsis thaliana*.[2] Riječ je o atipičnoj fosfatazi iz superobitelji Nudix hidrolaza, s kojom je na C-kraju fuzionirana dipeptidil-peptidaza III. Premda su naši rezultati trenutno ograničeni na *in vitro* istraživanja, IPP je najbolji supstrat ovog enzima od 73 spoja koja smo testirali. Osim toga, druga recentna istraživanja ukazuju da bi naši biokemijski rezultati mogli biti fiziološki relevantni, te otvaraju nove smjerove istraživanja. Naš cilj je uz pomoć biokemije, strukturne biologije, biljne fiziologije i metabolomike ispitati jesmo li zaista pronašli izopentenil-difosfat-fosfohidrolazu. U tu svrhu koristimo mahovinu *Physcomitrella patens* kao modelni organizam. Preliminarni podaci na *knock-out* mutanti *P. patens* indirektno potvrđuju da su IPP i DMAPP zaista fiziološki supstrati ovog enzima. Također, zaključujemo da je izopentenil-difosfat-fosfohidrolaza uključena u metabolizam citokinina.

1. Henry, L. K. et al., *Proc. Natl Acad. Sci. USA* **112** (2015) 10050–10055.
2. Karačić, Z. et al., *Biol. Chem*. **398** (2017) 101–112.

U-K2: ODRŽIVOST MOTIVA HALOGENSKE VEZE PRI KOKRISTALIZACIJI AMINÂ, IMINÂ I NJIHOVIH KOORDINACIJSKIH SPOJEVA S PERFLUORIRANIM AROMATIMA

Vinko Nemec, Dominik Cinčić

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

U ovome radu istraživana je mogućnost izgradnje binarnih krutina, metaloorganskih materijala povezanih halogenskom vezom. Dosadašnja istraživanja u tom području uglavnom su bila usmjerena prema korištenju jednostavnih anionskih liganada (npr. klorida, cijanida, tiocijanata) kao akceptora halogenske veze.[1] Nasuprot tome, rjeđe su istraživani sustavi u kojima se koriste neutralni koordinacijski spojevi s periferijom dostupnom halogenskoj vezi. Iz navedenih je razloga jedan od glavnih ciljeva ovog istraživanja bio dizajnirati, sintetizirati i okarakterizirati takve sustave. Budući da je za uspješnost kristalnog inženjerstva binarnih krutina nužno poznavati može li odabrana funkcijska skupina pouzdano tvoriti supramolekulske motive halogenske veze, postavljena je pretpostavka da metaloorganski građevni blokovi kao i njihovi jednostavniji prekursori od kojih su sačinjeni (imini i amini) mogu sudjelovati kao akceptori halogenske veze u stvaranju istih supramolekulskih motiva.

U tu svrhu smo temeljem literaturnih podataka odabrali jedanaest amina, uglavnom aromatskih, koji sadrže i funkcijske skupine za koje smo pretpostavili da će biti dobri akceptori halogenske veze (kisikov atom nitro-, metoksi- i karbonilne skupine, te morfolinskog fragmenta, piridinski dušikov atom). Iz njih

smo kondenzacijom s 2-hidroksi-1-naftaldehidom izveli imine. Pripravljeni imini korišteni su dalje u sintezi koordinacijskih spojeva bakra(II). Mogućnost nastajanja halogenske veze odnosno sinteza kokristala aminâ,[2] iminâ i njihovih koordinacijskih spojeva[3] s perfluoriranim aromatima, kao donorima halogenske veze, pretražena je tekućinom potpomognutim mljevenjem. Pretraživanje mogućnosti kokristalizacije je popraćeno difrakcijom rendgenskog zračenja u polikristalnom uzorku. U slučajevima gdje je ustvrđeno da dolazi nastajanja novih tvari, provedeni su i eksperimenti kristalizacije istih produkata iz otopine. Ti su produkti zatim okarakterizirani termičkim metodama te difrakcijom rendgenskog zračenja u jediničnom kristalu. Iz iminâ čiji su koordinacijski spojevi bakra(II) dali kokristale izvedeni su također i koordinacijski spojevi nikla(II), kobalta(II) i cinka, te su analogno ispitane njihove mogućnosti kokristalizacije i svojstva.

1. Groom, C. R.; Bruno, I. J.; Lightfoot, M. P.; Ward, S. C., *Acta Crystallogr., Sect. B* **72** (2016) 171–179.
2. Nemec, V.; Cinčić, D., *CrystEngComm* **18** (2016) 7425–7429.
3. Nemec, V.; Fotović, L.; Friščić, T.; Cinčić, D., *Cryst. Growth Des.* **17** (2017) 6169–6173.

U-K3: NEW UNCHARGED POTENT REACTIVATORS OF ACHE AND BCHE INHIBITED BY NERVE AGENTS

Tamara Zorbaz[1], Anissa Braïki[2], Nikola Maraković[1], Maja Katalinić[1], Julien Renou[2], Ludovic Jean[2], Pierre-Yves Renard[2] and Zrinka Kovarik[1]

[1]*Institute for Medical Research and Occupational Health, Ksaverska cesta 2, Zagreb*
[2]*Normandie Univ., COBRA, UMR 6014 & FR 3038, Univ. Rouen, INSA Rouen, CNRS, 1 Rue Tesnières, 76821 Mont-Saint-Aignan Cedex, France*

Intoxication by organophosphorus nerve agents (OPNA; e.g. sarin, cyclosarin, tabun, VX) leads to the irreversible inhibition of enzymes acetylcholinesterase (AChE, E.C. 3.1.1.7.) and butyrylcholinesterase (BChE, E.C. 3.1.1.8). This inhibition causes acetylcholine accumulation in the peripheral and central nervous system synapses, leading to a cholinergic crisis (miosis, headache, dyspnoea, ocular impairments, excessive secretion, fasciculations, etc.). The most prominent symptoms with a possible lethal outcome are respiratory failure and seizures, but those who survive can also experience long-term neurological impairments, e.g. cognitive and behavioural incapacitations. The antidote treatment comprises an antimuscarinic drug, an oxime reactivator and an anticonvulsive drug. Standard reactivators (e.g. 2-PAM, HI-6, LüH-6) are not efficient for every OPNA, and since they have positively charged quaternary nitrogen in their structures, they cross the brain-blood barrier poorly. We synthesised and evaluated novel uncharged and therefore possibly centrally active reactivators. They showed a highly promising *in vitro* reactivation profile for VX-inhibited AChE/BChE, sarin-inhibited AChE and cyclosarin-inhibited BChE. Using molecular docking, the possible interactions that these oximes form with the amino acid residues in the active site gorge of the enzymes near the covalently linked OPNA, were detected. Additionally, *in silico* determined physicochemical properties (e.g. lipophilicity, polar surface area, number of hydrogen bond donors and acceptors, rotatable bonds, pK_a values) implied that these novel oximes were likely to be centrally active. On the other side, the higher lipophilicity is connected with a higher probability of accumulation in different tissues and therefore could lead to adverse effects. Further evaluation of these novel reactivators' *in vivo* efficacy is needed, as well as evaluations of their pharmacokinetic and toxicological profiles.

Acknowledgment: This work was supported by the COGITO Croatian-French bilateral grant (2015-2016; PIs: Z. Kovarik and L. Jean) and by the Croatian Science Foundation (4307, PI: Z. Kovarik).

U-K4: KINETIKE KEMIJSKIH REAKCIJA AROMATSKIH DINITROZO SPOJEVA U ČVRSTOM STANJU

Petar Bibulić, Igor Rončević, Ivana Biljan, Hrvoj Vančik

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

Dimerizacija aromatskih nitrozo spojeva koristan je modelni sustav za praćenje kemijskih reakcija u čvrstom stanju. Nitrozo spojevi u čvrstom stanju uglavnom su prisutni u obliku *E*- ili *Z*- azodioksida (dimera), dok je monomere moguće dobiti UV ozračivanjem u kriogenim uvjetima ili depozicijom para monomera na hladnu površinu. Način priprave uvjetuje molekulsko uređenje monomera, što se očituje preko brzine ponovne dimerizacije.[1]

Kinetike reakcija u čvrstom stanju najčešće se opisuju empirijskim modelima koji se prema obliku krivulje mogu grupirati u ubrzavajuće, usporavajuće ili sigmoidalne. Kako su reaktanti i produkti u pravilu prisutni u različitim fazama, reakcije u čvrstom stanju praćene su faznim promjenama što dodatno otežava kinetičku obradu. Nedavno su se pored empirijskih modela počeli koristiti i mehanistički modeli, koji su ekvivalentni mehanističkim modelima u plinskoj ili tekućoj fazi, ali umjesto opisa pojedine kemijske pretvorbe opisuju prosječnu reakciju. Jedan od najpoznatijih empirijskih modela je Avrami-Erofeev model koji je ekvivalentan mehanističkom Finke-Watzky modelu u dva koraka.[2] Prvi korak Finke-Watzky modela je klasična reakcija prvog reda, dok je drugi korak autokatalitičko nastajanje produkta.[3]

Gore navedeni pristupi temelje se na odabiru modela koji, uz određene pretpostavke, najbolje opisuje eksperimentalne podatke. Osim takvih metoda, kinetikama reakcija u čvrstom stanju moguće je pristupiti i izokonverzijskim metodama. Izokonverzijske metode ne uvode nikakvu pretpostavku o modelu ili mehanizmu kojim se reakcija odvija. Glavna pretpostavka izokonverzijskih metoda je da konstanta brzine reakcije pri određenom udjelu pretvorbe (dosegu reakcije) ovisi samo o temperaturi.[4] Nedostatak izokonverzijskih metoda je njihovo ograničenje na reakcije koje je moguće opisati samo jednim ili više odvojenih reakcijskih koraka, dok nisu prikladne za kompleksnije reakcijske mehanizme. Prednost je veći temperaturni raspon što osigurava pouzdano određivanje brzine i pri samom početku i kraju reakcije.

Navedenim metodama ispitane su reakcije aromatskih dinitrozo spojeva, od jednostavnih reakcija u jednom koraku pa sve do složenijih paralelnih reakcija i *E-Z* izomerizacija.

1. I. Halasz, E. Meštrović, H. Čičak, Z. Mihalić, H. Vančik, *J. Org. Chem*. **70** (2005) 8461-6467.
2. M. Avrami, *J. Chem. Phys.* **7** (1939) 1103-1112.
3. E. E. Finney, R. G. Finke, *Chem. Mater.* **21** (2009) 4468-4479.
4. S. Vyazovkin, A. K. Burnham, J. M. Criado, L. A. Pérez-Maqueda, C. Popescu, N. Sbirrazzouli, *Thermochim. Acta* **520** (2011) 1-19.
Acknowledgement: This work is funded by the Croatian Science Foundation, project HRZZ-7444.

U-K5: DEFORMACIJA KRISTALNE REŠETKE KALCITA IZAZVANA HIPERVISOKIM TLAKOM. USPOREDBA DIFRAKTOGRAMA ŠOKIRANIH VAPNENACA S KRKA I IZ VISOKOG ATLASA (MAROKO)

Marina Čalogović, Tihomir Marjanac

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

Hiperbrzinski impakti (sudari planete Zemlje s asteroidima) izazivaju tlakove u rasponu od 20 do 60 GPa koji se šire kroz stijene na mjestu udara i izazivaju šok-metamorfizam u zahvaćenim stijenama i mineralima koji se manifestira njihovom pretvorbom u visokotemperaturne i visokotlačne polimorfe, deformacijama kristalne rešetke i pretaljivanjem u amorfnu fazu. Šok-deformacije u silikatnim mineralima su dobro poznate i služe za određivanje vršnog tlaka, ali su u karbonatnim mineralima rijetko istraživane, prvenstveno zbog optičkih svojstava kalcita koji prikrivaju efekte šokiranosti. Hipervisokotlačne deformacije elementarne rešetke na šokiranom kalcitu uočene su na difraktogramima

praha iz kratera Ries u Njemačkoj (Skála 2002), a manifestiraju se proširenjem "pikova" na difraktogramu. Naše istraživanje obuhvatilo je uzorke iz predložene impaktne strukture na otoku Krku (Marjanac et al. 2003) i impaktne strukture Agoudal u marokanskom Visokom Atlasu (Lorenz et al. 2015). Difraktogrami praha su pokazali proširenje pojedinih "pikova" i njihov pomak prema većem ili manjem kutu 2Θ što je posljedica deformacije elementarne rešetke kalcita. Publicirani podatci za šokirani kalcit iz kratera Ries (Skála 2002) pokazuju proširenje "pika" od 30%, a rezultati mjerenja na uzorcima s Krka pokazuju veće proširenje (38-140%). Usporedba difraktograma uzoraka s različitih mjesta u strukturi Agoudal ukazuje na promjenu stupnja šokiranosti, što pripisujemo opadanju tlaka u stijenama s udaljavanjem od središta impaktne strukture.

1. Lorenz, C. A., Ivanova, M. A., Artemieva, N. A., Sadilenko, D. A., Chennaoui Aoudjehane, H., Roschina, I. A., Korochantsev, A.V., Humayun, M., *Meteorit. Planet. Sci.* **50** (2015) 112–134.
2. Marjanac T., Tomša A.M., Marjanac Lj., *Krk-breccia, Possible Impact-Crater Fill, Island of Krk in Eastern Adriatic Sea (Croatia)* u: H. Dypvik, M. Burchell, P. Claeys (eds.), *Cratering in Marine Environments and on ice, Impact Studies*, Springer, Berlin, 2003, 115-134.
3. Skála R., *Bull. Czech Geol. Surv.* **77** (2002) 313-320.

U-K6: KAKO NEAKTIVNI KONJUGATI AUKSINA IZAZIVAJU INHIBICIJU RASTA KORIJENA: ULOGA AUKSIN-AMIDOHIDROLAZA I POSLJEDIČNA DISTRIBUCIJA AUKSINA U KORIJENU

Ana Smolko[1], Aleš Pěnčík[2,3], Iva Pavlović[1], Branka Salopek-Sondi[1]

[1] *Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, Zagreb*
[2] *Centar regije Haná za biotehnološka i agrikulturna istraživanja, Institut za eksperimentalnu botaniku, Akademija znanosti Republike Češke (AS CR), Olomouc, Češka*
[3] *Prirodoslovni fakultet, Palacký Sveučilište, Olomouc, Češka*

Auksini su biljni hormoni koji kontroliraju niz različitih procesa biljnog rasta i razvitka te prilagodbe na promjenjive okolišne uvjete. Dok pri niskim koncentracijama potiču rast, u visokim koncentracijama često djeluju inhibitorno. Stoga je za razvoj biljaka izuzetno važna kontrola koncentracije auksina u biljnim tkivima. Jedan od procesa homeostaze je reverzibilna konjugacija, tj. proces sinteze inaktivnih auksinskih konjugata, koji se prema potrebi mogu hidrolizirati u aktivnu formu djelovanjem auksin-amidohidrolaza , metalopeptidaza koje pripadaju M20 potporodici. Auksin-amidohidrolaze iz kineskog kupusa (BrIAR3 I BrILL2) biokemijski su okarakterizirane[1] te je pokazano da preferiraju aminokiselinske konjugate dugolančanih auksina: indolil-3-propionske i indolil-3-maslačne kiseline (IPA-Ala i IBA-Ala), u odnosu na konjugate s IAA (IAA-Ala)[1], iako postojanje tih supstrata nije potvrđeno za sada u tkivima kineskog kupusa (*Brassica rapa*). Dugolančani auksini IBA i IPA identificirani su u tkivima klijanaca *B. rapa* uslijed tretmana klijanaca s IBA i IPA konjugatima, što potvrđuje hidrolizu tih konjugata *in vivo*. Analize auksina tekućinskom kromatografijom visoke djelotvornosti (UHPLC-MS/MS), dale su nam uvid u homeostazu auksina po tretmanu sa gore spomenutim aminokiselinskim konjugatima.[2] Nadalje, koristeći transgenične linije uročnjaka (*Arabidopsis thaliana*), reportere auksina, praćena je akumulacija i distribucija auksina *in vivo* uslijed tretmana s konjugatima auksina (IBA-Ala, IPA-Ala i IAA-Ala) konfokalnom mikroskopijom na osnovu aktivnosti promotora *DR5::GFP.*[3,4] Distribucija auksina u korijenu *DR5::GFP* linije *A. thaliana* po tretmanu konjugatima IAA-Ala, IBA-Ala i IPA-Ala omogućuje nam objašnjenje učinka istih konjugata na rast korijena klijanaca *B.rapa*.

1. Savić, B. *et al.*, *Plant Cell Physiol.* **50** (2009)1587-1599.
2. Novák, O. et al., *Plant J. 72* (2012) 523–536.
3. Benkova, E. *et al*., *Cell* **115** (2003) 591-602.
4. Friml, J. *et al*., *Nature* **426** (2003):132-135.

U-K7: RAZVOJ SMJERNICA ZA PRIJENOS ODABRANIH SUPRAMOLEKULSKIH SINTONA IZ ORGANSKIH U METALO-ORGANSKE SUSTAVE

Mladen Borovina, Ivan Kodrin, Marijana Đaković

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

Krajnji cilj kristalnog inženjerstva je ostvarivanje specifičnih supramolekulskih topologija u čvrstom stanju koje će rezultirati željenim fizikalnim i kemijskim svojstvima priređenih materijala. Kako bismo bili u mogućnosti prirediti krutine sa željenim načinom supramolekulskog povezivanja nužno je izvesti strategije za supramolekulsko samoudruživanje odabranih molekulskih građevnih blokova. U tu svrhu, nužno je za pojedine funkcionalne skupine identificirati i kvantificirati ponavljajuće obrasce njihovog međumolekulskog povezivanja.[1] Do sada je većina istraživanja u području kristalnog inženjerstva provedena na organskim kristalnim strukturama, iako su metalo-organski sustavi od velikog interesa zbog raznih svojstava (poput katalitičkih, optičkih, magnetnih i fotokemijskih) koja nisu dostupna ili su puno teže ostvariva u čisto organskim sustavima. Kontrolirani dizajn metalo-organskih sustava općenito je zahtjevniji od organskih jer su metalo-organski sustavi inherentno strukturno kompleksniji te zahtijevaju dodatnu pažnju kod planiranja supramolekulske radi kompenzacije pozitivnog naboja metala.[2] Uistinu jedna od većih poteškoća je upravo neutralizacija destruktivnog utjecaja protuiona na ciljane supramolekulske motive.

Cilj našeg istraživanja je utvrditi kako se određeni supramolekulski sintoni, koji su se pokazali robusnima u organskim sustavima, mogu prenijeti u metalo-organske sustave, te utvrditi smjernice kojima će se maksimalizirati uspješnost tog prijenosa. Kao modelne sustave koristimo β-diketonato komplekse Co^{II}, Ni^{II} i Cu^{II} s ligandima koji sadrže funkcionalne skupine čije supramolekulske sintone želimo prenijeti. β-Diketonati su odabrani kao ligandi koji će kompenzirati naboj metalnog centra te, koordiniranjem na izabrane metalne katione, preferencijalno tvore oktaedarske komplekse. Uz to, β-biketonati nude i mogućnost finog podešavanja elektrostatskog potencijala na kisikovim atomima, potencijalnim akceptorima vodikovih i halogenskih veza.[3] Kao ligandi preko čijih funkcionalnih skupina očekujemo suprmolekulsko povezivanje metalo-organskih građevnih blokova, korišteni su pirimidin-4-on i quinazolin-4-on (za istraživanje prijenosa motiva vodikovih veza) te halo-piridini (za izučavanje ostvarivanje halogenskih veza u metalo-organskoj sredini).

1. G.R. Desiraju, *Angew. Chem. Int. Ed.* **34** (1995) 2311; M. C. Etter, *Acc. Chem. Res.* **23** (1990) 120.
2. M. Đaković, D. Vila-Viçosa, M. José Calhorda, Z. Popović, *CrystEngComm*, **13 (**2011) 5863; (b) M. Đaković, D. Vila-Viçosa, N.A.G. Bandeira, M. José Calhorda, B. Kozlevčar, Z. Jagličić, Z. Popović, *CrystEngComm* **15 (**2013) 8074.
3. M. Borovina, I. Kodrin, M. Đaković, *CrystEngComm* (2017) u postupku objavljivanja, doi: 10.1039/c7ce01989k

U-B1: EPIGENETIČKA REGULACIJA GENA *BACH2* I NJEGOVA ULOGA U GLIKOZILACIJI IMUNOGLOBULINA G

Marija Klasić[1], Aleksandar Vojta[1], Melanija Posavec Marjanović[1], Ivan Biruš[1], Irena Trbojević Akmačić[2], Gordan Lauc[2,3], Vlatka Zoldoš[1]

[1]*Biološki odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Horvatovac 102a, Zagreb*
[2]*Genos d.o.o. za vještačenje i analizu, Vatrogasna 112, Osijek*
[3]*Farmaceutsko-biokemijski fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Ante Kovačića 1, Zagreb*

Cijelogenomske studije povezanosti (GWAS) povezale su gen *BACH2* s upalnim bolestima crijeva (IBD) i glikozilacijom imunoglobulina G (IgG). Upalne bolesti crijeva karakterizira poremećen imunološki odgovor na antigene crijevne mikroflore. Još uvijek nisu u potpunosti razjašnjeni molekularni mehanizmi nastanka i progresa bolesti, odnosno njihova genetička i epigenetička pozadina. Molekule IgG, kao važan dio imunog sustava, uključene su u patogenezu ovih bolesti. Ovisno o N-glikozilaciji na Fc regiji, molekule IgG mogu imati proupalnu ili protuupalnu ulogu te obavljati različite funkcije. Protein BACH2 ključni je transkripcijski faktor koji regulira ekspresiju mnogih gena specifično eksprimiranih u B limfocitima, te ima bitnu ulogu pri njihovoj diferencijaciji u plazma stanice koje luče IgG. Da bih utvrdila dolazi li do promjene metilacijskog statusa gena *BACH2* u pacijenata oboljelih od upalnih bolesti crijeva, analizirala sam CpG metilaciju unutar pet regija tog gena u krvi 300-400 pacijenata te odgovarajućih zdravih kontrola iz dviju neovisnih kohorti. Također, iz krvi manjeg broja pacijenata izolirani su B limfociti te je analiziran stupanj metilacije promotora *BACH2*. Razina metilacije statistički se značajno razlikovala za pojedina CpG mjesta unutar promotora gena *BACH2* između pacijenata i zdravih kontrola u obje neovisne kohorte, kao i u B limfocitima. U plazmi istih pacijenata analizirani su glikani na Fc regiji imunoglobulina G te su korelirani podaci metilacije promotora *BACH2* i IgG glikozilacije.

U-B2: 'BOLD SYSTEMS' I EVOLUCIJA MONAŠKIH SKAKAVACA (ORTHOPTERA: TETRIGIDAE): BATRACHIDEINAE KAO ZASEBNA PORODICA?

Josip Skejo,[1,2] Damjan Franjević[1]

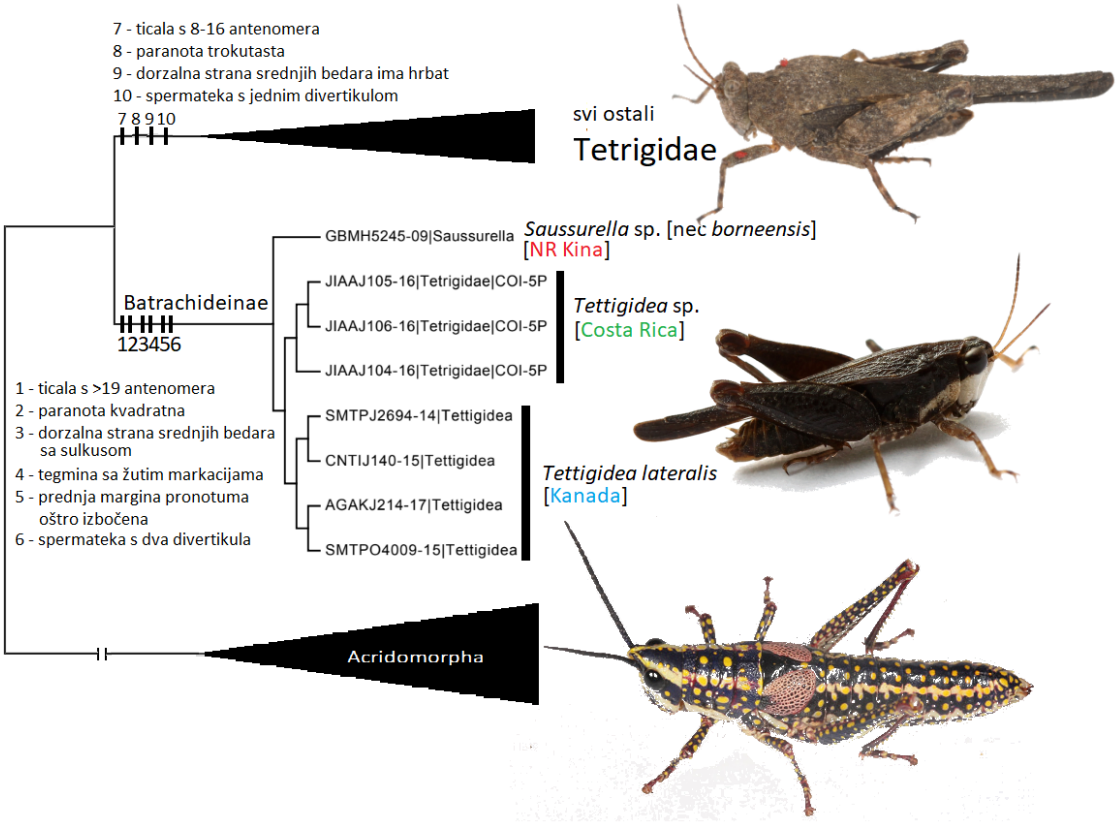
[1] *Biološki odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Rooseveltov trg 6, Zagreb*
[2]*SIGTET – Special Interest Group Tetrigidae*

Red skakavaca i zrikavaca (Orthoptera) broji 28 tisuća vrsta raznovrsnih niša, od fosorijalnih do arborealnih. Pretci današnje raznolikosti živjeli su prije 300 milijuna godina. Skakavci (Caelifera) se od dugoticalaca zrikavaca (Ensifera) razlikuju po ticalima s <30 antenomera. Ženke skakavaca, za razliku od zrikavaca, nemaju dugu leglicu. Dijagnostička su svojstva monaških skakavaca (Tetrigidae: 1900 vrsta, 270 rodova) dugi pronotum, tarzalna formuli 2-2-3 i sternomentum. Porodica potječe iz trijasa (Song et al. 2015).

Dosadašnja sistematika porodice temelji se na nekoliko morfoloških svojstava i nije značajno mijenjana otkad su Bolívar [1] i Hancock [1, 2] ustanovili tadašnje sekcije, današnje potporodice (najveće su Batrachideinae, Cladonotinae, Metrodorinae, Scelimeninae, i Tetriginae). Cilj je rekonstrukcija evolucije trnovratki. Interpretiramo evoluciju COI barcode regije iz do sada pohranjenih javnih podataka s baze 'BOLD Systems' (308 sekvenci, 52 BINs, 18 zemalja, svi kontinenati osim Antarktike, 283 determinirane sekvence – 52 vrste). Vanjsku su grupa pravi skakavaci (Acridomorpha: Acrididae). Poravnjanje je napravljeno programu Clustal Omega. Filogenetske analize (izrada stabla: Bayesian - BA, Maximum Likelihood – ML i Maximim Parsimony – MP, i bootstraping) napravljene su u PAUP* 4.0 (MP, ML), MEGA (MP), i BEAST-u (BA). Nakon poravnanja 30ak je sekvenci eliminirano, a ostalo je oko 400 varijabilnih mjesta.

Potporodica Batrachideinae sestrinska je ostalim potporodicama i može se smatrati porodicom . Ovo podržavaju morfološke i anatomske sinapomorfije (Slika 1.). Unutar preostalih taksi situacija nije jasna. Iako je u BOLD-u i dosta netočnih determinacija (već kritizirano u [4]) i premalo taksi zastupljeno, predstavljamo neke vidljive hipoteze i preliminarne zaključke. Rod *Tetrix* Latreille, 1802 je polifiletski.

Potrebna je kako taksonomska revizija, tako i istraživanje zašto se baš ovakva morfologija pojavljuje u toliko evolucijski odvojenih skupina i kako pruža selektivnu prednost. Tribusi Thoradontini i Criotettigini su sinonimi, a rodovi jugoistočne Azije s jasnim apomorfijama koji pripadaju tribusima formiraju monofiletsku skupinu Definiranje srodstvenih odnosa po *a priori* odabranim svojstvima nije dobro.



Slika 1. Simplificirani koncenzus kladogram bez bootstrap vrijednosti dobiven u MEGA-i, metodom ML. Za vanjsku grupu je prikazana skupina Acridomorpha, a na grane potporodice Batrachideinae i svih ostalih potporodica izlistane su apomorfije skupine. Uz grupe su prikazani i predstavnici pojedinih grupa – od gore prema dolje Tetrigidae: Metrodorinae: *Crimisus* sp. (Ekvador: Loja: Cerro Toledo 3000 m n.v. , Foto: G. Montgomery – Izvor: Flickr), Tetrigidae: Batrachideinae: *Tettigidea l. lateralis* (Say, 1824) (SAD: Maryland: Harmans park, Foto: B. Woo – Izvor: Flickr), Pyrgomorphidae: Pyrgomorphinae: *Greyacris profundesulcata* (Carl, 1916) (Australia: Queensland: Chillagoe, Foto: Mr Smiley – Izvor: Flickr).

1. Bolívar, I., *Ann. Soc. Entomol. Belg.* **31** (1887) 175-313.
2. Hancock, J. L., *Orthoptera Fam. Acridiidae. Subfam. Tetriginae*, u Wytsman, P. (ed.) *Genera Insectorum*, Vol. 48, V. Verteneuil & L. Desmet, Bruxelles, 1907, 1–79.
3. Hancock, J.L., *Trans. Entomol. Soc. London* **56** (1909) 387–426.
4. Lehmann, A., Devriese, H., Tumbrinck, J., Skejo, J., Lehmann, G.U.C., Hochkirch, A., *Zookeys* **679** (2017) 139-144.

U-B3: VODENGRINJE (HYDRACHNIDIA) KAO KLJUČNE SASTAVNICE I DESKRIPTORI LIMNOKRENIH I REOKRENIH KRŠKIH IZVORA HRVATSKE

Ivana Pozojević, Sanja Gottstein

Biološki odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Rooseveltov trg 6, Zagreb

Vodengrinje čine značajan udio u ukupnoj brojnosti jedinki i vrsta makroskopskih beskralješnjaka krenala. Istraživanja provedena na ovoj skupini, koja ima izniman broj obligatnih krenobionata, u Hrvatskoj su malobrojna te se odnose uglavnom na nove nalaze, dok radovi o ekologiji i rasprostranjenosti u potpunosti izostaju. Krški izvori jedinstvenog su sastava zajednica beskralješnjaka, specifične strategije kruženja hranjivih tvari te složeno ustrojenih hidro- i geomorfoloških obilježja. Ideja

doktorske disertacije bila je specifičnom metodologijom uzorkovanja (baziranom na procjeni udjela mikrostaništa i njihovom zasebnom obradom) te istraživanjem specifične indikatorske skupine (vodengrinja) pružiti mogućnost razvijanja novih modela pri ocjenama stanja krških izvora Hrvatske te omogućiti buduću primjenjivost rezultata u biomonitoringu. Otkriven je obrazac sezonskih dinamika različitih svojti vodengrinja. Dinamika pojedinih svojti u diskrepanciji je sa dosadašnjim podacima. Otkrivena je značajna razlika u temporalnoj raspodjeli, životnim ciklusima i strategijama prezimljavanja vodengrinja između gorskih i mediteranskih krških izvora Hrvatske. Ova doktorska disertacija daje prvi opis ekoloških interakcija ove skupine na području Hrvatske. Opisana je povezanost pojedinih svojti s fizikalno-kemijskim (okolišnim) parametrima te zajednice pojedinih svojti s promjenama istih. Dobiven je uvid u strategiju preživljavanja ove skupine u tri tipa izvora: i)stalni, ii) sa sporadičnim presušivanjem te iii) krški izvor koji redovno (periodički) presušuje. Predstavljen je novi biotički indeks koji u svojem vrednovanju ekološkog stanja kakvoće koristi skupinu vodengrinja dokazanu kao iznimno vrijedan biološki indikator.

U-B4: PREŽIVLJAVANJE KLINIČKI ZNAČAJNE BAKTERIJE *Acinetobacter baumannii* U VODENIM MEDIJIMA RAZLIČITIH TEMPERATURA I VRIJEDNOSTI pH

Svjetlana Dekić, Jasna Hrenović, Tomislav Ivanković

Biološki odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Rooseveltov trg 6, Zagreb

Bakterija *Acinetobacter baumannii* je oportunistički patogen koji izaziva infekcije imunosuprimiranih ljudi u bolničkom i izvanbolničkom okružju. Pojava sojeva višestruko rezistentnih na antibiotike te otpornost na dezinficijense i isušivanje čini ovu bakteriju velikom prijetnjom za ljudsko zdravlje. Svrstana je među „ESKAPE“ patogene za koje je potrebno pronaći nove terapijske metode te se nalazi na prvom mjestu WHO liste opasnih patogena. *A. baumannii* smatrao se isključivo bolničkim patogenom sve do nedavnog pronalaska u okolišu. Do danas je nepoznato koji ekološki čimbenici i u kojoj mjeri utječu na *A. baumannii*. Cilj rada bio je istražiti učinak temperature (-20, 4, 22, 35, 44, 50, 63°C) i pH vrijednosti (2, 5, 7, 10, 12 pri 22°C) na preživljavanje *A. baumannii* u komercijalnoj prirodnoj izvorskoj vodi i u vodi obogaćenoj nutrijentima (razrijeđeni 1:100 *Nutrient broth*) kako bi mogli predvidjeti ponašanje *A. baumannii* u okolišu. Ispitivana su četiri okolišna i jedan klinički izolat *A. baumannii* kroz sedam tjedana. Broj bakterija određen je kao broj kolonija (CFU) na hranjivom agaru (24h/42°C). Stopa preživljavanja izračunata je uspoređujući početni i konačni broj bakterija. Optimalni uvjeti za preživljavanje *A. baumannii* su sobna temperatura (22°C) i pH 7. Uspješno preživljava kroz sedam tjedana pri temperaturama od -20 do 44°C kao i pri pH 5 do 10. Također preživljava klasičan proces pasterizacije (63°C/30 min), te je tek nakon 2 h uništen. Na 50°C može preživjeti do četiri dana. Pri pH 12 može preživjeti do jedan dan, dok pri pH 2 preživljava samo 1h. Preživljavanje je veće u svim slučajevima u *Nutrient broth*-u, u kojem je došlo do umnažanja bakterija. Jedan izolat osjetljiv na sve testirane antibiotike slabije je preživljavao u izvorskoj vodi pri različitim temperaturama od ostalih multiplo-rezistentnih izolata, što upućuje na zaključak da multiplo-rezistentni izolati *A. baumannii* potencijalno bolje preživljavaju nepovoljne okolišne uvjete. *A. baumannii* je vrlo otporna bakterija na različite uvjete temperature i pH koji su nepovoljni za većinu drugih mezofilnih nesporogenih bakterija.

U-B5: PICOPLANKTON IN THE SOUTH ADRIATIC SEA: GLIMPSE OF WINTER DIVERSITY IN OLIGOTROPHIC ECOSYSTEM

Maja Mucko, Sunčica Bosak, Ivana Babić, Zrinka Ljubešić

Biološki odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Rooseveltov trg 6, Zagreb

Marine picoplankton includes viruses and organisms with cell sizes up to 3 µm, dominant in marine ecosystems in both abundance and biomass, embedded in three different domains - Archaea, Bacteria, Eukarya (protists and fungi). The diversity of South Adriatic Sea picoplankton has received limited attention, although it is crucial as the base of the food web (Cerino et al. 2012). During the winter of 2016, apparent oxygen utilization indicated that respiration resulting from heterotrophic bacteria was main process in the southern Adriatic Sea (Babić et al., submitted). This study investigates this smallest plankton fraction in both prokaryotic and eukaryotic perspective considering within the euphotic layer (from surface up to 200m of depth) from coastal to open sea during mixed winter conditions. The samples were collected at total of 8 different depths at three stations in the South Adriatic Sea, during the late winter BIOTA (BIO-Tracing Adriatic water masses) cruise conducted in 2016. Using high-throughput sequencing of 16S and 18S rRNA genes along with flow-cytometry counts of bacteria, cyanobacteria and photosynthetic picoeukaryotes, we managed to define picoplanktonic community in the oligotrophic ecosystem. Prokaryotic community was dominated by *Alphaproteobacteria* (>40%), SAR11 clade (90%), followed by *Marinimicrobia* (18%), mainly represented by clade SAR406 (8%). Picoeukaryotes, although important primary producers in oligotrophic systems, in this study were dominated in general by heterotrophic counterparts: Syndiniophyceae, parasitic dinoflagellates (79%), Dinophyceae (5%), and distincitvely on two depths, Collodaria (24%), Spumellaria (4%) and Chaunocanthida (2%) were significant in number. Total heterotrophic bacteria cell numbers ranged from 1.8×10^5 to 8.8×10^5 cells mL^{-1}, while Cyanobacteria (*Synechococcus* + *Prochlorococcus*) cell numbers were higher only in surface layers (0-50 m) of offshore stations where they did not exceed 5.0×10^4 cells mL^{-1}. Photosynthetic picoeukaryotes were most abundant at offshore stations with 9.0×10^3 cells mL^{-1} (Babić et al., submitted).

1. Babić, I., Mucko, M., Petrić, I., Bosak, S., Mihanović, H., Vilibić, I., Dupčić Radić, I., Cetinić, I., Balestra, C., Casotti, R., Ljubešić, Z. Uncovering marine bacterial diversity in a marginal sea: from surface to seabed, *Mar. Syst.* (2017) submitted.
2. Cerino, F., Bernardy-Aubry, F., Coppola, J., La Ferla, R., Maimone, G., Socal, G., Totti, C., *Cont. Shelf Res.* **44** (2012) 94-105.

U-B6: PRISUTNOST VIRUSA U POPULACIJAMA ŠIŠMIŠA U HRVATSKOJ

Ivana Šimić

Hrvatski veterinarski institut, Savska cesta 143, Zagreb

Šišmiši su prepoznati kao rezervoari raznih virusa, od kojih najviše pažnje privlače oni zoonotskog potencijala. Kohabitacija šišmiša s ljudima i domaćim životinjama stvara priliku za prijenos bolesti, a diljem svijeta su zabilježena brojna prelijevanja virusa šišmiša u populaciju domaćih životinja i ljudi, ponekad sa stravičnim posljedicama. Dosada su u šišmiša utvrđeni Ebola i Marburg virus, Nipah i Hendra, SARS i MERS-coronavirus te pripadnici roda Lyssavirus, koji uzrokuju bjesnoću. Bjesnoća je zasad jedina zoonoza podrijetla šišmiša utvrđena na europskom kontinentu. Bolest karakteriziraju akutni encefalitis ili meningoencefalitis sisavaca, globalna rasprostranjenost, visoki troškovi menadžmenta u veterinarskoj i humanoj medicini te visoka smrtnost.

U Republici Hrvatskoj dosad nije bilo sustavnog pretraživanja virusa u šišmiša, stoga ne postoje reprezentativni epidemiološki podaci koji bi ukazivali na javnozdravstveni značaj šišmiša ni koliko njih same određeni patogeni ugrožavaju.

U-B7: PROMJENA GLIKOZILACIJE IMUNOGLOBULINA G TIJEKOM STARENJA

Jasminka Krištić[1], Frano Vučković[1], Maja Pučić-Baković[1], Ozren Polašek[2], Caroline Hayward[3], Tim Spector[4], Gordan Lauc[1,5]

[1]Genos d.o.o., Laboratorij za glikobiologiju, Borongajska cesta 83h, Zagreb
[2]Medicinski fakultet, Sveučilište u Splitu, Šoltanska 2, Split
[3]MRC Human Genetics Unit, Institut za genetiku i molekularnu medicinu, Sveučilište u Edinburgu, Edinburg, UK
[4]Zavod za istraživanje blizanaca & genetičku epidemiologiju, King's College London, London, UK
[5]Zavod za biokemiju i molekularnu biologiju, Farmaceutsko-biokemijski fakultet, Sveučilište u Zagrebu, A. Kovačića 1, Zagreb

Dobro je poznato kako glikani (kompleksni šećeri) vezani za protein imunoglobulin G (IgG) imaju važnu ulogu u strukturi i funkciji IgG-a. Osim toga, pokazano je da kod raznih bolesti dolazi do promjene u glikozilaciji IgG-a. Prema dosadašnjim istraživanjima postoji indicija da se glikozilacija imunoglobulina G (IgG) mijenja s dobi. Ipak, sva prethodna istraživanja koja su proučavala promjenu glikozilacije IgG-a tijekom starenja provedena su na malom broju uzoraka te stoga nije sigurno jesu li rezultati tih studija točni i potpuni. Informacije o odnosu između glikozilacije IgG-a i dobi vrlo su korisne budući da postoji sve veći broj istraživanja koja se baziraju na proučavanju glikozilacije IgG-a, osobito onih istraživanja koja proučavaju promjene glikozilacije IgG-a u raznim bolestima. Osim toga, detaljne informacije o promjeni glikozilacije IgG-a tijekom starenja mogle bi omogućiti pronalazak glikanskih biomarkera kronološke i biološke dobi te dati novi uvid u sam mehanizam starenja. U ovom radu napravljena je detaljna analiza promjene glikozilacije IgG-a na oko 5000 ljudi iz četiri europske populacije kako bi se dobili detaljni i konačni podaci o tome kako se glikozilacija IgG-a mijenja u ovisnosti o dobi i spolu. Rezultati rada pokazuju da se sa starenjem značajno mijenja glikozilacija imunoglobulina G te da sve četiri proučavane populacije slijede isti trend promjena, što nepobitno dokazuje da postoji generalni princip po kojem se događaju promjene glikozilacije proteina IgG tijekom starenja. Pokazano je i da promjene u glikozilaciji IgG-a koje se događaju sa starenjem potiču upalni imunološki odgovor u organizmu tijekom starenja. Osim toga, dobiveni rezultati pokazuju da glikani proteina IgG mogu biti vrlo dobri biomarkeri i kronološke i biološke dobi te da su bolji biomarkeri od dobro poznatih telomera. Analiza glikozilacije IgG-a sa starenjem napravljena je i na animalnom modelu.

U-B8: IZBOR STANIŠTA PRIMARNIH I SEKUNDARNIH DUPLJAŠICA U POPLAVNIM NIZINSKIM ŠUMAMA UZ RIJEKU DRAVU U HRVATSKOJ

Mario Slatki

Biološki odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Rooseveltov trg 6, Zagreb

Zajednice ptica šumskih staništa ovise o floističkim i strukturalnim svojstvima šume. U Hrvatskoj su provedena istraživanja ornitofaune nizinskih šuma hrasta lužnjaka te gorskih i planinskih šuma. Dosadašnja istraživanja zajednica ptica ili pojedinih vrsta u nizinskim i gorskim šumama Hrvatske ukazala su na različit utjecaj floističkih i strukturalnih svojstava šume na sastav zajednica ptica i izbor staništa pojedinih vrsta. Među asocijacijama sjeverozapadnih nizinskih predjela Hrvatske osim prevladavajućih šuma hrasta lužnjaka postoje i relativno dobro očuvane poplavne šume johe, topole i jasena. Istraživanje obuhvaća zajednice primarnih i sekundarnih ptica dupljašica radi usporedbe sastava zajednica tih ptica s floističkim i strukturalnim sastavom šume kako bi se utvrdila korelacija između karakteristika zajednica ptica i njihovih staništa. Na temelju prethodnih istraživanja mogu postaviti sljedeće hipoteze: broj vrsta ptica i kvantitativni sastav populacija ptica dupljašica u poplavnim šumama Hrvatske ovise o strukturalnom sastavu šumskih zajednica; starije šumske sastojine imaju veću raznolikost zajednica ptica i veću gustoću populacija; broj vrsta i veličina populacija sekundarnih dupljašica su pozitivno korelirani s brojem vrsta i veličinom populacija primarnih dupljašica. Istraživanje sastava zajednice ptica provodi se metodom prebrojavanja u točki (Bibby i sur. 1992) u različitim asocijacijama poplavnih šuma u kojima

prevladavaju joha, topola i jasen i bit će provedeno na ukupno 50 do 60 točaka. Istraživanje staništa provodi se metodom kružnih ploha (James i Shugart 1970, Cyr i Oelke, 1976.). Dosadašnjim istraživanjem tijekom 2016. i 2017. godine na ukupno 31 točki na lokacijama Varaždinske podravske šume i Đurđevačke nizinske šume utvrđeno je postojanje ukupno 12 vrsta dupljašica, od čega pet vrsta primarnih i sedam sekundarnih. Zabilježeno je ukupno 156 parova dupljašica, od čega 51 par primarnih i 105 parova sekundarnih. Najčešća primarna dupljašica je vrsta veliki djetlić (24,36% ukupnog broja parova), a najčešća sekundarna velika sjenica (23,08% ukupnog broja parova).

U-GG1: PROMJENE U RAZVOJU JEDINICA LOKALNE SAMOUPRAVE OD 1991. DO 2011. GODINE: PRIMJER SJEVERNE HRVATSKE

Valentina Valjak

Geografski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Marulićev trg 19/II, Zagreb

Promjene upravno-teritorijalnog ustroja na prostoru Hrvatske bile su česte, no u cilju traženja uspješnijeg razvoja prostora. Kako je teško mjeriti utjecaj lokalne samouprave na upravljanje razvojem, konkretnija istraživanja te tematike bila su vrlo rijetka. Ovo istraživanje bavi se upravo time. Pomoću metoda multivarijantne analize istražuje se kako je postojeća administrativna organizacija utjecala na razvoj jedinica lokalne samouprave (gradova i općina) u regiji Sjeverne Hrvatske u razdoblju od 1991. do 2011. godine s naglaskom na tri popisne godine. Istraživanje obuhvaća prostor 110 upravnih gradova i općina četiriju županija, Koprivničko-križevačke, Krapinsko-zagorske, Međimurske i Varaždinske županije. U analizu je uključeno 20 pokazatelja (varijabli) koji su podijeljeni u 6 glavnih skupina: 1. Pokazatelji broja, razmještaja i sastava stanovništva, 2. Pokazatelji demografske dinamike, 3. Pokazatelji aktivnosti i zaposlenosti, 4. Socioekonomski pokazatelji, 5. Pokazatelji infrastrukturne opremljenosti kućanstava i 6. Odabrani turistički pokazatelji. Faktorskom analizom je za svako razdoblje identificirano pet ključnih faktora koji predstavljaju glavne dimenzije razvoja, dok su klaster analizom jedinice lokalne samouprave svrstane u nekoliko skupina prema njihovim razvojnim karakteristikama. Formirane su tri tipologije općina (za 1991., 2001. i 2011.) koje su omogućile pojedinačni uvid u stanje jedinica lokalne samouprave, te su, na temelju promjene statusa ili stagnacije u tipologiji, općine odabrane za kvalitativnu analizu. Nakon dvadeset godina postojanja, analiza približava status i učinke postojećeg modela lokalne samouprave, a prikazana metoda može poslužiti kao temelj za formuliranje preporuka i mjera za budući razvoj.

U-GL1: KOLOČEPSKI KANAL – POTOPLJENI KRŠKI BAZEN

Dragana Šolaja[1], Slobodan Miko[1], George Papatheodorou[2]

[1]*Hrvatski geološki institut, Sachsova 2, Zagreb*
[2]*Laboratorij za marinsku geologiju i fizičku oceanografiju, Zavod za geologiju, Sveučilište u Patrasu, 26504 Rio, Patras, Grčka*

Tijekom zadnjeg glacialnog maksimuma (LGM) prostor Koločepskog kanala predstavljao je izolirani krški bazen koji je bio odvojen pragom od ostatka Jadranskog mora. Posljedica porasta razine mora je strma, stjenovita i transgresivna obalna linija, gdje obalno paralelne antiklinale tvore otočne lance, dok obalno paralelne sinklinale predstavljaju uvale i kanale (Pikelj & Juračić, 2013). Sedimentacija u bazenu se je odvijala pod utjecajem promjene morske razine i klime tijekom kvartara pri čemu su se taložili različiti okoliši. U posljednjem glacialnom razdoblju došlo je do intenzivne erozije starijih naslaga u središnjem dijelu bazena. Promjenom klime i topljenjem ledenih pokrova u zaleđu područja dolazi do stvaranja vodotoka i značajne sedimentacije u bazenu. Sedimenti su ponovno istaloženi vodotocima koji su rezultat obalnih vrulja i izvora koji su i dan danas vidljivi na području Doli – Banići i u uvali Slano. Na temelju ponora u Popovom polju (BiH) na zapadnoj strani rijeke Trebišnjce (BiH) mogu se definirati tokovi podzemnih voda koji su povezani s obalnim izvorima i vruljama (Vranješ et al., 2000). Analizom zapisa u jezgrama neporemećenih serija holocenskih sedimenata koristeći multidisciplinarne metode i datiranjem metodom radioaktivnog ugljika (AMS ^{14}C) u kombinaciji s podacima seizmičke refleksije visokerazlučivosti, možemo dobiti podatke o taložnim procesima, izvoru sedimenta, te odredbu kopnenih i morskih faza u bazenu tijekom holocena.

1. Pikelj, K, Juračić, M., *J. Coastal Res.* **29** (2013) 944-957.
2. Vranješ, M., Prskalo M., Džeba, T., *Hidrologija i hidrogeologija sliva Neretve i Trebišnjice, osvrt na izgradnju dijela HE sustava - gornji horizonti*, 2000.

U-OC1: SASTAV I POTENCIJALNA ULOGA PROKARIOTSKIH ZAJEDNICA U BIOKEMIJSKIM PROCESIMA EUKSINSKOG OKOLIŠA ROGOZNIČKOG JEZERA

Milan Čanković[1], Gavin Collins[2], Estefania Porca[2], Ines Petrić[1], Ivica Janeković[1], Irena Ciglenečki[1]

[1]*Zavod za istraživanje mora i okoliša, Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, Zagreb*
[2]*School of Natural Sciences, Microbiology, NUI Galway, University Road, Galway, Ireland*

Pojavnost hipoksično-anoksičnih okoliša, koji posljedično dovode do stvaranja euksinije, tijekom proteklih 50-ak godina se drastično povećala, prvenstveno kao posljedica antropogenog utjecaja. Stoga je dobro razumijevanje fizičko-kemijskih i bioloških procesa koji se odvijaju u ovim područjima nužno kako bi ih što bolje mogli pratiti, karakterizirati i definitati te po mogućnosti spriječiti njihovo nastajanje. Meromiktička jezera, sa hipoksičnom kemoklinom i permanentno anoksičnim tj. euksiničnim monimolimnionom mogu poslužiti kao dobri modeli za istraživanje biogeokemijskih procesa koji se u ovakvim okolišima odvijaju. U ovom radu, sekvenciranjem nove generacije 16S rRNA gena cDNA zajedno sa kvantitativnom lančanom reakcijom polimerazom (qPCR), detaljno je istražena prostorno-vremenska struktura i brojnost prokariotskih zajednica u kemoklini, monimolimnionu i sedimentu Rogozničkog jezera. Dobiven je uvid i u potencijalne ekofiziološke interakcije i biogeokemijske procese koji se odvijaju u ovim zonama jezera. Utvrđena je jasna vertikalna razdioba prokariotskih zajednica u skladu s fizičko-kemijskim karakteristikama okoliša. Razred *Gammaproteobacteria* dominira slojem kemokline, *Deltaproteobacteria* monimolimnionom, dok je značajno veći broj arheja pronađen u sedimentu. Nadalje, za razliku od drugih sličnih okoliša, bioraznolikost u Rogozničkom jezeru je relativno niska. To je vjerojatno rezultat razvoja visokospecijaliziranih taksonomskih skupina u relativno stabilnim zonama od kemokline do sedimenta. S obzirom na to, biokemijski ciklusi kruženja ugljika, dušika i sumpora ovisni su o malom broju svojti. Genetički potencijal za nitrifikaciju i denitrifikaciju, kao i za oksidaciju metana i anaerobnu oksidaciju amonijaka je vrlo slab. Dugoročni podaci (1996. - 2015.) pokazali su da se monimolimnion jezera zagrijava i da rastu koncentracije amonijaka i H_2S. Ove promjene mogu utjecati na stabilnost vodenog stupca te dovesti do daljnjeg slabljenja pojedinih biokemijskih puteva i nestanka svojti značajnih za funkcioniranje ekosustava jezera.

Posterska priopćenja

P-M1: METODA UVJETA OPTIMALNOSTI ZA PROBLEME VIŠEKRITERIJSKOG OPTIMALNOG DIZAJNA

Krešimir Burazin[1], Ivana Crnjac[1], Marko Vrdoljak[2]
[1]*Odjel za matematiku, Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku, Trg Ljudevite Gaja 6, Osijek*
[2]*Matematički odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Bijenička cesta 30, Zagreb*

U problemima optimalnog dizajna cilj je pronaći najbolju raspodjelu danih materijala, tako da dobiveno tijelo zadovoljava neke kriterije optimalnosti, što se obično izražava kao minimizacija nekog integralnog funkcionala. Mi promatramo mješavine dvaju izotropnih materijala sa aspekta vodljivosti, te višekriterijske probleme optimalnog dizajna, gdje na dano tijelo može utjecati više različitih režima, što pak vodi ka većem broju jednadžbi stanja (PDJ). Kako klasično rješenje najčešće ne postoji, problem relaksiramo koristeći proces homogenizacije. Za relaksirani problem izvodimo nužne uvjete optimalnosti koji omogućuju primjenu metode uvjeta optimalnosti za dobivanje numeričkog rješenja. Jedna varijanta ove metode napravljena je u [V] i daje konvergentan niz dizajna za problem maksimizacije energije. Potaknuti činjenicom da ta varijanta ne daje optimalno rješenje u slučaju minimizacije, razvili smo drugu varijantu metode koja rješava taj problem. Konvergencija naše metode pokazana je u sferno simetričnom slučaju te slučaju kada je broj jednadžbi stanja manji od dimenzije.

1. Allaire, G., *Shape Optimization by the Homogenization Method*, u *Applied Mathematical Sciences*, vol. 146, Springer, New York, 2002.
2. Tartar, L., *Lect. Notes Math.* **1740** (2000) 47-156.
3. Vrdoljak, M., *Nonlinear Anal. Real World Appl.* **11** (2010) 4597-4606.

P-M2: HOMOGENIZACIJA JEDNADŽBE ELASTIČNE PLOČE

Krešimir Burazin[1], Jelena Jankov[1], Marko Vrdoljak[2]
[1] *Odjel za matematiku, Sveučilište J. J. Strossmayera, Trg Ljudevita Gaja 6, Osijek*
[2] *Matematički odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Bijenička cesta 30, Zagreb*

Promatramo homogenizaciju jednadžbe tanke simetrične elastične ploče $\operatorname{divdiv}(M\nabla\nabla u) = f$ uz homogeni Dirichletov rubni uvjet. Fizikalna ideja homogenizacije je usrednjenje heterogenih materijala s ciljem dobivanja njihovih efektivnih svojstava. Teorija homogenizacije razvijena je za eliptičku jednadžbu drugog reda, gdje ključnu ulogu ima H-konvergencija. Bit će prikazana analogna teorija za jednadžbu elastične ploče koja je eliptička jednadžba četvrtog reda, te novi rezultati o svojstvima H-konvergencije takve jednadžbe.

1. G. Allaire, *Shape optimization by the homogenization method*, Springer, 2001.
2. N. Antonić, N. Balenović, *Z. Angew. Math. Mech.* **80 (**2000) 757-758.
3. N. Antonić, N. Balenović, *Math. Commun.* **4** (1999) 111-119.
4. N. Antonić, N. Balenović, M. Vrdoljak, *Z. Angew. Math. Mech.* **80** (2000) 783–784.
5. J. Munoz, P. Pedregal, *Asymptotic Anal.* **16** (1998)125-140.
6. L. Tartar, *The general theory of homogenization*, Springer, 2009.
7. V. V. Zhikov, S. M. Kozlov, O. A. Oleinik, Kha T'en Ngoa, *Russ. Math. Surv.* **34** (1979) 69–147.

P-M3: REPREZENTACIJE NEKIH IRACIONALNIH W-ALGEBRI

Ana Kontrec
Matematički odsjek, Prirodoslovno.matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Bijenička cesta 30, Zagreb

U ovom radu proučavamo reprezentacije nekih iracionalnih W-algebri, te strukturu podalgebri Weylove vertex algebri i nekih afinih W-algebri. Poseban naglasak bit će dan na Bershadsky-Polyakov verteks algebru W_k(sl(3), f_{\theta}) i njene reprezentacije najveće težine. U nekim posebnim slučajevima, prikazujemo formule za singularne vektore, klasifikaciju ireducibilnih modula i opisujemo strukturu pripadnih Zhuovih algebri. Proučavamo vezu između Zhuove algebre za W_k(sl(3), f_{\theta}) i Smithove algebre.

1. T. Arakawa, *Commun. Math. Phys.* **323** (2013)627.
2.T. Arakawa, T. Creutzig, A.R. Lindshaw, *Sel. Math.* **23** (2017) 2369-2395.
3. Y. Zhu, *J. Amer. Math. Soc.* **9** (1996)237-302.
4. S.P. Smith, *Trans. Amer. Math. Soc.* **322** (1990) 285-314.

P-M4: KORELIRANE SLUČAJNE ŠETNJE U NEPREKIDNOM VREMENU I FRAKCIONALNE PEARSONOVE DIFUZIJE

Nikolai Leonenko[1], Ivan Papić[2], Alla Sikorskii[3], Nenad Šuvak[2]
[1]*School of Mathematics, Cardiff University, Senghennydd Road, Cardiff CF244AG, UK*
[2]*Osjel za matematiku, Sveučilište J.J. Strossmayera, Trg Ljudevita Gaja 6, Osijek*
[3]*619 Red Cedar Road, Department of Statistics and Probability, Michigan State University, East Lansing, MI 48824, USA*

Stohastički modeli u transformiranom vremenu koji se razmatraju uključuju transformaciju slučajnog procesa u novi slučajni proces putem slučajnog vremena, dobivenog inverzom stabilnog subordinatora za koji se pretpostavlja da je nezavisan od početnog procesa. U prvom dijelu prezentirane su frakcionalne Pearsonove difuzije, tj. Pearsonove difuzije u transformiranom vremenu putem inverza standardnog stabilnog subordinatora. Konkretno, prezentirane su spektralne reprezentacije prijelaznih funkcija gustoća frakcionalnih Pearsonovih difuzija s teškim repovima. U drugom dijelu prezentirana je konvergencija specifično definiranih koreliranih slučajnih šetnji u neprekidnom vremenu prema frakcionalnim Pearsonovim difuzijama.

1. Avram, F., Leonenko, N., Šuvak, N., *Markov Process. Relat. Fields* **19** (2013) 249–298.
2. Avram, F., Leonenko, N., Šuvak, N., *Stochastics* **85** (2013) 346–369.
3. Jacobsen, M., *Bernoulli* **2** (1996) 271–286.
4. Kallenberg, O., *Foundations of Modern Probability*, Springer Series in Statistics. Probability and Its Applications., 2nd ed., Springer, 2002.
5. Karlin, S., Taylor, H., A *Second Course in Stochastic Processes*, Academic Press, 1981.
6. Leonenko, N., Meerschaert, M., Sikorskii, A., *Comput. Math. Appl.* **66** (2013) 737-745.
7. Leonenko, N., Meerschaert, M., Sikorskii, A., *J. Math Anal. Appl*. **403** (2013) 532-546.
8. N. Leonenko, I. Papić, A. Sikorskii, N. Šuvak, Correlated continuous time random walks and fractional Pearson diffusions, *Bernoulli* (2017), prihvaćen za objavljivanje
9. N. Leonenko, I. Papić, A. Sikorskii, N. Šuvak, *Stoch. Proc. Appl. 127* (2017) 3512-3535.

P-M5: NEPONIŠTAVANJA POINCARÉOVIH REDOVA NA METAPLEKTIČKOJ GRUPI I PRIMJENE

Sonja Žunar
Matematički odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Horvatovac 102a, Zagreb

U ovom se radu teorija reprezentacija metaplektičkog natkrivača $Mp_2(\boldsymbol{R})$ grupe $SL_2(\boldsymbol{R})$ primjenjuje na proučavanje kuspidalnih modularnih formi polucijele težine. Teorija modularnih formi je aktualan dio analitičke teorije brojeva; primjerice, veza između eliptičkih krivulja i modularnih formi temelj je Wilesova dokaza Fermatova posljednjeg teorema.

Neka je Γ diskretna podgrupa konačnog kovolumena u $SL_2(\boldsymbol{R})$. Prostor $S_m(\Gamma)$ kuspidalnih modularnih formi težine $m \in \boldsymbol{Z}_{\geq 3}$ za Γ posredstvom je klasičnog lifta izomorfan prostoru $\mathcal{A}\big(\Gamma\backslash SL_2(\boldsymbol{R})\big)_m$ kvadratno-integrabilnih automorfnih formi za Γ težine m. Prostor $\mathcal{A}\big(\Gamma\backslash SL_2(\boldsymbol{R})\big)_m$ je sadržan u prostoru K-konačnih vektora unitarne reprezentacije r_Γ grupe $SL_2(\boldsymbol{R})$ desnim translacijama na prostoru $L^2\big(\Gamma\backslash SL_2(\boldsymbol{R})\big)$, što otvara vrata primjeni teorije reprezentacija u proučavanju modularnih formi.

U uskoj vezi s primjedbom D. Miličića da Poincaréovi redovi K-konačnih matričnih koeficijenata proizvoljne integrabilne reprezentacije π grupe $SL_2(\boldsymbol{R})$ razapinju π-izotipičnu komponentu reprezentacije r_Γ, G. Muić je u [2] dokazao da je prostor $\mathcal{A}\big(\Gamma\backslash SL_2(\boldsymbol{R})\big)_m$ razapet Poincaréovim redovima određenih K-konačnih matričnih koeficijenata integrabilnih reprezentacija grupe $SL_2(\boldsymbol{R})$. Izračunavši te K-konačne matrične koeficijente i njihove Poincaréove redove, konstruirao je odgovarajući sustav izvodnica prostora $S_m(\Gamma)$ i dobio rezultate o neponištavanju nekih njegovih elemenata primjenom integralnog kriterija neponištavanja za Poincaréove redove na lokalno kompaktnim Hausdorffovim grupama dokazanog u [1].

Jedan je od glavnih ciljeva ovog rada dobiti analogne rezultate u slučaju kuspidalnih modularnih formi polucijele težine $m \in \frac{5}{2} + \boldsymbol{Z}_{\geq 0}$. Kuspidalne modularne forme polucijele težine imaju kompliciraniji automorfni faktor te se ne dižu na prirodan način do automorfnih formi na grupi $SL_2(\boldsymbol{R})$ nego do automorfnih formi na grupi $Mp_2(\boldsymbol{R})$. Zato je prvi netrivijalan korak ovog istraživanja bio istražiti integrabilne reprezentacije grupe $Mp_2(\boldsymbol{R})$ i izračunati njihove K-konačne matrične koeficijente. Prezentirat ćemo konstruirane sustave izvodnica za prostore kuspidalnih modularnih formi polucijele težine sastavljene od Poincaréovih redova i rezultate o neponištavanju mnogih njihovih elemenata.

1. G. Muić, *Math. Ann.* **343** (2009) 207-227.
2. G. Muić, *J. Number Theory* **130** (2010) 1488-1511.

P-F1: MODULACIJA TOKA KOZMIČKIH ZRAKA MEĐUPLANETARNIM UDARNIM VALOM

Anamarija Kirin[1], Bojan Vršnak[2], Mateja Dumbović[3], Bernd Heber[4]
[1]*Veleučilište u Karlovcu, Trg J.J. Strossmayera 9, Karlovac*
[2]*Geodetski Fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Kačićeva 26, Zagreb*
[3]*Institute of Physics, University of Graz, Graz, Austria*
[4]*Institut für Experimentelle und Angewandte Physik, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, Kiel, Germany*

Forbushevim smanjenjenjem (engl. *Forbush decrease*) nazivamo kratkotrajna smanjenja toka kozmičkih zraka koja je prvi opazio Scott E. Forbush 1937. godine. Uzrok ovih smanjenja mogu biti korotirajuća područja interakcije (eng. *corotating interaction region*, CIR) ili međuplanetarni koronini izbačaji (eng. *interplanetary coronal mass ejections,* ICMEs). Prikazat ćemo analitički model za modulaciju toka kozmičkih zraka u području iza brzog magnetohidrodinamičkog udarnog vala uzrokovanog ICME-om pri čemu magnetsko polje sadrži komponenete paralelne i okomite na frontu vala. Model se zasniva na pretpostavci da prevladavaju dva učinka: magnetsko zrcalo na udarnom valu i konvektivna kompresija u području iza vala. Magnetsko zrcalo smanjuje tok čestica dok ga kompresija povećava. Budući da je efekt magnetskog zrcala izraženiji, tok čestica iza fronte vala manji je od toka ispred fronte. Ovi rezultati mogu se primijeniti i u slučaju CIR-eva. Smanjenje toka dobiveno ovakvim proračunom veće je od izmjerenih vrijednosti što ukazuje na činjenicu da i drugi učinci, kao npr. difuzija, imaju značajan doprinos.

P-F2: ROBUSNOST OBOJENE KOMPLEKSNE MREŽE NA ZAOBILAŽENJE BOJE

Andrea Kadović, Vinko Zlatić
Zavod za teorijsku fiziku, Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, Zagreb

Kao moćan ali ogoljen model kompleksnog sustava, mreža je u prijašnjim perkolativnim proučavanjima bila definirana kao skup identičnih objekata međusobno povezanih identičnim vezama [1]. Nedavno je pokazano da je obojena mreža, u kojoj boja predstavlja dodatno svojstvo bilo svakog čvora ili svakog brida, krhkija reprezentacija kompleksnog sustava u kojem postoje različite klase ranjivosti [2]. U ovom izlaganju razmatramo osjetljivost globalne povezanosti mreže na prekidanje cijele ranjive klase bridova obojene jednom bojom, odnosno povezanosti dva čvora koja opstaje bez obzira koja boja se zaobilazi. Pokazujemo kako struktura mreže s jedne strane, te raspodjela i broj različitih boja s druge strane utječu na takav tip globalne povezanosti, uvjetuju njezino postojanje, kao i njezinu osjetljivost u kritičnom području. Pri tom koristimo i dalje razvijamo specijalizirani tip perkolacije tzv. perkolaciju zaobilaženja boje [3]. Ovdje pokazujemo analitičke i numeričke rezultate da mreže za koje vrijedi regularna aproksimacija srednjeg polja imaju bojom dominirano kritično ponašanje. Nasuprot tome, pokazujemo da kritično ponašanje može postati imuno na postojanje boja za mreže definirane s raspodjelama broja bridova po čvoru koje su sporo trnućeg repa.

1. M. Newman, *Networks - An Introduction*, Oxford University Press, 2010.
2. S.M. Krause, M.M. Danziger, V. Zlatić, *Phys. Rev. X* **6** (2016) 041022
3. S.M. Krause, M.M. Danzige, V. Zlatić, *Phys. Rev. E* **96** (2017) 022313

P-F3: KUTNE KORELACIJE IDENTIFICIRANIH PAROVA HADRONA POMOĆU ALICE DETEKTORA NA LHC SUDARIVAČU

Filip Erhardt, Marko Jerčić, Mirko Planinić, Nikola Poljak, Goran Simatović, Antonija Utrobičić
Fizički odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Bijenička 32, Zagreb

Proučavanje korelacija čestica u visokoenergetskim sudarima teških iona daje vrijedne informacije o kvantnokromodinamičkim procesima koji vode do proizvodnje čestica. Ovo se istraživanje bavi eksperimentalnim proučavanjem kutnih (Δη,Δφ) dvo-hadronskih korelacija prisutnih u proton-proton (pp) i proton-olovo (p-Pb) sudarima koristeći ALICE detektor na LHC-u. Jedna specifična struktura u korelacijama, tzv. "ridge" (greben), nastaje međudjelovanjima u kvarkovsko-gluonskoj plazmi (QGP) formiranoj nakon sudara te bi se mogla koristiti kao jedan pokazatelj postojanja QGP. Od varijabli koje opisuju svojstva korelacija, multiplicitet i sfericitet se koriste kao alat za uklanjanje velike pozadine koja proizlazi od mlazova čime se pojašnjava i naglašava prisutnost ridge strukture.

1. ALICE Collaboration, *Phys. Lett. B* **719** (2013) 29–41
2. CMS Collaboration, *Phys. Rev. Lett* **116** (2016) 172302

P-F4: VERIFIKACIJA PROGNOZE MAGLE NA ZAGREBAČKOJ ZRAČNOJ LUCI

Jadran Jurković[1], Zoran Pasarić[2], Igor Kos[1]
[1]*Hrvatska kontrola zračne plovidbe, Rudolfa Fizira 2, Velika Gorica*
[2]*Geofizički odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagreb, Horvatovac 95, Zagreb*

U zrakoplovstvu pojava magle je bitna jer ograničava zračni promet na zračnim lukama ili na ruti. Premda su uvjeti za stvaranje magle dobro poznati, prognoziranje pojave magle za jednu točku je vrlo izazovno. Ograničenja u mjerenjima koja se koriste kao početni uvjeti u modelima, te nužne aproksimacije fizičkih procesa te rezolucija modela, glavni su uzroci zašto današnji operativni modeli u prognozi magle nisu potpuno uspješni. S druge strane, zrakoplovstvo ima detaljne zahtjeve na prognozu vidljivosti koji su definirani međunarodnim kriterijima. No, u uvjetima magle nerijetko ih je teško zadovoljiti pogotovo u prognozi za pojedinu zračnu luku.

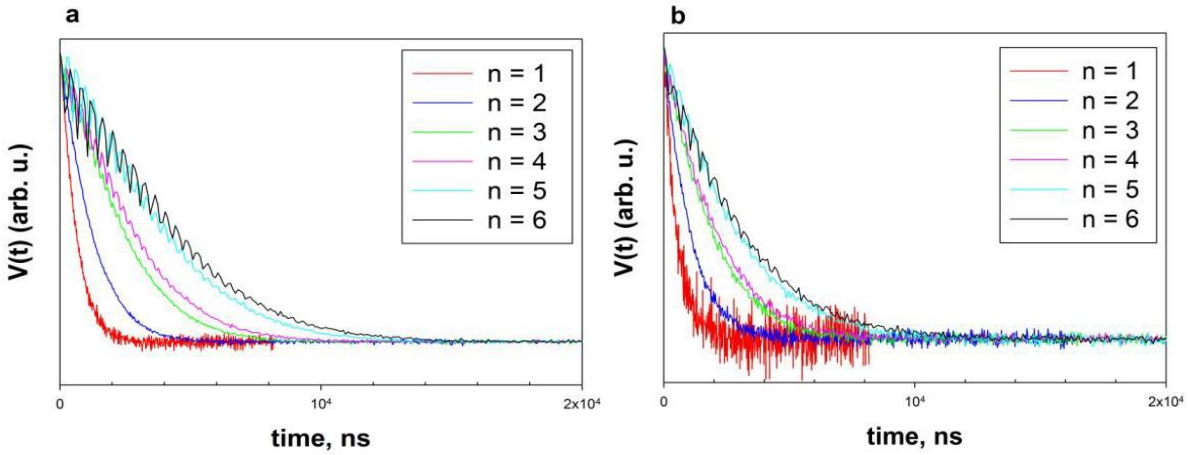
Podaci korišteni u radu su prognozirani i motreni podaci vidljivosti na zračnoj luci Zagreb u razdoblju 2009. do 2014. Prognozirani podaci za sljedeća 24 sata uspoređuju se s polusatnim motrenim vrijednostima vidljivosti slijedeći metodu predloženu od Marhingera (2008). Obzirom da se radi sigurnosnih razloga za planiranje leta uvijek koriste najnepovoljniji prognozirani uvjeti, rezultati verifikacije pokazat će se na usporedbi minimalnih prognoziranih i motrenih vrijednosti vidljivosti u pojedinom satu. Od dva niza napravi se tablica kontingencije s osam kategorija vidljivosti čije su granice definirane međunarodnim pravilima za izradu zrakoplovnih prognoza. Zbog rijetkih učestalosti kategorija s malim vrijednostima vidljivosti, osim standardnih verifikacijskih pokazatelja koristi se polihorički koeficijent korelacije (Juras i Pasarić, 2006).

Rezultati verifikacije pokazuju da je prognoza vidljivosti vrlo izazovna. Promatrajući tijekom godine, rezultati su bolji u sezoni magle od rujna do ožujka (Zoldoš i Jurković, 2016). U preostalom dijelu godine prisutno je češće davanje krivog alarma u prognozama sati s maglom. Obzirom da je nestanak magle često povezan s jačanjem sunčevog zračenja, on je bolje prognoziran od trenutka nastanka magle. Verifikacijski pokazatelji tijekom nastupnog vremena u prognozi pokazuju očekivano znatno smanjenje (kvalitete) nakon prvih nekoliko sati. Pojedini detaljni rezultati verifikacije bili su prezentirani prognostičarima, nakon čega se očekuju poboljšanja prognoza za zrakoplovne korisnike.

P-F5: PROBING THE DIFFERENCES FOR TEMPO INCORPORATED IN GLASSY AND CRYSTALLINE ETHANOL USING CONSTANT TIME CPMG EXPERIMENT

Jurica Jurec, B. Rakvin, M. Jokić, M. Kveder
Institut Ruđer Bošković, Bijenička 54, Zagreb

Staklasto i kristalinično stanje krutog etanola koristi se kao modelni sustav za proučavanje neuređenosti u materijalu. Neuređenost se ispituje hiperfinom interakcijom spina elektrona ugrađenog paramagnetskog nitroksilnog radikala TEMPO-a. Nuklearna spektralna difuzija od protona rešetke je dominantni mehanizam gubitka koherencije spina elektrona TEMPO-a ugrađenog u dva kruta stanja etanola te se predlaže kao parametar opisa udjela neuređenosti prisutne u sustavu [1,2]. Može se potisnuti upotrebom specifične više-pulsne sekvence razvijene za kontrolu dinamičkog razdvajanja, (*eng. decoupling*) centralnog spina. Efekt je izraženiji u staklastom nego u kristaliničnog etanol jer to stanje karakterizira veća neuređenost/ frustracija. Kako se fazno memorijsko vrijeme paramagnetskog centra povećava linearno s rastom broja primijenjenih refokusirajućih pulseva, efekt utjecaja neuređenosti može se numerički opisati za specifični modelni sustav.



Slika 1. Amplituda vremena pada spinske jeke elektrona u CPMG eksperimentu konstantnog vremena za TEMPO ugrađen u (a) staklasto i (b) kristalinično stanje etanola na 20 K. Broj π pulseva je prikazan.

1. M. Kveder, D. Merunka, M. Jokić, B. Rakvin, *J. Non-Cryst. Solids* **354** (2008) 5201.
2. M. Kveder, B. Rakvin, M. Jokić, E. Reijerse, *J. Non-Cryst. Solids* **414** (2015) 27.

P-F6: CHRYSTALOVA I PROUDMANOVA REZONANCIJA SIMULIRANE POMOĆU TRI NUMERIČKA MODELA

Maja Bubalo[1], Ivica janeković[2,3], Mirko Orlić [1]
[1]*Geofizički odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Horvatovac 95, Zagreb*
[2]*Institut Ruđer Bošković,Bijenička cesta 54, Zagreb*
[3]*The University of Western Australia, 35 Stirling Hwy,Crawley WA 6009, Australia*

Cilj ovog rada bio je utvrditi i usporediti kako različiti numerički modeli reproduciraju Chrystalovu i Proudmanovu rezonanciju. Testni slučaj baziran je na upotrebi jednostavnih poremećaja tlaka zraka, u obliku sinusoide i "boxcar" funkcije različitih duljina, koji su propagirali različitim brzinama. Domena je bila pravokutni bazen duljine 300 km s uniformnom dubinom od 50 m. Za svaku simulaciju su spremljene anomalije razine vode i izračunat je integral gustoće energije na nizu točaka raspoređenih duž bazena. Svih 2250 simulacija napravljeno je s tri numerička modela: ADCIRC, ROMS i SCHISM. Usporedba rezultata pokazuje da modeli različito prikazuju rezonantne fenomene. Uspješno je izmodeliran prijelaz iz Proudmanove u Chrystalovu rezonanciju koji se javlja kod sinusoidalnih poremećaja koji postaju veći od dimenzija bazena. Za Chrystalovu rezonanciju ponašanje svih modela je slično, iako ROMS daje vrijednosti najbliskije analitičkom rješenju. Što se tiče Proudmanove rezonancije, ROMS je također pokazao najbolje rezultate, dok su ADCIRC i SCHISM dali vrijednosti za rezonantnu brzinu koje su nešto manje od analitičke. Iako se razlike na prvi pogled ne čine velike, one mogu imati važnu ulogu u slučajevima kad je ta rezonancija nezaobilazan proces u pojačavanju amplitude vala i do nekoliko redova veličine (npr. meteotsunami).

P-F7: JEDNODIMENZIONALNA KOREKCIJA PRISTRANOSTI MJESEČNE TEMPERATURE ZRAKA I OBORINE IZ KLIMATSKIH MODELA: KALIBRACIJA I VALIDACIJA

Renata Sokol Jurković, Ivan Güttler
Državni hidrometeorološki zavod, Grič 3, Zagreb

Simulacije prošle i sadašnje, te projekcije buduće klime provode se globalnim klimatskim modelima (GCM). Njihova uobičajena prostorna rezolucija je pregruba da bi se mogli koristiti za klimatska istraživanja na finijoj skali, regionalnoj ili čak lokanoj, stoga se moraju prilagoditi na mrežu s višom prostornom rezolucijom. Sve metode prilagodbe su bazirane na pretpostavci da je klima velike skale povezana s lokalom klimom. Nakon provedbe statističke ili dinamičke prilagodbe, modelirane varijable sadrže pristranost, odnosno, javlja se određeno odstupanje modeliranih varijabli od mjerenja. Da bi se klimatski modeli mogli koristiti u studijama utjecaja, mora se prethodno primijeniti korekcija pristranosti. U radu je korištena statistička korekcija pristranosti (Piani et al., 2010) klimatskih modela. Srednja mjesečna temperatura zraka i mjesečna količina oborine su korigirane zasebno pomoću transfer funkcije. Promatrane su srednje vrijednosti te standardne devijacije mjesečne temperature zraka i količine oborine za mjerene podatke, izvorne podatke iz modela te za podatke na kojima je izvršena korekcija pristranosti. Statistička korekcija pristranosti se pokazala prikladnom, no u analizi koeficijenta korelacije između dvije promatrane varijable (srednje mjesečne temperature zraka i mjesečne količine oborine) uočeno je odstupanje između mjerenih i simuliranih vrijednosti.

1. Piani, C., Weedon, G. P., Best, M., Gomes, S. M., Viterbo, P., Hagemann, S., Haerter, J. O., *J. Hydrol.* **395** (2010) 199-215.

P-F8: KARAKTERISTIKE KLIMATSKIH TRENDOVA TEMPERATURA ZRAKA I MORA NA JADRANU

Slavko Radilović[1], Darko Koračin[1], Danijel Belušić[2], Ivica Vilibić[3], Karlo Penović[1], Clea Denamiel[3], Jadranka Šepić[3], Ante Bralić[1]

[1]*Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Splitu, Ruđera Boškovića 33, Split*

[2]*Swedish Meteorological and Hydrological Institute, Folkborgsvägen 17, Norrköping, Sweden*

[3]*Institut za oceanografiju i ribarstvo, Šetalište Ivana Meštrovića 63, Split*

Svojstva regionalne klime su istražena korištenjem mjerenja na devet postaja na jadranskom području i rezultata devet regionalnih klimatskih modela, uključujući determinističke i prognostičke modove. Mjerne postaje su podijeljene na kopneni, priobalni i morski pojas te s obzirom na sjeverni, srednji i južni Jadran. Podaci s postaja nam omogućuju detaljnu analizu pedesetogodišnjih nizova temperature zraka i mora. Korišteno je devet realizacija atmosferskih regionalnih klimatskih modela rezolucije 0.11° iz arhive EURO-CORDEX projekta. Naglasak je bio pokazati u kojoj mjeri globalno zatopljenje utječe na površinsku temperaturu zraka i mora na jadranskom području, uspoređujući s utjecajem orografije na obalne atmosferske procese i ulazom vodene mase iz Jonskog mora kroz Otrantska vrata. Evaluacija pokazuje da su modeli s poboljšanom rezolucijom i preciznim parametrizacijama u mogućnosti točnije prikazati atmosferske procese na jadranskom području. Posljedično tome, modeli unaprjeđuju rezultate reanalize i ukazuju na bolju usporedbu s mjerenjima. Temperatura zraka pokazuje da su trendovi zatopljenja nad kopnom usporedivi s trendovima zatopljenja nad obalom i morem. Razlike imaju značajne maksimalne sezonske varijacije u ljeto i proljeće te izražene minimalne varijacije zimi. Zbog navedenih razlika dolazi do sezonskih promjena varijabilnosti obalne atmosferske stabilnosti, mezoskalnih gradijenata tlaka zraka i lokalne cirkulacije.

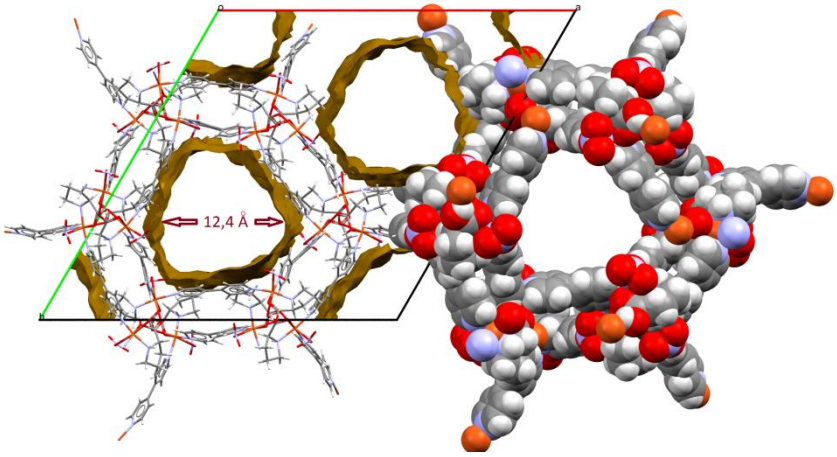
P-K1: PRIPRAVA I STRUKTURNA KARAKTERIZACIJA KOORDINACIJSKIH POLIMERA BAKRA(II) S L-PROLINOM, L-TRIPTOFANOM, GLICILGLICINOM I 4,4'-BIPIRIDINOM

Kristina Smokrović, Ivica Đilović, Dubravka Matković-Čalogović
Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Horvatovac 102a, Zagreb

Metaloorganske mreže podvrsta su koordinacijskih polimera u kojima su metalni centri povezani u trodimenzionalnu strukturu pomoću organskih liganada. Zbog svoje se velike specifične površine često koriste kao punila za kolone u plinskoj kromatografiji. U novije vrijeme posebno su zanimljive one mreže u kojima se molekule iz šupljina mogu zamijeniti drugim molekulama ili koje su sposobne prepoznati i selektivno vezati različite izomere ili enantiomere.[1]

Sintetizirane i strukturno karakterizirane su nove metaloorganske mreže: kompleksi bakra(II) s glicilglicinom, L-triptofanom i L -prolinom te s 4,4'-bipiridinom ligandom kao premoščujućim ligandom. Pripravljene su tri koordinacijska polimera različitih topologija, $\{6.7^4.10\}\{6^4.7.8\}$, $\{6^3\}$ i $\{4.8.10\}2\{4^2.8.10^2.2\}\{4^2.8.10^3\}$, odnosno jedna (4-c)(4-c) dvočvorna, jedna 3-c jednočvorna i jedna (3-c)2(4-c)(4-c) četveročvorna mreža.

Od tri pripravljena spoja, jedino je onaj s L-prolinom porozna, kiralna metaloorganska mreža (slika 1), dok su spojevi s L-triptofanom i glicilglicinom 2D- i 3D-polimeri u čijim kristalnim strukturama ne postoje kanali ispunjeni molekulama otapala. U spoju s L-triptofanom slojevi su međusobno povezani vodikovim vezama između nitratnih aniona koordiniranih na bakrov ion u jednom sloju s molekulom vode koordinirane na bakrov ion u susjednom sloju.



Slika 1. Prikaz strukture poroznog koordinacijskog polimera s l-prolinom duž kristalografske osi *c*. U kanalima se nalaze molekule otapala koje nije bilo moguće modelirati iz diferencijalne mape elektronske gustoće.

1. S. Xie, Z. Zhang, Z. Wang, L. Yuan, *J. Am. Chem. Soc.* **133** (2011) 11892–11895.

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

P-K2: ISTRAŽIVANJE MEĐUPOVRŠINSKOG SLOJA GRAFIT - VODENA OTOPINA ELEKTROLITA

Antun Barišić, Mirna Mandarić, Tajana Preočanin
Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Horvatovac 102a, Zagreb

Na dodiru krutih koloidnih čestica s vodenom otopinom elektrolita dolazi do nastanka električnog međupovršinskog sloja. Međupovršinski sloj nastaje kao posljedica električkog nabijanja površine, distribucije potencijal odredbenih iona i protuiona te reorijentacije molekula vode. Mehanizam nastajanja međupovršinskog sloja opisuje se fizikalnim modelima koji pretpostavljaju nastajanje dva ili više sloja definiranih površinskim potencijalima i gustoćama naboja. Međupovršinski sloj je karakteriziran padom potencijala pri čemu je potencijal najveći po iznosu na površini čestice te opada odmicanjem od nje [1-2]. Hidronijevi ioni utječu na iznos potencijala direktno kao potencijal odredbeni ioni i/ili

indirektno utječući na ravnotežne reakcije u međupovršinskom sloju. Stoga je mijenjanjem pH vodene otopine moguće utjecati na stanje u međupovršinskom sloju pa tako i na električni potencijal. Stanje međupovršinskog sloja u kojem nestaju sva električna svojstva naziva se točkom elektroneutralnosti (pH_{eln}). U slučaju zanemarivo male ili simetrične asocijacije protuiona točka elektroneutralnosti se nalazi pri istoj pH vrijednosti kao i izoelektrična točka i točka nul-naboja ($pH_{eln} = pH_{iep} = pH_{pzc}$)

Cilj ovog istraživanja je karakterizacija međupovršinskog sloja grafit - vodena otopina elektrolita. Površina grafita je kemijski inertna, odnosno kod nje ne dolazi do kemijskih reakcija između površine čestice i potencijal odredbenih iona iz vodene otopine elektrolita. Unatoč nedostatku kemijske reakcije istraživanja su pokazala da i kod inertnih površina dolazi do nastanka električnog međupovršinskog sloja koji je u neutralnom pH području negativno nabijen. Na temelju dosadašnjih istraživanja pretpostavljeno je da međupovršinski sloj nastaje akumulacijom potencijal odredbenih iona uz površinu čestica.

Kao metode istraživanja međupovršinskog sloja uz površinu grafita korištena je potenciometrijska masena titracija, elektroforeza, dinamičko raspršenje svjetlosti (DLS) i BET analiza površine.

1. N. Kallay, T. Preočanin, D. Kovačević, J. Lützenkirchen, E. Chibowski, *Croat. Chem. Acta* **83** (2010) 357.
2. J. Lützenkirchen, T. Preočanin, N. Kallay, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **10** (2008) 4946–4955.

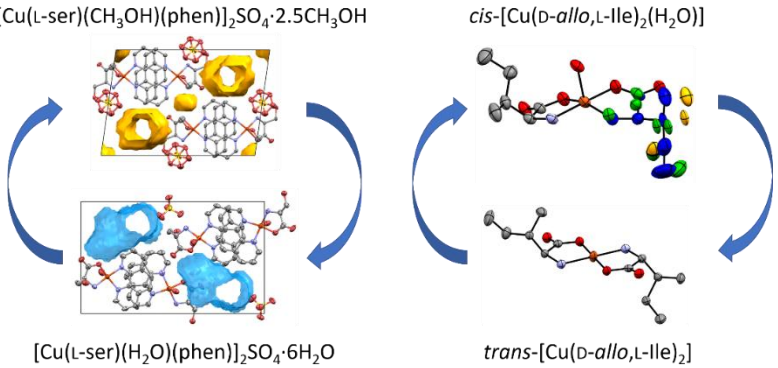
Rad je izrađen u okviru projekta podržanog od strane Hrvatske zaklade za znanost: IP-2014-09-6972.

P-K3: SOLVATOMORFIZAM I *CIS-TRANS* IZOMERIZACIJA U KOMPLEKSIMA BAKRA(II) SA SERINOM I IZOLEUCINOM

Darko Vušak[1], Jelena Budimčić[2], Jasmina Sabolović[2], Biserka Prugovečki[1], Dubravka Matković-Čalogović[1]

[1]*Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Horvatovac 102a, Zagreb*
[2]*Institut za medicinska istraživanja i medicinu rada, Ksaverska cesta 2, Zagreb*

Kompleksi standardnih aminokiselina s esencijalnim metalima od velikog su interesa za širok spektar znanstvenih područja. Budući da su aminokiseline sastavni dio proteina, a bakar izravno sudjeluje u metaboličkim procesima, kompleksni spojevi bakra s aminokiselinama mogu poslužiti kao modelni sustavi za proučavanje interakcija s proteinima.[1] Još jedan od smjerova istraživanja ovih spojeva je njihova biološka aktivnost. Sami kompleksi s aminokiselinama ili njihovim derivatima te kompleksi s aminokiselinama i heterocikličkim bazama, poput fenantrolina i 2,2'-bipiridina, pokazali su se kao biološki aktivni spojevi s izraženom antiproliferativnom aktivnosti.[2] Kompleksi s potencijalnim donorima i akceptorima vodikovih veza, primjerice aminokiseline s polarnim bočnim ograncima, mogu tvoriti porozne arhitekture u koje se mogu smjestiti molekule gosta zbog čega su takvi materijali našli primjenu u katalizi te za skladištenje molekula otapala.[3]



Analizirano je šest kristalnih struktura bakra(II) sa L-serinom (L-ser) i 1,10-fenantrolinom (phen): $[Cu(L\text{-ser})(H_2O)(phen)]_2SO_4{\cdot}nH_2O$ (n = 4, 6 i 10), $[Cu(L\text{-ser})(H_2O)(phen)][Cu(L\text{-ser})(CH_3OH)(phen)]SO_4{\cdot}3H_2O{\cdot}CH_3OH$, $[Cu(L\text{-ser})(CH_3OH)(phen)]_2SO_4{\cdot}mCH_3OH$ (m = 2 i 2.5), te će biti prikazani uvjeti pri kojima kristaliziraju pojedini kompleksi. Kompleksi su izrazito osjetljivi na vodu i metanol te je uspješno izvedena izmjena otapala među navedenim kompleksima u čvrstom stanju i predložen je mehanizam tih transformacija. Također, bit će prikazane dvije nove strukture bakra(II) s D-*allo*,L-izoleucinom (D-*allo*,L-

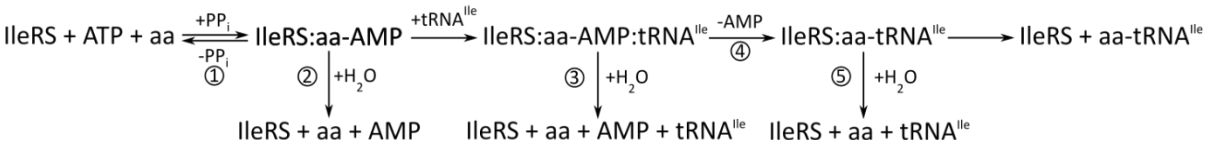
Ile): *cis*-[Cu(D-*allo*,L-Ile)$_2$(H_2O)] i *trans*-[Cu(D-*allo*,L-Ile)$_2$]. Pronađeni su uvjeti pri kojima kristaliziraju te je za ove komplekse uspješno izvedena *cistrans* izomerizacija u čvrstom stanju i u otopini.

1. C. R. K. Rao, N. Arulsamy, P. S. Zacharias, D. J. J. Hodgson, *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* (1993) 3581.
2. X. Y. Le, S. Liao, X. P. Liu, X. L. Feng, *J. Coord. Chem.* **59** (2006) 985.
3. A. C. Kathalikkattil, K. K. Bisht, P. S. Subramanian, E.Suresh, *Polyhedron* **29** (2010)1801.

P-K4: KINETIČKA RAZDIOBA U SINTETSKOM MJESTU IZOLEUCIL-TRNA-SINTETAZE ODREĐUJE MEHANIZAM DISKRIMINACIJE NEPRIPADNIH AMINOKISELINA

Igor Živković, Ita Gruić-Sovulj
Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Horvatovac 102a, Zagreb

Izoleucil-tRNA-sintetaza (IleRS) je enzim koji u dva koraka katalizira nastajanje Ile-tRNA^{Ile} koja je supstrat u ribosomskoj sintezi proteina. Prvo se aminokiselina aktivira i nastaje aminoacil-adenilat (1) dok drugi korak obuhvaća prijenos aminokiseline na tRNA (4). Prijetnju točnosti nastajanja Ile-tRNA^{Ile} (aminoacilacija) u stanici predstavljaju strukturno slične, nepripadne aminokiseline, poput valina, koje IleRS inicijalno diskriminira na razini vezanja u sintetsko mjesto. Kako ta diskriminacija nije dovoljno efikasna, IleRS upotrebljava i mehanizme popravka vlastite pogreške: tRNA-neovisni (2) i tRNA-ovisni (3) popravak pogreške prije prijenosa (hidroliza aminoacil-adenilata) te popravak pogreške poslije prijenosa aminokiseline (5) (hidroliza aminoacil-tRNA).[1] U ovom radu kinetički je okarakterizirana sposobnost diskriminacije IleRS iz bakterije *Escherichia coli* prema neproteinogenoj aminokiselini (S)-2-aminobutirična kiselina (α-Aba). Unatoč tome što je jedna od najstarijih aminokiselina[2] i što se akumulira u stanici, ona ne gradi proteine. Stoga je zanimljivo pitanje diskriminira li se α-Aba od strane IleRS poput nepripadnog, proteinogenog valina? U aktivaciji IleRS diskriminira α-Aba temeljno kroz povećanje K_m, a manje kroz snižavanje k_{cat}. Suprotno očekivanom, reakcija prijenosa α-Aba na tRNA je do 10 puta brža nego uz pripadni izoleucin i nepripadni valin. Iako preliminarni rezultati sugeriraju da je hidroliza α-ABA-tRNA^{Ile} spora, IleRS ne aminoacilira tRNA^{Ile} s α-Aba. Aminoaciliranje je opaženo uz mutant IleRS koji ne posjeduje popravak pogreške poslije prijenosa, što sugerira kako je taj popravak, iako manje efikasan nego uz valin, presudan za točnost aminoacilacije u prisutnosti α-Aba. Detalje mehanizma još proučavamo. Konačno, IleRS ne elimira α-Aba kroz tRNA-ovisan popravak pogreške prije prijenosa, koji je do sada smatran kao temeljna karakteristika IleRS. Zaključujemo kako se α-Aba drugačije diskriminira od valina, što se očituje kroz brzi prijenos koji kinetički kompetira hidrolizi aminoacil-adenilata te sporiji popravak pogreške poslije prijenosa. Dodatno se proučavaju fluorirani analozi α-Aba, zanimljivi zbog uloge novih gradivnih blokova proteina[3]. Značajna razlika u mehanizmu diskriminacije α-Aba i fluoriranih analoga od strane IleRS nije uočena.



Slika 1. Shema reakcija izoleucil-tRNA-sintetaze.

1. J. J. Perona, I. Gruic-Sovulj I., *Top. Curr. Chem.* **344** (2014) 1-41.
2. A. L. Weber, S. L. Miller, *J. Mol. Evol.* **17** (1981) 273-284.
3. A. A. Berger, J. S. Völler, N. Budisa, B. Koksch, *Acc. Chem. Res*. **50** (2017) 2093-2103.

P-K5: UTJECAJ ZAMJENE Li_2O I Ag_2O S WO_3 I MoO_3 NA MEHANIZAM ELEKTRIČNOG TRANSPORTA I STRUKTURU CINK FOSFATNIH STAKALA

Juraj Nikolić[1], Luka Pavić[1], Ana Šantić[1], Petr Mošner[2], Ladislav Koudelka[2], Andrea Moguš-Milanković[1]

[1]*Zavod za kemiju materijala, Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, Zagreb*

[2]*Odsjek za opću i anorgansku kemiju, Fakultet kemijske tehnologije, Sveučilište u Pardubicama, Pardubice, Češka*

U ovom istraživanju istraživana su stakla sastava (30-0.5*x*)M_2O-(30-0.5*x*)ZnO-40P_2O_5-*x*TMO (0≤*x*≤60%) (M = Li, Ag; TMO = WO_3, MoO_3). Električni transport u staklima koja sadrže alkalijske i pseudoalkalijske okside i prijelazne metalne okside je ionsko-polaronski. Naime, ovisno o količini i mobilnosti Li^+ odnosno Ag^+ pokazuju ionsku vodljivost, dok polaronska vodljivosti ovisi o koncentraciji malog polarona odnosno udjelu iona prijelaznih metala u nižim oksidacijskim stanjima. Ova stakla se istražuju zbog moguće primjene u čvrstim Li ili Ag baterijama kao katodni materijali. Ovo istraživanje ima za cilj pokazati kako zamjena Li_2O i Ag_2O s WO_3 i MoO_3 u četiri serije stakala utječe na strukturu i električna svojstva.

Da bi se dobio uvid u strukturu stakla korištena je Ramanska spektroskopija, dok se za istraživanja električnih svojstava stakla koristila impedancijska spektroskopija (IS).

Stakla s visokim udjelima Ag_2O pokazuju izrazito visoku električnu vodljivost u usporedbi sa stakalima s istim množinskim udjelom Li_2O. U slučaju početnog dodatka WO_3 u obje serije cink fosfatnih stakala dolazi do pada električne vodljivosti do minimuma (na 20% množinskog udjela WO_3 za Li seriju stakala i 30-40% množinskog udjela WO_3 za Ag seriju stakala), dok daljnjim dodatkom WO_3 vodljivost poraste za nekoliko redova veličine. S druge strane, električna vodljivost MoO_3 stakala je u slučaju Li serije stakala gotovo konstantna do 50% množinskog udjela MoO_3 dok u slučaju Ag serije stakala u istom području sastava vodljivost linearno pada. Nakon 50% množinskog udjela dodanog MoO_3 primjećen je porast vodljivosti za čisto polaronsko staklo koje sadrži samo MoO_3.

U ovoj prezentaciji rezultata biti će naglasak na povezivanju promjena električne vodljivosti s promjenama strukture u ovisnosti o tipu oksida koji su prisutni u staklima, a prikazat će se i usporedni pregled električne vodljivosti.

P-K6: KONFORMACIJSKA ANALIZA *trans*-DEKALINA

Karlo Sović, Tomica Hrenar

Kemijski odsjek Prirodoslovno-matematičkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu, Horvatovac 102A, Zagreb

Novi postupak potpune konformacijske analize [1], koji uključuje statističku analizu trajektorije molekularne dinamike, primijenjen je na molekulu *trans*-dekalina. Metoda se zasniva na uzorkovanju struktura u Cartesiusovim ili internim koordinatama provođenjem *ab initio* molekularne dinamike, redukciji dimenzionalnosti tenzorskom dekompozicijom, određivanju funkcije raspodjele vjerojatnosti u reduciranom prostoru i na kraju na algoritmu pretrage lokalnih maksimuma dobivene funkcije. Iz točaka maksimuma opisane funkcije generiraju se strukture koje se koriste kao početne strukture za optimizacije geometrije. Optimizirane strukture se potom klasteriraju u skup neredundantnih konformera. Potpuna konformacijska analiza provedena je na molekuli *trans*-dekalina, u vakuumu koristeći semiempirijsku metodu PM7 [2]. Trajektorija od ukupno 10 milijuna točaka generirana je na temperaturi od 1298,15 K s integracijskim korakom od 0,5 fs koristeći *Velocity-Verlet* integracijski algoritam [3]. U analizi trajektorije uzeto je 10 komponenata reduciranog prostora koji zajedno opisuju preko 90 % varijancije sustava te je identificirano ukupno 7 konformera [4]. Konformeri su strukturno ispitani i određena im je zastupljenost u opisu ukupne energije prema Boltzmannovoj raspodjeli pri sobnoj temperaturi.

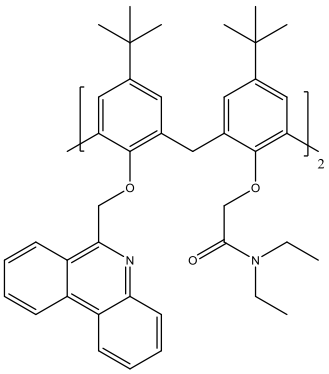
1. T. Hrenar, I. Primožič, D. Fijan, M. Majerić Elenkov, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19** (2017) 31706.
2. MOPAC2016, J. J. P. Stewart, Stewart Computational Chemistry, Colorado Springs, CO, USA, 2016, http://OpenMOPAC.net

3. T. Hrenar, ***qcc***, Quantum Chemistry Code, rev. 0.682, 2017.
4. T. Hrenar, ***moonee***, Program for Manipulation and Analysis of Multi- and Univariate Data, rev. 0.6827, 2017.

P-K7: SINTEZA I KOMPLEKSACIJSKA SVOJSTVA FENANTRIDINSKOG DERIVATA KALIKS[4]ARENA

Katarina Leko, Andrea Usenik, Nikola Cindro, Vladislav Tomišić
Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Horvatovac 102a, Zagreb

Kaliksareni su makrociklički oligomeri koji se sastoje od četiri ili više fenolnih podjedinica povezanih metilenskim skupinama u *ortho*-položaju fenola. Specifičan oblik i mogućnost njihove funkcionalizacije čine kaliksarene vrlo zanimljivim molekulama domaćinima za razne neutralne i nabijene goste. Derivati kaliksarena koji posjeduju ketonske, esterske ili amidne funkcionalne skupine na donjem obodu pokazuju velik afinitet za vezanje kationa.[1–3] Uvođenjem fluorescentnih supstituenata u strukturu tih spojeva moguće je prirediti visokoosjetljive senzore za niz kemijskih vrsta.[1–3] U okviru ovog rada pripravljen je derivat kaliks[4]arena s tercijarnim amidnim supstituentima koji tvore dio veznog mjesta, dok su na preostalim podjedinicama vezani fenantridinski fluorofori koji također sudjeluju u procesu kompleksiranja kationa (slika 1). Kalorimetrijskim, spektrofotometrijskim i fluorimetrijskim titracijama istražene su reakcije tog spoja s kationima alkalijskih metala u acetonitrilu i metanolu. Određene su konstante stabilnosti odgovarajućih kompleksa te standardne reakcijske entalpije i entropije. Fluorimetrijskim titracijama istražen je utjecaj otapala i vezanja kationa na intezitet fluorescencije, a time i potencijalna primjena priređenog kaliksarenskog receptora kao fluorescentnog senzora za katione alkalijskih metala.



Slika 1. Struktura fenantridinskog derivata kaliks[4]arena.

1. J. S Kim, D. T. Quang, *Chem. Rev*. **107** (2007) 3780-3799.
2. M. Tranfić Bakić, D. Jadreško, T. Hrenar, G. Horvat, J. Požar, N. Galić, V. Sokol, R. Tomaš, S. Alihodžić, M. Žinić, L. Frkanec, V. Tomišić, *RSC Adv.* **5** (2015) 23900-23914.
3. N. Galić, N. Burić, R.Tomaš, L. Frkanec, V. Tomišić, *Supramol. Chem.* **23** (2011)389-397.

P-K8: KOMBINIRANA MEHANOKEMIJSKA I OTOPINSKA SINTEZA ADICIJSKIH SPOJEVA BAKROVIH(ii) SALICILATA

Aleksandar Meštrić, Nenad Judaš
Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Horvatovac 102A, Zagreb

Molekulske strukture bakrovih(II) karboksilata u pravilu su binuklearne, a zbog prostornog rasporeda karboksilatnih liganada oblikom podsjećaju na vodenično kolo (eng. *paddlewheel*). Karboksilatni ligandi atomima kisika premošćuju dva bakrova(II) iona čiji su koordinacijski poliedri kvadratno-piramidne građe, jer se u apikalne položaje za bakrove(II) ione vežu različite Lewisove baze (npr. molekule vode, alkohola ili aminskih derivata).

Postupci priprave ovih binukleranih kompleksa jednostavni su, a mogućnost apikalnog vezanja različitih adenada čini ih dobrim polaznim građevnim jedinicama u području kristalnog inženjerstva, npr. za pripravu mrežastih kristalnih struktura koje sadrže ione metala (MOF). [1,2,3,4].

CSD sadrži neočekivano mali broj binukleranih kompleksa bakrovih(II) salicilata te smo stoga odlučili istražiti mogućnosti priprave ovih građevnih jedinica kombiniranjem mehanokemijskih i klasičnih otopinskih sintetskih postupaka te su uspješno pripremljeni monokristalni uzorci dvaju adicijskih spojeva čije kristalne i molekulske strukture do sada nisu bile poznate. To su:

(A) tetra-μ-salicilato-κ^8O:O'-bis[(metanol)dibakar(II)] i

(**B**) benzojeva kiselina salicilna kiselina tetra-μ-salicilato-κ^8O:O'-bis[(voda)dibakar(II)].

Kristalni podatci

(A) $C_{30}H_{26}O_{14}Cu_2$, M_r = 737,31, monoklinski, $C2/c$, ***a*** = 45,167(4) Å, ***b*** = 6,849(1) Å, ***c*** = 22,221(2) Å, β = 110,44(1), V = 6441,7(1) Å^3, Z = 4, D_c = 1,51 g cm^{-3}, λ(MoK_α) = 0,71073 Å, R = 0,0836, wR = 0,2403 za 3956 difrakcijskih maksimuma za koje vrijedi [$F_o > 4\sigma(F_o)$] od ukupno 9838 prikupljenih difrakcijskih maksimuma i 437 promjenjivih parametara.

(B) $C_{28}H_{17}O_{12}Cu$, M_r = 608,69, monoklinski, $P2_1/c$, ***a*** = 20,032(2) Å, ***b*** = 6,938(1) Å, ***c*** = 21,621(2) Å, β = 110,44(1), V = 2984,6(1) Å^3, Z = 4, D_c = 1,50 g cm^{-3}, λ(MoK_α) = 0,71073 Å, R = 0,0875, wR = 0,2452 za 3330 difrakcijskih maksimuma za koje vrijedi [$F_o > 4\sigma(F_o)$] od ukupno 7387 prikupljenih difrakcijskih maksimuma i 366 promjenjivih parametara.

Ovi rezultati pružaju nove mogućnosti za sintezu različitih adicijskih spojeva binuklearnih bakrovih(II) karboksilata *in situ* te posljedično i ciljanih višekomponentnih supramolekulskih mreža koje sadrže ione metala.

1. Papaefstathiou, G. S., MacGillivray, L. R., *Angew. Chem. Int. Ed.* **41** (2002) 2070–2073.
2. Papaefstathiou, G. S., MacGillivray, L. R., *Coord. Chem. Rev.* **246** (2003) 169–184.
3. C. B. Aakeröy, N. Schultheiss , J. Desper, *Inorg. Chem.* **44** (2005) 4983–4991.
4. L. R. MacGillivray, G. S. Papaefstathiou, T. Frisčić, D. B. Varshney, T. D. Hamilton, *Top. Curr. Chem.* **248** (2004) 201–221.

P-K9: UTJECAJ OTAPALA NA STRUKTURNU RAZNOLIKOST HETEROMETALNIH [$Cu^{II}Cr^{III}$] KOMPLEKSNIH SPOJEVA

Lidija Kanižaj, Krešimir Molčanov, Marijana Jurić
Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, Zagreb

Oksalatna skupina $C_2O_4^{2-}$ se u kristalnom inženjerstvu smatra građevnim elementom koji određuje kristalno slaganje i dimenzionalnost koordinacijskih spojeva. Ona ima mogućnost premošćivanja dvaju ili više metalnih centara na različite načine, od kojih su najčešći bidentatni i bis(bidentatni), čime je omogućeno elektronsko međudjelovanje između tih metalnih centara. Upravo je svojstvo posredovanja oksalatne skupine u magnetskoj interakciji između paramagnetskih centara koji su njome premošteni (intramolekulska udaljenost metal-metal je veća od 5 Å) zaslužno za intenzivna magnetno-strukturna istraživanja oksalatnih kompleksa, te su ovakvi spojevi uvelike doprinijeli razvoju novih saznanja u području molekulskog magnetizma. Za pripravu heteropolinuklearnih spojeva koristi se pristup *kemije*

građevnih blokova ili *kompleksi kao ligandi*, gdje se mononuklearni anionski kompleksi koriste kao ligandi prema drugom metalnom ionu. U koordinacijsku sferu metalnog iona često se dodaju bočni ligandi, i to aromatski bidentatni *N*-donorski ligandi koji lako tvore komplekse s različitim prijelaznim metalima i koji dodatno stabiliziraju kompleksni spoj putem interakcija između aromatskih prstenova.

Tehnikom naslojavanja u epruveti, reakcijama vodene otopine $K_3[Cr(C_2O_4)_3]\cdot 3H_2O$ i različitih otopina $CuCl_2\cdot H_2O$ i 1,10-fenantrolina (phen) u molarnom omjeru 1:1:1, priređene su tri heterometalne kompleksne soli: plavozeleni štapićasti kristali spoja $\{[Cu(phen)_2]_2Cr(C_2O_4)_3\}[Cu(phen)_2Cr(C_2O_4)_3]\cdot 12H_2O$ (**1**), i to kada su reaktanti otopljeni u etanolu, tamnozelene prizme spojeva $[CuCl(phen)_2]_2[Cu(phen)_2$ - $Cr(C_2O_4)_3]_2\cdot 5H_2O\cdot 5CH_3OH$ (**2**) i $[CuCl(phen)_2][Cu(phen)_2(H_2O)][Cr(C_2O_4)_3]\cdot 5H_2O$ (**3**) kada je kao otapalo korišten metanol, odnosno acetonitril. Svojstva pripravljenih kompleksa istražena su IR-spektroskopijom i difrakcijom rendgenskih zraka na monokristalu.

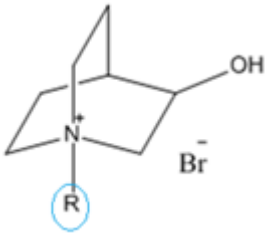
Spoj **1** građen je od trinuklearnog kationa i dinuklearnog aniona, u kojima je kompleksni anion $[Cr(C_2O_4)_3]^{3-}$ bidentatno koordiniran na dvije, odnosno jednu jedinku $[Cu(phen)_2]^{2+}$. Spoj **2** sadrži, pored istih aniona kao i spoj **1**, mononuklearne katione bakra(II) s koordinacijom trigonske bipiramide, koju čine četiri atoma dušika dviju molekula fenatrolina i kloridni ion. Priređena sol **3** se sastoji od triju mononuklearnih jedinki, dva mononuklearna kationa bakra(II), koji pored koordiniranih aromatskih liganada imaju vezan ili klorid ili vodu, i neizreagiranog građevnog bloka kroma(III).

P-K10: ANTIMICROBIAL ACTIVITY OF QUATERNARY 3-HYDROXYQUINUCLIDINIUM SALTS WITH LONG ALKYL CHAINS

Linda Bazina[1], Barbara Soldo[1], Ana Maravić[2], Ines Primožič[3], Matilda Šprung[1], Renata Odžak[1]
[1]Department of Chemistry, Faculty of Science, University of Split, R. Boškovića 33, Split,
[2]Department of Biology, Faculty of Science, University of Split, R. Boškovića 33, Split
[3]Department of Chemistry, Faculty of Science, University of Zagreb, Horvatovac 102a, Zagreb

Quinuclidine, bicyclic part of some alkaloids, easily forms quaternary ammonium compounds (QACs) which exhibit diverse biological and pharmacological activity. Given their amphiphilic nature, cationic part of salts interacts with the negatively charged phospholipids of the bacterial cell wall so that long alkyl tails of salts can penetrate into the membrane of bacteria. [1]
In order to explore antimicrobial activity we have synthesized quaternary 3-hydroxyquinuclidinium salts with different lengths of alkyl chains (C10, C12 and C14). Compounds were acquired in significant yields and their structures were affirmed by ^{1}H NMR, ^{13}C NMR and IR spectral data.

The antimicrobial activity was tested against Gram-positive, Gram-negative bacteria both ATCC and clinical isolates as well against fungal strains, using broth microdiluton method to determine minimum inhibitory concentrations (MICs). Activity toward inhibition of the biofilm structures was also tested. Our preliminary results indicate that the tested compounds have a better activity against Gram-positive bacteria and the compound displaying the highest antibacterial activity is the one with the longest alkyl chain.



R
$-C_{10}H_{21}$
$-C_{12}H_{25}$
$-C_{14}H_{29}$

1. M. C. Jennings, K. P. C. Minbiole, W. M. Wuest, *ACS Infect. Dis*. **1** (2015) 288-303.

P-K11: MEHANIZAM HIDROLIZE PEPTIDNE VEZE NA MODELNOM SUSTAVU DPP III IZ *Bacteroides thetaiotaomicron*

Marko Tomin, Sanja Tomić
Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, Zagreb

Dipeptidil-peptidaza III (DPP III) je o cinku ovisna metalopeptidaza koja otcjepljuje dipeptide s N-terminusa svojih supstrata. Obzirom na široku supstratnu specifičnost te prisutnost u citosolu pretpostavlja se da sudjeluje u završnim koracima razgradnje proteina u stanici. U viših organizama povezana je s obranom od oksidativnog stresa,[1] te je razumijevanje njene uloge kod oportunih patogena poput *B. thetaiotaomicron* (*Bt*) od potencijalnog kliničkog značaja.

Modelni sustav sačinjen je od iona cinka, His448 i His453 te Glu476 koji koordiniraju atom cinka, Glu449 koji sudjeluje u hidrolizi, molekule vode te His533 i Tyr309 koji stabiliziraju supstrat. Polazna geometrija priređena je iz prethodno provedenih dugih MD simulacija *Bt*DPP III u kompleksu sa sintetskim supstratom Arg_2-naftil-2-amidom. Kao modelni supstrat korišten je CH_3CO-Gly-$NHCH_3$. Sustav je opisan korištenjem B97D funkcionala uz 6-31G(d) osnovni skup, dok je ion cinka u aktivnom mjestu opisan ECP skupom LANL2DZ. Ova se metoda pokazala uspješnom u prijašnjim radovima na humanom ortologu.[3]

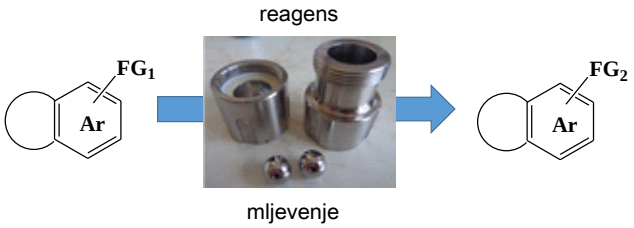
Predloženi mehanizam pokazuje znatne sličnosti s onim određenim za humani enzim[3], dok se razlike u energetskim barijerama kvalitativno poklapaju s eksperimentalno određenom slabijom katalitičkom aktivnosti DPP III iz *B. thetaiotaomicron*.[4] Određivanje mehanizma hidrolize na modelnom sustavu služit će kao polazna točka za buduće kvantno-mehaničke/molekulsko mehaničke račune koji će u razmatranje uključiti cijeli enzim.

1. B. E. Hast, D. Goldfarb, K. M. Mulvaney, M. A. Hast, P. F. Siesser, F. Yan, D. N. Hayes and M. B. Major, *Cancer Res*, **73** (2013) 2199-2210.
2. M. Tomin, S. Tomić, *Mol. Biosys.* **13** (2017) 2407-24177.
3. A. Tomić, B. Kovačevic, S. Tomić, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18** (2016) 27245-27256.
4. B. Vukelić, B. Salopek-Sondi, J. Špoljarić, I. Sabljić, N. Meštrović, D. Agić, M. Abramić, *Biol. Chem.* **393** (2012) 37-46.

P-K12: PRIMJENA MEHANOKEMIJE U FUNKCIONALIZACIJI AROMATSKIH SPOJEVA

Mateja Đud, Zoran Glasovac, Davor Margetić
Laboratorij za fizikalno organsku kemiju, Zavod za organsku kemiju i biokemiju, Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, Zagreb

Ekološki prihvatljiviji reakcijski uvjeti[1] u mehanokemijskim sintezama bez otapala [2] razvijeni su za reakcije funkcionalizacije aromatskih spojeva (reakcije gvanilacije aromatskih gvanidina i njihove deprotekcija).



FG_1 = NH_2, NHCNBocNHBoc
FG_2 = NHCNBocNHBoc, $HNHCNHNH_2$

Optimirani su reakcijski parametri kao što su vrijeme reakcije, omjer reagensa, dodaci mljevenju, frekvencija mlina, veličina i broj kuglica, otapala za mljevenje s tekućinom, kako bi se utvrdili optimalni uvjeti reakcije. [3] Primjenjivost reakcije je istražena upotrebom različitih aromatskih amina. Pokazano je da se reaktivni aromatski amini mogu učinkovito funkcionalizirati pomoću gvaniliranja provedenih u uvjetima kugličnog mljevenja bez prisutnosti otapala.

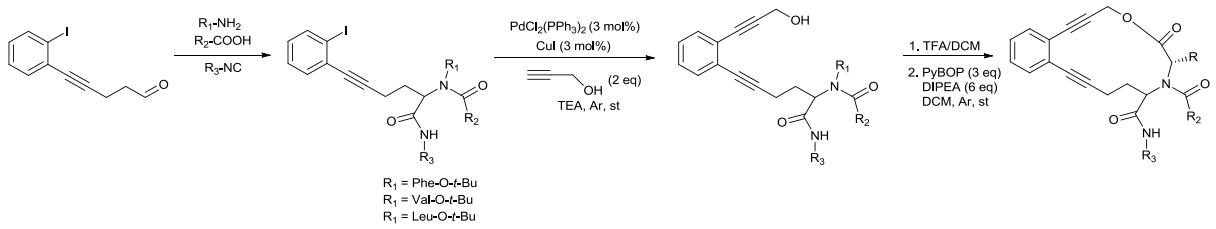
1. Ballini, R. (ed.), *Eco-Friendly Synthesis of Fine Chemicals*, RSC, Cambridge, 2009.
2. Margetić, D.; Štrukil, V., *Mechanochemical Organic Synthesis*, Elsevier, Amsterdam, 2016.
3. Đud, M.; Margetić, D., *Int. J. Org. Chem.* **7** (2017) 140.

P-K13: SINTEZA MARKOCIKLIČKIH SPOJEVA S ENDIINSKIM MOTIVOM

Mladena Glavaš, Matija Grdičak, Ivanka Jerić
Zavod za organsku kemiju i biokemiju, Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, Zagreb

Višekomponentne reakcije (*eng. multicomponent reactions*, MCRs) predstavljaju moćnu metodu za uvođenje kemijske različitosti i stvaranje biblioteka spojeva.[1] Osnovni princip je stvaranje relativno složene strukture iz jednostavnih polaznih spojeva u jednom koraku, čime se zaobilazi uzastopno ponavljanje bimolekularnih reakcija i povećava efikasnost kemijske sinteze. Vrlo značajna skupina MCRs je ona koja uključuje izocijandinu skupinu (eng. *isocyanide based MCRs* – IMRCs). Jedna od najviše korištenih reakcija iz ove skupine je Ugijeva reakcija, koja uključuje četiri komponente – karbonilnu, karboksilnu, izocijanidnu i amino komponentu. Ugijeva reakcija uvelike se koristi za sintezu peptidomimetika, spojeva koji mogu oponašati strukturu i funkciju prirodnih peptida i proteina te pripravu cikličkih produkata post-kondenzacijskim modifikacijama njihovih linearnih preteča.[2]

Naš cilj bio je priprava Ugijevih produkata s endiinskim motivom te sinteza makrocikličkih spojeva iz acikličkih analoga (Shema 1). Endiinski motiv otkriven je krajem 20-tog stoljeća u nekoliko vrsta mikroorganizama, a izolirani spojevi pokazali su antitumorsku aktivnost.[3] Osim toga, spojevi s ovakvim motivom pokazali su primjenu u asimetričnoj reakciji hidrogeniranja,[4a] induciranju konformacije β-okreta te kompleksiranju kationa metala.[4b] Ugijeva reakcija provedena je iz endiinskog aldehida i C-zaštićene aminokiseline te komercijalno dostupnih izocijanida i karboksilnih kiselina. Sinteza markocikličkih produkata provedena je pripravom esterske veze iz acikličkih analoga.



Shema 1. Sinteza makrocikličkih spojeva.

1. G. Koopmanschap, E. Ruijter, R. V. A. Orru, *Beilstein J. Org. Chem*. **10** (2014) 544-598.
2. L. A. Wessjohann, D. G. Rivera, O. E. Vercillo, *Chem. Rev.* **109** (2009) 796-814.
3. K. C. Nicolaou, W.-M. Dai, *Angew. Chem. Int. Ed.* **30** (1991) 1387-1416.
4. a) Z. Kokan, Z. Glasovac, M. Majerić Elenkov, M. Grdičak, I. Jerić, S. I. Kirin, *Organometallics* **33** (2014) 4005-4015. b) M. Grdičak, N. Bregović, D. Carić, I. Jerić, *J. Inorg. Biochem.* **116** (2012) 45-52.

P-K14: MODELNI SUSTAV REAKTIVNOG ALDEHIDA I AMINOKISELINE: REAKCIJSKI MEHANIZAM

Sanja Škulj, Katarina Vazdar, Mario Vazdar
Zavod za organsku kemiju i biokemiju, Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, Zagreb

Transport protona kroz mitohondrijske stanične membrane jedan je od osnovnih metaboličkih procesa u organizmu.1 U uvjetima oksidativnog stresa u stanicama nastaju različite reaktivne oksidativne vrste koje mogu reagirati s biomolekulama u staničnim membranama.2 Time dolazi do značajnog povećanja transporta protona kroz membranu i poremećaja u metabolizmu stanice, a mehanizam koji dovodi do takvog povećanja još uvijek nije detaljno razjašnjen. Jedna od glavnih oksidativnih vrsta koje nastaju tijekom oksidativnog stresa je 4-hidroksi-2-nonenal (4-HNE) koji lako može reagirati s proteinima smještenim u membrani.3 U svrhu razumijevanja kemijskih reakcija koje su relevantne u biološkim membranama u takvim uvjetima, za reakciju modelne aminokiseline lizina i 4-HNE-a izračunate su energetske barijere i relativne stabilnosti nastalih produkata i intermedijera na SMD/MP2/6-311++G(d,p)//B3LYP/6-31G(d) razini teorije. Predložen je detaljni reakcijski mehanizam za modelnu reakciju u diklormetanu te acetonitrilu s jednom molekulom vode koji simuliraju jednostavne modele hidrofobnog, odnosno hidrofilnog dijela fosfolipidnog dvosloja. Rezultati teorijskih istraživanja slažu se s eksperimentalnim rezultatima gdje je u diklormetanu, kao nevodenom inertnom otapalu, najstabilniji produkt adukt pirola s iskorištenjem od 61%. U aprotičnom acetonitrilu s vodom, pirolni adukt je samo jedan od produkata čiji udio se smanjuje povećanjem udjela vode, a uz njega nastaju i hemiacetal i Schiffova baza s iskorištenjima od 30% do 50%. Predloženi modelni sustav temelj je za daljnja složenija istraživanja svojstava modificiranih fosfolipidnih membrana jer opisuje jednostavne modelne reakcije koje simuliraju uvjete oksidativnog stresa u fosfolipidnom dvosloju. Nadalje, ovaj sustav pokazuje i kako mogu nastati različiti produkti ovisno u kojem mediju se reakcija odvija te kako prisustvo vode može smanjiti reakcijske barijere i odrediti koji produkti će nastati u takvim uvjetima.

1. J. M. Berg, J. L. Tymoczko, L. Stryer, *Biochemistry*, W H Freeman, New York, 2002, str. 491-526.
2. O. Jovanović, A. A. Pashkovskaya, A. Annibal, M. Vazdar, N. Burchardt, A. Sansone, L. Gille, M. Fedorova, C. Ferreri, E. E. Pohl, *Free Radic. Biol. Med* **89** (2015) 1067-1076.
3. G. Poli, R. J. Schaur, W. G. Siems, G. Leonarduzzi, *Med. Res. Rev.* **28** (2008) 569–631.

P-K15: RAČUNALNI UVID U REVERZIBILNU INHIBICIJU MONOAMINOOKSIDAZE B

Tana Tandarić, Robert Vianello
Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, Zagreb

Monoaminooksidaze (MAO) su flavoenzimi bitni za regulaciju razina endogenih i egzogenih amina u organizmu uključujući neurotransmitere u mozgu. Predstavljaju glavnu farmakološku metu u terapiji depresije i Parkinsonove bolesti. Postoje dvije izoforme enzima, MAO A i MAO B kojepokazuju značajne razlike u selektivnosti prema supstratima, a posebice inhibitorima. [1] U ovom radu fokus je na selektivnim ireverzibilnim inhibitorima MAO B, rasagilinu i selegilinu, koji se koriste za olakšavanje simptoma Parkinsonove bolesti. Oba inhibitora tvore kovalentnu vezu s organskim kofaktorom flavindinukleotidom (FAD) te na taj način onemogućuju daljnju katalitičku aktivnost MAO B.

U ovom radu, korištenjem molekularne dinamike (MD), simulirano je 300 ns interakcije MAO B s oba inhibitora. Pokazano je da Tyr398 i Tyr435 čine aromatski kavez koji interreagira s aromatskim dijelom inhibitora. Ile199 okarakteriziran je kao strukturno odgovoran za selektivnost inhibitora što potvrđuje eksperimentalno dobivene rezultate. [2] Aromatske interakcije inhibitora s aminikiselinama aromatskog kaveza kao i vodikove veze koje inhibitori ostvaruju s karbonilnim kisikom O8 u flavinskom kofaktoru stavljaju inhibitore u povoljan položaj za reakciju koja vodi do kovalentnog vezanja inhibitora na FAD. Korištenjem MMPBSA alata dobivene su vrijednosti slobodnih energija vezanja. Rezultati pokazuju da se selegilin veže bolje od rasagilina za 1,4 kcal/mol što je u skladu s eksperimentalnim IC50 vrijednostima. [3]

Kvantno-kemijska analiza u okviru klaster-modela enzima pokazala je da je MAO inhibicija reakcija u 4 koraka pri čemu u prvom koraku, koji određuje ukupnu brzinu reakcije, FAD odcjepljuje hidridni ion sa α-metilenske skupine supstrata u potpunoj analogiji s MAO katalitičkim mehanizmom.[4] Dobiveni reakcijski profili i konačna struktura inhibiranog enzima u odličnom su slaganju s eksperimentalnim podacima.

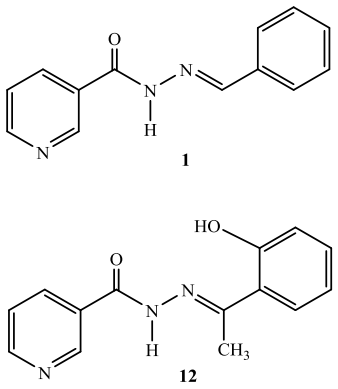
Ostvareni rezultati od velike su važnosti za razvoj novih i efikasnijih MAO B inhibitora koji su u kliničkoj primjeni.

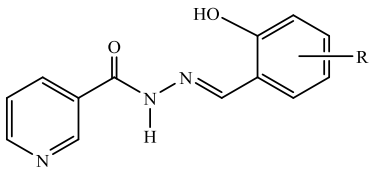
1. R. R. Ramsay, *Curr. Top. Med. Chem*. **12** (2012) 2189–2209.
2. F. Hubálek, C. Binda, A. Khalil, M. Li , A. Mattevi, N. Castagnoli, D.E. Edmondson, *J. Biol. Chem.* **280** (2005) 15761-15766.
3. M. B. H.Youdim, A. Gross, J. P. M. Finberg, *Brit. J. Pharmacol.* **132** (2001) 500–506.
4. R. Vianello, C. Domene, J. Mavri, *Front. Neurosci.* **10** (2016) 327-351.

P-K16: KARAKTERIZACIJA HIDRAZONA I NJIHOVIH KOMPLEKSNIH SPOJEVA SA ŽELJEZOM(III) SPEKTROMETRIJOM MASA

Tomislav Benković[1], Darko Kontrec[2], Nives Galić[1]
[1]*Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Horvatovac 102a, Zagreb*
[2]*Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, Zagreb*

Spektrometrijom masa analizirani su aroilhidrazoni **1**–**12**, te kompleksi spojeva **6** i **7** sa željezom(III). Osnovni signal u MS spektru hidrazona pripisan je protoniranoj molekuli ($[M+H]^+$). Osim iona karakterističnih za dio koji potječe od hidrazida nikotinske kiseline, u spektrima masa hidrazona **2**–**12** uočeni su i signali iona koji nastaju gubitkom 122 Da ($–C_5H_4NCONH_2$) pri čemu naboj ostaje na dijelu molekule koji potječe od aldehida ili ketona.





R = H (**2**); 3-OH (**3**); 4-OH (**4**); 5-OH (**5**); 3-OCH_3 (**6**); 4-OCH_3 (**7**); 3-Cl (**8**); 5-Cl (**9**); 3,5-Cl (**10**), 5-NO_2 (**11**)

Na temelju različitih intenziteta signala u MS/MS spektrima hidrazona razlikovani su pojedini strukturni izomeri. Spoj **6** u plinskoj fazi stabilniji je u keto obliku (–NHCH=C–C=O), dok je ravnoteža spoja **7** pomaknuta prema enolnom obliku (–N=CH–C–C–OH). Strukturni izomeri određeni su na temelju fragmentacije fragmentnog iona *m/z* 150. Primjenom tandemne spektrometrije masa i uslijed "*ortho* efekta" također je bilo moguće razlikovati strukturne izomere **3**–**5** (spojeve s hidroksilnim skupinama smještenim u *orto*, *meta* i *para* položaju na fenilnom prstenu) te izomere **8** i **9** (spojeve s atomima klora u *orto* i *para* položaju u odnosu na hidroksilnu skupinu). Tijekom fragmentacije spoja **11** s nitro skupinom na fenilnom prstenu uočeno je homolitičko pucanje veza i nastajanje kationskog radikala.

U spektrima masa kompleksa spojeva **6** i **7** sa željezom(III) uočeni su signali jednostruko nabijenih iona $[Fe(\mathbf{L})]^+$ visokih intenziteta u kojem je ligand dvostruko deprotoniran, kao i signali dvostruko nabijenih iona $[Fe(\mathbf{HL})]^{2+}$ niskih intenziteta. Na temelju MS/MS spektara navedenih iona predložene su odgovarajuće sheme fragmentiranja.

Rad je financiran sredstvima Hrvatske zaklade za znanost (projekt IP-2014-09-4841).

P-K17: ISTRAŽIVANJA REKACIJA POLIMERIZACIJE U MOLEKULSKIM SAMOUDRUGAMA DERIVATA BIS(AMINOKISELINA) AMIDA FUMARINSKE KISELINE

Tomislav Gregorić, Janja Makarević, Leo Frkanec
Laboratorij za supramolekularnu kemiju, Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, Zagreb

Supramolekularni gelovi su nova klasa samoorganiziranih nanomaterijala koji posljednjih desetljeća predstavljaju veliki izazov zbog svojstava, specifičnih primjena i pripreme novih materijala[1]. Istražili smo utjecaj samo-organizacije organogelatora [2,3] na polimerizaciju u gelovima uz pomoć ultraljubičastog (UV) i gama zračenja. Za UV zračenje koristili smo visokotlačnu Hg lampu (100 W) i fotoinitiator benzofenon, a za gama zračenje koristili smo izvor ^{60}Co u ukupnoj dozi od 200 kGy i brzina doziranja od 14 kGy / hGy min-1. Sintetski dio ovog rada bio je pripremiti metilni ester bis (L-Leu) fumarata i vinilni ester bis (L-Leu ili L-Val) fumarata reakcijom fumaril klorida s vinilnim esterom odgovarajuće aminokiseline. Vinilni esteri aminokiselina pripravljeni su Pd-kataliziranom transviniliranjem s vinil acetatom. Ovi spojevi su gelatori različitih organskih otapala. Nakon pripreme supramolekularnih gelova bis (L-Leu ili L-Val) fumarata u toluenu i smjesi H_2O/DMF, rezultirajući materijal odnosno gel je izložen UV i gama zračenju. Dobiveni materijali nakon iritacije zračenjem su polimeri s različitim mrežnim uzorcima bis (L-Leu) fumarata i bis (L-Val) fumarata kao izravnu vezu samo-organizacije. Morfološka studija SEM pokazuje da se morfologija gel-mreže i polimerne mreže nije značajno promijenila nakon polimerizacije kao potvrda početnih samo-organiziranih agregata. Korištenjem podataka FTIR spektroskopije za početnu i polimernu tvar smo primijetili da nestaju karakteristična istezanjana 996 cm^{-1} (pripisano fumarilu) i 947 cm^{-1} (karakteristično za vinilne estere) što je potvrda polimerizacije dvostrukih veza. UV zračenje metil estera bis (L-Leu) fumarata u otopini daje ciklobutanski prsten u [2 + 2] cikloaddicijskoj reakciji.

1. E. Busseron, Y. Ruff, E. Moulin, N. Giuseppone, *Nanoscale* **5** (2013) 7098–7140.
2. L. Frkanec, M. Jokić, J. Makarević, K. Wolsperger, M. Žinić, *J. Am. Chem. Soc.* **124** (2002) 9716-9717.
3. L. Frkanec, M. Žinić, *Chem. Commun.* **46** (2010) 522-537.

P-K18: UTJECAJ KAPLJEVINE NA ISHOD MEHANOKEMIJSKE SINTEZE METALOORGANSKIH MATERIJALA POVEZANIH HALOGENSKIM VEZAMA

Katarina Lisac, Dominik Cinčić
Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Horvatovac 102a, Zagreb

Posljednjih dvadesetak godina objavljeno je mnoštvo istraživanja i preglednih radova na temu halogenske veze u kristalnom inženjerstvu metaloorganskih krutina,[1] no vrlo malo ih se usmjerilo na višekomponentne metaloorganske materijale s donorima halogenske veze poput perfluoriranih aromata.[2] U takvim metaloorganskim materijalima, gdje su građevne komponente povezane halogenskim vezama, koordinacijski spojevi mogu imati dvije različite uloge: kao akceptori i kao donori halogenske veze.

Temeljem literaturnih podataka o kristalnom inženjerstvu binarnih metaloorganskih krutina u kojima su akceptori halogenske veze koordinacijski spojevi s jednostavnim anionskim liganadima (npr. kloridima, cijanidima itd.), u ovome radu odabran je kobaltov(II) kompleks, diklorbis(1,10-fenantrolina)kobalt(II) ($CoCl_2$**phen**$_2$) za izučavanje priprave višekomponentnog materijala s 1,4-dijodtetrafluorbenzenom (**14tfib**). Mogućnost nastajanja željenog materijala izučavana je tekućinom potpomognutim mljevenjem, metodom koja se pokazala kao brza i pouzdana za sintezu krutina,[3] pri čemu se ustanovio važan utjecaj vrste kapljevine na ishod mljevenja. Mljevenjem krutih reaktanata uz dodatak male količine vode dobiven je kokristal [$CoCl_2$(**phen**)$_2$](**14tfib**) dok je mljevenjem uz prisutnost male količine metanola dobivena višekomponentna ionska krutina, solvat soli kokristala [CoCl(MeOH)(**phen**)$_2$]Cl(**14tfib**)(MeOH). Oba su produkta dobivena i kristalizacijom iz otopine te im je određena kristalna i molekulska struktura rentgenskom difrakcijom na jediničnom kristalu. Analizom kristalnih struktura utvrđeno je da je u kokristalu dominantna supramolekulska interakcija halogenska veza I···Cl između molekula **14tfib** i $CoCl_2$(**phen**)$_2$ građevnih jedinica dok su u ionskoj strukturi dominantne nabojem potpomognute I···Cl^- halogenske veze između molekula **14tfib** i kloridnih aniona te vodikove veze između kloridinih aniona i OH skupina koordiniranih te solvatiranih molekula metanola. Napravljena je i termička analiza dobivenih produkata te je uočeno da je kokristal stabilniji od ionske krutine. Kokristal se počinje raspadati pri 185° C, što je za oko 60° C više od temperature pri kojoj se raspada ionska krutina. Također, ustanovljeno je da ionska krutina grijanjem prelazi u kokristal koji se pak pri sobnoj temperaturi može prevesti u sol ako se izloži parama metanola.

1. Bertani, R.; Sgarbossa, P.; Venzo, A.; Lelj, F.; Amati, M.; Resnati, G.; Pilati, T.; Metrangolo, P.; Terraneo, G., *Coord. Chem. Rev.* **254** (2010) 677–695.
2. Groom, C. R.; Bruno, I. J.; Lightfoot, M. P.; Ward, S. C., *Acta Crystallogr. B* **72** (2016) 171–179.
3. Friščić, T.; Jones, W., *Cryst. Growth Des*. **9** (2009) 1621–1637.

P-B1: PRELIMINARNI REZULTATI UČINKA ONEČIŠĆENJA ZRAKA IZ RAFINERIJE NAFTE NA FIZIOLOŠKE PROMJENE U NATIVNIM LIŠAJEVIMA

Maja Maslać Mikulec[1, 2], Saša Likić[1], Oleg Antonić[2, 3], Mirta Tkalec[1]
[1] *Biološki odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Rooseveltov trg 6, Zagreb*
[2] *Geonatura d.o.o., Fallerovo šetalište 22, Zagreb*
[3] *Odjel za biologiju, Sveučilište Josipa Juraja Strossmayera u Osijeku, Trg Svetog Trojstva 3, Osijek*

Problem onečišćenja zraka utječe na biološku raznolikost, funkcioniranje ekosustava i ljudsko zdravlje. Kako bi se istražio taj problem, u svijetu se danas sve više koriste lišajevi kao bioindikatori i biomonitori kvalitete zraka, dok to u Hrvatskoj nije slučaj. Slavonski Brod, kao najzagađeniji grad u Hrvatskoj zbog izvora onečišćenja zraka iz obližnje rafinerije nafte, odabran je za područje istraživanja fizioloških promjena u lišajevima uzrokovanih onečišćenjem zraka. Korištene su dvije vrste lišajeva, *Flavoparmelia caperata* i *Parmelia sulcata*, koje prirodno dolaze na tom području, a uzorkovane su na širem području rafinerije (radijus 20 km). Istraživani su učinci onečišćenja rafinerije nafte na fotosintetsku učinkovitost, fotosintetske pigmente, sadržaj dušika, sumpora i teških metala (olovo, cink, kadmij, nikal) te sekundarnih metabolita. Na dvije plohe najbliže rafineriji nafte nisu pronađeni lišajevi, što upućuje na alarmantno stanje kvalitete zraka. Sadržaj klorofila, karotenoida, sumpora, dušika, olova i cinka bio je povećan u lišajevima sakupljenim na plohama koje se nalaze u blizini rafinerije, ali su ujedno pod utjecajem grada, pokazujući kumulativan efekt gradskog i industrijskog onečišćenja. Nisu utvrđene značajne razlike u sadržaju sekundarnih metabolita, osim salazinske kiseline, čija je koncentracija najviša na plohama bližim rafineriji nafte, što ukazuje na potencijalnu ulogu salazinske kiseline u zaštiti lišajeva od onečišćenja zraka. Potrebne su daljnje analize i usporedbe s transplantiranim uzorcima, kako bi se moglo točnije kvantitativno i kvalitativno odrediti kvalitetu zraka na području Slavonskog Broda te dizajnirati optimalni sustav biomonitoringa kvalitete zraka.

P-B2: UTJECAJ EPIGENETIČKOG UTIŠAVANJA GENA *Hnf1α* NA GLIKOZILACIJU PROTEINA U ADENOKARCINOMU GUŠTERAČE I DIJABETESU

Ivona Bečeheli,[1] Petra Korać,[2] Vlatka Zoldoš,[2] Gordan Lauc[1,3]
[1] *Genos Glycoscience Research Laboratory, Zagreb*
[2] *Prirodoslovno matematički fakultet Sveučilišta u Zagrebu, Zagreb*
[3] *Famaceutsko-biokemijski fakultet Sveučilišta u Zagrebu, Zagreb*

Adenokarcinom gušterače i dijabetes su usko povezane bolesti, ali još uvijek nije poznato postoji li između njih uzročno-posljedična veza te zajednički mehanizam nastanka obiju bolesti. Hipoteza ovog istraživanja je da upravo poremećena epigenetička regulacija gena *HNF1A,* putem utjecaja na glikozilaciju proteina β stanica gušterače, sudjeluje u pojavi obiju bolesti. U prijašnjim istraživanjima pokazano je da je u adenokarcinomu gušterače snižena ekspresija gena *HNF1A* te da je status metilacije DNA pretpostavljene regulatorne regija gena *HNF1A* poremećen u tipu dijabetesa MODY III. Također, poznato je da je u tom tipu dijabetesa poremećena funkcija GLUT II transportera glukoze čiji su struktura, stabilnost, funkcija i smještaj na površini β stanica Langerhansovih otočića gušterače regulirani glikozilacijom putem proteina MGAT4a. S druge strane, glikoziltransferaza MGAT4a kodirana je genom *GnT1a,* reguliranim upravo transkripcijskim faktorom HNF1A. Cilj istraživanja je pokazati da je metilacija specifične regije gena *HNF1A* ključna za njegovu ekspresiju te da je isti utišan u navedenim bolestima, specifično u stanicama Langerhansovih otoka gušterače. Izolacija Langerhansovih otoka gušterače izvedena je metodom laserske mikrodisekcije, za analizu metilacije DNA korištena je metoda pirosekvenciranja, a glikozilacija je analizirana metodom PGC-LC-MS/MS.

P-B3: SILVER NANOPARTICLES AFFECT GERMINATION AND INDUCE OXIDATIVE STRESS IN TOBACCO

Renata Biba[1], Dajana Matić[1], Petra Cvjetko[1], Petra Peharec Štefanić[1], Sandra Šikić[2], Biljana Balen[1]

[1] *Department of Biology, Faculty of Science, University of Zagreb, Horvatovac 102a, Zagreb*

[2] *Department of Ecology, Institute of Public Health ''Dr. Andrija Štampar'', Mirogojska cesta 16, Zagreb*

Silver nanoparticles (AgNPs) are among the most widely used nanomaterials due to their excellent antimicrobial and antifungal properties. They can be found in various commercial products including textiles, paints and cosmetics. Increase in the production of AgNPs brings out concerns about their impact on the environment. Since plants have an important role in bioaccumulation of many environmentally released substances, they are likely to be influenced by AgNPs. In this study we have investigated the effects of three differently coated AgNPs [citrate, polyvinylpyrrolidone (PVP) and cetyltrimethylammonium bromide (CTAB)] and $AgNO_3$ on germination and oxidative stress response of tobacco seedlings (*Nicotiana tabacum* L.). Five concentrations (25, 50, 75, 100 and 150 μM) of AgNPs and $AgNO_3$, and two concentrations (10 and 25 μM) of surface coatings were tested. To evaluate the degree of oxidative damage, the content of malondialdehyde and protein carbonyls as well as the activity of antioxidant enzymes (pyrogallol peroxidase, ascorbate peroxidase, catalase and superoxide dismutase) was spectrophotometrically measured. Silver uptake in plant tissue was determined with inductively coupled plasma mass spectrometry (ICP-MS). The results showed that positively charged AgNPs-CTAB and CTAB coating have a negative effect on all the parameters of seed germination, while AgNPs-citrate and AgNPs-PVP as well as $AgNO_3$ caused only a slight reduction of fresh weight and root length when applied in higher concentrations. Citrate and PVP surface coatings did not show any significant impact on seed germination. Protein carbonyl content was increased after treatments with AgNPs-PVP, $AgNO_3$ and CTAB surface coating, while AgNPs-CTAB exhibited the opposite effect. Lipid peroxidation was detected after treatments with AgNPs-PVP and AgNPs-CTAB. All of the investigated antioxidant enzymes showed changes in activity implying the existence of oxidative stress. Silver uptake was the highest in AgNPs-CTAB treatment thus demonstrating that phytotoxicity of AgNPs directly correlates with their coating and surface charge.

P-B4: PROTEOM SERUMA PASA S POREMEĆAJEM FUNKCIJE BUBREGA I SRCA

Petra Bilić[1], Nicolas Guillemin[1], Mangesh Bhide[2], David Eckersall[1], Vladimir Mrljak[1]

[1]*Klinika za unutarnje bolesti, Veterinarski fakultet Sveučilišta u Zagrebu, Heinzelova 55, Zagreb*

[2]*Zavod za mikrobiologiju i imunologiju, Sveučilište veterinarske medicine i farmacije, Komenskeho 73, Košice, Slovačka*

Proteomika obuhvaća niz metoda kojima se istražuje cjelokupni set proteina organizma, tkiva ili stanica eksprimiran pri određenim uvjetima. Primjena proteomskih metoda omogućuje otkrivanje biomarkera koji pridonose razumijevanju patofizioloških procesa te imaju značenje u dijagnozi, određivanju stupnja ili prognozi bolesti. Cilj ovog istraživanja jest pomoću proteomskog pristupa otkriti nove serumske biomarkere za poremećaj funkcije bubrega u pasa u babeziozi, odnosno za poremećaj funkcije srca u idiopatskoj dilatativnoj kardiomiopatiji (iDCM).

Iz tog razloga, analiziran je proteom seruma pasa s babeziozom s komplikacijom oštećenja bubrega. Iako babeziozu primarno karakterizira hemolitička anemija, moguće su i komplikacije poput akutnog poremećaja funkcije bubrega. Ispitane su razlike između proteoma seruma zdravih pasa (kontrolne skupine) i pasa s oštećenjem bubrega u babeziozi pomoću dvodimenzionalne diferencijalne gel-elektroforeze. Nakon bioinformatičke analize, razlikovni proteini su izrezani iz gelova i identificirani pomoću MALDI-TOF spektrometra masa. Ovaj pristup rezultirao je s identifikacijom sveukupno 23 razlikovna proteina između skupina, koji imaju ulogu u imunološkom odgovoru, aktivaciji komplementa,

koagulaciji krvi i remodeliranju tkiva. Također, primijenjena je proteomska metoda u svrhu pronalaska serumskih biomarkera za iDCM u pasa. iDCM je poremećaj rada srčanog mišića nepoznatog uzroka kojeg karakterizira smanjena kontraktilnost te povećanje lijevog ventrikula srca, a vodi do smrtnog ishoda. Proteomskoj analizi seruma pasa s iDCM-om i zdravih pasa pristupilo se pomoću metode obilježavanja izobarnim privjescima koji omogućuju identifikaciju i relativnu kvantifikaciju proteina nakon analize pomoću spektrometrije masa spregnute s tekućinskom kromatografijom. Dobiveni podaci su obrađeni statistički u svrhu otkrivanja značajno različitih ($p < 0.05$) proteina između bolesnih i zdravih pasa. Razlikovni proteini između zdravih pasa i pasa s iDCM-om (N=13) su analizirani bioinformatički, što je rezultiralo identifikacijom putova uključenih u iDCM, kao što su dinamika lipoproteinskih čestica, aktivacija komplementa i regulacija krvnog tlaka.

Zaključno, proteomski pristup omogućuje otkrivanje biomarkera s potencijalnim dijagnostičkim i/ili prognostičkim značajem i pruža bolje razumijevanje istraživanih bolesti.

P-B5: MINIJATURIZACIJA I SEMI-AUTOMATIZACIJA METODE MEMBRANSKE PROPUSNOSTI NA MDCKII-MDR1 STANICAMA

Ana Bokulić, Astrid Milić
Fidelta d.o.o., Prilaz baruna Filipovića 29, Zagreb

U ranim fazama istraživanja lijekova, novosintetizirani spojevi prolaze kroz niz *in vitro* ispitivanja apsorpcije, distribucije, metabolizma i eliminacije (ADME) kako bi se omogućio probir najboljih spojeva za daljnja testiranja u životinjama. Naime, za uspješnost lijeka nije dovoljna samo njegova biološka aktivnost već i uspješan dolazak supstance preko sistemske cirkulacije (apsorpcija) do ciljnog mjesta djelovanja (distribucija), kao i pravovremeni metabolizam i izlučivanje iz tijela. Propusnost lijeka je uz fizikalno-kemijska svojstva najvažniji čimbenik odgovaran za unos lijeka u organizam. MDCKII-MDR1 (engl. Madin-Darby Canine Kidney) stanice su stanice bubrežnog epitela psa transfecirane humanim MDR1 genom, koji kodira P-glikoprotein, a koje se danas rutinski koriste u istraživanju propusnosti te predviđanju apsorpcije novih lijekova. Standardan pokus permeabilnosti izvodi se na pločicama s 24 jažice. Kako se iz godine u godinu povećava broj novih spojeva javila se potreba za postavljanjem testa permeabilnosti s većom mogućnošću protoka. Stoga je napravljena minijaturizacija formata s 24 na 96 jažica te semi-automatizacija procesa, odnosno prebacivanje na robotske radne jedinice za pipetiranje. Metoda je validirana korištenjem 12 komercijalnih spojeva te tridesetak novih kemijskih entiteta. Rezultati dobiveni novom metodom pokazali su dobru korelaciju sa rezultatima dobivenim na formatu s 24 jažice, a ujedno su omogućili i znatno veći protok uzoraka uz visoku reproducibilnost.

P-B6: INHIBICIJA PUTEVA NOTCH I PARP U LIMFOCITIMA

Luka Horvat[1], Josipa Skelin[2], Mariastefania Antica[2], Maja Matulić[1]
[1]*Biološki odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Horvatovac 102a, Zagreb*
[2]*Zavod za molekularnu biologiju, Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, Zagreb*

Diferencijacija krvnih stanica jedan je od najsloženijih procesa u organizmu. Regulirana djelovanjem transkripcijskih faktora stvara specifičnu signalnu mrežu. Ova mreža je karakteristična za svaku vrstu stanica i diferencijacijsku fazu. Jedan od signalnih putova koji reguliraju diferencijaciju je put Notch. U hematopoetskom sustavu signalizacija putom Notch jedan je od glavnih regulatora razvoja limfocita. Cilj ovog istraživanja je upoznavanje uloge puta Notch i njegove povezanosti s putovima enzima poliADPribolizacijske polimeraze (PARP-1) u limfocitima. PARP-1 je enzim koji sudjeluje u posttranslacijskoj modifikaciji proteina. Iako mu je primarna uloga u popravku oštećenja DNA, sudjeluje i u modifikaciji transkripcijskih faktora te promjenom strukture kromatina može utjecati na ekspresiju gena. U hematopoetskom sustavu uključen je u procese upale, aktivira se i kod procesa rekombinacije DNA tijekom diferencijacije limfocita T i B. Napravljena je analiza ekspresije mreže gena uključenih u

regulaciju putova Notch i PARP-1 kod nekoliko leukemijskih staničnih linija nakon inhibicije ovih putova. Linije limfocita B i T uzgajane su u prisutnosti inhibitora (DAPT, PJ-34) kroz 9 dana. Stanične se linije u ovim uvjetima uzgoja nisu diferencirale, imale su proliferaciju i vijabilnost na razini kontrolnih stanica. Analiza mreže gena nakon tretmana pokazala je da stanična linija akutne limfoblastične leukemije T stanica ima aktivan put Notch. Djelovanjem inhibitora tog puta smanjena je ekspresija nizvodnih gena puta Notch, kao i liganada receptora Notch. Stanice kronične limfocitne leukemije B pokazale su aktivnost signalnog puta nizvodno od receptora Notch, zbog prisutnosti transkripcijskog faktora EBNA2 Epstein Barr virusa s kojim je ta stanična linija imortalizirana. Inhibitor puta Notch koji djeluje na razini receptora nije doveo do inhibicije. Međutim, detektirane su promjene ekspresije gena porodice Ikaros. Inhibicija aktivnosti PARP-1 izazvala je povećanje ekspresije liganda receptora Notch, Jagged-1. Treća stanična linija, stanice akutne limfoblastične leukemija prekursora B limfocita, nije imala aktivni put Notch, a inhibicija aktivnosti PARP-1 izazvala je povećanje ekspresije liganda Jagged-1.

P-B7: PRAŽIVOTINJE AKIVNOG MULJA KAO INDIKATORI UČINKOVITOSTI PROČIŠĆAVANJA OTPADNIH VODA

Mirjana Kepec[1], Renata Matoničkin Kepčija[2], Slavko Kepec[3]
[1]*Strukovna škola Đurđevac, Dr. Ivana Kranjčeva 5, Đurđevac*
[2]*Biološki odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Rooseveltov trg 6, Zagreb*
[3]*VIRKOM d.o.o., Kralja Petra Krešimira IV 30, Virovitica i Medicinski fakultet u Osijeku, ulica Cara Hadrijana 10E, Osijek*

Praživotinje su dio mikrobne zajednice aktivnog mulja, pri čemu sudjeluju u uklanjanju organske i anorganske tvari, mikro-aeraciji i miješanju mulja, ali i održavanju bakterijskih populacija u ravnoteži. Sastav praživotinja u aktivnom mulju može indicirati učinkovitost pročišćavanja, odnosno stanje aktivnog mulja. Jedan od indeksa razvijenih upravo za ovu svrhu je biotički indeks aktivnog mulja (SBI – *sludge biotic index*). U ovom istraživanju praćeni su parametri pročišćavanja i praživotinje aktivnog mulja na uređaju za pročišćavanje otpadnih voda grada Virovitice, između lipnja 2016. i studenog 2017. godine. Cilj je bio utvrditi primjenjivost SBI kao indikatora učinkovitosti pročišćavanja u uvjetima kad se na uređaju pročišćavaju samo komunalne otpadne vode (K) te u uvjetima kad je opterećenje veće jer se pridodaju i industrijske otpadne vode nastale preradom šećerne repe (K+I). Ukupno je zabilježeno 27 vrsta praživotinja, 7 vrsta kolnjaka, 2 vrste euglena te jedan rod okućena. Brojnost veću od 10^6/L u pojedinim uzorcima imali su trepetljikaši *Aspidisca cicada*, *Opercularia coarctata, Vorticella microstoma* i *V. convallaria* te okućeni *Euglypha* spp. Ukupna brojnost praživotinja i mikro-metazoa bila je prosječno 2,5 puta viša u aktivnom mulju kad se pročišćavala samo K otpadna voda, u odnosu na K+I. Sastav zajednice se također znatno razlikovao između dva režima pročišćavanja. SBI je bio u rasponu od 8 do 10 i nije se u prosjeku razlikovao u dva režima pročišćavanja tj. odgovarao je I. kategoriji aktivnog mulja koji je stabilan te osigurava visok stupanj pročišćavanja otpadnih voda. Dodatna analiza indikatorskih svojti praživotinja ukazala je na veću učinkovitost aktivnog mulja pri pročišćavanju K+I u odnosu na pročišćavanje samo K otpadne vode. Dobivene rezultate potvrdili su vizualni indikatori flokula, kao i fizičko-kemijski pokazatelji ulazne i izlazne vode. Čak i uz visoko organsko opterećenje industrijske otpadne vode (prosječni KPK >5000 mg O_2/L), pročišćavanje je bilo vrlo učinkovito.

P-B8: ANALYSIS OF Fe DISTRIBUTION AMONG CYTOSOLIC BIOMOLECULES AND IDENTIFICATION OF Fe-BINDING COMPOUNDS IN THE LIVER AND GILLS OF VARDAR CHUB (*Squalius vardarensis* KARAMAN)

Nesrete Krasnići[1], Zrinka Dragun[1], Saša Kazazić[2], Hasan Muharemović[2], Snježana Kazazić[2], Maja Jordanova[3], Katerina Rebok[3], Vasil Kostov[4], Marijana Erk[1]

[1]*Ruđer Bošković Institute, Division for Marine and Environmental Research, Laboratory for Biological Effects of Metals, Zagreb*

[2]*Ruđer Bošković Institute, Division of Physical Chemistry, Laboratory for Mass Spectrometry, Zagreb*

[3]*Ss. Cyril and Methodius University in Skopje, Faculty of Natural Sciences and Mathematics, Skopje, Macedonia*

[4]*Institute of Animal Sciences, Skopje, Macedonia*

Many proteins contain essential metal Fe in ionic form, either within their own structures or bound to their active sites (del Castillo Busto et al., 2010). Iron distribution profiles among cytosolic biomolecules were determined for hepatic and gill cytosols of Vardar chub (*Squalius vardarensis* Karaman) from Macedonian rivers. Application of size-exclusion high performance liquid chromatography (SEC-HPLC) coupled offline with high resolution inductively coupled plasma mass spectrometry (HR ICP-MS) resulted with Fe separation in two peaks, the first one corresponding to biomolecules of 230-630 kDa, and the second one corresponding to biomolecules of 24-51 kDa. The first peak most likely corresponds to ferritin, the major Fe storage protein (450 kDa), and was more prominent in liver than in gills, which is in accordance with more significant role of liver in Fe storage. To obtain more information about biomolecules comprised by the second peak, which was observed in both studied organs, we have used anion exchange chromatography (AEX-HPLC) coupled offline with HR ICP-MS, as a second step of separation. Cytosolic biomolecules of 24-51 kDa from both organs were further separated according to their ionic strength, and clearly distinguishable Fe peaks were observed at elution times from 10^{th} to 14^{th} minute. The last step was application of two mass spectrometry techniques for the identification of Fe-binding biomolecules of 24-51 kDa which were purified by two-dimensional chromatographic separation. By use of MALDI-TOF, three protein peaks were obtained, corresponding to molecular masses of ~15 kDa, ~32 kDa and ~47 kDa in the liver, whereas in the gills we have obtained two peaks corresponding to ~11 kDa and ~14 kDa. Application of liquid chromatography-mass spectrometry system (LC-MS) enabled identification of α and β subunits of haemoglobin (Hb, 15-16 kDa) in both organs, whereas hepatic peaks of higher molecular masses probably referred to Hb dimers and trimers.

1. del Castillo Busto, E., Montes-Bayón, M., García Alonso, J.I., Caruso, J.A., Sanz-Medel, A., *Analyst* **135** (2010) 1538-1540.

P-B9: CHANGES OF PHYTOPLANKTON COMMUNITY STRUCTURE IN CORRELATION WITH DIFFERENT CONCENTRATIONS OF NITRATES IN SURFACE WATER OF VARAŽDIN ALLUVIAL AQUIFER SYSTEM

Antonija Kulaš[1], Tamara Marković[2], Petar Žutinić[1], Marija Gligora Udovič[1]

[1]*Biološki odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Rooseveltov trg 6, Zagreb*

[2]*Zavod za hidrogeologiju i inženjersku geologiju, Hrvatski geološki institut, Milana Sachsa 2, Zagreb*

Nitrate is a compound of nitrogen (N) that occurs naturally in moderate concentrations in aquatic environments. Higher concentrations of nitrate in freshwaters are typically caused by anthropogenic activities. In the project Origin, fate and TRAnsport modelling of NITrate in the Varaždin ALluvial aquifer (TRANITAL) an interdisciplinary approach was developed to study the spatio-temporal dynamics, fate and sources of nitrate in the aquifer systems at the catchment scale of Drava River near Varaždin. The main aims of the research are to: (i) develop multi-parametric approach to characterize alluvial aquifer hydraulic properties and chemical, isotopic and microbiological properties of groundwater; (ii) define the

role of surface waters on aquifer recharge and nitrogen cycle; (iii) describe algal succession in surface waters in correlation to microbial community and groundwater flow and transport of nitrate in the alluvial aquifer. Sampling of surface waters was performed monthly from June to December 2017 on five study sites: Plitvica stream, gravel pits Šljunčara and Zelendvor, accumulation HE Varaždin (Ormoško Lake) and Drava River near Virje. Samples of phytoplankton and phytobenthos were collected for molecular and morphological analyses according to standard methods using water sampler and scratching from substrates, accordingly. Different physical and chemical factors affect the composition of algal communities and one of the main factor is the availability of N compounds, mainly nitrates. Current preliminary results show that in the Plitvica stream, where nitrate concentrations are higher, species from phyla Chlorophyta and Cryptophyta are dominant. In the gravel pit Šijanec, where nitrate concentrations are very low, summer bloom of Cyanobacteria (*Microcystis aeruginosa* Kützing and *Microcystis wesenbergii* Komàrek) occurred. Study areas gravel pit Zelendvor, accumulation HE Varaždin and Drava River near Virje showed domination of diatoms (Bacillariopyceae), where nitrate concentrations oscillate. Further results will include molecular and morphological analyses of algae and microbiological community in correlation with nitrate concentrations.

P-B10: PRIMJENA NANOČESTICA ŽELJEZOVIH OKSIDA OBLOŽENIH D-MANOZOM ZA PRAĆENJE BIODISTRIBUCIJE HONDROCITA U TKIVNOM INŽENJERINGU HRSKAVICE

Maja Pušić[1], Tihana Marić[1], Siniša Škokić[2], Katarina Caput Mihalić[1], Maja Antunović[1], Daniel Horak[3], Srećko Gajović[4], Inga Marijanović[1], Alan Ivković[5,6]

[1]Biološki odsjek, Zavod za molekularnu biologiju, Prirodoslovno matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Horvatovac 102 a, Zagreb

[2] Hrvatski institut za istraživanje mozga, Medicinski fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Šalata 12, Zagreb

[3]Institut za makromolekularnu kemiju , Akademija znanosti, Heyrovského Sq. 2, Prag, Češka

[4]Zavod za histologiju i embriologiju, Medicinski fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Šalata 3, Zagreb

[5]Zavod za ortopediju, Klinička bolnica „Sveti Duh“, Sveti Duh 64, Zagreb

[6]Odjel za biotehnologiju, Sveučilište u Rijeci, Radmile Matejčić 2,Rijeka

Superparamagnetske nanočestice željezovih oksida obložene D-manozom sa svojstvom biokompatibilnosti stabilne su u otopini i slabije podložne oksidaciji. Vidljive su magnetskom rezonancijom što ih čini odličnim kontrastnim sredstvom u vizualizaciji i praćenju stanica i tkiva. Hondrociti nosne hrskavice koriste se u kliničkoj studiji za proizvodnju hrskavičnih presadaka s ciljem liječenja oštećene zglobne hrskavice, obzirom da imaju bolji proliferacijski i hondrogeni kapacitet od hondrocita zglobne hrskavice. Cilj istraživanja je utvrditi vijabilnost hondrocita obilježenih nanočesticama manoze te istražiti njihov diferencijacijski potencijal u uvjetima *in vitro* i analizom MR vizualizirati hondrocite nakon diferencijacije.

U istraživanju su korišteni hondrociti izolirani iz hrskavice nosnog septuma ovce. Hondrociti su umnoženi u uvjetima *in vitro* i tretirani različitim koncentracijama nanočestica D-manoza γ-Fe_2O_3 kroz vremenski period od 24, 48 i 72 sata. Testom isključenja tripanskog modrila određena im je vijabilnost i proliferacijski potencijal. Kako bi se potvrdio njihov diferencijacijski potencijal u prisutnosti nanočestica manoze, uspostavljena je trodimenzionalna (3D) stanična kultura hondrocita tijekom 7 i 14 dana. Uzorci su analizirani histološkim i molekularnim metodama, a vizualizacija 3D kulture je učinjena pomoću sustava za magnetsku rezonanciju jakosti polja 7 Tesla (Bruker Biospec 70/20 USR).

Nakon tretmana nanočesticama manoze, vijabilnost hondrocita nije promijenjena dok proliferacija raste za oko 30% u odnosu na netretiranu kontrolu. Berlinskim modrilom i magnetskom rezonancijom potvrđena je prisutnost nanočestica u diferenciranim hondrocitima. Kvantitativna lančana reakcija polimerazom u stvarnom vremena pokazuje nisku relativnu ekspresiju kolagena I, povišenu relativnu ekspresiju kolagena II, a bojanje Safraninom O prisutnost proteoglikana i glikozaminoglikana. Rezultati upućuju da novonastalo tkivo u 3D staničnoj kulturi nakon 7 i 14 dana ima svojstva hrskavice.

Zaključak je da ispitivane nanočestice nisu citotoksične te ne ometaju proliferaciju i diferencijaciju hondrocita. Upotreba nanočestica obloženih D-manozom u svrhu vizualizacije i praćenja hondrocita u 3D

kulturi daje nove mogućnosti u razvoju tkivnog inženjeringa hrskavice i moguće primjene u pretklinčkim i kliničkim ispitivanjima.

P-B11: POPULACIJSKA ANALIZA ATLANTSKE PLAVOPERAJNE TUNE, *Thunnus thynnus* (Linaeus, 1758) U KAVEZNOM UZGOJU PRIMJENOM MIKROSATELITNIH LOKUSA

Ivana Radonić
Institut za oceanografiju i ribarstvo, Meštrovićevo šetalište 63, Split

Atlantska plavoperajna tuna (*Thunnus thynnus*) je je pelagična riba iz razreda koštunjača i porodice skušovki (Scombridae). Prvi put ju je znanstveno opisao Linnaeus 1758. godine kao *Scomber thynnus*. Rasprostranjena u području Atlantskog oceana i Sredozemnog mora duž kojih migrira na desetke tisuća kilometara, prvenstveno u svrhu reprodukcije i potrage za hranom. Populacije unutar Atlantskog oceana su na temelju različite dobi prilikom postizanja spolne zrelosti, odvojenog područja mrijesta, genetičke diferencijacije i ponašanja podijeljene na 2 stocka- istočni i zapadni koji su podijeljeni 45º meridiana, te se prema toj podjeli imaju i različiti status zaštite.

Zbog svog hranjivog i kvalitetnog mesa dostižu visoka tržišnu vrijednost što je dovelo do pojačanog ribolovnog pritiska koji je tijekom desetljeća rezultirao drastičnim smanjenjem broja jedinki u populacijama stoga se započelo s njihovim kaveznim uzgojem.

Uzgoj tuna je profitabilna industrija koja donosi visoku ekonomsku dobit, a kavezni način uzgoja ove vrste je uspostavljen u Japanu, Australiji, Sjevernoj Americi, Dalekom Istoku i Sredozemnom moru.

Međutim, ulov, transport do kaveza, adaptacija na kavezne uvjete života, ozljede nastale tijekom manipulacije ribom, njenog sudaranja u zidove tanka ili zapletanje u mrežu tijekom transporta u kombinaciji sa raznim biotičkim i abiotičkim faktorima mogu uzrokovati stres kod juvenilnih jedinki koji ima suprimirajuće učinke na komponente urođene imunosti što loše utječe na rast i kondiciju i u konačnici može rezultirati mortalitetom i velikim gubicima u uzgajalištima.

Analizom 13 mikrosatelitnih lokusa koji se nalaze u blizini fiziološki važnih gena koji se eksprimiraju prilikom stresa i imunosnih reakcija kod atlanstske plavoperajne tune *T. thynnus* iz kaveznog uzgoja u Jadrankom moru istraženo je da li kod novoulovljene populacije juvenilnih tuna iz Jadranskog mora postoje polimorfizmi koji ukazuju na jedinke unutar populacije sklonije promjenama imunosnog sustava tijekom uzgojnog ciklusa.

Iako su rezultati pokazali da nema značajnih razlika između divljih juvenilnih i uzgojnih jedinki, što ukazuje da uzgojni ciklus ne utječe promjenu u fitnessu riba i njihovo preživljavanje do kraja uzgojnog ciklusa, mikrosatelitni biljezi razvijeni u ovom istraživanju proširuju popis mikrosatelitskih biljega dostupnih za atlantku plavoperajnu tunu *T. Thynnus*.

P-B12: INTERPLAY OF RECOMBINATION, PLASMID STABILITY, AND CRISPR-Cas IMMUNITY IN *Escherichia coli*

Marin Radovčić[1], Edward L. Bolt[2], Ivana Ivančić Baće[1]
[1]*Biološki odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Horvatovac 102a, Zagreb*
[2]*School of Life Sciences, Queen's Medical Centre, Medical School, University of Nottingham, Nottingham NG7 2UH, United Kingdom*

CRISPR-Cas (Clustered Regularly Interspaced Short Palindromic Repeats; CRISPR-associated) system is a prokaryotic adaptive immune system against foreign genetic elements. Immunity is acquired through insertion of small fragments of invader DNA into a CRISPR array. This process of fragment (spacer) insertion is called adaptation, and can be mediated solely by the protein complex Cas1-Cas2 ("naïve CRISPR adaptation"). In *E. coli,* naïve adaptation is helped by RecBCD enzyme to generate single-stranded DNA (ssDNA) intermediates. We report here that cells lacking *recD* gene and transformed with Cas1-Cas2 expressing plasmid (pCas1-Cas2) could not

acquire new spacers, as expected, but that this also corresponded with moderate loss of pCas1-Cas2. The adaptation could be re-established by simultaneous deletion of *recA*. Since RecA loading is constitutive in *recD* mutant, the presence of bound RecA onto 3' ssDNA protects and prevents generation of ssDNA fragments that are required for spacer preparation. We suggest that RecA has an inhibitory role in spacer acquisition by preventing spacer formation from self DNA coated by RecA, while at the same time foreign DNA is unprotected by RecA and available for DNA fragmentation and spacer preparation.

P-B13: RAZVOJ METODE ANALIZE *N*-GLIKANA KROMATOGRAfiJOM NA IMOBILIZIRANOM HEPARINU I SPEKTROMETRIJOM MASE

Genadij Razdorov[1], Gordan Lauc[1,2]
[1]*Genos d.o.o., Borongajska cesta 83h, Zagreb*
[2]*Farmaceutsko biokemijski fakultet, A. Kovačića 1, Zagreb*

Gotovo svi izvanstanični proteini su N-glikozilirani, dok je prema procjeni preko polovice svih proteina N-glikozilirano. Kako se fokus medicinskih istraživanja pomiče prema višečimbeničnim bolestima, veličina populacijskog uzorka neophodno raste, a time i potreba za visokopropusnom analitikom. Danas su uobičajena istraživanja na kohortama većim od tisuću pojedinaca. Zbog svoje praktičnosti krvna plazma je najčešće tkivo u tim velikim istraživanjima.

Spektrometrija mase (MS) ključna je analitička tehnika u glikomici zbog iznimne osjetljivosti, brzine i neselektivnosti. Raspon koncetracija proteina plazme prelazi 10 redova veličine, dok se MS-om u najboljem slučaju može kvantificirati 3 do 5 redova veličine.

Osiromašivanje najzastupljenijih proteina plazme i/ili obogaćivanje ciljanih glikoproteina uobičajena je strategija pripreme uzorka plazme prije glikoanalitike. Visokopropusna analiza Fc N-glikozilacije humanog IgG LC/MS-om primjer je uspješnog pristupa obogaćivanja IgG-a iz plazme putem proteina A/G. Povezanost promjena u glikomu IgG-a kod različitih bolesti, otvara pitanje N-glikozilacije drugih proteina plazme. Afinitetna kromatografija pomoću heparina imobiliziranog na sefarozi, uobičajen je pristup izolacije antitrombina III i raznih drugih proteina. Obogaćeni proteini su identificirani LC/MSMS-om nakon tripsinizacije. Stehiometrijska podzastupljenost pojedinačnih glikoformi, onemogućava njihovu analizu LC/MS-om u prisutnosti neglikoziliranih peptida. Glikopeptidi su obogaćeni kromatografijom hidrofilnih interakcija (HILIC). Podešavanjem ionske jakosti moguće je obogaćivanje raznih faktora koagulacije i komplementa iz plazme, te uklanjanje preko 90% mase proteina plazme. N-glikozilirani peptidi identificirani su LC/MSMS pristupom nakon deglikozilacije PNGazom F. Nakon optimizacije pojedinačnih koraka metode, cijeli pristup validirati će se na par stotina uzoraka korelacijom s glikozilacijom IgG-a odnosno s ukupnim glikomom plazme. Razvojem novog pristupa visokopropusnoj glikoanalitici, između glikoma pojedinačnog proteina i glikomike tkiva omogućit će se produbljivanje glikobiologije.

P-B14: DIVERSITY AND EVOLUTION OF HUMAN RESPIRATORY SYNCYTIAL VIRUS ON1 STRAINS IN CROATIA, 2012-2016

Anamarija Slović[1,2], Jelena Ivančić-Jelečki[1,2], Sunčanica Ljubin-Sternak[3,4], Gordana Mlinarić Galinović[4], Tatjana Vilibić-Čavlek[4,5], Irena Tabain[5], Dubravko Forčić[1,2]

[1]*Centre for Research and Knowledge Transfer in Biotechnology, University of Zagreb, Rockefellerova 10, Zagreb*

[2]*Center of Excellence for Viral Immunology and Vaccines, CERVirVac*

[3]*Teaching Institute of Public Health "Dr. Andrija Štampar", Mirogojska 8, Zagreb*

[4]*School of Medicine University of Zagreb, Šalata 3, Zagreb*

[5]*Croatian National Institute of Public Health, Rockefellerova 12, Zagreb*

Human respiratory syncytial virus (HRSV) causes common respiratory tract infections in infants, young children and among the elderly. Variability among strains is responsible for repeated infections and yearly HRSV outbreaks, with major antigenic differences located in the G protein. The molecular epidemiology of HRSV is rather complex as numerous genotypes exist, new genotypes emerge and some previously circulating genotypes appear to become extinct. Rapid spread of a newly introduced ON1 genotype detected first in Canada in 2010, prompted us to investigate genetic variability of this genotype during the first four years (March, 2012 – May, 2016) of its detection in Croatia. During this time period, a total of 266 samples were found to belong to this genotype by sequencing of the second hypervariable region of the G protein. These strains were more diverse at the amino acid level (53.6%), than at the nucleotide level (70.3%), although positive selection of substitutions was shown for only one codon for which high entropy value was calculated, suggesting that amino acid at this position is experiencing frequent substitutions. Mean evolutionary rate was estimated 4.98×10^{-3} substitutions/site/year (95% HPD 5.07×10^{-3}, 1.33×10^{-2}). At the beginning of 2016, 70% of analysed HRSV samples were of ON1 genotype showing clear genotype shift in the circulating HRSV population. The reason for the epidemiological dominance of this genotype still remains to be elucidated.

P-B15: NOVA SAZNANJA O RASPROSTRANJENOSTI RIJEČNE KORNJAČE (*Mauremys rivulata*) U HRVATSKOJ

Ana Štih[1], Dragica Šalamon[2]
[1]*Udruga Hyla, Lipovac I br. 7, Zagreb*
[2]*Agronomski fakultet sveučilišta u Zagrebu, Zavod za opće stočarstvo, Svetošimunska 25, Zagreb*

U Hrvatskoj je riječna kornjača rasprostranjena samo na krajnjem jugu, u Dubrovačko-neretvanskoj županiji. Donedavno poznate tri subpopulacije nisu u međusobnom doticaju. Prva subpopulacija naseljava lokve u selu Donji Majkovi i Prljevići. Druga dolazi u Stonskom polju u kanalima za navodnjavanje, dok treća živi u kanalima, lokvama i rijekama u Konavlima. Osim toga, poznato je nekoliko izoliranih nalaza na području Neretve. Iako je recentna istraživanja obilaskom literaturnih lokacija 1997. godine započeo Hrvatski prirodoslovni muzej u Zagrebu, a nastavila ih je Udruga Hyla u sklopu programa nacionalnog monitoringa ugroženih vrsta u periodu od 2004. do 2012. godine, nije bilo značajnijih publikacija s konačnim zaključcima o distribuciji ove vrste u Hrvatskoj.
S ciljem ažuriranja saznanja o distribuciji riječne kornjače u Hrvatskoj, ovim radom dana je sinteza literaturnih lokacija od 1864. do 2012., neobjavljenih istraživanih lokacija od 1997. do 2012. te novih istraživanja u periodu od 2013. do 2017.
Distribucijska istraživanja od 2013. do 2017. provedena su na literaturnim, potencijalnim novim lokacijama te lokacijama pojedinačnih upitnih nalaza. Istraživanje se odvijalo vizualnim pregledom vlažnih staništa te postavljanjem vrša s mamcem. Posjećeno je sveukupno 119 lokaliteta, na njih 32 zabilježena je riječna kornjača.
Analizom georeferenciranih lokaliteta iz faunističkih radova od 1864. do 2012. (13), s rezultatima neobjavljenih istraživanja od 1997. do 2012. te onim iz perioda 2013. - 2017.(32) definirani su lokaliteti na kojima ova vrsta recentno nije prisutna (Ombla), lokaliteti na kojima su potvrđene jedinke, no u znatno manjem broju (Ston) te lokaliteti koje je potrebno dodatno istražiti (Korčula i Neretva). Navedenim podatcima izrađena je prva točkasta karta distribucije riječne kornjače u Hrvatskoj, gdje su lokaliteti nalaza dani u odnosu na istraživano područje te je prikazan tip nalaza prema recentnosti i relevantnosti.

Zaključujemo da je riječna kornjača na području južne Hrvatske prisutna u tri međusobno izolirane subpopulacije koje su tipične za rubni dio areala vrste.

P-GL1: UZROCI I POSLJEDICE STRESNIH EPIZODA ZABILJEŽENIH U PERMSKIM NASLAGAMA VELEBITA

Ana Šimičević
Geološki odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Horvatovac 102a, Zagreb

Turbulentni događaji tijekom mlađeg paleozoika ostavili su zapis u sedimentnim stijenama diljem Palaeotethysa, pa tako i na Velebitu (JZ Hrvatska). Posebno je zanimljiv slijed karbonatnih naslaga srednjo- i gornjopermske starosti (Salopek, 1942; Kochansky-Devide, 1964). Na Velebitu, karbonatna sedimentacija je trajala oko 20 milijuna godina i rezultirala je sekvencijama plitkomorskih karbonatnih naslaga debljine preko 900 m (Sremac, 2005).

Nova istraživanja pokazuju da su se tijekom ovog razdoblja dogodile dvije značajnije stresne epizode (Fio et al., 2010). Stabilno razdoblje na području Palaeotethysa prekinuto je krajem srednjeg perma (granica guadalupij-lopingij). Kao mogući uzorci ovog izumiranja spominju se: promjena morske razine, promjena klime, vulkanizam, tektonika, impakti. Nakon kratkotrajnog oporavka slijedi stresni događaj krajem perma (granica perm-trijas), koji je doveo do najvećeg poznatog izumiranja u povijesti Zemlje.

Stresni događaj na granici guadalupij-lopingij popraćen je globalnim zahladnjenjem i padom morske razine, što je najviše pogodilo prostor unutarnjeg šelfa, a time i veliki bentos (posebno fuzulinidne foraminifere). Tolerantni organizmi najbolje su podnijeli promjene u okolišu, te su se namnožile glomospire, earlandije, globivalvuline, primitivne miliolide (*Hemigordius*) i cijanobakterije (stromatoliti). Među vapnenačkim algama krizi su jako bile podložne dasikladalne alge, dok su gimnokodijaceje prisutne na istraživanim profilima u okolici Brušana i Baških Oštarija sve do granice s trijasom.

Nakon početnog stresa na granici guadalupij-lopingij, biota je imala kratak i nedovoljan period za oporavak i prilagodbu novim uvjetima. Uslijed najvećeg stresnog događaja, na granici perm-trijas, drevni organizmi paleozoika više se nikada nisu oporavili na globalnoj razini. Oni koji su i uspjeli preživjeti izumiranja, više nikada nisu dosegli nekadašnju raznolikost već su bili zamijenjeni novim, modernijim i prilagođenijim skupinama mezozojskih organizama.

1. Fio, K., Spangenberg, J.E., Vlahović, I., Sremac, J., Velić, I., Mrinjek, E., *Chem. Geol.* **278** (2010) 38-57.
2. Kochansky-Devidé, V., *Acta Geol. V* **35** (1964) 101-136.
3. Salopek, M., *Rad HAZU* **274** (1942) 218-272.
4. Sremac, J., *Geol. Croat.* **58** (2005) 1-19.

P-OC1: DUGOROČNO ISTRAŽIVANJE SADRŽAJA ORGANSKE TVARI U JADRANSKOM MORU KAO INDIKATOR GLOBALNIH PROMJENA

Jelena Dautović[1], Vjeročka Vojvodić[1], Nataša Tepić[2], Božena Ćosović[1], Irena Ciglenečki[1*]
[1]*Institut Ruđer Bošković, Zavod za istraživanje mora i okoliša, Bijenička cesta 54, Zagreb*
[2]*Nacionalni centar za vanjsko vrednovanje obrazovanja, Ulica D. Tomljenovića 11, Zagreb*

U ovom radu biti će prikazani rezultati dugoročnog istraživanja (25 godina) sadržaja organske tvari (otopljeni organski ugljik, DOC, te njegova površinski aktivna frakcija, PAT) i distribucije na istim postajama transekta ušće rijeke Po-Rovinj u sjevernom Jadranu (1-3). Ovi jedinstveni rezultati za Mediteran, i Jadran uopće, pokazuju

- izražena i karakteristična prostorna i vremenska kolebanja: sadržaj DOC opada sa dubinom (vertikalna distribucija) te od zapada prema istoku transekta (horizontalna distribucija)
- izražena sezonska kolebanja tijekom godina s evidentnim eutrofnim epizodama ali generalno s trendom oligotrofikacije uz opadajući trend DOCa u cijelom stupcu mora.

Smatra se da su dinamika i distribucija DOC u sjevernom Jadranu pod snažnim utjecajem kompleksne cirkulacije vodenih masa objašnjene uz pomoć *Bimodal Oscillating System* (BiOS) koji povezuje cirkulacije vodenih masa u Jonskom i Jadranskom moru (4). Stoga se na osnovu rezultata iz ovoga rada može zaključiti kako na događaje/procese u sjevernom Jadranu velikim dijelom utječe donos slatke vode rijeke Po, a s druge strane tip vode koji kao posljedica BiOSa ulazi u Jadran iz zapadnog ili istočnog Mediterana. Relativno dobro slaganje s BiOS-om te rezultati drugih studija koje su koristile druge varijable kao indikatore promjena u okolišu (prvenstveno diskutirane kao posljedice klimatskih promjena), ukazuju na činjenicu da je organska tvar s naglaskom na DOC i njegovu površinsko aktivnu frakciju (PAT) dobar alat te potencijalan indikator globalnih promjena.

1. Dautović J., Vojvodić V., Tepić N., Ćosović B., Ciglenečki I., *Sci. Total Environ.* **587/588** (2017) 185-195.
2. Ćosović B., Vojvodić V., *Electroanal.* **10** (1998) 429-434.
3. Cauwet G., *Mar. Chem.* **47** (1994) 55-64.
4. Gačić M., Eusebi Borzelli G.L., Civitarese G., Cardin V., Yari S., *Geophys. Res. Lett.* **37** (2010) L09608.

P-OC2: INTERPRETACIJA FORAMINIFERSKIH ZAJEDNICA SREDNJEG I JUŽNOG JADRANA POMOĆU ODABRANIH GEOKEMIJSKIH POKAZATELJA STANJA SEDIMENTA

Krešimir Markulin[1], Vlasta Ćosović[2], Grozdan Kušpilić[1]
[1] *Institut za oceanografiju i ribarstvo, Šetalište I. Meštrovića 63, Split*
[2] *Geološki odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Horvatovac 102a, Zagreb*

Opisane su zajednice foraminifera i njihov odnos s fizikalno-kemijskim svojstvima sedimenta u području srednjeg i južnog Jadrana te Šibenskog zaljeva. Jezgra su uzorkovane Uwitec gravitacijskim korerom na 12 postaja duž dva profila koji se pružaju prema otvorenom moru okomito na smjer pružanja Jadranskog bazena, u srednjem i južnom Jadranu, te jedna postaja u Šibenskom zaljevu. Postaje su odabrane u rasponu dubina od 38 m do 1200 m s ciljem da se obuhvate lokacije različite dubine i udaljenosti od obala te područja s antropogenim utjecajem. Geokemijske i mikorpaleontološke analize obuhvaćale su analize redoks potencijala, granulometrijske analize, analize udjela karbonatne komponente, analize udjela organske tvari, analize udjela odabranih kemijskih elemenata, taksonomsko određivanje foraminifera, određivanja bioraznolikosti i statističke analize. S obzirom na sastav i abundanciju foraminiferskih vrsta definirane su dvije asocijacije. *Eilohedra vitrea – Turborotalita quinqueloba* asocijacija s dva biotopa, *Turborotalita quinqueloba – Globocassidulina subglobosa* biotop i *Eilohedra vitrea* biotop, te *Turborotalita quinqueloba* asocijacija. Sedimenti bogatiji sitnijim česticama bogatiji su organskom tvari te imaju manji udio epifaunalnih vrsta te su u takvim okolišima/zajednicama dominantne vrste *Eilohedra vitrea* i *Cassidulina laevigata*. Indeksi raznolikosti konstantni su dubinom jezgre, a mijenjaju se s obzirom na dubinu mora te s porastom dubine vrijednosti indeksa raznolikosti su sve manje. U sedimentima postaja dubljih od 84 m, u istraženim intervalima, najbrojnija je *Turborotalita quinqueloba*, relativno mala planktonska vrsta, tipični predstavnik zajednice iz hladnih mora. U sedimentima srednjeg i južnog Jadrana elementi Mg, Al, Fe, Be, V, Cr, Sc, Co, Ni, Cu, Ti, Zn, Rb, Zr, Sb, Cs, Ba, Tl, Th su terigenog porijekla, a moguće je da postoji antropogeni unos Pb, Cd, Ag, Se i U u području Šibenskog zaljeva. Raspodjela foraminifera u srednjem i južnom Jadranu nije povezana s raspodjelom istraženih elemenata u sedimentima, a razlike u izmjerenim masenim udjelima nemaju utjecaj na sastav i raznolikost zajednice.

Predavanja

Uspješan razvoj inovacija – kako s tehnologijom do tržišta

dr. sc. Vlatka Petrović
Centar za istraživanje, razvoj i transfer tehnologije (CIRTT), Sveučilište u Zagrebu

Suradnja industrije i akademske zajednice u razvoju inovacija nosi prednosti i za jedne i druge partnere. Istodobno, zbog sve veće globalne konkurencije potrebno je biti svjestan čimbenika koji utječu na spremnost industrije na suradnju s akademskom zajednicom kao i na uspješan izlaz na tržište s novim rješenjima. Čimbenici od značaja tako uključuju kvalitetu i karakteristike rješenja, te razumijevanje i usklađenost s ključnim potrebama kupaca i korisnika tehnologije. Značajan je čimbenik i vrijeme potrebno za daljnji razvoj te dodatna usklađenost s potrebama industrijskih partnera ovisno o vremenu izlaska na tržište. Kako bi se pronašli i privukli industrijski partneri potrebno je jasno komunicirati spremnost na suradnju te kompetencije kojima se može doprinijeti razvoju inovacija, te u svim interakcijama raditi na izgradnji uzajamnog povjerenja.

Zaštita intelektualnog vlasništva - trendovi i smjernice

dr. sc. Nataša Maršić
ovlašteni patentni zastupnik, Odvjetničko društvo Hraste i partneri d.o.o.; Ribnjak 40, Zagreb

Teme vezane za zaštitu intelektualnog vlasništva u akademskoj zajednici vrlo su raznolike-od mogućnosti korištenja znanja objavljenog u patentnoj literaturi do zaštite vlastitih istraživanja putem formalne ili neformalne zaštite intelektualnog vlasništva. Najčešće se pri tom misli da je zaštita patentom najvažnija zaštita, ukoliko postoji dobro definirani plan za komercijalizaciju inovacija. No uspješna komercijalizacija ovisi o tome i da li je pronađen optimalni model zaštite kao i svrsishodan put stavljanja na tržište. Današnje malo i srednje poduzetništvo u EU sve se čeće koristi različitim kombinacijama zaštite i patentom i poslovnom tajnom u omjerima koji su individualizirni na osnovu prirode same inovacije (npr. proizvod ili usluga) i specifičnih značajki same inovativne tvrtke (niska ili visoka ulaganja u istraživanje i razvoj, kompetitivnost područja, sudjelovanje u otvorenim inovacijskim shemama suradnje, itd.)[1] Također, danas se od znanstvenika očekuje velika odgovornost i uvažavanje dobre prakse u ovom području prilikom natjecanja za sredsva za istraživanje i u nacionalnim kao i u drugim modelima financiranja znanstvenih istraživanja (Obzor 2020, bilateralni programi, suradnja s industrijom). Na ove izazove moguće je odgovoriti novim, inovativnim obrazovanjem znanstvenika kao i interdisciplinarnom suradnjom različitih stručnjaka u području transfera tehnologije kao i zaštite intelektualnog vlasništva.

[1] Protecting Innovation Through Trade Secrets and Patents:Determinants for European Union Firms (www.euipo.europa.eu)

Sudionici

Bakić Petar, 1
Ban Sara, 2
Barišić Antun, 29
Bazina Linda, 35
Bečeheli Ivona, 42
Benković Tomislav, 39
Biba Renata, 43
Bibulić Petar, 9
Bilić Petra, 43
Bokulić Ana, 44
Borovina Mladen, 11
Bosilj Agneza, 5
Bubalo Maja, 27
Čalogović Marina, 9
Čanković Milan, 20
Crnjac Ivana, 21
Dautović Jelena, 53
Dekić Svjetlana, 14
Đud Mateja, 36
Erhardt Filip, 25
Galić Marija, 3
Glavaš Mladena, 37
Gregorić Tomislav, 40
Grizelj Karmen, 4
Horvat Luka, 44
Jankov Jelena, 21
Jurec Jurica, 26
Jurković Jadran, 25
Kadović Andrea, 24
Kanižaj Lidija, 34
Karačić Zrinka, 7
Kepec Mirjana, 45
Kirin Anamarija, 24
Klasić Marija, 12
Kontrec Ana, 22
Krasnići Nesrete, 46
Krištić Jasminka, 16
Kulaš Antonija, 46
Leko Katarina, 33
Lisac Katarina, 41
Markulin Krešimir, 54
Maršić Nataša, 55
Maslać Mikulec Maja, 42
Meštrić Aleksandar, 34
Mucko Maja, 15
Nemec Vinko, 7
Nikolić Juraj, 32
Papić Ivan, 22
Perković Dalibor, 6
Petrović Vlatka, 55
Planinić Hrvoje, 1
Pozojević Ivana, 13
Pušić Maja, 47
Puvača Matea, 2
Radilović Slavko, 28
Radonić Ivana, 48
Radovčić Marin, 48
Razdorov Genadij, 49
Šain Glibić Ivana, 2
Šebek Stjepan, 4
Šimić Ivana, 15
Šimičević Ana, 52
Skejo Josip, 12
Škulj Sanja, 38
Slatki Mario, 16
Slović Anamarija, 50
Smokrović Kristina, 29
Smolko Ana, 10
Sokol Jurković Renata, 27
Šolaja Dragana, 19
Sović Karlo, 32
Štih Ana, 51
Tandarić Tana, 38
Tomin Marko, 36
Torić Filip, 5
Valjak Valentina, 18
Vušak Darko, 30
Živković Igor, 31
Zorbaz Tamara, 8
Žunar Sonja, 23

Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu
ISBN 978-953-6076-43-7