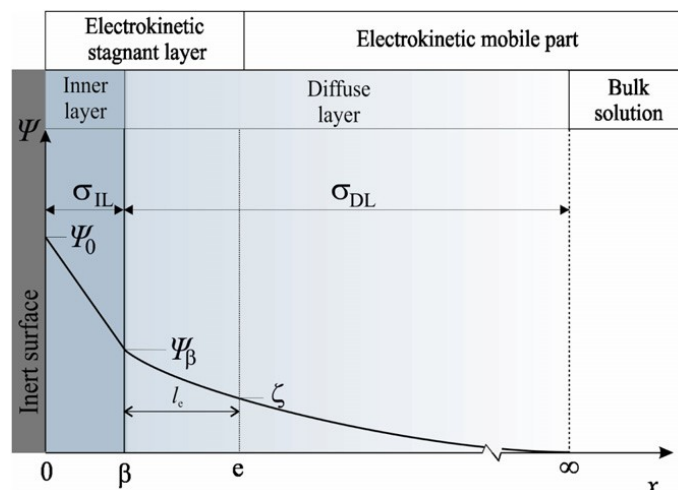


Prijedlozi tema za vježbe Višeg praktikuma fizikalne kemije 1 (ak. g. 2017/2018.)

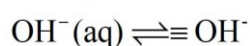
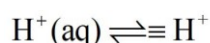
Zauzete vježbe označene su zvjezdicom (*).

1. A. Barišić, T. Preočanin: *Istraživanje međupovršinskog sloja grafit – vodena otopina elektrolita**



U kontaktu koloidnih i nanočestica s vodenom otopinom elektrolita dolazi do preraspodjele iona između otopine i elektrolita te nastajanja električnog međupovršinskog sloja. Na vrijednost potencijala u međupovršinskom sloju direktno utječe pH vrijednost suspenzije.

Inertni materijali, poput grafita, nemaju površinski nabijene skupine te se kod njih električno nabijanje međupovršinskog sloja opisuje procesom akumulacije hidronijevih i hidroksidnih iona na površini inertnog materijala:



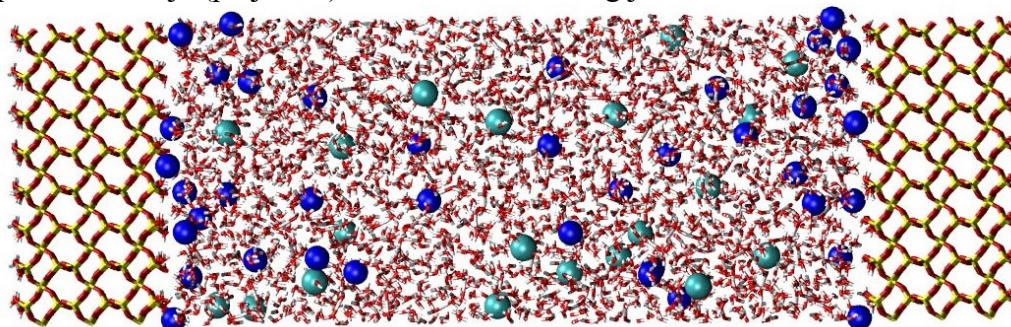
Prijašnja mjerenja na inertnim materijalima (Teflon, dijamant, argon) pokazala su da pri pH = 7 postoji negativni potencijal u međupovršinskom sloju. To ukazuje da se u neutralnim uvjetima negativno nabijeni hidroksidni ioni u većoj mjeri akumuliraju uz površinu nego pozitivno nabijeni hidronijevi ioni. Zanimljivo je da se za sve dosad ispitane inertne materijale točka elektroneutralnosti (pH vrijednost otopine u kojoj vrijednost potencijala kroz cijeli međupovršinski sloj iznosi 0) nalazi u uskom kiselom području i to između pH = 2 - 4

Iz pokretljivosti čestica u električnom polju može se odrediti elektrokinetički potencijal površine. Mjerenjem pokretljivosti čestica pri različitim vrijednostima pH suspenzije određuje se izoelektrična točka koloidnih čestica. Povećanjem masene koncentracije koloidnih čestica u suspenziji dolazi do promijene pH vrijednosti suspenzije koja teži graničnoj vrijednosti pH_∞ . pH_∞ odgovara vrijednosti točke nul naboja u slučaju nekontaminiranih uzoraka.

Mjerenja elektrokinetičkog potencijala grafita radila bi se na elektrokinetičkom uređaju Brokheaven Zeta Puls. U planu je mjerenje zeta potencijala pri različitim pH vrijednostima suspenzije i pri različitim vrijednostima ionske jakosti.

Kvarc je mineral silicijeva oksida kristalne rešetke sastavljene od atoma silicija i kisika smještenih u vrhove tetraedra. Kvarc je drugi najzastupljeniji mineral u zemljinoj kori. U kontaktu kvarca s vodenom otopinom elektrolita površinski atomi kisika i silicija reagiraju s vodom i tvore električki nabijene površinske skupine. Uz nabijenu površinu dolazi do orijentacije molekula vode i preraspodijele iona iz otopine te nastajanja električnog međupovršinskog sloja.

Cilj je ove vježbe metodama molekulske dinamike (MD) simulirati stanje na površini kvarca u vodenoj otopini elektrolita. Student će naučiti osnovne naredbe u Linuxu (operativni sustav u kojem se izvode simulacije), naučiti osnovne modele parametrizacije (polje sila) i osnovnu terminologiju molekulske dinamike.



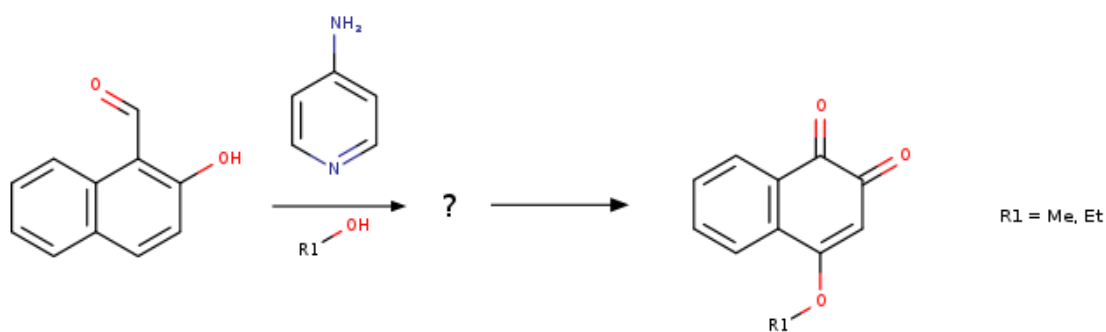
U tu svrhu student će pripremiti simulacijsku kutiju koja se sastoji od plohe kvarca na kojoj se nalazi tanki sloj vodene otopine iona. Nakon postavljanja osnovnih parametara koji su nužni za propagiranje simulacije izvest će se minimizacija, ekvilibracija i propagacija (*production run*) pripremljenog sustava.

Vježba uključuje i analizu rezultata simulacije, dobivanje statistički relevantnih svojstva propagiranog sustava, primarno brojčanu gustoću molekula vode i orijentacijska svojstva molekula vode na plohi kvarca te lateralnu raspodjelu iona u sustavu.

1. N. Kallay, T. Preočanin, D. Kovačević, J. Lützenkirchen, E. Chibowski, *Croat. Chem. Acta* 83 (2010) 357-370.
2. van der Spoel et al., *GROMACS*, www.gromacs.org (2005).
3. [3] F. S. Emami, V. Puddu, R. J. Berry, V. Varshney S. V. Patwardhan, C. C. Perry, H. Heinz, *Chem. Mater.* 26 (2014) 2647-2658.
4. [4] I. S. Joung, T. E. III, Cheatham, *J. Phys. Chem. B* 112 (2008) 9020-9041.
5. [5] B. Das, A. Majhi, K. R. Reddy, K. Venkateswarlu, *J. Mol. Catal. A: Chem.* 263 (2007) 273-275.

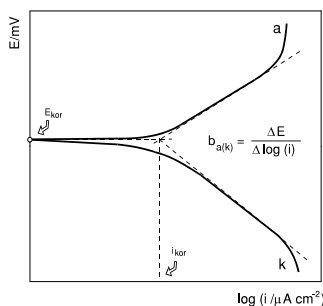
3. G. Horvat: *Određivanje mehanizma reakcije 2-hidroksi-1-naftaldehida s 4-aminopiridinom u metanolu i etanolu**

Otapanjem 2-hidroksi-1-naftaldehida i 4-aminopiridina u metanolu i etanolu dolazi do kemijske reakcije u kojoj nastaje 4-alkoksinaftalen-1,2-dion, što je potvrđeno rengenomskom difrakcijskom analizom kristala koji nastaju iz otopine. Cilj ove praktične vježbe je okarakterizirati kinetiku navedene reakcije UV-Vis spektrofotometrijom i NMR analizom te na temelju dobivenih podataka pretpostaviti i potvrditi mehanizam. U svrhu određivanja kinetičkih parametara iz navedenih eksperimentalnih podataka bit će razvijen program za numeričko rješavanje sustava diferencijalnih jednačini kojima je opisana kinetika reakcija s proizvoljnim reakcijskim mehanizmom.



4. D. Kovačević, D. Hasenay (Sveučilište u Osijeku): *Elektrokemijsko određivanje korozijskih kinetičkih parametara*

Kratki opis vježbe: Korozija predstavlja proces spontanog trošenja (degradacije, nagrizanja, razaranja, otapanja) nekog materijala uslijed kemijskog ili elektrokemijskog djelovanja okoliša. Praktički svaki materijal podliježe koroziji, ali u praksi najčešće se radi o koroziji metala. Zbog prirode metala, kao i činjenice da je korozijski medij najčešće neki elektrolit, koroziju metala u užem smislu te riječi možemo promatrati kao elektrokemijski proces. Slijedom prirode ovog procesa moguća je upotreba različitih elektrokemijskih tehnika u određivanju parametara pomoću kojih je moguće dobiti uvid u kinetiku i mehanizam odvijanja procesa korozije. U praksi se to svodi na određivanje tzv. *korozijskih kinetičkih parametara* - KKP (E_{kor} – korozijski potencijal, i_{kor} – gustoća korozijske struje, b_a i b_k – anodni i katodni Tafelovi nagibi te v_{kor} – brzina korozije). Zadatak vježbe je odrediti KKP za zadani sustav, provedbom elektrokemijskog mjerenja upotrebom tehnike potenciodinamičke polarizacije uz primjenu različitih brzina polarizacije i u granicama potencijala koji omogućuju Tafelovu analizu i određivanje polarizacijskog otpora. U Tafelovoj analizi određivanje KKP svodi se na matematički opis linearnih anodnih i katodnih dijelova potenciodinamičke krivulje opisanih jednostavnim relacijama koje odgovaraju jednadžbi pravca:



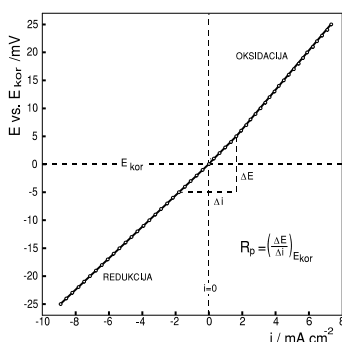
$$\log i_a = \log i_{kor} + \frac{(E - E_{kor})}{b_a}$$

$$\log i_k = \log i_{kor} + \frac{(E - E_{kor})}{b_k}$$

Određivanje KKP pomoću polarizacijskog otpora svodi se na mjerenje nagiba polarizacijske krivulje u točki korozijskog potencijala:

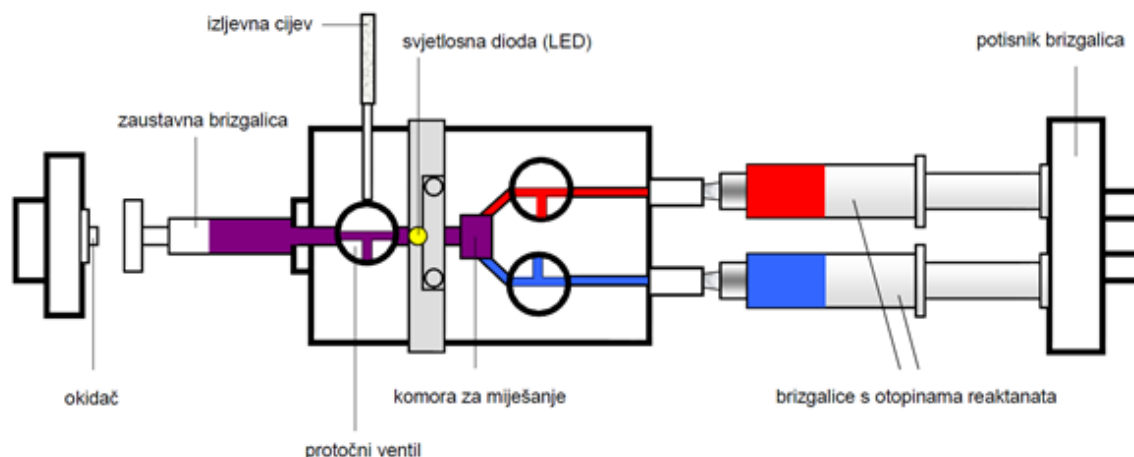
$$R_p = \left[\frac{dE}{di} \right]_{E=E_{kor}}$$

Nakon čega se iz vrijednosti R_p primjenom Stern-Gearyeve jednadžbe može izračunati i_{kor} :



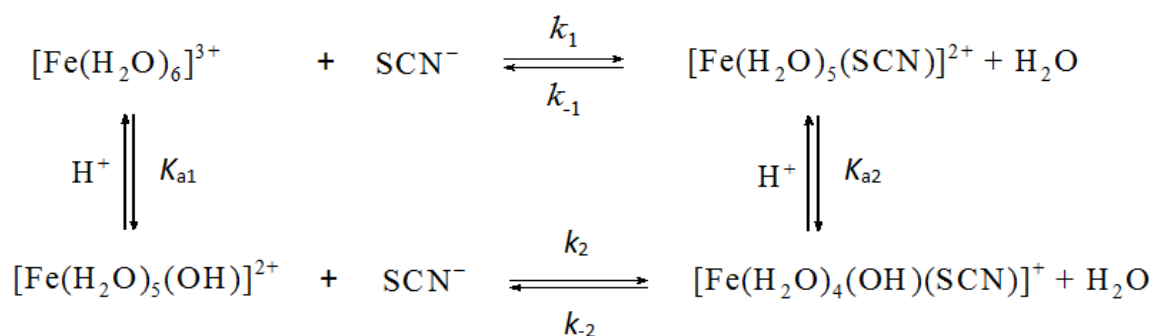
$$i_{kor} = \frac{b_a b_k}{2.303(b_a + b_k) R_p} = \frac{B}{R_p}$$

5. A. Barišić, G. Horvat: *Stopped-flow spektrometrijsko istraživanje kinetike reakcije nastajanja kompleksa željeza(III) s tiocianatnim ionom u vodi*



Željezo s tiocianatnim ionima u vodi tvori niz kompleksnih spojeva, molekulske formule $[\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})^{6-x}(\text{SCN})^x]^{3-x}$, gdje x može biti bilo koji broj od 1 do 6. Udio pojedine vrste ovisan je prije svega o koncentraciji željeza(III) i tiocianata, te o vrijednosti pH otopine. Svi kompleksi željeza s tiocianatom jarko su crvene boje.

Stopped-flow spektrometar je instrument u kojem dolazi do brzog miješanja dvaju ili više reaktanata čime je omogućeno ispitivanje kinetike relativno brzih kemijskih reakcija. Vremenski period od miješanja reaktanata do početka snimanja naziva se "mrtvo vrijeme" i kod većine stopped-flow instrumenata iznosi od 0,3 ms do 2 ms. Stopped-flow instrumentom nije moguće pratiti kinetiku izrazito brzih reakcija koje završe unutar navedenog vremenskog perioda. Opisanom metodom mjeri se ovisnost apsorbancije reakcijske smjese o vremenu.



Reakcija željezovog (III) iona i tiocianatnog aniona u vodenoj otopini predstavlja klasičnu supstitucijsku reakciju na metalnom centru. Mehanizam supstitucije molekula vode koordiniranih na ion željeza (III) tiocianatnim anionom detaljno je izučen pomoću mnogobrojnih tehnika. Samim time mehanizam nastajanja kompleksa željezovog (III) tiocianata dobro je proučen i poznat od ranije. Primijećeno je da je navedeni sustav posebno pogodan za stopped-flow spektrofotometrijsko istraživanje budući da su reaktanti bezbojni dok je produkt tamnocrvene boje čime se kinetika reakcije lako može pratiti metodom spektrofotometrije. Reakcija željezovog(III) iona i tiocianatnog aniona vrlo je brza te je nužno u određivanju

kinetičkih parametara navedene reakcije koristiti metodu stopped-flow spektrometrije.

Cilj opisanih istraživanja je odrediti konstante brzine reakcije i konstantu nastajanja $[\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})^5(\text{SCN})]^{2+}$ pomoću stopped-flow spektroskopije. Osim samog određivanja konstanti cilj je i ispitati utjecaj pH vodene otopine na brzinu nastajanja kompleksa željezovog (III) tiocianata.

6. N Došlić: *Izračun nuklearnih valnih funkcija dvoatomskih molekula: vezana stanja i kontinuum*

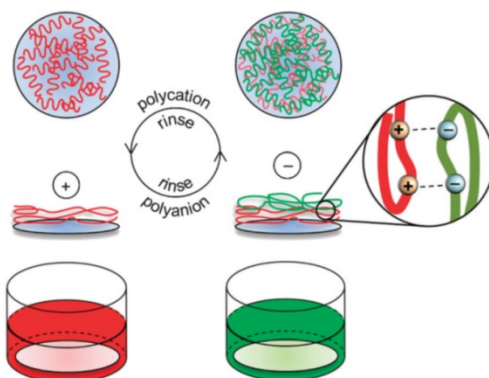
U molekularnoj kvantnoj dinamici gibanje jezgara opisuje se vremenski ovisnom Schrödingerovom jednačinom. Tu je jednačinu najjednostavnije riješiti u bazi vlastitih funkcija sustava. Za potpun opis dinamike potrebno je osim izračuna vezanih stanja molekula izračunati i valne funkcije nevezanih stanja tzv. molekularni kontinuum

U sklopu praktikuma testirat će se fortranski program za računanje valnih funkcija za vezana stanja i kontinuum. Program će se koristiti za opis disocijacije dvoatomskih molekula.

7. D. Kovačević, J. Salopek: *Praćenje nastajanja polielektrolitnih višeslojeva metodom elipsometrije**

Polielektrolitni višeslojevi su nanokompoziti koji nastaju uzastopnom adsorpcijom pozitivno i negativno nabijenih polielektrolita na neku čvrstu površinu, najčešće je to pločica nekog metala sa slojem metalnog oksida. Svoju primjenu pronalaze u biotehnologiji i medicini [1], gdje su od posebne važnosti njihova moguća antibakterijska svojstva.[2] Da bi se testirala ta svojstva, potrebno je prethodno prirediti višeslojeve u različitim eksperimentalnim uvjetima, prije svega odgovarajuće debljine i sastava (primjerice asimetrični sastav: suvišak jednog polielektrolita u odnosu na drugi). Osim na pločicama, višeslojeve je moguće prirediti i na česticama metalnih oksida. To je posebno važno jer se određenim metodama može pokazati kako se sukcesivno mijenja predznak naboja na površini čestica tijekom adsorpcije različitih polielektrolita, a i sam iznos mjerene fizikalne veličine može, u načelu, upućivati na razlike u vezanju suprotno nabijenih polielektrolita (asimetrija).

Cilj ove vježbe je prirediti polielektrolitne višeslojeve na pločicama Si/SiO₂ u različitim ionskim uvjetima pri čemu bi se posebna pažnja posvetila utjecaju vrste elektrolita na debljinu višeslojeva [3] koja bi se određivala elipsometrijski. Na temelju promjene u polarizaciji reflektirane svjetlosti u odnosu na upadnu zbog optičkih svojstava uzorka, moguće je dobiti informacije o debljini različitih struktura, pa tako i o debljini polielektrolitnih višeslojeva.[4] Dobiveni elipsometrijski rezultati mogu se usporediti s onim dobivenim pomoću kvarc-kristalne mikrovage.



[1] H. Kerdjoudj, N. Berthelemy, F. Boulmedais, J.-F. Stoltz, P. Menu, J. C. Voegel, *Soft Matter* **2010**, 6, 3722–3734.

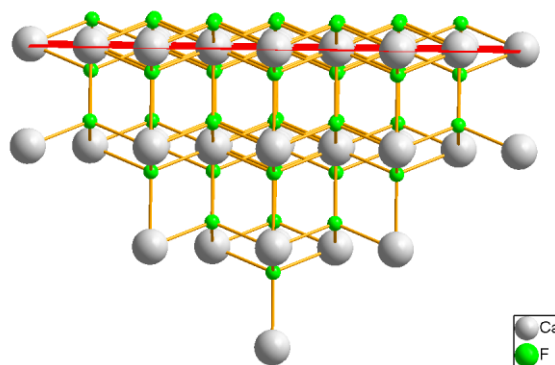
[2] L. Séon, P. Lavallo, P. Schaaf, F. Boulmedais, *Langmuir* **2015**, 31, 12856–12872.

[3] M. Salomäki, P. Tervasmäki, S. Areva, J. Kankare, *Langmuir* **2004**, 20, 3679–83.

[4] S. T. Dubas, J. B. Schlenoff, *Macromolecules* **1999**, 32, 8153–8160.

8. T. Preočanin, T. Klačić: *Kinetika otapanja (111) plohe fluorita**

Fluorit je jedan od polimorfa kalcijeva fluorida (CaF_2) čija su prirodna nalazišta vezana uz vulkanska i hidrotermalna područja.¹ Ovaj industrijski značajan mineral upotrebljava se u proizvodnji fluorovodične kiseline, aluminija, opalescentnih stakla, emajla, optičkih leća i zrcala, itd.² Slaba topljivost fluorita u vodenim otopinama ($K_{\text{sp}}^{\circ} = 3,08 \times 10^{-11}$ pri $25\text{ }^{\circ}\text{C}$)³ ima važnu ulogu u geokemijskim i ekološkim procesima te u različitim područjima industrije. Istraživanja su pokazala da se različite kristalografske plohe fluorita otapaju različitim brzinama pri istim eksperimentalnim uvjetima. Tako je primjerice otapanje (112) plohe fluorita čak oko 30 puta brže naspram otapanja (111) plohe fluorita što se objašnjava strukturnim različitostima ovih ploha. Na atomskoj razini strukture (111) plohe fluorita (slika) opaža se planarni heksagonski raspored Ca^{2+} iona ispod i iznad kojeg se nalaze slojevi F^{-} iona na udaljenosti od $1,88\text{ \AA}$. Ovakav strukturni motiv F-Ca-F-F-Ca-F slojeva ponavlja se u prostoru okomito na (111) plohu fluorita.⁴



Preliminarna kinetička mjerenja otapanja (111) plohe fluorita ukazala su na neočekivane rezultate stoga bi se u okviru ove vježbe ispitali utjecaji različitih čimbenika na brzinu otapanja (111) plohe fluorita poput pH otopine, koncentracije Ca^{2+} iona, brzine miješanja reakcijske smjese, itd. Utjecaji navedenih čimbenika istražili bi se *in situ* mjerenjima s ionskim selektivnim elektrodama. Na temelju dobivenih i literaturno poznatih rezultata predložio bi se mehanizam otapanja (111) plohe fluorita. Tijekom izrade ovog rada student će se upoznati s potencimetrijskim metodama i steći uvid u kinetička istraživanja otapanja kristala.

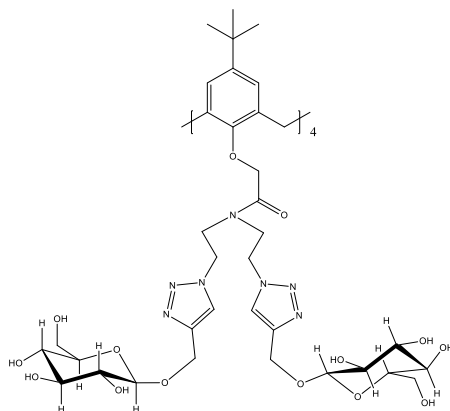
1. R. Zhang, S. Hu, X. Zhang, *Aquat. Geochem.* **12** (2006) 123–159.
2. M. J. Janicki, J. Drzymala, *Physicochem. Probl. Miner. Process.* **52** (2016) 451–458.
3. A. Garand, A. Mucci, *Mar. Chem.* **91** (2004) 27–35.
4. J. R. A. Godinho, S. Piazzolo, L. Z. Evins, *Geochim. Cosmochim. Acta* **86** (2012) 392–403.

9. N. Cindro: *Termodinamika kompleksiranja glikokonjugata kaliks[4]arena s ionima zemnoalkalijskih metala*

Kaliksareni su makrociklički oligomeri koji se sastoje od četiri ili više fenolnih podjedinica povezanih metilenskim skupinama u *ortho*-položaju fenola. Kaliksareni koji posjeduju ketonske, esterske ili amidne funkcionalne skupine na donjem obodu pokazuju veliki afinitet za vezanje kationa.

U sklopu vježbe istražit će se termodinamika reakcija kompleksiranja glikokonjugata kaliks[4]arena s kationima zemnoalkalijskih metala u vodi.

Svrha vježbe je upoznavanje studenta s različitim eksperimentalnim metodama (spektrofotometrija, kalorimetrija, NMR) za određivanje termodinamičkih parametara kompleksiranja.



Slika 1. Struktura glikokonjugata kaliks[4]arena.

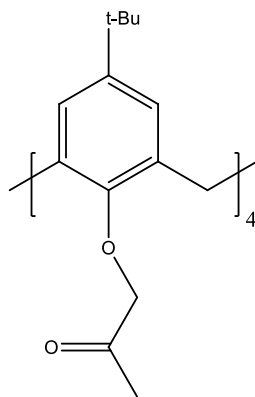
10. J. Požar: *Termodinamika inkluzije molekule otapala u hidrofobnu šupljinu ketonskog derivata kaliks[4]arena i njegovog kompleksa s natrijevim kationom**

Kaliksareni su makrociklički oligomeri koji se sastoje od četiri ili više fenolnih podjedinica povezanih metilenskim skupinama u *ortho*-položaju fenola. Nesupstituirani kaliksareni slabo vežu manje molekule i ione, dok kaliksareni koji posjeduju karbonilne i eterske skupine na donjem obodu pokazuju veliki afinitet za vezanje kationa, posebice alkalijskih i zemnoalkalijskih metala. Nastanak kompleksa u nekim je otapalima (acetonitril i benzonitril) često je popraćen vezivanjem molekula otapala u hidrofobnu kaliksarensku šupljinu što znatno utječe na stabilnost nastalih kompleksa. U našem prethodnom istraživanju detaljno je ispitana termodinamika kompleksiranja alkalijskih kationa s ketonskim derivatom kaliksarena (slika) koji posjeduje vezno mjesto na donjem obodu makrocikla u otapalima bitno drugačijih solvacijskih svojstava (broj i jačina vodikovih veza, dipolni moment i permitivnost).

U sklopu vježbe istražiti će se termodinamika reakcija kompleksiranja prikazanog ketonskog derivata kaliksarena kod kojeg je jedna funkcionalna skupina smještena na gornjem obodu receptora s natrijem u nekoliko otapala (metanol, etanol, acetonitril, formamid, metilformamid, dimetilformamid, dimetilsulfoksid). Afinitet kompleksa za

inkluziju molekula otapala u hidrofobnu šupljinu makrocikla istražiti će se u kloroformu pomoću spektroskopije NMR.

Svrha vježbe je upoznavanje studenta s različitim eksperimentalnim metodama (spektrofotometrija, kalorimetrija, spektroskopija NMR) za određivanje termodinamičkih parametara kompleksiranja i strukture nastalih adukata s molekulama otapala. Očekuje se da bi dobiveni rezultati mogli pružiti detaljniji uvid u utjecaj konformacije makrocikla na njegov afinitet prema natrijevom kationu, odnosno inkluziji molekula otapala u hidrofobnu šupljinu kompleksa.



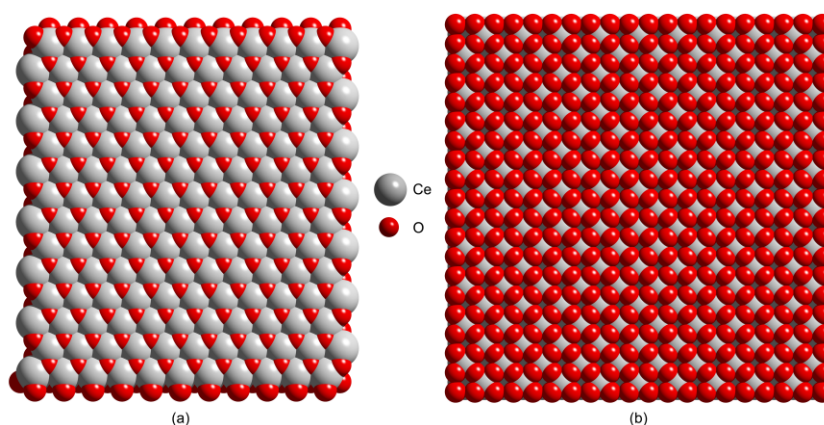
11. D. Namjesnik, T. Preočanin: Računalno definiranje aktivnih mjesta na površinama metalnih oksida

Pri kontaktu površina metalnih oksida s vodenim otopinama elektrolita dolazi do preraspodjele iona uz međupovršinu, nastajanja nabijenih površinskih skupina i formiranja električnog međupovršinskog sloja. Ovi procesi rezultiraju uspostavom potencijala uz površinu plohe koji se može mjeriti pomoću posebno konstruiranih monokristalnih elektroda.

Raspodjela iona uz površinu ovisi o gustoći i naboju aktivnih mjesta na površini metalnih oksida. Ta svojstva u velikoj mjeri određena su kristalnom strukturom i koordinacijskim brojevima pojedinih atoma.

Zadatci:

1. Vizualizacijom različitih kristalografskih ploha nekoliko kristala metalnih oksida u programu *Crystal Impact Diamond* i korištenjem Paulingovih pravila odrediti površinske koncentracije i naboje različitih aktivnih mjesta.
2. Za svaku aktivnu skupinu definirati sve površinske reakcije do kojih može doći u kontaktu s otopinom elektrolita.
3. Ovako dobiven (dobro definiran) sastav površine, zajedno sa modelom (skupom mogućih površinskih reakcija) može se upotrijebiti kao ulazni podatak za posebno izrađen program *P3R (a Python-PhreeqC coupled code for optimization and statistical analyses of chemical parameters)*. Rezultat je ovisnost površinskog (Ψ_0) i zeta (ζ) potencijala o pH, što se u konačnici može i usporediti s eksperimentalno dobivenim rezultatima.



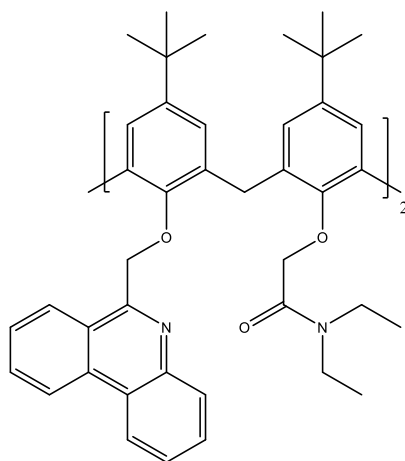
Slika. Primjer različitih ploha istog kristala CeO_2 : (a) (111), (b) (100).

12. K. Leko, V. Tomišić: *Termodinamika kompleksiranja fluorescentnog derivata kaliks[4]arena s kationima alkalijskih metala**

Kaliksareni su makrociklički oligomeri koji se sastoje od četiri ili više fenolnih podjedinica povezanih metilenskim skupinama u *ortho*-položaju fenola. Kaliksareni koji posjeduju ketonske, esterske ili amidne funkcionalne skupine na donjem obodu pokazuju veliki afinitet za vezanje kationa.

U sklopu vježbe istražit će se termodinamika reakcija kompleksiranja fluorescentnog fenantridinskog derivata kaliks[4]arena s kationima alkalijskih metala u više otapala kako bi se stekao uvid u utjecaj otapala na ravnoteže reakcija kompleksiranja. Također će se istražiti i utjecaj otapala i vezanja kationa na relativni intezitet fluorescencije te njegova potencijalna primjena kao fluorescentnog senzora.

Svrha vježbe je upoznavanje studenta s različitim eksperimentalnim metodama (spektrofotometrija, fluorimetrija, kalorimetrija) za određivanje termodinamičkih parametara kompleksiranja.



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

13. N. Bregović, V. Tomišić: *Istraživanja reakcija nastajanja piridinskih adukata oksobis(pentan-1,4-dionato)vanadija(IV) u acetonitrilu**

Adukti oksobis(pentan-1,4-dionato)vanadija(IV) (slika 1) s različitim derivatima piridina istraživani su u čvrstom stanju difrakcijom rentgenskih zraka na monokristalu te je utvrđeno da ovisno o bazičnosti piridinskog dušika dolazi do nastajanja ternarnih kompleksa (adukata) različitih geometrija, odnosno koordinacije piridina u *trans*- ili *cis*-položaj. Istražena je termodinamika reakcija nastajanja adukata u acetonitrilu pomoću spektrofotometrijskih titracija te je utvrđeno da konstanta stabilnosti kompleksa linearno ovisi Hammetovom σ parametru uz blaža odstupanja pojedinih derivata koja su vrlo vjerojatno posljedica steričkih efekata. Na temelju izračunanih karakterističnih spektara adukata pretpostavljeno je da konformacije kompleksa u otopini odgovaraju onima u čvrstom stanju.

U okviru ove vježbe istražiti će se kinetika nastajanja piridinskih adukata vanadija(IV) spektrofotometrijom zaustavljenog protoka. Cilj vježbe jest odrediti red reakcije nastajanja adukta te odrediti odgovarajuću konstantu brzine reakcije. Iz ranijih spektrofotometrijskih mjerenja poznato je da su te reakcije vrlo brze zbog čega se pretpostavlja da će *stopped flow* tehnika biti adekvatna za istraživanje njihove kinetike. Planirano je istraživanje adukata s dva piridinska derivata (piridin i 4-pikolin) u acetonitrilu. Dobiveni rezultati usporedit će se s odgovarajućim termodinamičkim funkcijama, a ispitat će se i veza konstanti brzine reakcije s Hammetovim parametrima.

14. N. Bregović, V. Tomišić: *Istraživanje kompleksa željeza(III) s aromatskim Schiffovim bazama u metanolu*

Schiffove baze predstavljaju izuzetno zanimljivu klasu spojeva budući da pronalaze primjenu u brojnim poljima kemije, velikim dijelom zbog činjenice da tvore vrlo stabilne komplekse s prijelaznim metalima, koji su često proučavani u otopini te je vrlo česta njihova katalitička aktivnost. Nerijetka je također pojava Schiffovih baza i u biokemijskim istraživanjima kao antitumorskih i antibakterijskih agensa.

U okviru ove vježbe će se uz pomoć različitih spektroskopskih tehnika (UV-Vis, NMR, IR) i potenciometrijski istražiti nastajanje kompleksa željeza(III) s dvije Schiffove baze u metanolu. Usporedbom određenih ravnotežnih konstanti steći će se detaljniji uvid u utjecaj različitih supstituenata na benzenskom prstenu na kompleksacijska svojstva te klase spojeva.

Svrha vježbe jest upoznavanje sa spektroskopskim i elektrokemijskim metodama, pristupom istraživanju kemijske ravnoteže u otopini i obradom eksperimentalnih podataka.

15. B. Bertoša: *Kvantitativni odnos strukturnih svojstava i antiproliferativne aktivnosti pirimidinskih derivata**

Pirimidinski derivati poznati su po svojoj antiproliferativnoj aktivnosti prema različitim staničnim linijama tumorskih stanica. Na temelju literaturno dostupnih podataka, izabrat će se skupina pirimidinskih derivata za koje je eksperimentalno određena antiproliferativna aktivnost te će ti spojevi izgraditi *in silico*. Programom Volsurf+ generirat će se strukturni deskriptori izabranih spojeva. Analizom glavnih komponenata (PCA) istražiti će se raspodjela generiranih deskriptora među izabranim spojevima. Koristeći regresijsku tehniku parcijalne projekcije najmanjih kvadrata (PLS) pokušat će se izgraditi modeli koji kvantitativno povezuju strukturne deskriptore izabranih spojeva i njihove izmjerene antiproliferativne aktivnosti. Za svaku staničnu liniju za koje budu dostupni podaci izgradit će se barem po jedan model. Na temelju generiranih modela, kao i na temelju rezultata analize glavnih komponenata, identificirat će se strukturni deskriptori s najvećim utjecajem na antiproliferativnu aktivnost izabrane skupine spojeva. Koristeći ta saznanja, dizajnirat će se novi spojevi te će se računalno predvidjeti njihova antiproliferativna aktivnost.

Neophodno predznanje

1. Osnove rada s računalom.
2. Osnove numeričkih metoda i matrice algebre. Osnove statistike.
3. Osnove kvantne kemije i molekularne spektroskopije.

Općeniti cilj vježbe

Izračun ploha potencijalne energije razapetih po torzijskim koordinatama dopamina i epinefrina te određivanje potpunog konformacijskog prostora.

Specifični ciljevi vježbe

1. Upoznavanje s radom u operacijskom sustavu Linux.
2. Upoznavanje s radom u kvantno-kemijskom programu *qcc*.
3. Upoznavanje s radom u programu za manipulaciju i analizu multi- i univariatnih skupova podataka *moonee*.
4. Određivanje ploha potencijalne energije te svih lokalnih minimuma.
5. Određivanje potpunog konformacijskog prostora i rangiranje prema standardnim Gibbsovim energijama stvaranja.

Kratki opis vježbe

Dopamin je neurotransmiter u ljudskom tijelu i ključan je za njegovo normalno funkcioniranje. Dopamin se primarno veže na β -1 receptore i zbog takve selektivnosti prikladniji je za korištenje kao srčani stimulator od epinefrina. Epinefrin ili adrenalin je hormon kojeg luči nadbubrežna žlijezda nakon pretrpljenog emocionalnog stresa. On priprema organizam za stanja kada treba hitno reagirati jer pod njegovim utjecajem poboljšava se protok krvi u raznim organima.

Kako biološka funkcija ovih spojeva osim o njihovoj prisutnosti ovisi i o njihovom konformacijskom prostoru, poznavanje konformacijskog prostora važno je za opis njihovih svojstava i aktivnosti. Konformacijski prostor bit će pretražen sustavnim pretraživanjem uz variranje svih kemijski relevantnih torzijskih kuteva te određivanjem lokalnih minimuma u n -dimenzijskom prostoru.

Plan rada

1. Upoznavanje s kemijskom strukturom proučavanih molekula i njihovom važnosti za život i zdravlje.
2. Upoznavanje s radom u operacijskom sustavu Linux.
3. Upoznavanje s radom u kvantno-kemijskom programu *qcc*. Testni proračuni i izrada inputa.
4. Upoznavanje s radom u programu za manipulaciju i analizu multi- i univariatnih skupova podataka *moonee*. Testni proračuni i izrada inputa.
5. Izračun n -dimenzijskih ploha potencijalne energije.
6. Određivanje svih lokalnih minimuma za n -dimenzijske plohe potencijalne energije.
7. Određivanje potpunog konformacijskog prostora i rangiranje prema standardnim Gibbsovim energijama stvaranja.
8. Izrada izvješća (kontinuirano tijekom 1–7).

Stechene kompetencije

1. Iskustvo u radu s operacijskim sustavom Linux.
2. Iskustvo u radu s kvantno-kemijskim programima te naprednim numeričkim i statističkim metodama.
3. Poznavanje naprednih metoda za konformacijsku analizu.

Očekivani ishodi vježbe

1. Određeni potpuni konformacijski prostori.