

# Simpozij studenata doktorskih studija PMF-a : knjiga sažetaka

---

**Edited book / Urednička knjiga**

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

*Publication year / Godina izdavanja:* **2019**

*Permanent link / Trajna poveznica:* <https://urn.nsk.hr/urn:nbn:hr:217:076611>

*Rights / Prava:* [In copyright](#)/[Zaštićeno autorskim pravom.](#)

*Download date / Datum preuzimanja:* **2024-11-29**



*Repository / Repozitorij:*

[Repository of the Faculty of Science - University of Zagreb](#)



# **SIMPOZIJ STUDENATA DOKTORSKIH STUDIJA PMF-a**

## **Knjiga sažetaka**

Sveučilište u Zagrebu Prirodoslovno-matematički fakultet  
Zagreb, 22. veljače 2019.

Zagreb, 2019.

**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. I. Gruić Sovulj, prodekanica za znanost i doktorske studije, izv. prof. dr. sc. Z. Ljubešić, prof. dr. sc. K. Kumerički, izv. prof. dr. sc. A. Lukić, izv. prof. dr. sc. D. Bucković, izv. prof. dr. sc. I. Primožič, prof. dr. sc. Z. Drmač, doc. dr. sc. K. Pikelj.*

**Organizacijski odbor simpozija:**

*dr. sc. Petar Bakić, Petar Čuljak, dr. sc. Igor Felja, dr. sc. Frane Marković, dr. sc. Jelena Mlinarec Novosel, Karlo Sović, dr. sc. Ivan Šulc.*

**Mrežna stranica simpozija:**

[http://www.pmf.unizg.hr/poslijediplomski\\_studiji/simpoziji\\_studenata\\_doktorskih\\_studija\\_pmf-a/2019](http://www.pmf.unizg.hr/poslijediplomski_studiji/simpoziji_studenata_doktorskih_studija_pmf-a/2019)

**Glavna urednica:** Ines Primožič

**Uredništvo:** K. Kumerički, A. Lukić, D. Bucković, I. Primožič, Z. Drmač, K. Pikelj.

**Tehnički urednik:** Branka Maravić

**Tekstove sažetaka pripremili potpisani autori.**

**Izdavač:**

*Prirodoslovno-matematički fakultet Sveučilišta u Zagrebu*

ISBN 978-953-6076-49-9

# Sadržaj

<b>Predgovor.....</b>	<b>VIII</b>
<b>Usmena priopćenja .....</b>	<b>1</b>
U-M1: ASIMPTOTIČKA ANALIZA NESTACIONARNOG TOKA MIKROPOLARNOG FLUIDA U TANKOJ ZAKRIVLJENOJ CIJEVI .....	1
<i>Marko Radulović, Igor Pažanin</i>	
U-M2: KLASIFIKACIJA IREDUCIBILNIH MODULA NEKIH IRACIONALNIH W-ALGEBRI.....	1
<i>Ana Kontrec</i>	
U-M3: DVOFAZNI DVOKOMPONENTNI TOK FLUIDA U POROZNOJ SREDINI U REŽIMU SLABE TOPLJIVOSTI .....	2
<i>Mladen Jurak, Ivana Radišić, Ana Žgaljić Keko</i>	
U-M4: KVAZISIMETRIČNI DIZAJNI.....	2
<i>Renata Vlahović Kruc, Vedran Krčadinac</i>	
U-M5: ON IRREDUCIBILITY OF WHITTAKER MODULES FOR CYCLIC ORBIFOLD VERTEX ALGEBRAS AND APPLICATION TO THE WEYL ALGEBRA .....	3
<i>Dražen Adamović, Ching Hung Lam, Veronika Pedić, Nina Yu</i>	
U-F1: VLA-COSMOS VELIKI PROJEKT NA 3 GHz: RAZVOJ RADIJATIVNO EFIKASNIH AKTIVNIH GALAKTIČKIH JEZGARA KROZ POVIJEST SVEMIRA .....	4
<i>Lana Ceraj, Vernesa Smolčić, Ivan Delvecchio, Mladen Novak, Gianni Zamorani, Jacinta Delhaize, Eva Schinnerer, Eleni Vardoulaki, Noelia Herrera Ruiz</i>	
U-F2: UNIFIKACIJA TAMNOG SEKTORA: TAMNA MATERIJU - TAMNA ENERGIJA I TAMNA MATERIJU - TAMNA ENERGIJA - TAMNA MATERIJU .....	4
<i>Dalibor Perković, Hrvoje Štefančić</i>	
U-F3: ISPITIVANJE NISKOTEMPERATURNE MOLEKULSKE DINAMIKE U SUSTAVU NEUREĐENE REŠETKE METODOM ESR .....	5
<i>Jurica Jurec</i>	
U-K1: HALOGENSKA VEZA U KOKRISTALIMA KOJI SADRŽE $\text{CoCl}_2\text{L}_2$ METALOORGANSKE JEDINICE .....	6
<i>Katarina Lisac, Dominik Cinčić</i>	
U-K2: MEĐUPOVRŠINSKI SLOJ VODE UZ POVRŠINU METALNIH OKSIDA I INERTNIH MATERIJALA.....	6
<i>Antun Barišić, Zlatko Brkljača, Tajana Preočanin</i>	
U-K3: MEHANIZAM MODELNE REAKCIJE AMINOKISELINE I REAKTIVNOG ALDEHIDA U RAZLIČITIM OTAPALIMA.....	7
<i>Sanja Škulj, Katarina Vazdar, Davor Margetić, Mario Vazdar</i>	
U-K4: DIZAJN, PRIPRAVA I KOMPLEKSACIJSKA SVOJSTVA KALIKS[4]ARENA S FENANTRIDINSKIM PODJEDINICAMA .....	8
<i>Katarina Leko, Andrea Usenik, Nikola Cindro, Matija Modrušan, Vladislav Tomišić</i>	
U-K5: POLIMORFIJA U KOMPLEKSIMA NIKLA(II) S GLICINAMIDOM .....	9
<i>Darko Vušak, Inka Kirasić, Biserka Prugovečki, Dubravka Matković-Čalogović</i>	
U-K6: IREVERZIBILNA INHIBICIJA ENZIMA MONOAMINOOKSIDAZE B: RAČUNALNI UVID .....	9
<i>Tana Tandarić, Robert Vianello</i>	
U-K7: METODOLOGIJA LC-SPE-NMR – PRIMJENA U ANALIZI BIOAKTIVNIH MOLEKULA I LIJEKOVA .....	10
<i>Iva Habinovec, Predrag Novak</i>	

U-K8:	MOLEKULSKO SAMOUDRUŽIVANJE I PRIJEPIS STRUKTURE SUPRAMOLEKULSKIH GELOVA U POLIMERE AMINOKISELINSKIH AMIDNIH DERIVATA FUMARNE KISELINE .....	11
	<i>Tomislav Gregorić, Janja Makarević, Leo Frkanec</i>	
U-K9:	VIŠEKOMPONENTNE REAKCIJE. SINTEZA MAKROCIKLIČKIH SPOJEVA.....	11
	<i>Mladena Glavaš, Matija Gredičak, Ivanka Jerić</i>	
U-K10:	METALNI KOMPLEKSI KONJUGATA TRIFENILFOSFINA I KIRALNIH AMIDA: PRIPRAVA, KARAKTERIZACIJA I PRIMJENA U STEREOSELEKTIVNOJ SINTEZI .....	12
	<i>Saša Opačak, Zoran Kokan, Zoran Glasovac, Berislav Perić, Srećko I. Kirin</i>	
U-B1:	UTJECAJ SPOLNIH HORMONA NA N-GLIKOZILACIJU IMUNOGLOBULINA G U ŽENA .....	13
	<i>Julija Jurić, Hongli Peng, Manshu Song, Frano Vučković, Jelena Šimunović, Irena Trbojević-Akmačić, Feifei Zhao, Youxin Wang, Jiaonan Liu, Qing Gao, Hao Wang, Marija Pezer, Wei Wang, Gordan Lauc</i>	
U-B2:	KARBAPENEM-REZISTENTNE BAKTERIJE U RIJEČNOM EKOSUSTAVU.....	13
	<i>Svjatlana Dekić, Jasna Hrenović, Snježana Kazazić, Martina Šeruga Musić</i>	
U-B3:	RAZVOJ I ŠIRENJE OTPORNOSTI NA MAKROLIDNE ANTIBIOTIKE U SEDIMENTU RIJEKE SAVE KOJI JE POD UTJECajem FARMACEUTSKIH OTPADNIH VODA.....	14
	<i>Milena Milaković, Gisle Vestergaard, Juan Jose Gonzalez Plaza, Ines Petrić, Nikolina Udiković Kolić</i>	
U-B4:	IN VIVO I IN VITRO UČINAK ANTIEPILEPTIKA VALPROATA I FLAVONONA NARINGENINA NA ANTIOKSIDACIJSKI SUSTAV OBRANE U MOZGU, JETRI I BUBREGU .....	14
	<i>David Jutrić, Domagoj Đikić</i>	
U-B5:	MODULACIJA CRIJEVNOG MIKROBIOMA KVERCETINOM U ŠTAKORSKOMU MODELU ALZHEIMEROVE BOLESTI.....	15
	<i>Marina Kukulj, Nada Oršolić, Dyana Odeh, Barbara Nikolić, Lea Langer Horvat, Goran Šimić, Romana Gračan, Ivana Zrinščak, Tatjana Orct, Branko Šoštarčić, Karmen Branović Čakanić, Dunja Vlahović, Jagoda Šušaković, Blaženka Kos, Ksenija Uroić, Jurica Žučko, Andreja Leboš Pavunc, Ivan Kosalec, Svjetlana Terzić, Maja Ledinski, Anamarija Mojzeš</i>	
U-GG1:	MEDIJSKA SLIKA „MIGRANTSKE KRIZE“ U GEOGRAFSKOM PROSTORU: PRIMJER HRVATSKE.....	16
	<i>Tomislav Golubić</i>	
U-GG2:	MODEL INVENTARIZACIJE, VREDNOVANJA, UPRAVLJANJA I ZAŠTITE GEOBAŠTINE U REPUBLICI HRVATSKOJ.....	17
	<i>Irina Žeger Pleše</i>	
U-GL1:	TEKTONIKA I GEOMORFOLOGIJA KOLOČEPSKOGA KANALA .....	18
	<i>Dragana Šolaja, Slobodan Miko, George Papatheodorou</i>	
U-GL2:	DINAMIKA METALA U SEDIMENTIMA ESTUARIJA RIJEKE KRKE .....	19
	<i>Nuša Cukrov, Neven Cukrov, Dario Omanović, Cedric Garnier</i>	
U-OC1:	SVOJSTVA I DINAMIKA PROMJENA ORGANSKE TVARI U JADRANU .....	20
	<i>Jelena Dautović, Vjeročka Vajvodić, Nataša Tepić, Božena Čosović, Irena Ciglencečki</i>	
U-OC2:	MORFO-FIZIOLOŠKE REAKCIJE RODOVA CHAETOCEROS I LEPTOCYLINDRUS NA LIMITACIJU NUTRIJENTIMA.....	20
	<i>Nataša Kužat, Mirta Smodlaka Tanković, Ana Baričević, Ingrid Ivančić, Emina Pustijanac, Nikola Medić, Daniela Marić Pfannkuchen, Martin Pfannkuchen</i>	
U-OC3:	ZAJEDNIČKI UTJECAJ RASTA TEMPERATURE I OLIGOTROFIKACIJE NA POVEĆANU PRODUKCIJU FITOPLANKTONSKIH LIPIDA .....	21
	<i>Tihana Novak, Jelena Godrijan, Daniela Marić Pfannkuchen, Tamara Djakovac, Nikola Medić, Ingrid Ivančić, Marina Mlakar, Blaženka Gašparović</i>	
U-OC4:	RASPODJELA I RAZNOLIKOST PORODICE SYLLIDAE (ANNELIDA: POLYCHAETA) U KAŠTELANSKOM ZALJEVU.....	21
	<i>Ante Žunec, Petra Lučić, Ivan Cvitković, Marija Despalatović, Ante Žuljević</i>	

U-OC5:	SKLEROKRONOLOŠKA ISTRAŽIVANJA KOMERCIJALNO VAŽNIH VRSTA ŠKOLJKAŠA <i>VENUS VERRUCOSA LINNAEUS</i> , 1758 I <i>CALLISTA CHIONE</i> (LINNAEUS, 1758) U JADRANU .....	22
	<i>Hana Uvanović, Melita Peharda</i>	
U-OC6:	POPULACIJSKA STRUKTURA I MORFOLOŠKE ZNAČAJKE HLAPA ( <i>HOMARUS GAMMARUS</i> , LINNAEUS 1758) NA ISTOČNOJ OBALI JADRANSKOG MORA .....	22
	<i>Mišo Pavičić, Dario Vrdoljak, Sanja Matić-Skoko</i>	
U-OC7:	ELEKTROKEMIJSKA KARAKTERIZACIJA KOBALTOVIH(II) KOMPLEKSA S 4-NITRO-KATEKOLOM I HUMUSNOM KISELINOM .....	23
	<i>Anđela Bačinić, Marina Mlakar</i>	
U-OC8:	UV/VIS SPEKTROFOTOMETRIJSKA KARAKTERIZACIJA KROMOFORNE OTOPLJENE ORGANSKE TVARI (CDOM) U ESTUARIJU RIJEKE KRKE.....	24
	<i>Saša Marcinek, Nicolas Layglon, Jasmin Pađan, Ana-Marija Cindrić, Chiara Sanitnelli, Margherita Gonnelli, Cedric Garnier, Stephane Mounier and Dario Omanović</i>	

## Posterska priopćenja ..... 25

P-F1:	STRUKTURA LAKIH JEZGARA RAZMATRANA PUTEM REAKCIJA ${}^7\text{Li}+{}^{6,7}\text{Li}$ .....	25
	<i>Deni Nurkić, M. Uroić, M. Milin, A. Di Pietro, P. Figuera, M. Fisichella, M. Lattuada, I. Martel, Đ. Miljanić, M. G. Pellegriti, L. Prepolec, A. M. Sanchez Benitez, V. Scuderi, N. Soić, E. Strano, D. Torresi</i>	
P-F2:	KARAKTERISTIKE I PROMJENE LJETNIH I ZIMSKIH TEMPERATURA ZRAKA U ZAGREBU.....	25
	<i>Irena Nimac, Ivana Herceg Bulić, Melita Perčec Tadić</i>	
P-F3:	OPTIMIZACIJA DIJAGNOSTIČKOG PREGLEDA TORAKSA KOMPJUTERIZIRANOM TOMOGRAFIJOM.....	26
	<i>Ivan Lasić</i>	
P-F4:	ELEMENTNA ANALIZA LEBDEĆIH ČESTICA U RADIONICI ZA OBRADU METALA I BIOLOŠKIH UZORAKA IZLOŽENIH RADNIKA .....	27
	<i>Marija Čargonja, Gordana Žauhar, Darko Mekterović, Paula Žurga</i>	
P-F5:	UPOTREBA UVJETNE VJEROJATNOSTI U KRATKOROČNOM PROGNOZIRANJU VIDLJIVOSTI NA ZRAČNOJ LUCI ZAGREB .....	27
	<i>Marko Zoldoš, Jadran Jurković, Darko Koračin</i>	
P-F6:	UTJECAJ NAPREZANJA I BROJA SLOJEVA NA OPTIČKA SVOJSTVA 2D ANTIMONA, INDIJA I ALUMINIJA .....	28
	<i>Matko Mužević, Igor Lukačević, Maja Varga Pajtler, Sanjeev Kumar Gupta</i>	
P-F7:	UPRAVLJANJE MAGNETSKOM POLARIZACIJOM GRAFENA ELEKTRIČNIM POLJEM U VAN DER WAALSOVIM HETEROSTRUKTURAMA .....	29
	<i>Mihovil Bosnar, Ivor Lončarić, Predrag Lazić</i>	
P-K1:	ASYMMETRIC SYNTHESIS OF MARINOAZIRIDINES AND THEIR DERIVATIVES WITH POTENTIAL BIOLOGICAL EFFECT .....	30
	<i>Anđela Buljan, Irena Dokli, Marin Roje</i>	
P-K2:	SINTEZA I ANTIPROLIFERATIVNA AKTIVNOST CIKLIČKIH AMIDINO-SUPSTITUIRANIH 2-ARILBENZOKSAZOLA .....	30
	<i>Lucija Ptiček, Petra Grbčić, Sandra Kraljević Pavelić, Livio Racané</i>	
P-K3:	SURFACTANT PROPERTIES OF ALKYL QUINUCLIDINE-3-OLS.....	31
	<i>Linda Bazina, Perica Bošković, Matilda Šprung, Renata Odžak</i>	
P-K4:	MEHANIZMI DISKRIMINACIJE IZOLEUCIL-tRNA-SINTETAZE PREMA $\alpha$ -AMINOBTIRATU I NJEGOVIH FLUORIRANIM ANALOZIMA.....	32
	<i>Igor Živković, Ita Gruić-Sovulj</i>	

P-K5:	COMPUTATIONAL AND EXPERIMENTAL STUDY OF HYDROGEN ATOM REACTIONS WITH HALOGENATED ORGANIC COMPOUNDS IN AQUEOUS SOLUTIONS.....	33
	<i>Ivana Nikšić-Franjić, Igor Sviben, Marija Bonifačić, Ivan Ljubić</i>	
P-K6:	KARAKTERIZACIJA INTERAKCIJA DIPEPTIDIL-PEPTIDAZE III S DOMENOM KELCH PROTEINA KEAP1 - RAČUNALNI I EKSPERIMENTALNI PRISTUP .....	33
	<i>Sara Matić, Mihaela Matovina, Filip Šupljika, Ivo Crnolatac, Sanja Tomić</i>	
P-K7:	KOMPETICIJA ALDEHIDNE I HIDROKSILNE SKUPINE U OSTVARIVANJU HALOGENSKE VEZE U KOKRISTALIMA 2-HIDROKSI-1-NAFTALDEHIDA I PERFLUORIRANIH HALOGENBENZENA.....	34
	<i>Luka Fotović, Vinko Nemec, Vladimir Stilinović, Dominik Cinčić</i>	
P-K8:	USPOREDBA ANALOGNIH STRUKTURA BAKROVIH BENZOATA I SALICILATA .....	35
	<i>Aleksandar Meštrić, Nenad Judaš</i>	
P-K9:	TRIDENTATNI DUŠIKOVI LIGANDI I STEREOKEMIJA NJIHOVIH HEKSAKOORDINIRANIH KOMPLEKSA S PRIJELAZNIM METALIMA.....	36
	<i>Natalija Pantalon Juraj, Srećko I. Kirin</i>	
P-K10:	NITROCHLORANILATE – A NOVEL HETEROSUBSTITUTED 2,5-DIHYDROXYQUINOID LIGAND WITH A GREAT POTENTIAL FOR DESIGN OF COORDINATION POLYMERS.....	36
	<i>Valentina Milašinović, Krešimir Molčanov</i>	
P-K11:	PRIPREMA I ADSORPCIJSKA SVOJSTVA PLOČASTIH {001} KRISTALA KALCITA .....	37
	<i>Nives Matijaković, Giulia Magnabosco, Francesco Scarpino, Simona Fermani, Giuseppe Falini, Damir Kralj</i>	
P-K12:	USPOREDBA 1,3- i 1,4-DIJODTETRAFLUORBENZENA KAO DONORA HALOGENSKE VEZE U KRISTALNOM INŽENJERSTVU .....	38
	<i>Nikola Bedeković, Vladimir Stilinović, Dominik Cinčić, Tomislav Friščić</i>	
P-K13:	KOMPETICIJA SUPRAMOLEKULSKIH SINTONA U KRISTALIMA MONOSUPSTITUIRANIH KARBONOHIDRAZIDA.....	38
	<i>Edi Topić, Mirta Rubčić</i>	
P-K14:	CHARACTERIZATION OF ADENYLOSUCCINATE SYNTHETASE FROM HELICOBACTER PYLORI USING COMPUTATIONAL AND EXPERIMENTAL APPROACH .....	39
	<i>Ante Bubić, B. Bertoša, I. Leščić Ašler, M. Luić</i>	
P-K15:	SUPRAMOLEKULSKE ARHITEKTURE FLEKSIBILNIH KRISTALA KOORDINACIJSKIH POLIMERA KADMIJA(II) .....	40
	<i>Mateja Pisačić, Marijana Đaković</i>	
P-B1:	NANOČESTICE SREBRA STABILIZIRANE S OMOTAČIMA UTJEČU NA ISKLIJAVANJE I RAST DUHANA.....	41
	<i>Renata Biba, Petra Cvjetko, Mirta Tkalec, Daniel Lyons, Petra Peharec Štefanić, Biljana Balen</i>	
P-B2:	POTENCIJALNI BIOMARKERI PROGRESIJE I INVAZIVNOSTI INTRAKRANIJALNIH MENINGEOMA..	41
	<i>Anja Bukovac, Anja Kafka, Nives Pećina-Šlaus</i>	
P-B3:	GENOTIPIZACIJA MIKROORGANIZAMA (MRSA) POMOĆU ELEKTROFOREZE U PULSIRAJUĆEM POLJU (PFGE).....	42
	<i>Jasenska Grgurić</i>	
P-B4:	ZNAČAJKE I ORGANIZACIJA UZASTOPNO PONAVLJAJUĆE DNA U GENOMU DALMATINSKOG BUHAČA ( <i>Tanacetum cinerariifolium</i> (Trevir.) Sch. Bip.) .....	42
	<i>Adela Jurković, Jelena Mlinarec, Nenad Malenica, Višnja Besendorfer</i>	
P-B5:	UČINAK TERBUTILAZINA NA INDUKCIJU ANEUPLODIJE <i>IN VITRO</i> U LIMFOCITIMA PERIFERNE KRVI ČOVJEKA .....	43
	<i>Vedran Mužinić, Davor Želježić</i>	

P-B6:	ANAEROBIC POTENTIAL OF <i>Synurella ambulans</i> (Müller, 1846) (Crustacea, Amphipoda) FROM HYPORHEIC ZONE OF SAVA RIVER AND STALNJAK SPRING, CROATIA.....	43
	<i>Zuzana Redžović, Inna Sokolova, Marijana Erk, Eugene Sokolov, Sanja Gottstein</i>	
P-B7:	PROMJENE RAZINA EKSPRESIJE POVRŠINSKIH I SOLUBILNIH MOLEKULA STANICA UROĐENOG IMUNOLOŠKOG SUSTAVA KAO ODGOVOR NA INFEKCIJU ORTHOHANTAVIRUSIMA .....	44
	<i>Petra Svoboda, Lidija Cvetko Krajinović, Denis Polančec, Ivan Christian Kurolt, Željka Mačak Šafranko, Alemka Markotić</i>	
P-GL1:	SEDIMENTI ISTARSKOG FLIŠKOG BAZENA.....	46
	<i>Krešimir Petrinjak</i>	

## **Predavanja .....47**

GENOS: OD START-UPA DO GLOBALNOG LIDERA U VISOKOPROTOČNOJ GLIKOMICI U DESET GODINA ....	47
<b>prof. dr. sc. Gordan Lauc</b> .....	

R&D U ZNANOSTI, INDUSTRIJI I <i>START-UPU</i> .....	47
<i>dr. sc. Ivan Krajinović</i>	

## **Sudionici.....48**



# Predgovor

Drage studentice i studenti doktorskih studija na PMF-u,

Vjerujem da vas je do doktorskog studija i do vaših laboratorijskih stolova i računala dovela znatiželja i strast za učenjem nečeg novog. Da ste zamišljali kako misaonim skalpelom pronicete u tajne koje nisu svakome dostupne. No, možda vam se ponekad čini da je put složeniji nego što ste očekivali. Rezultati ne dolaze uvijek kao naručeni, a kada i dođu nerijetko su prekomplicirani i nereproducibilni. Ni novaca nikada dosta; gledamo one „bogatije“ kako brže i lakše trče taj znanstveni maraton. Ipak, usprkos svim poteškoćama sigurna sam da se sjećate ushita kada ste spoznali nešto posve novo i kada je pred vas izronila jasna slika nastala iz fragmenata koje ste vrijedno sakupljali pitajući se ponekad jeste li i dalje na pravom putu. To su trenuci koje pamtimo, to su trenuci koje dijelimo s prijateljima i suradnicima, to su trenuci koji obnavljaju strast i zbog kojih se bavimo znanošću. Čuvajte i njegujte te trenutke, zbog njih zaboravljamo umor i krećemo uvijek iznova dalje.

Danas na Simpoziju studenata doktorskih studija PMF-a, rezultate svojih istraživanja dijelite s kolegama i profesorima. Bilo da su to još uvijek „znanstveni fragmenti“ koji čekaju misaono ujedinjenje ili su to već vrijedne „znanstvene slike“, budite na njih ponosni. Objasnite kolegama kuda vode vaša istraživanja, zašto je to važno i koje su stranputice. Znanost buja kroz konstruktivne dijaloge i diskusije. Jacques Monod, glasoviti francuski biokemikar i dobitnik Nobelove nagrade za fiziologiju ili medicinu, je rekao: *U znanosti, zadovoljstvo samim sobom donosi smrt. Ono što nas pokreće je nemir, nespokoj, nezadovoljstvo i agonija uma.* Ja vam želim da uvijek iznova propitkujete sebe i svoju znanost, bez obzira na nemir koji to izaziva, i da na taj način kročite punim plućima kroz ovo razdoblje vašeg života. Neka vaš žar bude zarazan. U ime Znanstvenog i Organizacijskog odbora zahvaljujem vam što sudjelujete u radu Simpozija i želim vam uspješan i ugodan znanstveni dan na PMF-u!

*prof. dr. sc. Ita Gručić Sovulj*

Prodekanica za znanost i doktorske studije

# Usmena priopćenja

## U-M1: ASIMPTOTIČKA ANALIZA NESTACIONARNOG TOKA MIKROPOLARNOG FLUIDA U TANKOJ ZAKRIVLJENOJ CIJEVI

Marko Radulović, Igor Pažanin

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

Prezentiramo model za nestacionarni tok mikropolarnog fluida u tankoj (ili dugačkoj) zakrivljenoj cijevi. [1] Koristimo Germanov referentni sustav kako bi opisali geometriju cijevi. Jednadžbe zapisujemo u krivolinijskim koordinatama, konstruiramo asimptotičku aproksimaciju drugog reda, proučavamo rubne slojeve u prostoru te opravdavamo model pomoću ocjene greške.

Teorija mikropolarnih fluida uvedena je šezdesetim godinama dvadesetog stoljeća od strane Eringena [2] kako bi opisala mikrostrukturu fluida i njen efekt na tok, koji je zanemaren u klasičnom Navier-Stokesovom modelu. Zbog praktične primjene modela mikropolarnih fluida u domenama u obliku cijevi u raznim područjima znanosti, prvenstveno u biomedicini kod modeliranja toka krvi kroz krvne žile, prezentacija će biti usmjerena na matematičke i inženjerske aspekte modela.

1. I. Pažanin, M. Radulović, *Appl. Anal.* (2018) 49.
2. A. C. Eringen, *J. Appl. Math. Mech.* **16** (1966) 1-18.

## U-M2: KLASIFIKACIJA IREDUCIBILNIH MODULA NEKIH IRACIONALNIH W-ALGEBRI

Ana Kontrec

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

Velik dio istraživanja u modernoj matematici obuhvaćen je Langlandsovim programom, formuliranim U ovom radu proučavamo neke iracionalne  $W$ -algebre i njihove module, posebno prostu Bershadsky-Polyakov verteks algebru  $W_k (=W_k(\mathfrak{sl}_3, f))$ , tj. minimalnu afinu  $W$ -algebru pridruženu  $\mathfrak{sl}_3$ .

T. Arakawa je dokazao u članku [3] da je  $W_k$  racionalna ako je  $k$  polucijeli broj veći od  $-3/2$ . Mi proučavamo slučajeve kad je  $W_k$  iracionalna, te klasificiramo  $W_k$ -module za neke  $k$ . Klasifikacija ireducibilnih modula koristi Zhuovu teoriju i formule za singularne vektore.

1. D. Adamović, *J. Pure Appl. Algebra* **196** (2005) 119-134.
2. D. Adamović, A. Milas, *J. Math. Phys.* **48** (2007) 073503.
3. T. Arakawa, *Commun. Math. Phys.* **323** (2013) 627-633.
4. S.P. Smith, *Trans. Amer. Math. Soc.* **322** (1990) 285-314.

**U-M3: DVOFAZNI DVOKOMPONENTNI TOK FLUIDA U POROZNOJ SREDINI U REŽIMU SLABE TOPLJIVOSTI**Mladen Jurak<sup>1</sup>, Ivana Radišić<sup>2</sup>, Ana Žgaljić Keko<sup>3</sup><sup>1</sup>Matematički odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Bijenička cesta 30, Zagreb<sup>2</sup>Fakultet strojarstva i brodogradnje, Sveučilište u Zagrebu, Ivana Lučića 5, Zagreb<sup>3</sup>Fakultet elektrotehnike i računarstva, Sveučilište u Zagrebu, Unska 3, Zagreb

Promatramo sustav jednadžbi koji opisuje gibanje tekuće i plinske faze u poroznoj sredini. Plinska faza je homogena dok je tekuća faza sastavljena od tekuće komponente i otopljene plinske komponente. Pretpostavljamo da je plinska komponenta slabo topljiva u tekućini. Navedena pretpostavka je precizno matematički formulirana. U matematičkoj analizi koristimo formulaciju s perzistentnim varijablama koja opisuje sustav fluida i u jednofaznim i u dvofaznim područjima. [1, 2, 3] Formuliramo slabo rješenje inicijalno-rubnog problema, zatim regulariziramo sustav, te diskretiziramo vremenske derivacije kako bi dobili niz eliptičkih problema. Nakon dokaza egzistencije rješenja eliptičkih problema, puštanjem limesa dokazujemo egzistenciju rješenja polaznog problema kao u [4].

1. A. Bourgeat, M. Jurak, F. Smaï, *Comput. Geosci.* **13** (2009) 29-42.
2. A. Bourgeat, M. Jurak, F. Smaï, *Comput. Geosci.* **17** (2013) 287-305.
3. O. Angelini, C. Chavant, E. Chénier, R. Eymard, S. Granet, *Math. Comput. Simul.* **81** (2011) 2001-2017.
4. F. Caro, B. Saad, M. Saad, *Discrete Contin. Dyn. Syst. Ser. S* **7** (2014) 191-205.

**U-M4: KVAZISIMETRIČNI DIZAJNI**

Renata Vlahović Kruc, Vedran Krčadinac

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

Dizajn  $D$  s parametrima  $t$ - $(v, k, \lambda)$  je uređeni par  $(V, B)$ , gdje je  $V$  konačan  $v$ -člani skup elemenata koje nazivamo točkama, a  $B$  familija  $k$ -članih podskupova od  $V$  koje nazivamo blokovima sa svojstvom da je svaki  $t$ -člani skup točaka sadržan u  $\lambda$  blokova. Dizajn  $D$  je kvazisimetričan ako se svaka dva njegova bloka sijeku u  $x$  ili  $y$  točaka, pri čemu je  $x < y$ . Kvazisimetrični dizajni povezani su i s drugim kombinatornim strukturama, kao što su jako regularni grafovi i samoortogonalni kodovi. Klasifikacija kvazisimetričnih 2-dizajna je težak otvoren problem i postoje mnoge trojke parametara  $(v, k, \lambda)$  za koje egzistencija dizajna nije poznata.

U ovom radu izložit ćemo neke metode za konstrukciju kvazisimetričnih dizajna sa zadanom grupom automorfizama.

1. M. S. Shrikhande and S. S. Sane, *Quasi-symmetric designs*, Cambridge University Press, Cambridge, 1991.
2. C. J. Colbourn and J. H. Dinitz, eds., *Handbook of combinatorial designs*, Chapman & Hall, Boca Raton, 2007.
3. P. Kaski and P. R. J. Östergård, *Classification algorithms for codes and designs*, Springer, Berlin, 2006.
4. V. Krčadinac, R. Vlahović, *Discret. Math.* **339** (2016) 2884–2890.

**U-M5: ON IRREDUCIBILITY OF WHITTAKER MODULES FOR CYCLIC ORBIFOLD VERTEX ALGEBRAS AND APPLICATION TO THE WEYL ALGEBRA**Dražen Adamović<sup>1</sup>, Ching Hung Lam<sup>2</sup>, Veronika Pedić<sup>1</sup>, Nina Yu<sup>3</sup><sup>1</sup> *Matematički odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Bijenička cesta 30, Zagreb, Croatia*<sup>2</sup> *Taipei, Taiwan*<sup>3</sup> *Xiamen, China*

Recently, modules of Whittaker type have attracted great interest in the representation theory of vertex algebras and infinite-dimensional Lie algebras. In the first part of the talk we present a new result on irreducibility of modules of Whittaker type for cyclic orbifold vertex algebra. Then we apply this result for orbifolds of the Weyl vertex algebra.

1. D. Adamović, C. H. Lam, V. Pedić, N. Yu, arXiv:1811.04649

2. D. Adamović, R. Lü, and K. Zhao, *Adv. Math.* **289** (2016) 438–479.

**U-F1: VLA-COSMOS VELIKI PROJEKT NA 3 GHz: RAZVOJ RADIJATIVNO EFIKASNIH AKTIVNIH GALAKTIČKIH JEZGARA KROZ POVIJEST SVEMIRA**

Lana Ceraj<sup>1</sup>, Vernesa Smolčić<sup>1</sup>, Ivan Delvecchio<sup>1</sup>, Mladen Novak<sup>1,2</sup>, Gianni Zamorani<sup>3</sup>, Jacinta Delhaize<sup>1,6</sup>, Eva Schinnerer<sup>2</sup>, Eleni Vardoulaki<sup>4</sup>, Noelia Herrera Ruiz<sup>5</sup>

<sup>1</sup> Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Fizički odsjek, Bijenička cesta 32, Zagreb

<sup>2</sup> Max Planck Institut für Astronomie, Königstuhl 17, 69117 Heidelberg, Njemačka

<sup>3</sup> INAF – Osservatorio di Astrofisica e Scienza dello Spazio – Bologna, Via Piero Gobetti 93/3, 40129 Bologna, Italija

<sup>4</sup> Argelander-Institut für Astronomie, Universität Bonn, Auf dem Hügel 71, 53121 Bonn, Njemačka

<sup>5</sup> Astronomisches Institut, Ruhr-Universität Bochum, Universitätsstrasse 150, 44801 Bochum, Njemačka

<sup>6</sup> Department of Astronomy, University of Cape Town, Private Bag X3, Rondebosch 7701, Republika Južna Afrika

Proučavamo porijeklo zračenja u radio području i razvoj kroz kozmičku povijest skupine radijativno efikasnih aktivnih galaktičkih jezgara (RE AGJ-a) detektiranih u radio području. Kombiniramo radio podatke dobivene iz VLA-COSMOS velikog projekta na 3 GHz s raspoloživim više frekventnim podacima. RE AGJ detektirane u radio području odabrane su na temelju kriterija osjetljivih na obilježja radijativno efikasnog prirasta na super masivnu crnu rupu koja se mogu detektirati u rendgenskom, srednjem infracrvenom i optičkom području. Doprinosu od procesa stvaranja zvijezda i od aktivnosti AGJ opaženom radio zračenju razdvajamo statističkom metodom razdiobe luminoziteta. Koristeći luminozitete AGJ-a, određujemo funkcije luminoziteta RE AGJ-a u radio području. Određujemo brojčanu i luminozitetnu gustoću, nalazeći maksimum u kozmičkoj epohi kada je Svemir bio star oko 4 milijarde godina.

1. L. Ceraj, V. Smolčić, I. Delvecchio, M. Novak, G. Zamorani, J. Delhaize, E. Schinnerer, E. Vardoulaki, N. Herrera Ruiz, *Astron. Astrophys.* **A192** (2018) 620.

2. L. Ceraj, V. Smolčić, I. Delvecchio, J. Delhaize, M. Novak, *IAU Symposium* **333** (2018) 195-198.

**U-F2: UNIFIKACIJA TAMNOG SEKTORA: TAMNA MATERIJIA - TAMNA ENERGIJA I TAMNA MATERIJIA - TAMNA ENERGIJA - TAMNA MATERIJIA**

Dalibor Perković<sup>1</sup>, Hrvoje Štefančić<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Zdravstveno veleučilište, Mlinarska 38, Zagreb

<sup>2</sup> Hrvatsko katoličko sveučilište, Ilica 242, Zagreb

Ovaj rad donosi novi pristup ujedinjenju tamne materije i tamne energije u okvirima kozmičkih fluida. Uvodi se novi model u kojem se brzina zvuka definira kao funkcija parametra jednadžbe stanja. U radu se prikazuje da se ovaj model, u nekim posebnim režimima, ponaša kao ujedinjenje tamne materije i fantomske tamne energije ( $w < -1$ ). Dalje, model može prikazati i ujedinjenje u kojemu parametar jednadžbe stanja asimptotski ide u vrijednost veću od  $-1$ . U nekim parametarskim režimima ujedinjeni fluid također reproducira ekspanziju sličnu modelu  $\Lambda$ CDM u kojemu brzina zvuka nestaje za male, ali i velike vrijednosti faktora skale. Na kraju, ovaj model pokazuje kako implicitno definirana jednadžba stanja može biti poslužiti u opisivanju ujedinjenja tamna materija - tamna energija - tamna materija.

**U-F3: ISPITIVANJE NISKOTEMPERATURNE MOLEKULSKE DINAMIKE U SUSTAVU NEUREĐENE REŠETKE METODOM ESR**

Jurica Jurec

*Laboratorij za magnetske rezonancije, Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, Zagreb*

Staklasto stanje tvari je amorfno stanje materijala koje nastane brzim hlađenjem tekućine. Takav neuređeni sustav nije u stanju termodinamičke ravnoteže i s obzirom na minimum energije svi stupnjevi slobodne nisu optimizirani. Izostanak dugodosežne translacijske i rotacijske simetrije dovodi do pojave mnogih interesantnih fizičkih fenomena poput bozonskog vrška. Ako su takovi sustavi paramagnetski ili ih dopiramo paramagnetskim centrima, moguće ih je proučavati metodom elektronske spinske rezonancije (ESR). Koristeći specifične impulsne slijedove u ESR eksperimentima proučavali smo razlike između staklastih i kristalnih realizacija istog materijala s ciljem pronalaženja prikladnog eksperimentalnog parametra za opis neuređenosti staklastih sustava. Cilj našeg rada je doprinijeti razumijevanju utjecaja neuređenosti na dinamičke efekte opažene u staklima na niskim temperaturama u odnosu na kristalinično stanje, a za koja još ne postoji usuglašeni teorijski opis.

Koristeći inačicu konstantnog vremena Carr-Purcell-Meiboom-Gill (CPMG) impulsnih slijedova proučavali smo dva modelna sustava: etanol dopiran paramagnetskim nitroksilnim radikalom TEMPO i trehalozu podvrgnutu  $\gamma$ -zračenju. Oba materijala proučavali smo u staklastom i polikristaliničnom stanju. Proučili smo hiperfinu interakciju spina elektrona sa spinovima protona matrice kao funkciju neuređenosti, tj. molekuskog pakiranja. U slučaju etanola nuklearna spektralna difuzija (NSD) pokazala se dominantnim mehanizmom gubitka faze koherencije spinova elektrona [1], dok u slučaju trehaloze uz NSD uočavamo i dodatne relaksacijske mehanizme za koje pretpostavljamo da potječu od elektron-elektron spinske dipolarne interakcije između različitih radikala u uzorku. Dobiveni eksperimentalni podaci predstavljaju osnovu za daljnja teorijska razmatranja modela molekulske dinamike u neuređenom materijalu jer poznavanje dinamičkih svojstava nuklearnih spinova (NSD) koja detektiramo putem hiperfine interakcije direktno odražavaju dinamička svojstva promatranog materijala.

1. J. Jurec, B. Rakvin, M. Jokić, M. Kveder, *J. Non-Cryst. Solids* **471** (2017) 435-438.

**U-K1: HALOGENSKA VEZA U KOKRISTALIMA KOJI SADRŽE  $\text{CoCl}_2\text{L}_2$  METALOORGANSKE JEDINICE**

Katarina Lisac, Dominik Cinčić

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

Sinteza višekomponentnih spojeva koji sadrže metaloorganske jedinice atraktivna je tema istraživanja u kristalnom inženjerstvu zbog mogućnosti uvođenja novih magnetskih, optičkih i električnih svojstava. [1] U ovom radu odabrani su  $\text{CoCl}_2\text{L}_2$  kompleksi (L = 1,10 fenantrolin, **phen**, ili 2,2' bipiridin, **bpy**) u ulozi akceptora halogenske veze [2] te je pokazan njihov potencijal kao dobrih građevnih blokova za sintezu višekomponentnih materijala metodama mljevenja uz prisutnost male količine kapljevine i tradicionalne sinteze iz otopine [3]. Za pripremu kokristala izabrani su često korišteni, komercijalni perfluorirani donori halogenske veze: jodpentafluorbenzen (**ipfb**), 1,4-dijodtetrafluorbenzen (**14tfib**), 1,3-dijodtetrafluorbenzen (**13tfib**), 1,2-dijodtetrafluorbenzen (**12tfib**), 1,1,2,2,3,3,4,4-oktafluor-1,4-dijodbutan (**ofib**) i 1,3,5-trifluor-2,4,6-trijodbenzen (**135tfib**). Difrakcijom rentgenskih zraka na jediničnom kristalu određene su kristalne i molekulske strukture svih 12 kokristala. Strukturnom analizom kokristala utvrđena je različita supramolekulska arhitektura u kojoj dominiraju halogenske veze  $\text{Cl}\cdots\text{I}$  između atoma joda koji pripada donoru halogenske veze i kloridnog liganda na metalnom kompleksu, a čije udaljenosti variraju između 3,088 i 3,471 Å. Arhitekturu vođenu halogenskim vezama koja se pojavljuje u kokristalima možemo podijeliti na diskretne molekulske komplekse (0D), lance (1D), dvo- i tro-dimenzijske mreže (2D i 3D). Diskretne komplekse s metalnim kompleksima očekivano tvori monotopični donor **ipfb** te ditopični donor **12tfib**. Lanci povezani halogenskom vezom formirani su u kokristalima ditopičnih donora (**14tfib**, **13tfib**, **ofib**) kao i tritopičnog donora **135tfib**. 2D i 3D mreže formiraju se jedino ukoliko se koriste ditopični donori halogenske veze **13tfib** i **ofib**. U svim kokristalima donori i akceptori povezani halogenskom vezom dalje se povezuju  $\text{C-H}\cdots\text{F}$ ,  $\text{C-H}\cdots\text{Cl}$ ,  $\text{C-H}\cdots\text{C}$ ,  $\text{C-H}\cdots\text{I}$ ,  $\text{C-F}\cdots\text{C}$ ,  $\text{I}\cdots\text{C}$  ili  $\text{I}\cdots\text{I}$  kontaktima. Također je ispitana termička stabilnost pripremljenih kokristala te je utvrđeno da kokristali s **12tfib**, **13tfib**, **14tfib** i **135tfib** raspadaju u temperaturnom intervalu između 220–260 °C, a kokristali s **ipfb** i **ofib** u intervalu između 170–200 °C. Zanimljiva je uočena sličnost u temperaturi raspada s obzirom na razliku u supramolekulskoj arhitekturi halogenske veze u kokristalima i značajnoj razlici u talištima čistih donora halogenske veze.

1. R. Bertani, P. Sgarbossa, A. Venzo, F. Lelj, M. Amati, G. Resnati, T. Pilati, P. Metrangolo i G. Terraneo, *Coord. Chem. Rev.* **254** (2010) 677-695.
2. G. Cavallo, P. Metrangolo, R. Milani, T. Pilati, A. Priimagi, G. Resnati i G. Terraneo, *Chem. Rev.* **116** (2016) 2478-2602.
3. K. Lisac i D. Cinčić, *CrystEngComm* **20** (2018) 5955-5963.

**U-K2: MEĐUPOVRŠINSKI SLOJ VODE UZ POVRŠINU METALNIH OKSIDA I INERTNIH MATERIJALA**Antun Barišić<sup>1</sup>, Zlatko Brkljača<sup>2</sup>, Tajana Preočanin<sup>1</sup><sup>1</sup> *Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Horvatovac 102a, Zagreb*<sup>2</sup> *Laboratorij za kemiju u modelnim biološkim sustavima, Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, Zagreb*

Međupovršinski sloj vode nastaje kao posljedica električkog nabijanja površine, distribucije potencijal-odredbenih iona i protuiona te reorijentacije molekula vode uz površinu čvrstih čestica. Mehanizam nastajanja međupovršinskog sloja opisuje se fizikalnim modelima koji pretpostavljaju nastajanje slojeva definiranih površinskim potencijalom i gustoćom naboja. [1]

Metalni oksidi posjeduju amfoterne površinske skupine koje se električki nabijaju u dodiru s vodenom otopinom elektrolita. Iznos i predznak površinskog naboja ovisi o pH vrijednosti vodene otopine. pH vrijednost pri kojoj je ukupna gustoća površinskog naboja nula naziva se točkom nul-naboja ( $\text{pH}_{\text{pzc}}$ ). Kod većine jednostavnih metalnih oksida  $\text{pH}_{\text{pzc}}$  se nalazi u intervalu pH vrijednosti od 6 do 10. [2]

Iz temperaturne ovisnosti  $pH_{pzc}$  određuju se termodinamički parametri procesa nabijanja površinskih skupina metalnih oksida. Reakcija protoniranja površinskih skupina metalnih oksida egzoterman je proces. [3]

Cilj ovog istraživanja bio je odrediti termodinamiku procesa nabijanja međupovršinskog sloja vode na površini različitih inertnih materijala (politetrafluoretilena (PTFE), dijamanta i grafita). Inertne površine za razliku od metalnih oksida ne posjeduju površinske skupine koje kemijski reagiraju s vodenom otopinom elektrolita. Do nabijanja međupovršinskog sloja dolazi zbog akumulacije hidronijevih i hidroksidnih iona uz površinu čestice [4]. Istraživanje je provedeno korištenjem potenciometrijskih masenih titracija kako bi se odredio  $pH_{pzc}$  pri različitim temperaturama. Iz izračunatih termodinamičkih parametara nađeno je da se akumulacija hidronijevih iona uz inertne površine odvija endotermnim putem.

U sklopu istraživanja također su provedene računalne simulacije molekulske dinamike vodene otopine elektrolita uz površinu  $SiO_2$  i dijamanta. Uspoređen je međupovršinski sloj vode uz površinu metalnih oksida i inertnih materijala na mikroskopskoj razini.

1. J. Lützenkirchen, T. Preočanin, N. Kallay, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **10** (2008) 4946-4955.
2. M. Kosmulski, *Surface charging and points of zero charge*, CRC Press, Boca Raton, 2009.
3. M. A. Blesa, A. J. G. Maroto, A. E. Regazzoni, *J. Colloid Interface Sci.* **140** (1990) 287-290
4. N. Kallay, F. Šupljika, T. Preočanin, *Adsorption* **19** (2013) 211-216.

### **U-K3: MEHANIZAM MODELNE REAKCIJE AMINOKISELINE I REAKTIVNOG ALDEHIDA U RAZLIČITIM OTAPALIMA**

Sanja Škulj, Katarina Vazdar, Davor Margetić, Mario Vazdar

*Zavod za organsku kemiju i biokemiju, Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, Zagreb*

„Curenje elektrona“ u elektron transportnom lancu glavni je uzrok nastanka mitohondrijskih superoksida koji su primarna reaktivna vrsta kisika (ROS) čija povećana koncentracija može štetno djelovati na ukupnu održivost stanica. Nemogućnost njihove eliminacije antioksidativnim obrambenim mehanizmom uzrokuje nagomilavanje ove vrste čija posljedica je oksidativni stres. ROS mogu reagirati sa svim makromolekulama od kojih su lipidi najosjetljiviji i iz kojih lipidnom peroksidacijom polinezasićenih masnih kiselina lipida i slobodnih radikala nastaju oksidacijski produkti, reaktivni aldehidi (RA). Najčešći RA je 4-hidroksi-2-nonenal (HNE) koji je u usporedbi sa slobodnim radikalima stabilniji te lako može doprijeti i reagirati s aminokiselinama iz proteina, membranskim lipidima i DNA mijenjajući im pri tome funkciju i stabilnost. [1]

Ove reakcije su dosta ispitivane te ovisno o uvjetima i otapalu nastaju različiti adukti. [2] Zbog toga smo proveli eksperimentalne i kvantnokemijske (QM) račune za modelnu reakciju HNE-a i aminokiseline lizina u dva različita otapala, aprotičnom diklormetanu te protičnom acetonitrilu s raznim udjelima vode. Na taj način smo pokazali utjecaj otapala i utjecaj količine vode na nastajanje različitih produkata što je analogno uvjetima u hidrofobnoj unutrašnjosti membrane i hidrofilnom vodenom sloju. U nevodenom mediju acetonitrilu i diklormetanu glavni produkt je nepolarni pirolni adukt dok se povećanjem koncentracije vode udio pirolnog adukta smanjuje te nastaju novi produkti, od kojih su najzastupljeniji Michaelov i piridinski adukt. Eksperimentalne rezultate i stabilnost nastalih produkata potvrdili smo QM računima. Rezultati također pokazuju značajno smanjenje barijere u dijelovima mehanizma koji u prijelaznim stanjima imaju prijenos protona uz pomoć molekule vode.

Predloženi modelni sustav opisuje jednostavne modelne reakcije koje simuliraju uvjete oksidativnog stresa u fosfolipidnom dvosloju te je temelj za daljnja složenija istraživanja svojstava modificiranih fosfolipidnih membrana.

1. F. Guéraud, M. Atalay, N. Bresgen, A. Cipak, P. M. Eckl, L. Huc, I. Jouanin, W. Siems, K. Uchida, *Free Radic. Res.* **44** (2010) 1098–1124.
2. K. Vazdar, D. Vojta, D. Margetić, M. Vazdar, *Chem. Res. Toxicol.* **30** (2017) 840–850.



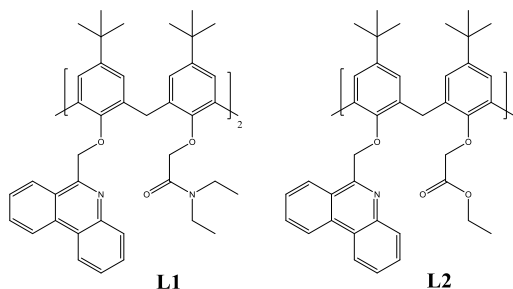
3. S. Škulj, K. Vazdar, D. Margetić, M. Vazdar, *J. Org. Chem.* doi: 10.1021/acs.joc.8b02231, prihvaćen za objavljivanje.

#### U-K4: DIZAJN, PRIPRAVA I KOMPLEKSACIJSKA SVOJSTVA KALIKS[4]ARENA S FENANTRIDINSKIM PODJEDINICAMA

Katarina Leko, Andrea Usenik, Nikola Cindro, Matija Modrušan, Vladislav Tomišić

Zavod za fizikalnu kemiju, Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Horvatovac 102a, Zagreb

Kaliksareni su makrociklički oligomeri koji se sastoje od fenolnih podjedinica povezanih metilenskim skupinama u *ortho*-položaju fenola. Mogućnosti njihove funkcionalizacije čine ovu klasu spojeva zanimljivim molekulama domaćinima za razne neutralne i nabijene goste. Derivati kaliksarena koji posjeduju karbonilne funkcionalne skupine na donjem i/ili gornjem obodu pokazuju velik afinitet za vezanje kationa. Uvođenjem fluorescentnih supstituenata u strukturu kaliksarena moguće je prirediti visokoosjetljive senzore za niz kemijskih vrsta. [1-4] U ovom radu sintetizirani su derivati kaliks[4]arena **L1** i **L2** (slika 1) koji uz "klasična" amidna i esterska vezna mjesta imaju fluoroforne fenantridinske podjedinice na donjem kaliksarenskom obodu.



Slika 1. Strukture fenantridinskih derivata kaliks[4]arena.

Spektrofotometrijskim, fluorimetrijskim i kalorimetrijskim titracijama istražene su njihove reakcije kompleksiranja s kationima alkalijskih metala i lantanida u više organskih otapala (acetonitril, metanol, etanol, *N,N*-dimetilformamid, dimetilsulfoksid). Određene su konstante stabilnosti kompleksa te pripadne standardne reakcijske entalpije i entropije. Također je istražen utjecaj vezanja kationa na intezitet fluorescencije kaliksarenskih receptora, a time i njihova potencijalna primjena kao fluorescentnih senzora za katione metala.

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.
4. N. Bregović, N. Cindro, L. Frkanec, V. Tomišić, *Supramol. Chem.* **28** (2016) 608–615.

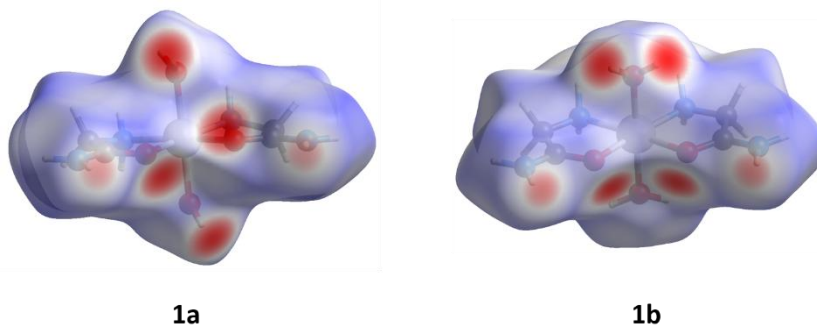
**U-K5: POLIMORFIJA U KOMPLEKSIMA NIKLA(II) S GLICINAMIDOM**

Darko Vušak, Inka Kirasić, Biserka Prugovečki, Dubravka Matković-Čalogović

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

Kompleksni spojevi prijelaznih metala i aminokiselina te njihovih amida istražuju se radi njihovih zanimljivih bioloških svojstava te u kristalnom inženjeringu. Navedeni spojevi imaju također potencijalnu primjenu u adsorpciji otapala, enantioselektivnoj sintezi, katalizi. [1,2] Glicinamid je najjednostavniji amid aminokiselina, a zanimljivo je da je u čvrstom stanju strukturno karakterizirano svega nekoliko metalnih kompleksa s glicinamidom. U CSD bazi (engl. *Cambridge Structural Database*) objavljeno je tek pet struktura metalnih kompleksa s glicinamidom (metali su Mn/Cr, Ru, Rh i Ir). [3]

U ovom istraživanju priređena su dva nova kompleksa nikla(II) s glicinamidom (glyam) te im je određena molekulska i kristalna struktura – dva polimorfa  $[\text{Ni}(\text{H}_2\text{O})_2(\text{glyam})_2]_2$  (**1a** i **1b**) i  $(\text{NH}_4)\{\text{K}[\text{Ni}(\text{glyam})_3]_3\} \cdot \text{H}_2\text{O}$  (**2**). Polimorfni prijelaz u kompleksu **1** odvija se snižavanjem temperature do 210 – 215 K pri čemu **1b**, koji kristalizira u rompskom sustavu (prostorna grupa *Pnma*), prelazi u kompleks **1a**, koji kristalizira u monoklinskom sustavu (prostorna grupa *P2<sub>1</sub>/c*). Promjena u načinu povezivanja vodikovim vezama prikazana je na slici 1. Kompleks **2** kristalizira u trigonskom sustavu (prostorna grupa *P3<sub>1</sub>/c*). Tri molekule glicinamida koordinirane su na niklov(II) ion kao *N,O*-kelat, a karbonilni kisikovi atomi premošćuju Ni(II) i K<sup>+</sup> ione. Istraživanje je financirano sredstvima Hrvatske zaklade za znanost, projekt br. IP-2014-09-4274.



Slika 1. Hirshfeldove površine kompleksa **1a** i **1b** mapirane preko  $d_{\text{norm}}$  u rasponu od  $-0.6050$  do  $1.7042$ .

1. D. L. Stone, D. K. Smith *Polyhedron* **23** (2004) 1709–1717.
2. D. Vušak, B. Prugovečki, D. Milić, M. Marković, I. Petković, M. Kralj, D. Matković-Čalogović, *Cryst. Growth Des.* **17** (2017) 6049–6061.
3. C. R. Groom, I. J. Bruno, M. P. Lightfoot, S. C. Ward, *Acta Cryst.* **B72** (2016) 171–179.

**U-K6: IREVERZIBILNA INHIBICIJA ENZIMA MONOAMINOOKSIDAZE B: RAČUNALNI UVID**

Tana Tandarić, Robert Vianello

*Grupa za računalnu organsku kemiju i biokemiju, Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, Zagreb*

Monoaminooksidaze su flavoenzimi sisavaca odgovorni za regulaciju razina aminokiselinskih neurotransmitera. Ovi enzimi predstavljaju glavni farmakološki cilj u liječenju depresije i neurodegenerativnih bolesti. Dvije izoforme ovog enzima su prisutne u ljudskom tijelu, MAO A i MAO B, koje dijele oko 70% identičnih aminokiselina u primarnoj sekvenci, ali pokazuju značajne razlike u selektivnosti prema supstratima, a posebno u specifičnosti prema inhibitorima. [1] Fokus ovog rada su komercijalni, selektivni ireverzibilni inhibitori MAO B, selegilin i razagilin, kao i njihovi glavni metaboliti. Oba inhibitora tvore kovalentnu vezu s organskim kofaktorom flavin adenin dinukleotidom (FAD) i na taj način sprječavaju daljnju katalitičku aktivnost MAO B enzima.

U ovom radu koristili smo simulacije molekularne dinamike (MD) za dobivanje uvida u interakcije MAO B s oba inhibitora i metabolitima u aktivnom mjestu enzima. Hidrofobne interakcije s Gln206 i četiri tirozina u aktivnom mjestu enzima okarakterizirane su kao odgovorne za vezanje, dok potencijal stvaranja vodikovih veza predstavlja faktor koji doprinosi lošijem vezanju. Rezultati pokazuju da se selegilin bolje veže od rasagilina što je u skladu s eksperimentalnim  $IC_{50}$  vrijednostima. [2] Tercijarni amini pokazuju značajno veće vrijednosti  $\Delta G_{\text{BIND}}$  vezanja u odnosu na sekundarne što ukazuje na važnost metilne skupine na dušikovom atomu u kreiranju potentnijih supstanci.

Kvantno-kemijska analiza unutar klaster modela enzima sugerira potpuno novi kemijski mehanizam MAO inhibicije kroz reakciju u 3 koraka, pri čemu prvi korak određuje ukupnu brzinu reakcije u kojoj FAD cijepa hidridni ion iz  $\alpha$ -metilenske skupine supstrata u potpunoj analogiji s MAO katalitičkim mehanizmom. [3] Dobiveni reakcijski profili i konačna struktura inhibiranog enzima izvrsno se slažu s eksperimentalnim podacima.

Ostvareni uvid omogućio nam je prijedlog kemijske modifikacije razagilina u smislu povećanja njegove inhibitorne efikasnosti. Dobiveni rezultati nude nove smjernice u razvoju novih klasa efikasnijih i učinkovitijih MAO B inhibitora za kliničku upotrebu, što je od iznimne važnosti i hitnosti u kontekstu rastuće prevalencije bolesti mozga.

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. R. Vianello, C. Domene, J. Mavri, *Front. Neurosci.* **10** (2016) 327–351.

## U-K7: METODOLOGIJA LC-SPE-NMR – PRIMJENA U ANALIZI BIOAKTIVNIH MOLEKULA I LIJEKOVA

Iva Habinovec, Predrag Novak

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

Tehnika LC-SPE-NMR predstavlja suvremen spregnuti analitički sustav koji u posljednjih dvadeset godina sve više pronalazi svoju primjenu u analizi farmaceutika, metabolita, prirodnih spojeva, razgradnih produkata te onečišćenja. [1] Sprega tekućinske kromatografije (engl. *Liquid Chromatography*, LC) s ekstrakcijom na čvrstoj fazi (engl. *Solid-Phase Extraction*, SPE) omogućuje učinkovito odjeljivanje komponenata smjese na kromatografskoj koloni, zatim izdvajanje i ukoncentriravanje svakog pojedinog analita na SPE-nosaču (engl. *SPE-cartridge*), nakon čega slijedi identifikacija i određivanje strukture izdvojenog spoja spektroskopijom NMR. Prednosti ove tehnike su brojne. Zbog kvantitativnog obogaćivanja analita na SPE-nosaču, koje se postiže jednostrukim (engl. *single-trapping*) ili višestrukim (engl. *multi-trapping*) izdvajanjem analita na pojedini SPE-nosač, veća je osjetljivost mjerenja krio probom NMR. [2] S obzirom da se u kromatografskom odjeljivanju mogu koristiti nedeuterirana otapala, analiza je jeftinija, osjetljivija i učinkovitija u odnosu na tehniku LC-NMR. Sušenjem SPE-nosača u struji dušika uklanja se većina otapala iz kromatografske analize pa su signali otapala u spektru NMR reducirani. Cilj je ovog istraživanja razviti metodologiju *on-line* LC-SPE krio NMR koja će omogućiti praćenje kemijskih reakcija [3] te određivanje strukture nusprodukata i/ili onečišćenja koja nastaju u sintezi aktivnih farmaceutskih pripravaka [4] (engl. *Active Pharmaceutical Ingredient*, API) i novih derivata makrolida. [5] U ovom izlaganju bit će prikazana uspješna primjena metodologije LC-SPE-NMR u analizi onečišćenja 7-etilriptofola, polaznog spoja u sintezi nesteroidnog protuupalnog lijeka etodolaka, te za praćenje sinteze makrozona - novih bioaktivnih konjugata azitromicina.

1. S. Singh, T. Handa, M. Narayanam, A. Sahu, M. Junwal, R. P. Shah, *J. Pharm. Biomed. Anal.* **69** (2012) 148-173.
2. M. Godejohann, Li-Hong Tseng, U. Braumann, J. Fuchser, M. Spraul, *J. Chromatogr. A* **1058** (2004) 191-196.
3. I. Habinovec, T. Jednačak, P. Novak, *ADMET & DMPK* **3** (2015) 352-358.

4. M. Harča, I. Habinovec, E. Meštrović, I. Biljan and P. Novak, *Croat. Chem. Acta* **89** (2016) 543-547.

5. M. Bukvić Krajačić, M. Dumić, P. Novak, M. Cindrić, S. Koštrun, A. Fajdetić, S. Alihodžić, K. Brajša, and N. Kujundžić, *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **21** (2011) 853 - 856.

## U-K8: MOLEKULSKO SAMOUDRUŽIVANJE I PRIJEPIS STRUKTURE SUPRAMOLEKULSKIH GELOVA U POLIMERE AMINOKISELINSKIH AMIDNIH DERIVATA FUMARNE KISELINE

Tomislav Gregorić, Janja Makarević, Leo Frkanec

Laboratoriji za supramolekularnu kemiju, Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, Zagreb

Među glavnim izazovima u supramolekularnoj kemiji je sinteza novih materijala koji imaju poboljšana svojstva za različite primjene u medicinskoj znanosti, razvoj novih biomaterijala, senzora i mnogih drugih[1]. Supramolekularna kemija pokazala je interes za sintezu novih materijala jer pruža širok spektar mogućnosti za stvaranje novih materijala kao samoorganizirane nanomaterijale koristeći nekovalentne interakcije kao što su vodikove veze,  $\pi$ - $\pi$  slaganje ili Van der Waalove sile. Istraživali smo sintezu novih polimera[2]. U tu svrhu razvijeni su novi derivati aminokiselinskih vinil-estera fumarne kiseline. Novi sintetizirani spojevi su novi supramolekularni gelatori male molekularne težine. Ovi spojevi mogu stvarati gelove s različitim organskim otapalima. Ispitali smo mogućnost polimerizaciju induciranu UV zrakama i gama zrakama u samoorganiziranim gelovima. Reakcija polimerizacije se odvijala u različitim organskim gelovima. Pokazali smo da male promjene u strukturi spoja uzrokuju specifičnu samoorganizaciju kroz nekovalentne interakcije koje djeluju na reaktivnost umreženih molekula. Rezultirajuće gelske samoorganizacije u različitim otapalima karakterizirani su s  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ , NMR i FTIR spektroskopijom ovisna o temperaturi. Morfologiju gelske mreže i polimera određene su TEM, SEM i AFM mikroskopijom.

1. E. Busseron, Y. Ruff, E. Moulin, N. Giuseppone, *Nanoscale* **5** (2013) 7098–7140.

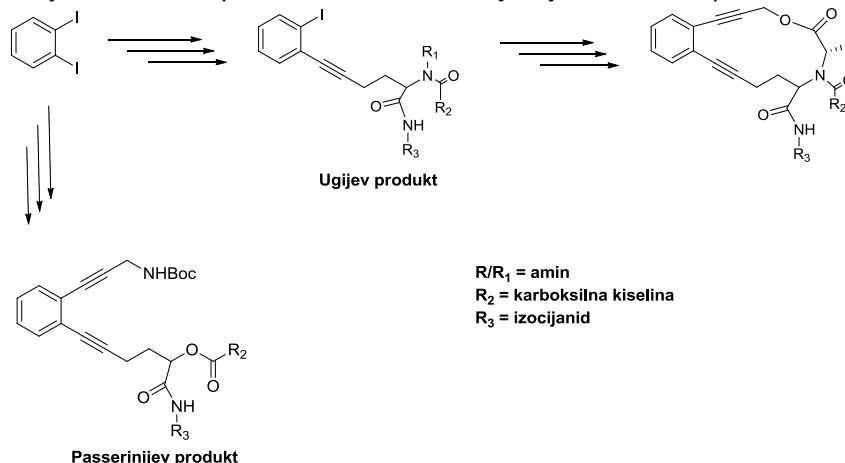
2. D. J. Cornwell and D. K. Smith, *Mater. Horiz.* **2** (2015) 279–293.

## U-K9: VIŠEKOMPONENTNE REAKCIJE. SINTEZA MAKROCIKLIČKIH SPOJEVA

Mladena Glavaš, Matija Gredičak, Ivanka Jerić

Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, Zagreb

Vrlo značajno područje organske sinteze su reakcije koje se odvijaju u jednom koraku. Takve reakcije nazivaju se višekomponentne reakcije i omogućavaju nastanak jednog produkta iz tri ili više početnih materijala. Ovakvim pristupom omogućena je priprava velikog broja strukturno različitih spojeva iz jednostavnih polaznih materijala. Višekomponentne reakcije koje uključuju izocijanidnu komponentu (Passerinijeva i Ugijeva reakcija) su vrlo važne, jer omogućavaju sintezu peptidomimetika. Passerinijeva reakcija je trikomponentna reakcija koja uključuje karbonilnu, karboksilnu i izocijanidnu komponentu, dok je Ugijeva reakcija četverekomponentna i dodatno uključuje amino komponentu.<sup>1</sup>



Spojevi s endiinskim strukturnim motivom izolirani su krajem 20-tog stoljeća iz mikroorganizama te su pokazali antitumorsku aktivnost. [2] Kasnije je otkriveno kako se takvi spojevi mogu koristiti u asimetričnim reakcijama hidrogeniranja [3] te kompleksiranju metala. [4]

Naš cilj bio je provođenje višekomponentnih reakcija (Passerinijeva i Ugijeva reakcija) polazeći od jednostavne molekule 1,2-dijodobenzena. [5] Makrociklički spojevi s endiinskim motivom pripremljeni su iz Ugijevih produkata dvjema uzastopnim reakcijama, Sonogashirina reakcija/intramolekulska esterifikacija.

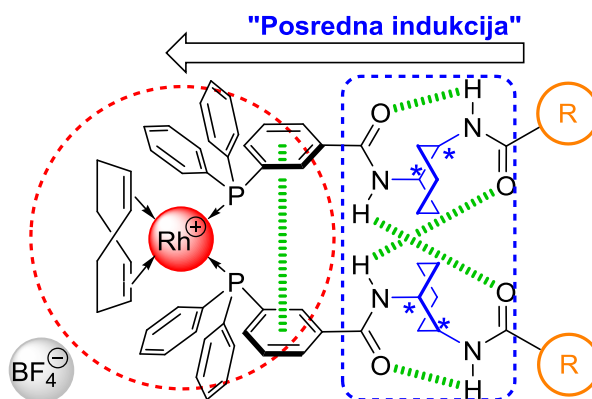
1. G. Koopmanschap, E. Ruijter, R. V. A. Orru, *Beilstein J. Org. Chem.* **10** (2014) 544-598.
2. K. C. Nicolaou, W. - M. Dai, *Angew. Chem. Int. Ed.* **30** (1991) 1387-1530.
3. Z. Kokan, Z. Glasovac, M. Majerić Elenkov, M. Gredičak, I. Jerić, S. I. Kirin, *Organometallics* **33** (2015) 4005-4015.
4. M. Gredičak, N. Bregović, D. Carić, I. Jerić, *J. Inorg. Biochem.* **116** (2012) 45-52.
5. M. Glavaš, M. Gredičak, I. Jerić, *ACS Comb. Sci.* **20** (2018) 151-155.

## U-K10: METALNI KOMPLEKSI KONJUGATA TRIFENILFOSFINA I KIRALNIH AMIDA: PRIPRAVA, KARAKTERIZACIJA I PRIMJENA U STEREOSELEKTIVNOJ SINTEZI

Saša Opačak, Zoran Kokan, Zoran Glasovac, Berislav Perić, Srećko I. Kirin

Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, Zagreb

Enantioselektivna kataliza je od ključne važnosti u sintezi kiralnih spojeva u znanstvene i industrijske svrhe. Kao katalizatori se najčešće koriste kompleksi kiralnih organskih liganada i prijelaznih metala. [1] U reakcijama enantioselektivnog hidrogeniranja prijelazni je metal najčešće rodij, a uobičajeni ligandi su fosfini. [2] U sklopu naših istraživanja sintetiziran je 21 novi kiralni monodentatni ligand za primjenu u reakcijama enantioselektivnog hidrogeniranja. Ligandi se sastoje od tri građevna bloka: trifenilfosfinskog veznog mjesta za metal, kiralnog cikličkog diamina i pomoćnog supstituenta za modulaciju steričkih i elektronskih svojstava. Pripremljeni su i spektroskopskim metodama (NMR, IR, UV-Vis, CD) te DFT računima karakterizirani predkatalitički Rh(I) kompleksi navedenih liganada te njihovi izostrukturalni modelni Pt(II) kompleksi. Ključna obilježja ovih katalizatora su prokiralna koordinacijska sfera metala, kod koje se kiralnost prisutna u udaljenom dijelu molekule prenosi do metala putem nekovalentnih interakcija, tzv. principom posredne indukcije (engl. *backdoor induction*). [3] Rodijevi kompleksi sintetiziranih liganada primjenjeni su u reakcijama enantioselektivnog hidrogeniranja  $\alpha,\beta$ -nezasićenih aminokiselina s izvrsnim prinosima i visokom selektivnošću (do 97%). [4]



1. V. Caprio, J. M. Williams, *Catalysis in Asymmetric Synthesis*, 2nd ed., John Wiley and Sons, Padstow, 2009.
2. M. Cettolin, P. Puylaert, J. G. de Vries, *Rhodium-Catalysed Hydrogenations Using Monodentate Ligands*, u C. Claver (ur.), *Rhodium Catalysis. Topics in Organometallic Chemistry*, Springer, Cham, 2017, str. 231.
3. Z. Kokan and S. I. Kirin, *RSC Adv.* **2** (2012) 5729.
4. S. Opačak, Z. Kokan, Z. Glasovac, B. Perić, S. I. Kirin, *Eur. J. Org. Chem.* (2019) u tisku, doi: 10.1002/ejoc.201801647.

**U-B1: UTJECAJ SPOLNIH HORMONA NA N-GLIKOZILACIJU IMUNOGLOBULINA G U ŽENA**

Julija Jurić<sup>1</sup>, Hongli Peng<sup>2,3</sup>, Manshu Song<sup>2,3</sup>, Frano Vučković<sup>1</sup>, Jelena Šimunović<sup>1</sup>, Irena Trbojević-Akmačić<sup>1</sup>, Feifei Zhao<sup>2,3</sup>, Youxin Wang<sup>2,3</sup>, Jiaonan Liu<sup>2,3</sup>, Qing Gao<sup>2,3</sup>, Hao Wang<sup>2,3</sup>, Marija Pezer<sup>1</sup>, Wei Wang<sup>2,3</sup>, Gordan Lauc<sup>1,4</sup>

<sup>1</sup>Znanstveni centar izvrsnosti za personaliziranu brigu o zdravlju, Istraživanje u glikoznanosti - Genos d.o.o., BICRO BIOCentar, Borongajska cesta 83H, Zagreb

<sup>2</sup>Škola javnog zdravstva, Glavno medicinsko sveučilište (CMU), Fengtai 100054, Peking, Kina

<sup>3</sup>Glavni područni laboratorij za kliničku epidemiologiju u Pekingu, Glavno medicinsko sveučilište (CMU), Peking 100069, Kina

<sup>4</sup>Zavod za biokemiju i molekularnu biologiju, Farmaceutsko-biokemijski fakultet, Sveučilište u Zagrebu, A. Kovačića 1, Zagreb

Imunoglobulin G (IgG) se smatra jednim od glavnih modulatora imunog odgovora u našem tijelu. Važnu ulogu u tom procesu imaju na njega kovalentno vezani oligosaharidni lanci, glikani, koji omogućavaju pokretanje imunog odgovora najčešće putem interakcija s Fcγ receptorima na imunološkim efektorskim stanicama, ili pak aktivacijom C1q komponenti komplementa. Poznato je da se glikozilacija imunoglobulina G (IgG) mijenja tijekom tumorskih, autoimunih i upalnih bolesti, ali i pod utjecajem različitih fizioloških čimbenika, kao što su dob i spol. Prema dosadašnjim istraživanjima postoje naznake da spolni hormoni, naročito estrogen, imaju utjecaj na promjenu N-glikozilacije IgG. Kako bi se utvrdilo postoji li povezanost između fiziološke promjene razine spolnih hormona estrogena, progesterona i testosterona i N-glikozilacije IgG, ova studija pratit će N-glikoprotin IgG u više vremenskih točaka tijekom menstrualnih ciklusa u 70 zdravih žena reproduktivne dobi. Iz periferne krvi centrifugiranjem će se izdvojiti plazma iz koje će se izolirati IgG afinitetnom kromatografijom pomoću proteina G. Za analizu N-glikana IgG koristit će se visokoprotlačna metoda tekućinske kromatografije ultravisoke učinkovitosti s hidrofilnim interakcijama (HILIC-UPLC). Dobivene informacije omogućile bi razlikovanje patoloških od normalnih hormonalno uvjetovanih promjena u N-glikozilaciji IgG čime bismo dobili bolji uvid u mehanizam bolesti i utjecaj bolesti na imunološki sustav žena. Osim toga, postoji potencijal da ovo istraživanje osigura znatno veće znanstvene doprinose, posebno u vidu razvoja glikana kao biomarkera biološke dobi i raznih bolesti, jer bi moglo omogućiti određivanje optimalne faze menstrualnog ciklusa za uzorkovanje u svrhu dijagnoze bolesti i planiranja znanstvenih te epidemioloških studija koje uključuju žene reproduktivne dobi.

**U-B2: KARBAPENEM-REZISTENTNE BAKTERIJE U RIJEČNOM EKOSUSTAVU**

Svjetlana Dekić<sup>1</sup>, Jasna Hrenović<sup>1</sup>, Snježana Kazazić<sup>2</sup>, Martina Šeruga Musić<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Biološki odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Rooseveltov trg 6, Zagreb

<sup>2</sup>Zavod za fizičku kemiju, Institut Ruđer Bošković, Bijenička 54, Zagreb

Karbapenemi su antibiotici koji se koriste kao zadnja linija obrane u liječenju infekcija uzrokovanih multiplo-rezistentnim bakterijama. Pojava bakterija rezistentnih na karbapeneme (CRB) u okolišu značajna je s javno-zdravstvenog aspekta. Cilj ovog rada bio je proučiti utjecaj ispusta otpadnih voda na bakterijsku populaciju u riječnom ekosustavu s naglaskom na klinički značajne CRB. Niz tokove rijeka Krapinica i Krapina uzorkovani su voda i sediment. CRB kultivirane su na selektivnoj podlozi CHROMagar Acinetobacter s dodatkom suplementa CR102 na 37 °C /72h i 42 °C /48h što omogućuje potencijalno razlikovanje bakterija s urođenom rezistencijom na karbapeneme (CRB37) i klinički značajnih bakterija sa stečenom rezistencijom na karbapeneme (CRB42). Ukupne heterotrofne bakterije izolirane su na hranjivom agaru (22 °C/72h), dok su crijevni enterokoki izolirani na Slanetz-Bartley (37 °C/72h) i potvrđeni na Bile esculin azide agaru (44 °C/4h). CRB42 pozitivno su korelirale s CRB37 i ukupnim heterotrofnim bakterijama, dok korelacija s crijevnim enterokokima nije bila statistički značajna što ukazuje da unos CRB42 u ekosustav nije nužno povezan s fekalnim zagađenjem. Ispust otpadnih voda iz centara za zdravlje ljudi i životinja doprinosi pojavi CRB42 u vodi i sedimentu riječnog ekosustava. Klinički značajni patogeni sa stečenom rezistencijom na karbapeneme *Acinetobacter baumannii* i

*Klebsiella pneumoniae* izolirani su samo iz riječne vode nakon ispusta otpadne vode bolnice. Nakon ispusta, CRB42 mogu se u vodi širiti nizvodno ili akumulirati u riječnom sedimentu. Rezultati upućuju na potrebu dezinfekcije bolničke vode prije ispuštanja u prirodni recipijent kako bi se spriječilo širenje patogena u okolišu.

### **U-B3: RAZVOJ I ŠIRENJE OTPORNOSTI NA MAKROLIDNE ANTIBIOTIKE U SEDIMENTU RIJEKE SAVE KOJI JE POD UTJECAJEM FARMACEUTSKIH OTPADNIH VODA**

Milena Milaković<sup>1</sup>, Gisle Vestergaard<sup>2</sup>, Juan Jose Gonzalez Plaza<sup>1</sup>, Ines Petrić<sup>1</sup>, Nikolina Udiković Kolić<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Institut Ruđer Bošković, Bijenička 54, Zagreb*

<sup>2</sup>*Helmholtz Zentrum Munchen, Ingolstadter Landstraße 1, D-58764 Neuherberg, Njemačka*

Otpadne vode farmaceutskih industrija se smatraju značajnim izvorima zagađenja okoliša antibioticima što povećava rizik za razvoj i širenje otpornosti bakterija na antibiotike i potencijalno ugrožava ljudsko zdravlje. Budući da su spoznaje o utjecaju farmaceutskog otpada na recipijentni okoliš još uvijek vrlo ograničene, cilj ovog rada je bio istražiti ulogu otpadnih voda lokalne industrije koja proizvodi azitromicin u razvoju i širenju bakterijske otpornosti na makrolidne antibiotike. Prikupljeni su uzorci industrijske otpadne vode i sedimenta rijeke Save uzvodno i nizvodno od ispusta tijekom zime 2016. godine. Kemijskom analizom je utvrđena povećana koncentracija makrolidnih antibiotika, teških metala i nutrijenata u sedimentima nizvodno od ispusta u odnosu na uzvodnu referentnu lokaciju. Nadalje, kvantitativnom lančanom reakcijom polimeraze (qPCR) su uočene značajno povišene koncentracije različitih gena odgovornih za otpornost na makrolide u sedimentima nizvodno od ispusta u odnosu na uzvodnu lokaciju. Pored toga, egzogenom izolacijom plazmida uočen je i povećani plazmidni prijenos gena za makrolidnu otpornost iz bakterija porijeklom iz zagađenih sedimenata u modelni patogen, *E. coli*. Dobiveni rezultati ukazuju da ispušt nedovoljno obrađenih otpadnih voda iz pogona za proizvodnju antibiotika dovodi do kemijskog i mikrobiološkog zagađenja recipijentnih voda što povećava rizik prijenosa otpornosti na makrolidne antibiotike iz okolišnih u kliničke rezervoare.

### **U-B4: IN VIVO I IN VITRO UČINAK ANTIEPILEPTIKA VALPROATA I FLAVONONA NARINGENINA NA ANTIOKSIDACIJSKI SUSTAV OBRANE U MOZGU, JETRI I BUBREGU**

David Jutrić<sup>1</sup>, Domagoj Đikić<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Klinička bolnica Dubrava, Avenija Gojka Šuška 6, Zagreb*

<sup>2</sup>*Biološki odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet Sveučilišta u Zagrebu, Rooseveltov trg 6, Zagreb*

Valproična kiselina (VPA) je kratkolančana masna kiselina, razgranatog lanca s antikonvulzivnim svojstvima. Valproat (VP) je natrijeva sol valproične i koristi za liječenje raznih tipove epilepsije, bipolarnog poremećaja i prevenciju migrene. *In vivo* istraživanja koja su se provodila na humanim staničnim linijama HepG2 su pokazala da tretman valproičnom kiselinom uzrokuje propuštanje ALT, AST i LDH u dozama koje uzrokuju oštećenje hepatocita. [1] Valproat u stanici može izazvati oksidacijski stres. On utječe na prijenos elektrona u antioksidacijskom lancu tako da se ili direktno veže na neku biološku komponentu lanca kao recimo SOD ili direktno preuzima elektron na sebe, te na te načine povećava ukupnu količinu nastalog ROS-a. Živčani sustav posebice mozak izrazito je osjetljiv na oksidacijski stres. Povezan je s metaboličkim promjenama poput smanjenja beta oksidacije masnih kiselina. Eksperimenti na humanim HepG2 staničnim linijama pokazali su da izloženost VPA više od 72 sata povećava razinu proizvodnje reaktivnih kisikovih vrsta u mitohondrijima jetrenih stanica, a smanjuje razinu mitohondrijske superoksid dismutaze SOD2, što ukazuje na oksidativni stres uzrokovan slabljenjem eliminacije mitohondrijskih reaktivnih kisikovih vrsta (ROS). [2] Valproat je također povezan sa 1.95 puta

višom incidencijom sindroma policističnih jajnika u žena koje koriste Valproat [3], a također je povezan sa ozljedama bubrežnih tubula u djece. [4] Nedavna istraživanja za cilj imaju ispitati može li primjena prirodnih biljnih antioksidansa, primjerice biljnih polifenola, zajedno sa terapijom valproatom, umanjiti njegove negativne učinke. Predstavljamo prve preliminarne rezultate dobivenih u sklopu doktorske disertacije koja istražuje združene učinke valproata i prirodnog biljnog polifenola flavonona naringenina na umanjene učinke oksidativnog stresa u tkivima mozga, bubrega i jetre.

1. Ji Q., Shi X., Lin R., Mao Y., Zhai X., Lin Q., Zhang J., *Toxicol. Vitro* **24** (2010) 1086-1091.
2. Komulainen T., Lodge T., Hinttala R., Bolszak M., Pietilä M., Koivunen P., Hakkola J., Poulton J., Mor K. J., Uusimaa J., *Toxicology* **331** (2015) 47-56.
3. Taubøll E., Gregoraszcuk E. L., Kołodziej A., Kajta M., Ropstad E., *Epilepsia* **44** (2003) 1014-1021.
4. Knights M. J., Finlay E., *Pediatr. Nephrol.* **29** (2014) 1131-1138.

## U-B5: MODULACIJA CRIJEVNOG MIKROBIOMA KVERCETINOM U ŠTAKORSKOMU MODELU ALZHEIMEROVE BOLESTI

Marina Kukolj<sup>1</sup>, Nada Oršolić<sup>2</sup>, Dyana Odeh<sup>2</sup>, Barbara Nikolić<sup>2</sup>, Lea Langer Horvat<sup>3</sup>, Goran Šimić<sup>3</sup>, Romana Gračan<sup>2</sup>, Ivana Zrinščak<sup>2</sup>, Tatjana Orct<sup>4</sup>, Branko Šoštarić<sup>5</sup>, Karmen Branović Čakanic<sup>5</sup>, Dunja Vlahović<sup>5</sup>, Jagoda Šušković<sup>6</sup>, Blaženka Kos<sup>6</sup>, Ksenija Uroić<sup>6</sup>, Jurica Žučko<sup>6</sup>, Andreja Leboš Pavunc<sup>6</sup>, Ivan Kosalec<sup>7</sup>, Svjetlana Terzić<sup>5</sup>, Maja Ledinski<sup>2</sup>, Anamarija Mojzeš<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Klinika za bolesti uha, nosa i grla i kirurgiju glave i vrata, KBC Zagreb, Kišpatićeva 12, Zagreb

<sup>2</sup>Biološki odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Rooseveltov trg 6, Zagreb

<sup>3</sup>Hrvatski institut za istraživanje mozga, Medicinski fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Šalata 12, Zagreb

<sup>4</sup>Institut za medicinska istraživanja i medicinu rada, Ksaverska cesta 2, Zagreb

<sup>5</sup>Hrvatski veterinarski institut, Savska cesta 143, Zagreb

<sup>6</sup>Prehrambeno-biotehnoški fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Pierottijeva 6, Zagreb

<sup>7</sup>Farmaceutsko-biokemijski fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Schrottova 39, Zagreb

Oksidativni stres (engl. *oxidative stress*, OS) jest primarni uzrok patogeneze upale, djelomičnih ishemija, metaboličkih i neurodegenerativnih bolesti. Poremećaju homeostatskih procesa u mozgu doprinosi i crijevni mikrobiom. Os crijeva-mozak (engl. *gut-brain axis*, GBA) sastoji se od dvosmjernog komuniciranja između središnjeg i enteričnog živčanog sustava, povezujući emocionalne i kognitivne centre u mozgu s perifernom funkcijom crijeva. Mehanizmi komunikacije su brojni i uključuju neuralne, humoralne i upalne putove, ovisno o domaćinu i okolišnim čimbenicima. Na ovaj kompleksni simbiotski međuodnos između probavnog sustava, crijevnog mikrobioma i mozga domaćina snažno utječe prehrana; optimalan odnos između prehrane i crijevnog mikrobioma može biti koristan za probavu hrane, unos hranjivih tvari, te zdravlje imunskog i živčanog sustava. Temeljem navedenog cilj rada jest istražiti strukturne i funkcionalne promjene crijevnog mikrobioma u štakorskom modelu Alzheimerove bolesti (engl. *Alzheimer disease*, AD); točnije utvrditi da li je neravnoteža i promjena mikrobioma crijeva povezana s AD i da li primjenom potencijalno funkcionalne hrane možemo modulirati crijevnu mikrobiotu te smanjiti posljedice OS koje vode neurodegenerativnim bolestima. Istraživanje je provedeno na muškom spolu visokorodnih štakora Y59, starih 3 mjeseca, koji su podijeljeni u 6 skupina (zdrava kontrolna skupina HC - 0,9% NaCl; AD - AlCl<sub>3</sub> 10 mg/kg i D-gal 60 mg/kg; AD + kvercetin 25 mg/kg (Qu<sub>25</sub>); AD + kvercetin 50 mg/kg (Qu<sub>50</sub>); Qu<sub>25</sub>; Qu<sub>50</sub>) svakodnevno obrađenih tijekom 28 dan intraperitonealnim (*ip*) injeciranjem navedenog. Sekvenciranjem V4 varijabilne regije 16S rRNA dobivena je sveobuhvatna slika crijevnog mikrobioma. Statistički najznačajnije promjene ( $P \leq 0,01$ ) vidljive su u porodica čija je zastupljenost u rasponu 0,1-1%, te u porodica čija je zastupljenost 1-10% ( $P \leq 0,05$ ). Dominantne porodice ne pokazuju statistički značajne ( $P \geq 0,05$ ) promjene. Daljnje analize su u tijeku. Istraživanje je financirano iz projekta: HRZZ-IP-2014-09-9730); Analiza crijevnog mikrobioma u štakorskom modelu Alzheimerove bolesti (2017., br. projekta: 20282313); Molekularni mehanizmi kafeinske kiseline na angiogenezu i supresiju rasta Ehrlichovog ascitesnog tumora (2016., br. projekt: 20281220).



**U-GG1: MEDIJSKA SLIKA „MIGRANTSKE KRIZE“ U GEOGRAFSKOM PROSTORU: PRIMJER HRVATSKE**

Tomislav Golubić

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

Tematika izbjeglica i migranata prisutna je i u hrvatskim akademskim krugovima [1], no geografska istraživanja o ovoj tematici su skromna. Nedostatak geografskih radova iz područja medijske geografije, i posebno njenog dijela koji se odnosi na istraživanje vijesti, temeljenih na istovremenom korištenju kvalitativnih i kvantitativnih metoda povezujući ih sa problematikom migrantske krize od 2015. do danas otvara prostor koji se želi ispuniti ovim radom. Glavni cilj doktorskog rada je istražiti u kojem odnosu se nalazi medijska slika migrantske (izbjegličke) tematike stvorena kroz relevantna internetska medijska izdanja u Hrvatskoj u razdoblju tijekom i nakon izbjegličke krize sa slikom odabranih aktera koji su bili u neposrednom iskustvu s migrantima, te utvrditi kakva je medijska slika izbjegličke krize stvorena u različitim hrvatskim regijama i tipovima područja (urbano/ruralno). Postoje li sličnosti i razlike u percepciji medijske slike s obzirom na udaljenost od migrantskih ruta i zašto?

„Medijska geografija“ i/ili „komunikacijska geografija“ nova je geografska poddisciplina proizašla iz humane geografije. Rezultat je geografskog interesa za pitanje kako različiti mediji poput filma, televizije, radija i interneta utječu na stvaranje i poimanje prostora, mjesta i odnosa u njima. Prema Adams i dr. [2] komunikacijska geografija sa svojim fokusom na medije funkcionira poput mosta koji nadilazi granice klasične geografije, te se spaja s komunikologijom. Unutar te nove poddiscipline važno mjesto zauzima i geografija vijesti koja se bavi prostornom analizom izvještavanja (npr. [3]).

Konačni cilj ovoga doktorata je vizualizirati medijske objave koristeći se GIS alatima kako bi se izradili kartografski prikazi migrantske krize u izabranim hrvatskim medijima, u cilju boljeg razumijevanja značaja regionalne pripadnosti i urbano-ruralne diferencijacije u percepciji migrantske krize.

1. J. Jurišić, L. Vesnić Alujević, D. Bonacci, *Stvaranje agendi: slučaj izbjegličke krize u hrvatskim medijima*. In: V. Car, M. Matović, eds. *Mediji, novinarstvo i ljudska prava*, Fakultet političkih znanosti Sveučilišta u Zagrebu. Hanns-Seidel-Stifung; Zagreb, 2017, 39-55.
2. P. C. Adams, J. Cupples, K. Glynn, A. Jansson, S. Moores, S., *Communications/Media/Geographies*, Taylor & Francis, New York, London, 2017.
3. M. Gasher, Mapping the Online News Worlds: A News-flow Study of Three U.S. Dailies, *Aether* 4 (2009) 102-116.

**U-GG2: MODEL INVENTARIZACIJE, VREDNOVANJA, UPRAVLJANJA I ZAŠTITE GEOBAŠTINE U REPUBLICI HRVATSKOJ**

Irina Žeger Pleše

*Hrvatska agencija za okoliš i prirodu, Radnička cesta 80, Zagreb*

Sagledavanje prirode kao nerazdvojive cjeline svih njezinih sastavnica, počelo se mijenjati u proteklih 25 godina. Do tada se očuvanje i zaštita prirode poistovjećivalo s očuvanjem vrsta i staništa pri tome zanemarujući georaznolikost. Takav princip doveo je do neučinkovite zaštite i neadekvatnog upravljanja područjima.

Pojmovi georaznolikosti i geobaštine koriste se od kraja 20. stoljeća i ubrzo su se proširili među znanstvenicima diljem svijeta. [1] Georaznolikost je definirana kao prirodna raznovrsnost geoloških (stijene, minerali, fosili), geomorfoloških (reljefni oblici, topografija i fizički procesi), hidroloških značajki te tla koja uključuje sveukupnost struktura, sustava te njihov doprinos krajobrazu [2], dok pojam geobaštine podrazumijeva najvrijednije dijelove nežive prirode (geološki, geomorfološki i pedološki važni lokaliteti i područja) iznimnog znanstvenog, edukativnog, kulturnog, civilizacijskog i estetskog značenja koje je potrebno sačuvati za buduće generacije. [3] Usprkos dugoj tradiciji geoloških i geomorfoloških istraživanja te zaštite geobaštine, u Hrvatskoj nije provedena sustavna inventarizacija i vrednovanje temeljeno na strogo određenim kriterijima i znanstvenim metodama koji predstavljaju važan korak k adekvatnoj zaštiti i upravljanju područjem. U sklopu Dokorskog studija geografije: prostor, regija, okoliš, pejzaž izraditi će se metodologija za inventarizaciju koja će omogućiti odabir geolokaliteta temeljem znanstvenih, edukacijskih i turističkih vrijednosti područja. Vrednovanjem lokaliteta kvalitativno-kuantitativnom metodom te kartografskim analizama pomoću GIS softvera odabrat će se reprezentativni geolokaliteti dok će se modelom za upravljanje omogućiti adekvatna zaštita i upravljanje kroz razrađene mjere i aktivnosti, ovisno o vrijednostima i posebnostima područja.

1. M. Gray, *Geodiversity: The Backbone of Geoheritage and Geoconservation*, u E. Reynard, J. Brilha, (ur): *Geoheritage: assessment, protection and Management*, Elsevier, 2017, 13-25
2. M. Gray, *Geodiversity: Valuing and Conserving Abiotic Nature*, 2nd ed., Wiley Blackwell, Chichester, 2013, 3-14.
3. N. Buzjak, *Georaznolikost i geobaština – pojam i značenje*, 5. hrvatski geografski kongres, Knjiga sažetaka, Hrvatsko geografsko društvo, Zagreb, 2011, 30.

**U-GL1: TEKTONIKA I GEOMORFOLOGIJA KOLOČEPSKOGA KANALA**

Dragana Šolaja<sup>1</sup>, Slobodan Miko<sup>1</sup>, George Papatheodorou<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Hrvatski geološki institut, Sachsova 2, Zagreb

<sup>2</sup>Laboratorij za marinsku geologiju i fizičku oceanografiju, Zavod za geologiju, Sveučilište u Patrasu, 26504 Rio, Patras, Grčka

Koločepski kanal je područje između obale i Elafitskog otočja u Dubrovačko-neretvanskoj županiji. Prema strukturnim klasifikacijama, područje se nalazi na dodirnoj zoni regionalnih strukturnih jedinica Jadranske mikro ploče i Vanjskih Dinarida. Kretanje mase Jadranske mikro ploče prema kopnu dovodi do njenog podvlačenja pod Vanjske Dinaride, što dovodi do boranja, rasjedanja i navlačenja, te akumulira energiju i dovodi do potresa. Broj i jakost potresa raste idući od SZ prema JI, tako da se najveći broj potresa kao i najjači potresi događaju na JI dijelu od Stona prema Dubrovniku do Albanije. [1] Na nastajanje reljefa bitan utjecaj imaju kompresijski tektonski pokreti i prevladavajući reversni pomaci naročito izraženi duž rasjeda vergencije JJZ. Glavni reversni rasjed na području je rasjed Mosor–Biokovo-Ploče-Dubrovnik-Bar s pravcem pružanja SZ-JI, koji ujedno čini i neposrednu granicu regionalnih strukturnih jedinica na površini. [2] Dokazi tektonske aktivnosti vidljivi su na seizmičkim profilima visoke razlučivosti. Na temelju snimljenih geofizičkih profila moguće je dobiti podatke o morfologiji i geološkim strukturama morskog dna. Intepretacijom profila vidljivo je da naslage unutar bazena koje su taložene tijekom kasnog pleistocena i holocena nemaju pomaka, tj. da su horizontalne te se može zaključiti da većina rasjeda u središnjem dijelu kanala nisu aktivni tijekom tog razdoblja. Suprotno tome na južnom dijelu kanala duž SI obale otoka Šipana vidljiv je aktivni rasjed koji je izdignuo holocenske naslage, te se upravo taj rasjed povezuje sa epicentrom najsnažnijeg potresa iz 1996. godine kod Stona.

1. V. Kuk, E. Prelogović, I. Dragičević, *Geol. Croat.* **53** (2000) 295-303.

2. R. Buljan, *Značenje strukturnog modela u razradi zahvata i zaštite podzemnih voda izvorišnog područja Omble kraj Dubrovnika*, Doktorski rad, Rudarsko-geološko-naftni fakultet, Sveučilište u Zagrebu, 1999, str. 154.

**U-GL2: DINAMIKA METALA U SEDIMENTIMA ESTUARIJA RIJEKE KRKE**

Nuša Cukrov<sup>1</sup>, Neven Cukrov<sup>1</sup>, Dario Omanović<sup>1</sup>, Cedric Gernier<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Zavod za istraživanje mora i okoliša, Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, Zagreb

<sup>2</sup>MIO, Université de Toulon, UMR7294, 83041 Toulon Cedex 9, Francuska

Ubrzani razvoj čovječanstva u posljednjih stotinjak godina negativno je utjecao na sve segmente okoliša, pa tako i vodne okoliše. Među onečišćivalima koja predstavljaju značajnu prijetnju za vodni okoliš svakako su toksični metali. Jednom kad dospiju u vodni okoliš, obično se veoma brzo adsorbiraju na anorganske i organske čestice, te se zajedno s njima talože u sediment. Međutim, brojna istraživanja su pokazala da sediment nije samo krajnje odredište onečišćivala, već može postati i njihov sekundarni izvor, zbog procesa kao što su resorpcija i remobilizacija [1-3].

Kako bi procijenili potencijalnu opasnost da neki sediment postane i izvor onečišćivala, potrebno je ne samo poznavati ukupnu koncentraciju metala u sedimentu, već i razumjeti biogeokemijske procese (npr. razgradnja organske tvari, redukcija Fe i Mn oksihidroksida, difuzija, boirigacija) koji kontroliraju njihovu mobilnost u sedimentu te potencijalnu remobilizaciju u okolni vodni okoliš. Većina ovih procesa je pod utjecajem bakterijske aktivnosti, ali i sastava sedimenta te dostupnosti metala. [4] Jedan od alata koji je iznimno važan u proučavanju mobilnosti metala u sedimentu i na granici sediment/voda svakako je analiza porne vode – tekućine koja zauzima prostor među česticama sedimenata.

Cilj ovog istraživanja je bio istražiti procese koji kontroliraju dinamiku metala u sedimentu te na granici faza sediment/voda u različitim okolišnim/antropogenim uvjetima estuarija. U tu svrhu provedeno je sveobuhvatno istraživanje na području estuarija rijeke Krke, gdje su na 7 lokacija duž estuarija provedene analize sedimenata, porne vode, pridnene vode i vodenog stupca. Za analizu porne vode korištene su dvije različite metode: (1) analiza porne vode dobivene ekstrakcijom iz sedimenta i (2) analiza in-situ pasivnih uzorkivača (difuzijski gradijent na tankom filmu (DGT)). Primjenom ovih metoda, potvrđen je dominantan utjecaj procesa rane dijageneze na mobilnost sedimenta, te je uočen značajan gradijent na granici faza sediment/voda, što ukazuje na potencijalni prijenos nekih elemenata (npr. Cu, Cd i Pb) iz sedimenta u vodeni stupac.

1. I. Saulnier, A. Mucci, *Appl. Geochem.* **15** (2000) 191-210.

2. L.H. Kalnejais, W.R. Martin, M.H. Bothner, *Mar. Chem.* **121** (2010) 224-235.

3. N. Cukrov, S. Frančičković-Bilinski, B. Hlača, D. Barišić, *Mar. Pollut. Bull.* **62** (2011) 154-167.

4. D.H. Dang, V. Lenoble, G. Durrieu, D.Omanović, J.-U. Mullot, S. Mounier, C. Garnier, *Mar. Pollut. Bull.* **92** (2015) 113-124.

**U-OC1: SVOJSTVA I DINAMIKA PROMJENA ORGANSKE TVARI U JADRANU**

Jelena Dautović<sup>1</sup>, Vjeročka Vojvodić<sup>1</sup>, Nataša Tepić<sup>2</sup>, Božena Ćosović<sup>1</sup>, Irena Ciglencečki<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Institut Ruđer Bošković, Zavod za istraživanje mora i okoliša, Bijenička cesta 54, Zagreb*

<sup>2</sup> *Nacionalni centar za vanjsko vrednovanje obrazovanja, Ulica D. Tomljenovića 11, Zagreb*

Organski ugljik važan je pokazatelj globalnih promjena te sudjeluje u mnogim biogeokemijskim procesima u moru. Ovim radom se pojašnjava dinamika promjena koncentracije i svojstava otopljene organske tvari/ugljika, u odabranim područjima Jadrana koja su pod jakim utjecajem unosa slatke vode kao i različitih strujanja vodenih masa: sjeverni Jadran (SJ) na profilu Rovinj – rijeka Po, Boka kotorska i albanski šelf. Ispitivani su sadržaj i svojstva otopljenog organskog ugljika (eng. DOC), partikularnog organskog ugljika (eng. POC) te površinski aktivnih tvari (PAT). Istraživanja trendova promjena sadržaja i svojstava organske tvari u SJ u vremenskom razdoblju od 28 godina pokazala su da se radi o vrlo dinamičnom sustavu na prostornoj, a posebno na vremenskoj skali. Rezultati također pokazuju da je područje SJ dominantno oligotrofno s kraćim, ali vrlo izraženim mezotrofnim/eutrofnim epizodama. Svojstva i sadržaj OT u sjevernom Jadranu pod jakim su utjecajem promjenjivog unosa slatke vode rijekom Po te globalnim utjecajem strujanja vodenih masa koje ulaze u Jadransko more iz Mediterana tijekom različitih tipova cirkulacija u Jonskom moru (Jadransko-jonska bimodalna oscilacija, eng. BiOS). U vremenskom razdoblju u kojem su istraživana sva područja odabrana za usporedbu (03/2008-05/2009), najadsorbabilniji, to jest najreaktivniji organski materijal nađen je na području Boke kotorske (bez naznaka eutrofnosti), po svojstvima bliži adsorbabilnijim modelnim spojevima s nižom molekulskom masom dekstranu T-500 i fulvičnoj kiselini. Slično je dobiveno prilikom jednokratnog proljetnog istraživanja tada oligotrofnog albanskog šelfa.

Reaktivnost otopljene organske tvari u SJ pokazala se promjenljivijom od ostala dva istraživana sustava tijekom ovog dugogodišnjeg istraživanja. Svojstva organske tvari mijenjaju se od reaktivnijeg, adsorbabilnijeg materijala sličnog fulvičnoj kiselini i dekstranu T-500, do slabije adsorbabilnog, odnosno manje reaktivnog organskog materijala predstavljenog modelnim spojem polisaharida ksantana visoke molekulske mase.

1. J. Dautović, V. Vojvodić, N. Tepić, B. Ćosović, I. Ciglencečki, *Sci. Total Environ.* **587/588** (2017) 185-195.

2. B. Ćosović, V. Vojvodić, *Electroanalysis* **10** (1998) 429-434.

3. J. Dautović, S. Strmečki, B. Pestić, V. Vojvodić, M. Plavšić, S. Krivokapić, B. Ćosović, *Fresenius Environ. Bull.* **21** (2012) 995-1006.

4. M. Plavšić, S. Strmečki, J. Dautović, V. Vojvodić, G. Olujić, B. Ćosović, *Cont. Shelf Res.* **39-40** (2012) 41-48.

**U-OC2: MORFO-FIZIOLOŠKE REAKCIJE RODOVA CHAETOCEROS I LEPTOCYLINDRUS NA LIMITACIJU NUTRIJENTIMA**

Nataša Kužat<sup>1</sup>, Mirta Smodlaka Tanković<sup>1</sup>, Ana Baričević<sup>1</sup>, Ingrid Ivančić<sup>1</sup>, Emina Pustijanac<sup>2</sup>, Nikola Medić<sup>1</sup>, Daniela Marić Pfannkuchen<sup>1</sup>, Martin Pfannkuchen<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Institut Ruđer Bošković, Centar za istraživanje mora, Giordano Paliaga 5, Rovinj*

<sup>2</sup> *Sveučilište Jurja Dobrića u Puli, Odjel za prirodne i zdravstvene studije, Zagrebačka 30, Pula*

Sjeverni Jadran karakteriziran je brojnim prostorno-vremenski izmjenjivim gradijentima (npr. nutrijenti, salinitet, temperatura). Ovo područje je plitko te je pod jakim utjecajem dotoka rijeke Po. To rezultira izrazito kompleksnom strukturom planktonskog ekosustava koja nam omogućuje praćenje prilagodbi planktonskih organizama duž navedenih gradijenata. U ovom istraživanju analizirali smo dvije vrste roda *Leptocylindrus* (*L. aporus* i *L. hargravesii*) i vrstu *Chaetoceros peruvianus* koji su česte vrste/rodovi u Sjevernom Jadranu. Usredotočili smo se na njihove metaboličke odgovore na limitaciju fosfatima. Analizirali smo njihovo ponašanje in situ te proveli eksperimentalna mjerenja. U prezentaciji ćemo prikazati mjerenja brzine rasta pojedine vrste pri različitim koncentracijama nutrijenata, brzine unosa fosfata, podatke o aktivnosti, lokalizaciji i načinima aktivacije enzima alkalne fosfataze, te

morfološke prilagodbe pojedine vrste na stres fosfatima. Fiziološke promjene koje smo uočili uključuju promjene dužine generacijskog vremena i različitu ekspresiju enzima alkalne fosfataze. Uz fiziološke, uočene su i morfološke promjene kao reakcija na stres fosfatima. Kod roda *Leptocyllindrus* uočene su promjene u dužini stanica i lanaca u uvjetima smanjene koncentracije fosfora, dok su kod vrste *C. peruvianus* uočene morfološke promjene koje nalikuju prijelazu između dva već opisana oblika te vrste (*C. peruvianus* i *C. peruvianus* var. *gracilis*). Rezultati našeg istraživanja upućuju na to da morfološke analize in situ uzoraka mogu biti dobar pokazatelj trenutnog stanja u okolišu, kao što je limitacija fosfatom. Također svoja mjerenja fizioloških odgovora uspoređujemo sa in situ analizama te ih povezujemo u model koji bi nam mogao objasniti životne strategije vrsta roda *Leptocyllindrus* i vrste *Chaetoceros peruvianus*, a i drugih vrsta koje borave na području Sjevernog Jadrana.

### U-OC3: ZAJEDNIČKI UTJECAJ RASTA TEMPERATURE I OLIGOTROFIKACIJE NA POVEĆANU PRODUKCIJU FITOPLANKTONSKIH LIPIDA

Tihana Novak<sup>1</sup>, Jelena Godrijan<sup>1</sup>, Daniela Marić Pfannkuchen<sup>2</sup>, Tamara Djakovac<sup>2</sup>, Nikola Medić<sup>3</sup>, Ingrid Ivančić<sup>2</sup>, Marina Mlakar<sup>1</sup>, Blaženka Gašparović<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Zavod za istraživanje mora i okoliša, Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, Zagreb

<sup>2</sup>Centar za istraživanje mora, Institut Ruđer Bošković, G. Paliaga 5, Rovinj

<sup>3</sup>Marine Biological Section, Department of Biology, University of Copenhagen, DK-3000 Helsingør, Danska

Rast temperature oceana i mora, te promjene u trofiji otvorile su pitanje na koji način one utječu na fitoplankton u smislu kvalitete i kvantitete producirane organske tvari, uključujući i biološki važne lipide. Dosadašnja istraživanja slabo su orijentirana na odnos produkcije lipida i zamijećenih promjena u okolišu. Sukladno tome proveli smo istraživanje na uzgajanim monokulturama u kontroliranim uvjetima temperature i hranjivih soli te usporedili rezultate s *in situ* istraživanjima sjevernog Jadrana. Kao modelni organizam odabrali smo dijatomeju *Chaetoceros pseudocurvisetus* koju smo uzgajali pri temperaturnom rasponu od 10-30 °C i u uvjetima promjene hranjivih soli u uzgajanom mediju. Time smo simulirali uvjete eutrofnog i oligotrofnog mora u različitim godišnjim dobima. Dobivene rezultate smo usporedili s fitoplanktonskom produkcijom lipida u sjevernom Jadranu tijekom jednogodišnjeg razdoblja. Kako bismo dobili detaljnije informacije o istraživanom sustavu, uz analizu lipida tankoslojnom kromatografijom proveli smo mjerenja koncentracije klorofila a, koncentracije nutrijenata zajedno s hidrografskim parametrima te odredili taksonomiju i abundanciju fitoplanktonskih stanica. Dobiveni rezultati su pokazali povećanu produkciju lipida s povećanjem temperature, posebice u oligotrofnim uvjetima. Također dobiveni odnos određenih klasa lipida, uključujući nama najzanimljiviji odnos membranskih fosfolipida i glikolipida, pokazao je da je pod većim utjecajem dostupnosti hranjivih soli nego porasta temperature.

### U-OC4: RASPODJELA I RAZNOLIKOST PORODICE SYLLIDAE (ANNELIDA: POLYCHAETA) U KAŠTELANSKOM ZALJEVU

Ante Žunec, Petra Lučić, Ivan Cvitković, Marija Despalatović, Ante Žuljević

Institut za oceanografiju i ribarstvo, Šetalište Ivana Meštrovića 63, Split

U ovom istraživanju obrađena je skupina mnogočetinaša na području Kaštelanskog zaljeva, a posebno je analizirana porodica Syllidae s obzirom na njenu osjetljivost na antropogene utjecaje. Uzorkovanje algi i beskralješnjaka obavljeno je ronjenjem na sedam postaja na području zaljeva u zajednicama algi, na dubinama do 1 metra. Postaje su bile pod različitim antropogenim utjecajima kao što su kanalizacijski ispusti, brodogradilište te tvornica cementa. Referentna postaja nalazila se izvan zaljeva. Na svakoj postaji sakupljeno je pet replikata s površine 20 cm x 20 cm. Ukupno je sakupljeno 2211 jedinki mnogočetinaša, od čega su bile 663 jedinke iz porodice Syllidae. Iz ove je porodice određeno

25 vrsta. Ove vrste su poznate po iznimnoj osjetljivosti na antropogene utjecaje, pa je u području istraživanja s obzirom na različite antropogene pritiske analizirana prostorna rasprostranjenost i broj vrsta. Dobiveni rezultati (prostorna rasprostranjenost i broj vrsta porodice Syllidae) pokazali su se kao dobar indikator stanja okoliša u Kaštelanskom zaljevu. Broj vrsta i broj jedinki iz porodice Syllidae značajno je smanjen u područjima pod antropogenim utjecajem, u blizini brodogradilišta, tvornica ili naselja.

#### **U-OC5: SKLEROKRONOLOŠKA ISTRAŽIVANJA KOMERCIJALNO VAŽNIH VRSTA ŠKOLJKAŠA *VENUS VERRUCOSA* LINNAEUS, 1758 I *CALLISTA CHIONE* (LINNAEUS, 1758) U JADRANU**

Hana Uvanović, Melita Peharda

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

Sklerokronologija je interdisciplinarno polje znanosti koje proučava strukturu i geokemijski sastav tvrdih struktura morskih organizama poput školjkaša, otolita kod riba i koralja. Omogućava dobivanje podataka o morskom okolišu koji su značajni za bolje razumijevanje procesa na razini ekosustava te njihovih odgovora na klimatske promjene. Dosadašnje studije su do sad uglavnom provedene na organizmima u Atlantskom i Tihom oceanu te se područje istraživanja u posljednjim godinama proširilo i na poluzatvorena mora poput Mediterana i Jadrana. Sklerokronološka istraživanja u Jadranu odvijaju se u sklopu projekta „Sklerokronologija kao alat za otkrivanje dugoročnih okolišnih promjena u Jadranu“ (IP-2014-09-5747, 2015-2019, Melita Peharda Uljević). Istražuju se dugoživuće vrste školjkaša *Glycymeris bimaculata* (Poli, 1795) i *G. pilosa* (Linnaeus, 1767) koje nemaju veći ekonomski značaj te komercijalno važne vrste - brbavica (*Venus verrucosa* Linnaeus, 1758) i rumenka (*Callista chione* (Linnaeus, 1758)).

Prezentirat će se ciljevi istraživanja u okviru izradbe doktorskog rada, koja se temelje na sklerokronološkoj analizi vrsta *V. verrucosa* i *C. chione*. Te dvije vrste školjkaša su veoma cijenjene na tržištu te im zbog sve veće potražnje prijete opasnost od prelova. Brbavica može dostići oko 15 godina starosti, a rumenka oko 40, a obje su vrste rasprostranjene širom Jadrana i Mediterana. Ciljevi doktorskog rada jesu analiza vremenskih i prostornih promjena u dinamici rasta i geokemijskog sastava ljuštura, izrada kronologija rasta s dostupnih područja u Jadranu i Mediteranu te određivanje glavnih čimbenika koji utječu na rast ciljanih vrsta, uključujući utjecaj klimatskih promjena.

#### **U-OC6: POPULACIJSKA STRUKTURA I MORFOLOŠKE ZNAČAJKE HLAPA (*HOMARUS GAMMARUS*, LINNAEUS 1758) NA ISTOČNOJ OBALI JADRANSKOG MORA**

Mišo Pavičić, Dario Vrdoljak, Sanja Matić-Skoko

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

Hlap (*Homarus gammarus*, Linnaeus 1758) je rasprostranjen u cijelom Jadranskom moru iako se veća gustoća populacije nalazi u sjevernom Jadranu. Ekonomski je značajna vrsta velikih rakova, a ribolov te vrste je intenzivan i nepravilan. Biološka i ekološka saznanja za tu vrstu na području Jadrana manjkaju. Ribolov hlapa u Hrvatskoj je reguliran s minimalnom dužinom ulova koja iznosi 10,5 cm dužine karapaksa i 30 cm ukupne dužine jedinke te s otvorenom sezonom ribolova od 5. svibnja do 1. rujna. Uzorkovanje hlapa se provodilo od svibnja 2016. do rujna 2017. tokom svih mjeseci, te u sezoni ribolova od svibnja 2018. do rujna 2018. Hlapovi su lovljeni s mrežama stajačicama i vršama na više područja u Jadranu: zapadna obala Istre, na području otoka Lošinja, Hvara i Visa. Svakom ulovljenom hlapu zabilježene su sljedeće značajke: dužina karapaksa, ukupna dužina, masa, spol i širina drugog segmenta abdomena. Također, uzrokovan je biološki materijal i konzerviran u 96% alkoholu za izolaciju DNA te daljnju analizu i genotipizaciju mikrosatelitnih lokusa. Svrha ovog istraživanja je bila utvrditi populacijsku strukturu hlapa

u istočnom Jadranskom moru te dobiti osnovne biološke i ribarstvene podatke za pravilno i održivo gospodarenje tom vrstom.

## U-OC7: ELEKTROKEMIJSKA KARAKTERIZACIJA KOBALTOVIH(II) KOMPLEKSA S 4-NITRO-KATEKOLOM I HUMUSNOM KISELINOM

Anđela Bačinić, Marina Mlakar

*Zavod za istraživanje mora i okoliša, Laboratorij za fizičku kemiju tragova, Institut Ruđer Bošković, Bijenička 54, Zagreb*

Kobalt (Co) je važna hranjiva tvar (mikronutrijent) prisutna u moru u nanomolarnim koncentracijama i potrebna je za rast fitoplanktona kokolitoforida, dijatomeja te cijanobakterija [1]. Biogeokemijski ciklus Co u morskoj vodi je zbog njegove niske koncentracije (prosječne vrijednosti u morskoj vodi iznose između 0,01 do 0,2 nmol) relativno slabo istražen. Co (II) u morskoj vodi stvara komplekse s organskim i anorganskim ligandima. Važna istraživanja kompleksa Co (II) s organskim ligandima, dimetilglioksimom (butan-2,3-dion dioksim, DMG) i nioksimom (cikloheksan-1,2-dion dioksim), provedena su u svrhu određivanja koncentracija Co u morskoj vodi elektrokemijskim metodama [2].

U ovom radu korišteni su 4-nitrokatekol i humusna kiselina kao kompleksirajući ligandi za kobaltove (II) ione. Katekol (1,2-dihidroksibenzen) je organska molekula prisutna u humusnim materijalima i sideroforima, poznatim prirodnim organskim ligandima u morskoj vodi [3]. 4-nitrokatekol je ligand koji za razliku od katekola ima elektron-akceptorsku nitro skupinu koja s kobaltom stvara stabilan kompleks [4]. Humusna kiselina je složena organska molekula koja kompleksira metale u morskom okolišu te ima značajnu ulogu u njihovoj topljivosti i pokretljivosti. Pri elektrokemijskim mjerenjima slični signali redukcije katekola i humusne kiseline upućuju na stvaranja kompleksa kobalta s humusnom kiselinom na vezno mjesto nitrokatekola. Kompleksiranje metala u tragovima s organskim ligandima pratili smo različitim elektrokemijskim tehnikama i to: pravokutno-valnom voltammetrijom i cikličkom voltammetrijom u modelnoj otopini natrijevog klorida korištenjem živine kapi kao radne elektrode.

U uvodnom dijelu bit će prikazana kemijska raspodjela iona Co(II) u morskoj vodi u ovisnosti o pH, a zatim rezultati kompleksiranja Co s ligandima korištenjem voltametrije s katodnim otapanjem u ovisnosti o sljedećim eksperimentalnim uvjetima: pH, koncentraciji kobalta i liganda te ovisnost odziva redukcije kompleksa uz variranje mjernih i elektrokemijskih parametara (vrijeme i potencijal akumulacije, frekvencija i amplituda signala, brzina promjene potencijala). Na taj način lako se može okarakterizirati mehanizam redukcije istraživanih kompleksa.

1. M. J. Ellwood, C. M. G. van den Berg, *Mar. Chem.* **75** (2001) 33–47.
2. M. Vega, C. M. G. van den Berg, *Anal. Chem.* **69** (1997), 874-881.
3. J. Bown, M. Boye. D. M. Nelson, *Biogeosci.* **9** (2012) 2719-2736.
4. J. P. Conrad, Rasmiwetti, J. C. Merlin, *Chem. Phys.* **309** (2005) 239–249.



**U-OC8: UV/VIS SPEKTROFOTOMETRIJSKA KARAKTERIZACIJA KROMOFORNE OTOPLJENE ORGANSKE TVARI (CDOM) U ESTUARIJU RIJEKE KRKE**

Saša Marcinek<sup>1</sup>, Nicolas Layglon<sup>2</sup>, Jasmin Pađan<sup>1</sup>, Ana-Marija Cindrić<sup>1</sup>, Chiara Sanitnelli<sup>3</sup>, Margherita Gonnelli<sup>3</sup>, Cedric Garnier<sup>2</sup>, Stephane Mounier<sup>2</sup>, Dario Omanović<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Zavod za istraživanje mora i okoliša, Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, Zagreb

<sup>2</sup> Laboratorij MIO, ECEM, Sveučilište u Toulonu, Avenue de l'Université, La Garde, Francuska

<sup>3</sup> CNR – Biofizički institut, Via G. Moruzzi 1, Pisa, Italija

Otopljena organska tvar (DOM) u moru se nalazi u širokom rasponu molarnih masa i kemijskih struktura, a kompleksna struktura i sklonost stvaranju molekularnih agregata otežava njenu karakterizaciju. Također, izvori organske tvari u moru te mehanizmi produkcije, transformacije i remineralizacije većim dijelom su nepoznati. Karakterizacija organske tvari je važna za razumijevanje uloge organske tvari u vodenom okolišu kao i njenog doprinosa funkcioniranju vodenih ekosustava. Sastav i struktura organske tvari u moru ovisi o izvornom materijalu, a promjene izazvane fotokemijskom i mikrobiološkom aktivnošću se odražavaju u njenim optičkim svojstvima. Obradom apsorpcijskih spektara CDOM-a moguće je izvesti parametre koji pružaju uvid u strukturu (aromatičnost, molekularna masa), izvore (alohtoni, autohtoni) i sudbinu organske tvari unutar vodenog stupca (fotodegradacija, mikrobiološka razgradnja, vezanje metala) te praćenje sezonskih i prostornih promjena.

U većini svjetskih estuarija riječni ispušt se smatra glavnim izvorom DOM-a, ali i drugih elemenata u tragovima. Međutim, slatkovodni sustavi u krškim područjima, bez značajnog antropogenog utjecaja mogu imati i drukčije karakteristike. Estuarij rijeke Krke tipičan je primjer drukčijeg ponašanja: koncentracija elemenata u tragovima trajno je niža nego u otvorenom obalnom području, dok je koncentracija otopljenog organskog ugljika (DOC) na istoj razini (zimi) ili samo malo iznad razine čiste morske vode (ljeti). [1] Dok je estuarij općenito dobro okarakteriziran s obzirom na hidrologiju, biološki status i ponašanje metala u tragovima, prema našim saznanjima, studija CDOM-a nikada nije provedena. Stoga u ovom radu predstavljamo prve preliminarne rezultate optičke karakterizacije CDOM-a u estuariju rijeke Krke. Glavni cilj je bio dobiti uvid u svojstva CDOM-a na temelju zajedničkih parametara izvedenih iz UV-Vis spektralnih krivulja. Dobiveni rezultati ukazuju na očiglednu sezonsku promjenu u strukturi organske tvari. Osim toga, u ovom radu usvojili smo i prilagodili nekoliko modela za procjenu DOC-a iz CDOM parametara, predloženih u drugim studijama, [2,3,4] kako bi testirali njihovu moguću primjenu u analizi organske tvari u estuariju rijeke Krke.

1. M. Cindrić, C. Garnier, B. Oursel, I. Pižeta, D. Omanović, *Mar. Pollut. Bull.* **94** (2015) 199-216.

2. C. G. Fichot, R. Benner, *Geophys. Res. Lett.* **38** (2011) L03610.

3. X. Yu, F. Shen, F. Y. Liu, *Coast. Shelf Sci.* **181** (2016) 302-311.

4. T. S. Catalá, A. M. Martínez-Pérez, M. Nieto-Cid, M. Álvarez, J. Otero, M. I. R. Emelianov, et al. *Prog. Oceanogr.* **165** (2018) 35-51.

# Posterska priopćenja

## P-F1: STRUKTURA LAKIH JEZGARA RAZMATRANA PUTEM REAKCIJA ${}^7\text{Li}+{}^{6,7}\text{Li}$

Deni Nurkić<sup>1</sup>, M. Uroić<sup>2</sup>, M. Milin<sup>1</sup>, A. Di Pietro<sup>4</sup>, P. Figuera<sup>4</sup>, M. Fisichella<sup>4</sup>, M. Lattuada<sup>4</sup>, I. Martel<sup>3</sup>, Đ. Miljanić<sup>2</sup>, M. G. Pellegriti<sup>4</sup>, L. Prepolec<sup>2</sup>, A. M. Sanchez Benitez<sup>3</sup>, V. Scuderi<sup>4</sup>, N. Soić<sup>2</sup>, E. Strano<sup>4</sup>, D. Torresi<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Fizički odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Bijenička cesta 32, Zagreb

<sup>2</sup>Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 52, Zagreb

<sup>3</sup>Sveučilište u Huelvi, Huelva, Španjolska

<sup>4</sup>INFN-LNS, Catania, Italija

U ovom će radu biti prezentirana kratka analiza eksperimenta obavljenog na institutu LNS-INFN u kojem su kao projektil korištene jezgre  ${}^7\text{Li}$  na energijama 30 i 52 MeV-a, dok su mete imale strukturu  ${}^7\text{LiF}$  i  ${}^6\text{LiF}$ . Dakle, mjereni su produkti reakcija  ${}^7\text{Li}+{}^{6,7}\text{Li}$  da bi se dobio uvid u različite strukture lakih jezgara u tom masenom području. Posebna je pozornost pridana potrazi za molekularnim stanjima u jezgrama  ${}^{10}\text{B}$  i  ${}^{10}\text{Be}$ . Molekularna stanja su iznimno deformirana stanja jezgre koja se sastoje od jedne ili više inertnih sredica vezanih valentnim nukleonima. Uz to se naglasak stavlja i na istraživanje raznih strukturnih konfiguracija u jezgrama  ${}^7\text{He}$ ,  ${}^9\text{Be}$  i  ${}^{10-12}\text{B}$ . Eksperimentalni se postav sastoji od četiri nuklearna teleskopa koji pokrivaju polarne kutove u rasponu od 20 do 90 stupnjeva i koji omogućavaju identifikaciju čestica korištenjem standardnih  $\Delta E-E$  tehnika. Ovaj rad sadrži prethodno objavljene metode analize i spektre iz jednočestičnih detekcija kao i neke nove spektre iz koincidencejskih detekcija. Preostali planovi za analizu, također će biti prezentirani.

1. M. Uroić, M. Milin et al., *Eur. Phys. J. A* **51** (2015) 93.

## P-F2: KARAKTERISTIKE I PROMJENE LJETNIH I ZIMSKIH TEMPERATURA ZRAKA U ZAGREBU

Irena Nimac<sup>1</sup>, Ivana Herceg Bulić<sup>2</sup>, Melita Perčec Tadić<sup>1</sup>

Zavod za teorijsku fiziku, Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, Zagreb

Uslijed porasta gradskog stanovništva gradovi se ubrzano razvijaju i šire. U izgradnji se koriste umjetni materijali koji imaju drugačija toplinska (kapacitet i vodljivost) i radijacijska (albedo) svojstva od prirodnih materijala zbog čega dolazi do promjene bilance energije u izgrađenom području te formiranja urbanog toplinskog otoka – značajno toplije urbane sredine u odnosu na okolno ruralno područje. Za analizu urbane klime Zagreba korišteni su podaci s 4 meteorološke postaje – 3 gradske (Zagreb Grič, Zagreb Maksimir i Zagreb Pleso) i 1 planinske (Puntijarka). Osim razlika u geografskom položaju i nadmorskoj visini, postaje se razlikuju i prema vrsti zemljišnog pokrova područja u kojem se nalaze. Korišteni su dnevni podaci apsolutnih maksimalnih i minimalnih temperatura za 58-godišnje razdoblje 1961-2017. Analizirane su temperature zraka za ljetnu i zimsku sezonu kada se javljaju temperaturni ekstremi koji imaju značajan utjecaj na ljudski osjet ugodnosti i mogu izazvati nepovoljne klimatske uvjete te ugroziti zdravlje ljudi. Procijenjeni su temperaturni trendovi, a njihova signifikantnost testirana je neparаметarskim Mann Kendallovim testom. [2,4] Analizirana su 2 hladna i 2 topla temperaturna indeksa definirana od ETCCDI-a (Expert Team on Climate Change Detection; [4,5]). Očekivane apsolutne maksimalne i minimalne temperature za različita povratna razdoblja procijenjene su primjenom GEV razdiobe (Generalized Extreme Value; [1]).

1. S. Coles, *An Introduction to Statistical Modeling of Extreme Values*, Springer, London, 2001.

K. W. Hipel and A. I. McLeod, *Time Series Modelling of Water Resources and Environmental Systems*, Elsevier Science, New York, 1994.

2. T. R. Karl, N. Nicholls, A. Ghazi, *Clim. Change* **42** (1999) 3-7.

3. H. B. Mann, *Econometrica* **13** (1945) 245-259.

4. T. C. Peterson, C. Folland, G. Gruza, W. Hogg, A. Mokssit, N. Plummer, Report on the Activities of the Working Group on Climate Change Detection and Related Rapports 1998-2001. WMO, Rep. WCDMP-47, WMO-TD 1071, Geneva, 2001, 143.

### **P-F3: OPTIMIZACIJA DIJAGNOSTIČKOG PREGLEDA TORAKSA KOMPJUTERIZIRANOM TOMOGRAFIJOM**

Ivan Lasić

*Centar za medicinsku fiziku i zaštitu od zračenja, Sveučilišna Klinička Bolnica Mostar, Bijeli brijeg bb, 88000 Mostar, Bosna i Hercegovina*

Cilj rada je smanjiti dozu ionizirajućeg zračenja koju pacijent prima prilikom dijagnostičkog pregleda toraksa kompjuteriziranom tomografijom bez ugrožavanja kvalitete dijagnostičke informacije. Za potrebe ovog istraživanja korišten je uređaj za kompjuteriziranu tomografiju /CT/ koji se nalazi na klinici za radiologiju Sveučilišne Kliničke Bolnice Mostar /SKBM/. U istraživanje koje je trajalo od 1.3.2018 do 1.6.2018 su bila uključena 62 odrasla pacijenta upućena na CT pregled toraksa različitih uputnih dijagnoza. Nakon određivanja doze koju je 31 pacijent primio, cilj je bio optimizacija parametara CT protokola u svrhu smanjenja doze koju pacijenti primaju na način da ne ugrozimo dijagnostičku informaciju. U sami proces optimizacije su bili uključeni liječnik specijalist radiologije te medicinski fizičar. Nakon procesa optimizacije parametara protokola snimljen je još 31 pacijent. Liječnik radiolog je koristeći "double-stimulans" metodu ocjenivao vidljivost anatomskih struktura koje su izabrane prema European Guidelines on image quality criteria for CT 16262 /EUR 16262 EN/. Za konačni izračun učinkovitosti doze korišten je faktor "figure of merit" /FOM/.

Rezultati koje smo dobili govore da smo modifikacijom parametara protokola CT toraksa signifikantno smanjili dozu koju pacijent prima. Vidljivost anatomskih struktura je ostala nepromjenjena. Srednja vrijednost FOM faktora prije procesa optimizacije je bila  $1.28 \text{ mSv}^{-1}$  i  $2.46 \text{ mSv}^{-1}$  nakon optimizacije ( $p < 0.001$ ).

Zaljučak ovog istraživanja je da smo promjenom parametara ekspozicije singifikantno smanjili dozu koju prima pacijent bez ugrožavanja dijagnostičke informacije.

1. Holmberg O., Malone J., Rehani M. et al., *Eur. J. Radiol.* **76** (2010)15-19.

2. Holmberg O., Czarwinski R., Mettler F., *Eur. J. Radiol.* **76** (2010) 6-10.

3. ICRP. ICRP Publication 60: Recommendations of the International Commission on Radiological Protection. International Commission on Radiological Protection; 1991.

4. Singh S., Kalra M. et al., *Radiol. Clin. N. Am.* **52** (2014) 1-15.

5. Simonji Hanadev D. *Procjena doza i optimizacija protokola pri standardnim pregledima višeslojnom kompjuterizovanom tomograjom*; Doktorska disertacija, Univerzitet u Novom Sadu, Medicinski fakultet, Novi Sad, 2015.

6. Beganović A. *Kožne doze kod perfuzije kompjuterizovanom tomograjom*; Doktorska disertacija. Univerzitet u Sarajevu, Prirodno - Matematički fakultet, Sarajevo, 2013.

7. European Guidelines on quality criteria for computed tomography, EUR16262 EN Øberg M. Patient Doses for CT Examinations in Denmark; Doctoral thesis. Submitted to the Department of Electrical Engineering at the Technical University of Denmark, University of Copenhagen, 2011.

8. Kalra M., Maher M. M., Toth T. L. et al., *Radiology* **230** (2004) 619-628.

9. Prasad S, et al., *Am. J. Roentgenol.* **179** (2002) 461-465.

**P-F4: ELEMENTNA ANALIZA LEBDEĆIH ČESTICA U RADIONICI ZA OBRADU METALA I BIOLOŠKIH UZORAKA IZLOŽENIH RADNIKA**

Marija Čargonja<sup>1</sup>, Gordana Žauhar<sup>1,2</sup>, Darko Mekterović<sup>1</sup>, Paula Žurga<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Sveučilište u Rijeci, Odjel za fiziku, Radmile Matejčić 2, Rijeka

<sup>2</sup>Sveučilište u Rijeci, Medicinski fakultet, Braće Branchetta 20, Rijeka

<sup>3</sup>Nastavni zavod za javno zdravstvo Primorsko-goranske županije, Krešimirova 52a, Rijeka

Lebdeće čestice su smjesa čestica u krutoj i tekućoj fazi raspršenih u atmosferi te su jedan od najvažnijih sastojaka onečišćenog zraka, kako na otvorenom, tako i u zatvorenim prostorima. Fine lebdeće čestice (PM<sub>2.5</sub>) čiji je aerodinamički promjer manji od 2,5 μm, mogu predstavljati opasnost za zdravlje čovjeka, budući da mogu prodrijeti u respiratorni sustav pa su stoga važne za proučavanje, posebno u sredinama u kojima su im ljudi profesionalno izloženi. Primjer radnog prostora u kojem su moguće povišene koncentracije lebdećih čestica su radionice za obradu metala. [1]

U ovom preliminarnom istraživanju [2], fine lebdeće čestice su uzorkovane u radionici za obradu metala u okolici Rijeke. Tijekom dva tjedna u svibnju 2016. prikupljeni su 12-h uzorci lebdećih čestica na udaljenosti od oko 30 m od najbližeg postupka zavarivanja. U studenom 2016. tijekom tri radna dana prikupljeni su satni i 12-h uzorci lebdećih čestica na udaljenosti od oko 5 m od najbližeg postupka zavarivanja. Elementna analiza uzoraka provedena je tehnikom fluorescencije rendgenskog zračenja (XRF) te su dobivene koncentracije sljedećih elemenata: Ti, V, Cr, Mn, Fe, Ni, Cu i Zn. Koncentracije lebdećih čestica i pojedinih metala imale su značajan porast tijekom radnog vremena.

Devet izloženih radnika radionice ustupilo je uzorke krvi, kose i noktiju tijekom ljeta 2017. Kontrolna skupina sastavljena je od devet osoba istog spola i sličnog starosnog profila kao izloženi radnici. Biološki uzorci analizirani su masenom spektrometrijom s induktivno spregnutom plazmom te su dobivene koncentracije sljedećih elemenata: Al, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Cd i Pb. Kod radnika su pronađene povećane koncentracije Al, Cr, Mn i Fe u kosi te Cr, Mn, Fe, Ni i Ti u noktima.

1. B. Pesch, T. Weiss, B. Kendzia, J. Henry, M. Lehnert, A. Lotz, E. Heinze, H. U. Käfferlein, R. Van Gelder, M. Berges, J.-U. Hahn, M. Mattenklott, E. Punkenburg, A. Hartwig, Thomas Brüning, *J. Expo. Sci. Env. Epid.* **22** (2012) 291-298.
3. M. Čargonja, G. Žauhar, I. Orlić, *Rad. Applic.* **2** (2017) 220-225.

**P-F5: UPOTREBA UVJETNE VJEROJATNOSTI U KRATKOROČNOM PROGNOZIRANJU VIDLJIVOSTI NA ZRAČNOJ LUCI ZAGREB**

Marko Zoldoš<sup>1</sup>, Jadran Jurković<sup>1</sup>, Darko Koračin<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Sektor zrakoplovne meteorologije, Hrvatska kontrola zračne plovidbe d.o.o., Rudolfa Fizira 2, Velika Gorica

<sup>2</sup>Odjel za fiziku, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Splitu, Ruđera Bošković 33, Split

Dugotrajni događaji magle na zračnim lukama mogu uzrokovati značajna prometna kašnjenja. Stoga je istraživanje magle važno za zrakoplovnu meteorologiju, jer točne prognoze mogu dovesti do značajnih novčanih ušteda za korisnike. Cilj ovog rada je testiranje jednostavnog statističkog modela za vjerojatnosno kratkoročno prognoziranje (nowcasting) vidljivosti na zračnoj luci Zagreb, kojeg su predložili Juras i Pasarić 2006. Model će operativnim prognostičarima pružiti alat koji će biti od pomoći za prognozu vidljivosti.

Korišteni podaci su polusatni METAR izvještaji u razdoblju od 1.1.1994. do 31.12.2016. Teorijska osnova modela je autokorelacijski proces prvog reda, koji povezuje klimatologiju i perzistenciju (stoga i naziv CLIPER). Iz njega se može razviti relativno jednostavna prognostička jednačica za dani meteorološki element - kao npr. vidljivost - koja povezuje korelaciju između vrijednosti elementa u različitim vremenskim koracima s uvjetnom vjerojatnošću nastupa definiranih vrijednosti.

Satni koeficijenti korelacije, koji opisuju klimatološku perzistenciju vidljivosti, izračunati su za svaki mjesec iz kumulativnih učestalosti vidljivosti (koje su pretvorene u normalizirane vrijednosti). Koeficijenti

korelacije se koriste za prognozu vidljivosti za svaki sat, 9 sati unaprijed. Uz medijsku prognozu vidljivosti (50. percentil) računaju se i 50-postotni i 80-postotni intervali nepouzdanosti, koji daju ocjenu nepouzdanosti prognoze. Također se računa i prognoza po percentilu, za koju se očekuje da može biti korisna za vrijeme jako rijetkih događaja.

Model je testiran na 4 izdvojena slučaja nastanka i nestanka magle, za koje su izračunate prognoze vidljivosti. Rezultati kod nestanka magle su obećavajući, dok su prognoze nastanka magle očekivano loše. U takvim slučajevima prognoza po percentilu može biti prikladniji pristup. Opisani model je u operativnoj upotrebi od listopada 2017, i dosadašnja prognostička iskustva su relativno dobra.

1. I.I. Gringorten: Conditional probability for an Exact, Noncategorized Initial Condition. *Mon. Weather Rev.* **100** (1972) 796-798.

2. S. Ivatek-Šahdan, *Horizontalna vidljivost na aerodromu Zagreb-Pleso*, Diplomski rad, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb, 1997.

3. J. Juras, Z. Pasarić: CLIPER Forecast as a Reference for Visibility Forecast Evaluation. Poster, EMS, 2006.

### **P-F6: UTJECAJ NAPREZANJA I BROJA SLOJEVA NA OPTIČKA SVOJSTVA 2D ANTIMONA, INDIJA I ALUMINIJA**

Matko Mužević<sup>1</sup>, Igor Lukačević<sup>1</sup>, Maja Varga Pajtler<sup>1</sup>, Sanjeev Kumar Gupta<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Odjel za fiziku, Sveučilište Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku, Trg Ljudevita Gaja 6, Osijek*

<sup>2</sup>*Department of Physics and Electronics, St. Xavier's College, Ahmedabad, Indija*

2D materijali pokazuju se kao potencijalni kandidati u razvoju novih tehnologija uslijed mnogih pogodnih karakteristika, poput malih dimenzija, fleksibilnosti i lako promjenjivih elektronskih svojstava. Za moguću primjenu u optoelektroničkim uređajima, važno je poznavati optička svojstva korištenih materijala i načine njihove moguće modulacije. Kao jednostavan način modulacije svojstava 2D materijala proučavaju se naprezanje (koje se prirodno javlja u interakciji sa supstratom) te povećanje broja slojeva koji međudjeluju van der Waalsovima silama. U ovom radu prikazujemo utjecaj različitih vrsta naprezanja i broja slojeva na elektronska i optička svojstva 2D alotropskih modifikacija antimonija, indija i aluminija.

1. Xu, R. Zou, X. Liu, B. Cheng, H.-M. *Mater. Today* **21** (2018) 391.

2. Zhou, X. Hu, X. Yu, J. Liu, Sh. Shu, Zh. Zhang, Q. Li, H. Ma, Y. Xu, H. Zhai, T. *Adv. Funct. Mater.* **28** (2018) 170658.

3. Singh, D. Gupta, S. K. Sonvane, Y. Lukačević, I. J. *Mater. Chem. C* **4** (2016) 6386.

4. Singh, D. Gupta, S. K. Lukačević, I. Sonvane, Y. *RSC Adv.* **6** (2016) 8006.

**P-F7: UPRAVLJANJE MAGNETSKOM POLARIZACIJOM GRAFENA ELEKTRIČNIM POLJEM U VAN DER WAALSOVIM HETEROSTRUKTURAMA**

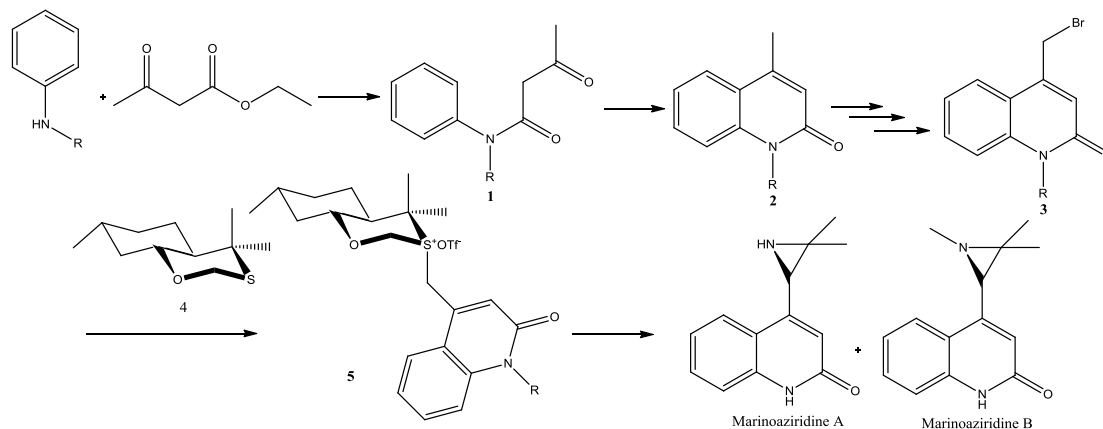
Mihovil Bosnar, Ivor Lončarić, Predrag Lazić  
Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, Zagreb

Promatramo heterostrukture sastavljene od sloja platine, zlata ili heksagonalnog borovog nitrida i grafena položenih na površinu bloka kobalta tako da je grafen odvojen od kobalta nekim od navedenih slojeva. Cilj je pokazati da se grafen u ovakvoj strukturi može lagano pozitivno ili negativno dopirati primjenom malog homogenog električnog polja u smjeru okomitom na površine slojeva sustava i to tako da mu se pritom lako mijenja magnetska polarizacija, pogotovo blizu najvišeg popunjenog stanja, odnosno Fermijevog nivoa. Pokazano je da je sloj između kobalta i grafena nužan da se ovo ponašanje pojavi jer sprječava kemijsku vezu između njih te time čuva elektronsku strukturu grafena, najvažnije mali broj stanja blizu Fermijevog nivoa [1]. Tada je grafen s ostatkom strukture vezan van der Waalsovom vezom te je stoga pri formaciji heterostrukture samo dopiran zbog izjednačenja kemijskog potencijala u heterostrukturi [1]. Dopiranje je pritom spinski ovisno jer je kobalt feromagnet te zbog magnetskog efekta blizine koji uzrokuje slabi feromagnetizam i u grafenu [1]. Primjenom polja se uvjet ravnoteže mijenja i primjećuje se promjena dopiranja i magnetske polarizacije [1]. Pritom su se u izboru međusloja boljim pokazali metali nego heksagonalni borov nitrid jer je u heterostrukturi s metalnim međuslojevima grafen pri formaciji strukture znatno manje dopiran, odnosno Fermijev nivo pada u područje s malo stanja po jedinici energije, što znači da su polja malog iznosa, što povlači male količine preraspodijeljenog naboja, potrebna za značajne promjene broja elektrona blizu Fermijevog nivoa.

1. P. Lazić, K. D. Belaschenko, I. Žutić, *Phys. Rev. B* **79** (2016) 241401.

**P-K1: ASYMMETRIC SYNTHESIS OF MARINOAZIRIDINES AND THEIR DERIVATIVES WITH POTENTIAL BIOLOGICAL EFFECT**Anđela Buljan<sup>1,2</sup>, Irena Dokli<sup>1</sup>, Marin Roje<sup>1,2</sup><sup>1</sup>Ruđer Bošković Institute, Bijenička cesta 54, Zagreb, Croatia<sup>2</sup>Center of Excellence for Marine Bioprospecting-BioProCro, Ruđer Bošković Institute, Zagreb, Croatia

Marinoaziridines A and B are the first aziridine-containing natural products isolated from Gram-negative bacteria from marine sediment.<sup>1</sup> Their absolute configuration is so far unknown as well as their total synthesis. Due to previous research in our group<sup>2</sup>, marinoaziridines can be prepared by the addition of the chiral sulfur ylide derived from Eliel's oxathiane **4**<sup>3</sup> to a carbon-nitrogen double bond of the corresponding ketimine. The synthesis starts with the preparation of acetoacetanilide **1** from suitably protected aniline and ethyl acetoacetate, which cyclizes in the second step to compound **2** under harsh acidic conditions.<sup>4</sup> The compound **2** was also prepared *via* microwave-assisted synthesis that proved to be a better method compared to conventional synthesis. The following research studies, the reaction conditions (power, temperature, time) were optimized for the first step, and the possibility of using the additives was tested in the second step of the reaction. Compound **2** was oxidized to the aldehyde then reduced to the alcohol and converted to the corresponding bromide **3**. Further, the coupling of compound **3** to oxathiane **4** will be investigated for the preparation of the chiral sulfonium salt **5** and the possibility of addition to the various *N*-protected ketimines for the preparation of enantiomerically pure marinoaziridines A and B.

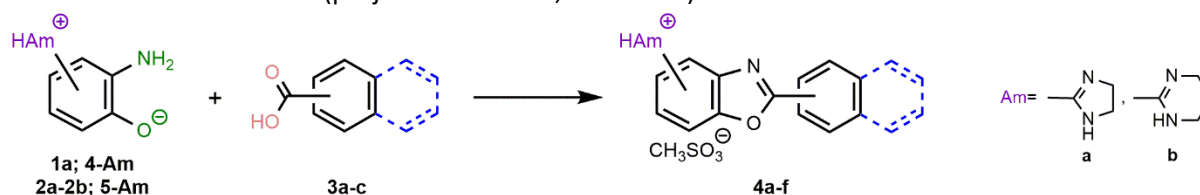


1. E. J. Choi, S.-J. Nam, L. Paul, C. A. Kauffman, P. R. Jensen, W. Fenical, *Chem. Biol.* **22** (2015) 1270-1279.
2. I. Stipetić, M. Roje, Z. Hameršak, *Synlett* **20** (2008) 3149-3152.
3. E. L. Eliel, J. L. Lynch, *Tetrahedron Lett.* **22** (1981) 2855-2858.
4. A. S. C. Fonseca, M. S. T. Gonçalves, S. P. G. Costa, *Amino Acids* **39** (2010) 699-712.

**P-K2: SINTEZA I ANTIPROLIFERATIVNA AKTIVNOST CIKLIČKIH AMIDINO-SUPSTITUIRANIH 2-ARILBENZOKSAZOLA**Lucija Ptiček<sup>1</sup>, Petra Grbčić<sup>2</sup>, Sandra Kraljević Pavelić<sup>2</sup>, Livio Racané<sup>1</sup><sup>1</sup>Zavod za primijenjenu kemiju, Tekstilno-tehnološki fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Prilaz baruna Filipovića 28a, Zagreb<sup>2</sup>Odjel za biotehnologiju, Sveučilište u Rijeci, Radmile Matejčić 2, Rijeka

Prema ranije razrađenom sintetskom putu za pripremu amidino-supstituiranih benzotiazola<sup>1</sup> priređeni su dosad neopisani izomerni, različito amidino-supstituirani 2-aminofenoli. Priprava uključuje kiselokataliziranu Pinnerovu reakciju čime su izolirani amidino-supstituirani 2-aminofenoli u obliku zwitteriona. Tako dobiveni prekursori predstavljaju građevne jedinice za kondenzacijske reakcije sa komercijalno dostupnim karboksilnim kiselinama te omogućuju daljnju sintezu velikog broja raznolikih, potencijalno biološki aktivnih spojeva. Cilj ovog rada bila je usporedba antiproliferativne aktivnosti različitih cikličkih

amidino-supstituiranih 2-arilbenzazola. Nedavno su objavljena istraživanja antiproliferativne aktivnosti peterocikličkih imidazolinil amidino-supstituiranih 2-aril- i 2-heteroarilbenzotiazola na četiri tumorske stanične linije. Predstavljeni su rezultati u mikromolarnim koncentracijama za inhibiciju rasta stanica u rasponu vrijednosti  $IC_{50} = 0,3 - 29,1^2$ . Ovdje je opisana sinteza šest različitih amidino-supstituiranih 2-arilbenzoksazola mesilata **4a – 4f** dobivenih u reakcijama kondenzacije izomernih cikličkih amidino-supstituiranih 2-aminofenola sa tri različite aromatske karboksilne kiseline te *in vitro* ispitivanje njihove antiproliferativne aktivnosti na tumorskim staničnim linijama dukalnog adenokarcinoma gušterače (CFPAC-1), metastatskog kolorektalnog adenokarcinoma (SW620), hepatocelularnog karcinoma jetre (HepG2) i karcinoma grlića maternice (HeLa) kao i na zdravim stanicama fibroblasta ljudske kože (HFF-1). Novo priređeni analogni benzoksazolski derivati pokazali su antiproliferativnu aktivnost u rasponu koncentracija  $IC_{50} = 0,16 - 24,26 \mu M$  na testiranim staničnim linijama što ukazuje na podjednako dobru antitumorsku aktivnost, neovisno o ispitivanim heterocikličkim jezgrama. Ovo istraživanje financira Hrvatska zaklada za znanost (projekt HRZZ-4379, AntioxPot).



1. L. Racané, V. Tralić Kulenović, Z. Mihalić, G. Pavlović, G. Karminski Zamola, *Tetrahedron* **64** (2008) 11594-11602.
2. L. Racané, L. Ptiček, M. Sedić, P. Grbčić, S. Kraljević Pavelić, B. Bertoša, I. Sović, G. Karminski Zamola, *Mol. Diversity* **22** (2018) 723-741.

### P-K3: SURFACTANT PROPERTIES OF ALKYL QUINUCLIDINE-3-OLS

Linda Bazina, Perica Bošković, Matilda Šprung, Renata Odžak

<sup>1</sup>Faculty of Science, University of Split, R. Boškovića 33, Split, Croatia

Quaternary ammonium compounds (QACs) are group of compounds with broad spectrum applications. Owing to their amphiphilic nature, QACs reduce surface tension and form micelles allowing dispersion in a liquid. Due to this ability QACs are incorporated into soaps, cosmetics, hair dyes and detergents. [1]

Previously synthesized QACs consisting of a quinuclidine-3-ol core and long side alkyl chains (C10, C12, C14) have shown promising antimicrobial potential and low cytotoxicity. [2] Given their potential application, here we have additionally investigated thermodynamic properties and self-assembly of these surfactants (Figure 1.) by measuring conductivity, dynamic light scattering (DLS) and Zeta-potential.

The critical micellar concentration (*c.m.c.*), the degree of micelle ionization ( $\beta$ ) and standard Gibbs free energy ( $\Delta G_{mic}^0$ ) were determined using conductivity measurement. The results showed that *c.m.c.* value is between  $3.4$  and  $23.8 \cdot 10^{-3} \text{ mol L}^{-1}$  at 298 K, and the Gibbs energy of micellization have negative values what proves the process is spontaneous. In order to analyze formed aggregations, DLS and Zeta-potential measurements were taken and they show similar size distribution for all surfactants with excellent uniformity.

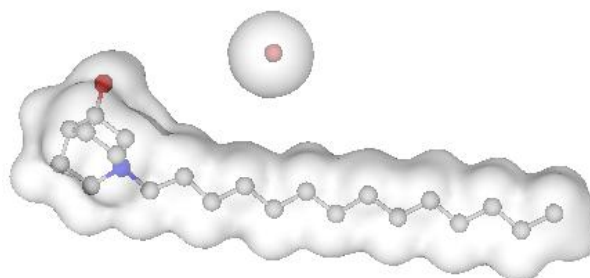


Figure 1. Van der Waals surface of QAC with the longest alkyl chain



Due to the measurements, our QACs have promising surfactants properties which are depended on the chain length since the *c.m.c.* decreases with increasing the length of alkyl chain.

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

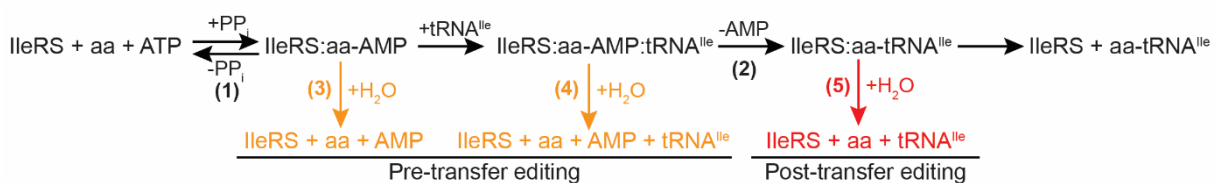
2. L. Bazina, A. Maravić, L. Krce, B. Soldo, R. Odžak, V. Bučević Popović, I. Aviani, I. Primožič, M. Šprung, *Eur J Med Chem.* **163** (2019) 626-635.

#### P-K4: MEHANIZMI DISKRIMINACIJE IZOLEUCIL-tRNA-SINTETAZE PREMA $\alpha$ -AMINOBUTIRATU I NJEGOVIH FLUORIRANIM ANALOZIMA

Igor Živković, Ita Gruić-Sovulj

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

Izoleucil-tRNA-sintetaza (IleRS) je enzim koji katalizira aktivaciju i prijenos aminokiseline na tRNA<sup>Ile</sup> (slika 1, crno). Pri tome nastaje Ile-tRNA<sup>Ile</sup> koja je supstrat ribosomske sinteze proteina. IleRS aktivira i prenosi na tRNA<sup>Ile</sup> i nepripadne aminokiseline valin i norvalin, što može uzrokovati pogrešku u sintezi proteina. Norvalin je neproteinogena aminokiselina koja se može akumulirati u stanici te je, kao i valin, jednu metilensku skupinu manji od izoleucina. Kako bi se pogreška u sintezi proteina spriječila, IleRS primjenjuje popravke pogreške prije i poslije prijenosa (slika 1, narančasto/crveno). Da bismo istražili kako smanjenje hidrofobnosti utječe na diskriminaciju aminokiselina, kinetički smo okarakterizirali  $\alpha$ -aminobutirat ( $\alpha$ -ABA) u reakcijama IleRS.  $\alpha$ -ABA je, kao i norvalin, neproteinogena metabolička aminokiselina, a od izoleucina je manja dvije metilenske skupine. Eksperimenti su pokazali kako IleRS aktivira i prenosi  $\alpha$ -ABA na tRNA<sup>Ile</sup> s brzinama sličnim kao i izoleucin. Ipak, IleRS diskriminira  $\alpha$ -ABA temeljno na razini  $K_m$  čija je vrijednost 3500 puta veća nego  $K_m$  izoleucina. Iako se  $\alpha$ -ABA uspješno aktivira i prenosi na tRNA<sup>Ile</sup>, nije opažena akumulacija  $\alpha$ -ABA-tRNA<sup>Ile</sup> zbog aktivnih popravaka pogreške IleRS. Zaključujemo kako smanjenje hidrofobnosti temeljno utječe na vezanje aminokiseline ( $K_m$  efekt) dok je utjecaj na brzine reakcija kataliziranih s IleRS malen. Nadalje, kako bismo istražili hoće li povećanje hidrofobnosti uslijed fluoriranja utjecati na diskriminaciju  $\alpha$ -ABA, istražili smo kinetiku di- i tri- $\gamma$ -fluoriranih analoga  $\alpha$ -ABA u reakcijama IleRS. Dodatak fluora temeljno utječe na smanjenje brzine aktivacije (do 5 puta), dok je efekt na vezanje supstrata i na reakcije popravka pogreške iznenađujuće malen. Dakle, u slučaju IleRS, fluoriranje  $\alpha$ -ABA ne nadoknađuje gubitak hidrofobnih interakcija uzrokovan smanjenjem veličine supstrata. Nadalje, naši rezultati sugeriraju kako „polarna hidrofobnost“, specifično svojstvo fluora, ima negativan utjecaj na vezanje supstrata u aktivno mjesto IleRS. Nepredvidljivost interakcija fluora s enzimom može učiniti reinženjering aminoacil-tRNA-sintetaza, s ciljem efikasnijeg ugrađivanja fluoriranih aminokiselina u proteine, znatno zahtjevnijim nego što se očekivalo.



Slika 1. Shema reakcija izoleucil-tRNA-sintetaze.

**P-K5: COMPUTATIONAL AND EXPERIMENTAL STUDY OF HYDROGEN ATOM REACTIONS WITH HALOGENATED ORGANIC COMPOUNDS IN AQUEOUS SOLUTIONS**

Ivana Nikšić-Franjić<sup>1</sup>, Igor Sviben<sup>2</sup>, Marija Bonifačić<sup>2</sup>, Ivan Ljubić<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Department of Physical Chemistry, Ruđer Bošković Institute, Bijenička cesta 54, Zagreb, Croatia

<sup>2</sup>Department of Materials Chemistry, Ruđer Bošković Institute, Bijenička cesta 54, Zagreb, Croatia

Free radical reactions in aqueous media typically exhibit a rich variety of fundamentally important reaction mechanisms in close competition. In the focus of our research are reactions of hydrogen atom which take place in non-buffered and buffered (bicarbonate or phosphate) aqueous media. We present experimental and theoretical studies of the H atom in reaction with various haloorganic substrates, such as monohaloacetates (chloroacetate, bromoacetate, and iodoacetate) and a modified nucleobase 5-bromouracil. The H atom is experimentally generated as a primary water radical by the steady state  $\gamma$ -radiolysis of water solutions. The reaction mechanisms and rates are computed in the framework of density functional theory in conjunction with the polarizable continuum model (PCM) for an implicit description of the water solvent. [1-3] Of special interest is a possibility that the reduction of the haloorganic substrates by the H atom could follow the proton-coupled electron transfer (PCET) route. PCET is a ubiquitous reaction mechanism that is of vast importance to energy conversion in biological and man-made processes as it normally provides the kinetically most favorable means of transfer of the elementary charge. The prospect of PCET occurring in these systems is fascinating because this would imply disintegration of the H atom to the constituting proton and electron thereby representing the most fundamental instance of the process. The pathways that are expected to be in competition with the PCET are hydrogen transfer (HAT), the direct abstraction of the halogen atoms, substitutions and additions. Especially indicative of the PCET would be increase in the dehalogenation yields in the presence of the basic buffer anions, which fulfill the role of external proton acceptors thus promoting the PCET pathway.

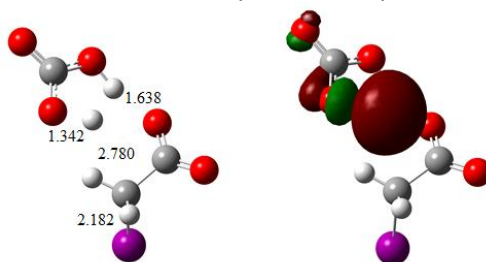


Figure 1: The PCET transition state and its singly occupied molecular orbital (SOMO) in the reaction of H atom with iodoacetate in presence of the  $\text{HCO}_3^-$  anion (distances in Å).

1. I. Džeba, M. Bonifačić, I. Nikšić-Franjić and I. Ljubić, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20** (2018) 19829-19840.
2. I. Ljubić, A. Sabljčić and M. Bonifačić, *J. Phys. Chem. B* **120** (2016) 11810-11820.
3. I. Ljubić, B. Matasović and M. Bonifačić, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **41** (2013) 18001-18011.

**P-K6: KARAKTERIZACIJA INTERAKCIJA DIPEPTIDIL-PEPTIDAZE III S DOMENOM KELCH PROTEINA KEAP1 - RAČUNALNI I EKSPERIMENTALNI PRISTUP**

Sara Matić<sup>1</sup>, Mihaela Matovina<sup>1</sup>, Filip Šupljika<sup>2</sup>, Ivo Crnolatac<sup>1</sup>, Sanja Tomic<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 34, Zagreb

<sup>2</sup>Prehrambeno-biotehnološki fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Pierottijeva 6, Zagreb

Dipeptidil-peptidaza III (DPP III) je cink metalo-egzopeptidaza iz porodice M49. Fiziološka uloga DPP III nije potpuno istražena, no sve je više eksperimentalnih dokaza o uključenosti DPP III u razvoj određenih vrsta raka kod ljudi, što se povezuje s ulogom DPP III u signalnom putu Keap1-Nrf2 [1-3]. Keap1 je stanični senzor oksidativnog stresa i djeluje kao citosolni represor transkripcijskog faktora Nrf2. U uvjetima oksidativnog stresa, Nrf2 se oslobađa s proteina Keap1, što rezultira povećanim prijenosom Nrf2 u jezgru, gdje potiče ekspresiju velikog broja gena koji kodiraju proteine odgovora na oksidativni

stres [4]. Za mogućnost kompetitivnog vezanja DPP III na Kelch domenu proteina Keap1 ključna je u petlja s motivom ETGE, koji odgovara veznom motivu proteina Nrf2. Vezanjem DPP III na Keap1, Nrf2 se oslobađa te dolazi do pojačane ekspresije njegovih ciljnih gena, što može dovesti do otpornosti stanica raka na kemoterapijske lijekove [2].

Cilj ovog rada je okarakterizirati interakciju DPP III s Kelch domenom kako bi bolje razumjeli ulogu DPP III u karcinogenezi. U tu svrhu koristimo računalne i eksperimentalne metode kao što su simulacije molekulske dinamike, izotermalna titracijska kalorimetrija (ITC), termoforeza (MST) i cirkularni dikroizam (CD). Razumijevanje interakcije DPP III-Keap1 na molekularnoj razini uz poznavanje termodinamičkih parametara vezanja korisno je za daljnja proučavanja čimbenika koji utječu na ovu interakciju i dobivanje boljeg uvida u ulogu DPP III u odgovoru na oksidativni stres.

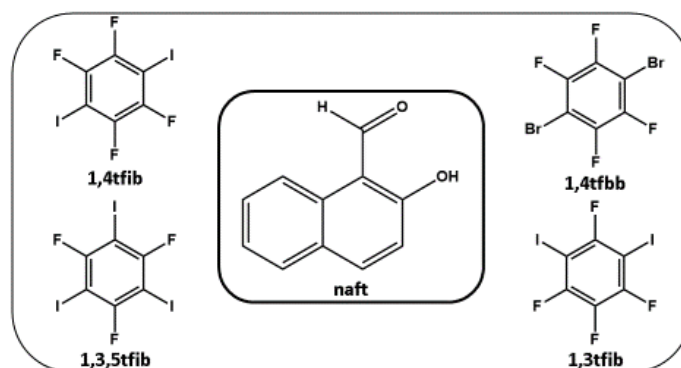
1. B.E. Hast, D. Goldfarb, K.M. Mulvaney, M.A. Hast, P.F. Siesser, F. Yan, D.N. Hayes, M.B. Major, *Cancer Res.* **73** (2013) 2199-2210.
2. M.C. Jaramillo, D.D. Zhang, *Genes Dev.* **27** (2013) 2179-2191.
3. K. Lu, A.L. Alcivar, J. Ma, T.K. Foo, S. Zywea, A. Mahdi, *Cancer Res.* **77** (2017) 2881- 2892.
4. T. Nguyen, P. Nioi, C.B. Pickett, *J. Biol. Chem.* **284** (2009) 13291-13295.

### P-K7: KOMPETICIJA ALDEHIDNE I HIDROKSILNE SKUPINE U OSTVARIVANJU HALOGENSKE VEZE U KOKRISTALIMA 2-HIDROKSI-1-NAFTALDEHIDA I PERFLUORIRANIH HALOGENBENZENA

Luka Fotović, Vinko Nemeč, Vladimir Stilinović, Dominik Cinčić

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

Tijekom dosadašnjeg istraživanja halogenske veze, velik interes pridali smo izučavanju kisikovog atoma karbonilne, hidroksilne i metoksi skupine kao akceptora halogenske veze.<sup>1-3</sup> U ovom radu cilj je bio ispitati sklonost aldehydnog atoma kisika sudjelovanju u halogenskoj vezi u kompeticiji s hidroksilnim. Kako bi se to ispitalo kokristaliziran je 2-hidroksi-1-naftaldehid (**naft**) s komercijalno dostupnim perfluoriranim halogenbenzenima: 1,4-dijodtetrafluorbenzenom (**1,4tfib**), 1,3-dijodtetrafluorbenzenom (**1,3tfib**), 1,3,5-trijodtrifluorbenzenom (**1,3,5tfib**) i 1,4-dibromtetrafluorbenzenom (**1,4tfbb**) kao donorima halogenske veze.<sup>4</sup>



Mehanokemijskom sintezom dobiveni su kokristali sa sva četiri korištena donora halogenske veze: (**naft**)<sub>2</sub>(**1,4tfib**), (**naft**)<sub>2</sub>(**1,4tfbb**), (**naft**)(**1,3tfib**) i (**naft**)(**1,3,5tfib**). Stehiometrijski odnos molekula donora i akceptora u priređenim kokristalima potvrđen je difrakcijom rentgenskog zračenja na praškastim uzorcima te diferencijalnom pretražnom kalorimetrijom. Kristalizacijom iz otopine priređeni su jedinični kristali (**naft**)<sub>2</sub>(**1,4tfib**), (**naft**)<sub>2</sub>(**1,4tfbb**), (**naft**)(**1,3tfib**). Difrakcijom rentgenskog zračenja na jediničnim kristalima određene su im kristalne i molekulske strukture te je utvrđeno da se u kokristalima s **1,4tfib** i **1,4tfbb** molekule povezuju halogenskim vezama I...O<sub>ald</sub> čime je potvrđen akceptorski potencijal atoma kisika aldehydne skupine. Nasuprot tome, u kokristalu s **1,3tfib** molekule povezuju se halogenskim vezama I...O<sub>OH</sub> i I...I dok atom kisika aldehydne skupine sudjeluje u vodikovoj vezi vrste C-H...O<sub>ald</sub>. Svi su kokristali stabilni pri sobnoj temperaturi, a tališta su im u rasponu od 52 do 90 °C.

1. V. Nemeč, L. Fotović, T. Friščić, D. Cinčić, *Cryst. Growth. Des.* **17** (2017) 6169-6173.
2. A. Carletta, M. Zbačnik, M. Van Gysel, M. Vitković, N. Tumanov, V. Stilinović, J. Wouters, D. Cinčić, *Cryst. Growth. Des.* **18** (2018) 6833-6842.
3. A. Carletta, M. Zbačnik, M. Vitković, N. Tumanov, V. Stilinović, J. Wouters, D. Cinčić, *CrystEngComm* **20** (2018) 5332-5339.
4. C. R. Groom, I. J. Bruno, M. P. Lightfoot, S. C. Ward, *Acta Cryst. Sect. B. Struct. Sci.* **B72** (2016) 171-179.

## P-K8: USPOREDBA ANALOGNIH STRUKTURA BAKROVIH BENZOATA I SALICILATA

Aleksandar Meštrić, Nenad Judaš

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

Bakrovi(II) karboksilati su molekule u kojima su dva atoma bakra O,O' mostovima premoštena s četiri karboksilatna liganda. Takva struktura svojim oblikom podsjeća na vodenično kolo (eng. *paddlewheel*). Koordinacijski poliedri bakrovih iona su kvadratno-piramidne građe, jer se u apikalne položaje za njih vežu različite Lewisove baze (npr. molekule vode, alkohola ili aminske derivata).

Mogućnost apikalnog vezanja različitih adenada čini ove spojeve dobrim polaznim građevnim jedinicama u području kristalnog inženjerstva, npr. za pripremu mrežastih kristalnih struktura koje sadrže ione metala (MOF). [1,2,3].

Priprava ovih spojeva uglavnom je jednostavna. CSD sadrži približno 1500 setova strukturnih podataka za bakrove(II) karboksilate, no većina njih se odnosi na bakrove acetate i benzoate dok su strukture s ostalim karboksilnim kiselinama zastupljene ili s tek nekoliko setova, ili uopće ne postoje. [2] Zbog toga smo odlučili istražiti mogućnosti pripreme 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)** katena-tetra- $\mu$ -salicilato- $\kappa^8$ O:O'-bis[(4,4'-bipiridin)dibakar(II)] i

**(B)** tetra- $\mu$ -benzoato- $\kappa^8$ O:O'-bis[bis(metanol)dibakar(II)].

### Kristalni podatci

**(A)** C<sub>48</sub>H<sub>28</sub>O<sub>16</sub>N<sub>2</sub>Cu<sub>2</sub>,  $M_r = 1015,83$ , monoklinski,  $P4_2/m n m$ ,  $a = 9,9113(3) \text{ \AA}$ ,  $b = 9,9113(3) \text{ \AA}$ ,  $c = 19,4032(10) \text{ \AA}$ ,  $\alpha = \beta = \gamma = 90$ ,  $V = 1906,0(1) \text{ \AA}^3$ ,  $Z = 2$ ,  $D_c = 2,368 \text{ g cm}^{-3}$ ,  $\lambda(\text{MoK}\alpha) = 0,71073 \text{ \AA}$ ,  $R = 0,0644$ ,  $wR = 0,1613$  za 502 difrakcijskih maksimuma za koje vrijedi [ $F_o > 4\sigma(F_o)$ ] od ukupno 1844 prikupljenih difrakcijskih maksimuma i 94 promjenjivih parametara.

**(B)** C<sub>60</sub>H<sub>52</sub>O<sub>16</sub>Cu<sub>4</sub>,  $M_r = 1283,23$ , monoklinski,  $I2/a$ ,  $a = 22,2626(15) \text{ \AA}$ ,  $b = 6,8060(5) \text{ \AA}$ ,  $c = 42,509(49) \text{ \AA}$ ,  $\beta = 98,595(5)$ ,  $V = 6368,64(49) \text{ \AA}^3$ ,  $Z = 8$ ,  $D_c = 1,404 \text{ g cm}^{-3}$ ,  $\lambda(\text{MoK}\alpha) = 0,71073 \text{ \AA}$ ,  $R = 0,0455$ ,  $wR = 0,1153$  za 2924 difrakcijskih maksimuma za koje vrijedi [ $F_o > 4\sigma(F_o)$ ] od ukupno 13163 prikupljenih difrakcijskih maksimuma i 381 promjenjivih parametara.

Kristalne strukture dobivenih spojeva uspoređene su s kristalnim strukturama analognih bakrovih karboksilata. [4]

1. R. Bertani, P. Sgarbossa, A. Venzo, F. Lelj, M. Amatic, G. Resnati, T. Pilati, P. Metrangolo, G. Terraneo, *Coord. Chem. Rev.* **254** (2010) 677-695.
2. C. R. Groom, I. J. Bruno, M. P. Lightfoot, S. C. Ward, *Acta Cryst.*, **B 72** (2016) 171-179.
3. C. B. Aakeröy, N. Schultheiss i J. Desper, *Inorg. Chem.* **44** (2005) 4983-4991.
4. A. Meštrić, I. Pavličić, S. Čičić, N. Judaš, The Twenty-Sixth Croatian-Slovenian Crystallographic Meeting, Book of abstracts, 2018.

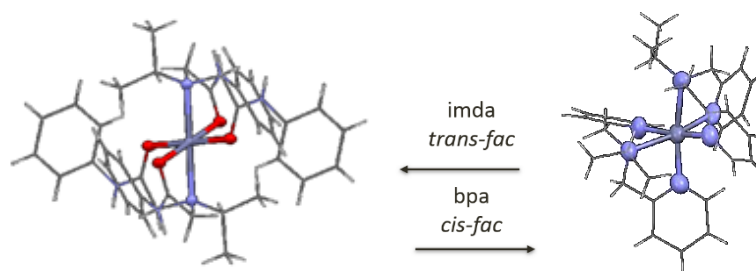
**P-K9: TRIDENTATNI DUŠIKOVI LIGANDI I STEREOKEMIJA NJIHOVIH HEKSAKOORDINIRANIH KOMPLEKSA S PRIJELAZNIM METALIMA**

Natalija Pantalon Juraj, Srećko I. Kirin

Zavod za kemiju materijala, Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, Zagreb

Heksakoordinirani kompleksi prijelaznih metala s tridentatnim liganadima kao što su **imda** (iminodiacetamid) i **bpa** (bis-(2-pikolil)amin), mogu imati različite koordinacijske poliedre: oktaedar i trigonsku prizmu. U slučaju oktaedra, mogući su različiti geometrijski izomeri (*mer*, *trans-fac* i *cis-fac*).<sup>1</sup> U literaturi postoji opsežna karakterizacija **imda**, **bpa** i sličnih sustava u čvrstom stanju, no karakterizacije u otopini ima značajno manje.

U ovom radu istraživana su dva liganđna sustava različitih stereokemijskih preferenci-**imda** i **bpa**. Dok se pregledom literature može uočiti da **bpa**<sup>2</sup> tvori uglavnom *cis-fac*, **imda**<sup>3</sup> tvori uglavnom *trans-fac* izomere. Cilj ovog istraživanja je ispitati utjecaje na stereokemiju kompleksa, kao što su skupine različitih elektronskih i steričkih svojstava na liganđu te protuoini različitih koordinacijskih svojstava. Kompleksi su također karakterizirani u otopini NMR i UV-Vis spektroskopijom. U čvrstom stanju kompleksi su karakterizirani difrakcijom X-zraka na monokristalnim i praškastim uzorcima, IR spektroskopijom i termogravimetrijom. Određeno je devet kristalnih struktura **imda** kompleksa ML<sub>2</sub> stehiometrije te osam struktura **bpa** kompleksa različitih stehiometrija i koordinacijskih brojeva.

Slika 1. *Trans-fac* kompleks  $[Zn(iPr-imda)_2](BF_4)_2$  i *cis-fac* kompleks  $[Zn(iPr-bpa)_2](ClO_4)_2$ 

1. Đ. Škalamera, E. Sanders, R. Vianello, A. Maršavelski, A. Pevec, I. Turel, S. I. Kirin, *Dalt. Trans.* **45** (2016) 2845–2858.
2. J. T. Simmons, J. R. Allen, D. R. Morris, R. J. Clark, C. W. Levenson, M. W. Davidson, L. Zhu, *Inorg. Chem.*, **52**, **10** (2013) 5838–5850.
3. N. Smrečki, B. M. Kukovec, M. Đaković, Z. Popović, *Polyhedron* **93** (2015) 106–117.

**P-K10: NITROCHLORANILATE – A NOVEL HETEROSUBSTITUTED 2,5-DIHYDROXYQUINOID LIGAND WITH A GREAT POTENTIAL FOR DESIGN OF COORDINATION POLYMERS**

Valentina Milašinović, Krešimir Molčanov

Ruđer Bošković Institute, Bijenička cesta 54, Zagreb, Croatia

2,5-dihydroxyquinones (anilic acids) are a class of versatile organic ligands interesting for design of novel coordination polymers and metal-organic frameworks. They are able to coordinate metals in terminal bidentate and bridging (bis)bidentate modes, and are thus able to form coordination polymers of various topologies [1]. The most commonly used ones are unsubstituted 2,5-dihydroxyquinone [2] and its dichloro-analogue, chloranilic acid (3,6-dichloro-2,5-dihydroxyquinone) [3].

Substituents on positions 3 and 6 of the quinoid ring influence electronic structure of the ring through inductive effect, thus enhancing properties such as acidity, electronegativity (the rings may act as electron acceptors), optical properties (colour and possible luminescence) and capability to coordinate metals. The ligands are also able to mediate magnetic exchange interactions [1].

So far, all studied anilic acids were symmetrically substituted (i.e. substituents at positions 3 and 6 are identical), and pioneering work with the first asymmetrically substituted analogue, chlorocyananilic acid (3-chloro-6-cyano-2,5-dihydroxyquinone) revealed interesting luminescent properties [4], promising for design of optoelectronic materials. Here we present a novel asymmetrically substituted ligand, nitrochloranilic acid (3-nitro-6-chloro-2,5-dihydroxyquinone, NCA) and first of its transition metal complexes. In a mononuclear complex  $(\text{Hpy})_2[\text{Mn}(\text{NCA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$  it behaves as a terminal bidentate ligand, while in 1D coordination polymers  $[\text{Mn}_2(\text{NCA})(\text{H}_2\text{O})_5 \cdot 3\text{H}_2\text{O}]_n$ ,  $\{[\text{Co}(\text{NCA})(\text{phen})] \cdot \text{EtOH}\}_n$  and  $[\text{Cu}(\text{NCA})(\text{H}_2\text{O})_2]_n \cdot \text{H}_2\text{O}$  it acts as a bridging (bis)bidentate ligand. In the binuclear  $[\text{Cu}(\text{NCA})(\text{bpy})]_2$  it bridges two monomeric units  $[\text{Cu}(\text{NCA})(\text{bpy})]$  by bonding to Cu atom through its nitro group. The work was financed by the Croatian Science Foundation, grant no. IP-2014-09-4079.

1. L. Androš Dubraja, K. Molčanov, D. Žilić, B. Kojić-Prodić, E. Wenger, *New J. Chem.* **41** (2017) 6784-6794; M. Jurić, K. Molčanov, B. Kojić-Prodić, *Dalton Trans.* **43** (2014) 7208-7218.
2. S. Kitagawa, S. Kawata, *Coord. Chem. Rev.* **224** (2002) 11-34.
3. S. Benmansour, C. Valles-Garcia, P. Gomez-Claramunt, G. Minguez-Espallargas, C. J. Gomez-Garcia, *Inorg. Chem.* **54** (2015) 5410-5418; M. Jurić, K. Molčanov, D. Žilić, B. Kojić-Prodić, *RSC Adv.* **6** (2016) 62785-62796; M. Atzori, F. Pop, P. Auban-Senzier, R. Clerac, E. Canadell, M. L. Mercuri, N. Avarvari, *Inorg. Chem.* **54** (2015) 3643-3655; M. Jurić, K. Molčanov, B. Kojić-Prodić, *Dalton Trans.* **42** (2013) 15756-15765.
4. M. Atzori, F. Artizzu, L. Marchio, D. Loche, A. Caneschi, A. Serpe, P. Deplano, N. Avarvari, M. L. Mercuri, *Dalton Trans.* **44** (2015) 15786-15802.

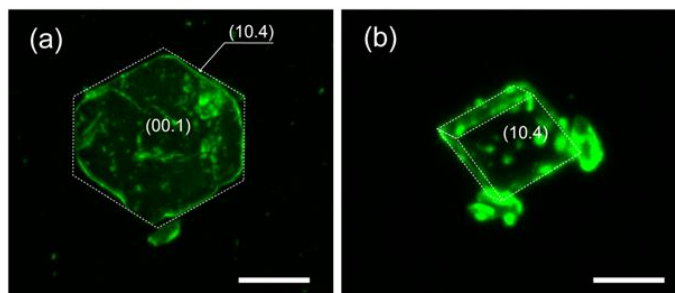
#### P-K11: PRIPREMA I ADSORPCIJSKA SVOJSTVA PLOČASTIH {001} KRISTALA KALCITA

Nives Matijaković<sup>1</sup>, Giulia Magnabosco<sup>2</sup>, Francesco Scarpino<sup>2</sup>, Simona Fermani<sup>2</sup>, Giuseppe Falini<sup>2</sup>, Damir Kralj<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Laboratorij za procese taloženja, Zavod za kemiju materijala, Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54 Zagreb

<sup>2</sup>Zavod za kemiju "Giacomo Ciamician", Alma Mater Studiorum – Sveučilište u Bologni, via Selmi 2, Bologna, Italija

Termodinamički najstabilniji polimorf kalcijeva karbonata, kalcit, karakteristične je romboedarske morfologije, s izraženim {104} plohamama. Taloženjem kalcita iz vodenih sustava dopiranih s  $\text{Li}^+$ , uzrokuje nastajanje nestabilnih {001} ploha. Pri izrazito visokim koncentracijama litija, {001} plohe postaju dominantne, tako da kristali kalcita poprimaju pločastu strukturu<sup>1</sup>. Istraživanja mehanizama taloženja kalcijevih karbonata, kao i interakcija različitih skupina otopljenih aditiva s površinom kristala, privlače sve veću pozornost zbog moguće primjene, kao na primjer u farmaciji<sup>2</sup>. Cilj ovoga rada bio je pripremiti kristale kalcita glatkih {001} ploha, istražiti njihova adsorpcijska svojstva te ih usporediti s romboedarskim {104} kalcitom. Taloženje pločastog kalcita proučavano je u sustavima s različitim omjerom  $c(\text{Ca}^{2+}) / c(\text{Li}^+)$ , uz korištenje intenzivnih pulseva ultrazvuka. Adsorpcijska mjerenja rađena su s obojenim modelnim molekulama, koje pri eksperimentalnim uvjetima posjeduju različit naboj te na kristalima s izraženim {001} ili {104} plohamama (Sl. 1). Pri tome je utvrđeno da je adsorpcija pozitivno nabijenog kristal violeta, u odnosu na negativan kalcein, snažnije izražena na obje morfologije kristala, dok je adsorpcija kalceina na pločastom kalcitu značajno inhibirana.



Slika 1. Prikaz adsorbiranog kalceina na kristalima kalcita s izraženim (a) {001} i (b) {104} plohamama korištenjem konfokalne mikroskopije

1. D. Aquilano, L. Pastero, *Cryst. Res. Technol.* **48** (2013) 819-839.
2. G. Magnabosco, M. Di Giosia, I. Polishchuk, E. Weber, S. Fermani, A. Bottoni, F. Zerbetto, P. G. Pelicci, B. Pokroy, S. Rapino, G. Falini, M. Calvaresi, *Adv. Health. Mater.* **4** (2015) 1510–1516.

### **P-K12: USPOREDBA 1,3- i 1,4-DIJODTETRAFLUORBENZENA KAO DONORA HALOGENSKE VEZE U KRISTALNOM INŽENJERSTVU**

Nikola Bedeković<sup>1</sup>, Vladimir Stilinović<sup>1</sup>, Dominik Cinčić<sup>1</sup>, Tomislav Friščić<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Horvatovac 102a, Zagreb*

<sup>2</sup>*Department of Chemistry, McGill University, 801 Sherbrooke St. W., H3A 0B8 Montreal, Kanada*

Unazad dva desetljeća, halogenska veza [1] privukla je velik interes u području kemije čvrstog stanja i kristalnog inženjerstva kao razmjerno jaka i usmjerena nekovalentna interakcija, primijenjiva za sintezu novih organskih i metaloorganskih materijala. Najčešće korišteni donori halogenske veze u kokristalima pripremljenim do danas su perhalogenirani aromatski ugljikovodici, od kojih je najveći broj višekomponentnih krutina pripremljen s 1,4-dijodtetrafluorbenzenom (**1,4-tfib**, 337 struktura). [2] Njegov *meta*-izomer dijodtetrafluorbenzena (**1,3-tfib**), iako je komercijalno dostupan, slabo je proučen kao donor halogenske veze. Stoga je u ovome radu predstavljeno sustavno i usporedno istraživanje kokristala **1,3-tfib** i **1,4-tfib** sa serijom monotopičnih i ditopičnih Lewisovih baza. [3] Pripremljeno je ukupno 14 kokristala s **1,3-tfib** te 9 kokristala s **1,4-tfib** kojima su riješene molekulske i kristalne strukture. Iako kokristali oba donora imaju slična tališta te su duljine halogenskih veza I · · · N podjednake, kristalne su im strukture i stehiometrija različite. U kombinaciji s ditopičnim akceptorima oba donora tvore lance, dok s monotopičnim akceptorima **1,4-tfib** većinom tvori diskretne molekulske komplekse stehiometrije 2:1, a **1,3-tfib** stehiometrije 1:1. S obzirom da su vrijednosti elektrostatskih potencijala na atomima joda u molekulama donora vrlo slične, opažena razlika u strukturi i sastavu pripremljenih kokristala nastaje zbog promjene pakiranja molekula u kristalu kada se linearni donor halogenske veze **1,4-tfib** zamijeni s nelinearnim **1,3-tfib**. To ukazuje da, uz halogensku vezu, velik utjecaj na stehiometriju konačnog spoja, te motive povezivanja molekula u supramolekulske strukture, ima i učinkovitost pakiranja molekula u kristalu.

1. G. R. Desiraju, P. S. Ho, L. Kloo, A. C. Legon, R. Marquardt, P. Metrangolo, P. Politzer, G. Resnati, K. Rissanen, *Pure Appl. Chem.* **85** (2013) 1711.
2. C. R. Groom, I. J. Bruno, M. P. Lightfoot, S. C. Ward, *Acta Cryst. Sect. B. Struct. Sci. B* **72** (2016) 171.
3. N. Bedeković, V. Stilinović, T. Friščić, D. Cinčić, *New. J. Chem.* **42** (2018) 10584.

### **P-K13: KOMPETICIJA SUPRAMOLEKULSKIH SINTONA U KRISTALIMA MONOSUPSTITUIRANIH KARBONOHIDRAZIDA**

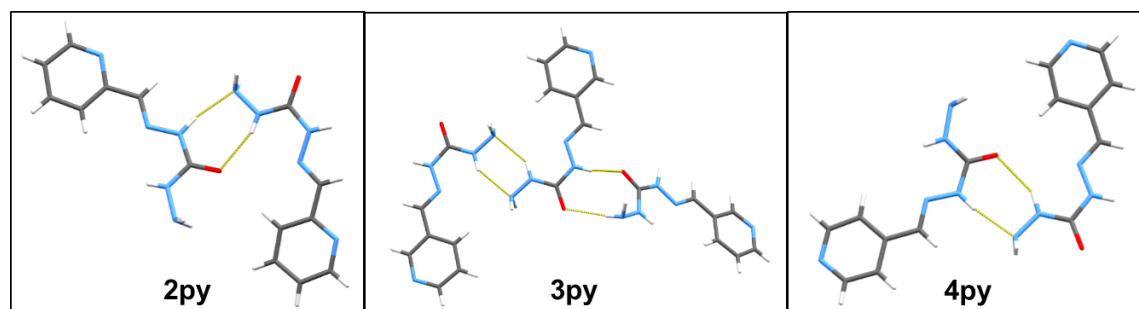
Edi Topić, Mirta Rubčić

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

Sposobnost predviđanja strukture i svojstava materijala u čvrstom stanju predstavlja jedan od središnjih ciljeva kemije čvrstog stanja te računalne kemije. Različiti načini međumolekulskog udruživanja jedinki u krutinama dovode do pojave polimorfâ, solvatâ i amorfnih fazâ, čija se fizikalno-kemijska svojstva, poput stabilnosti, topljivosti i termičkog ponašanja, mogu bitno razlikovati.[1] Razumijevanje fenomena polimorfije, kontrola pojavnosti pojedinih čvrstih faza kao i mogućnost predviđanja odgovarajućih kristalnih struktura stoga je izuzetno važna ne samo iz perspektive akademske zajednice, već i one industrijske. [2]

Karbonohidrazidi mogu poslužiti kao model fleksibilnog sustava s više različitih međumolekulskih veznih mjesta. To potvrđuje njihova uloga kao anionskih receptorâ i metalosupramolekulskih gradivnih jedinica. [3] Kako bi se istražio utjecaj bočnog ogranka na kristalnu strukturu, pripremljeni su

monosupstituirani karbonohidrazidi izvedeni iz 2-, 3- i 4-piridinkarbaldehida (**2py**, **3py** i **4py**). Čvrste faze pretražene su prekrizacijom i izlaganjem krutine atmosferi zasićenoj parama otapala. Dobivene krutine okarakterizirane su rentgenskom difrakcijom i termičkom analizom. Iako atom dušika u piridinskom prstenu ne sudjeluje u interakcijama sa susjednim molekulama karbonohidrazida ni u jednom opaženom slučaju, položaj dušikovog atoma u prstenu znatno utječe na prirodu interakcija između karbamidnih podjedinica. U kristalnim strukturama **2py** i **4py** prevladavaju supramolekulski lanci ostvareni preko CONH-NHNH<sub>2</sub> heterosintona, dok čvrste faze **3py** pokazuju puno veću raznolikost u supramolekulskom vezivanju, odnosno kompeticiju između CONH homosintona, NHNH<sub>2</sub> homosintona i CONH-NHNH<sub>2</sub> heterosintona (slika 1). Provedena istraživanja upućuju kako su čvrste faze u kojima prevladava homosintonski motivi ujedno i termodinamički stabilnije faze.



Shema 1. Supramolekulski sintoni u strukturama 2py, 3py i 4py

1. A. M. Healy, Z. A. Worku, D. Kumar, A. M. Madi, *Adv. Drug Del. Rev.* **117** (2017) 25-46.
2. A. M. Reilly *et al.*, *Acta Cryst. B* **72** (2016) 439-459.
3. M. Rubčić, N. Galić, I. Halasz, T. Jednačak, N. Judaš, J. Plavec, P. Šket, P. Novak, *Cryst. Growth Des.* **14** (2014) 2900-2912.

#### P-K14: CHARACTERIZATION OF ADENYLOSUCCINATE SYNTHETASE FROM HELICOBACTER PYLORI USING COMPUTATIONAL AND EXPERIMENTAL APPROACH

Ante Bubić<sup>1</sup>, Branimir Bertoša<sup>2</sup>, Ivana Leščić Ašler<sup>1</sup>, Marija Luić<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ruđer Bošković Institute, Bijenička cesta 54, Zagreb, Croatia

<sup>2</sup>Faculty of Science, Horvatovac 102a, Zagreb, Croatia

*Helicobacter pylori* is a Gram-negative microaerophilic bacterium that chronically colonizes the gastric epithelium. Presence of this bacteria in humans can lead to the development of several gastrointestinal diseases; including non-symptomatic chronic gastritis, peptic ulcer disease, gastric mucosa-associated lymphoid tissue (MALT) lymphoma, and gastric adenocarcinoma. [1] Adenylosuccinate synthetase (ADSS) is one of the key enzymes in purine salvage pathway, which catalyses condensation reaction of IMP with L-aspartate (ASP) to form adenylosuccinate by GTP hydrolysis in the presence of Mg<sup>2+</sup> ions. Bioinformatic studies showed that *H. pylori* lacks the genes for *de novo* synthesis of purines. Consequently, the viability of *H. pylori* relies on salvage pathway for purine synthesis. Thus, ADSS represents a potential drug target for *H. pylori* infection. [2-3] Using experimental methods, such as enzyme kinetics we have successfully determined main kinetic parameters for all three substrates (ASP, GTP, IMP). Additionally, inhibition tests were done with known inhibitor (hadacidin) and with adenylosuccinate (main reaction's product). Preliminary binding experiments were conducted for all three substrates using microscale thermophoresis, in order to obtain binding parameters. Since attempts to solve 3D-structure of ADSS using crystallography were unsuccessful as yet, homology modelling was applied to obtain 3D-model. The model was constructed using multisequence alignment based on six closely related protein structures of ADSS. Using obtained 3D model, several systems of ADSS enzyme alone, as well as in complex with different ligands, including substrates and inhibitors, were prepared for molecular dynamics (MD) simulations at the temperature of 310 K. The aim of this research is to decipher the mechanism of ADSS enzyme, with the final goal of designing new inhibitors.



1. S. Nishiumi, M. Yoshida, T. Azuma, *Microb. Pathog.* **109** (2017) 78–85.
2. K. Eaazhisai, R. Jayalakshmi, P. Gayathri, R. P. Anand, K. Sumathy, H. Balaram and M. R. N. Murthy, *J. Mol. Biol.* **335** (2004) 1251–1264.
3. G. Liechti, J. B. Goldberg, *J. Bacteriol.* **194** (2011) 839–854.

### **P-K15: SUPRAMOLEKULSKE ARHITEKTURE FLEKSIBILNIH KRISTALA KOORDINACIJSKIH POLIMERA KADMIJA(II)**

Mateja Pisačić, Marijana Đaković

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

Kristalno inženjerstvo grana je supramolekulske kemije usmjerena na sintezu molekularnih krutina definiranih supramolekulskih topologija. [1] Proučavanjem unutrašnje strukture i međumolekulskih interakcija koje određuju kristalno pakiranje moguće je objasniti makroskopska svojstva sintetiziranih materijala, ali i steći znanja koja se onda mogu primjeniti u dizajnu novih kristalnih krutina željenih svojstava i morfologija. U posljednje vrijeme sve je veći broj organskih, ali odnedavno i metalo-organskih molekularnih kristala koji pokazuju elastični ili plastični odziv kada se na njih primjeni mehanička sila. [2,3] Do sada je pokazano da je fleksibilni odziv kristalne tvari posljedica specifične unutrašnje građe kristala, te je uočen samo kod onih kristalnih materijala koje karakterizira anizotropija međumolekulskih interakcija. Takvo novo svojstvo kristalne tvari svrstava ih u skupinu „pametnih materijala“ te otvara brojne mogućnosti njihove potencijalne primjene u područjima kao što su optika, fleksibilna elektronika, te dizajn pametnih tekstilnih vlakana i inženjerstvo tkiva.

Nedavno smo na skupini igličastih kristala koordinacijskih polimera kadmija(II) s halopirazinskim ligandima opisali i kvantificirali elastičan odziv kristala na primjenu vanjske mehaničke sile.<sup>4</sup> Kako bismo razjasnili utjecaj različitih strukturnih parametara na fleksibilan odziv kristalnih koordinacijskih polimera u ovom radu prikazujemo novu seriju koordinacijskih polimera kadmija(II), ovaj puta s amidnim derivatima pirazina i piridina, koji također pokazuju fleksibilan odziv na primjenu vanjske mehaničke sile. Priređenim spojevima određena je molekulska i kristalna struktura, a strukturne karakteristike u kristalima priređenih spojeva korelirane su sa stupnjem mehaničkog odziva.

1. G. R. Desiraju, *Angew. Chem. Int. Ed.* **46** (2007) 8342–8356.
2. C. M Reddy, G. R Krishna, S. Ghosh, *CrystEngComm* **12** (2010) 2296–2314.
3. A. Worthy, A. Grosjean, M. C. Pfrunder, Y. Xu, C. Yan, G. Edwards, J. K. Clegg, J. C. McMurtrie, *Nat. Chem.* **10** (2018) 65–69.
4. M. Đaković, M. Borovina, M. Pisačić C. B. Aakeröy, Ž. Soldin, B.-M. Kukovec, I. Kodrin, *Angew. Chem. Int. Ed. Eng.* **57** (2018) 14801–14805.

**P-B1: NANOČESTICE SREBRA STABILIZIRANE S OMOTAČIMA UTJEČU NA ISKLIJAVANJE I RAST DUHANA**

Renata Biba<sup>1</sup>, Petra Cvjetko<sup>1</sup>, Mirta Tkalec<sup>2</sup>, Daniel Lyons<sup>3</sup>, Petra Peharec Štefanić<sup>1</sup>, Biljana Balen<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Zavod za molekularnu biologiju, Biološki odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Horvatovac 102a, Zagreb

<sup>2</sup>Botanički zavod, Biološki odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Rooseveltov trg 6, Zagreb

<sup>3</sup>Centar za istraživanje mora, Institut Ruđer Bošković, G. Paliaga 5, Rovinj

Nanočestice srebra (AgNPs) se zbog izvrsnih protubakterijskih i protugljivičnih svojstava koriste u sve većem broju potrošačkih proizvoda. Pojačana proizvodnja neizbježno će dovesti do njihova ispuštanja u okoliš. Biljke, kao ključne komponente bioloških sustava, mogu poslužiti kao potencijalni put za prijenos, bioakumulaciju i unos AgNPs u prehrambene lance. U ovom istraživanju usporedili smo utjecaj AgNPs, stabiliziranih s tri različita omotača [citrat, polivinilpirolidon (PVP) i cetiltrimetilamonijev bromid (CTAB)], primijenjenih u tri koncentracije (25, 50 i 100  $\mu\text{M}$ ), na klijanje i rani rast duhana (*Nicotiana tabacum* L.). AgNPs-citrat nisu uzrokovale značajne promjene u postotku klijavosti, dok je klijavost biljaka tretiranih s AgNPs- PVP i AgNPs-CTAB bila značajno smanjena. Uz to, zabilježen je i negativan utjecaj na duljinu korjenčića i rast klijanaca, što je rezultiralo smanjenjem svježje i suhe mase te smanjenim indeksom tolerancije na stres. Kako bi utvrdili je li toksičnost AgNPs-PVP i AgNPs-CTAB posljedica disocijacije iona  $\text{Ag}^+$  ili samih nanočestica, u podlogu je dodano 125, 250 i 500  $\mu\text{M}$  cisteina, jakog liganda srebra. Cistein je značajno smanjio štetne učinke AgNPs, ukazujući da je fitotoksičnost AgNPs barem djelomično rezultat disocijacije  $\text{Ag}^+$  iona.

**P-B2: POTENCIJALNI BIOMARKERI PROGRESIJE I INVAZIVNOSTI INTRAKRANIJALNIH MENINGEOMA**

Anja Bukovac, Anja Kafka, Nives Pećina-Šlaus

Laboratorij za neuroonkologiju Hrvatskog instituta za istraživanje mozga, i Katedra za medicinsku biologiju, Medicinski fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Šalata 3, Zagreb

Intrakranijalni meningeomi su tumori mozga nastali od arahnoidalnih stanica te se smatraju jednim od najčešćih primarnih tumora središnjeg živčanog sustava. Meningeomi su uglavnom benigne tvorevine klasificirane kao gradus I (u 80% slučajeva), ali prelaskom u više graduse II i III (atipični i anaplastični) mogu postati maligni te metastazirati u okolno tkivo. Aktivacija ili pogreške u radu signalnih puteva poput Wnt signalnog puta, epitelno-mezenhimske tranzicije (EMT) ili postreplikacijskog popravka, mogu dovesti do pojave i progresije tumora. EMT ima važnu ulogu u mehanizmima invazivnosti i metastaziranja tumorskih stanica, a odlikuje je gubitak ekspresije E-kadherina te pojačana ekspresija N-kadherina. Signalni put Wnt usko je povezan s procesima EMT, te je poznato da prelazak beta-*katzenina* u jezgru može dovesti do EMT. Prepoznavanje puteva i molekula odgovornih za kontrolu stanične pokretljivosti od velike je znanstvene vrijednosti jer donosi potencijalne biljege progresije te otkriva nove molekularne mete za terapijske intervencije. Kako bismo dobili uvid u molekularni profil meningeoma, napravljena je genska analiza glavnih aktera postreplikacijskog popravka – MLH1 i MSH2, Wnt signalnog puta – DVL3 i AXIN te epitelno-mezenhimske tranzicije – E-kadherina (CDH1). Genske analize (gubitak heterozigotnosti, mikrosatelitna nestabilnost) su napravljene na uzorcima različitih stupnjeva malignosti pomoću mikrosatelitnih markera: D3S1611 (MLH1), BAT26 (MSH2), D16S3399 (AXIN1), D3S1262 (DVL3), D16S3025 (CDH1). Nadalje, imunohistokemijskim analizama monoklonskim antitijelima na parafinskim rezovima uzoraka dobivene su proteinske ekspresije i lokalizacije E-kadherina, N-kadherina i beta-*katzenina*. Rezultati su pokazali povećanu ekspresiju N-kadherina te aktivnog beta-*katzenina*. Veliki broj uzoraka (64%) je pokazao genske promjene na barem jednom od proučavanih gena. Najčešće mutirani gen je bio MLH1 (u 36% uzoraka). Zapažena je i pozitivna korelacija genskih promjena između CDH1 i AXIN1 gena ( $P=0,028$ ,  $\rho=0,011$ ). Naši rezultati ukazuju na uključenost istraživanih molekula signalnih

puteva i postreplikacijskog popravka u progresiji intrakranijalnih meningeoma te istraživanjem na većem uzorku viših gradusa će se moći izdvojiti potencijalni biomarkeri stanične pokretljivosti invazivnih meningeoma.

1. N. Pećina-Šlaus, T. Nikuševa Martić, A. J. Deak, M. Zeljko, R. Hrašćan, *J. Cancer Res. Clin. Oncol.* **136** (2010) 695-702.
2. N. Pećina-Šlaus, T. Cicvara-Pecina, A. Kafka, *Front. Biosci.* **E4** (2012) 889-896.
3. N. Pećina-Šlaus, A. Bukovac, I. Salomon, A. Kafka, *Cancer Hypotheses* **1, 6** (2017) 1-16.

### **P-B3: GENOTIPIZACIJA MIKROORGANIZAMA (MRSA) POMOĆU ELEKTROFOREZE U PULSIRAJUĆEM POLJU (PFGE)**

Jasenka Grgurić

*Medicinski fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Šalata 3, Zagreb*

Elektroforeza u pulsirajućem polju (PFGE) je metoda genotipizacije mikroorganizama opisana 1984.g. (Schvartz D.C., Cantor C.R.). PFGE – elektroforeza predstavlja „zlatni standard“ u genotipizaciji različitih vrsta mikroorganizama odnosno razlikovanju različitih uzročnika nozokomijalnih infekcija. Danas su prisutni visokorezistentni sojevi bakterija uzročnici teških infekcija koje se vrlo brzo prenose u bolničkim sredinama. Infekcijama su izrazito podložna teško imunokompromitirana populacija. *Staphylococcus aureus* (MRSA soj) je vrlo otporna bakterija koja pripada porodici (Micrococcaceae) koji se boje Gram pozitivno i veličine 0,8-1,2 µm u promjeru. Raste na uobičajenim hranjivim podlogama pri temperaturi od 37 °C. Bakterijske kolonije su glatke i sjajne, bijele do zagasito žute boje (tzv. zlatni stafilokok). Do danas su opisane tri vrste nastanka meticilin rezistencije: 1. mehanizam sinteze novog proteina u staničnoj stjenki (PBP 2) slabi afinitet vezanja za penicilin, 2. mehanizam je granična ili stečena otpornost povezana sa hiperprodukcijom betalaktamaza, 3. mehanizam rezistencije je povezan sa sojevima koji iskazuju smanjeni afinitet PBP1 i PBP2 za vezanje sa betalaktamskim antibioticima (MODSA). Postoje i drugi načini prijenosa genetičke tvari – plazmidne rezistencije ili R plazmida. PFGE je metoda koja može odjeliti DNA dijelove do 10 Mpb. Parametri koji utječu na odijeljivanje DNA vrpce: čistoća i koncentracija izolirane DNA, koncentracija agaroze u gelu, jakost polja, vremena pulsiranja i kut pulsiranja, temperatura i jakost pufera. Interpretacija odijeljenih vrpce DNA: istovjetni sojevi, vrlo slični sojevi, eventualno slični sojevi, različiti sojevi. Na temelju dobivenih rezultata i diskusije dokazano je širenje genetički istovjetnih DNA sojeva u populaciji.

1. Bannerman T. L., Hancock G. A., Tenover F.C., Miller J. M., *J. Clin. Microbiol.* **33** (1995) 551-555.
2. Schwartz D. C., Cantor C.R., *Cell* **37** (1984) 67-75.

### **P-B4: ZNAČAJKE I ORGANIZACIJA UZASTOPNO PONAVLJAJUĆE DNA U GENOMU DALMATINSKOG BUHAČA (*Tanacetum cinerariifolium* (Trevir.) Sch. Bip.)**

Adela Jurković, Jelena Mlinarec, Nenad Malenica, Višnja Besendorfer

*Biološki odsjek, Zavod za molekularnu biologiju, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Horvatovac 102a, Zagreb*

Dalmatinski buhač je hrvatska endemska i termofilna biljka iz porodice glavočika (Asteraceae) koja prirodno raste na istočnoj jadranskoj obali. Najvažnija primjena buhača je u ekološkoj poljoprivredi, budući da se iz njega dobiva prirodni insekticid piretrin. Iako se radi o gospodarski značajnoj vrsti, dalmatinski buhač je citogenetički slabo istražen. Dio biljnog genoma čini uzastopno ponavljajuća DNA za koju se dugo smatralo da predstavlja DNA smeće (engl. junk DNA). Međutim, radi se o brzo evoluirajućoj DNA koja ima važnu ulogu u staničnoj diobi, regulaciji genske ekspresije i organizaciji genoma. Ciljevi ovog istraživanja bili su identifikacija i klasifikacija ponavljajuće DNA u genomu buhača upotrebom

sekvenciranja nove generacije (NGS) i obradom sekvenci pomoću programa RepeatExplorer i TAREAN te organizacija glavne uzastopno ponavljajućih porodica DNA (satelitna, telomerna i ribosomska DNA) na kromosomima. Okarakterizirane su tri satelitne porodice: TcSAT1, TcSAT2 i TcSAT3. Porodice TcSAT1 i TcSAT2 smještene su subtelomerno na većini kromosoma, dok je TcSAT3 porodica smještena intersticijski na dva akrocentrična kromosomska para. Osim na krajevima kromosoma telomerna ponavljanja su utvrđena i duž krakova kromosoma (intersticijska telomerna ponavljanja - ITR) koja se smatraju evolucijski primitivnijim razmještajem. Metodom FISH je dokazano da genom buhača sadrži rijetku L-konfiguraciju 35S/5S rDNA, za koju se također smatralo da je karakteristična za evolucijski primitivnije biljke. Porodice TcSAT1 i TcSAT2 pokazuju visoki stupanj polimorfizma u broju FISH-signala između pojedinih jedinki. Dobiveni rezultati ukazuju na veliku dinamičnost i plastičnost genoma dalmatinskog buhača, posebno u subtelomernom području. Kod većine eukariota, subtelomerno područje je značajno obzirom da se tu nalaze brzo evoluirajući geni odgovorni za procese prilagodbe na okolišne čimbenike.

**P-B5: UČINAK TERBUTILAZINA NA INDUKCIJU ANEUPLODIJE *IN VITRO* U LIMFOCITIMA PERIFERNE KRVI ČOVJEKA**

Vedran Mužinić, Davor Želježić

*Jedinica za mutagenezu, Institut za medicinska istraživanja i medicinu rada, Ksaverska cesta 2, Zagreb*

Terbutilazin je herbicid triazinske skupine koji se koristi za suzbijanje širokolisnih korova u poljoprivredi i šumarstvu. Međutim, unatoč postojanju podataka koji ukazuju na visoku izloženost stanovništva ovom herbicidu, nije dostatno utvrđena njegova toksičnost pri niskim dozama koje su određene od strane nadležnih regulatornih agencija kao prihvatljive razine izloženosti. Aneuploidija nastaje uslijed pogrešaka u razdvajanju kromosoma u mitozu, te je zapažena u brojnim novotvorinama gdje može djelovati promotivno na tumor. U ovom pokusu ispitali smo mogući učinak terbutilazina na pravilnosti razdvajanja kromosoma u anafazi mitoze. Puna krv muškog dobrovoljnog davatelja bila je izložena 24 sata *in vitro* dvjema koncentracijama terbutilazina, jednoj koja odgovara razini izloženosti pučanstva (0,0012 µg/mL), te drugoj koncentraciji (3 µg/mL). Po obradi pune krvi u skladu sa smjernicama mikronukleus testa, binuklearni limfociti su hibridizirani pancentromernim izravno obilježenim sondama za kromosome 18, 9, X i Y. Rezultati pokazuju da tretman terbutilazinom dovodi do značajnog povećanja učestalosti gubitka kromosoma 18, 9 i X pri obje koncentracije, te kromosoma Y pri višoj koncentraciji. Temeljem navedenoga zaključujemo da terbutilazin pri ispitivanim koncentracijama posjeduje značajan učinak na pogreške u razdvajanju kromosoma i indukciju aneuploidije za kromosome 18, 9, X i Y.

**P-B6: ANAEROBIC POTENTIAL OF *Synurella ambulans* (Müller, 1846) (Crustacea, Amphipoda) FROM HYPORHEIC ZONE OF SAVA RIVER AND STALNJAK SPRING, CROATIA**

Zuzana Redžović<sup>1</sup>, Inna Sokolova<sup>2</sup>, Marijana Erk<sup>1</sup>, Eugene Sokolov<sup>2</sup>, Sanja Gottstein<sup>3</sup>

<sup>1</sup> *Division for Marine and Environmental Research, Ruđer Bošković Institute, Bijenička cesta 54, Zagreb, Croatia*

<sup>2</sup> *Department of Marine Biology, Institute of Biological Sciences, University of Rostock, Albert-Einstein-Straße 3, Rostock, Germany*

<sup>3</sup> *Department of Biology, Faculty of Science, University of Zagreb, Rooseveltov trg 6, Zagreb, Croatia*

The hyporheic zone (HZ), a subterranean/surface water transitional interface, is a complex shallow interstitial groundwater flow system situated lateral and beneath a stream. HZs belong to the most threatened aquatic environments. The extreme characteristics of the HZs, including dynamic and highly heterogeneous hydrologic and biochemical processes, small physical size and exchange flow, and full darkness, cause higher concentration of major ions and metals and unpredictable changes in the rate of dissolved oxygen. To cope with oxygen deprivation, subterranean organisms have evolved different

strategies such as reduced metabolism [1], high amounts of stored glycogen and phosphagen arginine phosphate [2] and utilization of anaerobic routes. [3]

In this study, the activities of three enzymes involved in energy metabolism were measured in small stygophilous amphipod *Synurella ambulans* to assess its anaerobic potential. Specimens were sampled from two localities: the HZ of the Sava River (Zagreb, Jarun) and acid springbrook Stalnjak (Zaprešić). The data on metabolic enzyme activity of this species are lacking since this amphipod species hasn't been intensively investigated. The ratio of pyruvate kinase (PK) over phosphoenolpyruvate carboxykinase (PEPCK) activities was used as an index of aerobic relative to anaerobic capacity of an animal, and lactate dehydrogenase (LDH) activity as an indicator of anaerobic glycolytic potential. Stalnjak population had lower PK/PEPCK ratio and lower LDH activity than population at the Sava River indicative of higher dependence on anaerobic pathways compared with the population from the Sava River HZ. PK/PEPCK ratio in *S. ambulans* was ~2-3-fold higher compared with the published values for two other stygobiont species (*Niphargus virei* and *Niphargus rhenorhodanensis*), but ~6-fold lower than in an epigeal species *Gammarus fossarum* (Hervant, 1997). LDH activity in *S. ambulans* was similar to that of *N. rhenorhodanensis* and *N. virei*. Overall, relatively low PK/PEPCK ratio and high LDH activity indicate increased anaerobic potential of *S. ambulans* and its ability to tolerate low oxygen concentrations underground.

1. J. I. Spicer, *Hydrobiologia* **377** (1998) 201–204.

2. F. Hervant, *C. R. Acad. Sci. III* **319** (1997) 1071–1077.

3. R. W. Simpfendorfer, M. V. Vial, D. A. López, M. Verdala, M. L. González, *Comp. Biochem. Physiol. B, Biochem. Mol. Biol.* **111** (1995) 615–623.

#### **P-B7: PROMJENE RAZINA EKSPRESIJE POVRŠINSKIH I SOLUBILNIH MOLEKULA STANICA UROĐENOG IMUNOLOŠKOG SUSTAVA KAO ODGOVOR NA INFEKCIJU ORTHOHANTAVIRUSIMA**

Petra Svoboda<sup>1</sup>, Lidija Cvetko Krajinović<sup>1</sup>, Denis Polančec<sup>2</sup>, Ivan Christian Kurolt<sup>1</sup>, Željka Mačak Šafranko<sup>1</sup>, Alemka Markotić<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Klinika za infektivne bolesti „Dr. Fran Mihaljević“, Mirogojska cesta 8, Zagreb

<sup>2</sup>Dječja bolnica Srebrnjak, Srebrnjak 100, Zagreb

Orthohantavirusi (HTV) su RNA virusi s ovojnicom, koji pripadaju rodu *Orthohantavirus*, obitelji *Hantaviridae*, redu *Bunyavirales*. Puumala orthohantavirus (PUUV) je patogeni virus uzročnik blagih do srednje teških oblika hemoragijske vrućice s bubrežnim sindromom (HVBS) u Euroaziji. Tula orthohantavirus (TULV) se smatra apatogenim zbog ograničenih dokaza patogeneze u ljudi. U Hrvatskoj je HVBS endemska bolest te najvažnija bolest koja se prenosi glodavcima. Epidemije koje pogađaju kontinentalni dio zemlje se javljaju svakih nekoliko godina. Monociti, makrofagi i dendritičke stanice, kao stanice urođenog imunološkog sustava, su ciljane stanice za HTV koje potencijalno doprinose širenju virusa u organizmu te razvoju bolesti. Još uvijek postoji nedostatak znanja o mehanizmima imunološkog odgovora na HTV. Imunopatogenetske studije su donekle otežane jer nema odgovarajućih životinjskih modela za istraživanje HVBS-a.

Cilj ovog istraživanja bio je u *in vitro* uvjetima analizirati ekspresiju odabranih staničnih površinskih molekula na monocitima inficiranim patogenim i apatogenim virusom te obrasce lučenja odabranih citokina i kemokina u svrhu fenotipske karakterizacije monocita/makrofaga u smjeru pro- ili protuupalnog fenotipa kako bi se istražilo potiče li orthohantavirusna infekcija diferencijaciju te susljednu polarizaciju stanica.

Primarni ljudski monociti bili su inficirani s PUUV ili TULV i kultivirani do sedam dana nakon infekcije. Imunofenotipizacija je provedena u tri vremenske točke pomoću interno kreiranog polikromatskog panela. Mjerenje koncentracije solubilnih citokina i kemokina u supernatantima stanica kroz šest vremenskih točaka rađeno je multipleks imunotestom na bazi magnetskih kuglica.

Razine ekspresije staničnih površinskih molekula kao i koncentracije citokina i kemokina u supernatantima između inficiranih i neinficiranih stanica, bile su različite. Određene razlike su se pokazale i između patogenih i

apatogenih infekcija. Zaključujemo kako ortohantavirusi potiču diferencijaciju primarnih ljudskih monocita kao što je vidljivo na razini ekspresije staničnih površinskih markera te solubilnih molekula.

**P-GL1: SEDIMENTI ISTARSKOG FLIŠKOG BAZENA**Krešimir Petrinjak

Hrvatski geološki institut, Sachsova 2, Zagreb

Predmet ovog rada su Istarske fliške naslage, tj. mehanizmi kojima su one istaložene. Tijekom paleogena dolazi do razvoja predgorskog bazena na području Istarskog poluotoka koji kulminira dubokomorskom klastičnom sedimentacijom fliša. [1] Za ovu potrebu Istarske fliške naslage predstavljene su na tri geološka stupa: Buzet-I, Hum i Kaldir. Na stupu Buzet-I zastupljene su sve litostratigrafske jedinice koje čine ispunu istraživanog bazena na području Istre, a to su Foraminiferski vapnenci i Istarski fliš. Stupovi Kaldir i Hum odabrani su jer uključuju i specifične naslage (karbonatne breče i foraminiferske breče) koje nisu zastupljene na stupu Buzet-I. U tumaču geološke karte, list Ilirska Bistrica, paleogenski klastiti opisani su kao flišolike naslage i razvijene su u dva tipa: u Pazinskom bazenu veći je udio karbonata, a u sinklinalama Brkini i Rječine prevladava glinovita komponenta uz znatno veći udio kvarca. Flišolike naslage su sastavljene od breča, konglomerata, pješčenjaka, lapora, glinovitih lapora i glina. [2] Paleogenske naslage u Istri taložile su se u migrirajućim depozonama predgorskog bazena [1] i njihov razvoj se može objasniti modelom kojeg su iznijeli DeCelles & Giles. [3] Foraminiferski vapnenci su taloženi na distalnoj karbonatnoj rampi [4] *foredeep* bazena. Prijelazne naslage su nastale daljnjim produblivanjem okoliša na karbonatnoj rampi uslijed fleksure nastale zbog akumulacije stijenske mase na području orogena sjeverozapadnih vanjskih Dinarida. Daljnjim produbljavanjem nastaje klasični *foredeep* u kojem se talože globigerinski lapori, a približavanjem orogenskog klina i izvorišta krupnijeznastih materijala dolazi do taloženja uložaka pješčenjaka, odnosno klasičnog fliša. Navedeni stupovi su snimljeni tijekom terenskih istraživanja za potrebe izrade Osnovne geološke karte 1:50.000, za vrijeme terenskih istraživanja na istraživačkom projektu Geosekva (IP-06-2016-1854) i u okviru izrade navedene disertacije, koja će dopridonjeti boljem poznavanju Istarskog fliša. U ovom radu opisane su i interpretirane samo klastične naslage.

1. T. Korbar, *Earth-Sci. Rev.* **96** (2009) 296-312.

2. D. Šikić, M. Pleničar, *Osnovna geološka karta SFRJ 1:100 000, Tumač za list Ilirska Bistrica*, Savezni geološki zavod, Beograd, 1975, str. 1-51.

3. P. DeCelles, K. Giles, *Basin Res.* **8** (1996) 105-123.

4. V. Čosović, K. Drobne, A. Moro, *Facies* **50** (2004) 61-75.

# Predavanja

## **1. GENOS: OD START-UPA DO GLOBALNOG LIDERA U VISOKOPROTOČNOJ GLIKOMICI U DESET GODINA**

**prof. dr. sc. Gordan Lauc**  
*Genos d.o.o.*

## **2. R&D U ZNANOSTI, INDUSTRIJI I *START-UPU***

**dr. sc. Ivan Krajinović**  
*Rimac Automobili*

Predavanje donosi pregled moje karijere, od rada u znanstveno-tehnološkom području i pisanja doktorata, preko rada u high-tech industriji do rada u tehnološkom start-upa. Govorit ću u prednostima i fokusima svakog područja te pokušati prenjeti vlastita iskustva i znanja. Ideja je pokazati koji su izazvovi i koje mogućnosti rada u različitim područjima.



# Sudionici

Bačinić Anđela, 23  
Barišić Antun, 6  
Bazina Linda, 31  
Bedeković Nikola, 38  
Biba Renata, 41  
Bosnar Mihovil, 29  
Bubić Ante, 39  
Bukovac Anja, 41  
Buljan Anđela, 30  
Čargonja Marija, 27  
Ceraj Lana, 4  
Cukrov Nuša, 19  
Dautović Jelena, 20  
Dekić Svjetlana, 13  
Fotović Luka, 34  
Glavaš Mladena, 11  
Golubić Tomislav, 16  
Gregorić Tomislav, 11  
Grgurić Jasenka, 42  
Habinovec Iva, 10  
Jurec Jurica, 5  
Jurić Julija, 13  
Jurković Adela, 42  
Jutrić David, 14  
Kontrec Ana, 1  
Kukolj Marina, 15  
Kužat Nataša, 20  
Lasić Ivan, 26  
Leko Katarina, 8  
Lisac Katarina, 6  
Marcinek Saša, 24  
Matić Sara, 33  
Matijaković Nives, 37

Meštrić Aleksandar, 35  
Milaković Milena, 14  
Milašinović Valentina, 36  
Mužević Matko, 28  
Mužinić Vedran, 43  
Nikšić-Franjić Ivana, 33  
Nimac Irena, 25  
Novak Tihana, 21  
Nurkić Deni, 25  
Opačak Saša, 12  
Pantalon Juraj\_Natalija, 36  
Pavičić Mišo, 22  
Pedić Veronika, 3  
Perković Dalibor, 4  
Petrinjak Krešimir, 45  
Pisačić Mateja, 40  
Ptiček Lucija, 30  
Radišić Ivana, 2  
Radulović Marko, 1  
Redžović Zuzana, 43  
Škulj Sanja, 7  
Šolaja Dragana, 18  
Svoboda\_Petra, 44  
Tandarić Tana, 9  
Topić Edi, 38  
Uvanović Hana, 22  
Vlahović Kruc Renata, 2  
Vušak Darko, 9  
Žeger Pleše Irina, 17  
Živković Igor, 32  
Zoldoš Marko, 27  
Žunec Ante, 21

**Sveučilište u Zagrebu Prirodoslovno-matematički fakultet**  
ISBN 978-953-6076-49-9