**HRVATSKA AKADEMIJA ZNANOSTI I UMJETNOSTI**

RAZRED ZA MATEMATIČKE, FIZIČKE I KEMIJSKE ZNANOSTI

HRVATSKA KRISTALOGRAFSKA ZAJEDNICA

**Znanstveni skup**

**SUVREMENA KRISTALOGRAFIJA U HRVATSKOJ**

30. rujna 2014.

u povodu **Međunarodne godine kristalografije 2014.**

**PROGRAM**

***Ujutro***

9.15 – 9.25 ***Otvorenje skupa***

***Priopćenja*** *– Predsjedavajuće Marija Luić, Dubravka Matković Čalogović*

9.25 – 9.55 Biserka Kojić Prodić:

Rendgenska kristalografija – interdisciplinarna znanost – izazov za budućnost

X-ray crystallography – interdisciplinary science – a challenge for the future

9.55 – 10.10 Stanko Popović, Antun Tonejc, Željko Skoko:

Suvremene difrakcijske metode u istraživanju polikristala

Contemporary diffraction methods in study of polycrystals

10.10 – 10.25 Željko Skoko, Jasminka Popović, Stanko Popović:

Analiza proširenja rendgenskih difrakcijskih linija – kako odrediti mikrostrukturu  
X-ray diffraction line broadening analysis – how to determine microstructure

10.25 – 10.40 Martina Vrankić, Biserka Gržeta, Dirk Lützenkirchen-Hecht, Sanja  Bosnar, Ankica Šarić:  
Metode XANES, EXAFS i rendgenska difrakcija u određivanju strukture  polikristalnih dopiranih materijala  
XANES, EXAFS and X-ray diffraction in structure determination of doped  polycrystalline materials

10.40 – 11.00 ***Stanka***

***Priopćenja*** *– Predsjedavajući Darko Tibljaš, Antun Tonejc*

11.00 – 11.15 Anđelka M. Tonejc, Davorin Medaković, Stanko Popović, Andrej Jaklin, Mirjana Bijelić, Ivana Lončarek:

Strukturna istraživanja biomineralizacije morskoga zekana vrste *Aplysia punctata* metodama elektronske  mikroskopije i difrakcije

Structural studies of biomineralization in the sea hare *Aplysia punctata* by electron microscopy and diffraction

11.15 – 11.30 Mira Ristić, Svetozar Musić, Stanko Popović, Mark Žic, Marijan  Marcius, Željka Petrović:

Metalni oksidi – sinteza i mikrostruktura

Metal oxides – synthesis and microstructure

11.30 – 11.40 Goran Štefanić:

Strukturne i kemijske promjene uzrokovane kontaminacijom tijekom  intenzivnog mljevenja

Structural and chemical  changes caused by contamination during the high-energy milling

11.40 – 11.50 Dražen Balen:

Morfologija cirkona – primjena u geološkim istraživanjima

Zircon typology – application in geological investigations

11.50 – 12.00 Vladimir Bermanec, Vladimir Zebec, Željka Žigovečki Gobac, Snježana Mikulčić Pavlaković:

Značaj izučavanja kristalne morfologije

Importance of crystal morphology investigations

12.00 – 12.10 Ognjen Milat:

Četverodimenzijska kristalografija; studij modulirane strukture kompozitnog kristala (M)*x*CuO2

Four-dimensional crystallography;a case study of modulated (M)*x*CuO2 composite crystal structure

12.10 – 12.20 ***Stanka***

12.20 – 13.00 Predstavljanje *Englesko-hrvatskoga rječnika kristalografije, fizike kondenzirane tvari i fizike materijala*, autori Stanko Popović, Antun Tonejc, Milica Mihaljević; Institut za hrvatski jezik i jezikoslovlje, 2014.

***Poslijepodne***

***Priopćenja*** *– Predsjedavajući Marijana Đaković, Vladimir Stilinović*

15.30 – 15.40 Vjera Novosel-Radović, Nikol Radović, T. Marjanović, M. Balen, F. Šafar:

Uloga rendgenske difrakcije u procesu održavanja parnoga termoenergetskog postrojenja

The role of X-ray diffraction in the process of servicing the steam power plant

15.40 – 15.55 Ernest Meštrović:

Kristalografija u istraživanju i kontroli djelatnih tvari

Crystallography in the research and control of active pharmaceutical ingredients

15.55 – 16.10 Goran Mikleušević, Zoran Štefanić, Marija Luić:

Uvid u katalitički mehanizam purin nukleozid fosforilaze iz *E. coli* s pomoću rendgenske kristalografije  
Insights into the catalytic mechanism of *E. coli* purine nucleoside phosphorylase by X-ray crystallography

16.10 – 16.25 Biserka Prugovečki, Dubravka Matković-Čalogović:

Strukturna istraživanja derivata inzulina

Structural characterization of insulin derivatives

16.25 – 16.40 Sanja Tomić, Alan Tus, Alen Rakipović, Goran Peretin, Mile Šikić:

BioMe: mrežni poslužitelj za analizu veznih mjesta metala u eksperimentalno određenim 3D strukturama biomakromolekula

BioMe: web-based platform for analysis of the metal-binding sites in the experimentally determined biomacromolecular 3D structures

16.40 – 16.50 ***Stanka***

***Priopćenja*** *– Predsjedavajući Biserka Prugovečki, Zoran Štefanić*

16.50 – 17.00 Mario Cetina, Ante Nagl, Vedran Krištafor, Krešimir Benci, Karlo Wittine, Mladen Mintas:

Supramolekulsko udruživanje nukleozidnih analoga

Supramolecular assembling of nucleoside analogues

17.00 – 17.10 Krešimir Molčanov:

Kristalno inženjerstvo u pripravi funkcionalnih π-elektronskih  sustava temeljeno na kinoidnim spojevima

Crystal engineering in design of functional π-electronic systems  based in quinoid compounds

17.10 – 17.20 Aleksandar Višnjevac:

Rendgenska strukturna analiza monokristala u istraživanju biomimetičkih modela mononukelarnih aktivnih mjesta metaloenzima

Single crystal X-ray diffraction in investigation of biomimetic models of mononuclear metalloezyme active sites

17.20 – 17.30 Marijana Đaković, Zora Popović:

Strukturna istraživanja halogenskih veza u kompleksima Cu(II) i Ag(I)

Structural studies of halogen bonds in Cu(II) i Ag(I) complexes

17.30 – 17.40 Boris Marko Kukovec, Marijana Đaković, Neven Smrečki-Lolić, Zora Popović:

Kompleksi Ni(II) i Pd(II) s derivatima iminodioctene kiseline – priprava, kristalne strukture i katalitička svojstva

Nickel(II) and palladium(II) complexes with derivatives of iminodiacetic acid – preparation, crystal structures and catalytic properties

17.40 – 17.50 ***Stanka***

***Priopćenja*** *– Predsjedavajući Jasminka Popović, Aleksandar Višnjevac*

17.50 – 18.00 Gordana Pavlović, Marina Cindrić:

Supramolekulsko dizajniranje magnetskih svojstava tetranuklearnih niklovih(II) kompleksa

Magnetic properties of tetranuclear nickel(II) complexes by supramolecular design

18.00 – 18.10 Mirta Rubčić, Ivan Halasz, Gordana Pavlović, Damir Pajić, Marina Cindrić:

Imino derivati karbonohidrazida i njihovi koordinacijski spojevi

Imino derivatives of carbohydrazide and their coordination compounds

18.10 – 18.20 Vladimir Stilinović, Branko Kaitner:

Utjecaj molekulskog dipolnog momenta na simetriju molekulskih kristala

Influence of molecular dipole moment on the symmetry of molecular crystals

18.20 – 18.30 Ivica Đilović, Krunoslav Užarević, Dubravka Matković-Čalogović, Marina Cindrić:

Molekulsko prepoznavanje – uloga anionskih templata u kemiji fleksibilnih receptora

Molecular recognition – the role of anionic templates in the chemistry of flexible receptors

18.30 – 18.45 Igor Djerdj:

Primjena direktnih metoda i metoda u kristalnom prostoru u rješavanju kristalnih struktura nekih složenih nanokristalnih spojeva

Employment of direct and direct-space methods for solving crystal structures of several complex nanocrystalline compounds

18.45 Stanko Popović: Završna riječ