

**SAŽETCI ZNANSTVENIH RADOVA
TEHNOLOGIJADA 2018.**

FAKULTET KEMIJSKOG INŽENJERSTVA I TEHNOLOGIJE

MATEMATIČKO MODELIRANJE PROIZVODNJE OPTIČKI AKTIVNOG DIOLA KORIŠTENJEM VIŠEENZIMSKOG SUSTAVA

MATEMATICAL MODELLING OF OPTICALLY ACTIVE DIOLS PRODUCTION BY MULTIENZYME CATALYSIS APPROACH

Tatjana Baković

Mentorica: izv. prof. dr. sc. Ana Vrsalović Presečki

Zavod za reakcijsko inženjerstvo i katalizu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Sveučilište u Zagrebu, Marulićeve trg 19, 10000 Zagreb

tbakovic@fkit.hr

U području biokatalize, kaskadne višeenzimске reakcije su važan pristup za proizvodnju optički aktivnih spojeva. Navedeni pristup je vrlo obećavajući s ekološke i ekonomske točke gledišta, jer se time postižu veće konverzije i produktivnosti, troši se manje kemikalija, izbjegava se izolacija međuprodukata, a na industrijskoj razini se smanjuju troškovi otpada i proizvodnje. Sintaza kiralnih spojeva uvijek predstavlja izazov u području organske kemije, posebice proizvodnja molekula s dva kiralna centra, kao što su kiralni 1,2-diol. U ovom radu je u svrhu dobivanja enantiomerno čistog diastereoselektivnog 1,2-diola proučavan višeenzimski sustav koji se sastojao od reakcije stereoselektivne karboligacije, katalizirane enzimom benzoilformat dekarboksilazom (BFD), L-selektivne redukcije karbonilne skupine s alkohol dehidrogenazom iz *Lactobacillus brevis* (*LbADH*) uz regeneraciju koenzima korištenjem formijata dehidrogenaze (FDH). Određena je kinetika svih enzima. Ispitan je utjecaj acetaldehida na stabilnost BFD i *LbADH*. Na temelju tih rezultata postavljen je matematički model. Ispitana su dva različita načina provedbe višeenzimskih reakcija: sekvencijalni i simultani način. Na temelju rezultata simulacije predložen je optimalni način provedbe te optimalni početni uvjeti.

Ključne riječi: matematičko modeliranje, benzoilformat dekarboksilaza, alkohol dehidrogenaza, formijat dehidrogenaza, (1S,2S)-1-fenilpropan-1,2-diol

Within the field of biocatalysis, multi-enzyme cascade reactions are an important strategy for the production of optically active chemicals. This approach is very promising from an environmental and as well the economical point of view since in this manner higher yields and productivities is accomplished, fewer chemicals are spent, isolation of intermediates is avoided and on industrial scale, waste and production costs are reduced. The synthesis of chiral building blocks is always challenging in the field of organic chemistry, especially the production of molecules with two chiral centers, as the chiral 1,2diols. By coupling stereoselective carbonylation catalyzed by benzoylformate decarboxylase (BFD), L-selective reduction of carbonyl group with alcohol dehydrogenase from *Lactobacillus brevis* (*LbADH*) as well as the coenzyme regeneration by formate dehydrogenase (FDH), enantiomerically pure diastereoselective 1,2-diol production was explored. All enzymes were kinetically characterized. The impact of acetaldehyde on the BFD and ADH stability was investigated. Based on these results mathematical model was set. Two different multi-enzyme system approaches were applied: the sequential twostep one-pot and the simultaneous one-pot cascade. Based on the result from the simulation by model optimal approach as well the optimal initial conditions were proposed.

Keywords: mathematical modelling, benzoylformate decarboxylase, alcohol dehydrogenase, formate dehydrogenase, (1S,2S)-1-phenylpropane-1,2-diol

ISPITIVANJE EFIKASNOSTI PEDOT/TiO₂ KOMPOZITNOG FOTOKATALIZATORA PRI RAZLIČITIM KONCENTRACIJAMA KATALIZATORA TIJEKOM RAZGRADNJE ACID BLUE 25 BOJILA

TESTING THE EFFICIENCY OF PEDOT/TiO₂ COMPOSITE PHOTOCATALYST AT DIFFERENT CONCENTRATION OF THE CATALYST DURING THE DECOMPOSITION OF ACID BLUE 25 DYE

Nikolina Nascimento Mrakovčić

Mentorica: Prof. dr. sc. Zlata Hrnjak-Murgić

Zavod za polimerno inženjerstvo i organsku kemijsku tehnologiju
Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Marulićev trg 19, 10000 Zagreb
nnascimen@fkit.hr

Jedan od suvremenih procesa pročišćavanja otpadnih voda su napredni oksidacijski procesi (*eng. Advanced Oxidation Processes, AOP*) čiji je princip djelovanja razgradnja organskog onečišćivala u prisustvu fotokatalizatora koji se aktivira apsorpcijom svjetla. Danas najčešće korišten fotokatalizator je titanijev dioksid (TiO₂) zbog svojih brojnih dobrih svojstava, a osnovni nedostatak mu je velika širina zabranjene zone (E_g), tj. aktivira se apsorpcijom UV svjetla koje je sadržano u vrlo malom udjelu u Sunčevu spektru. Stoga je u radu pripremljen kompozitni fotokatalizator na osnovi TiO₂ i vodljivog polimera poli(3,4-etilendioksitiofena) (PEDOT) kako bi se aktivacija katalizatora pomaknula ka vidljivom dijelu spektra. Kemijskom oksidacijskom polimerizacijom sintetizirani su PEDOT/TiO₂ kompozitni fotokatalizatori uz FeCl₃ kao oksidans. Omjeri monomera EDOT-a i nanočestica TiO₂ bili su: 1:2, 1:3, 1:4, 1:5, 1:10 i 1:20. Kompozitni fotokatalizatori su karakterizirani FTIR i UV/Vis spektroskopijom dok je fotokatalitička aktivnost ispitana praćenjem razgradnje Acid Blue 25 (AB25) bojila u vodi uz simulirano Sunčevo zračenje. Tijekom procesa fotokatalize praćeno je smanjenje koncentracije AB25 bojila u otpadnoj vodi određivanjem promjene apsorbancije s UV/Vis spektrometrom, dok je proces mineralizacije AB25 bojila praćen određivanjem ukupnog organskog ugljika (*eng. Total organic carbon, TOC*).

Iz rezultata je vidljivo da se smanjenjem udjela PEDOT vidljivog polimera u kompozitnom fotokatalizatoru povećava njegova fotokatalitička učinkovitost pod djelovanjem Sunčeva zračenja.

Ključne riječi: fotokataliza, poli(3,4-etilendioksitiofen), titanijev dioksid, Acid Blue 25

Advanced oxidation processes (AOP) are one of the modern processes for the wastewater treatment with the principle to decompose organic pollutants in the presence of photocatalyst activated by the absorption of light. Today, the most widely used photocatalyst is titanium dioxide (TiO₂) due to its many good properties, while its main drawback is the width of the band gap (E_g), i.e. it can be activated only by the absorption of UV light, which is present in a very small percentage in the solar spectrum. Therefore a composite photocatalyst based on TiO₂ and a conductive polymer of poly(3,4-ethylenedioxythiophene) (PEDOT) was prepared in order to activate the catalyst with the visible light irradiation. PEDOT/TiO₂ composite photocatalysts were synthesized by chemical oxidative polymerization with FeCl₃ as an oxidant. The ratios of EDOT monomer and TiO₂ nanoparticles were: 1:2, 1:3, 1:4, 1:5, 1:10 and 1:20. Composite photocatalysts were characterized by FTIR and UV / Vis spectroscopy while photocatalytic activity was tested by monitoring the decomposition of Acid Blue 25 (AB25) dyes in water under simulated solar light irradiation. During the photocatalysis, the reduction of the AB25 dye concentration in the wastewater was monitored by determining the change of absorbance with the UV/Vis spectrometer, while the mineralization process of the AB25 dye was monitored by determination of total organic carbon (TOC).

From the results it can be seen that with the lower concentration of the PEDOT polymer in the composite photocatalyst its photocatalytic efficiency under the solar simulated irradiation increases.

Keywords: photocatalysis, poly(3,4-ethylenedioxythiophene), titanium dioxide, Acid Blue 25

FLUORESCENCIJSKI KEMIJSKI SENZORI TEMELJENI NA KUMARINU

COUMARIN-BASED FLUORESCENT CHEMOSENSORS

Katarina Majnarić

Mentorica: v. pred. dr. sc. Lidija Furač

Zavod za opću i anorgansku kemiju, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Sveučilište u Zagrebu,
Marulićev trg 19, 10000 Zagreb
majnarić@fkit.hr

Kumarini su se zadnjih godina pokazali kao obećavajuće strukture u dizajnu i sintezi novih kemosenzorskih molekula zbog svojih fluorescentnih svojstava, a otkrićem *click*-kemije predstavljen je novi način sinteze spojeva jednostavnim i brzim postupcima. Ovim načinom sinteze dizajnirani su mnogobrojni kemosenzori, a u radu je dan pregled dosad istraženih kemijskih senzora za metalne ione i pH temeljenih na derivatima kumarina i triazola.

Cilj rada bila je sinteza i spektroskopska karakterizacija novog derivata kumarina kao potencijalnog kemijskog senzora. Ciljani spoj 7-(4-(4-(dimetilaminofenil)-1*H*-1,2,3-triazol-1-il)-4-metil-2*H*-kromen-2-on (spoj **3**) pripremljen je klasičnom reakcijom organske sinteze i *click*-reakcijom odgovarajućeg azido derivata kumarina i 4-etinil-*N,N*-dimetilanilina uz Cu(I) kao katalizator. U svrhu ispitivanja mogućnosti primjene spoja kao optičkog pH senzora i senzora za metalne ione, istražene su promjene njegovih spektroskopskih svojstava ovisno o pH otopine uz prisutnost različitih metalnih soli primjenom UV/Vis i fluorimetrijske spektroskopije.

Spoj **3** pokazuje ovisnost spektrofotometrijskih svojstava o vrijednosti pH otopine te je zbog toga potencijalni pH senzor. Preliminarna ispitivanja u otopinama etanola s dodatkom različitih metalnih soli pokazala su značajan utjecaj prisutnosti Hg²⁺ i Li⁺ iona na apsorpcijski i emisijski spektar spoja **3**. Potrebno je provesti dodatna detaljnija ispitivanja kako bi se sa sigurnošću utvrdila senzorska primjena spoja **3** za navedene metale.

Gljučne riječi: optički senzori, kumarin, triazol, click-kemija, fluorescencija

Coumarins are promising structures in the synthesis and design of novel chemosensors as they exhibit fluorescence properties. With the discovery of *click*-chemistry, a new way of synthesizing compounds with simple and quick synthetic steps has been found. A significant number of potential chemosensors was designed by the click chemistry approach. In this work, an overview of chemosensors for metal ions and pH based on the derivatives of coumarin and triazole is given.

This work presents the synthesis and spectroscopic characterization of a novel coumarin derivative as potential chemosensor. Targeted compound 7-(4-(4-(dimethylamino)phenyl)-1*H*-1,2,3-triazol-1-yl)-4-methyl-2*H*-chromen-2-one (compound **3**) was prepared by classical chemical reaction of organic chemistry and by *click*-reaction from the corresponding azido-coumarin derivative and 4-ethynyl-*N,N*-dimethylaniline in the presence of Cu(I) as catalyst. In order to determine the possibility of application as pH and metal ion sensor, the changes of the compounds spectroscopic properties depending on the pH value and in presence of different metal ions were studied by UV/Vis and fluorescence spectroscopy.

Compound **3** shows dependence of spectroscopic properties on the pH value of the solution, and is therefore a potential pH sensor. Preliminary testing in ethanol solutions with the addition of various metal salts showed a significant influence in the presence of Hg²⁺ and Li⁺ ions in absorption and emission spectrum of compound **3**. It is required to carry out more detailed testing to determine the sensing application of compound **3** for said metals.

Keywords: optical sensors, coumarin, triazol, click-chemistry, fluorescence

UNAPRIJEĐENA BIOREMEDIJACIJA INDUSTRIJSKE FARMACEUTSKE OTPADNE VODE

ENHANCED BIOREMEDIATION OF INDUSTRIAL PHARMACEUTICAL WASTEWATER

Martina Miloloža, Klara Perović

Mentorica: prof. dr. sc. Marija Vuković Domanovac

Zavod za industrijsku ekologiju, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Sveučilište u Zagrebu, Marulićev trg 19, 10 000 Zagreb
miloloza@fkit.hr

Zadnjih godina, pronalazak farmaceutika u okolišu izaziva sve veću pozornost. Proizvodnjom farmaceutika zaostaju otpadne vode koje mogu sadržavati neizregairane reaktante, aditive, katalizatore, organska otapala, međuprodukte i ostatke aktivnih farmaceutskih tvari. Kako bi se smanjio negativan utjecaj po okoliš, otpadne se vode iz farmaceutske industrije obrađuju prije njihova ispuštanja u okoliš. Biološka obrada je prihvatljiva zbog isplativosti, ekološke prihvatljivosti i učinkovitosti. Bioremedijacija podrazumijeva iskorištavanje enzimatskog potencijala mikroorganizama za razgradnju onečišćujućih tvari u kontroliranim uvjetima. Dodatkom specifičnih mikroorganizama u sustav, ostvaruje se povećanje učinkovitosti, a takav se postupak naziva bioaugmentacija. U ovom radu istraživana je bioremedijacija farmaceutske otpadne vode pomoću aktivnog mulja i bioaugmentiranog aktivnog mulja. Bakterijska kultura korištena za bioaugmentaciju je *Pseudomonas putida*, koja je izolirana iz otpadne vode farmaceutske industrije. Pokus biorazgradnje je proveden u šaržnim uvjetima s početnom koncentracijom supstrata $S_0=5,0 \text{ g L}^{-1}$ i različitim početnim koncentracijama aktivnog mulja, X_0 , u rasponu od $3,7 \text{ g L}^{-1}$ do $5,8 \text{ g L}^{-1}$. Mikroskopskom analizom praćena je morfologija pahuljica aktivnoga mulja. Proces biorazgradnje farmaceutske otpadne vode opisan je Endo-Haldaneovim kinetičkim modelom. Prema rezultatima F – testa, Endo-Haldaneov model dobro opisuje rezultate pokusa. U sustavu s bioaugmentiranim aktivnim muljem postignuta je veća učinkovitost od 80 % i proces biorazgradnje je ubrzan za 6 sati u odnosu na aktivni mulj bez bioaugmentacije.

Ključne riječi: farmaceutska otpadna voda, bioremedijacija, bioaugmentacija, kinetički model

In recent years, attention has been drawn toward the occurrence of pharmaceuticals in the environment. During the pharmaceutical manufacturing, the wastewaters are produced which may contain raw materials, additants, catalysts, organic solvents, intermediates and residues of active pharmaceutical ingredients. In order to reduce the negative environmental impact, wastewaters from pharmaceutical industry must be treated before being discharged into the environment. Biological treatment is acceptable due to its economic cost, environmental acceptability and efficiency. Bioremediation is the use of microorganisms under controlled conditions which possess the enzymatic potential for degradation of pollutants. Addition of specific microorganisms in the system, which is called bioaugmentation, increases efficiency of biodegradation. In this study, bioremediation of pharmaceutical wastewater by activated sludge and bioaugmented activated sludge was investigated. Bacterial culture used for bioaugmentation was *Pseudomonas putida*, which was isolated from pharmaceutical wastewater. The experiment was conducted in batch reactor at initial concentration of substrate $S_0=5,0 \text{ g L}^{-1}$ and different initial concentrations of activated sludge, X_0 , ranged from $3,7 \text{ g L}^{-1}$ to $5,8 \text{ g L}^{-1}$. By microscopic analysis of activated sludge, morphological characteristics of activated sludge flocs were monitored. The process of biodegradation was described by the Endo-Haldane kinetic model. According to the results of the F – test, good matches were achieved between the experimental data and the Endo-Haldane model. The efficiency of 80 % was achieved with bioaugmented activated sludge where process of biodegradation was accelerated for 6 hours, in regard to biodegradation process without bioaugmented activated sludge.

Key words: pharmaceutical wastewater, bioremediation, bioaugmentation, kinetic model

ISPITIVANJE EFIKASNOSTI PEDOT/TiO₂ KOMPOZITNOG FOTOKATALIZATORA PRI RAZLIČITOM OPTEREĆENJU VODA ONEČIŠĆENIH ACID BLUE 25 BOJILOM

TESTING THE EFFICIENCY OF PEDOT/TiO₂ COMPOSITE PHOTOCATALYST AT DIFFERENT LOAD OF ACID BLUE 25 DYE CONTAMINANT IN WATER

Tina Posedi

Mentorica: prof. dr. sc. Zlata Hrnjak-Murđić

Zavod za polimerno inženjerstvo i organsku kemijsku tehnologiju, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Sveučilište u Zagrebu, Marulićev trg 19, 10000 Zagreb
tposedi@fkit.hr

Fotokataliza je jedna od kemijskih metoda obrade otpadnih voda uz TiO₂ kao katalizator. Zbog široke zabranjene zone aktivan je samo pod UV svjetlom, pa ga je potrebno aktivirati elektrovodljivim polimerima.

U radu su sintetizirani nanokompozitni fotokatalizatori elektrovodljivog polimera poli(3,4-etilendioksitiofen) i titanijevog oksida (PEDOT-TiO₂) metodom kemijske oksidacijske polimerizacije uz prisutnosti FeCl₃ kao oksidansa. Omjeri EDOT-a i TiO₂ prilikom sinteze bili su 1:2, 1:3, 1:4, 1:5, 1:10 i 1:20 zbog čega nastali kompoziti imaju različiti sastav. Okarakterizirani su mjerenjem elektrovodljivosti i ispitivanjem morfološke strukture. Fotokatalitička aktivnost ispitana je praćenjem razgradnje AcidBlue 25 bojila ($\gamma = 30$ mg/L) u vodi uz prisutnost simuliranog Sunčevog zračenja i određivanjem apsorbancije na UV/Vis spektrofotometru. Nanokompozitni fotokatalizator PEDOT-TiO₂ omjera 1:20 upotrijebljen je za određivanje fotokatalitičke aktivnosti za različite koncentracije AB25 bojila (20, 30, 40, 60 mg/L).

Rezultati ispitivanja pokazali su da se povećanjem koncentracije AcidBlue 25 bojila smanjuje fotokatalitička aktivnost nanokompozitnog fotokatalizatora PEDOT-TiO₂ omjera 1:20.

Ključne riječi: otpadne vode, fotokataliza, poli(3,4-etilendioksitiofen), kompozitni fotokatalizator, Acid Blue 25 bojilo

Photocatalysis is one of the chemical methods used for treatment of wastewaters with TiO₂ as photocatalyst. Because of its wide band gap it is active only under UV light. Conductive polymers are used for its activation.

In this work the nanocomposite photocatalysts of conductive polymer poly(3,4-ethylenedioxythiophene) and titanium oxide (PEDOT-TiO₂) were synthesized with FeCl₃ oxidant by chemical oxidative polymerization. Composites were synthesized with ratios of EDOT:TiO₂ during synthesis of 1:2, 1:3, 1:4, 1:5, 1:10 and 1:20 which resulted in different composition of obtained photocatalysts. They were characterized by measuring the conductivity and determination of morphological structure. The photocatalytic activity was investigated by monitoring the removal of AcidBlue 25 dye ($\gamma = 30$ mg/L) in water under the simulated solar irradiation and by determining absorbance on the UV/Vis spectrophotometer. Nanocomposite photocatalyst PEDOT-TiO₂ 1:20 was used to determine photocatalytic activity for different concentrations of AB25 dye (20, 30, 40, 60 mg/L).

The results showed that higher concentration of Acid Blue 25 dye caused lower photocatalytic activity of nanocomposite photocatalyst PEDOT-TiO₂ 1:20.

Key words: wastewaters, photocatalyst, poly(3,4-ethylenedioxythiophene), composite photocatalyst, Acid Blue 25 dye

FAKULTETA ZA KEMIJO IN KEMIJSKO TEHNOLOGIJO

VPLIV OZONACIJE NA MOŽNOST ODSTRANJEVANJA VETERINARSKEGA ANTIBIOTIKA V BIOLOŠKI ČISTILNI NAPRAVI

THE IMPACT OF OZONATION ON TREATABILITY OF VETERINARY ANTIBIOTIC IN BIOLOGICAL WASTEWATER TREATMENT PLANT

Teja Antončič, Anja Vehar

Mentor: Prof. Ing. Ján Derco, DrSc.¹

Co-mentor: Assoc. Prof. Dr. Andreja Žgajnar Gotvajn²

¹Faculty of Chemical and Food Technology STU in Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia

²University of Ljubljana, Faculty for Chemistry and Chemical Engineering,
Večna pot 113, SI-1000 Ljubljana, Slovenia

anja.vehar15@gmail.com

Onesnaževanje okolja z globalno uporabo antibiotikov in drugih farmacevtskih učinkovin postaja vedno bolj zaskrbljujoč problem. Ugotovljena je bila prisotnost farmacevtikov v prsti in vodi, torej je skrajni čas za razvoj in začetek uporabe tehnik za preprečevanje nadaljnega vnosa v okolje. Razgradnja velikih organskih molekul lahko vodi k nastanku celo bolj strupenih stranskih produktov, zato je njihov vpliv na okolje potrebno raziskati.

Namen našega dela je bil primerjava vpliva raztopine veterinarske farmacevtske učinkovine tiamulin pred in po ozonaciji na mikroorganizme v aktivnem blatu biološke čistilne naprave. S pomočjo respirometrije in kinetičnih testov je bila narejena študija vpliva na biorazgradnjo in proces nitrifikacije. Določili smo tudi vpliv raztopine preiskovanega antibiotika pred in po ozonaciji na anaerobno stabilizacijo odpadnega aktivnega blata. Glede na eksperimentalne podatke so bili, z uporabo multivariabilne regresije in optimizacijskih kalkulacij, določeni parametri multivariabilne regresijske enačbe. Pridobljeni parametri so bili nato uporabljeni za izračun optimalnih vrednosti neodvisnih spremenljivk za doseg maksimalnih in minimalnih vrednosti odvisnih spremenljivk.

Raztopina tiamulina po ozonaciji je povečevala specifično hitrost porabe kisika med razgradnjo ogljikovih organskih snovi v komunalni odpadni vodi kot tudi nitrifikacijo. Zaznali smo inhibicijo produkcije bioplina ob dodatku raztopine tiamulina. Rezultati so potrdili visok potencial ozonacije za obdelavo strupenih in težko biorazgradljivih onesnaževal z ozonacijo.

Gljučne besede: tiamulin, ozonacija, aktivno blato, nitrifikacija, aerobna in anaerobna razgradnja

Pollution of the environment by global use of antibiotics and other pharmaceuticals is becoming more and more concerning problem. Lately, the veterinary pharmaceuticals have been discovered in soils and waters, which is the reason why techniques to prevent further contamination should be developed and implemented. Decomposition of large organic contaminants can generate by-products, which can be sometimes even more toxic, so their influence must be investigated.

The aim of our work was to compare the impact of ozonated and non-ozonated solution of veterinary antibiotic tiamulin on activated sludge microorganisms. The influence on biodegradation of carbonaceous organic compounds and nitrification process was studied using respirometric measurements and kinetic tests. The influence of ozonated and non-ozonated antibiotic solution on anaerobic stabilization of the sludge was also examined. Based on experimental data, acquired with respirometric measurements and anaerobic sludge stabilization test using multivariable regression and optimisation calculations, parameters of the multivariable regression equation were determined. The parameters were used to calculate optimal values of independent variables to obtain maximal and minimal values of dependent variables.

Ozonated tiamulin increased oxygen uptake rate during the removal of organics from a municipal wastewater as well as during nitrification. Inhibition of biogas production in presence of non-ozonated tiamulin solution was also noticed. However, the results of work confirmed high perspectives of ozonation process to treat toxic and biologically resistant pollutants.

Key words: tiamulin, ozonation, activated sludge, nitrification, aerobic and anaerobic degradation

**SINTEZA RUTENIJEVIH BIDENTATNIH KOMPLEKSOV Z RAZLIČNIMI LIGANDI ZA PROUČEVANJE
PRENOSA ELEKTRONOV, PROTONOV IN PRETVORBE KISIKA V CITOKROM C OKSIDAZI**

**SYNTHESIS OF RUTHENIUM TRIS-HETEROLEPTIC COMPLEXES WITH BIDENTATE LIGANDS FOR
STUDYING ELECTRON TRANSFER, PROTON PUMPING AND OXYGEN CONVERSION IN CYTOCHROME
C OXIDASE**

Matej Kolarič

Mentor: J.Prof. Dr. Carl Christoph Tzschucke

Mentor: izr. prof. dr. Franc Požgan

Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo

Večna pot 113, 1000 Ljubljana

this.is.i@hotmail.com

Delo opisuje sintezo rutenijevih kompleksov s tremi različnimi bidentatnimi ligandi z ustrežno skupino za vezavo na proteine. Takšni kompleksi so izjemni zaradi zmožnosti iniciacije elektrona na kovalentno vezano molekulo ob izpostavitvi svetlobi s primerno valovno dolžino. Ti kompleksi bodo uporabljeni v biokemijskih študijah v raziskovalni skupini Prof. Dr. J. Heberleja na Freie Universität Berlin, ki bo zbrala nove podatke o prenosu elektronov, protonov in pretvorbi kisika v citokrom C oksidazi.

Opisana je novo razvita "one-pot" sinteza v dveh korakih za pripravo rutenijevega kompleksa **1** kjer nosi ligand **L^a** zaščiteno maleimidno funkcionalno skupino in ligand **L^b** naredi kompleks vodotopen. Na ta kompleks je v naslednjem koraku koordiniran še tretji ligand, hkrati pa se iz maleimida, ki služi kot mesto za priprejanje na proteine, zaradi povišane temperature v Retro-Diels-Alder reakciji odstrani zaščitna skupina. Ideja je s poizkušanjem uvajanja zadnjega liganda po principu »trial and error« z namenom destabiliziranja HOMO orbitale na ruteniju dobiti kompleks, ki absorbira v območju rdeče vidne svetlobe. Na ta način je možna uporaba laserja z manjšo energijo, kar zmanjša radiacijsko škodo na proteinu ob eksperimentu.

Opisana je sinteza štirih ligandov **L^c**. Uspešno so bili sintetizirani trije, ki so bili uporabljeni v zadnjem koraku sinteze s kompleksom **1**. Uspešno pa je bil uveden le en. Karakterizacija produkta je pokazala, da je njegova absorpcija res pomaknjena v rdeče območje vidne svetlobe.

Ključne besede: rutenij, bidentatni, tris-heteroleptični, kompleksi, CcO

This paper describes the synthesis of ruthenium tris-heteroleptic complexes with bidentate ligands employing a single attachment site for proteins. Such complexes are exceptional due to their ability to inject an electron to a covalently bound molecule when exposed to light source with appropriate wavelength. These complexes will be used in biochemical studies which will gather more information about the electron transfer, proton pumping and oxygen conversion in cytochrome C oxidase by Prof. Dr. J. Heberle's group at the Freie Universität Berlin.

A one-pot two-step synthesis has been developed and is described to prepare ruthenium complex **1** where ligand **L^a** carries a protected maleimide functional group and ligand **L^b** makes it water-soluble. These complexes are later coordinated by another bidentate ligand that displaces two chlorido ligands. At the same time the maleimide, which serves as an attachment side for the protein, gets deprotected via a Retro-Diels-Alder reaction. The idea is to vary the last ligand by trial and error principle with intention to destabilise the HOMO on ruthenium to obtain a red-shifted absorption, which allows the use of a laser with lower energy and minimises radiation damage of the protein.

The synthesis of four ligands **L^c** is described while three were successfully isolated. These were reacted with ruthenium complex **1**, but only one ligand was successfully introduced. The characterisation of the produced complex showed a red-shifted absorption compared to known ruthenium bipyridine complexes.

Keywords: ruthenium, bidentate, tris-heteroleptic, complexes, CcO

STABILIZACIJA Z GVANINI BOGATIH NEKANONIČNIH DNA STRUKTUR S PIRENSKIMI SKUPINAMI

STABILIZATION OF GUANINE-RICH NON-CANONICAL DNA STRUCTURES WITH PYRENE GROUPS

Matic Kovačič

Mentor: prof. dr. Janez Plavec
Working mentor: dr. Peter Podbevšek

Slovenian NMR Center, National Institute of Chemistry,
Hajdrihova 19, Ljubljana 1000, Slovenia
Chair of Biochemistry, Faculty of Chemistry and Chemical Technology, University of Ljubljana,
Večna pot 113, 1000 Ljubljana, Slovenia
matic.kovacic92@gmail.com

Z gvanini bogata zaporedja nukleinskih kislin se lahko ob prisotnosti kovinskih kationov zvijejo v nekanonične strukture imenovane G-kvadrupleksi. G-kvadrupleksi se pogosto nahajajo v promotorskih regijah genov, kjer lahko kot sterična ovira ali vezavno mesto za transkripcijske faktorje regulirajo prepisovanje DNA. Tako imajo velik potencial pri zdravljenju različnih bolezni, pri čemer bi lahko bili tarča za zdravila ali pa bi umetno sintetizirani G-kvadrupleksi sami delovali kot zdravilne učinkovine. Pri takih učinkovinah bi bili ključni termična stabilnost in odpornost na razgradnjo s strani nukleaz. V našem raziskovalnem delu smo *in vitro* sintetizirali oligonukleotid trombin-vezavnega aptamera z nukleotidnim zaporedjem 5'-GGTTGGTGTGGTTGG-3', ki se ob prisotnosti kalijevih ionov zvije v G-kvadrupleks. Na mesta, kjer so v zaporedju timini, smo nato posamično vgradili modificiran nukleotid s kovalentno vezano pirensko skupino. S pomočjo NMR, CD in UV-spektroskopije smo dokazali, da je v specifičnih primerih pirenska skupina povečala termično stabilnost G-kvadrupleksa, kar je posledica dodatnega nalaganja aromatskih obročev pirena in nukleotidnih dušikovih baz. Poleg stabilizacije bi lahko pirenske skupine zaradi fluorescence omogočale tudi *in vivo* detekcijo G-kvadrupleksov v različnih celičnih okoljih.

Ključne besede: DNK, trombin-vezavni aptamer, G-kvadrupleks, piren, NMR

Guanine-rich nucleic acid sequences can in presence of metal cations fold into non-canonical structures called G-quadruplexes. G-quadruplexes are often present in promoter gene regions, where they can regulate DNA transcription through acting as a sterical obstacle or through binding of transcription factors. Because of this they have a high potential of being used in treatment of different diseases, where they could act as a drug target or represent an artificially synthesised active compound themselves. When designing such compounds, thermal stability and resistance to nuclease degradation are utmost important. In our research work we *in vitro* synthesized an oligonucleotide of thrombin-binding aptamer with a nucleotide sequence 5'-GGTTGGTGTGGTTGG-3', which folds into a G-quadruplex in the presence of potassium ions. On thymine positions in the sequence, we then individually incorporated a nucleotide with covalently bound pyrene group. With the help of NMR, CD and UV-spectroscopy we proved, that in specific cases pyrene group increased thermal stability of G-quadruplex, which is a result of additional aromatic stacking of pyrene group and nucleotide nitrogen bases. Besides stabilization, fluorescent pyrene group could also enable *in vivo* G-quadruplex detection in different cell environments.

Key words: DNA, thrombin-binding aptamer, G-quadruplex, pyrene, NMR

SPREMINJANJE PRODUKTIVNOSTI PRIDOBIVANJA BAKTERIOFAGOV V KONTINUIRNEM SISTEMU

EFFECT OF DILUTION ON PRODUCTIVITY OF CONTINUOUS PRODUCTION OF BACTERIOPHAGES

Nina Kuzmić

Mentor: izr. prof. dr. Aleš Podgornik

Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Univerza v Ljubljani, Večna pot 113, SI-1000 Ljubljana;
Center odličnosti za biosenzoriko, instrumentacijo in procesno kontrolo, Tovarniška 26, SI-5270 Ajdovščina
nina.kuzmic@gmail.com

Bakteriofagi so prisotni povsod okrog nas. Njihova ključna vloga je regulacija mikrobnega ravnovesja v različnih ekosistemih, prav tako pa se zaradi različnih prednosti, antibakterijskih učinkov ter naraščanja antibiotске rezistence vse bolj uporabljajo pri zdravljenju bakterijskih okužb in v najrazličnejših medicinskih aplikacijah. Bakteriofagi za svoj obstoj potrebujejo bakterije in so njihovi naravni sovražniki. Sodelujejo v procesu infekcije in končne lize bakterije. Gojenje bakteriofagov v laboratorijskem merilu se običajno izvaja v stresalnih kulturah, medtem ko se v industriji uporabljajo šaržni procesi v bioreaktorjih. Pri zdravljenju z bakteriofagi so potrebne večje količine bakteriofagov, zato sem se med raziskovanjem ukvarjala z vplivom spreminjanja hitrosti redčenja na produktivnost gojenja bakteriofagov v kontinuirnih sistemih. V tovrstnih sistemih nenehno dovajamo hranila in odvajamo odpadne produkte in celice, zato je volumen v bioreaktorju ves čas konstanten in se v določenem času vzpostavi stacionarno stanje (kemostat). To smo spremljali z merjenjem optične gostote. Miniaturni kontinuirni sistem je sestavljen iz črpalke in dveh zaporedno povezanih bioreaktorjev (volumen prvega je 25 ml, volumen drugega je 5 ml). Svež napajalni tok je LB gojišče, ki ga uvajamo v prvi reaktor, kjer poteka gojenje bakterije. V drugem bioreaktorju poteka pomnoževanje fagov. Kot modelna organizma smo uporabljali bakterijo *E. coli* K-12 in bakteriofag T4. Pretok smo spreminjali v območju od 0,1 do 0,3 mL/min. Iztok iz drugega reaktorja in s tem število fagov smo spremljali z vzorčenjem ter nato analizirali in ovrednotili z CFU in PFU analizo. Iz podatkov smo nato po enačbi:

$$P_r = P \cdot D$$

izračunali in spreminjali produktivnost.

Ključne besede: bakteriofag T4, E.coli K-12, Cellstat, kontinuirna proizvodnja, produktivnost

Bacteriophages (phages) are present almost everywhere. Their key role is regulating microbial community in various ecosystems, hence they are regaining attention as natural antimicrobial agents for potential antibacterial treatments also in human medicine, especially for multi-drug resistant bacteria. Phages are bacterial viruses which are amplified during the process of infection and final lysis of bacteria. In medical applications and therapies, large amount and higher concentrations of phages are required. Phages are nowadays still being amplified traditionally, on laboratory scale in shaking culture flasks and on industry level in bioreactors as batch process. In our case, we studied the effect of dilution rate on productivity of continuous production of phages in cellstat which consists of two connected glass bioreactors (volume of the first bioreactor was 25 mL and second 5 mL, respectively) and single pump. Fresh LB medium was continuously pumped in the first bioreactor where bacteria was continuously growing and then continuously introduced into second bioreactor where multiplication of phages occurred. As a model system we used well-studied phage T4 and *Escherichia coli* K-12 as a host. The flow rate was maintained between 0.1 and 0.35 mL/min and when the steady state was reached, concentration of phages (P) at the outflow of second bioreactor was evaluated by standard plaque assay and average values were obtained. Productivity P_r of continuous production of bacteriophages was calculated from average phage titers (P) and dilution rate in second bioreactor (D) by equation:

$$P_r = P \cdot D$$

Key words: bacteriophage T4, E. coli K-12, Cellstat, continuous production, productivity

ELEKTRODEPOZICIJA LITIJVEGA SULFIDA V RAZLIČNIH ELEKTROLITIH V LI-S AKUMULATORJIH

LITHIUM SULFIDE ELECTRODEPOSITION IN DIFFERENT ELECTROLYTES FOR LI-S BATTERIES

Tina Paljk

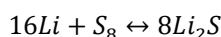
Mentor: izr. prof. dr. Robert Dominko

Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo UL, Večna pot 113, 1000 Ljubljana

Kemijski inštitut Hajdrihova 19, 1000 Ljubljana

tina.paljk@gmail.com

Med različnimi možnostmi kemijskega shranjevanja električne energije so litij-žveplovi (Li-S) akumulatorji ena bolj obetavnih in perspektivnih tehnologij za nizkocenovno in visokoenergijsko shranjevanje energije. V razvoju tovrstnih sistemov se pojavi več izzivov, predvsem zaradi mehanizma polnjenja oz. praznjenja, ki se za razliko od interkalacije v bolj razširjenih litij-ionskih akumulatorjih, v Li-S akumulatorjih odvija v raztopini. Žveplo se reducira po sledeči redoks reakciji:

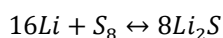


Tipična krivulja praznjenja Li-S akumulatorja je sestavljena iz dveh platojev. Pri visokonapetostnemu platoju se žveplo najprej raztopi in reagira do topnih polisulfidov. Ti se nato v drugem platoju reducirajo do netopnega in neprevodnega Li₂S. Razumevanje mehanizma, kinetike elektrokemijskih reakcij in vpliva morfologije produkta praznjenja (Li₂S) je bistvenega pomena za ciljno usmerjen razvoj bolj zmogljivih in visokoenergijskih Li-S akumulatorjev.

Poskuse smo izvedli z uporabo konstantnega potenciala na delno izpraznjenih akumulatorskih celicah. S tem smo pridobili krivuljo napetosti in toka. Vrh v tokovnem profilu praznjenja ustreza nukleaciji in rasti kristalov Li₂S. S primerjavo tokovnega odziva in morfologije odloženega filma lahko razberemo pomembne informacije o razlikah poteka elektrodepozicije pri različnih elektrolitih, ki se uporabljajo v Li-S akumulatorjih, ter o tem, kako elektrokemijski parametri in način vnosa aktivnega materiala vplivajo na pokritost elektrode z Li₂S.

Ključne besede: Litij-žveplovi akumulatorji, litijev sulfid, elektrodepozicija, elektroliti

Among the various electrochemical storage options under consideration, rechargeable lithium-sulfur (Li-S) batteries are one of the most promising and perspective technology for low-cost and high-density electrochemical energy storage. Many of the challenges in Li-S battery systems are caused by the charge/discharge mechanism taking place in solution, which is different from the intercalation mechanism in more widespread lithium-ion batteries. Sulfur is reduced according to the following redox reaction:



The typical Li-S battery discharge curve consists of two plateaus. In the high voltage plateau sulfur dissolves and reacts to soluble polysulfides, which are then reduced to insoluble and nonconductive Li₂S in the lower voltage plateau. Understanding the mechanism, the kinetics of electrochemical reactions and impact of morphology of the discharge product Li₂S is paramount to goal oriented development of better performance and high energy Li-S batteries.

The experiments were done by applying a constant potential to a partially discharged battery cell, through which, voltage and current curves were obtained. The peak shape in the discharge current corresponds to nucleation and growth of Li₂S. By comparing the current response and morphology of the deposited film, one can gather important information on the differences in electrodeposition process in different electrolytes used in Li-S batteries, as well as how the electrochemical parameters and the cell setup influences the coverage of the electrode with the Li₂S deposit.

Key words: Lithium-sulfur battery, lithium sulfide, electrodeposition, electrolytes

GRAFIČKI FAKULTET

ANALIZA ISPLATIVOSTI KORIŠTENJA ALTERNATIVNOG IZVORA NAPAJANJA
EFFECTIVENESS ANALYSIS OF ALTERNATIVE ELECTRIC POWER SUPPLY

Filip Dujčić

Mentor: doc. dr. sc. Davor Donevski

Katedra za knjigoveštvo i ambalažu, Grafički fakultet, Sveučilište u Zagrebu,
Getaldićeva 2, 10000 Zagreb

Stirling motor je poznat po svojoj visokoj učinkovitosti i tihom radu te se za njegov pogon može koristiti gotovo bilo koji izvor topline. Ova kompatibilnost s alternativnim i obnovljivim izvorima energije postaje sve značajnija dok cijena konvencionalnih goriva raste, te također dobiva na značaju uslijed problema kao što su nedostatak nafte i klimatske promjene. Ekološki doprinos je neupitan. U radu je urađena analiza isplativosti korištenja ovakvog pogona u radu Grafičkog poduzeća. Grafičko poduzeće bi u određenim klimatskim podnebljima moglo funkcionirati i imati stabilnu proizvodnju temeljenu na alternativnim izvorima energije. Cilj ovog rada je dokazati da je takva proizvodnja moguća.

Ključne riječi : Stirling motor, alternativni izvori napajanja

The Stirling engine is known for its high efficiency, quiet operation, and ease with which almost any heat source can be used. This compatibility with alternative and renewable energy sources becomes increasingly important as the price of conventional fuels is increasing and gains additional importance due to problems such as oil shortages and climate change. Ecological contribution is unquestionable. This research presents an analysis of the profitability of using alternative energy sources in print production processes. In certain climatic conditions, printing companies could base their production on alternative energy sources. The aim of this paper is to prove that such production is possible.

Keywords : Stirling engine, alternative power sources

ANALIZA KORIŠTENJA SOLARNE ENERGIJE U UNUTARNJEM TRANSPORTU

ANALYSIS OF THE USE OF SOLAR ENERGY IN INDOOR TRANSPORT

Marko Pelinjak, Vinko Makek

Mentor: doc. dr. sc Suzana Pasanec Preprotić

Katedra za knjigoveštvo i ambalažu, Grafički fakultet, Sveučilište u Zagrebu,
Getaldićeva 2, 10000 Zagreb
pelinjak72@gmail.com

Cilj rada je istražiti koja je isplativost korištenja solarne energije u automatiziranom unutarnjem transportu nekog pogona. Unutar grafičkog pogona transport iziskuje znatnu potrošnju električne energije i ovisno od stupnja automatizacije povećati broj radnika. U sklopu rada napravljen je model kako bi se testirao stvarni transport i dokazalo da se može razviti bez velikih ulaganja. Danas kada su ekološki problemi podosta kulminirali, doprinos bi bio neupitan sa svakim smanjenjem korištenja klasičnih oblika električnih pogona i transporta gdje se koriste motori sa unutrašnjim sagorijevanjem.

Ključne riječi: solarna energija, automatizacija

The goal is to investigate cost-effectiveness of using solar energy in an automated indoor transport of a graphic shop. Within the shop transport draws serious power and depending on the degree of automation, the number of workers increases. As part of the analysis, a model was developed to test the actual transport and prove that it can be developed without major investments. Today, when environmental problems have culminated, the contribution would be uncompromising with every reduction in the use of conventional electric drives and transports where internal combustion engines are used.

Key words: solar power, automatization

SVJETLOSTABILNOST SITOTISKARSKIH TERMOKROMNIH BOJA

STABILITY OF SCREEN PRINTING THERMOCHROMIC INKS

Ivan Penava, Melita Petrić

Mentor: doc. dr. sc. Rahela Kulčar

Katedra za fotografske procese, Grafički fakultet, Sveučilište u Zagrebu,
Getaldićeva 2, 10000 Zagreb
penava_ivan@hotmail.com

Istraživanje u ovom radu temelji se na termokromnim bojama i njihovoj primjeni. Svrha rada je eksperimentalno ispitivanje u kojem se istražuje postojanost i trajnost termokromne boje na vanjske utjecaje. Ispitivana vrsta boje je UV sitotiskarska termokromna boja koja je otisnuta na dvije različite vrste podloge kako bi se ispitala mogućnost utjecaja papira na bržu odnosno sporiju degradaciju otiska. Otisci su izloženi starenju od 6, 12, 18 i 24 sata, te nakon toga izmjereni spektrofotometrom (Ocean Optics USB 2000+) na različitim temperaturama (od 15 do 65°C), što je omogućeno termostatičkim cirkulatorom. Opisana je promjena dinamičkih karakteristika ove boje. Zaključeno je da duže izlaganje svjetlu utječe na degradaciju dinamičkih karakteristika termokromnih boja što ima i utjecaj na histerezu boje.

Ključne riječi: termokromne boje, svjetlostabilnost, mjerenje boje

The research in this paper is based on thermochromic colors and their application. The purpose of the work is an experimental study in which light stability and durability of thermochromic prints are explored on external influences. The investigated ink is thermochromic UV screen printing ink printed on two different types of substrates to test the possibility of paper impact on faster or slower degradation of the print. Printing technique which was used was screen printing. The prints are exposed to light at 6, 12, 18 and 24 hours, and then measured with a spectrophotometer (OceanOptics USB 2000+) at various temperatures (from 15 to 65°C), which is enabled with the thermostatic circulator. The changes of the dynamic color properties of the samples were described. The results show that longer exposure to light affects the degradation of the dynamic properties of thermochromic inks, which has also the effect of color hysteresis.

Key words: thermochromic inks, light stability, color measurements

DOPRINOS KVALITETE MULTIMEDIJSKOG ZAPISA NA ZAINTERESIRANOST CILJANE PUBLIKE
CONTRIBUTION OF MULTIMEDIA TRACK QUALITY TO THE INTEREST OF THE TARGETED AUDIENCE

Matko Pintar

Mentor: doc. dr. sc. Maja Rudolf

Katedra za računalnu grafiku i multimedijske sustave, Grafički fakultet, Sveučilište u Zagrebu,
Getaldićeva 2, 10000 Zagreb

Pretpostavka je da kod izrade multimedijskog zapisa postoji granični slučaj potrebne kvalitete da ciljana publika ne primijeti razliku zapisa. Kvalitetni zapisi se sporije publiciraju putem Interneta i dodatno opterećuju Internet promet. Za potrebe rada napravljen je zapis na profesionalnoj opremi, atraktivne teme i urađeno je nekoliko ključnih promjena postavki zapisa, rezolucije i audio postavki. Nakon toga ispitana je ciljana publika i utvrđena granica do koje se može narušiti kvaliteta da zapis ostane zanimljiv i pobudi pažnju.

Ključne riječi: multimedija, rezolucija, audio zapis

The assumption is that when creating a multimedia file there is a limit of the required quality that the target audience does not notice the difference of the record. Quality records are slower to be publicized over the Internet and are further burdened by Internet traffic. For the purpose of the work, a record of professional equipment, attractive themes, and several key changes to record settings, resolution and audio settings have been made. After that, the target audience was surveyed and a boundary that could be applied to distort the quality of the record to still keep it interesting and attract attention.

Keywords: multimedia, resolution, audio track

ISTRAŽIVANJE FOTOGRAFSKE TEHNIKE LIGHT PAINTING
RESEARCH OF PHOTOGRAPHIC TECHNIQUE LIGHT PAINTING

Alexander Stankov

Mentor: doc. dr. sc. Maja Strgar Kurečić

Katedra za reprodukcijску fotografiju, Grafički fakultet, Sveučilište u Zagrebu,
Getaldićeva 2, 10000 Zagreb

Temom "Istraživanje fotografske tehnike Light painting" analizirala se tehnika fotografiranja grafita pomoću Light paintinga. Analizirala se tehnika fotografiranja Light painting po njenoj podjeli, potrebnoj opremi za fotografiranje i postavkama na samom fotoaparatu. Posebna pažnja posvetila se planiranju prije i tokom samog snimanja fotografija. Cilj ovog rada bila je izrada serije fotografija na temelju kojih je objašnjena sama tehnika, planiranje, izvedba, postprodukcija na računalu kao i moguće greške prije i tijekom snimanja te su istovremeno primijenjena sva načela koje dobar Light painting rad mora imati.

Ključne riječi: fotografija, Light painting, obrada fotografije, grafiti

Topic "Research of photographic technique light painting" has analyzed graffiti photography technique using Light painting. Light painting photography technique has been analyzed based on its division, equipment needed for taking the photography, and settings on a camera. Extra attention was given to planning before and during the photography session. The goal of this thesis was a development of photography series which was later used to explain the photography technique, the planning, the execution, and the postproduction on a personal computer, as well as potential issues before and during photography session, all while applying all the good principles the Light painting should follow at the same time.

Keywords: photography, Light painting, photography editing, graffiti

KEMIJSKO-TEHNOLOŠKI FAKULTET

ISPITIVANJE ODZIVNIH KARAKTERISTIKA RAZLIČITIH MEMBRANAMA ZA PRIPRAVU ISFE
EXAMINATION RESPONSE CHARACTERISTICS OF DIFFERENT MEMBRANES FOR PREPARING ISFE

Marko Bačić

Mentorica: izv. prof. dr. sc. Marija Bralić

Zavod za Kemiju okoliša, Kemijsko-tehnološki fakultet, Sveučilište u Splitu,
Ruđera Boškovića 35, 21 000 Split
marko.bacic37@gmail.com

U ovom radu korištene su LaF₃ membrane kod kojih su ispitivane odzivne karakteristike. Ispitan je odziv fluorid ionsko-selektivne elektrode pri pH 4,7 za tri različite membrane. Utvrđeno je da elektrode kod svake od ispitivanih membrana slijede linearnu promjenu potencijala do koncentracije fluorida $1 \times 10^{-6} \text{ mol L}^{-1}$, uz promjenu potencijala po koncentracijskim dekadama od: 10 mV za LaF₃(Eu 1%) 8x5, 24 mV za LaF₃(Eu 0,3%) 8x1,5; 34 mV za LaF₃(Eu 1%) 8x1,35 mV za LaF₃(Eu 1%) 8x1 (prethodno močena 24 sata). Ispitan je i utjecaj pH na odziv fluorid ionsko-selektivne elektrode te je uočeno da je potencijal kod elektrode s membranom LaF₃(Eu 1%) veličine 8x5 mm padao do pH vrijednosti 4 nakon čega bi se ustalio. Za druge dvije membrane potencijal s mijenjao s promjenom pH do vrijednosti pH = 5 nakon čega je potencijal ostao stabilan do pH = 9. Također je ispitano odziv elektrode u ovisnosti o vremenu za sve tri membrane. Stabilan potencijal za elektrodu s membranom LaF₃(Eu 1%) veličine 8x5 mm uspostavlja se u vremenu od 6 minuta, dok se stabilan potencijal za druge dvije membrane uspostavlja u vremenu do 2 minute.

Ključne riječi: ionsko selektivne elektrode, lantanov(III) fluorid, FISE, potenciometrija, pH

In the following study case responsive characteristics of LaF₃ membranes are examined. Using 3 different membranes 4,7 pH fluoride ion-selective electrode responsiveness is examined. It has been found out that electrodes of all examined membranes follow linear change of potential until fluoride concentration $10^{-6} \text{ mol L}^{-1}$, potential changes are determined by concentration decades. It follows: 10 mV of LaF₃(Eu 1%) 8x5; 24 mV of LaF₃(Eu 0,3%) 8x1,5; 34 mV of LaF₃(Eu 1%) 8x1; 35 mV of LaF₃(Eu 1%) 8x1 (previously dipped in water for 24 hours). The influence of pH on the response of the fluoride ion-selective electrode was also investigated and the potential for electrodes with an 8 × 5 mm size of LaF₃ (Eu 1%) membrane fell to a pH of 4 after which it was settled. For the other two membranes, the potential varied with pH change to pH = 5, so the potential remained stable to pH = 9. An electrodes response in time dependent for all three membranes is also tested. Stable potential for 8x5mm-sized LaF₃(Eu 1%) electrodes is established for a period of 6 minutes while a stable potential for the other two membranes is established for up to 2 minutes.

Keywords: ion selective electrodes, lanthanum(III) fluoride, FISE, potentiometry, pH

**PRIPRAVA TEKUĆEG ORGANSKOG GNOJIVA FERMENTACIJOM KOPRIVE (*URTICA DIOICA L.*) I
KAMILICE (*CHAMOMILLA RECUTITA L. RAUSCHERT*)**

**OBTAINING LIQUID ORGANIC FERTILIZER BY FERMENTATION OF NETTLE (*URTICA DIOICA L.*) AND
CHAMOMILE (*CHAMOMILLA RECUTITA L. RAUSCHERT*)**

Zvonimir Jukić

Mentor: doc. dr. sc. Mario Nikola Mužek

Zavod za anorgansku tehnologiju, Kemijsko-tehnološki fakultet, Sveučilište u Splitu,
Ruđera Boškovića 35, 21000 Split

zvonimir.jukic@ktf-split.hr

U ovom radu je izvršena priprava tekućeg organskog gnojiva tijekom 17 dana kroz dvije serije uzoraka. Za fermentaciju su korišteni suhi mljeveni korijen koprive i suhi cvjetovi kamilice. Uzorci su pripremljeni otapanjem 20 g suhog bilja u 1 L vode i to u dvije serije: prva serija uzoraka predstavlja fermentaciju koprive, kamilice te koprive i kamilice zajedno u tehnološki pripremljenoj demineraliziranoj vodi s $\text{pH} = 7$ i $\sigma = 0,83 \mu\text{S cm}^{-1}$, a sljedeća serija uzoraka predstavlja fermentaciju prethodno navedene kombinacije u odstajaloj vodi (odstajala 48 h na sobnoj temperaturi) s $\text{pH} = 7,18$ i $\sigma = 374 \mu\text{S cm}^{-1}$. Tijekom fermentacije, koja je provedena u trajanju od 17 dana te temperaturnom rasponu $4 - 15^\circ\text{C}$, ispitivane su promjene pH vrijednosti, koncentracije biološki aktivnih tvari, kao i električne vodljivosti uzoraka. Dobiveni rezultati mjerenja pokazuju da serija uzoraka tekućeg gnojiva pripremljena miješanjem biljnog materijala s odstajalom vodom pokazuje bolje vrijednosti parametara koji su bitni za njegovu primjenu od serije uzoraka tekućeg gnojiva koja je pripremljena miješanjem biljnog materijala s demineraliziranom vodom, pa se tako otapanjem koprive u odstajaloj vodi dobila konačna pH vrijednost od 4,8 dok se otapanjem kamilice u odstajaloj vodi postigla vrijednost električne provodnosti od $3910 \mu\text{S cm}^{-1}$ što je povezano s većom koncentracijom otopljenih biološki aktivnih tvari. Otapanjem kombinacije bilja u odstajaloj vodi postigle su se optimalne vrijednosti uporabnih parametara: $\text{pH} = 4,02$ i $\sigma = 3410 \mu\text{S cm}^{-1}$.

Ključne riječi: kopriva, kamilica, fermentacija, pH vrijednost, električna provodnost

In this experiment, the preparation of liquid organic fertilizer was performed for 17 days through two series of samples. For the fermentation were used dry root of nettle and dry chamomile flowers. The samples were prepared by dissolving 20 g of dry plants in 1 L of water, in two series: the first series of samples represents the fermentation of nettle, chamomile and nettle and chamomile together in technologically prepared demineralised water with $\text{pH} = 7$ and $\sigma = 0.83 \mu\text{S cm}^{-1}$, the following series of samples represents fermentation of the above-mentioned combination in tapwater (left 48 h at room temperature) with $\text{pH} = 7.18$ and $\sigma = 374 \mu\text{S cm}^{-1}$. During the fermentation period of 17 days and the temperature range of $4 - 15^\circ\text{C}$, changes in pH, concentration of biologically active substances and electrical conductivity of the samples were measured. The obtained measurement results show that a series of liquid fertilizer samples prepared by mixing plant material with tapwater exhibits better value parameters that are essential for its application from a series of liquid fertilizer samples prepared by mixing plant material with demineralized water, so by dissolving the dry root of nettle with tapwater gives the final pH value of 4.8, while the decomposition of the chamomille in the tapwater reached the electrical conductivity value of $3910 \mu\text{S cm}^{-1}$, which is related to the higher concentration of dissolved biologically active substances. The optimal utilization parameters of pH values were 4.02 and $\sigma = 3410 \mu\text{S cm}^{-1}$.

Key words: nettle, chamomile, fermentation, pH value, electrical conductivity

ZnO NANOSTRUKTURIRANI FOTOKATALIZATORI ZA PRIMJENU U OBRADI VODE

ZnO NANOSTRUCTURED PHOTOCATALYSTS FOR WATER TREATMENT APPLICATIONS

Antonio Penava

Mentorica: Izv. prof. dr. sc. Magdy Lučić Lavčević

Zavod za fiziku, Kemijsko-tehnološki fakultet, Sveučilište u Splitu,
Ruđera Boškovića 35, 21 000 Split
tony.penava@gmail.com

Metal oksidni poluvodički materijali, dizajnirani da se primjenjuju u fotokatalitičkim sustavima za pročišćavanje vode, moraju imati veliku specifičnu površinu jer se kemijske reakcije inducirane odgovarajućim zračenjem odvijaju dodirivanjem površine i tekućine. Cinkov oksid poznat je kao materijal koji stvara različite morfologije na mikro- i nanoskali, i može lako ispuniti ovaj zahtjev pod utjecajem ultraljubičastog zračenja. Međutim, neke morfologije cinkovog oksida na nanoskali daju katalizatore koji su funkcionalni na suncu. Fotokatalitička degradacija organske boje, kao model zagađivača, proučavana je u vodenim otopinama koristeći strukture cinkovog oksida sintetizirane u obliku prizmi, štapova i žica. Rasli su iz otopine, a njihova je cjelovita morfologija jednostavno je kontrolirana uvjetima rasta. Detaljna karakterizacija njihove strukture i poroznosti na mikro- i nanoskali izvršena je pomoću skenirajućeg elektronskog mikroskopa, difrakcijom rendgenskih zraka te mjerenjem raspršenja. Sve strukture pokazale su značajne fotokatalitičke aktivnosti. Međutim, izuzetni rezultati postignuti su nanostrukturama u obliku žica, koja je pokazala pojačanu fotokatalitičku aktivnost na sunčevom svjetlu. To je pripisano njihovoj specifičnoj morfologiji sa defektima i visokim stupnjem mezoporoznosti.

Ključne riječi: ZnO, nanostrukture, mezoporoznost, fotokatalizator

Metal oxide semiconductor materials, designed to be applied in photocatalytic systems for water purification, are required to have large specific surface areas, because chemical reactions induced by suitable irradiation take place by contact between their surface and fluid. Zinc oxide is well known as a material that forms various morphologies at the micro- and nanoscale, which can easily fulfill this requirement in the case of ultraviolet irradiation. However, some nanoscaled morphologies can also provide zinc oxide catalysts that are functional in the sunlight. Photocatalytic degradation of an organic dye, as a model pollutant, was studied in aqueous solutions using structures of zinc oxide synthesized in the form of prism, spiky stick and grass blade. They were grown from a solution and their entire morphology was simply controlled by varying the growth conditions. Detailed characterization of their structure and porosity on the micro- and nanoscale was performed by scanning electron microscope and X-ray diffraction and scattering measurements. All structures exhibited notable photocatalytic activities. However, remarkable results were achieved with nanostructures in the form of grass blade, which exhibited enhanced photocatalytic activity in sunlike light. This was ascribed to their specific morphology characterized with defects and a high degree of mesoporosity.

Keywords: ZnO, nanostructures, mesoporosity, photocatalyst

UTJECAJ PROMJERA AKSIJALNOG MIJEŠALA NA SUSPENDIRANJE ZEOLITA I UTROŠAK SNAGE MIJEŠANJA

INFLUENCE OF AXIAL IMPELLER DIAMETER ON SUSPENDING OF ZEOLITE AND POWER CONSUMPTION

Tina Slatina

Mentorica: Doc. dr. sc. Marija Ćosić

Zavod za kemijsko inženjerstvo, Kemijsko-tehnološki fakultet, Sveučilište u Splitu,
Ruđera Boškovića 35, 21000 Split

tina.slatina@gmail.com

Pri suspendiranju sedimentirajućih čestica u miješalici najčešće se primjenjuje aksijalno miješalo. Brojna istraživanja su ukazala kako suspendiranje čvrstih čestica značajno ovisi o geometrijskim karakteristikama miješala. U ovom radu sagledan je utjecaj promjera aksijalnog turbinskog miješala s lopaticama nagnutim pod kutom od 45° (tzv. *PBT* miješalo) na postizanje stanja potpune suspenzije zeolita NaX u bakar(II) nitratu. Svi eksperimenti provodili su se u miješalici standardnih dimenzija promjera posude, d_T , 0.14 m, koja je sadržavala četiri razbijala virova. S ciljem ispitivanja utjecaja promjera miješala na promatrani proces, omjer promjera miješala (D) i promjera reaktora (D/d_T) mijenjan je u području od 0,46 do 0,68. Za svaki ispitivani promjer PBT miješala određena je brzina vrtnje miješala potrebna za postizanje stanja potpune suspenzije zeolita, N_{js} pri njegovim različitim koncentracijama. Kako bi se dobio uvid u hidrodinamička zbivanja unutar ispitivanih sustava, izvršena je simulacija toka kapljevine primjenom programa *VisiMiX 2000 Turbulent*. U svrhu određivanja optimalne konfiguracije miješalice za suspendiranje zeolita, u radu je također sagledavan i utrošak snage miješanja pri ispitivanim promjerima miješala i masama zeolita. Rezultati ispitivanja ukazali su da se s povećanjem promjera PBT miješala smanjuje kritična brzina vrtnje miješala. Dobiveni rezultati posljedica su hidrodinamičkih zbivanja u reaktoru koji se mijenjaju s povećanjem promjera miješala. Uočeno je također da se kritična brzina miješanja smanjuje i sa smanjenjem koncentracije zeolita, međutim ovaj utjecaj je znatno manje izražen od utjecaja promjera miješala. Utrošak snage miješanja smanjuje se s povećanjem veličine miješala, te je minimalan pri najvećem promjeru miješala ($D/d_T=0,68$).

Ključne riječi: suspendiranje, radijalno miješalo, promjer miješala, snaga miješanja, zeolit

Axial impeller is the most common used impeller when suspending solids. Numerous research have shown that solids suspension is significantly dependent on impeller geometry. This research work focuses on the influence of diameter of pitched blade turbine (abbrev. *PBT* impeller) on the state of complete suspension of zeolite NaX in copper (II) nitrate solution. Experiments were carried out in a glass reactor with a diameter of 0.14 m. In order to investigate the influence of impeller diameter on solids suspension, impeller of tankdiameter ration, D/d_T , was varied in the range of 0.46 – 0.68. For each diameter tested, a specific impeller speed was required for achieving the state of complete suspension, N_{js} , at four different zeolite concentration masses. In order to gain a more complete insight into the hydrodynamics in the mixer, liquid flow simulation was performed using the *VisiMix 2000 Turbulent program*. To find the optimum configuration of the suspended zeolite, power consumption at different impeller diameters zeolite masses was tested as well. It was found that the critical impeller speed was reduced as the diameter was increased. Obtained results are a consequence of hydrodynamic conditions which change with an increase of impeller diameter. Additionally, it was discovered that the critical impeller speed decreases with a reduction of zeolite concentration. However, this effect was considerably less pronounced than the aforementioned relationship. Power consumption decreases with an increase of impeller diameter and is minimal at the largest diameter investigated ($D/d_T = 0.68$).

Keywords: suspension, radial impeller, impeller diameter, power consumption, zeolite

METALURŠKI FAKULTET

IMOBILIZACIJA FOTOKATALIZATORA TiO₂ NA NOSAČ, KLASIČNO VS MIKROVALNO SUŠENJE

IMMOBILIZATION OF THE PHOTOCATALYST TiO₂ ON A CARRIER, CLASSIC VS MICROWAVE DRYING

Matija Borošić

Mentori: Izv. prof. dr. sc. Ivan Brnardić
Igor Jajčinović mag.ing.oecoing., asistent

Zavod za Procesnu Metalurgiju, Metalurški fakultet, Sveučilište u Zagrebu,
Aleja narodnih heroja 3, 44 000 Sisak
matask66@gmail.com

Jedan od prioriteta zaštite okoliša je zaštita voda i vodenih tokova. Ovim problemom znanost se već dugo bavi te se konstantno pokušava inovativnim i poboljšanim metodama podići pročišćavanje voda na novu razinu. Pojava mikroonečišćujućih tvari u pročišćenim otpadnim vodama te vodama za piće pobudila je interes kod znanstvenika u pronalasku rješenja za njihovo uklanjanje. Primjer takvog procesa je fotokataliza kod koje dolazi do potpune razgradnje mikroonečišćivala odnosno nastajanja neopasnih razgradnih produkata. U tu svrhu koriste se fotokatalizatori kao što je titanijev dioksid (TiO₂).

U radu je kao nosač za imobilizaciju TiO₂ korištena staklena mrežica. Imobilizacija TiO₂ na staklenu mrežicu je provedena sol-gel metodom uz dva različita načina sušenja; klasičnim i mikrovalnim sušenjem. Provedena je karakterizacija dobivenih fotokatalizatora pretražnom elektronskom mikroskopijom (SEM), energijsko disperzivnom rendgenskom spektroskopijom (EDS) i rendgenskom difrakcijskom analizom (XRD). Dobiveni rezultati SEM/EDS analize pokazuju da su veće čestice TiO₂ vezane na mrežicu osušenu mikrovalovima. Iz XRD rezultata se može zaključiti da prisutnost amorfnе faze silana smanjuje relativni udio anatasa i rutila te utječe na smanjenje specifične površine. Najbolji rezultati fotokatalitičke razgradnje salicilne kiseline dobiveni su korištenjem mrežice pripravljene klasičnim sušenjem što je i u korelaciji s navedenim rezultatima.

Gljučne riječi: mikroonečišćivala, titan dioksid, fotokataliza, sol-gel.

One of the priorities of the environmental protection is the protection of water and water flows. Science has been dealing with this problem for a long time through constant finding of innovative and improved methods of raising water purification to a new level. The constancy of micropollutants in cleaned wastewaters and drinking water inspired the interest of scientists in finding solutions of their successful removal. An example of such a process is a photocatalysis, which results in complete decomposition of micropollutants and formation of non-hazardous degradation products. Photocatalysts, including the titanium dioxide (TiO₂) are among others used for this purpose.

In this work a glass mesh was used as an immobilizer for TiO₂. The immobilization of TiO₂ on the glass mesh was carried out by the sol-gel method with two different drying methods; classic and microwave drying. Characterization of photocatalysts was obtained by a scanning electron microscopy (SEM), energy dispersive X-ray spectroscopy (EDS) and X-ray diffraction analysis (XRD). The results of the SEM/EDS analysis indicate that the bigger particles belonging to TiO₂ have been attached to glass mesh dried by microwaves. From the XRD results it can be concluded that the presence of the amorphous silane phase reduces the relative proportion of anatase and rutile and affects the reduction of the specific surface. The best results of photocatalytic degradation of salicylic acid were obtained using a mesh prepared using classical drying what is in correlation with the stated results.

Key words: micropollutants, titanium dioxide, photocatalysis, sol-gel.

FAZNE TRANSFORMACIJE Cu-Al-Mn-Ag LEGURA S PRISJETLJIVOŠĆU OBLIKA
PHASE TRANSFORMATIONS OF Cu-Al-Mn-Ag SHAPE MEMORY ALLOYS

Željka Krtić

Mentor: Izv. prof. dr. sc. Tamara Holjevac Grgurić

Zavod za fizičku metalurgiju, Metalurški fakultet, Sveučilište u Zagrebu
Aleja narodnih heroja 3, 44100 Sisak
zeljka.krtic@gmail.com

Cu-Al-Mn legure s prisjetljivošću oblika postale su vrlo atraktivne za komercijalnu primjenu u bioinženjerstvu, dentalnoj industriji te u proizvodnji senzora i aktuatora, i sve više zamjenjuju uporabu vrlo skupe Ni-Ti legure, s obzirom na njihovu nisku cijenu koštanja, veliku superelastičnost te izrazitu duktilnost. Efekt prisjetljivosti oblika u istraživanim legurama posljedica je bezdifuzijske martenzitne transformacije, koja podrazumjeva promjenu kristalne strukture materijala. Dodavanjem mangana osnovnoj binarnoj Cu-Al leguri, proširuje se područje β -faze, ključnoj fazi za postizanje martenzitne strukture, β' -faze, čime se povećava duktilnost materijala te sposobnost njenog hladnog deformiranja. Daljnjim dodavanjem mikrolegirajućih elemenata ternarnoj Cu-Al-Mn leguri, može se utjecati na smanjenje veličine zrna, čvrstoću materijala, pomak faznih transformacija te efekt prisjetljivosti oblika.

Stoga je u ovom radu istražen utjecaj srebra na mikrostrukturu i temperature faznih transformacija Cu-Al-Mn legura. Cu-Al-Mn-Ag legure pripremljene su taljenjem u elektrolučnoj peći te lijevane u cilindrični kalup, dimenzija 8 mm*1,2 cm. Termodinamički proračun i mehanizam skrućivanja Cu-Al-Mn legura proveden je programom Thermo-Calc, korištenjem termodinamičkih podataka prema Miettinen. Simultanom tehnikom toplinske analize, diferencijalnom pretražnom kalorimetrijom/termogravimetrijom (STA DSC/TG) određene su temperature transformacija Cu-Al-Mn-Ag legura, dinamičkim mjerenjima kroz 2 ciklusa zagrijavanje/hlađenje, u atmosferi argona. Mikrostrukturna ispitivanja provedena su optičkom mikroskopijom (OM) te skenirajućom elektronskom mikroskopijom (SEM), dok je energijsko disperzijskom spektrometrijom (EDS) određen kemijski sastav istraživanih sustava. Rezultati mikrostrukture korelirani su sa promjenom sastava Cu-Al-Mn-Ag legure i udjelom srebra te pomakom temperatura transformacija.

Ključne riječi: legure s prisjetljivošću oblika, Cu-Al-Mn-Ag, fazne transformacije, martenzit, DSC analiza

Zahvala: Ovaj rad je u potpunosti financiran projektom Hrvatske zaklade za znanost IP-2014-09-3405

Cu-Al-Mn shape memory alloys became very attractive for commercial use in the bioengineering, dental industry and in the high-demand industry for sensors or actuators, and they are frequently used instead of very expensive Ni-Ti alloy, due to their low cost, superelasticity and high ductility. Shape memory effect is a consequence of the diffusionless martensitic transformation, which implies a change of crystal structure. Addition of manganese to binary Cu-Al alloy, broadens β -phase region, parent phase for formation of martensitic structure, β' -phase, what increase ductility and cold workability of material. Further addition of alloying elements influences to decreasing of grain size, changes of phase transformation temperatures, mechanical properties and shape memory effect.

In this paper, the effect of silver addition on the microstructure and transformation temperatures of Cu-Al-Mn alloys was investigated. Cu-Al-Mn-Ag alloys were prepared by melting in the electric-arc furnace and casted in the moulds dimensions 8 mm*1.2 cm. Thermodynamic calculation and solidification mechanism was performed by software Thermo-Calc 5, with thermodynamic data according to Miettinen. Transformation temperatures of Cu-Al-Mn-Ag alloys were carried out by simultaneous thermal analysis differential scanning calorimetry/thermogravimetry (STA DSC/TG) through two dynamic cycles in the argon atmosphere. Microstructural investigations were performed by optical microscopy (OM) and scanning electron microscopy (SEM), while chemical content of specimens was determined by energy-dispersive spectrometry (EDS). Microstructural results were correlated with silver content in Cu-Al-Mn-Ag alloy as well as transformation temperatures.

Keywords: shape memory alloys, Cu-Al-Mn-Ag, phase transformations, martensite, DSC analysis

Acknowledgements: This work has been fully supported by Croatian Science Foundation under the project IP-2014-09-3405.

**ELEKTROISPREDANJE NOSAČA ZA
UZGOJ STANICA TKIVA OKA NA 3D PRINTANIM KOLEKTORIMA**

Anamarija Vuković

Mentor: Izv. prof. dr. sc. Tamara Holjevac Grgurić

Zavod za fizičku metalurgiju, Metalurški fakultet, Sveučilište u Zagrebu
Aleja narodnih heroja 3, 44100 Sisak
anamarijavukovicc@gmail.com

Tkivno inženjerstvo pruža velike mogućnosti u razvoju umjetnih organa, osobito bioloških regenerativnih materijala, kao što su hrskavica, kosti i koža. Dizajniranje odgovarajućih biorazgradljivih i biokompatibilnih materijala te praćenje biokemijskih i fizikalnih svojstava, kao i rasta ljudskih stanica omogućuje generiranje nadomjestaka koji mogu obnoviti ili znatno poboljšati funkciju oštećenih tkiva.

U ovom radu, istražen je utjecaj različite topografije elektroispredanih polimernih nosača polikaprolaktona (PCL) na uspješnost zasijavanja i rasta stanica. Kolektori za elektroispredanje pripremljeni su 3D printanjem te su postupkom elektroispredanja iz polimerne otopine PCL/CEFUROXIM® (CFU) dobiveni nosači različite strukture i poroznosti. Otopina polikaprolaktona pripremljena je uz 15 i 20 % mas. antibiotika CFU, koji se koristi za lokalno liječenje vanjskih infekcija oka. Morfologija vlakana pripremljenih nosača prije i nakon zasađivanja stanica praćena je skenirajućom elektronskom mikroskopijom (SEM), dok je kapsulacija antibiotika u polimerni nosač ispitana infracrvenom spektroskopijom s Fourierovom transformacijom (ATR-FTIR). Temperature kristalizacije (T_k) i taljenja (T_t) nosača PCL/CFU te stupanj kristalnosti (χ_c) određeni su diferencijalnom pretražnom kalorimetrijom (DSC), a toplinska stabilnost materijala praćena je tehnikom termogravimetrije (TG). Dobiveni rezultati mikrostrukture nosača korelirani su s rezultatima dobivenih temperatura transformacija te koncentracijom antibiotika, kao i rasprostranjenošću i rastom stanica na nosaču.

Ključne riječi: tkivno inženjerstvo, elektroispredanje, Polikaprolakton, Cefuroxim®, mikrostruktura

Tissue engineering provides great opportunities in the development of artificial organs, especially biological regenerative materials, such as cartilage, bone and skin. Designing the appropriate biodegradable and biocompatible materials and investigation of their biochemical and physical properties as well as cell growth factors, makes it possible to generate substitutes that can restore or substantially improve the function of damaged tissues.

In this paper, the effect of different topographies of electrospun Polycaprolactone fibrous carrier on the incorporation and cell growth was investigated. Polymer carriers with different structure and porosity, have been prepared by electrospinning of PCL/CEFUROXIM® (CFU) solution at the 3D printed collectors. Polymer solution was prepared with different concentrations of antibiotic CFU, 15 and 20 %wt., which is used for local eye infection treatment. Fibrous morphology was followed by scanning electron microscopy (SEM), while the incorporation of cells in the polymer carrier was identified by Fourier transformation infrared spectroscopy (ATR-FTIR). Melting (T_m) and crystallization (T_c) temperatures of PCL/CFU as well as degree of crystallinity were determined by differential scanning calorimetry (DSC), while thermal stability of material was obtained by thermogravimetry (TG). Results of PCL/CFU carrier microstructure were correlated with transformation temperatures and antibiotic concentrations as well as cell growth.

Keywords: tissue engineering, electrospinning, Polycaprolactone, Cefuroxim®, microstructure

PREHRAMBENO-BIOTEHNOLOŠKI FAKULTET

KONSTRUKCIJA PLAZMIDNIH VEKTORA ZA GENETIČKU MANIPULACIJU RAZLIČITIH BIOTEHNOLOŠKI ZNAČAJNIH PUPAJUĆIH KVASACA

CONSTRUCTION OF SHUTTLE VECTORS FOR THE GENETIC MANIPULATION OF DIVERSE BIOTECHNOLOGICALLY RELEVANT BUDDING YEASTS

Kristian Arambašić

Mentori: doc. dr. sc. Anamarija Štafa, dr. sc. Bojan Žunar

Laboratorij za biologiju i genetiku mikroorganizama, Zavod za biokemijsko inženjerstvo,
Prehrambeno-biotehnološki fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Pierottijeva 6, 10 000 Zagreb
kristian.arambasic@outlook.com

Kvasac *Saccharomyces cerevisiae* koristi se u osnovnim i primjenjenim istraživanjima većinom iz razloga što se lako genetički modificira. Upotrebom velikog broja dostupnih selektivnih biljega i plazmidnih vektora moguće je deletirati ili modificirati nekoliko gena u isto vrijeme i uvoditi nove metaboličke puteve u stanicu. Ovaj kvasac je, zbog jednostavnosti manipulacije genoma, iznimka u velikom broju biotehnološki zanimljivih vrsta kvasaca. Za mnoge vrste kvasaca ishodišta replikacije su i dalje nepoznata ili, iako identificirana, vrlo rijetko korištena. Također, neke vrste kvasaca imaju specifičan genetički kod što čini standardne genetičke markere nefunkcionalnima u njima. Iz tog razloga, prvo je potrebno konstruirati plazmidni vektor te potvrditi njegovu funkcionalnost, što zahtijeva vrijeme i resurse. Da bismo olakšali genetičko inženjerstvo u drugim vrstama kvasaca, optimizirali smo sastav kodona četiri antibiotička biljega i na taj način ih učinili funkcionalnima u velikom broju različitih vrsta kvasaca, neovisno o njihovom genetičkom kodu. Ove biljege smo koristili za konstrukciju četiri integrativna plazmida i dvadeset replikativnih plazmida u kojima je svaki biljeg bio kombiniran s jednim od pet različitih ishodišta replikacije te za konstrukciju vektora koji su sadržavali svih pet ishodišta replikacije. Koristeći konstruirane plazmide, uspješno smo transformirali 5 različitih vrsta pupajućih kvasaca. Također, odredili smo koncentracije antibiotika u podlozi za selekciju transformanata i razvili jedan protokol za transformaciju svih pet vrsta kvasaca. Plazmidni vektori konstruirani u ovome radu trebali bi olakšati genetičku manipulaciju u velikom broju različitih vrsta pupajućih kvasaca te potaknuti njihovu primjenu u biotehnologiji.

Ključne riječi: optimizacija kodona, transformacija kvasca, kvašćevi integrativni plazmidi, kvašćevi replikativni plazmidi

Yeast *Saccharomyces cerevisiae* is used in basic and applied research, mostly because it is amenable to genetic manipulation. Using extensive collection of selective markers and shuttle vectors, it is possible to delete, modify or introduce several genes at the same time. However, due to easy manipulation of its genome, yeast *S. cerevisiae* is an exception among biotechnologically interesting yeast species, although many of them have properties that could be used in particular bioprocesses. For many yeast species, replication origins are unknown. Moreover, some yeast species employ non-standard genetic code that renders standard selective markers ineffective. Thus, it is needed to first construct a vector and to confirm its functionality, which wastes both time and resources. To streamline genetic engineering of non-*Saccharomyces* species, we codon optimized four common antibiotic markers, obtaining genes functional across the clade of budding yeasts, regardless of the particular species' genetic code. These markers were used to construct a set of four integrating plasmids and twenty shuttle vectors, each combining one marker with one of five diverse replication origins. Using these plasmids, we successfully transformed five divergent budding yeast species that shared last common ancestor more than 250 million years ago. Furthermore, we determined antibiotic concentrations needed for the selection of transformants and developed a single transformation protocol for those five species. Finally, we constructed a broad spectrum yeast shuttle vector which contains all five replication origins. Vectors constructed here should greatly facilitate genetic manipulation of diverse budding yeast species and, consequently, encourage their application in biotechnology.

Keywords: codon optimization, yeast transformation, yeast integrative vectors, yeast replicating vectors

IMOBILIZACIJA I DIFERENCIJACIJA NEURALNIH MATIČNIH STANICA - RAZVOJ 3D KONSTRUKATA NALIK KORTEKSU MOZGA

IMMOBILIZATION AND DIFFERENTIATION OF NEURAL STEM CELLS - PROGRESS IN ENGINEERING OF 3D CORTEX LIKE STRUCTURES

Martina Glavan

Mentori: prof. dr. sc. Frederic Padilla, prof. dr. sc. Vladimir Mrša

LabTAU, Université Claude Bernard Lyon 1, Lyon, Francuska
Zavod za kemiju i biokemiju, Prehrambeno-biotehnološki fakultet, Sveučilište u Zagrebu,
Pierottijeva 6, 10 000 Zagreb
martina.glavan993@gmail.com

Ozljeda u centralnom živčanom sustavu sisavaca može uzrokovati ozbiljne i nepopravljive defekte s obzirom na nemogućnost potpune regeneracije živčanog tkiva. Današnja istraživanja usmjerena su ka izradi konstrukata živčanog tkiva u svrhu zamjene oštećenog tkiva, za istraživanje njegove strukture ili funkcije te kao model za istraživanje lijekova. Izrada živčanog tkiva metodama tkivnog inženjerstva potaknuta je potrebom za 3D *in vitro* modelima korteksa mozga budući da su danas jedini dostupni *ex vivo* modeli; humani i animalni *post-mortem* dijelovi mozga. Njihova dostupnost je ograničena, nabava skupa te su predmet čestih etičkih polemika. U ovom radu glavni cilj bila je izrada *in vitro* višeslojnih 3D konstrukata nalik korteksu mozga. Metoda bio-akustične levitacije korištena je za postavljanje neuralnih matičnih stanica primata u slojeve unutar 3D konstrukata. Ovakva struktura je stabilizirana unutar fibrinskog hidrogela. Dvije različite linije neuralnih matičnih stanica korištene su u dva odvojena eksperimenta levitacije te naposljetku uklopljene kako bi se dobio višeslojni konstrukt sastavljen od neuralnih matičnih stanica s različitim stadijem diferencijacije. Inkubacija ovih 3D konstrukata u optimalnim uvjetima dovela je do razvitka te karakterističnog ponašanja stanica unutar različitih slojeva: markeri karakteristični za neuralne matične stanice pronađeni su u donjem dijelu dok su markeri karakteristični za neurone pronađeni u gornjem dijelu konstrukata.

Razvijena metoda bio-akustične levitacije pokazala se uspješnom u izradi tkiva nalik cerebralnom korteksu. Ova jednostavna, brza i biokompatibilna metoda može doprinijeti boljem shvaćanju ponašanja neurona te objašnjenju neuron-neuron interakcija.

Ključne riječi: Bio-akustična levitacija, tkivno inženjerstvo, fibrinski hidrogel, korteks, Soybean Trypsin Inhibitor (SBTI)

Injury in the central nervous system of mammals may cause severe and irreparable disabilities due to failure of complete regeneration of the neural tissue. The current research is being directed towards engineering of neural tissue constructs to replace damaged or diseased tissue, to study its structure and function and, as models for drug discovery. Engineering of neural tissue with layered structure is motivated by the need for novel 3D *in vitro* cortex models for neuroscientific research to replace currently used *ex vivo* human or animal *post-mortem* brain slices that have limited availability, are linked to ethical issues, and high costs. Here, we report the construction of *in vitro* multilayered 3D cortex-like structures. A bio-acoustic levitation (BAL) method was used to position non-human primate neural stem cells (NSCs) in layers within 3D constructs. The assembled structure is stabilized in fibrin hydrogels. Two distinctive NSC populations were used in two separate levitation processes and subsequently assembled to produce a multilayered structure composed of NSC of different differentiation statuses. Incubation of this 3D construct in optimal conditions resulted in the display of distinct neuron-specific features in the different layers: stem cell marker expression in the bottom layer and neuron marker expression in the top layer. The developed BAL method successfully demonstrated the manufacturing of a cerebral cortex-imitating tissue.

This simple, rapid and biocompatible method can significantly contribute to the analysis of neuron behavior in 3D, to explain neuron-neuron interactions or to study brain drug delivery.

Key words: Bio-acoustic levitation, tissue engineering, fibrin hydrogel, cortex, Soybean Trypsin Inhibitor (SBTI)

RAZVOJ INTEGRIRANOG PROCESA ZA PROIZVODNJU ESTERA MLIJEČNE KISELINE

DEVELOPMENT OF INTEGRATED PROCESS FOR PRODUCTION OF LACTIC ACID ESTERS

Leo Moguš

Mentor: prof. dr. sc. Anita Slavica

Zavod za biokemijsko inženjerstvo, Prehrambeno-biotehnološki fakultet, Sveučilište u Zagrebu
Pierottijeva 6, 10 000 Zagreb
lmogus@pbf.hr

Osmišljen je integrirani proces za proizvodnju estera mliječne kiseline i to tako da se usklade (1) korištenje jeftinog polimernog ugljikohidrata u direktnoj proizvodnji mliječne kiseline i (2) esterifikacija proizvedene mliječne kiseline. Integrirani se procesi obično projektiraju kombiniranjem prethodno, zasebno optimiranih grupa procesa/operacija i ove grupe često nisu kompatibilne. Zbog toga je naša glavna ideja bila da se istovremeno kombiniraju i razvijaju (1) i (2), pri biotehnološki prihvatljivim uvjetima. Dosadašnja su istraživanja pokazala kako je metabolički potencijal soja *Lactobacillus amylovorus* DSM 20531^T vrlo obećavajuć i industrijski relevantan te je ovaj robusni biokatalizator, koji katalizira proizvodnju obaju stereoizomera mliječne kiseline direktno iz škroba, odabran za (1). Esterifikacija mliječne kiseline iz vodene otopine etanolom odabrana je za (2). Etil-laktat je proizveden u laboratorijskim uvjetima i ovaj modelni ester korišten je za optimiranje parametara GC-MS metode za identifikaciju i kvantifikaciju estera mliječne kiseline. Škrob i svježe uzgojena suspenzija *L. amylovorus* DSM 20531^T su inkapsulirani u kalcijevu alginatu, u aseptičnim uvjetima. Tako priređene kapsule korištene su kao mikrookolina za proizvodnju laktata i uronjene su u otopinu etanola. Simultana hidroliza škroba do maltooligosaharida i fermentacija jednostavnih maltooligosaharida do laktata, pomoću odabranog soja, zatim difuzija laktata iz kapsula u otopinu etanola su praćeni HPLC metodama. Razvijen je učinkovit i ekonomski prihvatljiv, integrirani šaržni proces za proizvodnju estera mliječne kiseline u laboratorijskom mjerilu pri 45 °C i 150 rpm te je ovaj proces izgledan kandidat za proceduru uvećanja mjerila.

Cljučne riječi: škrob, Lactobacillus amylovorus, inkapsulacija, laktati, etil-laktat

Integrated process for production of lactic acid esters has been invented in order to synchronize (1) utilization of low cost polymeric carbohydrate in direct production of lactic acid with (2) esterification of lactic acid therefrom. Integrated processes have usually been created by combining preliminary and separately optimized sets of processes/operations and those groups often do not fit together well. Therefore, our main idea was to combine and develop simultaneously (1) and (2) under biotechnologically acceptable conditions. Our previous investigation proved promising and industrially relevant metabolic potential of strain *Lactobacillus amylovorus* DSM 20531^T, a robust biocatalyst that catalyses production of both stereoisomers of lactic acid directly from starch, and the strain was selected for (1). Esterification of lactic acid aqueous solutions by ethanol was preferred for (2). Ethyl-lactate was formed under laboratory conditions and this model ester was suitable for optimization of GC-MS method parameters for identification and quantification of lactate esters. Starch and freshly pregrown suspension of *L. amylovorus* DSM 20531^T were encapsulated in calcium-alginate under aseptic conditions. Formed capsules served as microenvironment for production of lactates and were immersed in ethanol solution. Simultaneous hydrolysis of starch to maltooligosaccharides and fermentation of simple maltooligosaccharides thence to lactates by the strain, and diffusion of lactates from capsules to ethanol solution were followed by HPLC methods. Efficient and economically acceptable integrated batch process for production of lactic acid esters in the laboratory scale at 45 °C and 150 rpm has been developed and this process hold promises for scale-up procedure.

Keywords: starch, Lactobacillus amylovorus, encapsulation, lactates, ethyl-lactate

INFEKCIJA ADENOVIRUSNIM VEKTORIMA I UROĐENI IMUNOSNI ODGOVOR

INFECTION WITH ADENOVIRAL VECTORS AND INNATE IMMUNE RESPONSE

Marijana Slijepčević

Mentori: dr. sc. Dragomira Majhen, mag. ing. mol. biotechn. Davor Nestić,
doc. dr. sc. Andreja Ambriović Ristov

Zavod za molekularnu biologiju, Institut Ruđer Bošković, Bijenička 54, 10 000 Zagreb
Zavod za biokemijsko inženjerstvo, Prehrambeno-biotehnološki fakultet, Sveučilište u Zagrebu,
Pierottijeva 6, 10 000 Zagreb

Genska terapija označava unos genskog materijala u ciljanu stanicu u svrhu terapijskog učinka, kako bi se popravio određeni poremećaj ili unijela neka nova funkcija u stanicu. Velika pažnja se pridaje osmišljavanju i dizajniranju načina unosa gena od interesa u željenu stanicu te razlikujemo neviralni i viralni unos gena. Tema ovog rada obuhvaća istraživanje bazične biologije adenovirusa, najčešće korištenog viralnog vektora za unos gena. Adenovirusi su DNA virusi ikosaedralne kapside, pri čemu je najistraživaniji adenovirus tip 5 (AdV5) koji se najčešće koristi kao vektor u genskoj terapiji. Seroprevalencija AdV5 je u populaciji visoka što predstavlja problem prilikom uporabe tog tipa vektora. Iz tog razloga, u ovom istraživanju se proučava Adenovirus tip 26 (AdV26) čija je seroprevalencija u populaciji niska. U endosomu, adenovirusnu DNA može prepoznati receptor TLR9, koji potiče IFN odgovor te je cilj rada ispitati ulogu TLR9 u poticanju urođenog imunološkog odgovora nakon infekcije AdV26. Nakon pročišćavanja i namnažanja AdV26 na jastučiću cezijeveog klorida (CsCl), uslijedilo je utišavanje TLR9 u stanicama adenokarcinoma pluća čovjeka (A549), korištenjem specifične siRNA (*small interfering RNA*). Nakon provjere uspješnosti utišavanja, uslijedila je infekcija stanica A549 i proučavanje učinka infekcije na razini mRNA pomoću metode qPCR, na razini proteina pomoću metode western blot te na razini proteina izlučenih u medij pomoću metode ELISA. Proučavan je i učinak transdukcije AdV26 na utišane u odnosu na kontrolne stanice A549 pomoću protočne citometrije.

Ključne riječi: adenovirus tipa 26, toll slični receptor 9, urođeni imunološki odgovor

Gene therapy refers to the introduction of genetic material into the target cell for the purpose of therapeutic effect in order to correct a particular disorder or introduce a new function to the cell. Great attention is paid to designing ways of transferring genes of interest into target cells and we distinguish between non-viral and viral gene transfer. The topic of this work includes investigating basic biology of adenoviruses, one of the most studied vectors for gene transfer. Adenoviruses are DNA viruses, whereby the most investigated and commonly used in gene therapy is adenovirus type 5 (AdV5). AdV5 seroprevalence is high in the population, which is a problem when using this type of vector. For this reason, Adenovirus type 26 (AdV26), seroprevalence of which is low in the population, is studied in this work. In endosome, adenoviral DNA can be recognized by TLR9 receptor that stimulate IFN response, so the aim of this study is to investigate the role of TLR9 in stimulating the innate immune response after AdV26 infection. After purification and amplification of AdV26 in cesium chloride (CsCl) gradient, TLR9 was silenced in human lung adenocarcinoma cells (A549), using specific siRNA (*small interfering RNA*). After determining efficiency of silencing, the effect of infection was investigated by measuring mRNA levels using qPCR method, proteins by western blot method and the level of proteins secreted into the medium by ELISA method. The effect of transduction of AdV26 on silenced cells compared with controlled cells was studied by flow cytometry.

Key words: adenovirus type 26, toll like receptor 9, innate immune response

RAZVOJ BIOKATALIZE CJELOVITIM MIKROBNIM STANICAMA U PROIZVODNJI GLUKOZILIRANIH SPOJEVA

PROGRESS IN MICROBIAL WHOLE-CELL BIOCATALYSIS FOR PRODUCTION OF GLUCOSYLATED COMPOUNDS

Ivan Vučenović

Mentor: prof. dr. sc. Anita Slavica

Zavod za biokemijsko inženjerstvo, Prehrambeno-biotehnološki fakultet, Sveučilište u Zagrebu
Pierottijeva 6, 10 000 Zagreb
ivucenovic@pbf.hr

Korištenje enzima i/ili cjelovitih mikrobnih stanica omogućilo je industrijsku biotehnološku proizvodnju brojnih spojeva visoke dodane vrijednosti. Primjena enzima kao glavnih biokatalizatora često ima nekoliko nedostataka kao što su skupa proizvodnja enzimskih preparata i nestabilnost enzima u industrijskim uvjetima. Biokataliza cjelovitim mikrobnim stanicama nudi neke jedinstvene mogućnosti, npr. regeneraciju kofaktora, visoku učinkovitost biokatalizatora i blage uvjete, i svi pobrojani čimbenici podupiru aktivnost i stabilnost enzima od interesa. Bakterije i kvasci primarno se koriste kao cjelovite stanice biokatalizatora, dok se plijesni znatno manje koriste u reakcijama ovog tipa. U ovom istraživanju odabrali smo heterofermentativnu bakteriju mliječne kiseline *Leuconostoc mesenteroides* i to za provođenje reakcije glukozilacije, jer ova bakterija posjeduje gen koji kodira za saharoza fosforilazu (EC 2.4.1.7). Ovaj enzim katalizira regioselektivni prijenos glukozila sa donora (saharoze) na hidroksilnu grupu (-OH) akceptorske molekule. Izabrali smo glicerol kao prikladan akceptor, a proizvod koji nastaje u ovoj reakciji transglukozilacije je α -D-glukozilglicerol (GG), izuzetno interesantan i industrijski široko primjenjiv spoj. Optimiran je uzgoj biomase i rast bakterijskih stanica zaustavljen je pri sredini eksponencijalne faze rasta. Stanice su permeabilizirane primjenom ultrazvuka i neionske površinski aktivne tvari te su permeabilizirane aktivne stanice korištene za proizvodnju GG koja je praćena ion-izmjenjivačkom HPLC kromatografijom, a dobiveni kromatogrami upućuju na uspješnu sintezu GG. Osim toga, znatna koncentracija proizvedene mliječne kiseline bez drugih krajnjih proizvoda razgradnje saharoze naglašava metabolički potencijal ovih permeabiliziranih bakterijskih stanica.

Ključne riječi: permeabilizacija, Leuconostoc mesenteroides, biokataliza cjelovitim mikrobnim stanicama, fosforilaza, glukozilirani spojevi

Employment of enzymes and/or whole microbial cells has allowed large scale biotechnological production of plethora of high added-value compounds. Use of enzymes as main biocatalysts frequently suffers from several disadvantages, such as high-cost production of enzymatic preparations and enzyme instability under industrial conditions. Microbial whole-cell biocatalysis offers some unique features, e.g. cofactor regeneration, high biocatalytic efficiency, and mild conditions, all of them supporting activity and stability of enzyme of interest. Bacteria and yeasts have been primarily considered as whole-cell biocatalysts while moulds have attracted much less attention. In our investigation heterofermentative lactic acid bacterium *Leuconostoc mesenteroides* was selected for whole-cell glucosylation since it possesses a gene encoding sucrose phosphorylase (EC 2.4.1.7). This enzyme catalyses regioselective glucosyl transfer from donor (sucrose) to hydroxy group (-OH) of acceptor molecule. Glycerol was chosen as suitable acceptor and resulting product of this transglucosylation reaction, α -D-glucosylglycerol (GG), is a very interesting and broadly industrially applicable compound. Biomass cultivation was optimized and bacterial cells harvested in the middle of the exponential growth phase. Cell permeabilization was performed by using ultrasound and a non-ionic surfactant, and permeabilized viable cells were then used in production of GG which was monitored by ion-exchange HPLC method, and obtained chromatograms clearly suggest that synthesis of GG was successfully performed. Besides, considerable concentration of produced lactic acid without other end products emphasizes metabolic potential of the permeabilized bacterial cells.

Keywords: permeabilization, Leuconostoc mesenteroides, microbial whole-cell biocatalysis, phosphorylase, glucosylated compounds

PREHRAMBENO-TEHNOLOŠKI FAKULTET

PRIJELAZ ERGOT ALKALOIDA IZ RAŽI U PROIZVODE MLJEVENJA I KRUH
TRANSFER OF ERGOT ALCALOIDS FROM RYE TO GRINDING PRODUCES AND BREAD

Iva Andrašek

Mentor: doc. dr. sc. Bojan Šarkanj

Zavod za primijenjenu kemiju i ekologiju, Prehrambeno-tehnološki fakultet Osijek, Sveučilište J. J. Strossmayera
u Osijeku, F. Kuhača 20, 31 000 Osijek
andrasek.iva@gmail.com

Ergot alkaloidi su mikotoksini koje proizvode plijesni i biljke, ali najčešće ih proizvodi plijesan *Claviceps purpurea*. Uglavnom se nalaze na raži, iako su detektirani i u ostalim žitaricama. Brašno se dobije mljevenjem i prosijavanjem raži, koje za razliku od pšeničnog brašna ima manju količinu glutena. Raženo tijesto se može proizvesti direktnim, indirektnim i kombiniranim postupkom. Indirektnim postupkom se dobije ujednačena kakvoća proizvoda. U ovom radu je analizirana koncentracija ergot alkaloida u krupici, mekinjama, brašnu, tijestu i kruhu proizvedenima direktnim i indirektnim postupkom. Uzorci su analizirani na LC-MS/MS uređaju, a zatim je provedena kvalitativna i kvantitativna analiza podataka. Rezultati su pokazali sljedeće: koncentracija ergot alkaloida je veća kod tijesta proizvedenog direktnim postupkom nego kod tijesta proizvedenog indirektnim postupkom te ima 36 % manje ukupnih ergot alkaloida u konačnom proizvodu - kruhu, kod indirektnog zamjesa u odnosu na direktni zamjes. Također, kiselost tijesta značajno utječe na čvrstoću, omjer h/d te povećanje otpora žvakanju, u odnosu na tijesto s direktnim zamjesom.

Ključne riječi: Ergot alkaloidi, Claviceps purpurea, brašno, raženi kruh, direktni zamjes

Ergot alkaloids are mycotoxins produced by molds and plants, but usually they are produced by *Claviceps purpurea*. They are most commonly found on rye although they can also be detected on other cereals. Milling of rye, produces flour, which, unlike wheat flour, has a lower amount of gluten. The rye dough can be produced by direct, indirect or combined processes. Indirect technique gives a product of uniform quality. In this thesis the concentration of ergot alkaloids in the grits, bran, flour, dough and bread produced by direct and indirect process was analyzed. The samples were analyzed by the LC-MS/MS, after which a qualitative and quantitative data analysis was performed. The results showed: the concentration of ergot alkaloids is higher in dough produced by the direct process, there was 36% less total ergot alkaloids in the final bread produced by indirect process compared to direct procedure. Also, the sourdough affects on hardness, height/width ratio and significantly increases the chewiness as compared to the direct process.

Keywords: ergot alkaloids, Claviceps purpurea, flour, rye bread, direct process

ANTIOKSIDACIJSKI ODGOVOR GENOTIPA PŠENICE (*TRITICUM AESTIVUM* L.) OTPORNOG NA FUZARIJSKU PALEŽ KLASA PŠENICE NA STRES IZAZVAN VRSTAMA RODA *FUSARIUM* SPP.

ANTIOXIDATIVE RESPONSE OF FHB RESISTANT WHEAT (*TRITICUM AESTIVUM* L.) GENOTYPE UNDER *FUSARIUM* SPP. EXPOSURE

Ivan Bakula

Mentor: doc. dr. sc. Tihana Marček

Sveučilište Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku, Prehrambeno-tehnološki fakultet Osijek, Zavod za ispitivanje hrane i prehrane, Katedra za biologiju i mikrobiologiju
Franje Kuhača 20, 31000 Osijek, Hrvatska
ivan.bakula@yahoo.com

Fuzarijska palež klasa (FHB) je opasna bolest pšenice uzrokovana vrstama roda *Fusarium* spp. koja uzrokuje velike štete u prinosu. Cilj ovoga rada bio je istražiti fiziološki odgovor FHB-otpornog genotipa pšenice „Apache“ izloženog vrstama roda *Fusarium* spp. prateći aktivnost gvajakol peroksidaze (POD), katalaze (CAT), askorbat peroksidaze (APX), polifenol oksidaze (PPO), sadržaj malondialdehida (MDA), ukupne topljive proteine i koncentraciju H₂O₂. Cvjetovi biljke u fazi izbacivanja prašnika, umjetno su zaraženi suspenzijom spora i ostavljeni u uvjetima *in vivo*. Klasovi su uzorkovani nakon 2., 4., 7. i 14. dana infekcije. Tretirane biljke pokazale su smanjenu aktivnost POD i CAT u najranijoj točki uzorkovanja (2. dan) kao i povećanu količinu MDA u odnosu na kontrolu upućujući na membransko oštećenje. Dulje izlaganje (14. dan) biljaka vrstama roda *Fusarium* spp. pokazalo je pad sadržaja MDA, ukupnih proteina i koncentracije H₂O₂ u odnosu na kontrolu. U biljaka tretiranih vrstama roda *Fusarium* spp. 7. dana je izmjerena najveća količina H₂O₂ i aktivnost POD u odnosu na ostale točke uzorkovanja dok su najniže vrijednosti istih parametara uočene 2. dana, iz čega se može pretpostaviti kako „Apache“ ima kasniji odgovor na patogen. Sadržaj MDA tijekom infekcije postepeno je rastao, a najveća vrijednost uočena je nakon 14. dana infekcije. Povećanje aktivnosti POD nakon 7. dana tretmana upućuje na zaključak da POD ima važnu ulogu u obrambenom odgovoru biljke. Inhibicija CAT, APX i PPO tijekom biotičkog stresa nam govori da navedeni enzimi u „Apache“ ne doprinose razumijevanju FHB-otpornosti.

Ključne riječi: FHB-otporni genotip, antioksidacijski enzimi, MDA, H₂O₂, *Fusarium* spp.

Fusarium head blight (FHB) is serious wheat disease caused by *Fusarium* spp. that can cause enormous losses in yield. The goal of present study was to check the physiological response of FHB-resistant wheat genotype „Apache“ under *Fusarium* spp. exposure by measuring the activities of guaiacol peroxidase (POD), catalase (CAT), ascorbate peroxidase (APX) and polyphenol oxidase (PPO), MDA (malondialdehyde) content, total soluble protein content and H₂O₂ concentration. At the anthesis stage, flowers were artificially infected by the spore suspension and left under natural conditions. The ears were collected in several occasions (2, 4, 7 and 14 days after infection, DAI). Treated plants showed decreased POD and CAT activity in the earliest time point of sampling (2nd DAI) as well as enlargement of MDA content compared to control resulting in membrane damage. Prolonged exposure (14th DAI) to *Fusarium* stress showed decline in MDA, protein content and H₂O₂ concentration with regard to control. *Fusarium* infection caused the highest H₂O₂ level and POD activity at 7th DAI in comparison to other time points while at 2nd DAI values of the same parameters and protein content were the lowest indicating that „Apache“ later responds to pathogen attack. MDA content increased gradually during infection period and the highest value was observed at 14th DAI. Enlargement of POD activity after 7th DAI lead us on conclusion that POD has an important role in defence response. Inhibition of CAT, APX and PPO during biotic stress suggests that these enzymes in „Apache“ do not contribute in understanding the FHB-resistance.

Key words: FHB-resistant genotype, antioxidative enzymes, MDA, H₂O₂ concentration, *Fusarium* spp.

UDIO ERGOT ALKALOIDA I FIZIKALNA SVOJSTVA KUKURUZNIH EKSTRUDATA S DODATKOM RAŽENIH POSIJA

CONTENT OF ERGOT ALKALOIDS AND PHYSICAL PROPERTIES OF CORN EXTRUDATES WITH ADDITION OF RYE BRAN

Veronika Barišić

Mentor: doc. dr. sc. Antun Jozinović

Zavod za prehrambene tehnologije, Katedra za tehnologiju ugljikohidrata, Prehrambeno-tehnološki fakultet
Osijek, Sveučilište Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku
F. Kuhača 20, 31 000 Osijek
vbarisic@ptfos.hr

Cilj ovog istraživanja je bio određivanje količine ergot alkaloida pomoću LC/MS-MS metode te ispitivanje fizikalnih svojstava ekstrudiranih snack proizvoda na bazi kukuruzne krupice s dodatkom raženih posija od 10 različitih uzoraka raži. Uzorci raži su prikupljeni slučajnim odabirom od hrvatskih proizvođača. Ražene posije su dodavane u kukuruznu krupicu u udjelima 10 i 20 %. Zamjesi s 15 % vlage ekstrudirani su u jednopužnom laboratorijskom ekstruderu, nakon čega su osušeni na zraku i provedene su analize.

Istraživanjem je utvrđeno da je dodatak raženih posija u kukuruzne ekstrudate imao veliki utjecaj na udio ergot alkaloida i fizikalna svojstva. Dodatkom raženih posija došlo je do povećanja nasipne mase te smanjenja ekspanzijskog omjera kod gotovo svih uzoraka u odnosu na uzorak kukuruznog ekstrudata bez dodatka raženih posija. Utjecaj raženih posija na lomljivost ekstrudata nije bio toliko značajan, dok je tvrdoća ekstrudata smanjena dodatkom raženih posija. Proces ekstruzije i dodatak raženih posija imali su značajan utjecaj na promjenu boje, uz izraženiji utjecaj kod većeg udjela posija. Kod gotovo svih ekstrudata došlo je do smanjenja udjela ukupnih ergot alkaloida u odnosu na uzorke sirovih raženih posija, dok se ekstruzijom povećao udio paspalne kiseline.

Ključne riječi: ekstruzija, ergot alkaloidi, ražene posije, kukuruzni snack proizvodi, LC-MS/MS

The aim of this study was determination ergot alkaloids quantity by using LC/MS-MS method and to investigate the physical properties of extruded snack products based on corn grits with the addition of rye bran from 10 different rye samples. Rye samples were collected randomly from Croatian manufacturer. Rye brans were added to the corn grits in shares of 10 and 20%. Mixtures with 15% moisture content were extruded in a single laboratory extruder and then air-dried and analyzed.

It was found that the addition of rye bran in corn extrudates had a major influence on the quantity of ergot alkaloids and on the physical properties. With the addition of rye bran bulk density increased, while the expansion ratio decreased in almost all samples compared to the sample of corn extrudates without of rye bran. The influence of rye bran on the fracturability was not so significant, while the hardness of the extrudate was reduced by addition of rye bran. The extrusion process and the addition of rye bran had a significant effect on the color change, whit a more pronounced influence in the higher proportion of bran. Almost all corn extrudates had a lower quantity of total ergot alkaloids, compared to samples of raw rye bran, while with the extrusion process quantity of paspalic acid increased.

Keywords: extrusion, ergot alkaloids, rye bran, corn snack products, LC-MS/MS

ANALIZA SIROVINA PRIMJENOM KEMOMETRIJSKIH METODA
ANALYSIS OF RAW MATERIALS USING CHEMOMETRIC METHODS

Zvonimir Bošnjaković

Mentor: prof. dr. sc. Damir Magdić

Zavod za procesno inženjerstvo, Prehrambeno-tehnološki fakultet, Sveučilište Josip Juraj Strossmayer u Osijeku
Franje Kuhača 20, 31000 Osijek
zbosnja44@gmail.com

Sa slavonskih polja Poljoprivrednog instituta u Osijeku izabrana su 24 različita kultivara pšenice koja su uzgajana tijekom perioda od 12 godina. Različitim analizama i metodama u laboratorijima su određene vrijednosti ukupno 22 svojstva pšenice. Na dobivenim vrijednostima svojstava izvedena je opisna statistika pomoću koje su izračunate srednje vrijednosti, standardna devijacija, koeficijent varijabilnosti, minimumi i maksimumi svakog svojstva te medijan. Promjena svojstava tijekom razdoblja od 12 godina (2005.-2016.) objašnjena je pomoću opisne statistike dok je kemometrijskim metodama, u programskom paketu „Statistica ver. 13“, proučavana veza između svojstava pšeničnog zrna, brašna i tijesta kroz period od 10 godina (2005.-2014.). Izabrane su tri kemometrijske metode: Analiza glavnih komponenti, klasteraska analiza i regresijska analiza metodom najmanjih kvadrata. Analizom glavnih komponenata dokazano je da je pomoću sedam glavnih komponenata, odnosno sedam svojstava pšenice moguće opisati varijabilnost cijelog skupa svojstava sa 95 % točnosti. Povezanost između samih svojstava grafički je prikazana pomoću klasteraska analize, a pomoću PLSR kemometrijske metode izvedeni su prediktivni matematički modeli kreirani kroz period od 10 godina, dok je validacija takva tri modela provedena na sljedeće dvije godine (2015. i 2016.). Nakon validacije modela zaključeno je da je jednim od tri modela moguće predvidjeti vrijednost odabranog svojstva pšenice sa točnosti od 97%, dok je kod druga dva modela točnost iznosila oko 65%.

Ključne riječi: svojstvo, kemometrija, analize, prediktivni model, povezanost

Twenty-four different wheat cultivars were selected from the Slavonian Fields of the Agricultural Institute in Osijek, which were grown during the 12-year period. Various analyzes and methods in laboratories have determined the value of a total of 22 properties of wheat. On the resulting values of the properties descriptive statistics was done and the mean, standard deviation, coefficient of variation, minimums and maximums for each property and median were calculated. The change of properties over a period of 12 years (2005-2016) was explained by descriptive statistics while chemometric methods, in the program package "Statistica ver. 13", showed the relationship between the properties of wheat, flour and dough over a period of 10 years (2005 - 2014). Three chemometric methods were chosen: Analysis of major components, cluster analysis and regression analysis using the least squares method. First one proved that with using the seven main components is possible to describe the variability of a whole set of properties with 95% accuracy. The correlation between the properties is graphically represented by cluster analysis, and predictive mathematical models were created using a PLSR chemometric method for a period of 10 years, while the validation of these three models was carried out over the next two years (2015 and 2016). After validation of the model it was concluded that one of three models could predict the value of selected wheat properties with accuracy of 97%, while in the other two models the accuracy was about 65%.

Keywords: property, chemometrics, analysis, predictive models, relationships

PROJEKTIRANJE SUSTAVA ZA KONTROLIRANU FERMENTACIJU VINA
DESIGNING OF THE SYSTEM FOR CONTROLLED WINE FERMENTATION

Ana Fotez

Mentor: prof. dr. sc. Darko Velić; komentor: izv. prof. dr. sc. Anita Pichler

Zavod za procesno inženjerstvo, Prehrambeno-tehnološki fakultet Osijek, Sveučilište Josipa Jurja Strossmayera
u Osijeku, Franje Kuhača 20, 31 000 Osijek

afotez@ptfos.hr

Rad se temelji na projektiranju sustava za kontroliranu fermentaciju vina u poluindustrijskom mjerilu (pilot postrojenje). Osnovni elementi projektiranja navedenog sustava obuhvatili su dimenzioniranje fermentacijskih posuda, projektiranje sustava za termostatiranje fermentora (grijanje/hlađenje) te upravljačkog sustava. Na projektiranom sustavu provela se kontrolirana alkoholna fermentacija (KAF) te kontrolirana (potaknuta) jabučno-mliječna fermentacija (JMF) vina sorte Graševina. Cilj provedenih fermentacija je bio istražiti utjecaj bakterija mliječne kiseline (BMK) na sastav vina. Za jabučno-mliječnu fermentaciju vina sorte Graševina primijenila se čista kultura bakterije mliječne kiseline *Oenococcus oeni* uz uspostavljenje temperaturnog optimuma za odabranu vrstu BMK. U uzorcima tijekom i nakon provedene kontrolirane alkoholne fermentacije, kao i potaknute jabučno-mliječne fermentacije odredio se osnovni fizikalno-kemijski sastav vina. Dobiveni rezultati međosubno su uspoređeni. Istraživanje je pokazalo da kontrolirani postupak fermentacije u oba slučaja (KAF i JMF) rezultira kvalitetnim vinima, u pogledu fizikalno-kemijskih i senzorskih svojstava koja definiraju kvalitetu vina. Potaknutom jabučno-mliječnom fermentacijom smanjila se koncentracija jabučne kiseline što je rezultiralo poboljšanim senzornim svojstvima tako proizvedenog vina.

Ključne riječi: vino, pilot postrojenje, kontrolirana fermentacija, jabučno-mliječna fermentacija, Oenococcus oeni

The work is based on designing a system for controlled fermentation of wine on a semi-industrial scale (pilot plant). The basic design elements of the above system included the dimensioning of fermentation vessels, the design of the fermenter thermostat system (heating/cooling) as well as the control system design. The controlled alcohol fermentation (KAF) and the controlled (stimulated) malolactic fermentation (JMF) of Graševina variety. The aim of the fermentation was to investigate the influence of lactic acid bacteria (BMK) on wine composition. The pure culture of lactic acid bacteria *Oenococcus oeni* was applied for grape juice fermentation with the establishment of a temperature optimum for selected BMK type. The basic physico-chemical composition of wine was determined and compared in samples during and after controlled alcoholic fermentation, as well as induced malolactic fermentation. The research has shown that the controlled fermentation process in both cases (KAF and JMF) results in wines of exceptional quality in terms of the relevant physico-chemical and sensory properties that define the quality of the wine. By stimulated malolactic fermentation, the concentration of malic acid decreased which resulted in more acceptable sensory properties of wine.

Key words: wine, pilot plant, controlled fermentation, malolactic fermentation, Oenococcus oeni

TEKSTILNO-TEHNOLOŠKI FAKULTET

SINTEZA DERIVATA BENZOTIAZOLA U GLICEROLU KAO ZELENOM OTAPALU
SYNTHESIS OF BENZOTHIAZOLE DERIVATIVES IN GLYCEROL AS A GREEN SOLVENT

Glorija Fajdetić

Mentor: izv.prof.dr.sc. Livio Racané

Zavod za primjenjenu kemiju, Sveučilište u Zagrebu Tekstilno – tehnološki fakultet
Prilaz Baruna Filipovića 28a, 10000 Zagreb
glorija.fajdetic@gmail.com

Benzotiazol je jedan osnovni biciklički heterociklički spoj koji sadrži tiazolni prsten kondenziran na benzensku jezgru. Postoji više sintetskih metoda za pripremu 2-supstituiranih benzotiazola, a danas su najraširenije metode pripreme temeljene na kondenzacijskim reakcijama 2-aminotiofenola s aldehidima, nitrilima, karboksilnim kiselinama ili nekim derivatima kiselina, te metode temeljene na ciklizaciji tiobenzanilida.

Uzimajući u obzir broj reakcijskih stupnjeva i komercijalno dostupne kemikalije u pripravi novih 2-supstituiranih derivata benzotiazola kondenzacijska reakcija 2-aminotiofenola (nesupstituiranog ili supstituiranog) s aldehidima i karboksilnim kiselinama pokazala je najveću prednost. Nedostatak ovog sintetskog pristupa je uporaba toksičnih i zapaljivih organskih otapala ili bezvodnih nagrizajućih kiselina koje se koriste u sintezama na visokim temperaturama te predstavljaju određeni zdravstveni rizik i rizik za okoliš. Jedna od mogućnosti da se ovaj nedostatak ukloni je upotreba netoksičnog, nezapaljivog i ekološki prihvatljivog otapala koje bi bilo ujedno i efikasno u sintezama benzotiazolnih derivata.

Cilj ovog rada bilo je ispitati mogućnost upotrebe glicerola kao zelenog otapala u sintezi 2-supstituiranih benzotiazola kondenzacijskim reakcijama cijano- i nitro- supstituiranih 2-aminotiofenola s aromatskim aldehidima. Višestupnjevitom sintezom, polazeći iz benzotiazola opisanim metodama efikasno su priređeni odgovarajući prekursori koji su poslužili kao reagensi za optimiranje reakcije kondenzacije u glicerolu s benzaldehidom, 4-*N,N*-dimetilaminobenzaldehidom i 4-klorobenzaldehidom. Nađena je jednostavna, efikasna i ekološki prihvatljiva metoda pripreme supstituiranih 2-fenilbenzotiazola kondenzacijskom reakcijom nitro- i cijano- supstituiranih 2-aminotiofenola sa supstituiranim aromatskim aldehidima upotrebom glicerola.

Ključne riječi: Glicerol; zelena otapala; derivati benzotiazola; sinteza

Benzothiazole is a basic bicyclic heterocyclic compound that contains a thiazole ring fused to a benzene core. There are several synthetic methods for the preparation of 2-substituted benzothiazoles and today's the most widely used preparation methods are based on condensation reactions of 2-aminothiophenols with aldehydes, nitriles, carboxylic acids or some acid derivatives and a methods based on cyclization of thiobenzanilide.

Considering the number of reaction steps and commercially available chemicals in the preparation of new 2-substituted benzothiazole derivatives, the condensation reactions of 2-aminothiophenol (unsubstituted or substituted) with aldehydes and carboxylic acids showed the greatest advantage. The disadvantage of this synthetic approach is the use of toxic and flammable organic solvents or anhydrous corrosive acids used in high temperature synthesis which represents a certain health and environmental risk. One possibility of eliminating this disadvantage is the use of a non-toxic, non-flammable and environmentally acceptable solvent which would be equally effective in the synthesis of benzothiazole derivatives.

The aim of this research was to examine the possibility of using glycerol as a green solvent in the synthesis of 2-substituted benzothiazoles by condensation reactions of cyano- and nitro- substituted 2-aminothiophenols with aromatic aldehydes. By multistep synthesis, starting with benzothiazole, the appropriate precursors were used to provide reagents for the optimization of condensation reactions in glycerol with benzaldehyde, 4-*N,N*-dimethylaminobenzaldehyde and 4-chlorobenzaldehyde. A simple, efficient and environmentally acceptable method of preparing substituted 2-phenylbenzothiazoles was found by condensation reaction of nitro- and cyano-substituted 2-aminothiophenols with substituted aromatic aldehydes using glycerol.

Keywords: Glycerol; green solvents; benzothiazole derivatives; synthesis

VIŠESLOJNI PCL/FIBROIN NOSAČI ZA UZGOJ TKIVNIH STANICA KOŽE ELEKTROISPREDENI NA 3D PRINTANOM KOLEKTORU CILJANE GEOMETRIJE

MULTILAYERED PCL/FIBROIN SCAFFOLDS FOR SKIN TISSUE CELLS CULTURE ELECTROSPUN ON 3D PRINTED COLLECTOR WITH CUSTOM GEOMETRY

Paula Marasović, Ana Krajač

Mentori: Prof. dr. sc. Budimir Mijović, dr. sc. Emilija Zdraveva

Zavod za temeljne prirodne i tehničke znanosti, Tekstilno-tehnološki fakultet, Sveučilište u Zagrebu,

Prilaz baruna Filipovića 28a, 10 000 Zagreb

paula.pm2410@gmail.com, ana.krajac@hotmail.com

Elektroispredeni materijali zbog svojih svojstava poput velike specifične površine, velike poroznosti, mehaničke stabilnosti, te mogućnosti kontrole morfologije vlakana i funkcionalizacije, nalaze primjenu u biomedicini, tj. tkivnom inženjerstvu, kao nosači za uzgoj tkivnih stanica u regeneraciji oštećenog tkiva. Svojom strukturom simuliraju izvanstanično okruženje, osiguravaju veliki broj mjesta za vezivanje receptora stanica, te omogućuju prijenos hranjivih tvari, kisika, kao i odvođenje metaboličkih otpadnih tvari. U ovom radu izrađeni su elektroispredeni nosači iz biokompatibilnog polikaprolaktona (PCL) i mješavine PCL-a sa prirodnim fibroinom. Fibroin svile omogućava poboljšanje hidrofilitnosti vrlo hidrofobnog PCL-a, što je od izuzetne važnosti za adheziju stanica na površini nosača. Nosači su izrađeni naizmjeničnim elektroispredanjem čistog PCL-a i mješavine PCL/fibroin na 3D printanom kolektoru ciljane geometrije. Nanovlaknasta rahlija struktura formira se 3D printanim kolektorom, te je pogodna za infiltraciju stanica u višeslojne nosače, što predstavlja izazov kod nosača pripremljenih elektroispredanjem. Elektroispredanim nosačima ispitana je morfologija (promjer vlakana, površina pora), ukupna poroznost, te mehaničko ponašanje pri vlačnom testu u ovisnosti o koncentraciji polimerne otopine te broju slojeva u višeslojnoj strukturi. U svrhu evaluacije svojstava elektroispredanih nosača korištena je skenirajuća elektronska mikroskopija, te analiza morfologije izvršena u programu *ImageJ*. Ukupna poroznost određena je računski, dok je vlačni test napravljen na univerzalnoj kidalici. Poboljšanje hidrofilitnosti elektroispredanih nosača dodatkom fibroina utvrđeno je određivanjem kontaktnog kuta vode na površini materijala. Ovim radom potvrđeno je da se elektroispredanjem na relativno jednostavan način, uz kontrolu morfologije, poroznosti, broja slojeva kao i mehaničke stabilnosti materijala, mogu izraditi nosači prema primijeni u tkivnom inženjerstvu.

Ključne riječi: elektroispredanje, PCL/Fibroin, morfologija, poroznost, mehaničko ponašanje

Due to electrospun materials' high specific surface area, high porosity, mechanical stability, ability to control fibers' morphology and functionalization, these materials are used in biomedicine, i.e. in tissue engineering, as tissue cells scaffolds for the regeneration of damaged tissues. They simulate the extracellular matrix structure, provide a large number of cells' receptor binding sites, allow the transfer of nutrients, oxygen and remove metabolic waste. In this work electrospun scaffolds were fabricated using biocompatible polycaprolactone (PCL) and its blend with natural fibroin. Silk fibroin reduces PCL's high hydrophobicity, thus cells adhesion on a hydrophilic surface is of utmost importance. Scaffolds were fabricated by alternating electrospinning of pure PCL and PCL/fibroin blends on a 3D-printed collector with custom geometry. A nanofibrous loose structure resulted from the collector geometry. The structure is suitable for cells multi-layers infiltration which is still a challenge in electrospun scaffolds design. The electrospun scaffolds were evaluated in regard to morphology (fibers diameter, pores area), total porosity, and mechanical tensile behaviour depending on the solution concentration and the number of layers in the structure. The electrospun scaffolds were imaged by Scanning Electron Microscopy, while the morphology was analysed with the software *ImageJ*. The total porosity was calculated, while the tensile test was carried on universal tensile instrument. The improved electrospun scaffolds' hydrophilicity, after addition of the fibroin, was determined by surface water contact angle measurement. This work has confirmed that straightforward electrospinning technique, providing morphology, porosity, number of electrospun layers control, and material's mechanical stability, produces electrospun scaffolds depending on their application in tissue engineering.

Keywords: electrospinning, PCL/Fibroin, morphology, porosity, mechanical behaviour

TOPLINSKA SVOJSTVA ODJEVNOG SUSTAVA MUŠKE POSLOVNE ODJEĆE

THERMAL PROPERTIES OF A CLOTHING ENSAMBLE OF MEN'S BUSINESS CLOTHING

Valentina Vizec

Mentor: izv. prof. dr. sc. Snježana Firšt Rogale

Zavod za odjevnu tehnologiju, Sveučilište u Zagrebu Tekstilno-tehnološki fakultet
Prilaz baruna Filipovića 28a, 10 000 Zagreb
valentina.vizec@gmail.com

Pri kupnji odjeće ne postoji egzaktna mogućnost ocjene s aspekta točno izmjerenog stupnja toplinske zaštite odjeće. Kupcu stoga preostaje da odjevni predmet kupuje prema vizualnom dojmu i iskustvene procjene konstrukcije odjeće, debljine materijala i njegovog sirovinskog sastava. U Zavodu za odjevnu tehnologiju Tekstilno-tehnološkog fakulteta realiziran je i instaliran originalni mjerni sustav za određivanje statičkih i dinamičkih toplinskih svojstava kompozita i odjeće, koji je patentno zaštićen pri Državnom zavodu za intelektualno vlasništvo Republike Hrvatske pod oznakom PK20130350. Mjerni sustav se sastoji od vruće ploče (za određivanje toplinskih svojstava kompozita) i metalnog odljevka u obliku ljudskog tijela tzv. termalnog manekena (za određivanje toplinskih svojstava odjeće). Termalni maneken je smješten u klima komori u kojoj se određuju parametri okoliša (temperatura zraka, brzina strujanja i vlažnost zraka). Unutar termalnog manekena nalaze se sustav senzora temperature, instalirani električni grijači, mikrokontrolerski sklopovi i pneumatski sustav za pokretanje ruku i nogu, namijenjen određivanju dinamičkih toplinskih svojstava odjeće. Mjerenje se izvodi u trenutku uspostave toplinske ravnoteže 24 mjerna segmenta termalnog manekena prema standardu ISO 15831.

U ovom prezentaciji će biti prikazano istraživanje toplinskih svojstava odjeće u statičkom i dinamičkom modu na primjeru odjevnog sustava muške poslovne odjeće koji se sastoji od muškog donjeg rublja, košulje, kravate, poslovnog odijela, zimskog kaputa, cipela i rukavica. Rezultati ovog istraživanja pokazuju značaj procjene toplinske udobnosti odjeće.

Cljučne riječi: toplinska svojstva odjeće, termalni maneken, muška poslovna odjeća, toplinska udobnost

When purchasing clothes, there is no exact possibility of rating from the aspect of the exactly measured degree of thermal protection of clothing. There is nothing else for the customer but to buy an article of clothing based on visual impressions, empirical assessment of the clothing construction, material thickness, and its raw material composition. In the Department of Clothing Technology of the Faculty of Textile Technology, an original measuring system for the determination of static and dynamic thermal properties of composites and clothing was realized and installed, which is patent-protected at the State Intellectual Property Office of the Republic of Croatia under the designation PK20130350. The measuring system consists of hot plate (to determine the thermal properties of composites) and metal casting in the form of a human body, so called thermal manikin (to determine thermal properties of clothing). The thermal manikin is located in a climatic chamber that defines the environmental parameters (air temperature, flow rate and humidity). Inside the thermal manikin, there is a system of temperature sensors, installed electric heaters, microcontroller assemblies and a pneumatic system for arm and leg movements designed to determine the dynamic thermal properties of clothing. The measurement is performed at the moment of establishing the thermal equilibrium of 24 measurement segments of the thermal manikin according to ISO 15831.

This presentation will present the study of thermal properties of clothing in static and dynamic mode on the example of a clothing ensemble of men's business clothing consisting of men's underwear, shirt, tie, business suit, winter coat, shoes and gloves. The results of this research validate the importance of assessment of thermal comfort of clothing.

Keywords: thermal properties of clothing, thermal manikin, men's business clothing, thermal comfort

ANALIZA PARAMETARA POLIGONALNOG RAČUNALNOG MODELA I UTJECAJ NA SIMULACIJU DRAPIRANJA TKANINE

ANALYSIS OF COMPUTER POLYGONAL MODEL PARAMETERS AND INFLUENCE ON FABRIC DRAPE SIMULATION

Juro Živičnjak, Ivona Rastovac

Mentorica: Izv. prof. dr. sc. Slavenka Petrak

Sveučilište u Zagrebu Tekstilno-tehnološki fakultet, Zavod za odjevnu tehnologiju

Prilaz baruna Filipovića 28a, 10000 Zagreb

juro.zivicnjak@outlook.com, valnea94@gmail.com

Današnji suvremeni CAD sustavi u sprezi s tehnologijom virtualne realnosti omogućuju simulaciju tekstila i odjeće sa svrhom predviđanja izgleda i ponašanja odjavnog predmeta u realnim uvjetima. U radu je prikazana analiza utjecaja parametara poligonalnog računalnog modela na simulaciju drapiranja tkanine. Izvedena su laboratorijska mjerenja vrijednosti fizikalnih i mehaničkih svojstava za 11 tkanina primjenom sustava Kawabata Evaluation System, pri čemu su utvrđene vrijednosti parametra vlačnih, savojnih, smičnih i kompresijskih svojstava pri malim opterećenjima. Kompleksne deformacije analizirane su primjenom Cusick Drape Meter uređaja te su utvrđene vrijednosti koeficijenata drapiranja. Primjenom 2D/3D CAD sustava za računalnu simulaciju odjeće Optitex izvedene su simulacije drapiranja odabranih tkanina na modelu pločice, koja odgovara realnim uvjetima ispitivanja na Cusick Drape Meter uređaju kako bi se u daljnjoj fazi omogućila analiza korelacije vrijednosti parametara drapiranja simuliranih tkanina s realno izmjerenim vrijednostima za pojedinu tkaninu. Svaka tkanina simulirana je kao poligonalni model s promjenjivom varijablom koja se odnosi na gustoću mreže poligona, pri čemu su varirane vrijednosti od 2 do 7 milimetara kako bi se analizirao utjecaj veličine poligona na ponašanje modela kod simulacije. Na temelju oblika drapiranja simuliranih tkanina, u 3D programu Rhinoceros kreirane su krivulje i utvrđene vrijednosti površina unutar krivulja potrebne za izračun koeficijenata drapiranja simuliranih tkanina. Rezultati su statistički obrađeni i izvedene su analize realnih i simuliranih uzoraka različitih vrijednosti parametara gustoće poligonalnog modela. Završno, utvrđene su korelacije vrijednosti koeficijenata drapiranja te optimalni parametri simulacije tkanina određenih fizikalnih i mehaničkih svojstava.

Ključne riječi: drapiranje, fizikalna i mehanička svojstva tkanine, računalna simulacija, gustoća poligonalnog modela

Today's modern CAD systems coupled with virtual reality technology enable simulation of textiles and clothing with the purpose of predicting appearance and behavior of garment in realistic conditions. This work presents analysis of influence of computer polygonal model parameters on fabric drape simulation. Laboratory testing of physical-mechanical properties for 11 fabrics was performed using Kawabata Evaluation System, where values of tensile, bending, shear and compression parameters at low loads were determined. Complex deformations were analysed using Cusick Drape Meter system and the drape coefficients values were determined. Simulations of fabric drape were performed using 2D/3D system for computer simulation of clothing Optitex on a plate model which corresponds to the real test conditions on the Cusick Drape Meter to enable further analysis and correlation of simulated and real draping parameters values for each fabric. Every fabric is simulated as a polygonal model with adjustable variable that refers to polygonal model mesh density, where polygon dimensions varied from 2 to 7 millimeters in order to analyze the effect of the polygon size on simulated model behavior. Curves and drape surface values necessary for calculation of the simulated fabric draping coefficient were determined based on the drape shape of the simulated fabrics using the Rhinoceros 3D program. Results were statistically processed and analysis of real and simulated fabric models with different parameter values of polygonal model density were performed. Finally, corelations of drape coefficients values and optimal parameters for simulation of particular physical and mechanical fabric properties were obtained.

Keywords: draping, physical and mechanical fabric properties, computer simulation, polygonal model density